



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
DOUTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS**

**TESE DE DOUTORADO**

**TRANSPORTE DE CALOR EM REATOR CILÍNDRICO-ELÍPTICO DE  
LEITO FIXO VIA MODELO DE DUAS FASES EM REGIME  
PERMANENTE**

**Antonildo Santos Pereira**

**Campina Grande - Paraíba - Brasil**

**Fevereiro de 2021**

**TRANSPORTE DE CALOR EM REATOR CILÍNDRICO-ELÍPTICO DE  
LEITO FIXO VIA MODELO DE DUAS FASES EM REGIME  
PERMANENTE**

**Antonildo Santos Pereira**

Tese 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 - Paraíba - Brasil**

**Fevereiro de 2021**

P436t      Pereira, Antonildo Santos.  
    Transporte de calor em reator cilíndrico-elíptico de leito fixo via modelo de duas fases em regime permanente / Antonildo Santos Pereira. – Campina Grande, 2021.  
    169 f.: il. color.

    Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciência e Tecnologia, 2021.  
    "Orientação: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima".  
    Referências.

    1. Transferência de Calor. 2. Reatores de Leito Fixo. 3. Reator Cilíndrico-Elíptico. 4. Modelo Heterogêneo. I. Lima, Antonio Gilson Barbosa de. II. Título.

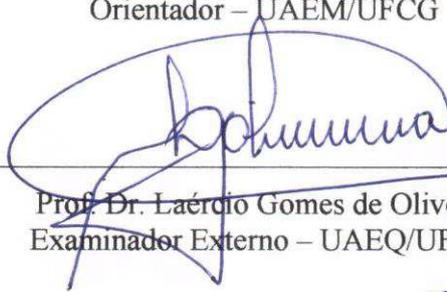
CDU 536.24(043)

**MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE ANTONILDO SANTOS PEREIRA APRESENTADA AO PROGRAMA DE DOUTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS DO CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE**

Tese de Doutorado **aprovada** em 26 de fevereiro de 2021



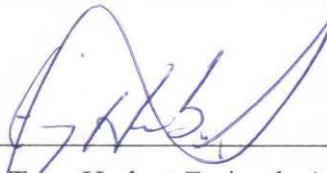
Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima  
Orientador – UAEM/UFCG



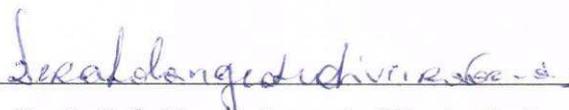
Prof. Dr. Laércio Gomes de Oliveira  
Examinador Externo – UAEQ/UFCG



Prof. Dr. Rodrigo Moura da Silva  
Examinador Externo – IFPB



Prof. Dr. Tony Herbert Freire de Andrade  
Examinador Externo – UAEPetro/UFCG



Prof.ª Dr.ª Vera Solange de Oliveira Farias  
Examinador Externo – UAFM/UFCG

**Campina Grande - Paraíba - Brasil**

**Fevereiro de 2021**

## **DEDICATÓRIA**

À minha esplendorosa companheira Shimenny Ludmilla Araújo Wanderley, à minha amada mãe Luzia Rodrigues dos Santos, à minha vó Leticia Rodrigues dos Santos (in memoriam), ao meu pai Pedro Fortunato dos Santos (in memoriam), ao meu irmão Antonio Pereira de Araújo Junior e à minha irmã Maria Luiza Santos Delfino por acreditarem que a educação é uma ferramenta de transformação do indivíduo e me darem todo o suporte para a realização dos meus sonhos.

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente ao senhor supremo Deus que me conduziu e possibilitou o andamento deste trabalho.

À minha mãe Luzia Rodrigues dos Santos e aos meus avós Pedro Furtunato dos Santos (in memoriam) e Letícia Rodrigues dos Santos (in memoriam) que me criaram e contribuíram com exemplo e orientação para formação do meu caráter.

À minha gloriosa e amada esposa Shimenny Ludmilla Araújo Wanderley pela compreensão e por me apoiar em todas as instâncias possíveis, academicamente e na vida.

Ao meu irmão Antonio Pereira de Araújo Junior e minha irmã Maria Luíza Santos Delfino pelo incentivo e palavras de apoio nos momentos de dificuldades da vida.

Ao meu orientador, Doutor Antonio Gilson Barbosa de Lima, pela orientação, sugestão, estímulo e competência com que conduziu esse trabalho. Total respeito a este professor de notória inteligência e renomado como pesquisador.

Ao meu amigo Rodrigo Moura da Silva, pela orientação, sugestão, irmandade e carinho na condução da ajuda desse trabalho. Total respeito a esse irmão amigo.

Aos meus amigos e amigas do Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos (LCTF/UAEM/CCT/UFCG), Robson Queiroz, Vanderson Agra, Conceição Machado, Balbina Raquel, Wanessa Rafaela, Mirênia Kalina e Morgana Vasconcellos e entre tantos outros com os quais tive um convívio cordial e amistoso, me proporcionando boas conversas e momentos de descontração.

A todo(a)s o(a)s professore(a)s da Pós-Graduação em Engenharia de Processos/UFCG que contribuíram com a minha formação profissional.

A todo(a)s que direta ou indiretamente possibilitaram a conclusão deste trabalho.

“É fazendo que se aprende a fazer aquilo que se deve aprender a fazer”

**(Aristóteles)**

“Quanto menos alguém entende, mais quer discordar.”

**(Galileu Galilei)**

“No meio da dificuldade encontra-se a oportunidade.”

**(Albert Einstein)**

“A Esperança não murcha, ela não cansa,  
Também como ela não sucumbe a Crença,  
Vão-se sonhos nas asas da Descrença,  
Voltam sonhos nas asas da Esperança.”

**(Augusto dos Anjos)**

## RESUMO

O estudo da transferência de calor em reatores tubulares de leito fixo de paredes aquecidas ou resfriadas é de grande interesse para a indústria, promovendo reações catalíticas heterogêneas gás-sólido endotérmicas ou exotérmicas. O projeto adequado e seguro de tais equipamentos requer a adoção de modelos matemáticos confiáveis e realistas que estejam em harmonia com os princípios físicos que regem o problema. O objetivo deste trabalho foi estudar a transferência de calor em reator cilíndrico-elíptico de leito fixo. Foi proposto um modelo matemático heterogêneo escrito em coordenadas cilíndricas elípticas, consistindo de duas fases contínuas, uma fase sólida e outra fase fluida, no qual os balanços energéticos de cada constituinte são desenvolvidos separadamente. As equações diferenciais governantes foram resolvidas matematicamente usando o método de volumes finitos e o esquema WUDS como função de interpolação para termos convectivos e difusivos, em uma formulação totalmente implícita. O sistema de equações algébricas lineares resultantes da discretização das equações de energia em todos os pontos do domínio computacional são resolvidas iterativamente pelo método de Gauss-Seidel. Foi simulado a transferência de calor em diferentes condições operacionais, variando-se: (1) a razão de aspecto geométrica ( $L_2/L_1$ ); (2) a altura do reator; (3) o material da parede do reator; (4) a velocidade de ar na entrada do reator; (5) a temperatura do fluido de resfriamento do reator; (6) a temperatura do fluido interno do reator; (7) as dimensões das partículas do reator. Os resultados da distribuição de temperatura das fases gasosa e sólida ao longo do reator foram apresentados e analisados. Verificou-se que os gradientes axiais e radiais de temperatura dentro do reator foram levemente maiores para a fase fluida em todos os casos analisados; que as isolinhas de temperaturas são maiores para as posições cada vez mais próxima do centro e entrada do reator; que os gradientes axiais de temperatura são mais relevantes na região próxima à entrada do reator para as fases fluida e sólida e que os gradientes de temperatura radial são maiores perto da parede do reator para ambas as fases.

**Palavras-chave:** transferência de calor, reatores de leito fixo, cilíndrico-elíptico, modelo de duas fases.

## ABSTRACT

The study of heat transfer in fixed bed tubular reactors of heated or cooled walls is of great interest to the industry promoting exothermic or endothermic gas-solid heterogeneous catalytic reactions. The adequate and safe design of such equipment requires the adoption of reliable, realistic mathematical models that are in harmony with the physical principles that govern the problem. The objective of this work was to study the heat transfer in packed-bed elliptical-cylindrical reactor. A heterogeneous mathematical model was proposed, written in elliptical cylindrical coordinates, consisting of two continuous phases, a solid phase and another fluid phase, in which the energy balances of each constituent are developed separately. The governing differential equations were solved mathematically using the finite volume method and the WUDS scheme as an interpolation function for convective and diffusive terms, in a totally implicit formulation. The system of linear algebraic equations resulting from the discretization of the energy equation at all points of the computational domain are solved iteratively by the Gauss-Seidel method. Heat transfer was simulated under different operating conditions, varying: (1) the geometric aspect ratio ( $L_2 / L_1$ ); (2) the height of the reactor; (3) the material of the reactor wall; (4) the air velocity at the reactor inlet; (5) the temperature of the reactor's cooling fluid; (6) the temperature of the internal fluid of the reactor; (7) the dimensions of the reactor particles. The results of the temperature distribution of the gas and solid phases along the reactor were presented and analyzed. It was found that the axial and radial temperature gradients inside the reactor were higher for the fluid phase in all cases analyzed; that the temperature isolines are higher for positions closer to the center and inlet of the reactor; that the axial temperature gradients are more relevant in the region close to the reactor inlet for the fluid and solid phases and that the radial temperature gradients are larger near the reactor wall for both phases.

**Keywords:** heat transfer, fixed bed reactor, elliptic-cylindrical, two-phase model.

# SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	12
LISTA DE TABELAS.....	17
SIMBOLOGIA.....	18
INTRODUÇÃO.....	24
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	28
2.1 - Fundamentos dos meios porosos.....	28
2.2 - Fundamentos de catalisadores.....	35
2.3 - Reatores químicos.....	38
2.3.1 - Fundamentos.....	38
2.3.2 - Reator em batelada ou descontínuo.....	39
2.3.3 - Reator tanque agitado contínuo ou reator de mistura completa.....	41
2.3.4 - Reator tubular de leito fixo ou reator de fluxo de leito fixo.....	42
2.4 - Modelos matemáticos de transferência de calor em reatores.....	48
2.4.1 - Modelo heterogêneo ou modelo de duas fases.....	49
2.4.1.1 - Modelo contínuo.....	50
2.4.1.2 - Modelo de dispersão concêntrica.....	51
2.4.1.3 - Modelo de Shuman.....	53
2.4.1.4 - Modelo heterogêneo unidimensional.....	54
2.4.1.5 - Modelo heterogêneo bidimensional.....	55
2.4.2 - Modelo pseudo-homogêneo ou modelo de única fase.....	56
2.4.2.1 - Modelo pseudo-homogêneo unidimensional.....	59
2.4.2.2 - Modelo pseudo-homogêneo bidimensional.....	60
2.4.3 - Estimativa de condutividade térmica de um meio poroso.....	62
2.4.3.1 - Condução de calor.....	63
2.4.3.2 - Convecção de calor.....	63
2.4.3.3 - Radiação de calor.....	63
MODELAGEM MATEMÁTICA.....	65
3.1 - A equação da energia no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas.....	65
3.1.1 - A equação da energia na forma geral.....	65
3.1.2 - A equação da energia no sistema de coordenadas cilíndrica elípticas.....	68

3.2 - Solução numérica das equações de transporte de calor nas fases fluida e sólida em um reator cilíndrico-elíptico de leito fixo.....	80
3.3 - A malha computacional.....	100
3.4 - Propriedades termofísicas utilizadas na simulação.....	102
3.5 - Solução do sistema de equações, critério de convergência e casos simulados..	
.....	105
RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	107
4.1 - Refino da malha.....	107
4.2 - Validação do modelo de duas fases.....	109
4.3 - Avaliação do efeito dos parâmetros geométricos e termofísicos na simulação de temperatura das fases fluida e sólida no reator de leito fixo.....	111
4.3.1 - Influência da forma geométrica do reator.....	111
4.3.1.1 - Efeito da razão de aspecto ( $L_2/L_1$ ) do reator.....	115
4.3.1.2 - Efeito da altura do reator.....	117
4.3.2 - Influência do material da parede do reator.....	122
4.3.3 - Influência do fluido refrigerante.....	126
4.3.3.1 - Efeito do coeficiente de transferência de calor convectivo na parede externa do reator.....	126
4.3.3.2 - Efeito da temperatura do fluido de resfriamento.....	131
4.3.4 - Influência do fluido de aquecimento.....	135
4.3.4.1 - Efeito da velocidade do fluido na entrada do reator.....	135
4.3.4.2 - Efeito da temperatura do fluido na entrada do reator.....	140
4.3.5 - Influência da forma da partícula no interior do reator.....	144
CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTURAS PESQUISAS.....	151
5.1 - Considerações .....	151
5.2 - Sugestões para futuros trabalhos.....	153
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	154

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Estado inicial (esquerda) e final de um enchimento de partículas após sinterização por compressão e/ou aquecimento. Fonte: Sahimi (1995) e Martins (2006).....	30
Figura 2.2 - Distribuição de partículas no leito de um meio poroso.....	32
Figura 2.3 - Relação entre o volume da partícula e o volume da esfera circunscrita.....	34
Figura 2.4 - Esquema representativo do ciclo catalítico (A e B são reagentes, P produto). Fonte: Santos (2016).....	35
Figura 2.5 - Esquema de reator de batelada. Fonte: Gosnçalves (2015).....	39
Figura 2.6 - Esquema de reator de tanque agitado de alta pressão. Fonte: Jheten (2018)...	41
Figura 2.7 - Esquema de reator tubular.....	42
Figura 2.8 - Esquema de leito fixo ou coluna de recheio.....	43
Figura 2.9 - Esquema de reator cilíndrico-elíptico de leito fixo.....	44
Figura 2.10 - Célula de medidas térmicas. Fonte: Oliveira (2004).....	46
Figura 3.1 - Esquema de um reator cilíndrico-elíptico de leito compactado.....	69
Figura 3.2 - Sistema de coordenadas cilíndricas elípticas no plano $\xi$ - $\eta$ .....	71
Figura 3.3 - Esquema mostrando as trocas de calor consideradas na condição de contorno na fronteira do reator para a fase fluida.....	77
Figura 3.4 - Configuração geométrica do problema físico.....	81
Figura 3.5 - Volume de controle da malha numérica.....	81
Figura 3.6 - Esquema mostrando as trocas de calor consideradas na condição de contorno na fronteira do reator para a fase sólida.....	95
Figura 3.7 - Ponto de simetria na face $\eta = 0$ . Fonte: Silva (2016).....	97
Figura 3.8 - Ponto de simetria na face $\eta = 1$ . Fonte: Silva (2016).....	98
Figura 3.9 - Ponto de simetria na face $\xi = 1$ . Fonte: Silva (2016).....	99

Figura 3.10 - Malha numérica no plano transversal de um reator cilíndrico-elíptico com razão de aspecto, $L_2/L_1 = 2,0$ .....	101
Figura 3.11 - Malha numérica no plano longitudinal de um reator cilíndrico-elíptico com razão de aspecto, $L_2/L_1 = 2,0$ .....	102
Figura 4.1 - Perfis adimensionais de temperatura no interior do reator de leito fixo cilíndrico ( $L_2/L_1 = 1,0$ ), obtidos com o modelo heterogêneo (fase fluida e fase sólida) e o modelo pseudo-homogêneo (fase única), ( $B_i = 1,0$ ).....	110
Figura 4.2 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $L_2/L_1 = 1,0$ (Caso 1).....	113
Figura 4.3 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $L_2/L_1 = 1,0$ (Caso 1).....	114
Figura 4.4 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $L_2/L_1 = 2,0$ (Caso 2).....	115
Figura 4.5 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $L_2/L_1 = 2,0$ (Caso 2).....	115
Figura 4.6 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $L_2/L_1 = 3,0$ (Caso 3).....	116
Figura 4.7 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $L_2/L_1 = 3,0$ (Caso 3).....	117
Figura 4.8 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $H = 0,3$ (Caso 4).....	118
Figura 4.9 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $H = 0,3$ (Caso 4).....	119

Figura 4.10 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $H = 0,4$ (Caso 5).....	120
Figura 4.11 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $H = 0,3$ (Caso 5).....	121
Figura 4.12 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $K_{wr} = 1,38$ W/m K (Caso 6).....	123
Figura 4.13 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $K_{wr} = 1,38$ W/m K (Caso 6).....	124
Figura 4.14 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $K_{wr} = 0,12$ W/m K (Caso 7).....	125
Figura 4.15 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $K_{wr} = 0,12$ W/m K (Caso 7).....	126
Figura 4.16 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $h_{wext} = 4,72$ W/m <sup>2</sup> K (Caso 8).....	128
Figura 4.17 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $h_{wext} = 4,72$ W/m <sup>2</sup> K (Caso 8).....	129
Figura 4.18 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $h_{wext} = 10,53$ W/m <sup>2</sup> K (Caso 9).....	130
Figura 4.19 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $h_{wext} = 10,53$ W/m <sup>2</sup> K (Caso 9).....	130

Figura 4.20 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 20^{\circ}\text{C}$ (Caso 10).....	132
Figura 4.21 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 20^{\circ}\text{C}$ (Caso 10).....	133
Figura 4.22 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 10^{\circ}\text{C}$ (Caso 11).....	134
Figura 4.23 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 10^{\circ}\text{C}$ (Caso 11).....	135
Figura 4.24 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $u_z = 0,2 \text{ m/s}$ (Caso 12).....	136
Figura 4.25 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $u_z = 0,2 \text{ m/s}$ (Caso 12).....	138
Figura 4.26 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $u_z = 0,35 \text{ m/s}$ (Caso 13).....	138
Figura 4.27 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $u_z = 0,35 \text{ m/s}$ (Caso 13).....	139
Figura 4.28 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 80^{\circ}\text{C}$ (Caso 14).....	141
Figura 4.29 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 80^{\circ}\text{C}$ (Caso 14).....	142

Figura 4.30 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 100^{\circ}\text{C}$ (Caso 15).....	143
Figura 4.31 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $T = 100^{\circ}\text{C}$ (Caso 15).....	144
Figura 4.32 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $a = 2,0 \times 10^{-3}$ e $b = 2,0 \times 10^{-3}$ (Caso 16).....	146
Figura 4.33 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $a = 2,0 \times 10^{-3}$ e $b = 2,0 \times 10^{-3}$ (Caso 16).....	147
Figura 4.34 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $a = 2,0 \times 10^{-3}$ e $b = 3,0 \times 10^{-3}$ (Caso 17).....	148
Figura 4.35 - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para $a = 2,0 \times 10^{-3}$ e $b = 3,0 \times 10^{-3}$ (Caso 17).....	149

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Densidade e condutividade dos materiais que constituem a parede do reator.....	103
Tabela 3.2 - Casos simulados nesta pesquisa.....	106
Tabela 4.1 - Parâmetros termofísicos para validação da malha.....	108
Tabela 4.2 - Teste para escolha da malha com as respectivas temperaturas das fases fluida e sólida e o tempo computacional.....	108
Tabela 4.3 - Parâmetros termofísicos usados para validação do modelo heterogêneo..	109

## SIMBOLOGIA

### Letras Latinas

$a$ e $b$ - Números reais positivos	[ m ]
$a_{fs}$ - Área da superfície específica do leito empacotado	[ m <sup>-1</sup> ]
$A_P, A_N, A_S, A_E, A_W, A_F, A_T, A_P^0$ - Coeficientes das equações discretizadas	[ - ]
$A_{tr}$ - Área de seção transversal do reator	[m <sup>2</sup> ]
$A_{sp}$ - Área superficial específica	[m <sup>2</sup> ]
$B_f$ - Termo de geração de energia do fluido	[W/m <sup>3</sup> ]
$B_s$ - Termo de geração de energia do sólido	[W/m <sup>3</sup> ]
$c_p$ - Calor específico do fluido	[ J/(kgK) ]
$D$ - Diâmetro do leito	[ m ]
$d_p$ - Diâmetro da partícula	[ m ]
$e, w, s, n, f, t$ - Referência das faces dos pontos nodais	[ - ]
$E, N, P, W, S$ - Referência pontos nodais	[ - ]
$H$ - Comprimento (altura) do leito	[m]
$h$ - Coeficiente de transporte de calor	[W/(m <sup>2</sup> K)]

$h_w$ - Coeficiente de transferência de calor na parede meio poroso	[W/(m <sup>2</sup> K)]
$h_{sf}$ - Coeficiente de transferência de calor em ambas as fases	[W/(m <sup>2</sup> K)]
J - Jacobiano da transformação	[1/m <sup>2</sup> ]
$J_H$ - Fator de Colburn para transferência de calor	[-]
$k_r, k_a$ - Condutividade térmica radial e axial, respectivamente	[W/m.K]
k - Condutividade térmica	[W/m.K]
$k_m$ - Condutividade térmica total	[W/m.K]
L - Distância focal da elipse	[ m ]
$L_1$ - Semi - eixo menor da elipse	[ m ]
$L_2$ - Semi - eixo maior da elipse	[ m ]
$m_{total}$ - Massa total	[ kg ]
$\hat{n}$ - Número de iterações em cada instante de tempo	[-]
Pe - Número de Peclet	[-]
$Nu_{sf}$ - Número de Nusselt de ambas as fases	[-]
$q_s$ - Geração de energia interna do sólido	[W/m <sup>3</sup> ]
$q_f$ - Geração de energia interna do fluido	[W/m <sup>3</sup> ]
Re - Número de Reynolds	[-]

$Re_p$ - Número de Reynolds de partículas	[-]
$S^\Phi$ - Termo de geração interna de energia	[W/m <sup>3</sup> ]
$S_p$ - Superfície da partícula	[m <sup>2</sup> ]
$S_t$ - Número de Stanton	[-]
$t$ - Tempo	[s]
$T$ - Variável temperatura	[°C]
$T_0$ - Temperatura na entrada	[°C]
$T_f$ - Temperatura do fluido	[°C]
$T_{W_{in}}$ - Temperatura no lado interno da parede do reator	[°C]
$T_{W_{ext}}$ - Temperatura no lado externo da parede do reator	[°C]
$T_m$ - Temperatura do fluido refrigerante	[°C]
$T_s$ - Temperatura do sólido	[°C]
$\tilde{U}$ , $\tilde{V}$ e $\tilde{W}$ - São as componentes contravariantes do vetor velocidade	[m/s]
$\hat{U}$ , $\hat{V}$ e $\hat{W}$ - Coeficientes métricos	[-]
$u_z$ - Velocidade superficial do fluido no leito	[m/s]
$V$ - Volume do reator	[m <sup>3</sup> ]
$V_v$ - Volume de vazios	[m <sup>3</sup> ]

$V_t$ - Volume total do meio	[m <sup>3</sup> ]
$V_p$ - Volume da partícula	[m <sup>3</sup> ]
$\vec{v}$ - Vetor velocidade	[m/s]
x, y, z - Coordenadas cartesianas	[m]
z - Variável posição axial	[m]

### **Letras gregas**

$\alpha_{ij}$ - Coeficientes	[-]
$\alpha_{ax}$ - Difusividade térmica axial	[ m <sup>2</sup> /s ]
$\alpha_f$ - Difusividade térmica da fase fluida	[ m <sup>2</sup> /s ]
$\epsilon$ - Esfericidade	[-]
$\delta, \Delta$ - Variação	[-]
$\tau$ e $\phi$ - Ângulos definidos na equação (3.9)	[-]
$\rho_f$ - Densidade do fluido	[ kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_s$ - Densidade do sólido	[ kg/m <sup>3</sup> ]
$\varphi$ - Fração de vazios do leito	[ - ]

$\mu$ - Viscosidade do fluido	[ N.s/m <sup>2</sup> ]
$\xi, \eta$ - Variáveis no sistema de coordenadas cilíndrico-elíptico	[-]
$\Phi$ - Função da variável observada	[-]
$\Gamma, \Gamma^\Phi$ - Propriedade genérica na equação geral da conservação	[-]
$\nabla$ - Operador de gradiente	[-]
$\Psi$ - Variável do termo de dissipação viscosa	[-]
$\theta$ - Ângulo do sistema de coordenadas cilíndricas	[-]
$\langle . \rangle$ - Valor médio de uma quantidade	[-]

### **Subscritos**

$\xi, \eta, z$ - Direção perpendicular ao fluxo	[-]
e, w, s, n, f, t - Faces dos pontos nodais	[-]
eff - Propriedade efetiva	[-]
feff - Propriedade efetiva do fluido	[-]
seff - Propriedade efetiva do sólido	[-]
f - Fluido	[-]
s - Sólido	[-]

$W_{ext}$  - Parede externa [-]

$W_{int}$  - Parede interna [-]

o - Inicial [-]

w - Parede do leito [-]

int - Intersticial [-]

p - Partícula [-]

T - Total [-]

V - Vazio [-]

### **Superescritos**

o - Anterior [-]

$\hat{n}$  - Iteração do método Gauss-Seidel [-]

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

O estudo da transferência de calor em meios porosos (um meio sólido contendo poros, que são espaços “vazios”, distribuídos aleatoriamente no meio) contido em tubos cilíndricos, percolados por fluidos tem despertado o interesse de pesquisadores de vários ramos da ciência e da tecnologia desde o século passado. O interesse advém pelo fato de os meios porosos estarem presentes tanto na natureza (solos e plantas, por exemplo) como na maioria das operações unitárias empregadas na Engenharia Química, como: filtração, destilação, absorção e adsorção em colunas recheadas, secagem e reações catalíticas em leitos fixos e fluidizados, (Freire, 1979).

Os reatores tubulares de leito fixo de paredes aquecidas ou resfriadas são frequentemente usados na indústria para promover reações catalíticas heterogêneas gás-sólido altamente exotérmica ou endotérmica. Porém, o projeto fidedigno e seguro de tais equipamentos exige a adoção de modelos preditivos confiáveis, baseados em experimentos de fluxo de fluidos resfriado (ou aquecido) e experimentos cinéticos, que permitem simular diversas condições experimentais visando mudança na geometria, ampliação de escala e otimização do equipamento e do processo como reportado por Paterson e Carberry (1983), Azevedo et al. (1990), Freund et al. (2003) e 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 esteja em consonância 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 e de difícil solução.

O manuseio de técnicas matemáticas para solução de equações diferenciais parciais 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 requerer 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 (Silva, 2018).

Com relação à modelagem de processos térmicos em leito catalítico com formato cilíndrico, os modelos podem ser divididos em dois grupos: pseudo-homogêneos e heterogêneos. Cada modelo pode ainda apresentar variações devido às hipóteses realizadas, quanto ao número de dimensões. Os modelos unidimensionais não consideram gradientes radiais de temperatura ou concentração, agrupando na parede toda a resistência ao transporte de calor. Os modelos bidimensionais consideram a existência de um perfil radial não uniforme de temperaturas e, conseqüentemente, de concentrações, o que pressupõe o conhecimento do valor da condutividade térmica radial efetiva, além do coeficiente de película na parede dos tubos (Giordano, 1991). Análises de eficácia de diferentes modelos bidimensionais (pseudo-homogêneos e heterogêneos) mostram que o modelo pseudo-homogêneo é consistente, tendo resolução computacional e programação mais simples que os demais, porém o modelo heterogêneo representa mais fidedignamente o modelo real.

Na construção de modelos matemáticos é necessário admitir algumas hipóteses. Levando-se em consideração que, se uma ou mais dessas hipóteses são inválidas, as predições do modelo tornam-se dependentes da estrutura de referência. Previsões confiáveis dos perfis de temperatura no leito advêm do conhecimento exato dos parâmetros do modelo matemático adotado. Para o problema de transferência de calor em reatores, o modelo matemático é constituído, basicamente, pela equação da energia.

Soluções analíticas e numéricas da equação da difusão/convecção de calor em reator de leito fixo, para vários casos tem sido reportada na literatura, conforme pode ser visto em Wash e Froment (1972), Gunn e Khalid (1975), Li e Finlayson (1977), Wakao e Kaguei (1982), Freiwald e Paterson (1992); Dixon (1985) e Oliveira et al. (2003). Contudo, os estudos estão limitados ao uso de geometria cilíndrica e ao uso do modelo matemático de uma única fase (pseudo-homogênea). Além disso, poucos são os trabalhos que assumem condições de contorno para o fluido na entrada do reator, material do reator, partículas do leito e propriedades termofísicas variáveis. Desta forma fica evidente a necessidade de serem apresentadas soluções mais amplas e rigorosas para o problema em questão envolvendo agora, também, um modelo matemático de duas fases ou modelo heterogêneo que abordam a fase fluida e a fase sólida do leito separadamente, e que podem apresentar perfis de temperatura em ambas as fases. Do ponto de vista térmico, a simulação destes modelos depende do conhecimento dos parâmetros térmicos elementares, tais como transferência de calor por convecção entre a partícula e o fluido adjacente e a condutividade térmica do sólido que compõe a partícula (Bunell et al., 1949; Jorge e Giudici, 1993).

Nesse sentido, para contextualizar a pesquisa citam-se alguns trabalhos importantes na área relacionada ao tema em questão. Oliveira (2004) fez pesquisas relacionadas ao estudo de transferência de calor em reator cilíndrico-elíptico, no entanto, o seu trabalho foi conduzido enfaticamente até as condições de operação em regime permanente e avaliando o efeito da velocidade do gás e calor de reação na transferência de calor em regime permanente. Silva Filho (2013) fez estudos adicionais levando em consideração diferentes valores para propriedades termofísicas, porém, constantes em todo o leito; diferentes valores de porosidade no leito, sendo em alguns casos constante e em outros, variável em todo o leito. Por último, Silva (2018) realizou sua pesquisa com o estudo da transferência de calor em um reator cilíndrico-elíptico de leito fixo em regime transiente, considerando propriedades termofísicas variáveis. O autor avaliou o efeito do perfil de temperatura variável com a posição na entrada do reator, perfil de porosidade variável, razão de aspecto geométrica  $L_2/L_1$ , influência da velocidade do ar na entrada do reator, termo de reação química no interior do reator na distribuição de temperatura e transferência de calor no interior do equipamento.

Embora todos importantes, os trabalhos foram conduzidos com o uso de um modelo matemático pseudo-homogêneo resolvido pelo método numérico de volumes finitos, usando o esquema WUDS de interpolação e método totalmente implícito, o que abre um leque de oportunidades para novas pesquisas envolvendo o tipo de modelo.

Diante do exposto, este trabalho tem como objetivo geral estudar o transporte de calor em um reator de leito fixo com uma geometria cilíndrica elíptica utilizando o modelo de duas fases (heterogêneo) em regime permanente. Como objetivos específicos pode-se citar:

- a) Propor uma modelagem matemática heterogênea das equações de transporte de energia em coordenadas cilíndricas elípticas para descrever a transferência de calor no interior de um reator tubular de leito fixo com seção transversal elíptica;
- b) Desenvolver a solução numérica das equações de difusão/convecção da energia aplicada as fases fluida e sólida no interior do reator de leito fixo de seção transversal cilíndrica usando o método de volumes finitos;
- c) Desenvolver um código computacional no software mathematica<sup>®</sup> para prever a transferência de calor no interior do reator;
- d) Simular o transporte de calor no interior do reator de leito em diferentes condições operacionais e estudar os aspectos termofluidodinâmicos e geométricos sobre a distribuição de temperatura no seu interior.

## CAPÍTULO 2

### FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Abordaremos neste capítulo uma revisão geral dos tópicos explorados em diversas literaturas relacionados a tipos de reatores, meios porosos, transferência de calor em reatores de leito fixo, catalisadores e modelos matemáticos.

#### 2.1 - Fundamentos dos meios porosos

De acordo Dullien (1992), para um material ser considerado como um meio poroso, este deve conter espaços vazios relativamente pequenos, geralmente designados por poros, no interior de uma matriz sólida ou semissólida. Os poros contêm normalmente um fluido, como ar, água ou mistura de vários fluidos, além disso, devem estar conectados e, portanto, serem permeáveis. Assim, fluidos podem penetrar no meio poroso através de uma face e emergir em outra face. O comportamento em atravessar um determinado meio poroso depende tanto das características do fluido como das do próprio meio, além das condições termodinâmicas em que decorre o escoamento do fluido.

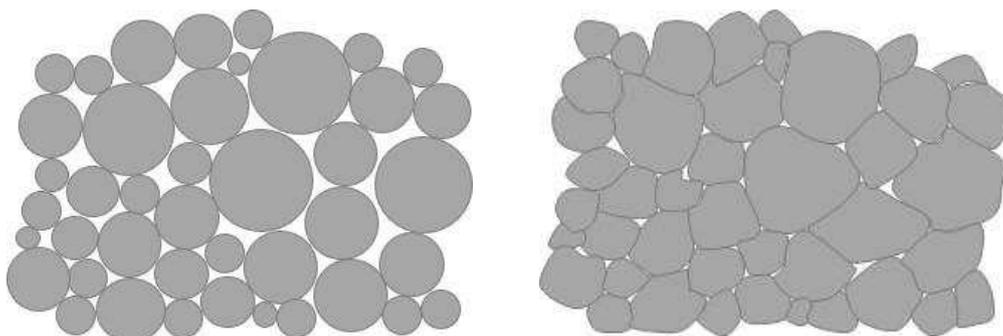
Os meios porosos, portanto, compreendem uma larga variedade de materiais. Por esse motivo, divide-se os meios porosos em classes, de acordo com o tipo de poros que eles contêm, podendo um meio poroso pertencer a mais de uma classe ao mesmo tempo. Uma classificação sugerida por Manegold (1937) e citada em Scheidegger (1974), categoriza os meios porosos em vazios, capilarizados e espaços forçados. Vazios são caracterizados pelo fato de que as paredes têm um efeito insignificante sobre o fenômeno hidrodinâmico em seu interior. Em meios capilarizados, as paredes exercem alguma influência sobre o escoamento, mas os efeitos decorrentes da estrutura molecular do fluido são desprezíveis. Já nos espaços forçados, a estrutura molecular do fluido influi consideravelmente no escoamento.

Além disso, os meios porosos podem ser classificados em função de sua estrutura como granulares ou fibrosos. Os granulares são usualmente formados por um conjunto de partículas ou grãos, de forma esférica ou não, dispostas regular ou randomicamente, e

representam a grande maioria dos meios porosos. Já os fibrosos são formados por um conjunto de inclusões muito longas, chamadas de fibras, que podem ser naturais ou sintéticas, retas ou curvas, estando randomicamente dispostas ou em malhas regulares. São exemplos de meios porosos: leitos, rochas porosas, agregados fibrosos como tecidos e filtros, e partículas catalíticas contendo microporos extremamente pequenos (Mendes, 1997).

Determinados meios nos quais os poros não se encontram ligados entre si são denominados como impermeáveis ao escoamento de fluidos, já aqueles com poros interconectados entre si são denominados permeáveis. O escoamento de fluidos através de meios porosos permeáveis é uma situação encontrada em larga escala em hidrologia e na indústria química, na produção de óleo e gás, na filtração, nos leitos fluidizados, nas colunas de recheio para absorção, destilação e extração líquido-líquido, e requer que se conheçam expressões que permitam prever a relação “vazão-queda de pressão” para o fluido, associada à resistência ao escoamento causada pelas partículas.

Existe também condições em que o escoamento através do meio poroso seja viscoso e é caracterizada por um parâmetro, designado de permeabilidade, independentemente das propriedades do fluido. Esta propriedade implica que as dimensões dos espaços vazios atravessados pelo fluido são muito maiores que as dimensões das moléculas do fluido que os atravessa. Em função do tipo de investigação entre os elementos (partículas) que os constituem, é possível dividi-los ainda em meios porosos não consolidados, no qual, é possível distinguir visualmente os elementos constituintes e separá-los fisicamente, e os meios porosos consolidados, em que a fase sólida é contínua, onde não é possível distinguir as partículas que formam a estrutura do meio, conforme pode-se visualizar na Figura 2.1. Descrição mais detalhada dos mecanismos de formação de meios porosos consolidados e não consolidados, assim como das suas propriedades podem ser vistas em Sahimi (1995).



**FIGURA 2.1** - Estado inicial (esquerda) e final de um enchimento de partículas após sinterização por compressão e/ou aquecimento.

Em escala microscópica e num sentido amplo, virtualmente todos os materiais sólidos podem ser considerados meios porosos, com exceção de estruturas metálicas, rochas densas e alguns plásticos (Dullien, 1992). Dispor de modelos adequados que permitam prever o comportamento dos meios porosos e dos fenômenos de transporte de quantidade de movimento, massa e calor que neles ocorrem, pode ser fundamental em várias áreas do conhecimento científico (tecnológico e industrial), como por exemplo, o estudo de reatores de leito fixo. A capacidade de modelar o comportamento de um meio poroso em diferentes condições, permite acelerar o desenvolvimento e melhorar a eficiência de processos que envolvem meios porosos, evidenciando ganhos econômicos e ambientais. Alguns exemplos de áreas em que este conhecimento é vantajoso incluem:

- 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, etc;

- Recursos naturais: produção de gás natural e petróleo, escoamento em minas de água e etc.

- 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;

- 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 outras situações.

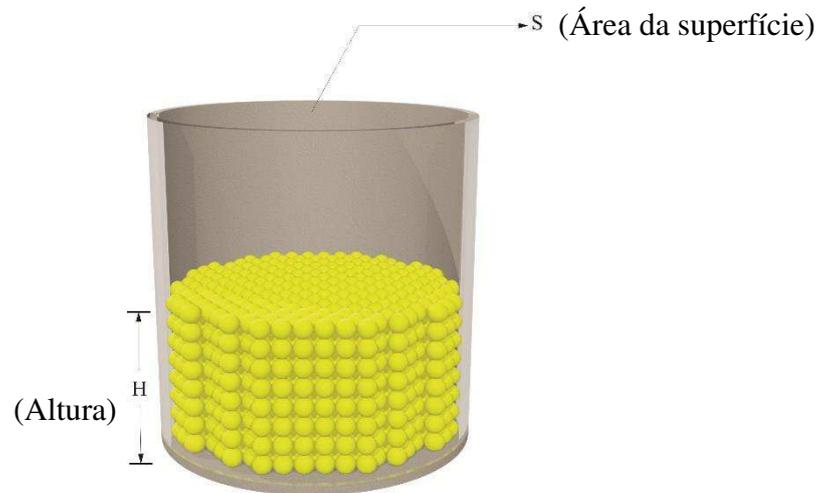
Devido à complexidade dos meios porosos reais, torna-se difícil descrever o meio poroso geometricamente de forma precisa. Em teoria, um meio poroso é especificado por equações analíticas que definem o espaço entre os poros. De forma geral, algumas aproximações geométricas são então consideradas, de modo a tornar possível o estudo do meio, obtendo-se características muito próximas das reais.

Para descrever um meio poroso em termos de modelagem torna-se necessário utilizar alguns parâmetros. 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 para torna-lo hábil para prever o meio poroso mais próximo da realidade. Portanto, porosidade e permeabilidade são os mais relevantes parâmetros usados na caracterização de um meio poroso em uma escala macroscópica.

A porosidade é definida como sendo a razão entre o volume de vazios ( $V_V$ ), que são as zonas sem partículas e que não está ocupada pelo material sólido, e o volume total do meio ( $V_T$ ), que é a soma do volume de vazios e do volume ocupado pelas partículas sólidas de acordo com Dullien (1992). Assim, pode-se escrever:

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

Sendo assim, a porosidade indica a porcentagem do volume de vazios em relação ao volume total conforme pode ser observado na Figura 2.2.



**FIGURA 2.2** - Distribuição de partículas no leito de um meio poroso.

Pode-se também estabelecer uma relação entre porosidade e as densidades do leito, das partículas e do fluido, em que a densidade aparente é dada por:

$$\rho_{\text{leito}} = \frac{m_{\text{total}}}{V_{\text{total}}} \quad (2.2)$$

De acordo com Silva Filho (2013), a massa total é igual à massa de sólidos mais a massa de fluido. Portanto, a massa total e o volume total do leito são dados, respectivamente por:

$$m_{\text{total}} = (1 - \varphi) \times S \times H \times \rho_s + \varphi \times S \times H \times \rho_f \quad (2.3)$$

e

$$V_{\text{total}} = S \times H \quad (2.4)$$

onde  $\rho_s$  e  $\rho_f$  são as densidades das partículas e fluido, respectivamente. Substituindo as equações (2.3) e (2.4) na equação (2.2), obtem-se

$$\varphi = \frac{\rho_{\text{leito}} - \rho_s}{\rho_f - \rho_s} \quad (2.5)$$

onde o termo  $\varphi \times S \times H$  representa o volume disponível para fluxo (volume de vazios) e  $(1 - \varphi) \times S \times H$  representa o volume ocupado pelas partículas sólidas.

Uma outra maneira de se determinar a porosidade de um meio poroso é pelo fator de empacotamento (FE) que denota a fração real ocupada pelas partículas. Sob essa ótica, este parâmetro é dado por:

$$\varphi = 1 - (\text{FE}) = 1 - \left( \frac{N \times V_p}{V_{\text{total}}} \right) \quad (2.6)$$

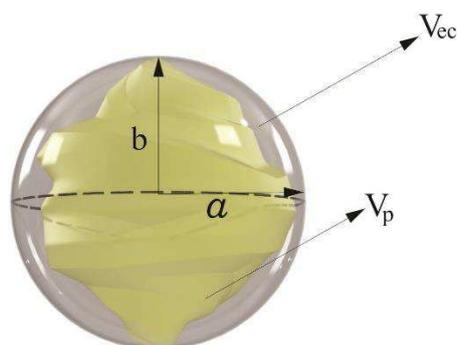
onde,  $N$  é o número de partículas que efetivamente ocupa a célula,  $V_p$  é o volume da partícula e  $V_{\text{total}}$  é o volume da célula unitária (meio poroso).

Já as características geométricas das partículas que constituem os meios porosos, a saber, sua forma geométrica, dimensão e distribuição influenciam o comportamento dos meios porosos não consolidados. A porosidade do leito aumenta à medida que as partículas se afastam da forma esférica, ou seja, a esfericidade se distancia do valor unitário ( $0 < \varphi \leq 1$ ).

O diâmetro equivalente,  $d_p$ , que é definido como sendo o diâmetro da esfera com o mesmo volume de partícula (McCabe et al., 1985), pode ser determinado, entre outras formas, pela relação  $d_p = 6/A_{sp}$ , se a área superficial específica ( $A_{sp}$ ) for conhecida. Um diâmetro nominal equivalente também pode ser obtido por peneiração, 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 regular ou irregular atribui-se um fator de esfericidade ( $\epsilon$ ), definido por:

$$\epsilon = \left( \frac{V_p}{V_{ec}} \right)^{1/3} \quad (2.7)$$

onde valores deste fator diferenciam-se para partículas de diferentes formas. Na equação (2.7),  $V_p$  e  $V_{ec}$  representam os volumes da partícula e da esfera circunscrita, respectivamente, conforme ilustrado na Figura 2.3 (Curry, 1951).



**FIGURA 2.3** – Relação entre o volume da partícula e o volume da esfera circunscrita.

Visto que, em muitas aplicações, as partículas que constituem um leito de enchimento não possuem um diâmetro uniforme, mas uma distribuição de tamanhos. Assim, é prática comum determinar um valor médio para o diâmetro de partículas do leito de enchimento, representando um 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.

Já a área superficial específica é definida como sendo a razão entre a área superficial do espaço vazio e o volume total de amostra de meio poroso. Ela 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).

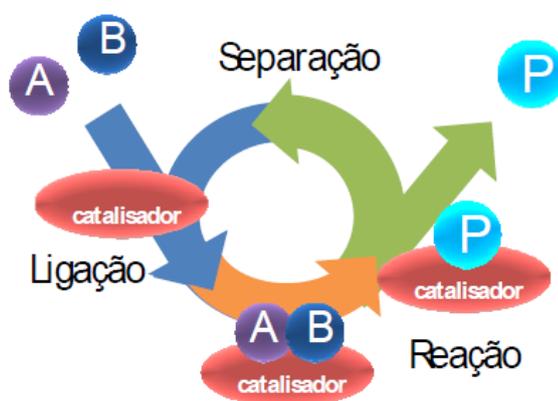
## 2.2. Fundamentos de catalisadores

A palavra catalisador que vem da expressão grega “Katálysis” cujo significado é dissolução é bastante utilizado nas indústrias químicas e petroquímicas para acelerar as reações e baratear todo o custo do processo. Os tipos mais comuns de catalisadores são os metais (Co, Ni, Pt, Pd), os ácidos que catalisam muitas reações orgânicas ( $H_2SO_4$ ), os

óxidos metálicos ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), as bases ( $\text{NaOH}$ ) e enzimas produzidas pelos organismos vivos (ptialina, pepsina e tripsina). Segundo Balzer (2014), os catalisadores são usados em mais de 90% dos processos industriais e apresentam um papel significativo no controle de emissão de poluentes atmosféricos. O desafio proposto pela necessidade de produtos e processos favoráveis ao meio ambiente oferece uma oportunidade interessante para a descoberta e desenvolvimento de novos catalisadores e novas tecnologias.

Existem duas classes de catalisadores extremamente amplas, uma delas é a que opera com sistemas sintéticos a uma temperatura alta onde a maioria dos catalisadores sintéticos são sólidos e geralmente objetivam provocar a ruptura em alta temperatura ou a síntese dos materiais. A outra classe de catalisador é a que opera em sistemas biológicos a uma temperatura próxima à do ambiente e que são encontrados na maioria das vezes em qualquer lugar no mundo bioquímico e nas criaturas vivas (Levenspiel, 2011).

A catálise é a ocorrência, ou seja, estudo e uso de catalisadores e de processos catalíticos que pode ser descrita como um fenômeno em que uma quantidade de um material “estranho” (catalisador) à estequiometria proporciona um novo percurso reacional energeticamente mais favorável, o que se traduz geralmente em uma diminuição da energia de ativação, com o conseqüente aumento da velocidade reacional. Uma reação catalítica é descrita como um evento cíclico conforme pode ser visto na Figura 2.4, em que o catalisador participa da reação ligando-se às moléculas dos reagentes para promover a formação de produtos. Após esta etapa, os produtos são liberados e o catalisador é recuperado à sua forma original, podendo retornar ao ciclo catalítico (Chorkendorff e Niemantsverdriet, 2007).



**FIGURA 2.4.** Esquema representativo do ciclo catalítico (A e B são reagentes, P produto). Fonte: Santos (2016).

De acordo com Santos (2016), em uma reação não catalisada, as moléculas dos reagentes necessitam colidir com uma energia suficiente para quebrar a barreira energética, isto provoca a transformação do reagente em produtos, logo, a reação catalisada fornece um caminho alternativo por intermédio de ligações químicas entre os reagentes e o catalisador. Normalmente, quando se fala sobre catalisadores, se quer dizer aquele que acelera uma reação, embora, um catalisador mude somente a velocidade de uma reação e não afete o equilíbrio dela.

Sabe-se que um catalisador pode acelerar facilmente a taxa de reações, entretanto, quando uma variedade de reações é encontrada, a característica mais importante do catalisador é sua seletividade. Levenpiel (2011) reporta que a seleção de um catalisador específico para promover a reação ainda não é bem entendida, conseqüentemente, na prática, necessita-se de um longo procedimento de tentativa e erro de modo a produzir um catalisador satisfatório.

Parâmetros como a atividade e a seletividade são essenciais na escolha de um catalisador para atuar em determinada reação. A seletividade é uma medida importante em reações catalíticas já que a reação principal, aquela que gera o produto desejado, é, em geral, acompanhada por outras reações simultâneas, em série ou em paralelo ou em série-paralelo, que conduzem à formação de produtos considerados indesejáveis (Logli, 2008). Um catalisador seletivo produz uma proporção elevada do produto desejado com quantidades mínimas de produtos secundários. Outra característica também importante está relacionada à estabilidade do catalisador, ou seja, um bom catalisador deve resistir a muitos ciclos catalíticos para ser economicamente viável. Assim, há um grande interesse econômico no desenvolvimento de catalisadores seletivos e estáveis (Meireles, 2013).

Os catalisadores são classificados também quanto à sua natureza físico-química, em homogêneos e heterogêneos. Quando o catalisador, os reagentes e os produtos estão dispersos na mesma fase, a catálise é conhecida como homogênea. Quando o catalisador se encontra em uma fase separada, a catálise é denominada heterogênea e geralmente começa com adsorção de moléculas nos sítios ativos da superfície do catalisador, no caso do catalisador sólido (Ciola, 1981; Figueiredo e Ribeiro, 1989; Schmal, 2011).

Em catálise heterogênea é possível encontrar diversas combinações de fases, mas geralmente o catalisador é um sólido, enquanto os reagentes e produtos se distribuem por uma ou mais fases, que pode ser líquida ou gasosa. O catalisador intervém no mecanismo reacional, podendo ser regenerado ao final de cada ciclo. A reação ocorre na superfície do catalisador e o processo catalítico ocorre em várias etapas durante o contato dos reagentes com o catalisador (Ciola, 1981; Figueiredo e Ribeiro, 1989).

Para a indústria, a catálise heterogênea é a mais vantajosa e de maior importância, uma vez que o emprego de catalisadores homogêneos acarreta diversos problemas técnicos e ambientais, como corrosão, formação de rejeitos e separação dos produtos obtidos do catalisador e dos solventes utilizados (Védrine, 2014). Tais problemas são minimizados com o uso de catalisadores heterogêneos, que facilitam a separação dos produtos da reação e a obtenção de produtos com alto grau de pureza. Em muitos casos, esse tipo de catalisador, pode ser regenerado e reutilizado, provocando pouca ou nenhuma corrosão, sendo de fácil manuseio e possibilitando o fácil reinício de processos contínuos em reações de leito fixo (Santos, 2016). Eles apresentam alta estabilidade térmica e altas atividades e seletividades diante de vários tipos de reação. Além disso, têm menor geração de resíduos ao final do processo, o que os caracteriza como ambientalmente “amigáveis” ou “corretos” (Kirumakki et. al., 2006; Zhang et al., 2010). Dessa forma, a catálise heterogênea pode contribuir em dois níveis para uma produção química industrial mais limpa, em primeiro lugar, fornecendo melhoria dos processos de produção e, em segundo, ao ajudar a eliminar ou, até mesmo, transformar subprodutos tóxicos indesejados (Blaser, 2000).

Na obtenção de um catalisador é realizada uma seleção entre várias substâncias potenciais, em seguida usa-se um determinado método para sua síntese. Os métodos geralmente são compostos por várias operações unitárias cuja ordenação e condições de operatórias diferem, de acordo com o tipo de catalisador desejado. Neste caso podem ser: catalisador suportado, que apresenta um suporte sobre o qual se dispersa uma substância ativa, ou um catalisador mássico, em que toda a massa é constituída por uma substância ativa.

Quanto ao tempo de reação, as condições reacionais e à atividade catalítica, os catalisadores homogêneos apresentam rendimentos muito superiores, quando

comparados aos heterogêneos, o que faz deles ainda os mais utilizados nos processos industriais. Porém, um processo industrial moderno deve ser tanto eficiente como ambientalmente correto, por isso existe a necessidade contínua de pesquisas capazes de produzir catalisadores que aliem a efetividade dos líquidos à simplicidade de operação e cunho ambiental dos sólidos (Mello et al., 2011). No entanto, a descoberta e a aplicação dos catalisadores sólidos aos processos químicos a indústria química se diversificou e cresceu de forma espetacular. Isto tem ocorrido através do desenvolvimento de novos processos e da atualização de processos existentes, muitos deles baseados no uso de catalisadores sólidos. A maior parte destes processos catalíticos envolvendo reagentes gasosos emprega reatores de leito fixo (Froment e Bichoff, 1990).

## **2.3 – Reatores químicos**

### **2.3.1 Fundamentos**

Os reatores químicos são equipamentos nos quais ocorrem reações químicas e são encontrados em dois tipos básicos, tanques ou tubos, os objetivos são maximizar a geração de produtos desejados e de maior valor agregado, produzir o maior rendimento com o menor custo, gerar intermediários químicos para novos processos, operar dentro de normas pré-estabelecidas de segurança (controlada) e de respeito ao meio ambiente, e por fim gerar lucros (Fábrega, 2012).

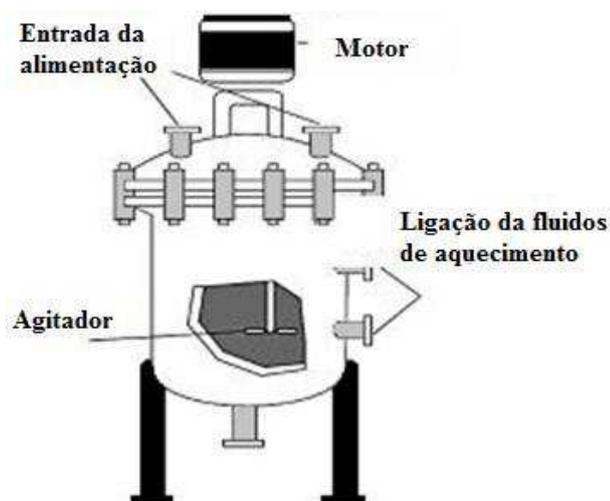
Na literatura são citados os reatores ideais, para os quais se desenvolvem modelos matemáticos específicos a partir de condições pré-estabelecidas e que quando aplicado às condições reais, se ajusta adequadamente, e os reatores não ideais, para os quais é necessário um tratamento matemático específico em função de peculiaridades de reação e/ou reator. Podem ser citados três principais reatores ideais básicos: reator descontínuo (ou batelada), reator tubular e reator de mistura. A classificação de reatores pode ser dada quanto à natureza das fases nos reatores. Neste caso, podem ser denominados homogêneos (de uma só fase), com reações em fase gasosa, do tipo líquido-líquido (catalisador), e reatores heterogêneos (de duas ou mais fases), com reações dos tipos gás-

sólido, gás-líquido e gás-líquido-sólido (catalisador). A seguir apresenta-se informações adicionais sobre os diferentes tipos de reatores.

### 2.3.2 – Reator em batelada ou descontínuo

O reator em batelada ou descontínuo é o termo genérico para um tipo de vaso amplamente utilizado nas indústrias de processos químicos, em diversas aplicações: reações químicas; dissolução de sólidos; mistura de produtos; destilação; cristalização; extração líquido/líquido; polimerização; etc. Esse tipo de reator é constituído por um tanque com agitador e um sistema de aquecimento e esfriamento, podendo variar seu tamanho e, geralmente são fabricados em aço inoxidável, para não reduzir o efeito de corrosão metálica.

O reator em batelada possui um agitador com lâminas impelidoras acopladas ao eixo central e a maioria desses reatores utiliza chicanas (“baffles”), para quebrar o fluxo causado pelo agitador, e aumentar a mistura do sistema, conforme pode ser visto na Figura 2.5.



**FIGURA 2.5** – Esquema de reator de batelada. Fonte: adaptado de Gonçalves (2015).

Existem diferentes tipos de reator batelada, tais como: a) o reator batelada encamisado (camisa externa simples), onde quando em grandes dimensões, esse sistema

de aquecimento pode demorar muito tempo para ajustar a temperatura, de forma que a transferência de calor não é ideal; b) o reator batelada com camisa externa, construído soldando-se uma metade de tubo na parede externa do reator, permitindo uma transferência de calor melhor que o reator encamisado e aquecimento/resfriamento mais uniforme.

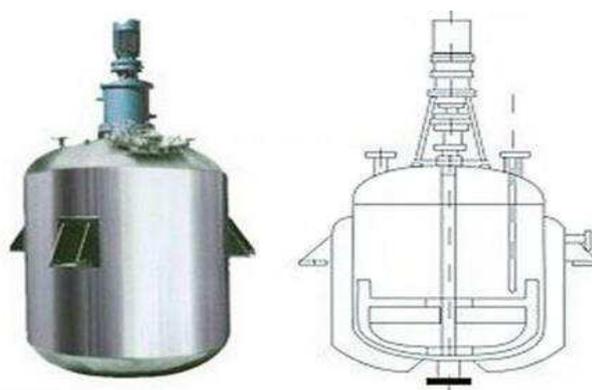
O reator em batelada encamisado com fluxo constante é um tipo de reator relativamente recente, possuindo uma série de camisas e uma válvula para regular a área encamisada, variando a área de transferência de calor. Isto possibilita regular a temperatura do processo, sem precisar alterar a temperatura na camisa. Apresenta um tempo muito rápido de resposta ao controle de temperatura e permite medir sensivelmente o calor transferido ao sistema, favorecendo o monitoramento da taxa de reação, controle de cristalização, etc.

Um reator batelada não admite entrada nem saída de reagentes ou produtos durante o processamento da reação. Todos os reagentes são introduzidos no reator de uma só vez. Em seguida são misturados e reagem entre si. Após algum tempo, os produtos obtidos também são descarregados de uma só vez. Nesse tipo de reator, as variáveis como temperatura e concentração não variam com a posição dentro do reator, mas variam com o tempo. É alimentado através de aberturas no topo e usado para operação em pequena escala, para teste de novos processos que ainda não foram completamente desenvolvidos, para a fabricação de produtos caros e para processos que são difíceis de converter em operações contínuas. Esse tipo de reator permite que altas conversões possam ser obtidas, deixando o reagente no reator por longos períodos de tempo. Quando a capacidade de conversão é baixa, o processo em batelada tem menor investimento de capital do que o processo contínuo, sendo preferíveis quando se está testando um novo produto. Existe uma flexibilidade de operação no mesmo reator, podendo-se obter produtos diferentes (Gonçalves, 2015).

Segundo Schmal (2011), no reator em batelada há uma certa dificuldade na produção em grande escala. Isto está associado a alto custo de mão-de-obra por batelada, por causa do tempo perdido durante a alimentação, esvaziamento e limpeza (o chamado “tempo morto”), que pode até inviabilizar o processo. A qualidade do produto é mais variável do que aquele obtido com um reator de operação contínua.

### 2.3.3 - Reator tanque agitado contínuo ou reator de mistura completa

O reator de tanque agitado (Figura 2.6) é equipado com um agitador, enquanto o efluente do reator é removido. O agitador mistura os reagentes assegurando uma homogeneização do sistema reativo. Nesse tipo de reator, quando em regime estacionário, a taxa mássica de alimentação dos reagentes é igual à taxa mássica dos efluentes. Assume-se a hipótese de que a mistura no interior do reator é perfeita, ou seja, não possui variações espaciais na concentração, temperatura ou velocidade de reação através do tanque. Temperatura e concentração em qualquer ponto do reator são as mesmas que no ponto de saída. Normalmente, por questões econômicas, utilizam-se reatores em série, a fim de proporcionar uma alta conversão os quais em geral são de tamanhos diferentes.



**FIGURA 2.6** – Esquema de reator de tanque agitado de alta pressão. Fonte: Jheten (2018).

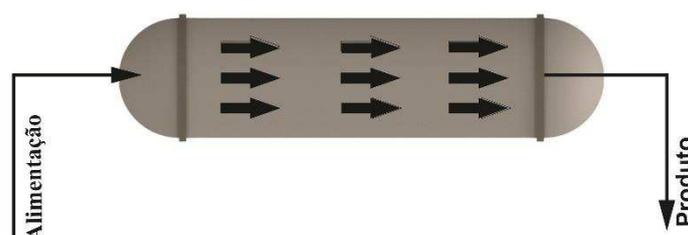
O reator de tanque agitado tem algumas características tais como escoamento contínuo e sem acúmulo de reagente ou produtos, e é operado com composição uniforme dentro do reator (composição de saída igual à composição do interior do reator) e a sua taxa de reação é a mesma em todo o reator, inclusive na saída. A principal utilização do reator de tanque agitado é quando se necessita de agitação intensa, especialmente em reações de fase líquida.

Quase que invariavelmente esses reatores são preferíveis aos reatores de batelada, quando a capacidade de processamento requerida é grande. Embora o investimento do capital necessário seja maior, os custos operacionais por unidade do produto são menores

para operação contínua do que em batelada. Esse reator pode ser usado tanto isoladamente quanto combinado em série ou bateria, sendo relativamente fácil manter um bom controle de temperatura de qualidade dos produtos devido ao controle automático do processo. A desvantagem desse tipo de reator está apenas na conversão do reagente por unidade de volume que é a menor dentre os reatores com escoamento contínuo.

### 2.3.4 - Reator tubular de leito fixo ou reator de fluxo pistonado de leito fixo

O reator tubular, mostrado na Figura 2.7, é um tubo sem agitação no qual todas as partículas escoam com a mesma velocidade na direção do fluxo. Consiste em um tubo cilíndrico (ou feixe de tubos) no qual um ou mais reagentes fluidos são bombeados e a reação química ocorre à medida que os reagentes escoam através desse tubo. A taxa de reação química varia ao longo do tubo, criando um gradiente de concentração na direção axial do reator. A hipótese associada a este tipo de reator é que o escoamento do fluido é ordenado (fluxo pistonado), não havendo mistura ou sobreposição de nenhum elemento de volume no seu interior (“back-mixing”).



**FIGURA 2.7** – Esquema de reator tubular.

O escoamento de fluidos (líquidos ou gases) através de leitos de partículas (leito fixo) é uma prática muito comum. Em muitas operações industriais a fase fluida escoam através de uma fase sólida particulada (fase sólida estacionária). As colunas empacotadas, como são também chamados estes equipamentos, são usadas para reações com catalisadores, adsorção de um soluto, absorção, leito de filtração, entre outros.

Um dos principais objetivos de um leito de partículas (recheio), conforme Figura 2.8, é promover o contato entre as fases envolvidas no processo (fase fluida gasosa e/ou líquida com a fase estacionária/partículas ou entre diferentes fases fluidas). O material de empacotamento pode ser: partículas irregulares, cilindros, esferas, e vários outros materiais disponíveis para comercialização. Para fins de praticidade, este trabalho considerou a geometria mais simples que é a esférica.



**FIGURA 2.8** – Esquema de leito fixo ou coluna de recheio.

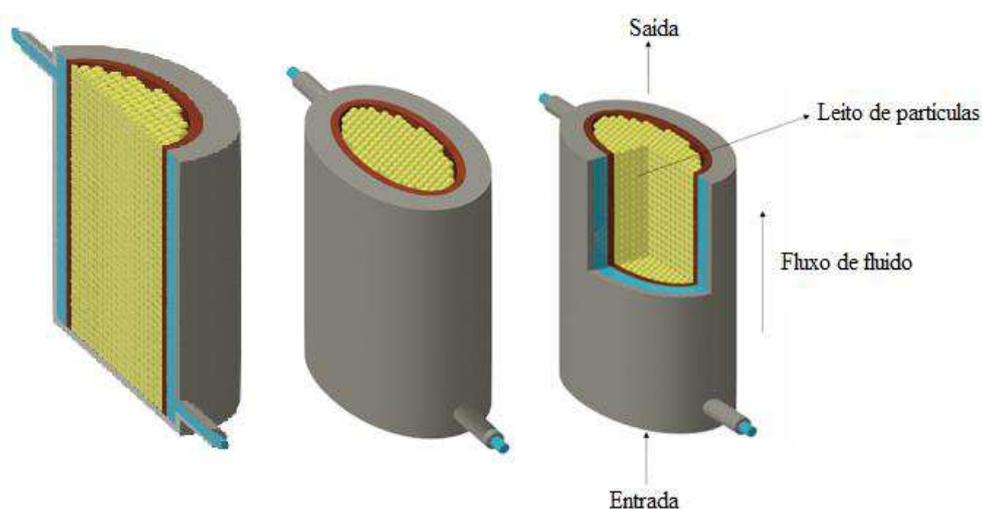
As características específicas de cada tipo de recheio, tais como porosidade, diâmetro nominal e área superficial, podem ser encontrados tabelados na literatura em Foust et. al., (1982) e McCabe et. al., (1985), por exemplo.

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 Bichoff, 1990).

Nos reatores tubulares de leito fixo, o meio reacional se encontra em uma fase (líquida ou gasosa) e existe um catalisador na fase sólida. Normalmente, também é

chamado de reator catalítico de leito fixo, onde o catalisador sólido é constituído de inúmeras e pequenas partículas depositadas ao longo do comprimento de um tubo. O reator de leito fixo é o carro chefe da indústria química, agregando alto valor econômico para os materiais por ele produzidos.

A Figura 2.9 ilustra um esquema de um reator de leito fixo com entrada e saída do fluido, o empacotamento de partículas no leito do reator e a direção do escoamento do fluido no leito.



**FIGURA 2.9** - Esquema de reator cilíndrico-elíptico de leito fixo.

Reatores de leito fixo podem ter uma escala ampliada (*scale-up*) de várias maneiras, salientando que a teoria da similaridade é pouco usada nesses casos. Portanto, costuma-se proceder da escala laboratorial à escala comercial gradativamente, passando pelo menos por duas escalas intermediárias: a unidade piloto e a unidade de demonstração. Mesmo com o emprego de grandes pilotos é difícil obter exatamente o mesmo comportamento do reator, tornando-se necessário uma análise mais detalhada.

Em função do desenvolvimento acelerado da informática e da disponibilidade de simuladores industriais, não é prudente que se amplie a escala de reatores sem antes desenvolver alguma modelagem por mais simples que se pareça. A modelagem pode variar de fundamental, a qual pode utilizar equações diferenciais mais simples avaliando

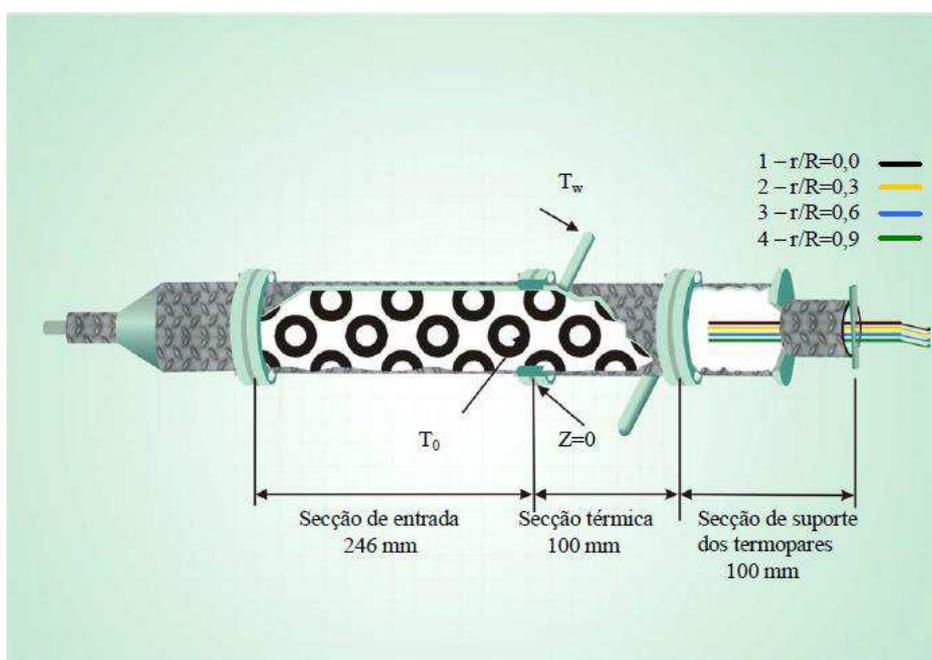
separadamente cada mecanismo que influencia o processo, para posteriormente aditar mais informações dos mesmos mecanismos ao modelo, proporcionando a simulação do reator; ou pode ser semi-empírico, baseando-se assim em experimentação piloto para ajuste dos chamados "parâmetros efetivos do modelo" (Froment e Hofmann, 1987).

Algumas vantagens dos reatores de leito fixo são bastante notórias em relação a outros equipamentos, tais como, baixo custo de construção e manutenção, simplicidade, pouca necessidade de equipamentos auxiliares, devido à flexibilidade da fixação das partículas no leito, o que dispensa gastos com implantação de unidades de separação a jusante, além de ter uma 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 ocorrendo à temperaturas extremamente altas ou elevadas pressões e empregando catalisadores sólidos. As considerações econômicas usualmente impõem que o processo somente se torne rentável quando um reator de leito fixo for empregado (Hill, 1977).

Em se tratando de operação com os reatores catalíticos de leito fixo, alguns problemas que podem surgir estão relacionados com a transferência de calor. Fato que é motivado pela taxa de liberação ou absorção 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. No caso 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 entre o centro do leito e a 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 técnica útil é o uso de diluentes inertes na alimentação, assim como a diluição do catalisador com material sólido inerte, permitindo 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 a Figura 2.10, onde tem-se um reator cilíndrico com as seções de

entrada, a seção térmica e a seção de suporte de termopares. A primeira tem por objetivo desenvolver plenamente o escoamento com empacotamento idêntico ao da segunda seção. A ideia é minimizar os efeitos térmicos de entrada. A segunda seção 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. Os procedimentos citados são estratégias de controle com o intuito de levar o reator a altos níveis de desempenho.



**FIGURA 2.10** - Célula de medidas térmicas. Fonte: Oliveira (2004)

Ainda no tocante ao projeto de reatores de leito fixo, as pesquisas têm alcançado sucesso no desenvolvimento de novos catalisadores, bem como a modificação dos existentes; no estudo dos dados físico-químicos, com destaque para a obtenção dos parâmetros de transporte de calor e a ênfase em dados cinéticos confiáveis; na sistematização do planejamento experimental, a qual oportuniza métodos mais eficazes para a aquisição de dados experimentais e nos métodos mais poderosos de análises de dados. Em relação à modelagem matemática, a possibilidade de solução de modelos cada vez mais robustos tem sido mais alcançável com o desenvolvimento contínuo dos métodos numéricos sendo fortes aliados no tratamento de não linearidades das equações diferenciais constituintes do problema. Portanto, pode-se dizer que os computadores vêm ocupando posição imprescindível com o seu contínuo desenvolvimento. Isto é refletido

pelas maiores capacidades de processamento e os *softwares* de simulação com interface gráfica cada vez mais atraente para apresentação dos resultados.

Desta forma, deve-se conhecer muito bem o reator a ser controlado e, para tanto, necessita-se de um modelo que descreva o seu comportamento da melhor maneira possível, sendo capaz inclusive de prever seu comportamento dinâmico. Por outro lado, as aplicações de um modelo dinâmico normalmente requerem um grande esforço computacional com impacto direto no tempo de processamento. Portanto, além do desenvolvimento de modelos com grande potencial de predição, tem-se que considerar a dificuldade na sua solução, tanto em termos computacionais, quanto na disponibilidade dos parâmetros necessários (Brunell et al., 1949).

A simulação de reatores químicos tem se expandido muito nos últimos anos. Estas simulações têm servido para vários propósitos: 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. Para os três primeiros propósitos, deve-se usar modelos detalhados, muitas vezes heterogêneos. A formulação dinâmica determinística de reatores de leito fixo consiste de equações diferenciais parciais para o balanço de massa, energia, momentum e da continuidade com apropriadas condições iniciais e de contorno.

Reatores catalíticos de leito fixo exibem complicado comportamento estacionário e dinâmico resultante das não-linearidades do sistema e da diferença de capacidades térmicas do sólido e do fluido, as quais, entre outras coisas, levam ao surgimento da resposta inversa e "runaway" da temperatura do reator. Sem um modelo detalhado não é possível fazer predições confiáveis, porque as localizações das regiões com comportamento instável mudam no tempo e espaço, sendo dependentes das perturbações da entrada e das ações de controle (McGreavy e Maciel Filho, 1989).

Modelos confiáveis dependem do conhecimento de como os mecanismos físico-químicos e fatores externos afetam o desempenho geral do sistema. Entretanto, quando aplicações são requeridas, modelos simplificados tem que ser usados. O problema é obter um modelo representativo que mantém as características essenciais do sistema. Levando-se isto em consideração, torna-se necessário admitir algumas hipóteses para os modelos

matemáticos, levando-se em consideração que se uma ou mais dessas hipóteses são inválidas, as predições do modelo tornam-se dependentes da estrutura de referência.

Também deve-se enfatizar que as principais deficiências na modelagem dos processos catalíticos com reatores de leito fixo se originam de cinéticas químicas incompletas ou imprecisas, o que é insuficientemente reconhecido pelos engenheiros químicos. Assim, uma resposta eficaz à necessidade crescente de bem modelar é a exigência de qualidade nos estudos cinéticos, condição principal para o sucesso dos estudos subsequentes, Froment e Hofmann (1987).

Mais informações sobre reatores catalíticos de leito fixo podem ser encontradas nas referências a seguir, que estão apresentadas em ordem cronológica: Aris (1965), Amundson (1966), Himmeblau e Bischoff (1968), Aris e Amundson (1973), Finlayson (1974), Carberry e But (1974), Aris (1975a), Aris (1975b), Carberry (1976), Hill (1977), Lapidus e Amundson (1977), Varma (1981), Levenspiel (1983a), Levenspiel (1983b), Westerterp et al. (1984), Doraiswamy e Sharma (1984), Moura (1984), Maciel Filho (1985), Froment (1986), Fogler (1986), Froment e Hofmann (1987), Villadsen e Michelsen (1987), Nauman (1987), Guirardello (1988), Levenspiel (1989), Maciel Filho (1989), Maciel Filho et al. (1990), Giudici (1990), Azevedo et al. (1990), Froment e Bischoff (1990), Domingues (1992), Maciel Filho (1993), Tresmondi (1995), Azeredo (1996), Vasco de Toledo (1999), Miranda (2017) e Pontes (2018).

#### **2.4. Modelos matemáticos de transferência de calor em reatores**

Como mencionado previamente, os modelos de leito catalítico cilíndrico circular relacionados a transferência de calor são dois: o modelo heterogêneo (fase sólida + fase fluida), também conhecido como modelo de duas fases, e o modelo a uma fase (pseudo-homogêneo). Ambos os modelos, até então são subdivididos em unidimensionais e bidimensionais. Cada modelo pode ainda apresentar variações devido às hipóteses admitidas. Os modelos unidimensionais não consideram gradientes radiais de temperatura ou concentração, agrupando na parede toda a resistência ao transporte de calor. Os bidimensionais consideram a existência de um perfil radial não plano de temperaturas e,

consequentemente de concentrações, o que pressupõe o conhecimento do valor da condutividade térmica radial efetiva, além do coeficiente de película na parede dos tubos (Giordano, 1991). Análises do desempenho de diferentes modelos bidimensionais (pseudo-homogêneos e heterogêneos) mostram que o modelo pseudo-homogêneo é consistente, tendo resolução computacional e programação mais simples que os demais.

Vários pesquisadores têm se preocupado em analisar a equivalência entre os modelos de uma e duas fases, podendo-se citar entre eles, Vortmeyer e Schaefer (1974), Dixon e Cresswell (1979), Vortmeyer e Berninger (1982), Duarte et al. (1985a, 1985b), Nield (2002), Gupta e Nag (2002) e Ismail e Henríquez (2002).

#### **2.4.1 - Modelo heterogêneo ou modelo de duas fases**

O modelo heterogêneo também denominado como modelo contínuo, é basicamente constituído de duas fases contínuas, uma fluida e outra sólida, sendo que o balanço de equações governantes (massa, quantidade de movimento e energia) para cada constituinte é aplicado separadamente.

Nesse modelo a duas fases (sólida + fluida), cada fase tem uma dinâmica própria na transferência de calor, sendo definido um parâmetro para cada fase, e um outro parâmetro que tem a função de acoplar a transferência de calor entre elas. Entretanto, sendo esse modelo fisicamente mais realista, poucos pesquisadores o têm estudado por razões inerentes à própria modelagem, que são: solução consideravelmente mais complicada das equações da energia, dificuldade experimental na determinação do coeficiente de transferência de calor sólido-fluido necessário ao modelo heterogêneo, e a dificuldade na medida pontual da temperatura para cada fase.

Para a descrição do modelo heterogêneo, a equação da energia pode ser vista em três categorias conforme classificado por Wakao e Kaguei (1982), a saber, o modelo contínuo, modelo de dispersão concêntrica e o modelo de Schumann. A seguir, uma breve descrição dessas categorias.

### 2.4.1.1 - Modelo contínuo

O modelo matemático de duas fases, em regime transiente, que envolve simulação numérica para o transporte de calor através de um leito de partículas esféricas, em condições de não equilíbrio térmico local entre a fase fluida e a fase sólida pode ser visto no trabalho desenvolvido por Amiri e Vafai (1993). Considerando as equações da conservação da energia para fase fluida e para fase sólida como um meio contínuo, tem-se que:

a) Fase Fluida

$$\varphi \langle \rho_f \rangle^f c_{pf} \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + \langle \rho_f \rangle^f c_{f(v)} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f = \nabla \cdot [k_{feff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f] + h_{sf} a_{sf} [\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f] \quad (2.8)$$

b) Fase Sólida

$$(1 - \varphi) \rho_s c_{ps} \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \nabla \cdot [k_{seff} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s] + h_{sf} a_{sf} [\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f] \quad (2.9)$$

onde a porosidade assume o seguinte perfil:

$$\varphi = \varphi_\infty \left[ 1 + a \exp\left(\frac{-by}{d_p}\right) \right] \quad (2.10)$$

em que **a** e **b** são constantes obtidas por ajuste aos dados experimentais disponíveis no trabalho de Benanati e Brosilow (1962), por exemplo.

O coeficiente de transferência de calor  $h_{sf}$  para ambas as fases, baseado em uma correlação empírica proposto por Wakao e Kagui (1979, 1982) é dado a seguir:

$$h_{sf} = \frac{k_f}{d_p} \left[ 2 + 1,1Pr^{1.3} \frac{(\rho_f u d_p)^{0.6}}{\mu_f} \right] \quad (2.11)$$

As condutividades térmicas efetivas da fase fluida composta por um componente estagnante e um componente de dispersão são dadas respectivamente por:

$$\frac{(k_{feff})_x}{k_f} = \varphi + 0,5 \left( \frac{\rho_f u d_p}{\mu_f} \right) Pr \quad (2.12a)$$

e

$$\frac{(k_{feff})_y}{k_f} = \varphi + 0,1 \left( \frac{\rho_f u d_p}{\mu_f} \right) Pr \quad (2.12b)$$

onde  $u$  representa a componente do vetor velocidade na direção  $x$  e  $Pr$  representa o número de Prandtl.

A condutividade térmica da fase sólida possui apenas uma componente de estagnação, dada por:

$$k_{seff} = (1 - \varphi)k_s \quad (2.13)$$

E finalmente, os números de Nusselt definidos separadamente para a fase fluida e fase sólida podem ser vistos no trabalho de Amiri e Vafai (1993). Vários outros autores, tais como: Quintard et. al (1997), Alazami e Vafai, (2000) e Nield (2002a) tem usados expressões alternativas para  $h$  e  $a_{sf}$ .

#### 2.4.1.2 - Modelo de dispersão concêntrica

Este modelo utiliza uma equação para a temperatura média do fluido, mas associa esta equação à equação de energia para a condução de calor em uma única partícula como

pode ser visto em Amhalhel e Furmański (1997). A partícula é geralmente tratada como esférica com condição de contorno de fluxo uniforme ao longo da superfície, conforme pode ser visto em Wakao e Kaguei (1982). A equação da conservação da energia para este modelo é escrita como sendo:

a) Fase Fluida

$$\frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle^f \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f = \alpha_{ax} \nabla^2 \langle T_f \rangle^f + \frac{h_{sf} a_{sf}}{\varphi (\rho c_p)_f} [\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f] \quad (2.14)$$

b) Fase Sólida

$$\frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \alpha_{ax} \left( \frac{\partial^2 \langle T_s \rangle^s}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial r} \right) \quad (2.15)$$

com a seguinte condição de acoplamento entre as equações:

$$K_s \left( \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial r} \right) = h_{sf} [\langle T_s \rangle^s - \langle T_f \rangle^f] \quad (2.16)$$

em que a difusividade térmica axial do fluido  $\alpha_{ax}$  inclui um termo de dispersão térmica dependente da velocidade do fluxo. Para um meio poroso composto de partículas esféricas idênticas, a difusividade térmica axial  $\alpha_{ax}$  para esse modelo é dada como sendo:

$$\alpha_{ax} = (0,6 - 0,8)\alpha_f + 0,5d_p \langle \mathbf{v} \rangle \quad (2.17)$$

onde  $\alpha_f$  é a difusividade térmica da fase fluida. A equação (2.17) também pode ser escrita (Wakao e Kaguei, 1982):

$$\alpha_{ax} = \frac{K_m}{\varphi(\rho c_p)_f} + 0,5d_p \langle \mathbf{v} \rangle \quad (2.18)$$

onde  $K_m$  é a condutividade térmica total,  $\varphi$  a porosidade,  $\rho$  a densidade,  $c_p$  o calor específico,  $d_p$  o diâmetro da partícula e  $\langle \mathbf{v} \rangle$  a velocidade.

#### 2.4.1.3 - Modelo de Shumann

Faz parte ainda dessas categorias, o modelo SHUMANN, em que a condução de calor em ambas as fases é negligenciada e a equação da energia pode ser escrita como segue (Amhahel e Furmański, 1997):

a) Fase Fluida

$$\varphi(\rho c_p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} + \varphi(\rho c_p)_f \mathbf{v} \cdot \nabla T_f = h_{sf} a_{sf} (T_s - T_f) \quad (2.19)$$

b) Fase Sólida

$$(1 - \varphi)(\rho c)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = h_{sf} a_{sf} (T_s - T_f) \quad (2.20)$$

Dos três modelos citados, o modelo Schumann é o mais simples de analisar, já que a condução de calor é negligenciada nas fases fluida e sólida. Além disso, o modelo de fase sólida contínua é muito mais fácil de analisar que o modelo de dispersão concêntrica, devido ao fato que, tanto a temperatura na fase fluido, quanto na fase sólida são função da posição do leito e do tempo. Sendo assim o modelo concêntrico é mais complexo, pois variáveis adicionais associadas às partículas individuais são incluídas nele.

#### 2.4.1.4 - Modelo heterogêneo unidimensional

Um modelo matemático heterogêneo unidimensional em regime transiente usado na simulação de um reator de leito gotejante aplicado à hidrodessulfurização - HDS (do inglês hydrodesulfurization) de petróleo foi desenvolvido por Souza e Santana (2016). As equações usadas para o balanço de energia do reator, operando em condição não isotérmica e transiente na solução do problema, foram as seguintes:

a) Fase Fluida

$$\varphi_f \rho_f c_{pf} \frac{\partial T_f}{\partial t} = u_f \rho_f c_{pf} \frac{\partial T_f}{\partial z} - h_{fs} a_f (T_f - T_s) \quad (2.21)$$

b) Fase Sólida

$$\varphi_s \rho_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} = h_{fs} a_s (T_f - T_s) + \rho_B (-\Delta H_{R,HDS}) \eta_{HDS} r'_{HDS} \quad (2.22)$$

onde o termo  $\eta_{HDS}$  representa o fator de efetividade do catalisador para o processo HDS, o termo  $\Delta H_{R,HDS}$  representa o calor global do processo HDS, e os termos f e s representam a fase fluida e a fase sólida, respectivamente. A taxa de reação por unidade de massa de catalisador  $r'_{HDS}$ , é dada por:

$$r'_{HDS} = \frac{k_{HDS} C_{enx}^{sn} C_{H2}^{sm}}{(1 + k_{H2S} C_{H2s}^s)^2} \quad (2.23)$$

As ordens de reação para enxofre e hidrogênio, n e m, respectivamente, são ajustáveis de acordo com a alimentação e podem variar entre 1,5 e 2,5 para o enxofre e entre 0,5 e 1,0 para o hidrogênio (Ancheyta, 2011).

A constante de taxa cinética e a equação apresentada não contempla a constante de equilíbrio de adsorção. De acordo com a equação de Arrhenius, tem-se:

$$k_{H_2S} = k_0 \exp\left(\frac{\Delta H_{ads}}{RT}\right) \quad (2.24)$$

onde  $K_0$  é o fator pré-exponencial em  $m^3 \text{ mol}^{-1}$  e  $\Delta H_{ads}$  é a entalpia de adsorção  $J.mol^{-1}$ . Portanto, o balanço de energia apresentado corresponde a um sistema de equações diferenciais parciais (EDP), que foi resolvido usando o método das linhas.

Esse modelo leva em conta a transferência de calor através das fases fluida e sólida. De acordo com os autores, as respostas desse modelo foram comparadas com o modelo de Wash e Froment (1970), e uma concordância em condições moderadas foi obtida. Pode-se citar ainda o modelo unidimensional aplicado em reatores de leito fixo e não adiabáticos reportado por Duarte et.al., (1983).

#### 2.4.1.5 - Modelo heterogêneo bidimensional

O modelo matemático heterogêneo bidimensional aplicado a um reator catalítico em leito fixo, não-isotérmico, não-adiabático e com resfriamento contracorrente foi usado na dissertação de Fujiwara (1989). Esse modelo foi usado no estudo da reação de oxidação de etanol acetaldeído sobre o catalisador poroso de óxido de ferro-molibdênio, em que se poderia estender para outras reações químicas. Na pesquisa foi apresentada, entre outras coisas, as correlações para estimar os parâmetros de transferência de calor e massa na interfase, intrapartícula e das propriedades físicas dos reagentes e produtos. Esse modelo supõe gradientes interfase e intrapartícula, ou seja, leva em conta as limitações da transferência de calor sobre a taxa global de reação, e considera, separadamente, a transferência de calor por condução efetiva na direção radial nas fases sólida e fluida do leito fixo do reator.

Para o balanço da energia na fase fluida, tem-se

$$u_p \rho_f C_{pf} \frac{\partial T_f}{\partial z} = k_{feffr} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + h_f a_v (T_s - T) + h_f a_{vi} (T_i^s - T) \quad (2.25)$$

e para o balanço da energia na fase sólida foi usada a seguinte equação

$$h_f a_v (T_i^s - T) = k_{seffr} \left( \frac{\partial^2 T_s}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + (-\Delta H_r) \eta r_v - h_p a_v (T_s^s - T_i^s) \quad (2.26)$$

sendo a equação de acoplamento entre as fases dada como segue:

$$h_f a_{vi} (T_i^s - T) = h_p a_v (T_s^s - T_i^s) \quad (2.27)$$

onde  $a_v$  é a área superficial da partícula de catalisador por unidade de volume do reator,  $a_{vi}$  é a área superficial da partícula de inerte por unidade de volume do reator,  $h_f$  é o coeficiente de transferência de calor interfase,  $h_p$  é o coeficiente de transferência de calor na película adjacente entre as partículas,  $T_i^s$  é a temperatura na superfície da partícula de inerte,  $T_s$  é a temperatura no interior da partícula do catalisador,  $T_s^s$  é a temperatura na superfície da partícula de catalisador,  $k_{feffr}$  é a condutividade térmica efetiva radial na fase fluida do leito e  $k_{seffr}$  é a condutividade térmica efetiva radial na fase sólida do leito.

Mais detalhes do modelo de duas fases bidimensional podem ser vistos no trabalho de Wash e Froment (1970). Estes autores abordaram o modelo heterogêneo para transferência de calor em reatores catalíticos de leito fixo para caso bidimensional, em que foi feita a distinção entre as temperaturas do fluido e da partícula, onde os perfis de transferência de calor radial e axial foram preditos. Eles afirmaram que a dificuldade encontrada com o modelo heterogêneo bidimensional foi apenas na transferência de calor em ambas as fases.

#### 2.4.2 - Modelo pseudo-homogêneo ou modelo de única fase

Os modelos pseudo-homogêneos são os mais “fáceis” de serem utilizados na modelagem de reatores catalíticos de leito fixo. A principal suposição feita é que o reator pode ser descrito com uma mistura fluindo como se fosse apenas uma única fase. De fato, duas fases estão presentes: a fase sólida do catalisador e a fase gasosa. Em outras palavras, esse tipo de modelo assume que toda a superfície da partícula do catalisador está exposta totalmente as condições do meio gasoso podendo assim ser completamente descrito por suas variáveis (temperatura, concentração e pressão). Nesse modelo de uma única fase, a natureza heterogênea do leito é considerada implicitamente através dos parâmetros efetivos. Vários pesquisadores têm se preocupado em analisar a equivalência entre os modelos a uma e a duas fases, podendo-se citar entre eles, Vortmeyer e Schaefer (1974), Dixon e Cresswell (1979), Vortmeyer e Berninger (1982), Duarte et al. (1985a, 1985b), Nield (2002), Gupta e Nag (2002), Ismail e Henríquez (2002), Wang et al. (2003), Oliveira (2004), Silva Filho, (2013) e Silva (2018).

O modelo pseudo-homogêneo mais simples é o modelo unidimensional *plug flow*, no qual se assume que o fluido tem um escoamento pistonado através do tubo do reator e uma taxa de reação, que depende da concentração local das espécies e da temperatura, a qual é conhecida como a taxa de geração ou consumo das espécies presentes por unidade de volume do reator. No estado estacionário, as equações do modelo são formadas por um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDO's) de primeira ordem do tipo valor inicial. Essas equações são geralmente não-lineares, mas podem ser facilmente e eficientemente integradas numericamente para obter perfis de concentração e temperatura em função da posição axial.

O modelo *plug flow* pode ser aprimorado através da inclusão da dispersão axial e/ou radial, para ambas as transferências de calor e massa. A mistura na direção axial, que ocorre devido à turbulência e a presença do leito catalítico, é considerada através do uso do termo de dispersão “efetiva” sobre o transporte global realizado pelo escoamento *plug flow*. O fluxo resultante deste mecanismo pode ser descrito analogamente pelas leis de Fick para transferência de massa e de Fourier para transferência de calor. Na maioria das vezes, a dispersão axial de massa não é significativa se a razão entre o comprimento do tubo e o diâmetro da partícula de catalisador ( $L/d_p$ ) for maior que 50, enquanto que a de calor se torna desprezível se esta mesma razão for igual a 300, conforme pode ser visto

em Varma (1981). Os modelos com dispersão axial são descritos por conjuntos de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem do tipo valores de contorno.

A dispersão radial de calor e massa em reatores catalíticos de leito fixo é normalmente expressa pelo número de Peclet radial para o transporte de calor e massa. Para reatores não-adiabáticos, o coeficiente de transferência de calor na parede entre a mistura de reação e o meio de resfriamento deve ser especificado. Quando a dispersão radial é incluída, as equações do modelo, inclusive para o estado estacionário, são formadas por equações diferenciais parciais (EDPs) nas coordenadas espaciais axial e radial. De acordo Varma (1981), esses modelos de equações bidimensionais podem ser numericamente resolvidos pelo método das diferenças finitas ou de forma mais eficaz pelo método da colocação ortogonal. Contudo outros métodos numéricos, como por exemplo, volumes finitos, podem ser usados.

De acordo com Nield e Bejan (1992), pode-se escrever o modelo pseudo-homogêneo ou modelo matemático de uma única fase da seguinte maneira:

$$(\rho c)_m \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho c)_f \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (K_m \nabla T) + q_m \quad (2.28)$$

onde

$$(\rho c)_m = (1 - \varphi)(\rho c)_s + \varphi(\rho c_p)_f \quad (2.29)$$

$$K_m = (1 - \varphi)K_s + \varphi K_f \quad (2.30)$$

$$q_m = (1 - \varphi)q_s + \varphi q_f \quad (2.31)$$

são respectivamente, a capacidade calorífica total por unidade de volume, condutividade térmica total e calor total produzido por unidade de volume no meio poroso.

### 2.4.2.1 - Modelo pseudo-homogêneo unidimensional

Um dos pioneiros no uso do modelo pseudo-homogêneo unidimensional para descrever o transporte de calor num leito compactado de parede aquecida, com baixa razão diâmetro do tubo para diâmetro de partícula foi o Colburn (1931). Seu trabalho foi estendido posteriormente por Leva (1947) e Leva e Grummer (1948). Nesse modelo, a temperatura do meio pseudo-homogêneo é considerada constante ao longo da posição radial, sendo a troca térmica com a parede caracterizada por intermédio de um coeficiente global de transferência de calor ( $U$ ).

Para o modelo unidimensional, um balanço térmico num elemento de volume do leito, assumindo um perfil de velocidade tipo pistonado, conduz à seguinte equação diferencial ordinária:

$$Gc_p D_t \frac{dT}{dz} = 4U(T_w - T) \quad (2.32)$$

com as condições de contorno  $T = T_o$ , em  $z = 0$  e  $T = T_U$  em  $z = L$ , onde  $T_w$  é constante para todo  $z$ . A integração da Equação (2.32) sugere que o logaritmo natural de  $T^*$  depende linearmente da profundidade do leito  $z$ , com o coeficiente angular dado por  $-4U/D_t Gc_p$ , onde,  $G = \rho_f u_z \varepsilon$  e  $T^* = (T - T_o)/(T_w - T_U)$ . A temperatura média na saída do leito compactado  $T_U$  é obtida do perfil radial medido na saída pela seguinte equação:

$$T_U = 2 \int_0^R \frac{rT(r)dr}{R^2} \quad (2.33)$$

Dixon (1996) usando o modelo de uma única fase unidimensional obteve valores para o coeficiente global de transferência de calor  $U$ , com erros inferiores a 3,8% em relação aos seus valores assintóticos, para toda a faixa de número de Biot. Segundo esse pesquisador, o uso do modelo pseudo-homogêneo unidimensional junto com uma equação melhorada para a estimativa do coeficiente global de transferência de calor  $U$ ,

fornece previsões de temperatura no centro do leito com boa concordância em relação aos valores obtidos pelo modelo pseudo-homogêneo bidimensional.

Prasad e Das (2002) examinaram o comportamento da dispersão axial de calor e do fluxo de fluido num leito fixo, usando o modelo pseudo-homogêneo unidimensional contendo o termo de dispersão de calor. O modelo analítico apresentado usa a técnica da transformada de Laplace para obter a solução da equação da energia simplificada. A temperatura do fluido calculada na saída é comparada com valores experimentais e os dois parâmetros do modelo, número de Peclet dispersivo ( $Pe$ ) e a velocidade de propagação do fluido no meio ( $c^*$ ), são estimados.

Pelo fato de o modelo de única fase unidimensional prever somente variações axiais de temperatura, sua aplicação fica restrita a leito de pequenos diâmetros, onde se cumpre a hipótese de variações radiais de temperatura desprezíveis.

#### 2.4.2.2 - Modelo pseudo-homogêneo bidimensional

Avanços significativos no estudo dos fenômenos de transferência de calor em leito fixo foram alcançados quando foi utilizado o modelo bidimensional, o qual inclui a ocorrência de perfis radiais e axiais de temperatura no meio pseudo-homogêneo, junto de uma série de simplificações. Neste caso, um balanço térmico num elemento de volume representativo do sistema conduz a:

$$G_{c_p} \frac{\partial T}{\partial z} = K_r \left( \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + K_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.34)$$

Normalmente, visando-se simplificar ainda mais o modelo, diminuir o esforço e o tempo computacional, bem como determinar diretamente a condutividade térmica efetiva a partir de dados experimentais, o termo de dispersão axial  $k_z (\partial^2 T / \partial z^2)$ , presente na Equação (2.34), é desprezado como pode ser visto em Wash e Froment (1972), e Li e Finlayson (1977). Neste caso, a Equação (2.34) reduz-se a:

$$G_{CP} \frac{\partial T}{\partial z} = K_r \left( \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) \quad (2.35)$$

Vários trabalhos como os de Plautz e Johnstone (1955), Calderbank e Pogorski (1957), Yagi e Wakao (1959), Wash e Froment (1972), Li e Finlayson (1977), Thoméo et al. (1989) e Thoméo (1990) mostram que o ajuste entre as temperaturas experimentais e previstas pelo modelo a um parâmetro (aquele em que apenas a condutividade térmica é estimada) não é considerado bom, principalmente na região próxima à parede, na qual se supõe que ocorra uma resistência térmica de contato, provocada pela presença de uma película de fluido estagnado, efeito este não contemplado na formulação desse modelo.

Resultados obtidos por Colburn (1931) mostram que a transferência de calor num leito compactado depende do efeito de parede, e que tal efeito está associado diretamente com a razão entre o diâmetro do leito e o diâmetro da partícula. Devido à falta de uniformidade no empacotamento próximo à parede do tubo, existe menor resistência ao fluxo de gás e, conseqüentemente, a velocidade, nessa região, será maior do que no centro do empacotamento. Portanto, quando a razão  $D/d_p$  diminui, uma maior proporção de gás fluirá próximo da parede com um concomitante aumento na taxa de transferência de calor.

Visando suprir as deficiências apresentadas no modelo bidimensional a um parâmetro, Coberly e Marshall (1951) propõem um modelo a dois parâmetros para equacionar o problema da resistência térmica de contato que, segundo eles, é ocasionada pelo escoamento preferencial de fluido na região do leito, onde a porosidade é mais elevada. Embora este modelo proporcione um melhor ajuste entre as temperaturas previstas e experimentais, resultados obtidos por Thoméo (1990), Silveira (1991) e Thoméo e Freire (2000) mostraram que a inclusão de um segundo parâmetro, o coeficiente convectivo de transferência de calor na parede do sistema ( $h_w$ ), modifica significativamente o valor da condutividade térmica radial ( $k_r$ ), na região próxima à parede.

### **2.4.3 - Estimativa da condutividade térmica de um meio poroso**

Com a finalidade de explicar os mecanismos de transporte de calor em meios porosos, a grande maioria dos pesquisadores estabelece uma analogia entre o sistema térmico e um sistema elétrico segundo Freire (1979).

Yagi e Kunii (1957) afirmaram que tratando o meio poroso como um sistema constituído de partículas sólidas (fase descontínua) e de uma fase fluida (fase contínua), os seguintes mecanismos de transferência de calor podem ser reconhecidos:

#### **2.4.3.1 - Condução de calor**

Neste tipo de mecanismo podem ocorrer:

Condução através das partículas sólidas, condução através do fluido nos poros, condução através do fluido estagnado na região do contato entre as partículas e a condução pela região do contato entre as partículas.

#### **2.4.3.2 - Convecção de calor**

Pode ser:

Convecção forçada do tipo transferência de calor sólido-fluido e dispersão térmica na fase fluida.

#### **2.4.3.3 - Radiação de calor**

Este mecanismo pode se dá por:

Radiação entre as superfícies das partículas e absorção de calor por radiação pelo fluido.

Depois de analisar-se os mecanismos de transporte de calor, espera-se que a condutividade térmica efetiva de um meio poroso seja uma função de muitos outros

parâmetros, tais como, porosidade do meio, pontos de contato entre as partículas, as propriedades físicas do fluido e do sólido (condutividade térmica, viscosidade, forma e orientação das partículas), velocidade do fluido, entre outras. Segundo Nield e Bejan (1992), a condutividade térmica global de um meio poroso depende também da natureza complexa da geometria do meio.

Como mencionado em termos de energia, a condutividade térmica total em um meio poroso depende de uma situação complexa da geometria do meio poroso. Se a condução de calor nas fases sólida e fluida ocorrer em paralelo, então a condutividade total  $K_A$  é a média aritmética ponderada das condutividades  $K_s$  e  $K_f$  como segue (Nield e Bejan, 1992):

$$K_A = (1 - \varphi)K_s + \varphi K_f \quad (2.36)$$

Na equação (2.36),  $\varphi$  é a porosidade do meio,  $K_s$ , é a condutividade térmica do sólido e  $K_f$  a condutividade térmica do fluido.

Por outro lado, se a estrutura e orientação do meio poroso é tal que a condução de calor ocorra em série, com todo o fluxo de calor passando através de ambas as fases sólida e fluida, Nield e Bejan (1992) propõem que a condutividade térmica do meio seja a média harmônica ponderada entre as condutividades térmicas do sólido e do fluido, como dada a seguir:

$$\frac{1}{K_H} = \frac{1 - \varphi}{K_s} + \frac{\varphi}{K_f} \quad (2.37)$$

Em geral, ambas as equações fornecerão limites superior e inferior, respectivamente, da real condutividade do meio,  $K_m$ . Sempre se tem valores  $K_A \geq K_H$ , com a igualdade se e apenas se  $K_s = K_f$ . Para fins práticos, uma leitura estimada criteriosa e fácil para  $K_m$  é fornecida pela correlação proposta por Woodside e Messmer (1961), que considera a condutividade do meio como sendo a média geométrica ponderada entre as condutividades térmicas das fases sólida e fluida para representar o grau de desordem de um meio poroso real. A equação proposta por estes autores é dada a seguir:

$$K_G = K_s^{1-\varphi} K_f^\varphi \quad (2.38)$$

A equação (2.38) define uma boa estimativa para a condutividade térmica do meio, somente quando  $K_s$  e  $K_f$  forem muito diferentes um do outro de acordo com Nield (1991b).

Gorring e Churchill (1961), citado por Kulkarni e Doraswamy (1980) apresentam uma correlação de estimativa da condutividade térmica do meio, num modelo que admite que as contribuições condutivas de calor ocorram de uma maneira combinada série-paralelo. Neste modelo, eles assumiram que as partículas estavam envolvidas por um filme de fluido estagnado e que a transferência de calor (na direção do fluxo térmico) ocorre: (a) através do fluido estacionário nos espaços vazios do leito compactado e (b) através da fase sólida. Eles propuseram a seguinte expressão para a condutividade térmica do meio:

$$K_0 = \left[ \varphi + (1 - \varphi) \left( \frac{\beta''}{\delta + \frac{2K_f}{3K_s}} \right) \right] K_f \quad (2.39)$$

em que  $\beta''$  representa a razão da distância efetiva entre as partículas e o diâmetro da partícula sendo igual a unidade para empacotamento solto e 0,895 para empacotamento denso, e o parâmetro  $\delta$  é a medida da espessura da camada do fluido estagnado, sendo obtida através de uma carta gráfica apresentada pelos autores, sendo função da relação  $K_f/K_s$ .

Mais expressões de correlações para a condutividade térmica em um leito compactado têm sido propostas. Experimentos realizados por Prasad et. al (1989b) mostraram que essas fórmulas forneciam razoavelmente bons resultados, provando que  $K_f$  não foi significativamente maior que  $K_s$ . As considerações que  $K_f \geq K_s$  não foram boas, a condutividade observada é maior que a pretendida. Essas discrepâncias podem ser verdadeiras para variação de porosidade perto das paredes segundo Nield (1991b). Alguns modelos para a condutividade térmica estagnada foram reportados por Hsu et. al. (1994, 1995), Cheng et. al. (1999) e Cheng e Hsu (1998, 1999). Em particular, Cheng et. al. (1999) e também Hsu (2000) fornecem compreensivas revisões sobre o assunto.

## **CAPÍTULO 3**

### **MODELAGEM MATEMÁTICA**

Várias pesquisas têm se reportado a transferência de calor em leitos fixos ao longo dos anos, devido a sua relevância nas operações unitárias da Engenharia Química, assim como sua grande aplicação nos processos industriais. Neste trabalho aborda-se a transferência de calor em reatores de leito fixo usando o modelo de duas fases (sólida+fluida).

A seguir será abordada a metodologia para a obtenção da solução numérica das equações que representam 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 foram feitas manipulações algébricas a fim de convertê-la ao sistema de coordenadas cilíndrico-elíptico. Em detalhes são descritos todos os passos, revelando todas as métricas necessárias para a conversão de um sistema cartesiano para o outro.

#### **3.1 - A equação da energia no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas**

##### **3.1.1 – A equação da energia na sua forma geral**

As equações da energia em termos de temperatura para as fases fluida e sólida no sistema de coordenadas cartesianas são, respectivamente (Nield e Bejan, 1992):

a) Fase Fluida

$$\varphi(\rho c_p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} + (\rho c_p)_f \mathbf{v} \cdot \nabla T_f = \frac{DP}{Dt} + \varphi \nabla \cdot (K_f \nabla T_f) + \mu \psi + \varphi q_f + h(T_s - T_f) \quad (3.1)$$

b) Fase Sólida

$$(1 - \varphi)(\rho c)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1 - \varphi) \nabla \cdot (K_s \nabla T_s) + (1 - \varphi) q_s + h(T_f - T_s) \quad (3.2)$$

onde **f** e **s** referem-se as fases fluída e sólida, respectivamente, **T** é a temperatura, **t** é o tempo, **v** é a velocidade média do fluido,  $\varphi$  é a porosidade do meio,  $\rho$  é a massa específica,  $c_p$  é o calor específico a pressão constante, **K** é a condutividade térmica,  $\mu\psi$  é o termo de dissipação viscosa,  $DP/Dt$  é a derivada substantiva da pressão, **q** é a geração de energia interna por unidade de volume, e **h** é o coeficiente de transferência de calor por convecção entre as fases.

O primeiro termo da Equação (3.1) representa o fluxo transiente da energia, o segundo termo, o transporte convectivo de calor nas três direções, sendo que foi feito o uso da relação DUPUIT-FORCHHEIMER  $\mathbf{v} = \varphi \mathbf{V}$ , onde **V** é a velocidade real do fluido, o terceiro termo representa a derivada substantiva da pressão, o quarto termo o transporte de calor por condução, o quinto termo é a dissipação viscosa, o sexto termo representa a geração de energia interna e o sétimo termo representa a troca de calor por convecção entre as fases fluida e sólida. O primeiro termo da Equação (3.2) representa o fluxo transiente da energia e o segundo termo representa o fluxo de calor condutivo através do sólido. Já o terceiro termo representa a geração de calor no sólido, e o quarto termo representa a troca de calor por convecção entre as fases fluida e sólida.

Alguns valores de **h** podem ser encontrados de maneira indireta em Polyaev et. al (1996). Para um leito poroso de partículas de acordo com Dixon e Cresswell (1979), a seguinte equação é válida:

$$h = a_{sf}h_{sf} \quad (3.3)$$

onde  $h_{sf}$  é o coeficiente de transporte de calor para ambas as fases e  $a_{sf}$  é a área da superfície específica. Para partículas esféricas, a seguinte equação pode ser usada:

$$a_{sf} = 6(1 - \varphi)/d_p \quad (3.4)$$

e

$$\frac{1}{h_{sf}} = \frac{d_p}{Nu_{sf} K_f} + \frac{d_p}{\epsilon K_s} \quad (3.5)$$

sendo  $d_p$  o diâmetro de partículas e  $\epsilon$  a esfericidade das partículas do leito poroso, representado por:

$$\epsilon = \left( \frac{a^2}{b^2} \right)^{1/3} \quad (3.6)$$

sendo  $a$  e  $b$  números reais positivos que determinam as dimensões e a forma da partícula.

Para o número de Reynolds (baseado em  $d_p$ )  $Re_p > 100$ , o número de Nusselt  $Nu_{sf}$  é dado pela seguinte expressão (Handley e Heggs, 1968):

$$Nu_{sf} = (0,225/\varphi) Pr^{1/3} Re_p^{1/3} \quad (3.7)$$

Uma outra correlação para o número de Nusselt foi proposta por Wakao e Kaguei (1982). Esta equação tem a forma:

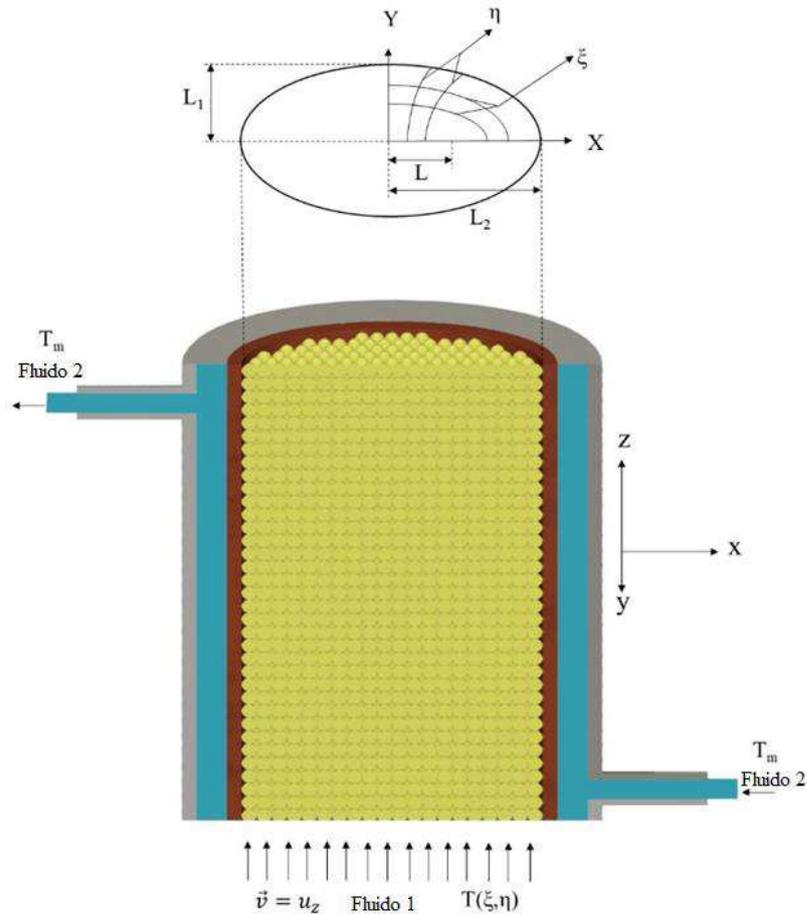
$$\text{Nu}_{\text{sf}} = 2,0 + 1,1 \text{Pr}^{\frac{1}{3}} \text{Re}_p^{0,6} \quad (3.8)$$

Para baixos valores de  $\text{Re}_p$ , as estimativas de  $\text{Nu}_{\text{sf}}$  variam entre 0,1 e 12,4, sendo esses valores baseados na literatura (Miyachi et. al., 1976; Wakao et. al., 1976). Vários outros autores, tais como: Grangeot et.al., (1994), Quintard et. al, (1997), Alazami e Vafai (2000), Quintard e Whitaken, (2000), Nield (2002a) e Saito e Lemos, (2005) tem reportados expressões alternativas para determinação de  $h_{\text{sf}}$  e  $a_{\text{sf}}$ .

### 3.1.2 – A equação da energia na sua forma cilíndrica elíptica

A representação das condições de contorno na maioria dos problemas físicos exige que os valores de uma função (ou de suas derivadas) sejam especificados na forma de curvas ou superfícies (esferas, cilindros, etc.). A escolha de um sistema de coordenadas em particular está condicionada à forma geométrica do sistema em estudo e conduzirá a uma melhor adequação e validade dos resultados obtidos (Lima, 1999).

A geometria usada na maioria dos trabalhos e amplamente estudada (por razões da prática industrial) é o cilindro de seção transversal circular. Oliveira (2004) abordou em seu trabalho um leito compactado de seção transversal cilíndrico elíptica, forma que pode ser encontrada nos escapamentos automotivos como coletor dos efluentes para conversão catalítica de gases nocivos aos seres vivos e ao meio ambiente. Esta pesquisa está direcionada para o estudo da transferência de calor em meios porosos contido em tubos cilíndricos elípticos, percolados por fluidos na direção axial, onde a temperatura do fluido na alimentação é diferente daquela que prevalece na parede do leito poroso. O problema físico consiste no escoamento de fluido através de um reator de leito fixo cilíndrico-elíptico recheado de partículas, conforme pode ser visto na Figura 3.1. Dependendo da temperatura do Fluido 1 na entrada, a parede do reator pode estar sendo resfriada ou aquecida por um Fluido 2 que escoar na parte anular.



**FIGURA 3.1** - Esquema de um reator cilíndrico-elíptico de leito compactado.

Quando se deseja trabalhar com um sistema de coordenadas curvilíneas, tipo cilíndricas elípticas, uma mudança de variáveis é um requisito naturalmente exigido. Essa mudança decorre da forma geométrica do sistema considerado. As relações gerais entre o sistema de coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$  e o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas  $(\tau, \phi, z)$  são dadas a seguir (Magnus et al., 1966):

$$x = L \cosh \tau \cos \phi \quad y = L \operatorname{senh} \tau \operatorname{sen} \phi \quad z = z \quad (3.9)$$

onde  $L$  é o comprimento focal da elipse, matematicamente calculado pela expressão  $L = \sqrt{L_2^2 - L_1^2}$ , onde  $L_1$  e  $L_2$  os semi-eixos menor e maior da elipse, respectivamente (Figura 3.1). Para se obter a transformação desejada, considere as seguintes variáveis:

$$\xi = \cosh \tau \quad (3.10)$$

$$\eta = \cos \phi \quad (3.11)$$

Dessa forma, a substituição dessas variáveis na Equação (3.9), fornece as relações diretas entre os dois sistemas de coordenadas, conforme discussão apresentada detalhadamente em Magnus et al. (1966). Desta forma, obtêm-se as seguintes relações para  $x$ ,  $y$  e  $z$ , em termos de  $\xi$  e  $\eta$ :

$$x = L\xi\eta \quad (3.12)$$

$$y = L\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)} \quad (3.13)$$

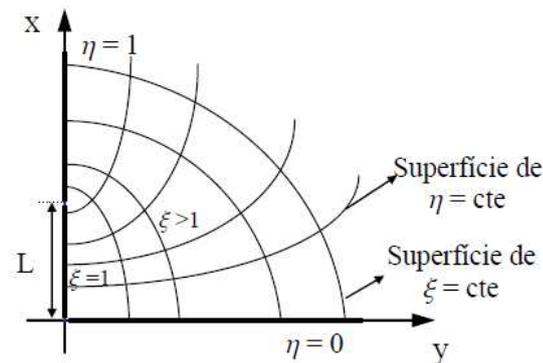
$$z = z \quad (3.14)$$

O domínio de validade das variáveis  $\xi$ ,  $\eta$  e  $z$  no sistema cilíndrico-elíptico é dado por:  $1 \leq \xi \leq L_2/L$ ,  $0 \leq \eta \leq 1$  e  $0 \leq z \leq H$ .

A eliminação da variável  $\phi$ , nas Equações (3.9) - (3.11), gera uma família de curvas no plano  $xy$  (Figura 3.2), caracterizadas pelos parâmetros  $\xi = \xi_0$  (constante). As superfícies  $\xi_0 > 1$  são elipsóides de revolução com centro na origem. A família de elipses gerada é cofocal; isto é, todas as elipses da família possuem o mesmo foco. Os dois focos da elipse estão localizados ao longo do eixo  $x$ , nos pontos ( $x = \pm L$ ,  $y = 0$ ). A superfície  $\xi = 1$  é uma linha reta que une a origem ( $z = 0$ ) e o ponto focal ( $z = +L$ ).

Analogamente, a eliminação da variável  $\tau$ , nas equações (3.9) - (3.11), produz uma família de curvas no plano  $xy$ , correspondendo a diferentes valores constantes do parâmetro  $\eta$ , que são hiperboloides de revolução, 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 um quarto de uma hipérbole; quando  $\eta_0 < 1$ , significa

dizer que a hipérbole para esta condição está localizada no primeiro quadrante. Quando  $\eta = 0$ , encontra-se como resultado uma hipérbole deformada, reduzindo-se a uma linha reta que se estende desde  $y = 0$ , até  $y = +\infty$  ao longo do eixo  $y$ . A superfície  $\eta = 1$  representa a parte do eixo  $x > +L$ . As afirmações acima podem ser visualizadas em detalhes na Figura 3.2, que representa esquematicamente o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas no plano  $\xi$ - $\eta$ .



**FIGURA 3.2** – Esquema representativo do sistema de coordenadas cilíndricas elípticas nos planos  $\xi$ - $\eta$  e  $xy$ .

De acordo com a Figura 3.1, quando  $L_2 \rightarrow L_1$ , o cilindro elíptico tende a um cilindro circular de diâmetro  $2L_1$ . Assim sendo, no limite quando a distância interfocal tende a zero, o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas se reduz ao sistema de coordenadas cilíndricas. Em outras palavras, significa dizer que:  $L\xi \rightarrow r$  e  $\eta \rightarrow \cos\theta$ , quando  $\xi \rightarrow \infty$ , onde  $r$  e  $\theta$  são coordenadas cilíndricas. Informações adicionais sobre os sistemas de coordenadas cilíndricas elípticas e suas relações com outros sistemas coordenados podem ser obtidas em Stratton et al. (1941), Morse e Feshbach (1953a), Happel e Brenner (1991) e Lima (1999).

A seguir será 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 cilíndricas elípticas (Maliska, 2004). Desde de que a velocidade do fluido seja muito menor que a velocidade do som (Prasad e Das, 2002), pode-se considerar, nas Equações (3.1) e (3.2), a dissipação viscosa nula e a derivada substantiva da pressão  $DP/Dt \approx 0$ .

Partindo-se das considerações acima, a equação geral da conservação aplicada a fase fluida para uma variável genérica  $\Phi$  e escrita em qualquer sistema de coordenadas (Maliska, 2004), é dada por:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[ \varphi (\rho c_P)_f \frac{\Phi}{J} \right] + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (\rho c_P)_f U \frac{\Phi}{J} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (\rho c_P)_f V \frac{\Phi}{J} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ (\rho c_P)_f W \frac{\Phi}{J} \right] \\
& = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \alpha_{11} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{12} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{13} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \alpha_{21} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{22} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{23} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] \quad (3.15) \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \alpha_{31} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{32} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{33} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] + \varphi \frac{q_f}{J} \\
& + h(\Phi_s - \Phi_f)
\end{aligned}$$

onde J representa o Jacobiano é determinado matematicamente como segue:

$$J^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial z} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial z} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial z} \end{vmatrix} \quad (3.16)$$

A determinação da inversa do jacobiano fornece como resultado:

$$J^{-1} = - \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \quad (3.17)$$

Os coeficientes  $\alpha_{ij}$  serão determinados pelas seguintes relações:

$$\alpha_{11} = \frac{a'}{J^2} \quad (3.18)$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{d'}{J^2} \quad (3.19)$$

$$\alpha_{22} = \frac{b'}{J^2} \quad (3.20)$$

$$\alpha_{13} = \alpha_{31} = \frac{e'}{J^2} \quad (3.21)$$

$$\alpha_{33} = \frac{c'}{J^2} \quad (3.22)$$

$$\alpha_{23} = \alpha_{32} = \frac{f'}{J^2} \quad (3.23)$$

onde os coeficientes  $a'$ ,  $b'$ ,  $c'$ ,  $d'$ ,  $e'$  e  $f'$  podem ser calculados por:

$$a' = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z}\right)^2 \quad (3.24)$$

$$b' = \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial z}\right)^2 \quad (3.25)$$

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

$$d' = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z}\right) \quad (3.27)$$

$$e' = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial \xi}{\partial z}\right) \quad (3.28)$$

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

Na equação geral, os termos que contém  $\alpha_{ij}$ , 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):

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta}\right) = 0 \quad (3.30)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial z}\right) = 0 \quad (3.31)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial x}{\partial \xi}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial z} \frac{\partial y}{\partial \xi}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \xi}\right) = 0 \quad (3.32)$$

Pode-se verificar facilmente que todas essas condições são satisfatórias para o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas, nas variáveis  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $z$ . Entretanto, os coeficientes  $d'$ ,  $e'$  e  $f'$  (nas Equações 3.27 a 3.29) serão eliminados. Logo a Equação (3.15) reduzirá para:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[ \varphi (\rho_{CP})_f \frac{\Phi}{J} \right] + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (\rho_{CP})_f u_\xi \frac{\Phi}{J} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (\rho_{CP})_f u_\eta \frac{\Phi}{J} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ (\rho_{CP})_f u_z \frac{\Phi}{J} \right] \\ & = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \alpha_{11} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \alpha_{22} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \alpha_{33} \varphi J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] + \varphi \frac{q_f}{J} + \frac{h}{J} (\Phi_s - \Phi_f) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Substituindo os termos encontrados nas Equações (3.17) - (3.23) na equação (3.33) e rearranjando os termos, onde  $\Phi = T_f$  e  $\Gamma^\Phi = K_f$ , obtém-se-á:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\varphi(\rho c_p)_f L^2 (\xi^2 - \eta^2) T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \frac{(\rho c_p)_f L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_\xi T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{(\rho c_p)_f L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_\eta T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{(\rho c_p)_f L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} \varphi K_f \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} \varphi K_f \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \varphi K_f \frac{\partial T_f}{\partial z} \right] + \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} [\varphi q_f + h(\Phi_s - \Phi_f)] \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Considerando  $u_z \gg u_\xi$  e  $u_z \gg u_\eta$ , e que o termo de dispersão axial é desprezível, quando comparado com os demais, a Equação (3.34) assume a forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\varphi(\rho c_p)_f L^2 (\xi^2 - \eta^2) T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{(\rho c_p)_f L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} \varphi K_f \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} \varphi K_f \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \varphi K_f \frac{\partial T_f}{\partial z} \right] \\
& + \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} [\varphi q_f + h(\Phi_s - \Phi_f)] \quad (3.35)
\end{aligned}$$

Usando ainda o método proposto por Maliska (1995), na equação da energia para a fase sólida, objetivando a transformação do sistema de coordenadas cartesianas para o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[ (1 - \varphi)(\rho c)_s \frac{\Phi}{J} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \alpha_{11} (1 - \varphi) J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \alpha_{22} (1 - \varphi) J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \alpha_{33} (1 - \varphi) J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] + (1 - \varphi) \frac{q_s}{J} + \frac{h}{J} (\Phi_f - \Phi_s) \quad (3.36)
\end{aligned}$$

Substituindo os termos encontrados nas Equações (3.17) - (3.23) na Equação (3.36), obter-se-á:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{(1-\varphi)(\rho c_p)_s L^2 (\xi^2 - \eta^2) T_s}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K_s \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right] + \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} (1 - \varphi) K_s \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right] &+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K_s \frac{\partial T_s}{\partial z} \right] \\ &+ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} [(1 - \varphi) q_s + h(\Phi_f - \Phi_s)] \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde  $\Phi = T_s$  e  $\Gamma^\Phi = K_s$ .

Sendo as Equações (3.35) e (3.37) equações diferenciais parciais de segunda ordem em relação à posição e de primeira ordem em relação ao tempo, a sua solução exige no mínimo duas condições de contorno para cada direção e uma condição inicial. No problema a ser tratado adotar-se as seguintes condições de contorno:

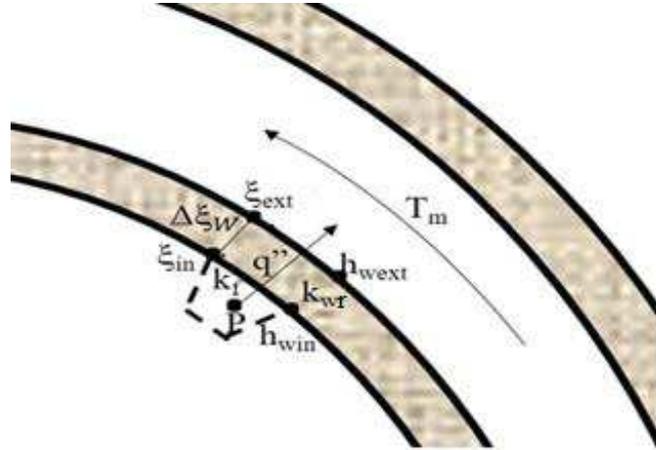
**a) Condições de simetria:**

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} (\xi = 1, \eta, z, t) = \frac{\partial T}{\partial \eta} (\xi, \eta = 0, z, t) = \frac{\partial T}{\partial \eta} (\xi, \eta = 1, z, t) = 0 \quad (3.38)$$

**b) Condição de contorno na parede do reator:**

Essa região pode ser estudada propondo-se diferentes condições de troca de calor, a saber, por exemplo, fluxo difusivo e/ou convectivo do lado interno da parede combinado com um fluxo convectivo do lado externo; fluxo difusivo e/ou convectivo do lado interno da parede, com temperatura prescrita na parede, no lado externo; fluxo difusivo e

convectivo do lado interno da parede considerando difusão através da parede e fluxo convectivo do lado externo da parede, como especificado na Figura 3.5.



**FIGURA 3.3** - Esquema mostrando as trocas de calor consideradas na condição de contorno na fronteira do reator para a fase fluida.

Assim pode-se escrever, de forma geral:

$$\begin{aligned}
 q'' &= -\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{(\xi=\xi_{in})} + h_{win} (T_p - T_{win}) = \\
 &= h_{wext} (T_{wext} - T_m) = -\frac{k_{wf}}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{(\xi=\xi_{ext})} \quad (3.39)
 \end{aligned}$$

onde  $\xi_n = L_2/L$  na superfície (Figura 3.1). Nas etapas futuras deste trabalho serão apresentadas as demais formas de condição de contorno na fronteira e onde o subscrito wr significa a localização na parede do reator.

**c) Condição prescrita na entrada do reator:**

$$T(\xi, \eta, z = 0, t) = T_0 \quad (3.40)$$

**d) Condição parabólica na saída do reator:**

$$\frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta, z = H, t) = 0 \quad (3.41)$$

O gradiente de T, as áreas de troca de calor e o volume do corpo no novo sistema de coordenadas, 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:

**a) Volume diferencial do corpo:**

$$dV = \frac{1}{\hat{U}\hat{V}\hat{W}} d\xi d\eta dz \quad (3.42)$$

**b) Áreas diferenciais de fluxo variável  $\Phi$ :**

$$dS_{\xi} = \frac{1}{\hat{V}\hat{W}} d\eta dz \quad (3.43)$$

$$dS_{\eta} = \frac{1}{\hat{U}\hat{W}} d\xi dz \quad (3.44)$$

$$dS_z = \frac{1}{\hat{U}\hat{V}} d\xi d\eta \quad (3.45)$$

**c) Gradiente da variável T:**

$$\nabla T = \left( \hat{U} \frac{\partial T}{\partial \xi}; \hat{V} \frac{\partial T}{\partial \eta}; \hat{W} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.46)$$

onde:

$$\frac{1}{\hat{U}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi}\right)^2 \quad (3.47)$$

$$\frac{1}{\hat{V}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta}\right)^2 \quad (3.48)$$

$$\frac{1}{\hat{W}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial z}\right)^2 \quad (3.49)$$

são os coeficientes métricos, cujo produto resulta no próprio jacobiano da transformação J. Com a substituição dos resultados envolvendo o jacobiano (Equação 3.16) e os coeficientes métricos (Equações 3.47 a 3.49), obtém-se:

$$dV = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta dz \quad (3.50)$$

$$dS_\xi = L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)}} d\eta dz \quad (3.51)$$

$$dS_\eta = L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} d\xi dz \quad (3.52)$$

$$dS_z = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta \quad (3.53)$$

$$\nabla T = \left( \frac{1}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi}, \frac{1}{L} \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta}, \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.54)$$

que são equações necessárias para a modelagem matemática.

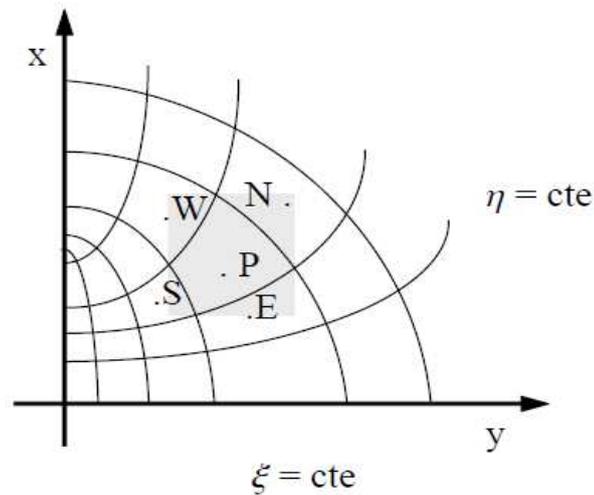
### 3.2. Solução numérica das equações de transporte de calor nas fases fluida e sólida em um reator cilíndrico elíptico de leito fixo

É bem conhecido pela comunidade científica que problemas físicos relacionados aos fenômenos de transporte (energia, momento linear e massa), possuem uma alta complexidade e inevitavelmente recaem em equações diferenciais parciais. Para se obter uma solução analítica para problemas dessa natureza, quando se consegue, será exigido um laborioso e rigoroso tratamento matemático refinado. Sendo assim, a solução numérica surge como uma alternativa para a interpretação e solução do problema físico em questão.

O avanço dos estudos de problemas físicos envolvendo simulação computacional, assim como a velocidade de processamento dos computadores na atualidade, aumentou significativamente a busca pela análise de tais problemas através de soluções numéricas. Existem vários métodos numéricos que vêm sendo utilizados em larga escala pela comunidade científica, mas nesse trabalho será usado o método de volumes finitos, que tem como princípio básico a transformação de equações diferenciais parciais em equações algébricas elementares. De acordo com Maliska (2004), o conceito fundamental do método de volume finito é que qualquer quantidade contínua pode ser aproximada por um modelo discreto, constituído por um conjunto de funções contínuas, definidas em um número finito de subdomínios, em que, esses subdomínios são denominados de volume de controle, com pontos nodais localizados no centroide dos mesmos.

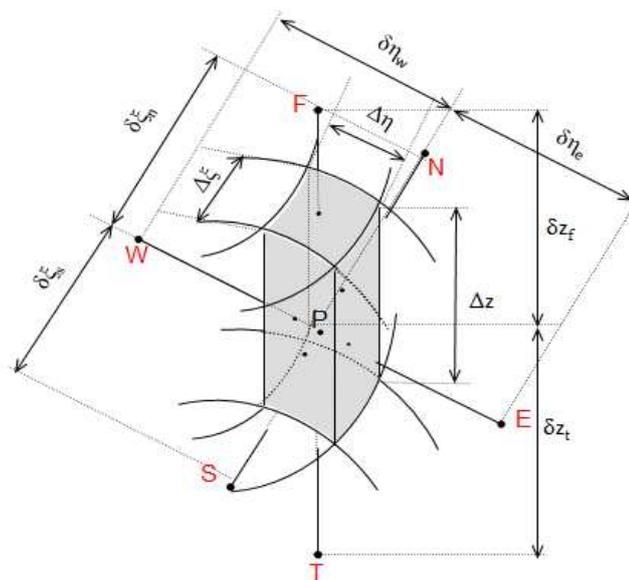
Na Figura 3.4, está ilustrado o domínio computacional utilizado para representar o problema físico no reator de leito fixo cilíndrico-elíptico, em que há simetria nos quatro quadrantes. Neste trabalho optou-se pelo uso apenas do primeiro quadrante ( $x \geq 0$  e  $y \geq 0$ ). Observa-se ainda na Figura 3.4 que o volume de controle está associado ao ponto nodal **P** e as linhas de  $\xi$  e  $\eta$  constantes delimitando os mesmos. Já os pontos **N**, **S**, **E** e **W**, são os seus pontos nodais vizinhos, letras que representam Norte, Sul, Leste e Oeste respectivamente. Já na Figura 3.5 pode-se observar as faces do volume de controle **e**, **w**, **n** e **s**, em torno do ponto **P**, as dimensões do volume de controle  $\Delta\xi$ ,  $\Delta\eta$  e  $\Delta z$ , assim como

as distâncias entre o ponto nodal **P** e os pontos adjacente. Observa-se que o volume de controle na Figura 3.5, é tridimensional.



**FIGURA 3.4** - Configuração geométrica do problema físico.

As equações (3.35) e (3.37) em coordenadas cilíndricas elípticas descrevem a transferência de calor no leito e são resolvidas numericamente pelo método de volumes finitos, junto com a prática de localizar os pontos nodais no centro do volume de controle (Patakar, 1980; Maliska, 1995). Pode-se justificar a escolha desta metodologia pelo fato que ela torna mais simples a determinação dos coeficientes de transporte, assim como, facilita a incorporação das condições de contorno admitidas na modelagem.



**FIGURA 3.5** - Volume de controle da malha numérica.

Considerando o volume de controle esboçado na Figura 3.5, pode-se discretizar cada termo da equação (3.35) da fase fluida e cada termo da equação (3.37) da fase sólida, integrando cada termo no volume e no tempo. Assumindo uma formulação totalmente implícita e o esquema WUDS como função de interpolação espacial para os fluxos convectivo e difusivo, sobre o volume de controle, obtém-se a equação que será válida para todos os pontos internos da malha.

### a) Integração da equação da energia para a fase fluida

Fazendo a integração do termo temporal, do termo convectivo e dos termos difusivos da equação (3.35), encontrar-se-á:

- **Para o termo temporal ou transiente**

$$\int_{t_0}^t \int_s^n \int_e^w \int_f^t \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\varphi \rho c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = (\varphi_p \rho_P c_{pP} T_{Pf} - \varphi_P^0 \rho_P^0 c_{pP}^0 T_{Pf}^0) \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta_P^2)(\xi_P^2 - \eta_P^2)}} \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \quad (3.55)$$

- **Para o termo convectivo**

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\rho c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T_f}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \frac{\rho c_p u_z L^2 (\xi^2 - \eta^2) T_f}{\sqrt{(1 - \eta_P^2)(\xi_P^2 - \eta_P^2)}} \right]_f - \left[ \frac{\rho c_p u_z L^2 (\xi^2 - \eta^2) T_f}{\sqrt{(1 - \eta_P^2)(\xi_P^2 - \eta_P^2)}} \right]_t \right\} \Delta \xi \Delta \eta \Delta t \quad (3.56)$$

- Para o termo difusivo na direção de  $\xi$

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right]_n - \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right]_s \right\} \Delta \eta \Delta z \Delta t \quad (3.57)$$

- Para o termo difusivo na direção  $\eta$

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right]_e - \left[ \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right]_w \right\} \Delta \xi \Delta z \Delta t \quad (3.58)$$

- Para o termo difusivo na direção  $z$

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial z} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial z} \right]_f - \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \varphi K \frac{\partial T_f}{\partial z} \right]_t \right\} \Delta \xi \Delta \eta \Delta t \quad (3.59)$$

- Para o termo fonte

$$\int_V \int_t \left[ \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \varphi q \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left[ \frac{\varphi q_f L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \Delta t \quad (3.60)$$

### b) Integração da equação da energia para a fase sólida

Fazendo a integração da Equação (3.37) do termo temporal e dos termos difusivo, encontrar-se-á:

- Para o termo temporal ou transiente

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^t \int_s^n \int_e^w \int_f^t \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{(1 - \varphi) \rho c_p L^2(\xi^2 - \eta^2) T_s}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t \\ &= \left[ (1 - \varphi_p) \rho_P c_{pP} T_{Ps} - (1 - \varphi_P^0) \rho_P^0 c_{pP}^0 T_{Ps}^0 \right] \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta_P^2)(\xi_P^2 - \eta_P^2)}} \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \end{aligned} \quad (3.61)$$

- Para o termo difusivo na direção  $\xi$

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right]_n - \right. \quad (3.62)$$

$$\left. \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right]_s \right\} \Delta \eta \Delta z \Delta t$$

- Para o termo difusivo na direção  $\eta$

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-1)}} (1-\varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-1)}} (1-\varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right]_e - \right. \quad (3.63)$$

$$\left. - \left[ \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-1)}} (1-\varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right]_w \right\} \Delta \xi \Delta z \Delta t$$

- Para o termo difusivo na direção z

$$\int_V \int_t \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial z} \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left\{ \left[ \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial z} \right]_f - \right. \quad (3.64)$$

$$\left. - \left[ \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) K \frac{\partial T_s}{\partial z} \right]_t \right\} \Delta \xi \Delta \eta \Delta t$$

- Para o termo fonte

$$\int_V \int_t \left[ \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} (1 - \varphi) q \right] \partial \xi \partial \eta \partial z \partial t = \left[ \frac{(1 - \varphi) q_s L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \Delta t \quad (3.65)$$

Substituindo as Equações (3.55 - 3.58) na Equação (3.35) e as Equações (3.61 - 3.65) na equação (3.37) e rearranjando alguns termos, obtém-se as seguintes equações:

#### a) Equação da energia para a fase fluida na forma discretizada

$$\begin{aligned}
& \frac{\Delta V}{J_P} \left[ \frac{\varphi_P \rho_P c_{pP} T_{Pf} - \varphi_P^0 \rho_P^0 c_{pP}^0 T_{Pf}^0}{\Delta t} \right] + \left[ \rho c_p \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta T_f \Big|_f - \rho c_p \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta T_f \Big|_t \right] \\
& = \left[ \left( D_{11} \varphi \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right) \Big|_n - \left( D_{11} \varphi \frac{\partial T_f}{\partial \xi} \right) \Big|_s + \left( D_{22} \varphi \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right) \Big|_e - \left( D_{22} \varphi \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \right) \Big|_w \right. \\
& \left. + D_{33} \varphi \frac{\partial T_f}{\partial z} \Big|_f - \left( D_{33} \varphi \frac{\partial T_f}{\partial z} \right) \Big|_t \right] + q_f \varphi \frac{\Delta V}{J_P} + h \frac{\Delta V}{J_P} (\Phi_s - \Phi_f) \tag{3.66}
\end{aligned}$$

**b) Equação da energia para a fase sólida na forma discretizada**

$$\begin{aligned}
& \frac{\Delta V}{J_P} \left[ \frac{(1 - \varphi_P) \rho_P c_{pP} T_{Ps} - (1 - \varphi_P^0) \rho_P^0 c_{pP}^0 T_{Ps}^0}{\Delta t} \right] = \left\{ \left[ D_{11} (1 - \varphi) \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right]_n - \left[ D_{11} (1 - \varphi) \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right]_s \right\} \\
& + \left\{ \left[ D_{22} (1 - \varphi) \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right]_e - \left[ D_{22} (1 - \varphi) \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right]_w + \left[ D_{33} (1 - \varphi) \frac{\partial T_s}{\partial z} \right]_f - \left[ D_{33} (1 - \varphi) \frac{\partial T_s}{\partial z} \right]_t \right\} \\
& + q_s (1 - \varphi) \frac{\Delta V}{J_P} + h \frac{\Delta V}{J_P} (\Phi_f - \Phi_s) \tag{3.67}
\end{aligned}$$

onde os coeficientes  $D_{ij}$  e o  $\Delta V$  da equação são avaliados pelas seguintes expressões:

$$D_{11} = \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(1 - \eta^2)}} K \Delta \eta \Delta z \tag{3.68}$$

$$D_{22} = \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} K \Delta \xi \Delta z \tag{3.69}$$

$$D_{33} = \frac{K}{J} \Delta \xi \Delta \eta \tag{3.70}$$

$$\Delta V = \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \tag{3.71}$$

onde  $\Delta V$  é o volume do volume de controle, na Figura 3.5, usado para localizar o ponto nodal P.

Considerando que a função de interpolação espacial entre dois pontos nodais adjacentes é uma função do tipo linear, as derivadas relativas ao fluxo difusivo nas faces dos volumes de controle, como mostra a Figura 3.4, de acordo com o esquema WUDS de interpolação (Maliska, 1995), podem ser escritas como segue:

$$K_n \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right|_n = \frac{K_n \beta_n (T_n - T_P)}{\delta \xi_n} \quad (3.72)$$

$$K_s \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right|_s = \frac{K_s \beta_s (T_P - T_S)}{\delta \xi_s} \quad (3.73)$$

$$K_e \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right|_e = \frac{K_e \beta_e (T_E - T_P)}{\delta \eta_e} \quad (3.74)$$

$$K_w \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right|_w = \frac{K_w \beta_w (T_P - T_w)}{\delta \eta_w} \quad (3.75)$$

$$K_f \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_f = \frac{K_f \beta_f (T_F - T_P)}{\delta z_f} \quad (3.76)$$

$$K_t \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_t = \frac{K_t \beta_t (T_P - T_T)}{\delta z_t} \quad (3.77)$$

Para os termos que correspondem aos fluxos convectivos, Maliska (1995) propõe as seguintes funções de interpolação para o valor da variável na face dos volumes de controle, ou seja:

$$T_t = \left( \frac{1}{2} + \alpha_t \right) T_T + \left( \frac{1}{2} - \alpha_t \right) T_P \quad (3.78)$$

$$T_f = \left(\frac{1}{2} + \alpha_f\right) T_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_f\right) T_F \quad (3.79)$$

Nas interpolações das Equações (3.72) - (3.77) e (3.78) - (3.79), os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes ponderadoras, determinadas por:

$$\alpha = \frac{P_e^2}{(10 + 2P_e^2)} \quad (3.80)$$

$$\beta = \frac{(1 + 0,005P_e^2)}{(1 + 0,05P_e^2)} \quad (3.81)$$

onde  $Pe$  é o número de Peclet, que fisicamente representa a razão entre o fluxo convectivo e o fluxo difusivo na direção da coordenada em questão. O mesmo pode ser determinado por:

$$P_e = \frac{\rho u_z c_p \delta z}{K} \quad (3.82)$$

As derivadas nas interfaces dos volumes de controle, os coeficientes  $D_{ij}$ , com  $i = j$ , e também a função de interpolação espacial para os fluxos convectivos de transporte de calor, serão substituídos na Equação (3.66). Dividindo os termos, rearranjando-os, e colocando em evidência os termos comuns, a equação da energia na fase fluida na sua forma algébrica linear discretizada, aplicada no ponto nodal  $P$ , passa a ser escrita da seguinte maneira:

$$A_{P_f} T_{P_f} = A_{E_f} T_{E_f} + A_{W_f} T_{W_f} + A_{N_f} T_{N_f} + A_{S_f} T_{S_f} + A_{F_f} T_{F_f} + A_{T_f} T_{T_f} + A_{P_f}^0 T_{P_f}^0 + B_f \quad (3.83)$$

onde

$$A_{E_f} = \sqrt{\frac{(1 - \eta_e^2)}{(\xi_e^2 - 1)}} \frac{\varphi K_{ef} \beta_{ef}}{\delta \eta_e} \Delta \xi \Delta z \quad (3.84)$$

$$A_{W_f} = \sqrt{\frac{(1 - \eta_w^2)}{(\xi_w^2 - 1)}} \frac{\varphi K_{wf} \beta_{wf}}{\delta \eta_w} \Delta \xi \Delta z \quad (3.85)$$

$$A_{N_f} = \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(1 - \eta_n^2)}} \frac{\varphi K_{nf} \beta_{nf}}{\delta \eta_n} \Delta \eta \Delta z \quad (3.86)$$

$$A_{S_f} = \sqrt{\frac{(\xi_s^2 - 1)}{(1 - \eta_s^2)}} \frac{\varphi K_{sf} \beta_{sf}}{\delta \eta_s} \Delta \eta \Delta z \quad (3.87)$$

$$A_{F_f} = \frac{L^2 (\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} \left[ \frac{\varphi K_{ff} \beta_{ff}}{\delta z_f} - (0.5 - \alpha_f) \rho_{ff} c_{P_{ff}} u_z \right] \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.88)$$

$$A_{T_f} = \frac{L^2 (\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} \left[ \frac{\varphi K_{tf} \beta_{tf}}{\delta z_t} + (0.5 + \alpha_t) \rho_{tf} c_{P_{tf}} u_z \right] \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.89)$$

$$A_{P_f}^0 = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)}} \frac{\varphi^0 \rho^0 c_p^0 \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t} \quad (3.90)$$

$$B_f = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)}} [q_f \varphi + a_{sf} h_{sf} T_s] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \quad (3.91)$$

$$\begin{aligned}
A_{P_f} = & A_{E_f} + A_{W_f} + A_{N_f} + A_{S_f} \\
& + \frac{L^2(\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} \left[ \frac{\varphi K_{ff} \beta_{ff}}{\delta z_f} + (0.5 + \alpha_f) \rho_{ff} c_{P_{ff}} u_z \right] \Delta \xi \Delta \eta \\
& + \frac{L^2(\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} \left[ \frac{\varphi K_{tf} \beta_{tf}}{\delta z_t} - (0.5 - \alpha_t) \rho_{tf} c_{P_{tf}} u_z \right] \Delta \xi \Delta \eta \\
& + \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)}} \left[ \frac{\varphi \rho c_P}{\Delta t} + a_{sf} h_{sf} \right] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z
\end{aligned} \tag{3.92}$$

As derivadas nas interfaces dos volumes de controle, os coeficientes  $D_{ij}$ , com  $i = j$  serão substituídos na Equação (3.67). Dividindo os termos, rearranjando-os e colocando em evidência os termos comuns, a equação da energia na fase sólida na sua forma algébrica linear discretizada, aplicada no ponto nodal P, passa a ser escrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
A_{P_s} T_{P_s} = & A_{E_s} T_{E_s} + A_{W_s} T_{W_s} + A_{N_s} T_{N_s} + A_{S_s} T_{S_s} + A_{F_s} T_{F_s} + A_{T_s} T_{T_s} \\
& + A_{P_s}^0 T_{P_s}^0 + B_s
\end{aligned} \tag{3.93}$$

onde

$$A_{E_s} = \frac{\sqrt{(1 - \eta_e^2)} (1 - \varphi) K_{es} \beta_{es}}{\sqrt{(\xi_e^2 - 1)} \delta \eta_e} \Delta \xi \Delta z \tag{3.94}$$

$$A_{W_s} = \frac{\sqrt{(1 - \eta_w^2)} (1 - \varphi) K_{ws} \beta_{ws}}{\sqrt{(\xi_w^2 - 1)} \delta \eta_w} \Delta \xi \Delta z \tag{3.95}$$

$$A_{N_s} = \frac{\sqrt{(\xi_n^2 - 1)} (1 - \varphi) K_{ns} \beta_{ns}}{\sqrt{(1 - \eta_n^2)} \delta \eta_n} \Delta \eta \Delta z \tag{3.96}$$

$$A_{S_s} = \frac{\sqrt{(\xi_s^2 - 1)} (1 - \varphi) K_{ss} \beta_{ss}}{\delta \xi_s} \Delta \eta \Delta z \quad (3.97)$$

$$A_{F_s} = \frac{L^2 (\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} \frac{(1 - \varphi) K_{fs} \beta_{fs}}{\delta z_f} \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.98)$$

$$A_{T_s} = \frac{L^2 (\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} \frac{(1 - \varphi) K_{ts} \beta_{ts}}{\delta z_t} \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.99)$$

$$A_{P_s}^0 = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)}} \frac{(1 - \varphi^0) \rho^0 c_p^0 \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t} \quad (3.100)$$

$$B_s = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)}} [q_s (1 - \varphi) + a_{sf} h_{sf} T_f] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \quad (3.101)$$

$$A_{P_s} = A_{E_s} + A_{W_s} + A_{N_s} + A_{S_s} + A_{F_s} + A_{T_s} \quad (3.102)$$

$$+ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)}} \left[ \frac{(1 - \varphi) \rho c_p}{\Delta t} + a_{sf} h_{sf} \right] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z$$

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  $A_P^0$ . Esses efeitos diminuem gradualmente, à medida que o processo tende para o regime estacionário. As aplicações das Equações 3.83 e 3.93 são restritas apenas aos pontos internos do domínio computacional.

Para os pontos de fronteira, o equacionamento é semelhante ao dos pontos internos, devendo ser aplicada a condição de contorno dada pela Equação (3.39) de acordo

com o perfil de troca de calor simulado nesta região. Neste balanço térmico citado, 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. Assim, na forma tem-se:

$$\begin{aligned}
 q_f'' &= -\frac{K_f}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_P^2)}} \frac{(T_{winf} - T_{Pf})}{\delta \xi_n} + h_{win} (T_{Pf} - T_{winf}) \\
 &\quad \text{(I)} \qquad \qquad \qquad \text{(II)} \qquad \qquad \qquad \text{(III)} \\
 &= h_{wext} (T_{wext} - T_m) = -\frac{K_{wr}}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_P^2)}} \frac{(T_{wext} - T_{winf})}{\delta \xi_n} \\
 &\quad \text{(IV)} \qquad \qquad \qquad \text{(V)}
 \end{aligned} \tag{3.103}$$

A Figura 3.3 foi esboçada a fim de considerar os diferentes mecanismos citados de trocas de calor na região de fronteira. Em consequência, a discretização dos pontos de fronteira poderá apresentar diferentes valores para o termo  $A_N$ ,  $A_P$  e  $B$  na modelagem. Maiores detalhes da discretização das equações para os pontos de fronteira correspondentes a cada diferente condição de contorno nessa região serão apresentados nas próximas etapas deste trabalho.

Após manipulação matemática da múltipla igualdade apresentada pela Equação 3.80, cujos termos foram convenientemente enumerados para tal, verifica-se que a partir dos termos (II), (III) e (V), substituindo-se o valor de  $T_{winf}$  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 para a fase fluida:

$$q_f'' = \frac{(T_{Pf} - T_m)}{\left(1 + \frac{K_f}{K_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{K_f \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{K_{wr} \hat{U}}\right) \left(h_{win} + \frac{K_f \hat{U}}{\delta \xi_n}\right)} \tag{3.104}$$

onde  $\hat{U}$  é dado pela equação (3.47).

A temperatura na parede interna do leito compactado para fase fluida é dada por:

$$T_{w_{inf}} = \frac{T_m + T_{Pf} \left( \frac{K_f}{K_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{K_f \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{K_{wr} \hat{U}} \right)}{\left( 1 + \frac{K_f}{K_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{K_f \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{K_{wr} \hat{U}} \right)} \quad (3.105)$$

A equação da energia para a fase fluida na sua forma discretizada para os pontos da fronteira assume praticamente a mesma forma que a Equações (3.83), como segue:

$$A_{P_f} T_{P_f} = A_{E_f} T_{E_f} + A_{W_f} T_{W_f} + A_{N_f} T_{N_f} + A_{S_f} T_{S_f} + A_{F_f} T_{F_f} + A_{T_f} T_{T_f} + A_{P_f}^0 T_{P_f}^0 + B_f'' \quad (3.106)$$

sendo os coeficientes  $A_{E_f}$ ,  $A_{W_f}$ ,  $A_{S_f}$ ,  $A_{F_f}$ ,  $A_{T_f}$  e  $A_{P_f}^0$ , exatamente os mesmos aos que foram apresentados anteriormente. A diferença está apenas no coeficiente  $A_{P_f}$  que vai ser determinado por:

$$A_{P_f} = \sum A_{kf} + A_{P_f}^0 + \overline{SM}_f \quad (3.107)$$

Na Equação (3.106), o coeficiente  $A_{N_f}$  tem valor nulo. A quantidade  $\overline{SM}_f$  que aparece na equação (3.107) é o termo fonte para a fase fluida, associado ao fluxo convectivo de calor junto a parede do leito e que deve ser adicionado aos pontos nodais de fronteira. Seu valor é calculado pela seguinte relação matemática:

$$\overline{SM}_f = \begin{cases} \frac{L\Delta\eta\Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}}}{\left[ \left( 1 + \frac{K_f}{K_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{K_f\widehat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} + \frac{h_{win}\delta\xi_n}{K_{wr}\widehat{U}} \right) \right]}, & \text{para os pontos da fronteira} \\ 0, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.108)$$

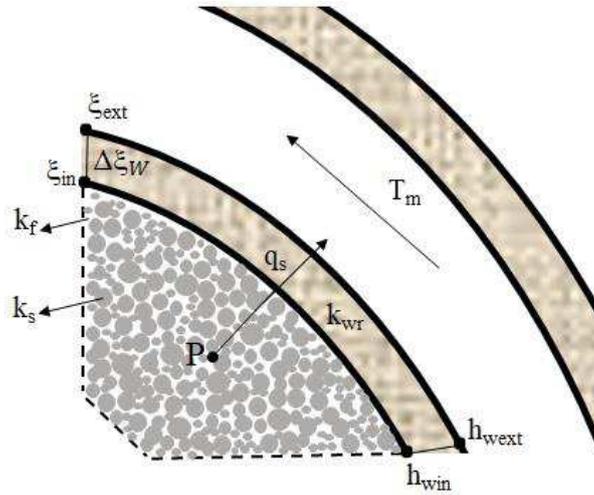
O termo  $B_f''$  para a fase fluida, proveniente da discretização, é matematicamente dado por:

$$B_f'' = \frac{L \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}} \Delta\eta\Delta z}{\left[ \left( 1 + \frac{K_f}{K_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{K_f\widehat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} + \frac{h_{win}\delta\xi_n}{K_{wr}\widehat{U}} \right) \right] \left( h_{win} + \frac{K_f\widehat{U}}{\delta\xi_n} \right)} \quad (3.109)$$

Usando ainda a condição de contorno (Equação 3.39), considera-se que o fluxo difusivo das partículas sólidas do leito é igual ao fluxo difusivo através da parede e também ao fluxo convectivo da mesma parede (lado externo) para o fluido refrigerante. Assim, a discretização gera a seguinte equação para a fase sólida:

$$\begin{aligned} q_s'' &= -\frac{K_s}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}} \frac{(T_{wins} - T_{ps})}{\delta\xi_n} = \\ &\quad \text{(VI)} \qquad \qquad \qquad \text{(VII)} \\ &= h_{wext}(T_{wext} - T_m) = -\frac{K_{wr}}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}} \frac{(T_{wext} - T_{wins})}{\delta\xi_n} \\ &\quad \text{(VIII)} \qquad \qquad \qquad \text{(IX)} \end{aligned} \quad (3.110)$$

A condição de contorno na fronteira para as partículas sólidas está representada na Figura 3.6, que foi esboçada a fim de considerar os diferentes mecanismos citados de trocas de calor nessa região.



**FIGURA 3.6** - Esquema mostrando as trocas de calor consideradas na condição de contorno na fronteira do reator para a fase sólida.

Manipulando os termos da múltipla igualdade apresentada na Equação 3.110, em que os termos foram enumerados, verifica-se que a partir dos termos (VIII) e (IX), substituindo-se o valor de  $T_{wins}$  delas obtido, no termo (VII) desta equação, encontra-se a seguinte expressão para o fluxo de calor para a fase sólida que atravessa a parede do reator:

$$q_s'' = \frac{(T_{Ps} - T_m)}{\left(1 + \frac{K_s \hat{U}}{\delta \xi_n h_{wext}} + \frac{K_s}{K_{wr}}\right) / \left(\frac{K_s \hat{U}}{\delta \xi_n}\right)} \quad (3.111)$$

onde  $\hat{U}$  é dado pela Equação (3.47).

A equação do cálculo da temperatura na parede interna do leito compactado para a fase sólida é dada por:

$$T_{wins} = \frac{T_m + T_{Ps} \left( \frac{K_s \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{K_s}{K_{wr}} \right)}{\left( 1 + \frac{K_s \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{K_s}{K_{wr}} \right)} \quad (3.112)$$

Assim, a equação discretizada para os pontos da fronteira aplicada para a fase sólida, assume praticamente a mesma forma que a Equação (3.93) conforme segue:

$$A_{P_s} T_{P_s} = A_{E_s} T_{E_s} + A_{W_s} T_{W_s} + A_{N_s} T_{N_s} + A_{S_s} T_{S_s} + A_{F_s} T_{F_s} + A_{T_s} T_{T_s} + A_{P_s}^0 T_{P_s}^0 + B_s'' \quad (3.113)$$

sendo os coeficientes  $A_{E_s}$ ,  $A_{W_s}$ ,  $A_{S_s}$ ,  $A_{F_s}$ ,  $A_{T_s}$  e  $A_{P_s}^0$ , exatamente os mesmos aos que foram apresentados anteriormente. A diferença está apenas no coeficiente  $A_{P_s}$  que vai ser determinado por:

$$A_{P_s} = \sum A_{k_s} + A_{P_s}^0 + \overline{SM}_s \quad (3.114)$$

Na Equação (3.113), o coeficiente  $A_{N_s}$  tem valor nulo, e o termo fonte  $\overline{SM}_s$  para a fase sólida que aparece na Equação (3.114) e que é calculado pela seguinte relação matemática:

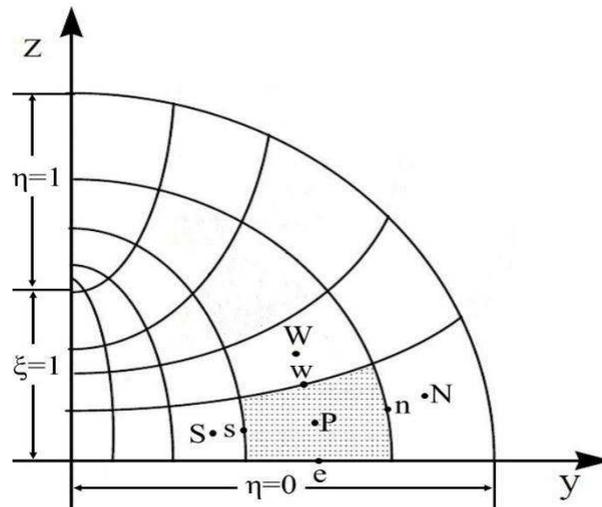
$$\overline{SM}_s = \begin{cases} \frac{L \Delta \eta \Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}}}{\left[ \frac{\left( 1 + \frac{K_s}{K_{wr}} + \frac{K_s \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} \right)}{\left( \frac{K_s \hat{U}}{\delta \xi_n} \right)} \right]}, & \text{para os pontos da fronteira} \\ 0, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.115)$$

O termo  $B_s''$  para a fase sólida, proveniente da discretização, é matematicamente dado por:

$$B_s'' = \frac{L \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}} \Delta\eta \Delta z}{\left[ \frac{\left(1 + \frac{K_s}{K_{wr}} + \frac{K_s \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n}\right)}{\left(\frac{K_s \hat{U}}{\delta \xi_n}\right)} \right]} \quad (3.116)$$

Os pontos de simetria não entram no conjunto de equações a serem resolvidos. 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. Então, tem-se:

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



**FIGURA 3.7** – Ponto de simetria na face  $\eta = 0$ . Fonte: Silva (2016)

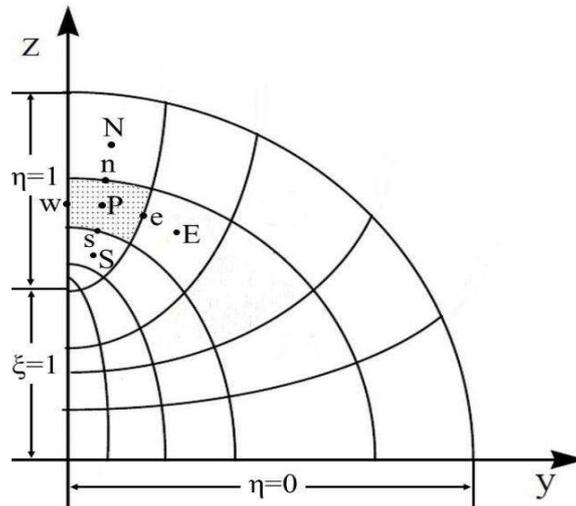
Para esses pontos nodais, pode -se escrever:

$$\left( -\frac{K}{L} \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-\eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e = \left( -\frac{K}{L} \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-\eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w \quad (3.117)$$

Logo, discretizando a Equação (3.117) e reorganizando os termos comuns, a temperatura nos pontos em  $\eta = 0$ , será dada por:

$$T_E = \left[ 1 + \frac{\left( \frac{K_w}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{(1-\eta_w^2)}{(\xi_p^2-\eta_w^2)}} \right)}{\left( \frac{K_e}{\delta \eta_e} \sqrt{\frac{(1-\eta_e^2)}{(\xi_p^2-\eta_e^2)}} \right)} \right] T_P - \left( \frac{K_w}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{(1-\eta_w^2)}{(\xi_p^2-\eta_w^2)}} \right) T_W \quad (3.118)$$

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



**FIGURA 3.8** – Ponto de simetria na face  $\eta = 1$ . Fonte: Silva (2016)

Para esses pontos, pode-se escrever:

$$\left( -\frac{K}{L} \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-\eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w = \left( -\frac{K}{L} \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-\eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e \quad (3.119)$$

Logo, discretizando a Equação (3.119) e reorganizando os termos comuns, a temperatura nos pontos em  $\eta = 1$ , pode ser obtida como segue:

$$T_W = \left[ 1 + \frac{\left( \frac{K_e}{\delta \eta_e} \sqrt{\frac{(1-\eta_e^2)}{(\xi_p^2-\eta_e^2)}} \right)}{\left( \frac{K_w}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{(1-\eta_w^2)}{(\xi_p^2-\eta_w^2)}} \right)} \right] T_P - \left( \frac{K_e}{\delta \eta_e} \sqrt{\frac{(1-\eta_e^2)}{(\xi_p^2-\eta_e^2)}} \right) T_E \quad (3.120)$$

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

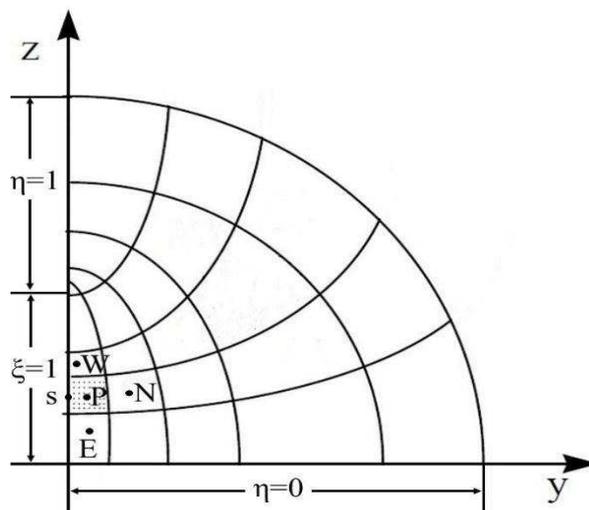


FIGURA 3.9 - Ponto de simetria na face  $\xi = 1$ . Fonte: Silva (2016)

Para esses pontos vale a seguinte igualdade:

$$\left( -\frac{K}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_n = \left( -\frac{K}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_s \quad (3.121)$$

que na forma discretizada, assume a forma:

$$T_S = \left[ 1 + \left( \frac{K_n}{\delta \eta_n} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}} \right) \right] T_P - \left( \frac{K_s}{\delta \eta_s} \sqrt{\frac{(\xi_s^2 - 1)}{(\xi_s^2 - \eta_p^2)}} \right) T_N \quad (3.122)$$

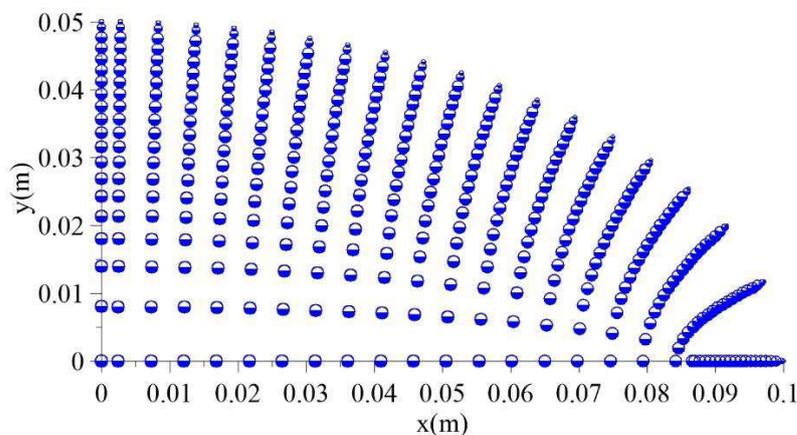
### 3.3 – A malha computacional

A malha numérica computacional formada por pontos e linhas, nada mais é do que a discretização do plano físico usado na simulação numérica. Entretanto, para se obter de maneira simples a solução de um sistema de equações diferenciais, é necessária uma malha bem construída. O método mais simples para se obter uma malha computacional é fazê-la manualmente, desenhando a geometria que se deseja discretizar numa folha de papel milimetrado, identificando as coordenadas de cada ponto formado pela intersecção de várias linhas que representam toda região da geometria desejada (Frari, 2009). Entretanto, as coordenadas são enviadas para o computador e lidas formando a malha computacional da geometria estudada (Maliska, 2004).

Existem outros métodos de se gerar malhas computacionais, os algébricos, que se utiliza diferentes tipos de interpolações e os diferenciais, que empregam equações diferenciais, porém, este último, demanda um custo computacional e uma maior elaboração matemática. Quanto à classificação das malhas, uma malha é estruturada quando cada volume interno tem sempre o mesmo número de vizinhos e a numeração dos mesmos tem uma seqüência natural. Já a malha não-estruturada, o número de vizinhos varia de volume para volume, ficando difícil estabelecer uma regra de ordenação (Bortoli, 2000).

A malha computacional 20x20x20 pontos nodais dessa pesquisa, foi obtida de forma algébrica por meio da simulação computacional do programa mathematica para as equações da energia em coordenadas cilíndricas elípticas nas fases fluida e sólida, usando o método de volumes finitos e considerando a localização dos pontos internos, os pontos de simetria e os pontos de fronteira do reator cilíndrico-elíptico de leito fixo. Apesar de o programa elaborado ter a flexibilidade de trabalhar com qualquer tipo de malha numérica, neste trabalho adotou-se uma malha ortogonal, estruturada e regular, escrita em coordenadas elípticas.

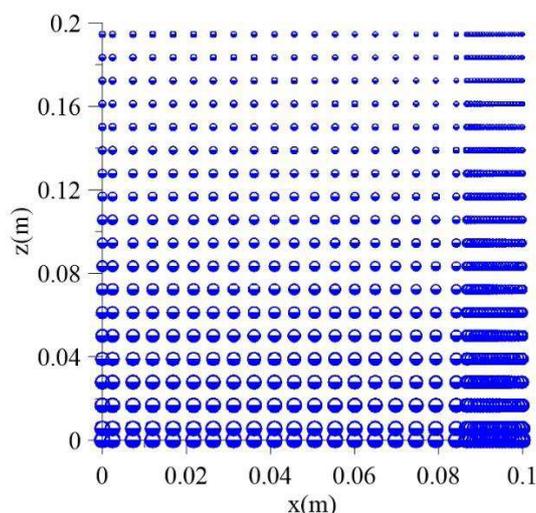
As Figuras 3.10 e 3.11, ilustram as malhas numéricas no plano transversal e longitudinal, usadas nas simulações  $\xi$ - $\eta$ . Nos planos, os volumes de controle não são igualmente espaçados, concentrando-se mais na superfície do corpo com relação a  $\xi$  e no eixo  $x$ . No plano  $\xi$ - $\eta$ , a malha é regular e ortogonal, como mostra a Figura 3.10 para a razão de aspecto ( $L_2/L_1 = 2,0$ ). Neste plano transversal, está concentrado a resolução numérica.



**Figura 3.10** – Malha numérica no plano transversal de um reator cilíndrico-elíptico com razão de aspecto,  $L_2/L_1 = 2,0$ .

Lima (1999), relata a existência da forte influência, nos valores de fronteira, do espaçamento da malha, para pontos nodais próximos a superfície do corpo, apesar do caráter elíptico das equações. Em especial, nestes pontos, deve-se ter um bom controle sobre o espaçamento da malha, principalmente quando existe altos gradientes e se requer uma solução mais precisa.

A Figura 3.11 apresenta uma malha numérica no plano longitudinal, onde os pontos  $(\xi = 1; \eta)$ ,  $(\xi; \eta = 0)$  e  $(\xi; \eta = 1)$  são pontos singulares, e mesmo que exista um considerável espaçamento dos primeiros pontos nodais em relação a estes pontos, isto traz benefícios para a solução da equação algébrica. Quanto mais próximos se estiver destes pontos, menos preciso será o resultado obtido.



**Figura 3.11** – Malha numérica no plano longitudinal de um reator cilíndrico-elíptico com razão de aspecto,  $L_2/L_1 = 2,0$ .

### 3.4 - Propriedades termofísicas utilizadas na simulação

O estudo da geometria para reatores de leito compactado é um requisito fundamental para o bom entendimento dos fenômenos envolvidos no movimento de fluidos assim como da transferência de calor através de sistemas particulados. Assim, nesse trabalho o leito compactado é heterogêneo, ou seja, constituído de uma fase fluida e uma fase sólida. No entanto, o tamanho e a forma das partículas dentro do leito são analisados, mas as direções dos interstícios e a localização detalhada são ignoradas. O fluxo de fluido no leito na direção axial é assumido como pistonado.

Segundo Silva (2018), o material e a espessura da parede do reator não influenciam significativamente no fenômeno estudado no interior do mesmo. Os materiais usados nas paredes do reator estudado nesse trabalho para avaliar o efeito da condutividade térmica constante foram: o cobre puro, o polipropileno ( $C_3H_6$ ) e a sílica

fundida (SiO<sub>2</sub>). As propriedades físicas e químicas do cobre e seus derivados, como o bronze e o latão, pela sua durabilidade e alta resistência à corrosão, os tornam de significativa utilidade e funcionalidade (Silva Filho, 2013). Já o polímero polipropileno é um tipo de plástico reciclável, mais precisamente um termoplástico polimerizado a partir do gás propileno. É uma resina de baixa densidade que oferece um bom equilíbrio de propriedades térmicas, químicas e elétricas, acompanhada de resistência moderada (Happer, 2003). E por último o material cerâmico sílica fundida possui uma expansão térmica extremamente baixa e uma condutividade térmica baixa (Prestes et. al., 2015). A Sílica fundida é produzida pela fusão de areia de quartzo natural com pureza elevada.

A Tabela 3.1 apresenta a densidade e a condutividade térmica do cobre puro, do polipropileno e da sílica fundida.

TABELA 3.1- Densidade e condutividade dos materiais que constituem a parede do reator.

<b>Material</b>	<b><math>\rho</math> (kg / m<sup>3</sup>)</b>	<b><math>k_{wr}</math> (W /m.K)</b>
Cobre puro	8933	401,00
Sílica fundida	2220	1,38
Polipropileno	900	0,12

O fluido arrefecedor utilizado na pesquisa foi o ar a diferentes temperaturas  $T_w = 10^\circ\text{C}$ ,  $20^\circ\text{C}$  e  $30^\circ\text{C}$ , com coeficiente de transferência de calor convectivo  $h_{wext}$  analisado de acordo com correlações para o número de Nusselt baseado no diâmetro hidráulico conforme Equação (3.123), onde obteve-se:  $h_{wext} = 379,35 \text{ W/m}^2\text{K}$ ,  $597,53 \text{ W/m}^2\text{K}$  e  $660 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

$$h_{wext} = \frac{N_u K_f}{D_h} \quad (3.123)$$

Por sua vez, o fluido percolante (ar) teve o coeficiente de transferência de calor por convecção ( $h_{wint} = 1,025 \times 10^{-4}$ ) foi calculado como segue.

De acordo com Beek e Muttzall (1975), o número de Reynolds da partícula é:

$$\text{Re}_p = \frac{2\rho u_z \varphi d_p}{3\mu(1 - \varphi)} \quad (3.124)$$

E, como pode ser visto em Incropera e De Witt (1992), o fator de Colburn ( $J_H$ ) e o número de Stanton ( $S_t$ ) são representados respectivamente por:

$$J_H = 2.06\text{Re}_p^{-0.575} \quad (3.125)$$

$$S_t = \frac{J_H}{\text{Pr}^{2/3}} \quad (3.126)$$

Combinando as Equações (3.124) - (3.126), obtém-se:

$$h_{\text{wint}} = S_t \rho u_z \varphi c_p \quad (3.127)$$

Foram usadas as seguintes equações para calcular as propriedades termofísicas do fluido (o ar), (Pakowski et al., 1991, Jumah e Mujumdar, 1996):

$$\rho_f = \frac{P\bar{M}_f}{R_g T} \quad (3.128)$$

$$\mu_f = 1,691 \times 10^{-5} + 4,984 \times 10^{-8} T - 3,187 \times 10^{-11} T^2 + 1,3196 \times 10^{-14} T^3 \quad (3.129)$$

Nestas equações,  $\bar{M}_f$  é o peso molecular do gás,  $R_g$  é a constante universal dos gases,  $T$  a temperatura absoluta em Kelvin e  $P$  a pressão em Pascal, sendo seus valores:  $P = 101325$  Pa,  $R_g = 8314,34$  kJ/kmol K,  $\bar{M}_f = 28,966$  kg/kmol.

### 3.5 - Solução do sistema de equações, critério de convergência e casos simulados

Para obter-se os resultados, implementou-se um código computacional no ambiente Mathematica<sup>®</sup>. O sistema de equações proveniente das Equações (3.83) e (3.93), foram resolvidos iterativamente usando-se o algoritmo Gauss - Seidel. Os critérios de convergência adotados são apresentados nas inequações (3.128) e (3.129) e têm de ser satisfeitos em todos os pontos do domínio computacional.

Em cada ponto do domínio computacional num certo instante de tempo, aplicam-se o seguinte critério:

$$|T^{\hat{n}+1} - T^{\hat{n}}| \leq 10^{-9} \quad (3.128)$$

Para as equações discretizadas em qualquer instante de tempo, aplicam-se o seguinte critério:

$$\frac{\sum |A_K|}{|A_P|} \leq 1 \text{ para todas as equações} \quad (3.129)$$

onde  $\hat{n}$ , na Equação (3.128), representa a  $\hat{n}$  - ésima iteração em cada instante de tempo e  $K$ , na Equação (3.129), os pontos nodais vizinhos do ponto nodal  $P$ . Além de satisfazer os critérios mencionados existe a necessidade de que os coeficientes  $A_K$  sejam todos positivos, para que a solução do problema tenha coerência física.

Na Tabela 3.2 estão listados todos os casos analisados nesta pesquisa. O estudo limitou-se a avaliar os efeitos da geometria e material do reator, velocidade e temperatura do fluido percolante (ar) e forma das partículas do leite.

TABELA 3.2 – Casos simulados nesta pesquisa.

Parâmetros																
Caso	Reator				Fluido de resfriamento		Fluido Interno (Ar)					Partículas				
	L <sub>1</sub> (m)	L <sub>2</sub> (m)	H (m)	K <sub>wr</sub> (W/mK)	V (m/s)	T <sub>w</sub> (°C)	u <sub>z</sub> (m/s)	T(z=0) (°C)	ρ <sub>f</sub> (Kg/m <sup>3</sup> )	c <sub>pf</sub> (J/kgK)	K <sub>f</sub> (W/mK)	a (m)	b (m)	ρ <sub>s</sub> (Kg/m <sup>3</sup> )	c <sub>ps</sub> (J/kgK)	K <sub>s</sub> (W/mK)
1	0,05	0,05001	0,2	401	0,0203	30	0,1	70	1,0948	1000	2,79x10 <sup>-2</sup>	2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>	487	5500	5,69
2	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
3	0,05	0,15	0,2	401	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
4	0,05	0,1	0,3	401	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
5	0,05	0,1	0,4	401	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
6	0,05	0,1	0,2	1,38	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
7	0,05	0,1	0,2	0,12	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
8	0,05	0,1	0,2	401	0,0205	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
9	0,05	0,1	0,2	401	0,0210	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
10	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	20	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
11	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	10	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
12	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,2	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
13	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,35	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
14	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,1	80				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
15	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,1	100				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,5x10 <sup>-3</sup>			
16	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	2,0x10 <sup>-3</sup>			
17	0,05	0,1	0,2	401	0,0203	30	0,1	70				2,0x10 <sup>-3</sup>	3,0x10 <sup>-3</sup>			

## CAPÍTULO 4

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 4.1 - Refino da malha

O conjunto de posições discretas nas quais as variáveis serão calculadas é definido como malha numérica (representação geométrica do domínio), no entanto, a qualidade e precisão da malha depende do modelamento, da geração e dos outros recursos adotados na simulação. A malha representa também a união das subdivisões dos elementos, sendo que a eficiência da malha dependerá da adaptação do refinamento a ser feito (Owen, 1998).

Quando o trabalho envolve a simulação numérica sempre é importante fazer uma análise de qual malha melhor se adequa a situação a ser analisada, que gere menor tempo na solução, menor gasto de memória computacional 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. O efeito do número de pontos da malha no comportamento da solução numérica para um reator cilíndrico-elíptico foi avaliado mudando-se o tamanho da malha numérica e a forma das partículas dentro do reator. Foi utilizado nessa pesquisa malhas  $10 \times 10 \times 10$ ,  $20 \times 20 \times 20$  e  $30 \times 30 \times 30$  pontos, para uma razão de aspecto geométrica  $L_2/L_1 = 2,0$ , velocidade superficial do fluido,  $u_z = 0,1147$  m/s e esfericidades  $\epsilon = 1,0, 0,8$  e  $0,6$  para as formas das partículas esféricas, cilíndricas e retangulares, respectivamente.

Os parâmetros termofísicos usados na validação da malha estão representados na Tabela 4.1. Este trabalho foi feito com um computador com processador Intel Core i7 – 7ª Geração, memória DDR3 1600 MHz com 8Gb e HD 1T.

**TABELA 4.1** – Parâmetros termofísicos para validação da malha.

Parâmetros								
L <sub>1</sub> (m)	L <sub>2</sub> (m)	H (m)	h <sub>wext</sub> (w/m <sup>2</sup> K)	h <sub>wint</sub> (w/m <sup>2</sup> K)	φ	K <sub>wr</sub> (W/mK)	K <sub>f</sub> (W/mK)	K <sub>s</sub> (W/mK)
0,05	0,1	0,2	2,0	1,0x10 <sup>-30</sup>	0,4	1,0 x 10 <sup>30</sup>	2,47x10 <sup>-3</sup>	5,69

A Tabela 4.2 mostra as malhas 10x10x10, 20x20x20 e 30x30x30 pontos, levando-se em consideração as esfericidades, as posições x, y e z, as temperaturas da fase fluida e da fase sólida e os seus respectivos tempos de execução do programa.

**TABELA 4.2** - Teste para escolha da malha com as respectivas temperaturas das fases fluida e sólida e o tempo computacional.

Análise da Malha						
Malha	ε	z (m)	(x, y) (m, m)	T <sub>f</sub> (°C)	T <sub>s</sub> (°C)	Tempo de execução programa
10x10x10	1,0	0,2	(0.09, 0.01)	63,2297	63,2266	4min58s
10x10x10	0,8	0,2	(0.09, 0.01)	63,2370	63,2333	3min50s
10x10x10	0,6	0,2	(0.09, 0.01)	63,2457	63,2412	2min46s
20x20x20	1,0	0,2	(0.09, 0.01)	62,9645	62,9704	2h43min34s
20x20x20	0,8	0,2	(0.09, 0.01)	62,9664	62,9759	2h11min04s
20x20x20	0,6	0,2	(0.09, 0.01)	62,9673	62,9841	1h35min37s
30x30x30	1,0	0,2	(0.09, 0.01)	62,9696	62,9681	12h36min12s
30x30x30	0,8	0,2	(0.09, 0.01)	62,9962	62,9943	12h47min1s
30x30x30	0,6	0,2	(0.09, 0.01)	62,9469	62,9641	12h58min21s

Observa-se na Tabela 4.2 para as malhas 10x10x10, 20x20x20 e 30x30x30 pontos nodais, diferença muito pequena entre as temperaturas da fase fluida e da fase sólida. Pode-se identificar ainda que o tempo de execução do programa para as malhas 10x10x10 e 20x20x20 pontos nodais analisados foi maior para as partículas do leito poroso com forma esféricas e menor para as partículas do leito com forma retangulares. Já para a

malha 30x30x30 pontos nodais, o tempo de execução do programa foi maior para as partículas com formas retangulares e menor para partículas com formas esféricas.

Pode-se ver ainda que a malha 20x20x20 pontos teve um tempo de processamento de 2h43min34s para as partículas esféricas, 2h11min4s para partículas cilíndricas e 1h35min37s para partículas com formas retangulares, enquanto que a malha de 30x30x30 pontos nodais levou 12h36min12s para partículas com forma esférica, 12h47min01s para partículas com forma cilíndrica e 12h58min21s para as partículas com forma retangular para produzir praticamente a mesma solução, motivo pelo qual descartou-se trabalhar com essa última malha nessa pesquisa. Desta forma, selecionou-se a malha 20x20x20 pontos nodais, pois apresentou um menor tempo de execução que a malha 30x30x30 pontos nodais.

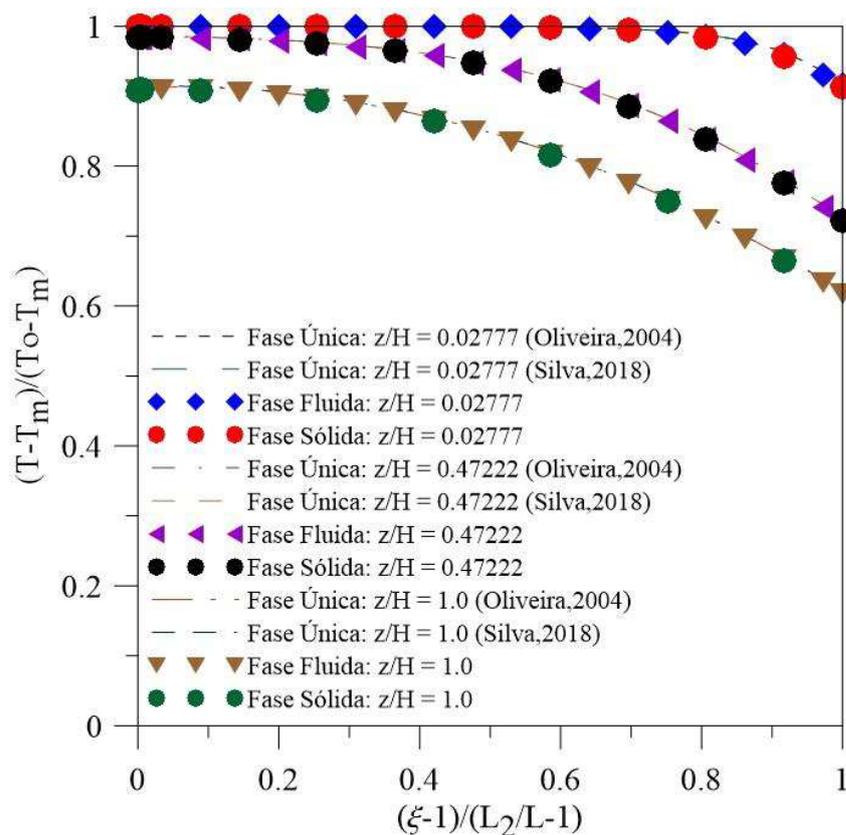
#### 4.2 - Validação do modelo de duas fases

A Figura 4.1 ilustra uma comparação entre os perfis adimensionais de temperatura no interior de um reator cilíndrico de seção transversal circular, obtidos usando o modelo de duas fases (fase fluida + fase sólida) com aqueles obtidos por Oliveira (2004) e por Silva (2018) com o modelo pseudo-homogeneo ou fase única.

A Tabela 4.3 reporta as condições operacionais usadas na simulação.

**TABELA 4.3** – Parâmetros termofísicos usado na simulação para validação do modelo heterogêneo.

Parâmetros								
L <sub>1</sub> (m)	L <sub>2</sub> (m)	H (m)	h <sub>wext</sub> (w/m <sup>2</sup> K)	h <sub>wint</sub> (w/m <sup>2</sup> K)	φ	K <sub>wr</sub> (W/mK)	K <sub>f</sub> = K <sub>s</sub> (W/mK)	ρ <sub>f</sub> = ρ <sub>s</sub> kg/m <sup>3</sup>
0,05	0,050001	0,2	2,0	1,0x10 <sup>-30</sup>	0,4	1,0 x 10 <sup>30</sup>	0,1	1,0948



**FIGURA 4.1** - Perfis adimensionais de temperatura no interior do reator cilíndrico de leito fixo ( $L_2/L_1 = 1,0$ ), obtidos com o modelo heterogêneo (fase flúida e fase sólida) e o modelo pseudo-homogêneo (fase única), ( $B_i = 1,0$ ).

Como pode ser observado na Figura 4.1, não existe diferença visível entre os resultados numéricos obtidos com o modelo pseudo-homogêneo e com o modelo de duas fases, em todas as posições adimensionais, que foram escolhidas para se obter os perfis de temperaturas (em toda altura intermediária e na saída do reator).

É importante frisar que o reator cilíndrico-elíptico quando  $L_1 \rightarrow L_2$ , se reduz a um cilindro circular. O modelo de duas fases se reduz ao modelo particular de única fase quando se utiliza a média ponderada das propriedades termofísicas envolvidas no sistema, para as fases flúida e sólida. Pode-se ver o estudo de transferência de calor em reator cilíndrico-elíptico usando o modelo de única fase nas pesquisas reportadas por Oliveira (2004), Silva Filho (2013) e Silva (2018), que analisaram esse modelo analiticamente e numericamente.

### **4.3 – Avaliação do efeito dos parâmetros geométricos e termofísicos na distribuição de temperatura das fases fluida e sólida no reator de leito fixo**

#### **4.3.1 – Influência da forma geométrica do reator**

##### **4.3.1.1 – Efeito da razão de aspecto ( $L_2/L_1$ ) do reator**

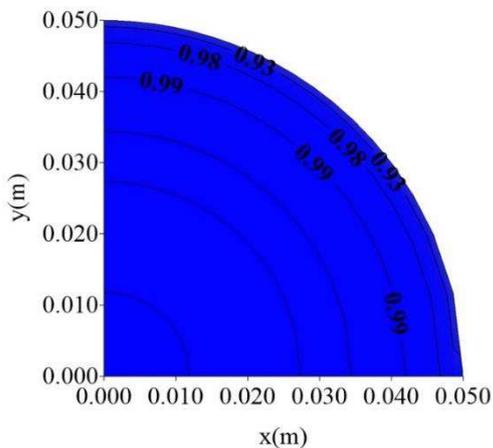
O estudo da razão de aspecto para reatores cilíndricos de leito fixo já vem sendo estudado na literatura a um bom tempo, como pode ser visto em Oliveira (2004), Silva Filho (2013) e Silva (2018). Esse estudo é um requisito fundamental para um bom entendimento dos fenômenos envolvidos no movimento de fluidos e na transferência de calor em reatores de leito compactado.

Foi considerado nesse trabalho o leito compactado com duas fases, ou seja, uma fase sólida e uma fase fluida. A forma das partículas dentro do reator é esferoidal prolata, com esfericidade ( $\epsilon = 0,85$ ). As direções dos interstícios e a localização das partículas dentro do leito não foram consideradas (distribuição aleatória). Assumiu-se o fluxo pistonado do fluido no leito na direção axial e propriedades térmicas dependentes do tipo de material que constituem as fases fluida e sólida.

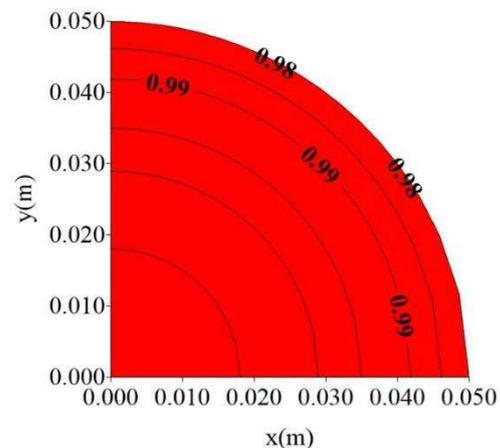
Para analisar o comportamento da distribuição de temperatura no interior do reator de leito compactado a fim de verificar o efeito da razão de aspecto  $L_2/L_1$  no processo de transferência de calor no reator usando o modelo heterogêneo, foram simulados três (3) casos:  $L_2/L_1 = 1,0$  (caso 1),  $L_2/L_1 = 2,0$  (caso 2) e  $L_2/L_1 = 3,0$  (caso 3). Foram fixados os valores dos coeficientes de transferência de calor  $h_{wext} = 2,69 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  e  $h_{wint} = 1,025 \times 10^{-4} \text{ W/m}^2 \text{ K}$ . Considerou-se três alturas de seções do leito compactado nos planos de entrada, metade e saída do reator para as fases fluida e sólida. Nas Figuras 4.2, 4.4 e 4.6 estão ilustradas a distribuição de temperatura das fases fluida e sólida em planos transversais no interior do reator em diferentes posições axiais ( $z/H = 0,0833 \text{ m}$ ,  $0,5277 \text{ m}$  e  $0,9722 \text{ m}$ ), para as razões de aspecto  $L_2/L_1 = 1,0$ ,  $2,0$  e  $3,0$ , respectivamente. As Figuras 4.3, 4.5 e 4.7, ilustram este mesmo resultado, mas em diferentes planos longitudinais ( $x/L = 0$  e  $y/L =$

0). Para o caso  $L_2/L_1 = 1,0$  (Figura 4.2), como esperado, observa-se gradientes radiais de temperatura bastantes elevados próximo a parede do reator. Na medida em que se aumenta a posição axial ao longo do reator, esses gradientes radiais aumentam. Percebe-se, em qualquer altura do leito, que os gradientes radiais de temperatura são levemente maiores para o fluido em relação ao sólido, e que a região próxima a superfície do reator ( $x = 0,10$  m) é a mais afetada pelo resfriamento. Nas Figuras 4.2, 4.4 e 4.6, vê-se que, na medida em que se aumenta a área da seção transversal do reator, refletido pelo parâmetro  $L_2/L_1 = 1,0, 2,0$  e  $3,0$ , aumenta-se os gradientes radiais de temperatura, mantendo-se ainda os maiores gradientes para o fluido, contudo, surge gradientes angulares de temperatura, o que não ocorre para o caso uma seção transversal circular.

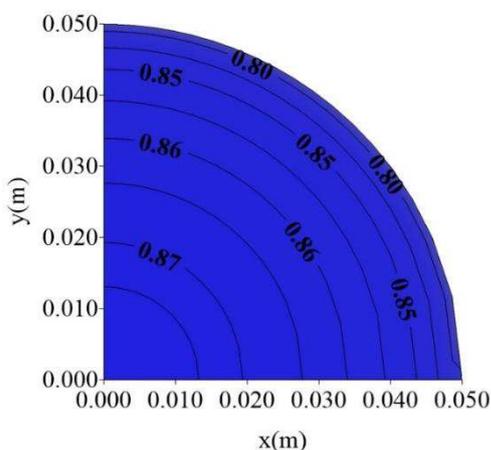
Foi observado que a porosidade do leito diminuiu com o aumento da área da seção transversal do reator, ou seja, com valores de razões de aspecto geométrico variando de  $L_2/L_1 = 1,0, 2,0$  e  $3,0$ , obteve-se porosidade de  $0,44, 0,40$  e  $0,37$ , respectivamente. As mudanças não foram muito intensas de modo que afetassem de forma significativa o campo de temperatura.



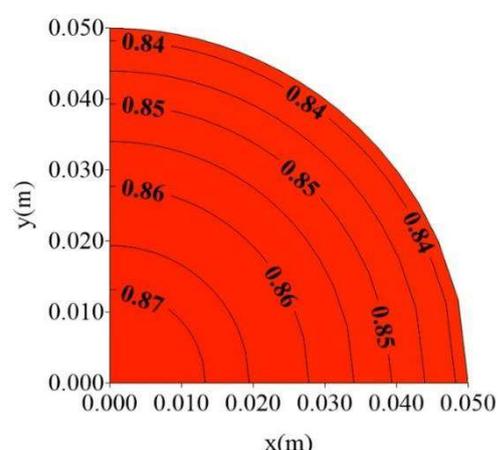
(a) Fase fluida,  $z/H=0,0833$



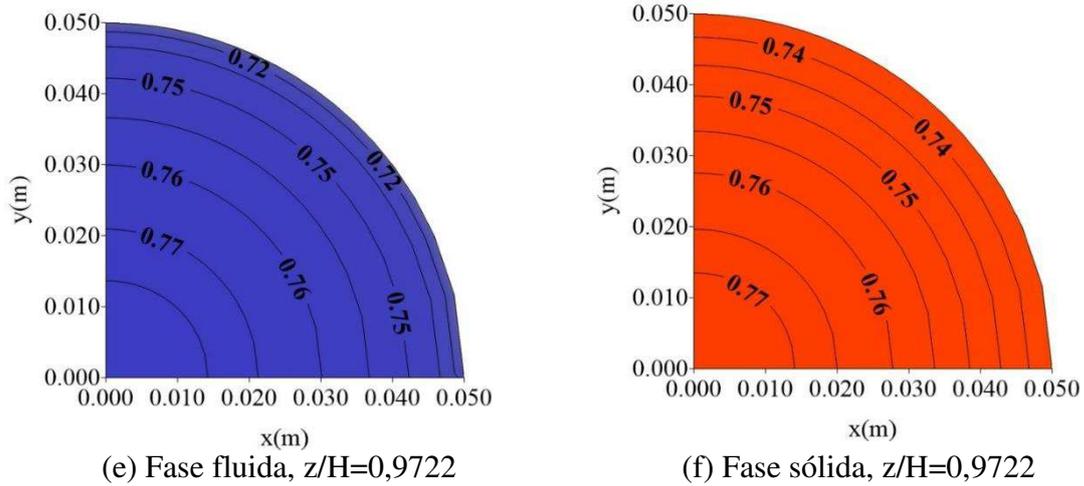
(b) Fase sólida,  $z/H=0,0833$



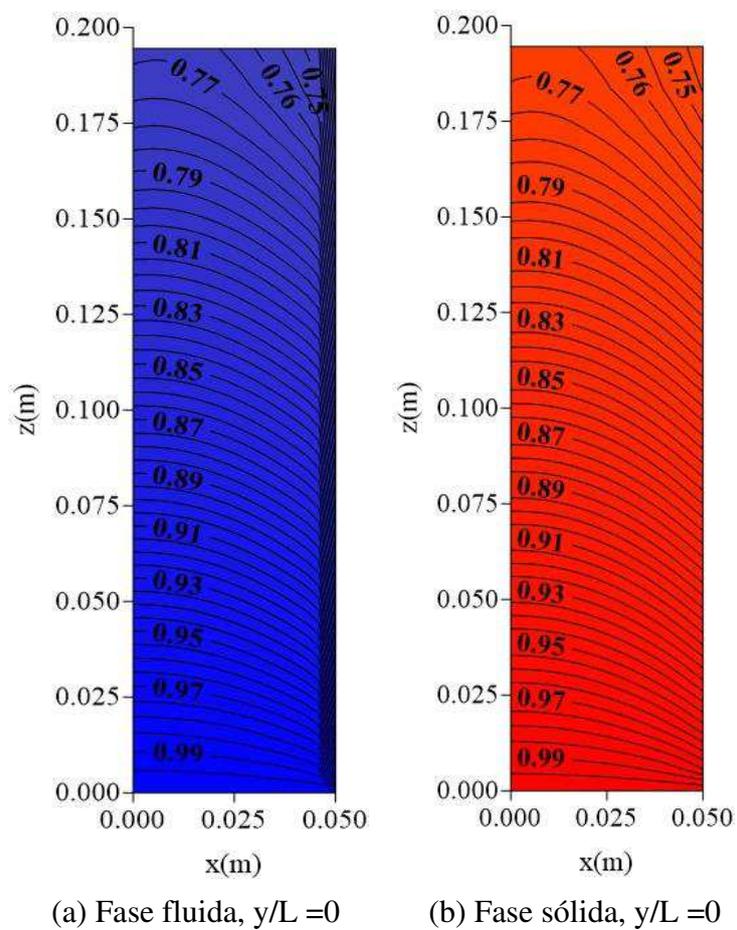
(c) Fase fluida,  $z/H=0,5277$

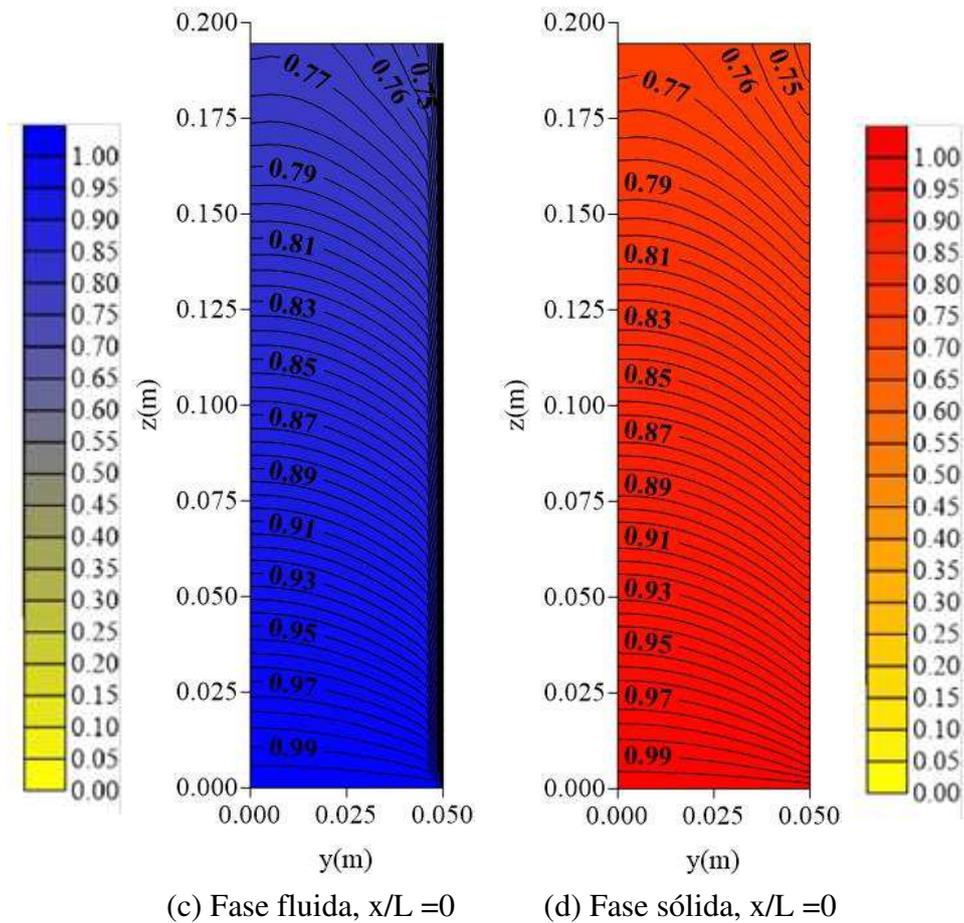


(d) Fase sólida,  $z/H=0,5277$

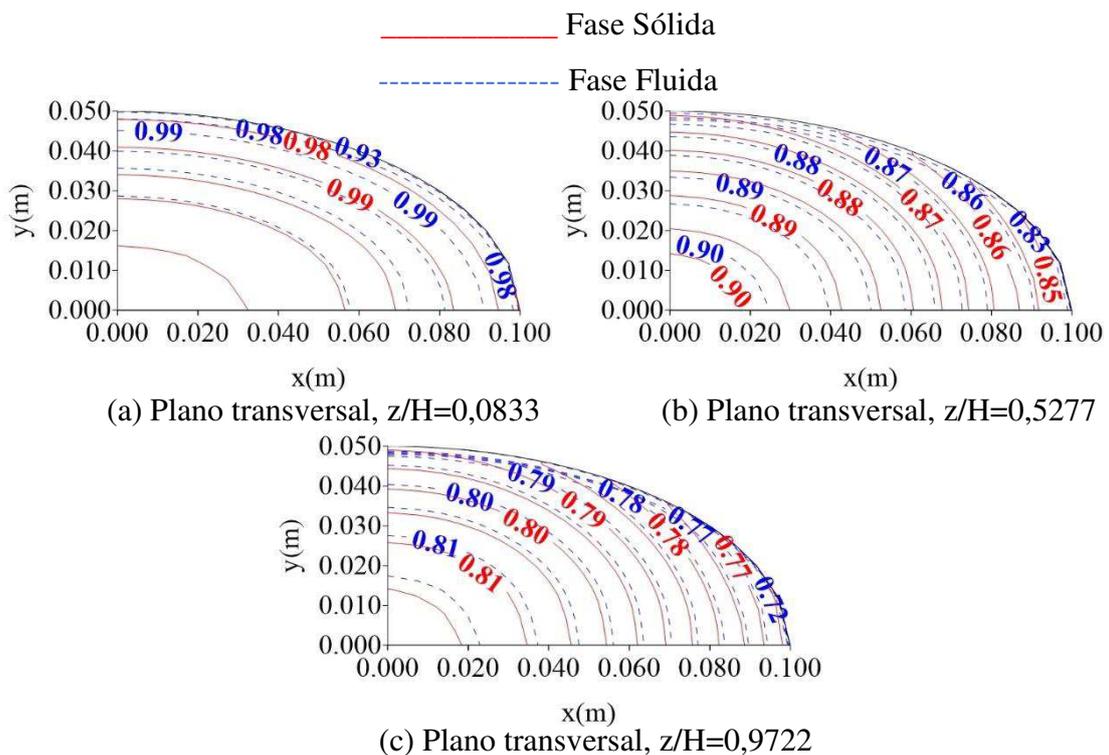


**FIGURA 4.2** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $L_2/L_1 = 1,0$  (Caso 1).





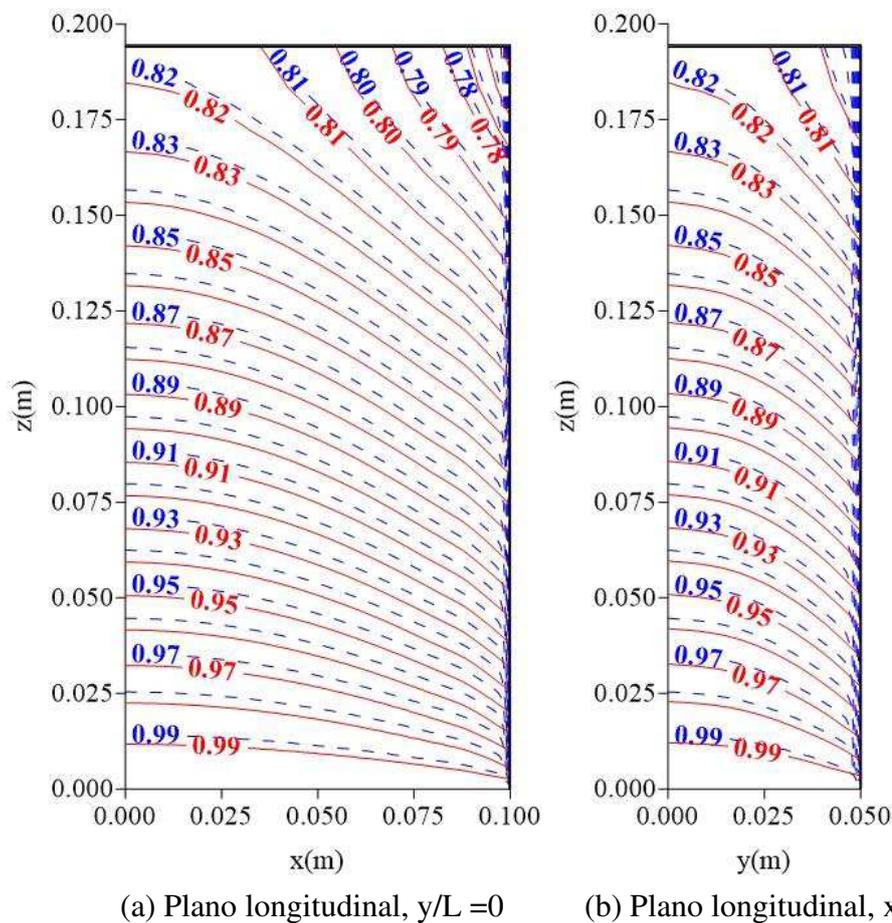
**FIGURA 4.3** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $L_2/L_1 = 1,0$  (Caso 1).



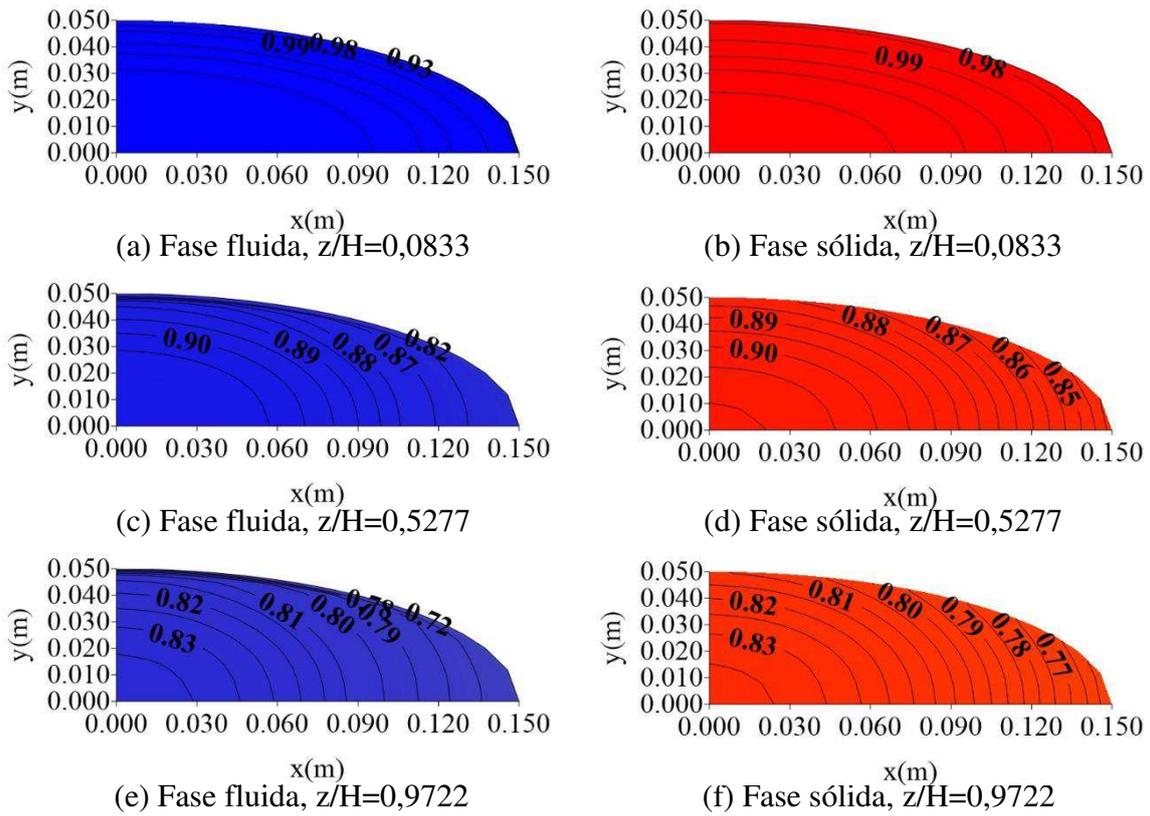
**FIGURA 4.4** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $L_2/L_1 = 2,0$  (Caso 2).

Como esperado, observa-se nas Figuras 4.2, 4.4 e 4.6 que existe um deslocamento das isolinhas de maiores temperaturas para as posições cada vez mais próxima do centro do reator de leito fixo, evidenciando o efeito de ponta, relacionado com a forma geométrica do reator.

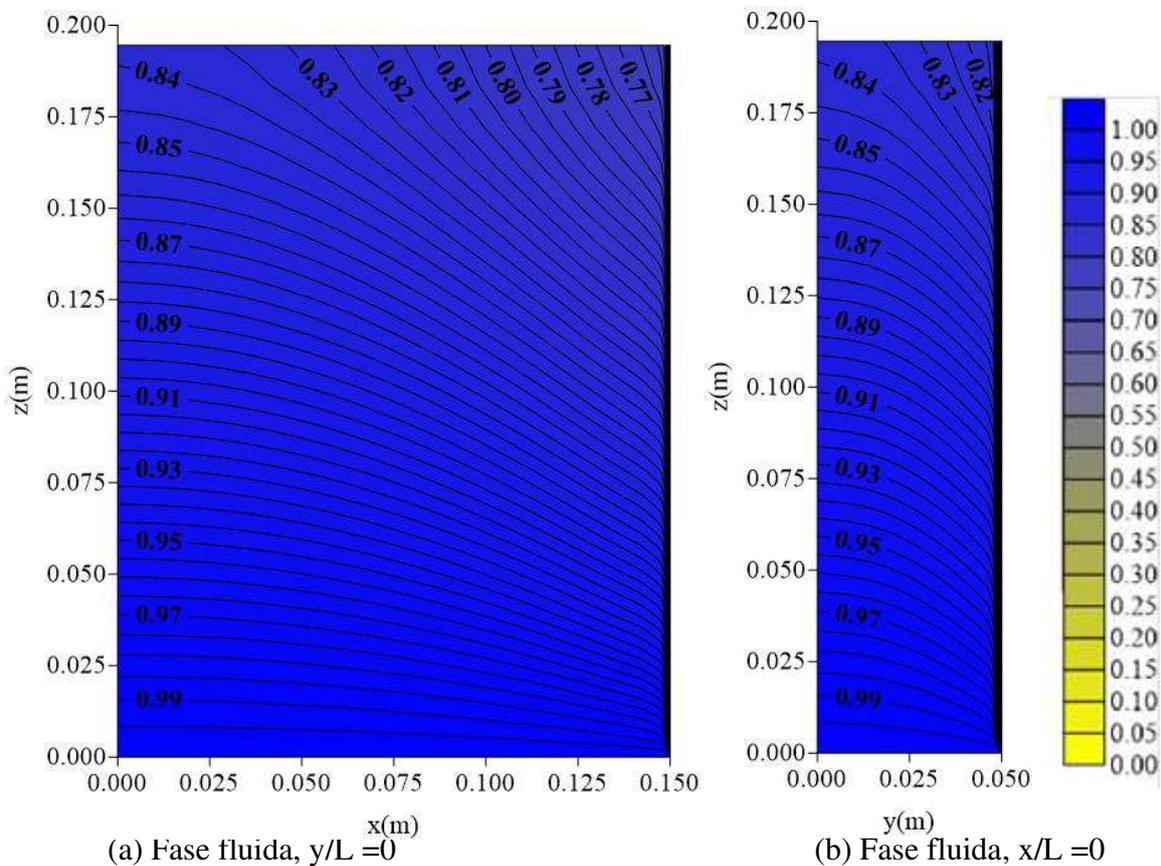
Pode-se ver nas Figuras 4.3, 4.5 e 4.6, que os gradientes axiais de temperatura são levemente menores do que os gradientes radiais de temperatura.

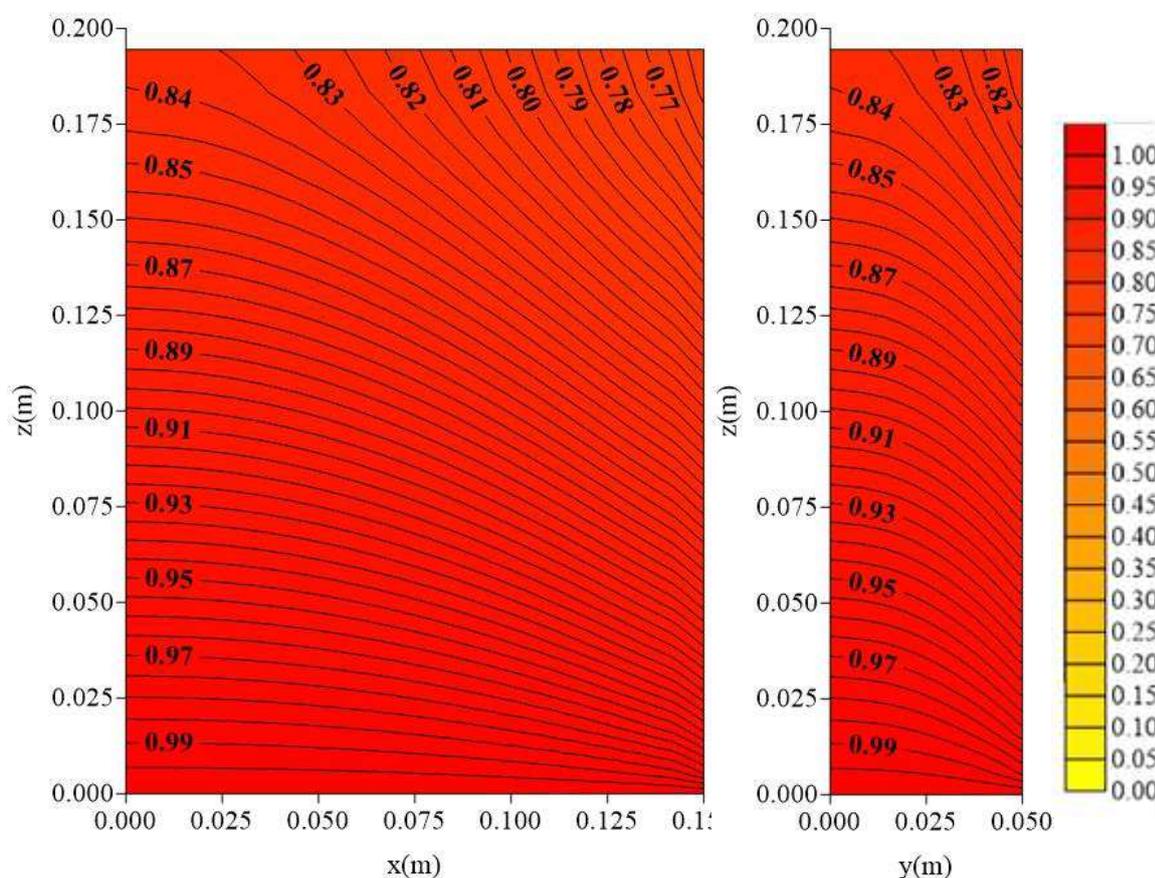


**FIGURA 4.5** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $L_2/L_1 = 2,0$  (Caso 2).



**FIGURA 4.6** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $L_2/L_1 = 3,0$  (Caso 3).



(a) Fase sólida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $x/L = 0$ 

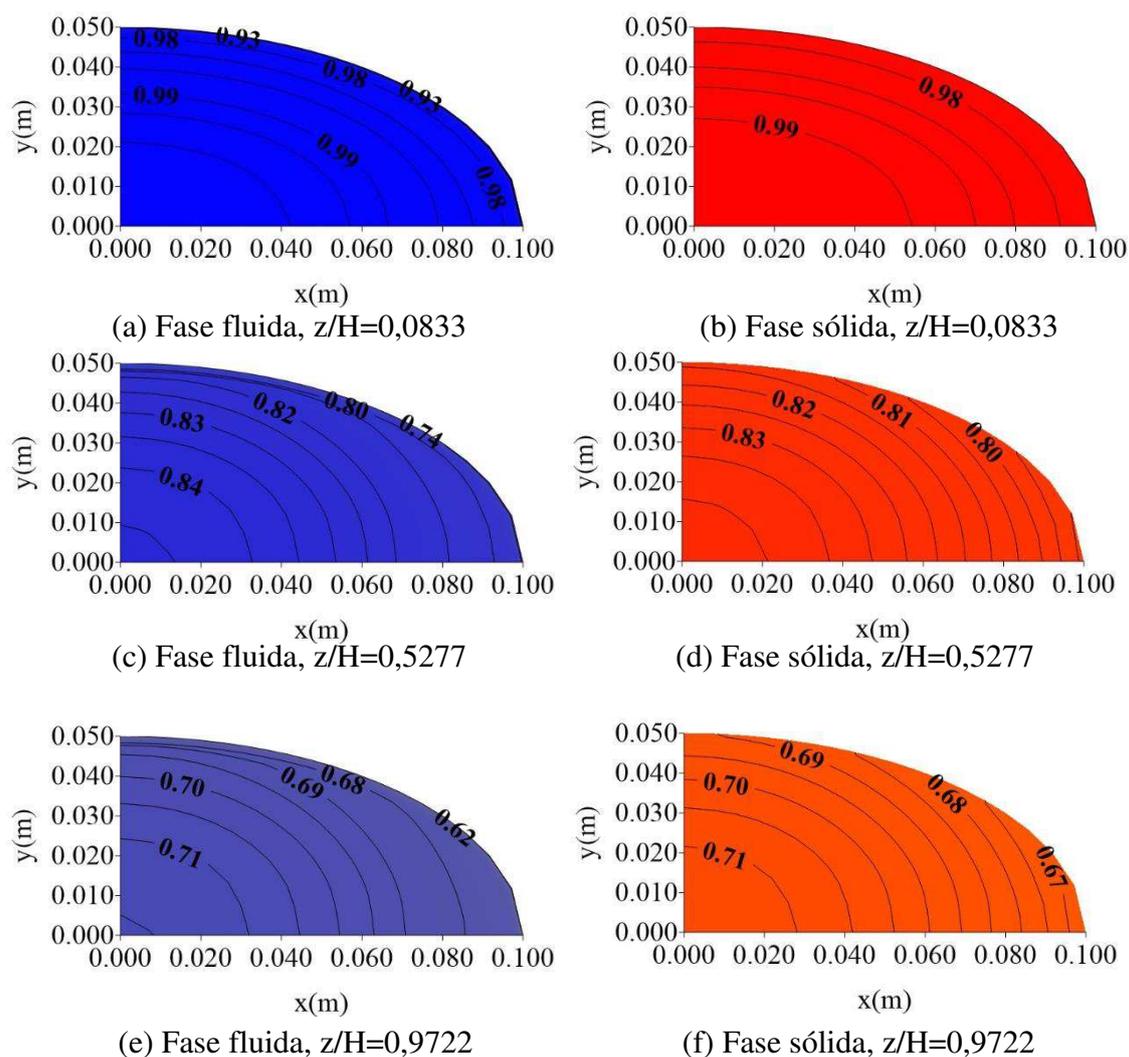
**FIGURA 4.7** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $L_2/L_1 = 3,0$  (Caso 3).

#### 4.3.1.2 - Efeito da altura do reator

As Figuras 4.8 e 4.10 ilustram a distribuição de temperatura das fases fluida e sólida em planos transversais no interior do reator em diferentes posições axiais ( $z/H = 0,0833$  m,  $0,5277$  m e  $0,9722$  m) para as alturas do reator  $H = 0,3$  m (Caso 4) e  $H = 0,4$  m (Caso 5), respectivamente. As Figuras 4.9 e 4.11 ilustram este mesmo comportamento em diferentes planos longitudinais ( $x/L = 0$  e  $y/L = 0$ ).

Analisando as Figuras 4.8 e 4.10, tomando como referência o caso 2, verifica-se que, quando se aumenta a altura do reator ( $H$ ) de  $0,30$  m para  $0,40$  m, há uma pequena

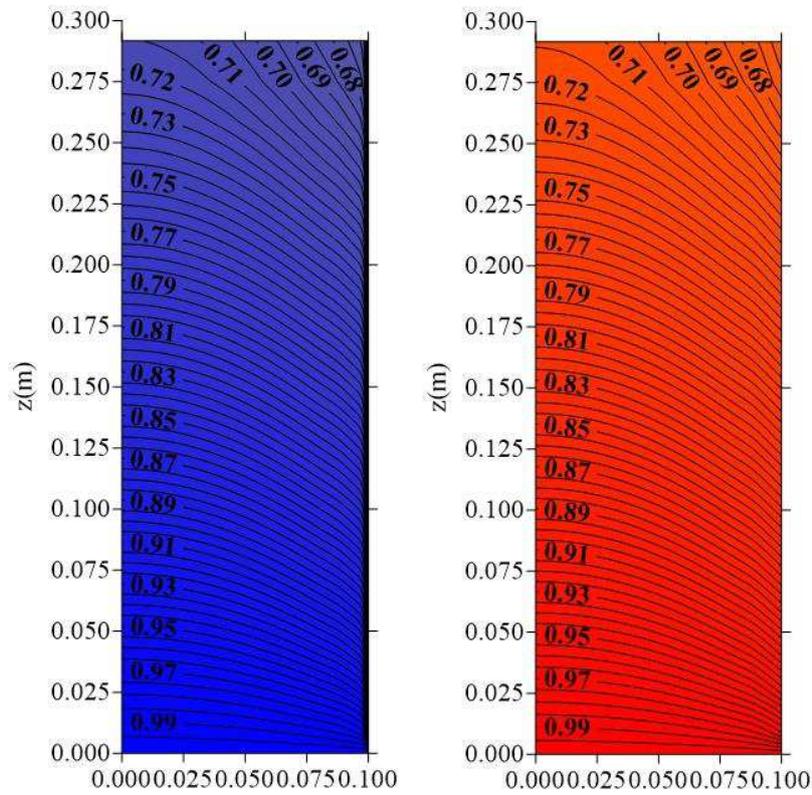
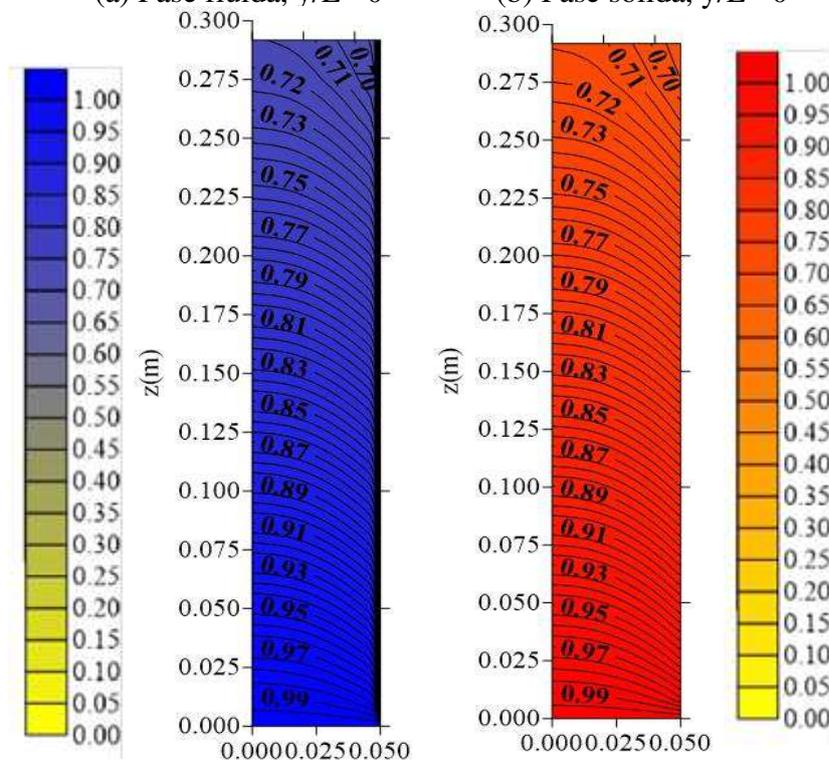
diferença no valor do gradiente de temperatura na direção radial entre a fase fluida e a fase sólida. Logo, pode-se dizer que, ao se aumentar a altura do leito, ocorrerá uma maior transferência de calor do fluido (ar) no interior do reator para a parede do reator. Observa-se ainda que um maior resfriamento acontece no maior valor de H (altura do leito) em virtude de haver maior área para troca de calor. Pode-se dizer que os gradientes de temperatura das fases fluida e sólida tiveram quase a mesma variação, tanto radial quanto axial, individualmente.



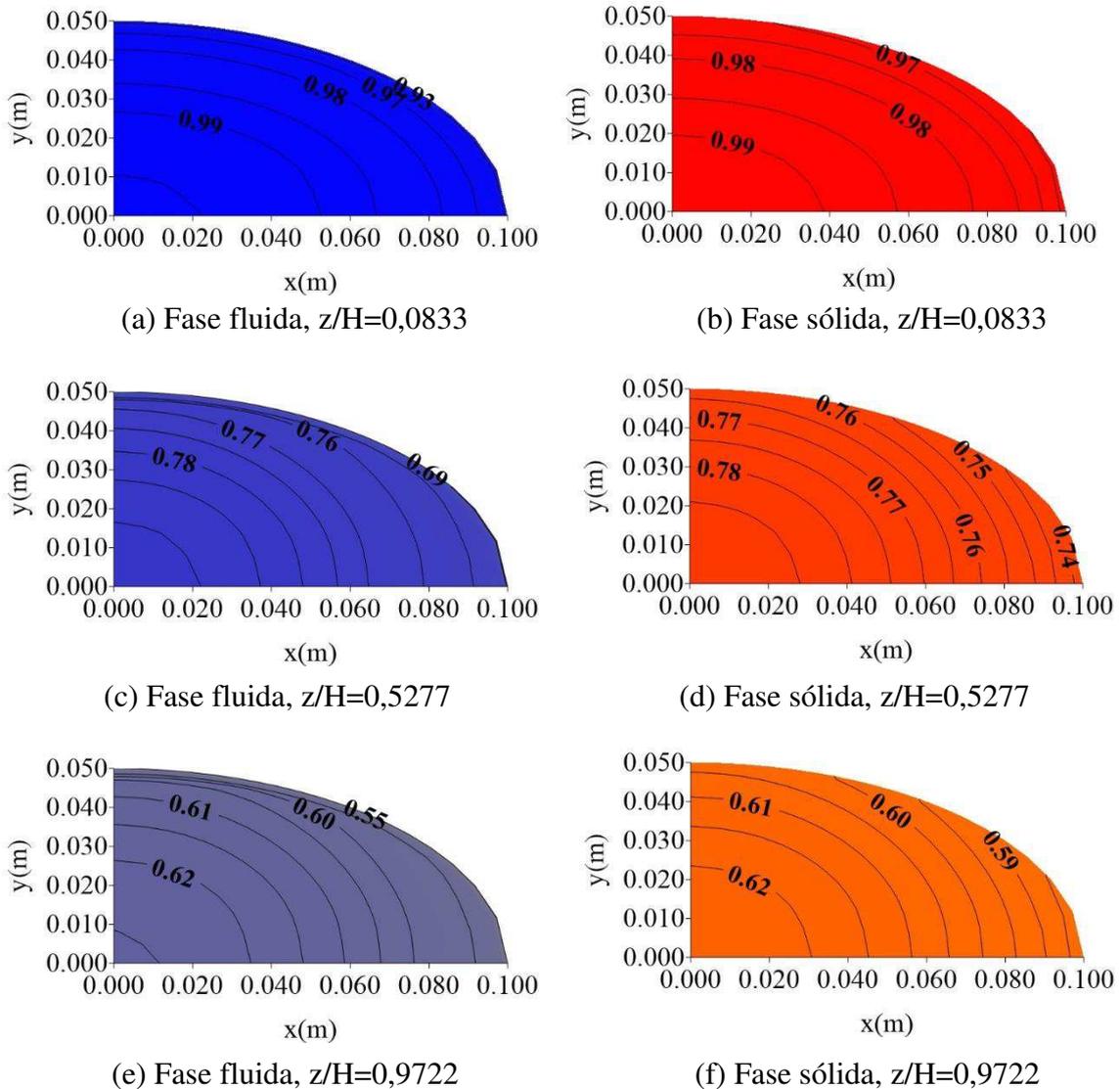
**FIGURA 4.8** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $H = 0,3$  m (Caso 4).

Agora, analisando ainda as Figuras 4.9 e 4.11 percebe-se que os gradientes axiais de temperaturas são maiores na entrada do reator para ambas as fases. As isolinhas de

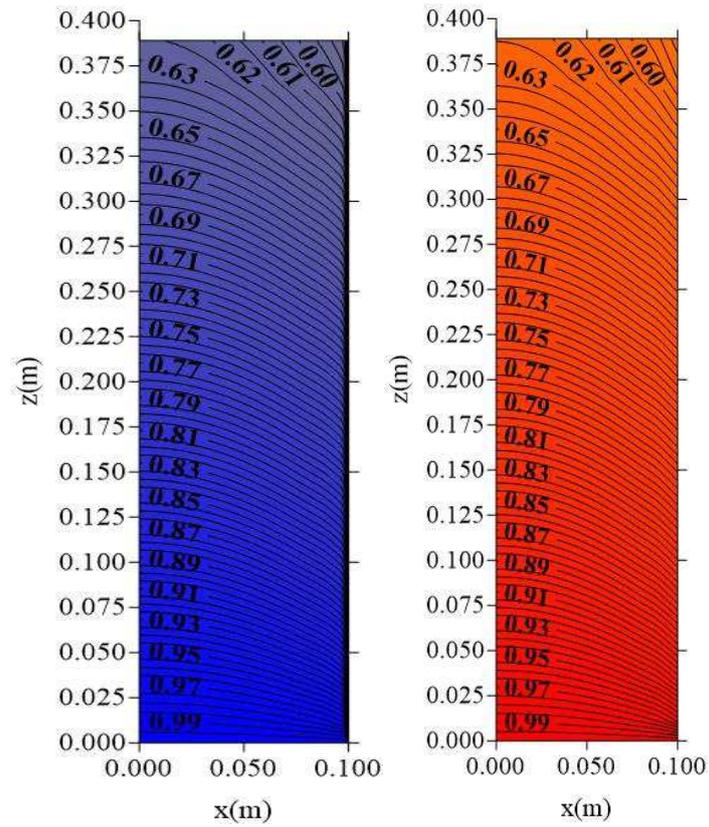
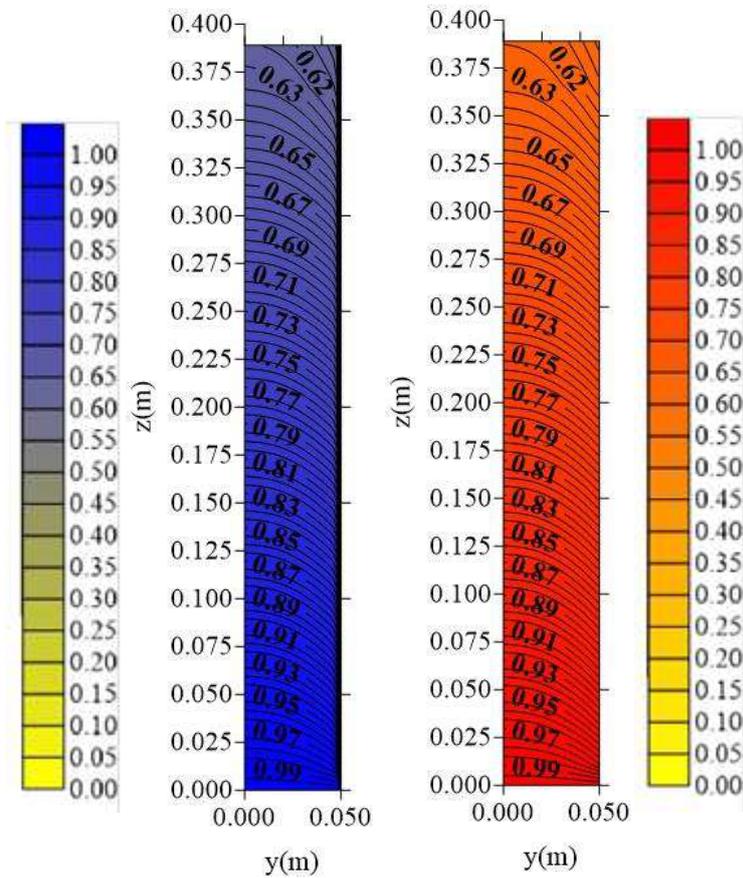
temperatura são maiores para as posições cada vez mais próxima do centro do que na saída do reator de leito fixo tanto para as posições axiais quanto radiais.

(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$ (c) Fase fluida,  $x/L = 0$ (d) Fase sólida,  $x/L = 0$

**FIGURA 4.9** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $H = 0,3$  m (Caso 4).



**FIGURA 4.10** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $H = 0,4$  m (Caso 5).

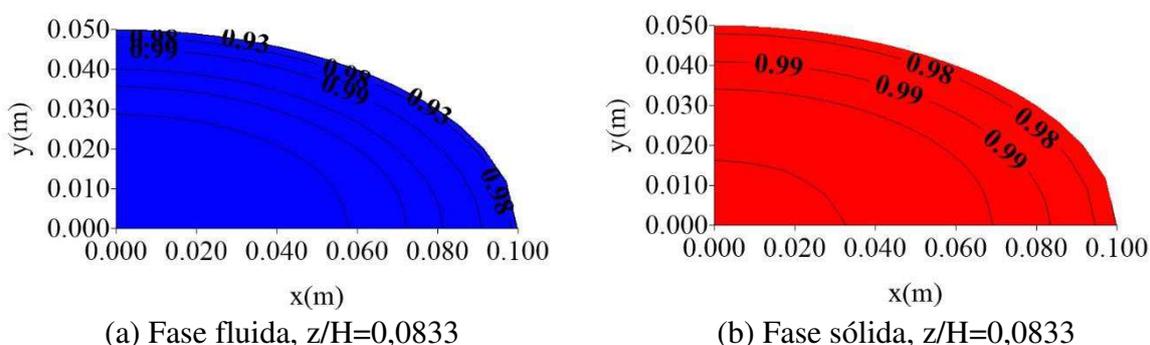
(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$ (c) Fase fluida,  $x/L = 0$ (d) Fase sólida,  $x/L = 0$

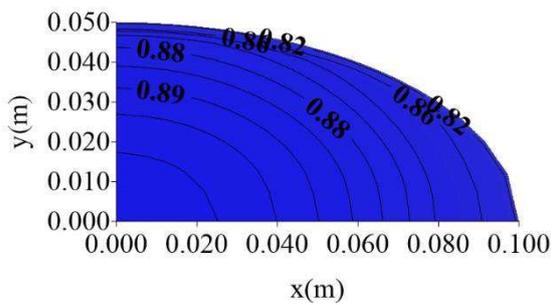
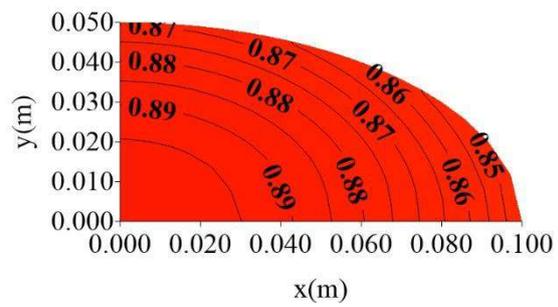
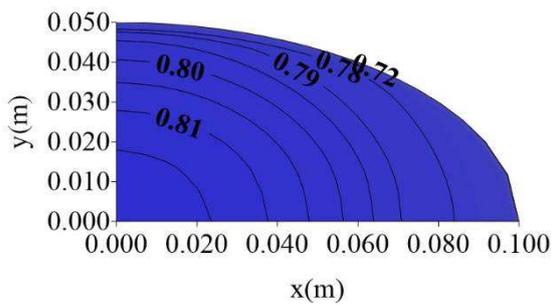
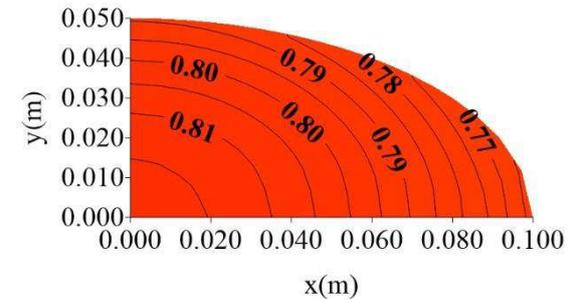
**FIGURA 4.11** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $H = 0,4$  m (Caso 5).

### 4.3.2 - Influência do material da parede do reator

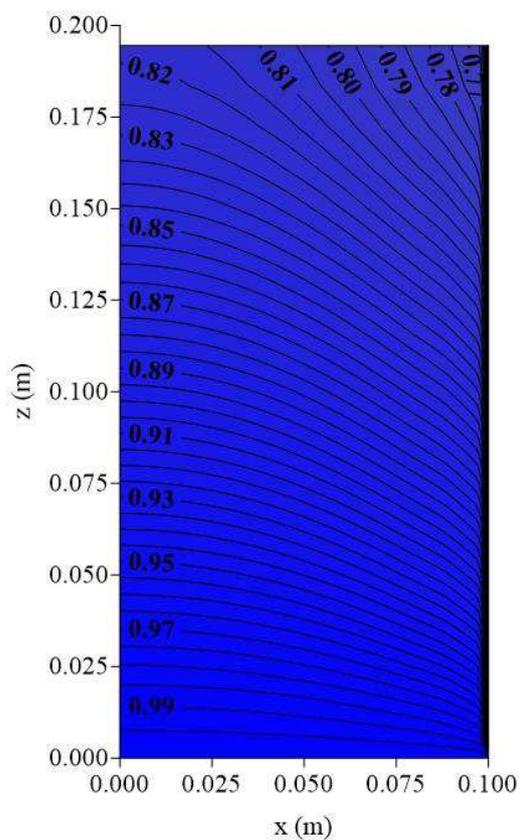
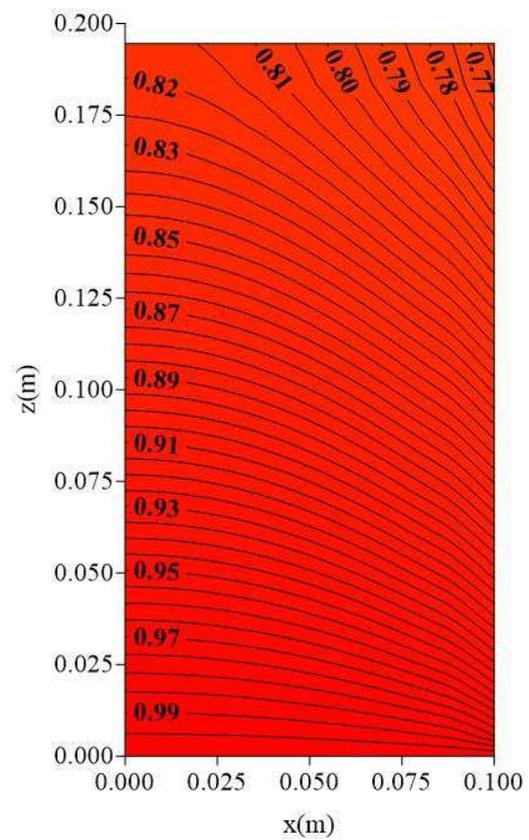
Para avaliar o efeito do material da parede do reator na distribuição de temperatura no interior do equipamento selecionou-se três tipos de materiais: metal (cobre puro), polímero (polipropileno) e cerâmico (sílica fundida), conforme pode ser visto nas Tabelas 3.1 e 3.2. A distribuição de temperatura no interior do reator em diferentes planos transversais, para o caso onde a parede é metálica é mostrada na Figura 4.4 (Caso 2), que será o caso referência para os demais casos analisados. As Figuras 4.12 e 4.14 mostram a distribuição de temperatura no interior do reator para o caso onde a parede é polimérica (Caso 6) e cerâmica (Caso 7), respectivamente, levando em consideração ambas as fases. Já as Figuras 4.13 e 4.15 ilustram este mesmo resultado em planos longitudinais.

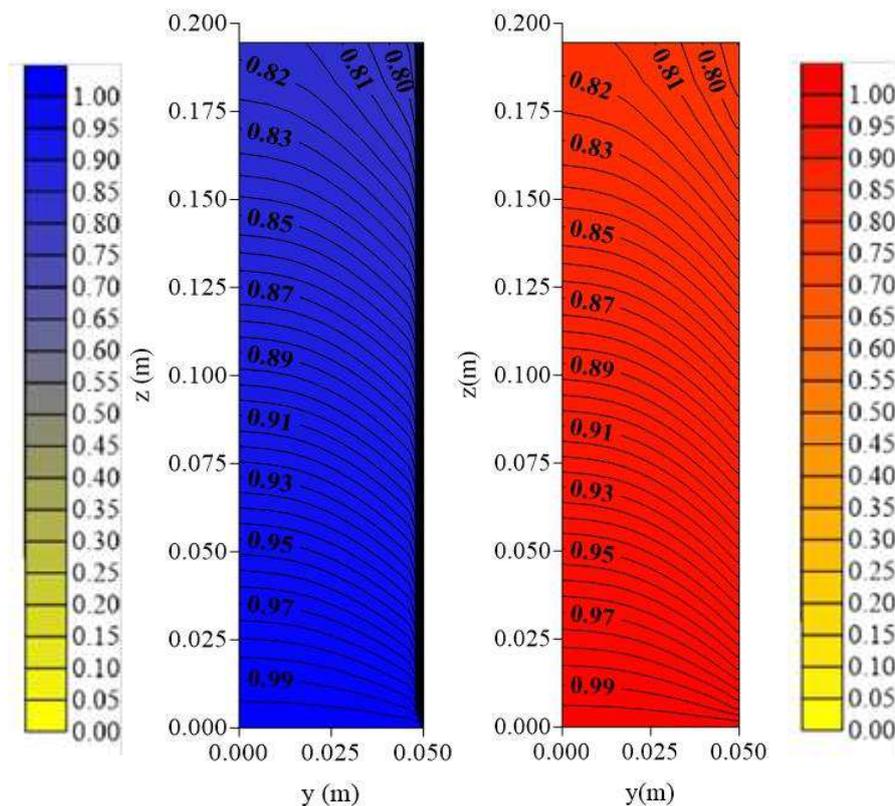
Verificou-se, após análise das Figuras 4.12 a 4.15, que os resultados são muito similares, do ponto de vista dos gradientes de temperatura para as fases fluida e sólida, axialmente e radialmente. Em se tratando de transferência do calor, quem está dominando o fenômeno é o coeficiente de transferência do calor convectivo externo. No entanto, sob o aspecto do efeito do calor no equipamento, os metais são mais recomendáveis para a parede do reator por serem mais resistentes ao calor e a corrosão.



(c) Fase fluida,  $z/H=0,5277$ (d) Fase sólida,  $z/H=0,5277$ (e) Fase fluida,  $z/H=0,9722$ (f) Fase sólida,  $z/H=0,9722$ 

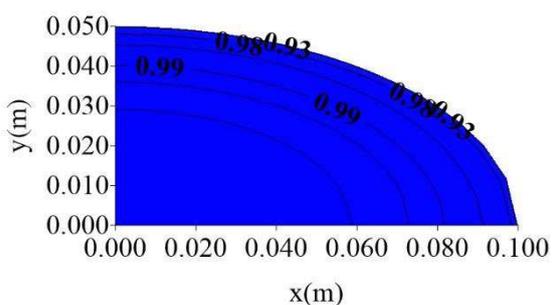
**FIGURA 4.12** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $K_{wr} = 1,38 \text{ W/m K}$  (Caso 6).

(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$

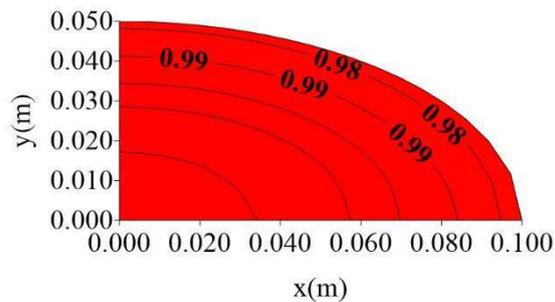


(c) Fase fluida,  $x/L = 0$     (d) Fase s3lida,  $x/L = 0$

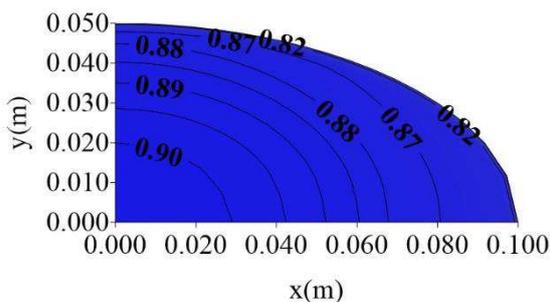
**FIGURA 4.13** - Distribui33o de temperatura adimensional das fases fluida e s3lida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cil3ndrico-el3ptico de leito empacotado, para  $K_{wr} = 1,38 \text{ W/m K}$  (Caso 6).



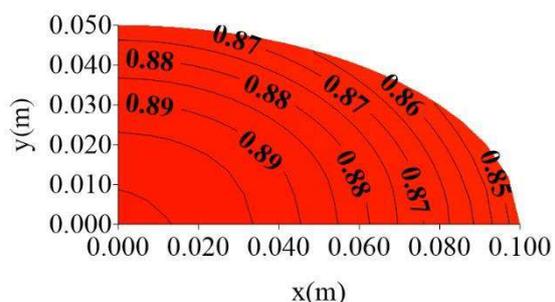
(a) Fase fluida,  $z/H = 0,0833$



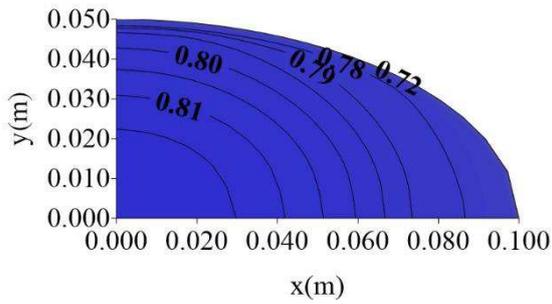
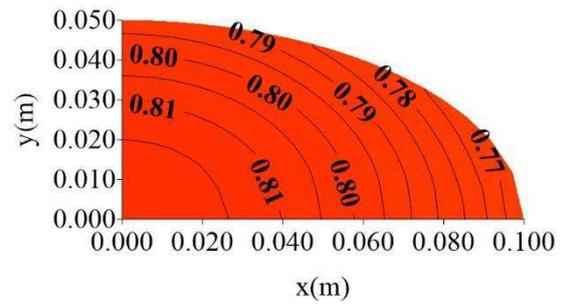
(b) Fase s3lida,  $z/H = 0,0833$



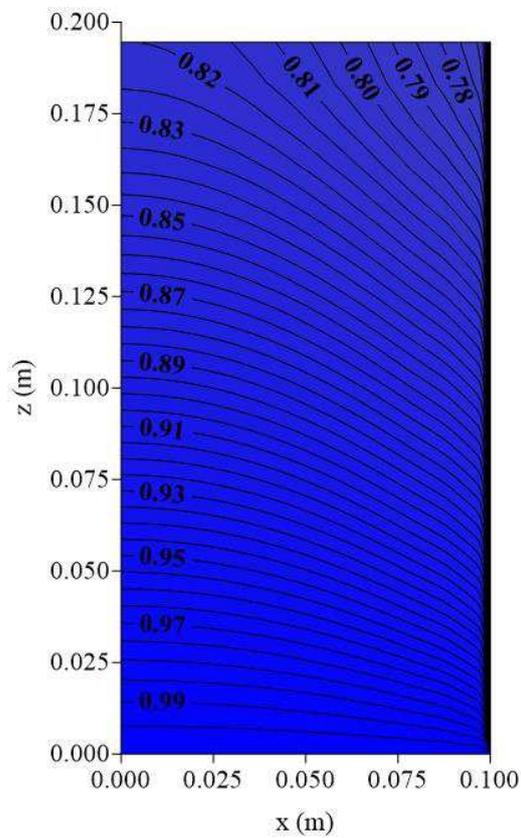
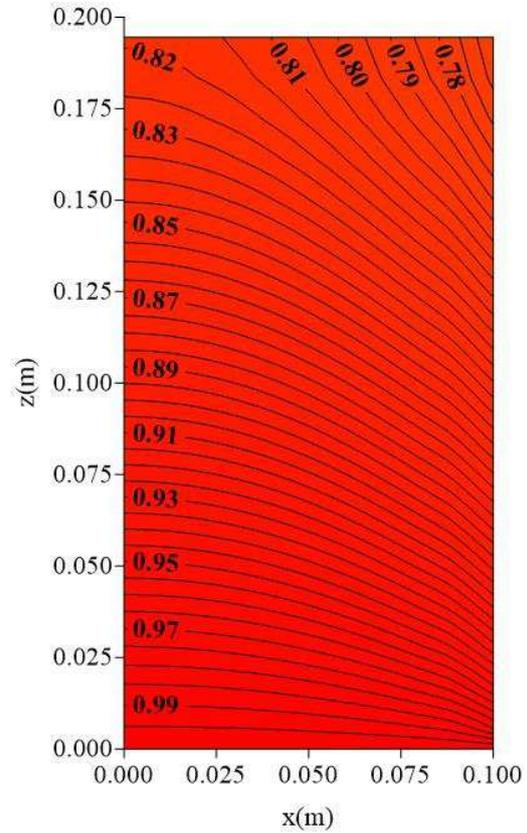
(c) Fase fluida,  $z/H = 0,5277$

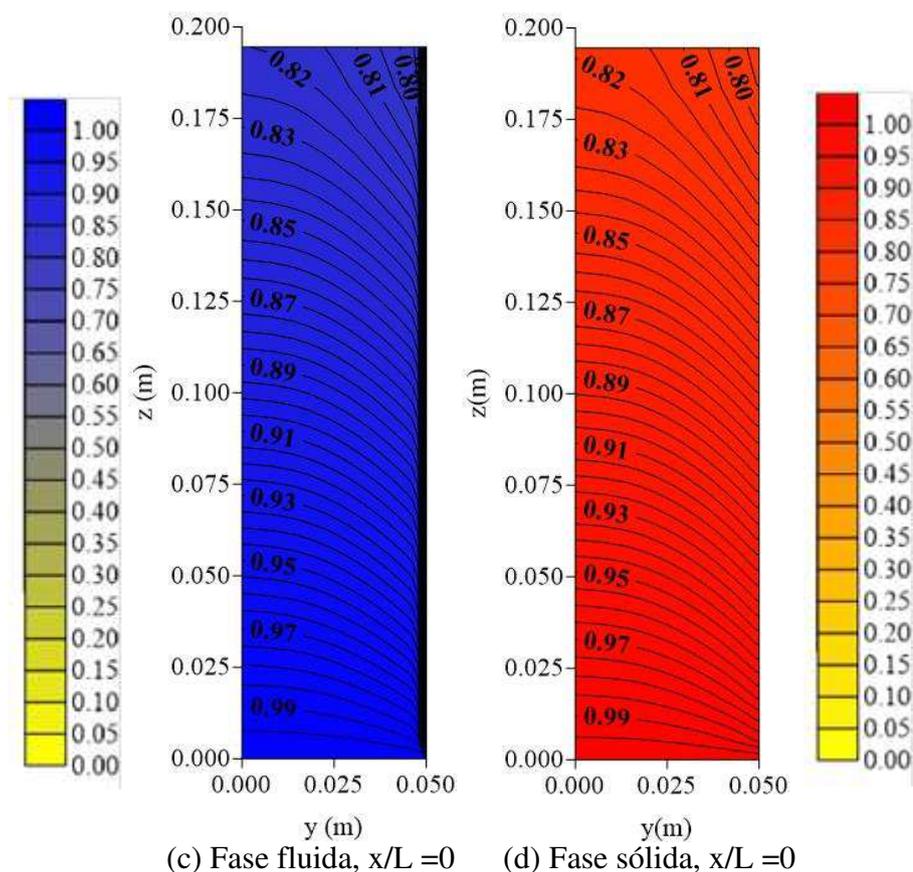


(d) Fase s3lida,  $z/H = 0,5277$

(e) Fase fluida,  $z/H=0,9722$ (f) Fase sólida,  $z/H=0,9722$ 

**FIGURA 4.14** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $K_{wr} = 0,12 \text{ W/m K}$  (Caso 7).

(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$



**FIGURA 4.15** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $K_{wr} = 0,12 \text{ W/m K}$  (Caso 7).

### 4.3.3 – Influência do fluido refrigerante

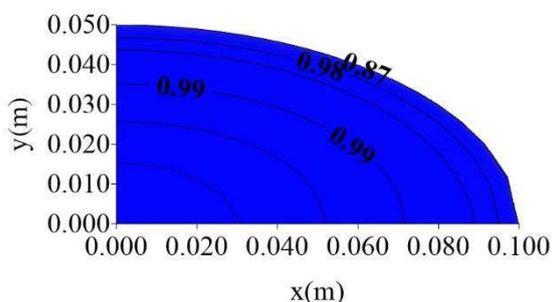
#### 4.3.3.1 - Efeito do coeficiente de transferência de calor convectivo na parede externa do reator

As Figuras 4.4, 4.16 e 4.18 (casos 2, 8 e 9 da Tabela 3.2) mostram a distribuição de temperatura na seção transversal do reator nas posições axiais  $z/H = 0,0833$ ,  $0,5277$  e  $0,9722$  para três diferentes coeficientes de transferência de calor da parede externa do reator. Os coeficientes de transferência de calor foram determinados a partir da velocidade do fluido que percola a parede externa do reator, do número de Nusselt, do diâmetro

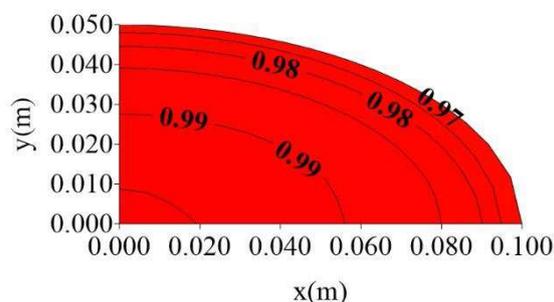
hidráulico e dos parâmetros termofísicos, conforme Equação (3.123). Os coeficientes de transferência de calor convectivos encontrados e utilizados nos casos 2, 8 e 9 foram  $h_{wext} = 2,69 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $h_{wext} = 4,72 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  e  $h_{wext} = 10,53 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , respectivamente.

Uma comparação entre as Figuras 4.4, 4.16 e 4.18, para porosidade constante e igual 0.4, evidenciou que, aumentando-se o coeficiente de transferência de calor por convecção na parede externa do reator tem-se uma maior troca de calor com o líquido percolante, pela parede do reator. Isto pode ser constatado observando-se as regiões de maiores variações de temperaturas, nas três figuras. Analisando ainda essas figuras, verifica-se que, aumentando-se o coeficiente de transferência de calor de  $h_{wext} = 2,69 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , para  $h_{wext} = 10,53 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , nas seções de alturas  $z/H = 0,0833$ ,  $0,5277$  e  $0,9722$  do leito, o gradiente radial de temperatura para as fases fluida e sólida são maiores nas proximidades da parede do reator de leito fixo, sendo esses gradientes de temperaturas para a fase fluida mais elevados do que aqueles obtidos para a fase sólida. As isolinhas de temperaturas radialmente e axialmente são mais intensas nas proximidades do plano de entrada do reator em ambas as fases, conforme pode ser observado nas Figuras 4.16 a 4.19. Quando o coeficiente de transferência de calor aumenta, a temperatura diminui na direção do escoamento para as fases fluida e sólida conforme pode ser observado nas figuras. Os gradientes axiais de temperatura das Figuras 4.17 e 4.19 são maiores na seção de entrada e menores na seção de saída do reator.

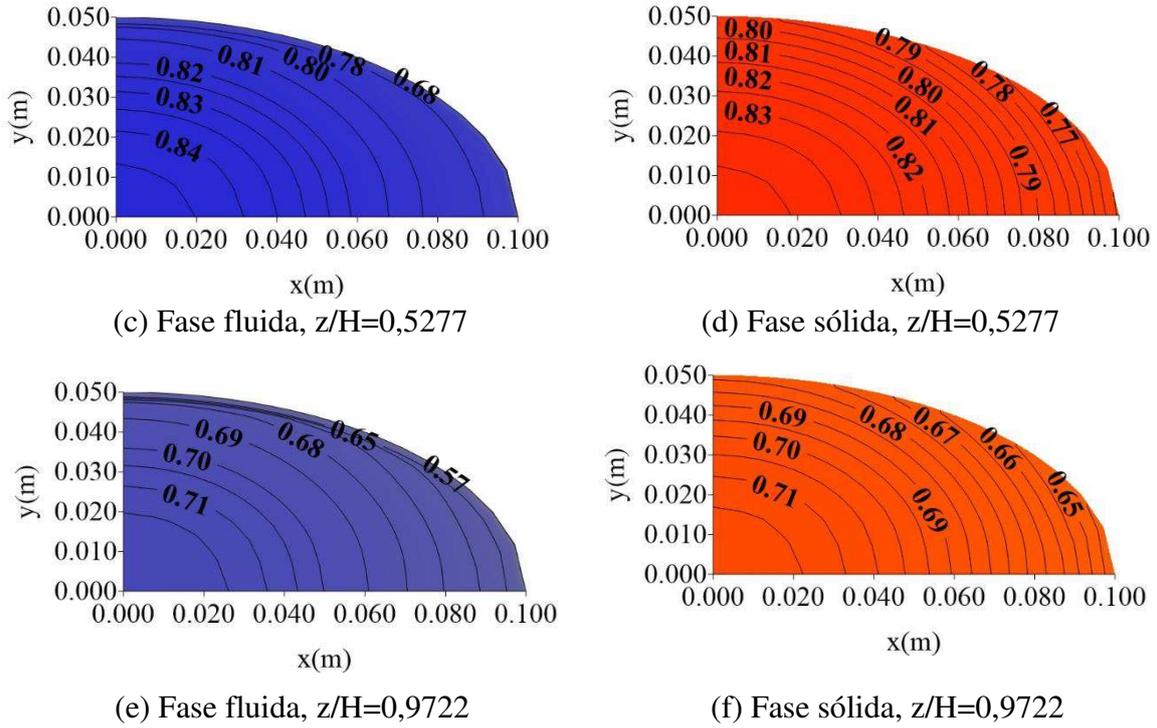
A partir dos planos transversais e axiais, verifica-se claramente o efeito da ponta, na distribuição de temperatura no interior do reator.



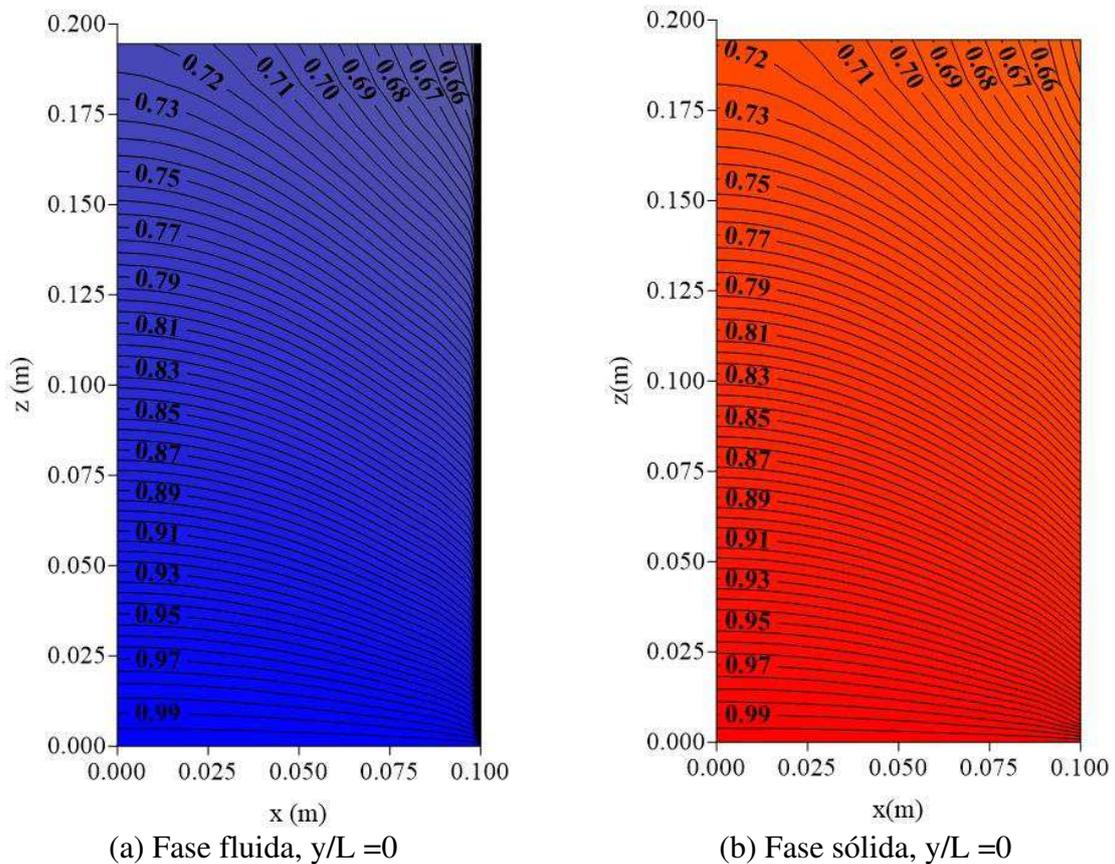
(a) Fase fluida,  $z/H=0,0833$

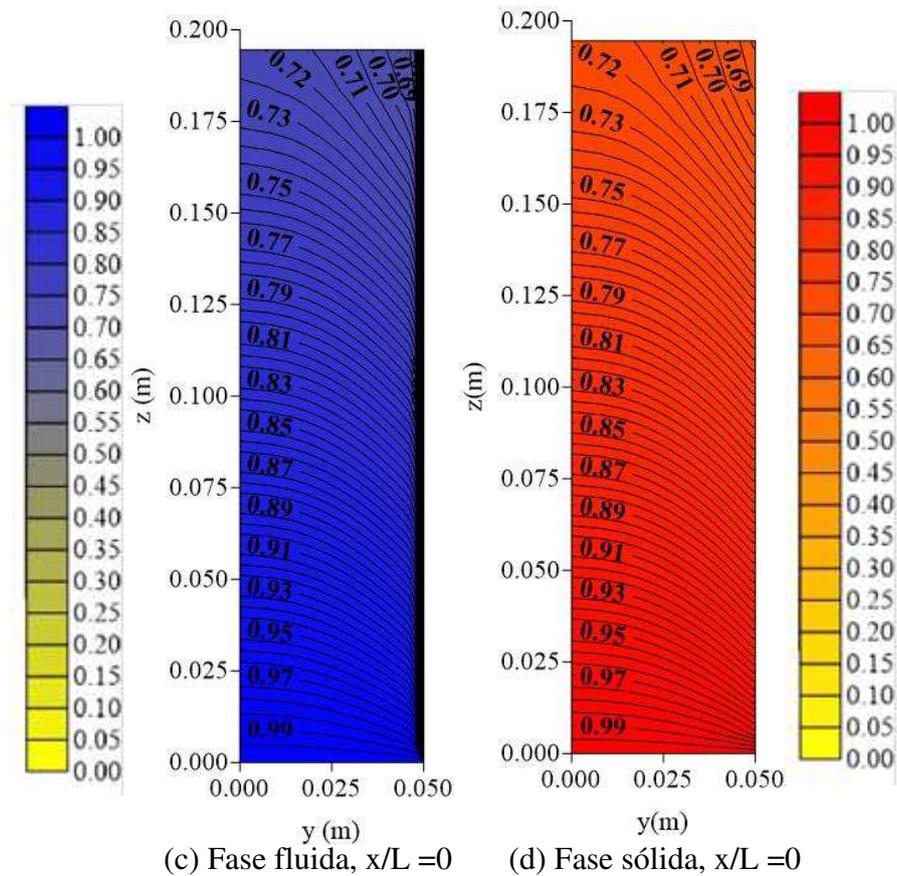


(b) Fase sólida,  $z/H=0,0833$

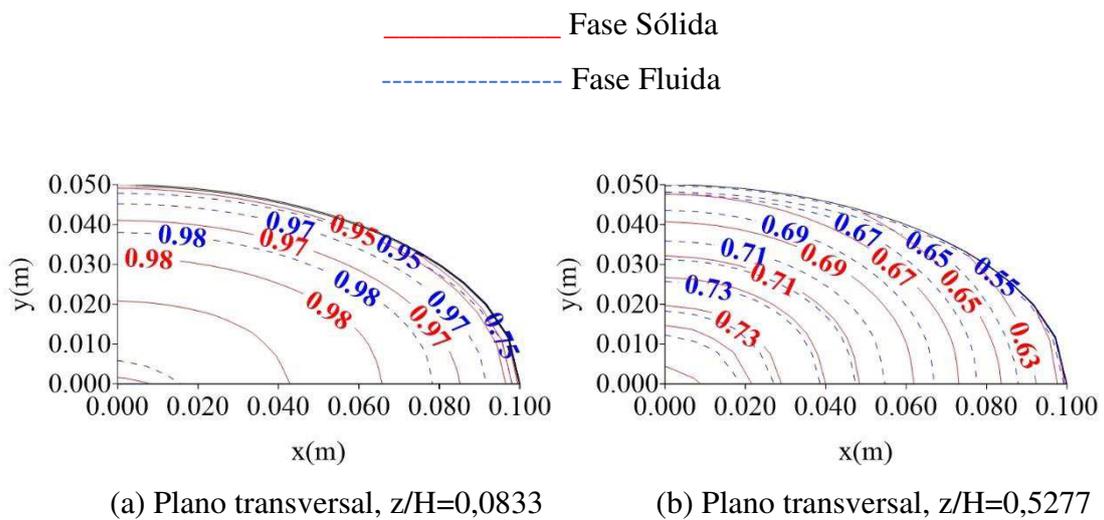


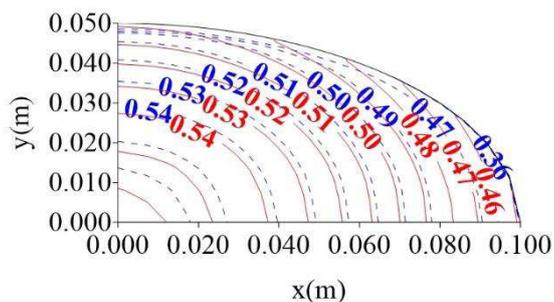
**FIGURA 4.16** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $h_{wext} = 4,72 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  (Caso 8).



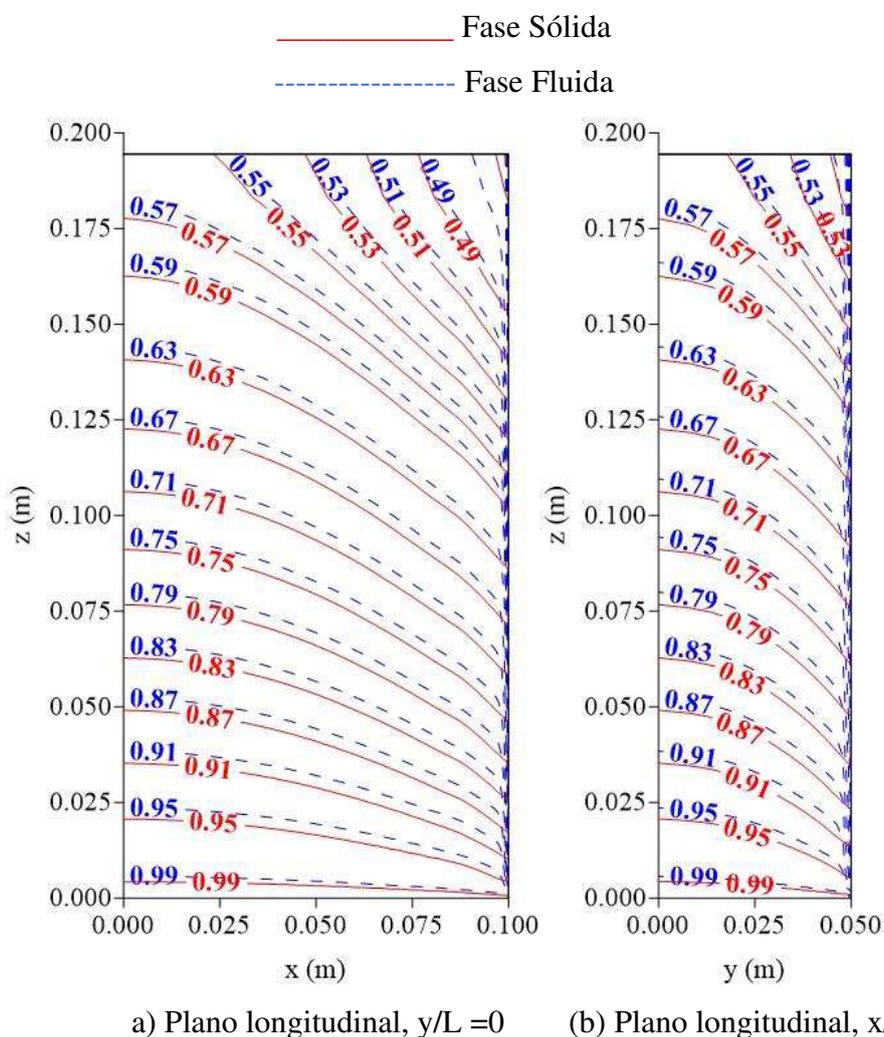


**FIGURA 4.17** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $h_{wext} = 4,72 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  (Caso 8).



(c) Fase transversal,  $z/H=0,9722$ 

**FIGURA 4.18** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $h_{wext} = 10,53 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  (Caso 9).



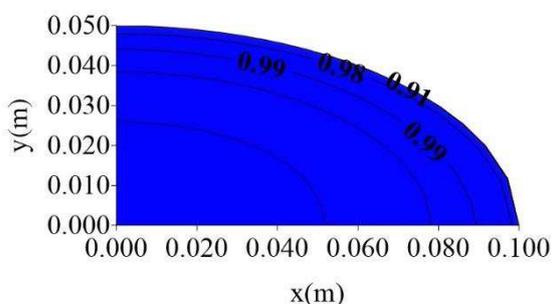
**FIGURA 4.19** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $h_{wext} = 10,53 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  (Caso 9).

### 4.3.3.2 – Efeito da temperatura do fluido de resfriamento

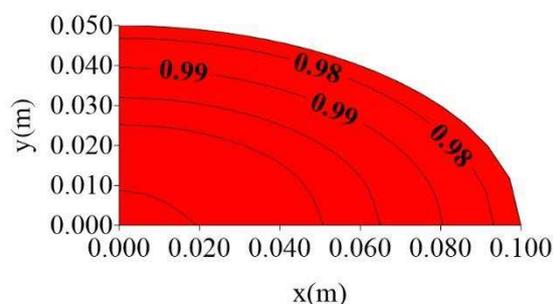
As Figuras 4.20 e 4.22 ilustram a distribuição de temperatura das fases fluida e sólida em planos transversais no interior do reator em diferentes posições axiais ( $z/H = 0,0833$  m,  $0,5277$  m e  $0,9722$  m) para diferentes temperaturas médias do fluido refrigerante, que escoam na região anular que recobre o reator (casos 2, 10 e 11 da Tabela 3.2). As Figuras 4.21 e 4.23 ilustram estes mesmos resultados, contudo em diferentes planos longitudinais ( $x/L = 0$  e  $y/L = 0$ ).

Verificou-se que, diminuindo a temperatura do fluido que percola o reator de  $30^{\circ}\text{C}$  para  $20^{\circ}\text{C}$  e  $10^{\circ}\text{C}$ , os coeficientes de transferência de calor convectivo na parede externa do reator não teve um efeito significativo. Para as temperaturas de resfriamento igual a  $10^{\circ}\text{C}$ ,  $20^{\circ}\text{C}$  e  $30^{\circ}\text{C}$ , obteve-se  $h_{\text{wext}} = 2,60$   $\text{W/m}^2$   $\text{K}$  e  $h_{\text{wext}} = 2,66$   $\text{W/m}^2$   $\text{K}$ , respectivamente. Analisando as Figuras 4.20 a 4.22, verificou-se que a temperatura no interior do reator nas seções localizadas em  $z/H = 0,0833$ ,  $0,5277$  e  $0,9722$  do leito, diminuem axialmente e radialmente, sendo os gradientes axiais de temperatura mais elevados no plano de entrada do reator cilíndrico-elíptico. Percebe-se que os valores dos gradientes axiais de temperatura diminuem na direção do escoamento, e geram um deslocamento das isolinhas de maiores temperaturas para posições cada vez mais próximos do centro do reator de leito fixo tanto para a fase fluida quanto para a fase sólida.

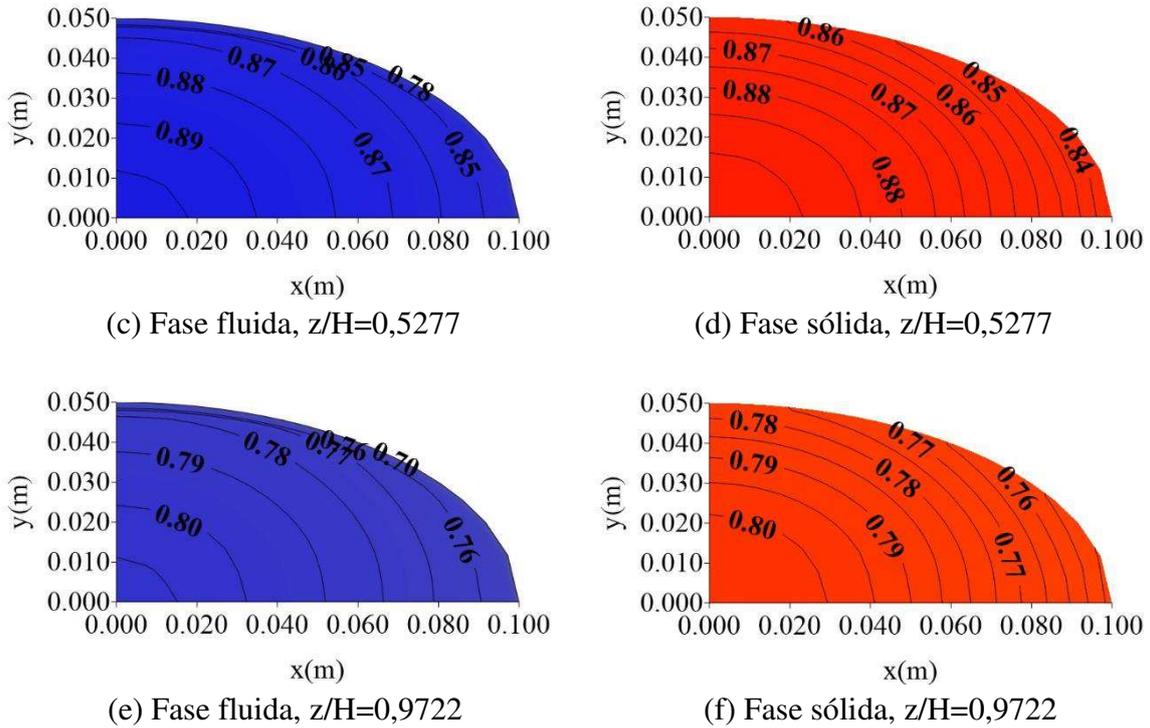
De forma geral, verifica-se que a temperatura na fase sólida é maior do que a temperatura da fase fluida, à medida que o fluido escoam axialmente no interior do reator.



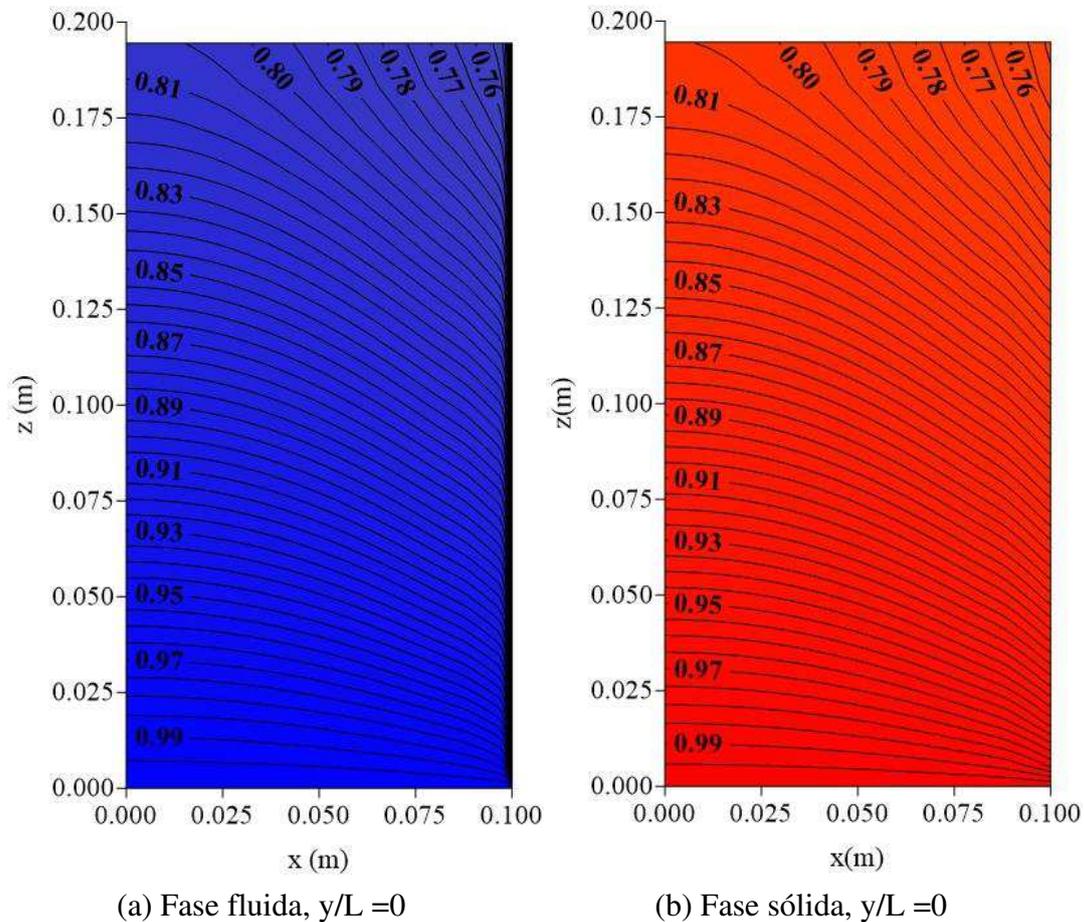
(a) Fase fluida,  $z/H=0,0833$

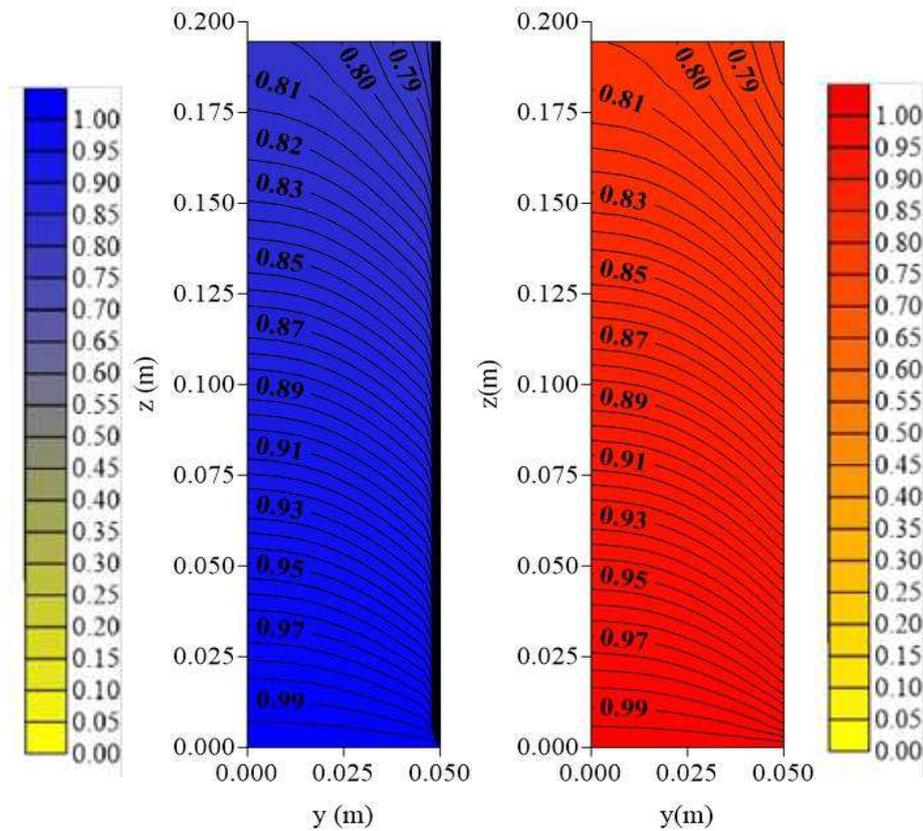


(b) Fase sólida,  $z/H=0,0833$



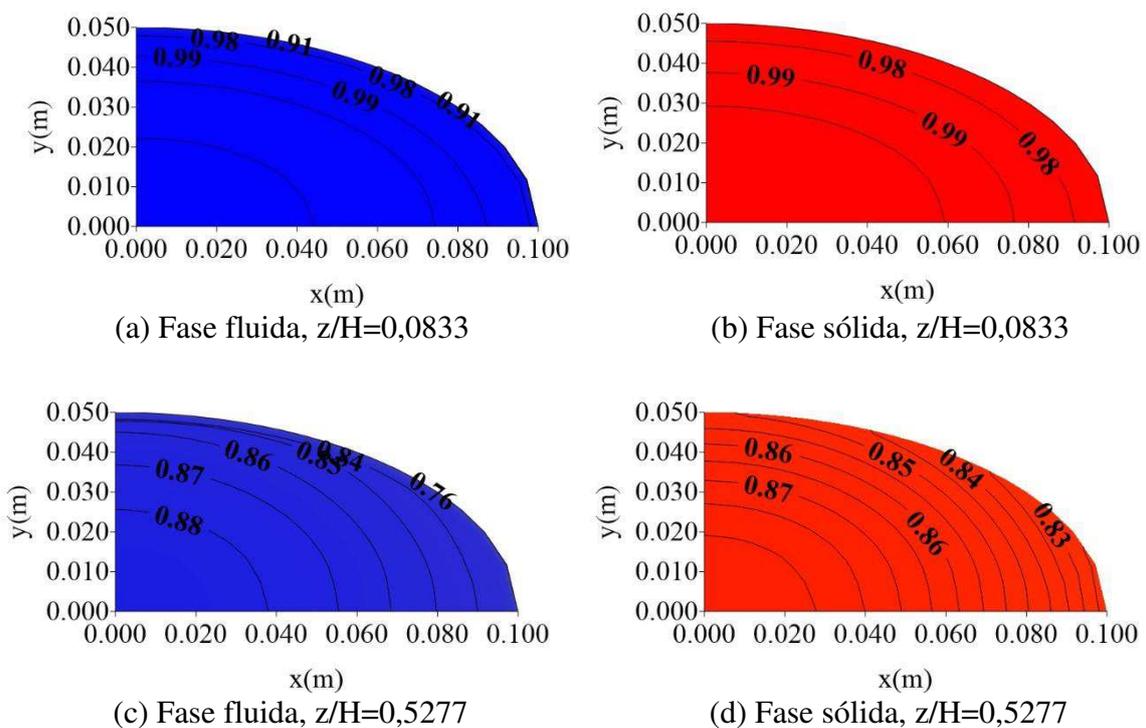
**FIGURA 4.20** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 20^{\circ}\text{C}$  (Caso 10).





(c) Fase fluida,  $x/L = 0$       (d) Fase sólida,  $x/L = 0$

**FIGURA 4.21** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 20^\circ\text{C}$  (Caso 10).

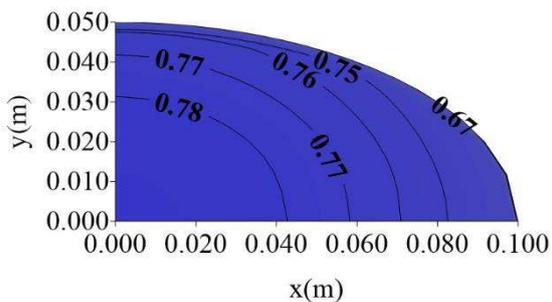
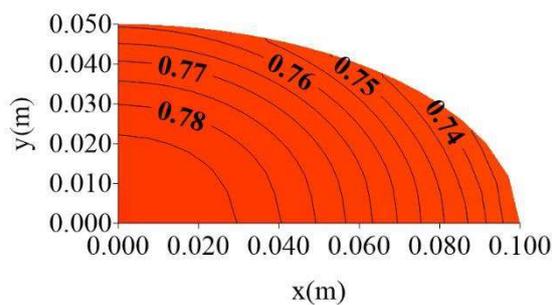


(a) Fase fluida,  $z/H=0,0833$

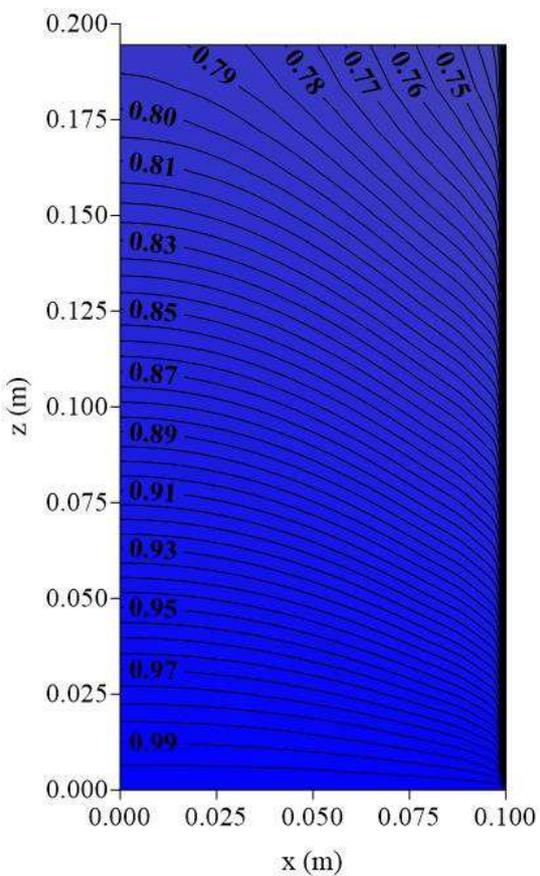
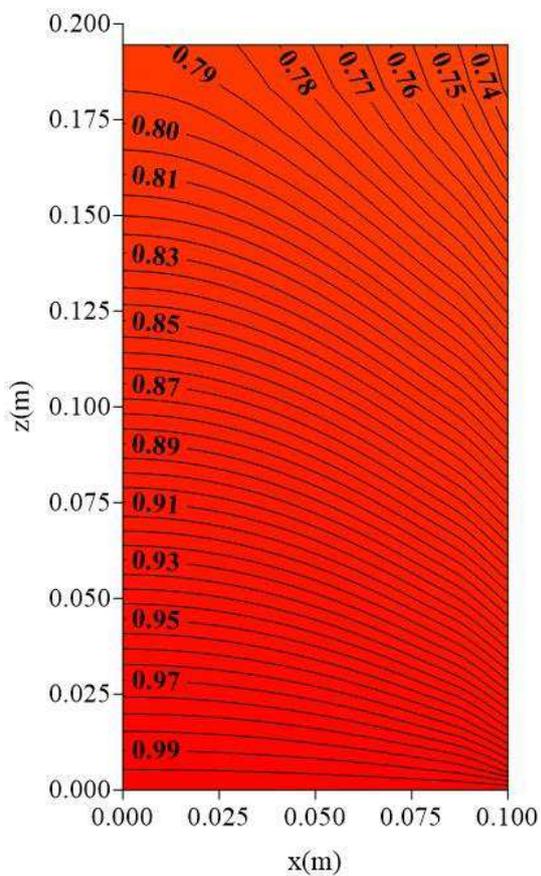
(b) Fase sólida,  $z/H=0,0833$

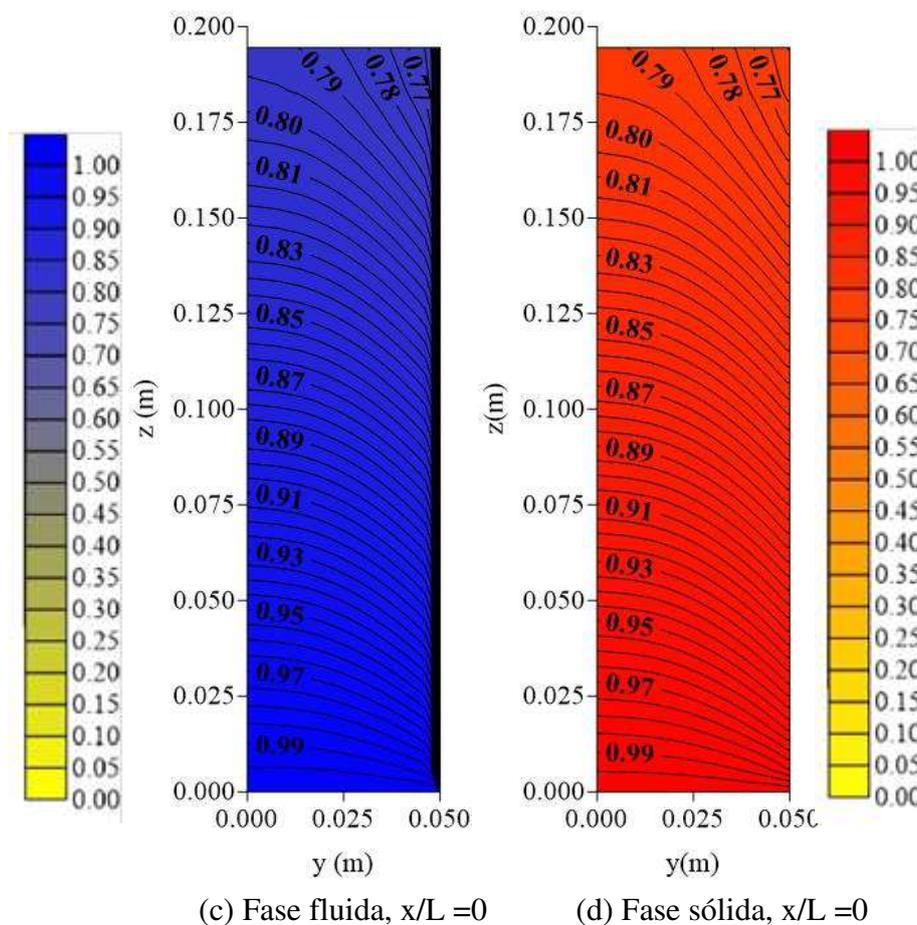
(c) Fase fluida,  $z/H=0,5277$

(d) Fase sólida,  $z/H=0,5277$

(e) Fase fluida,  $z/H=0,9722$ (f) Fase sólida,  $z/H=0,9722$ 

**FIGURA 4.22** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 10^{\circ}\text{C}$  (Caso 11).

(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$



**FIGURA 4.23** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 10^{\circ}\text{C}$  (Caso 11).

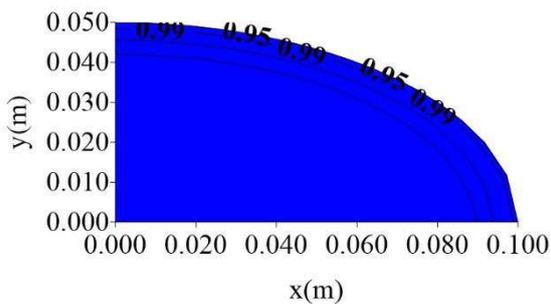
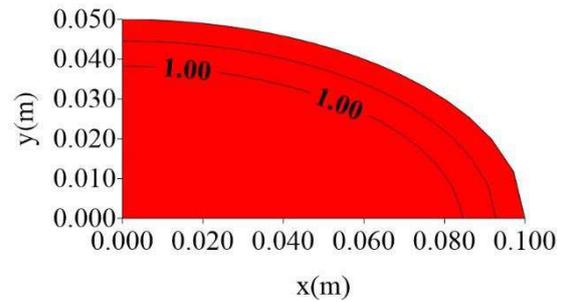
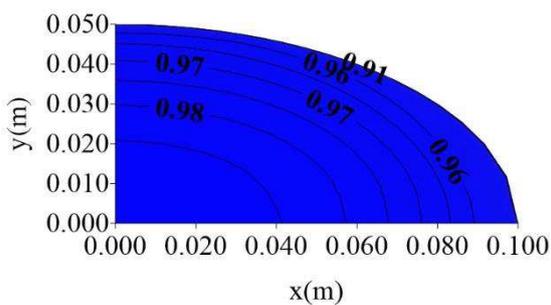
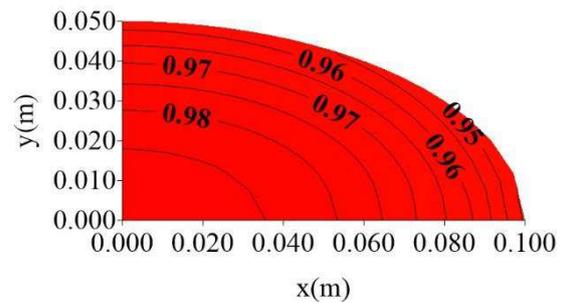
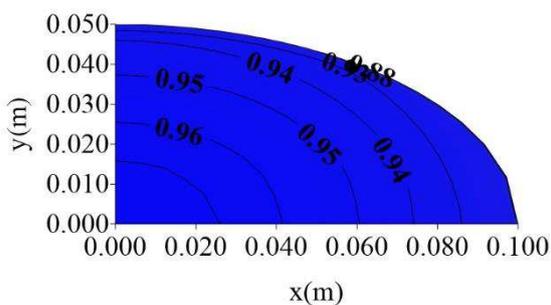
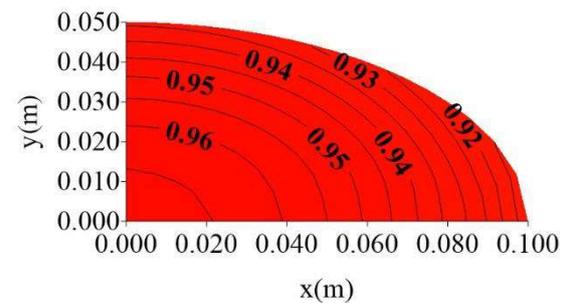
#### 4.3.4 - Influência do fluido de aquecimento

##### 4.3.4.1 – Efeito da velocidade do fluido na entrada do reator

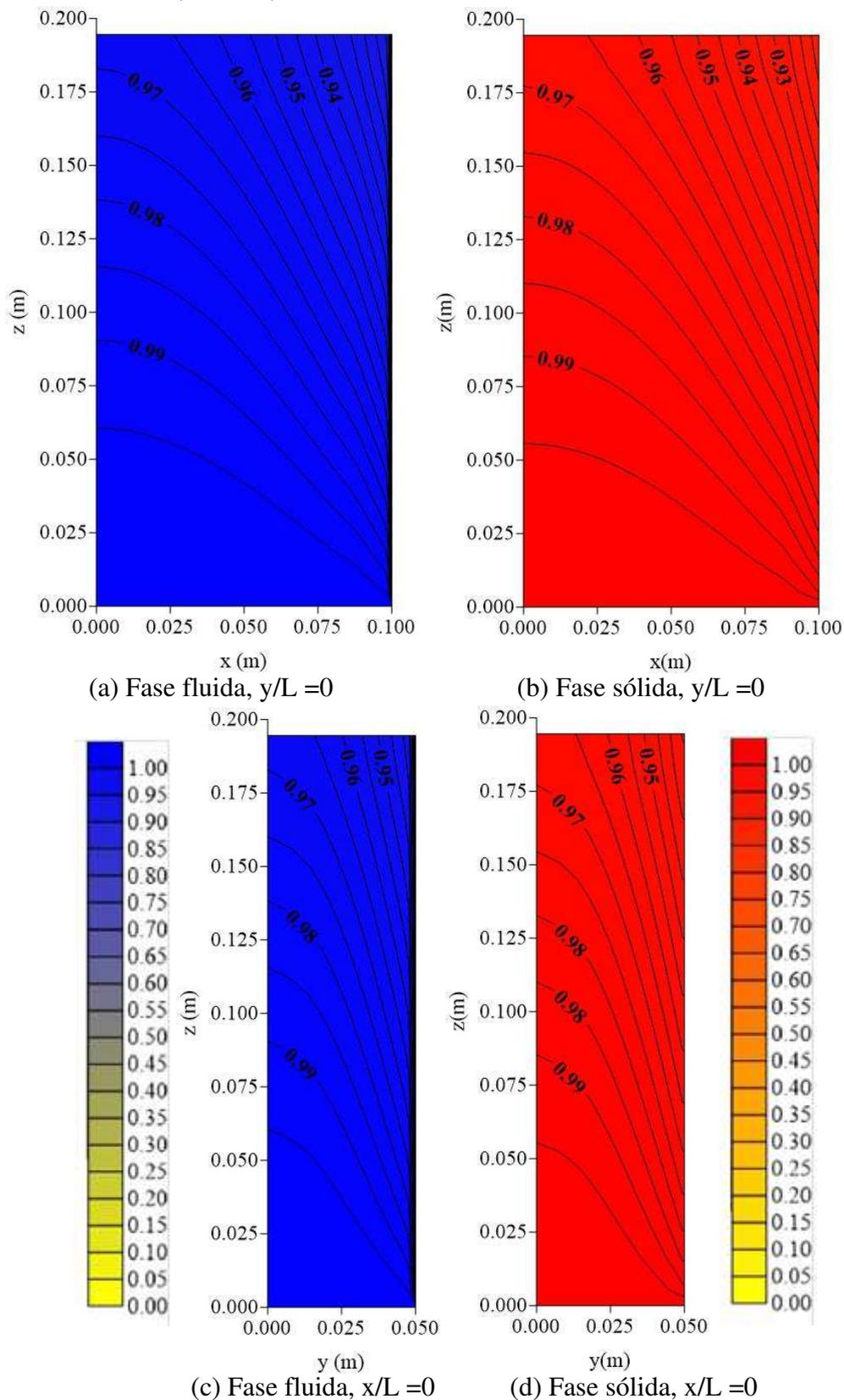
Até agora todos os casos foram simulados com uma velocidade do fluido na entrada do reator de  $u_z = 0,1$  m/s. Nesta seção serão discutidos os efeitos da velocidade do fluido na entrada do reator sobre o processo de transferência de calor no interior do equipamento. Foram escolhidas, para tal, as velocidades  $u_z = 0,2$  m/s (caso 12) e  $u_z = 0,35$  m/s (caso 13), para um reator com razão de aspecto  $L_2/L_1 = 2,0$ . O caso 2 será estabelecido como referência para análise comparativa.

Nas Figuras 4.24 e 4.26 estão ilustrados a distribuição de temperatura das fases fluida e sólida em planos transversais no interior do reator, em diferentes posições axiais ( $z/H = 0,0833$  m,  $0,5277$  m e  $0,9722$ m), para diferentes velocidades do fluido de aquecimento na entrada do reator (casos 2, 12 e 13 da Tabela 3.2). As Figuras 4.25 e 4.27 ilustram o mesmo resultado, mas em diferentes planos longitudinais ( $x/L = 0$  e  $y/L = 0$ ).

Avaliando as Figuras 4.24 e 4.26 observa-se que a transferência de calor no meio poroso ocorre gradativamente ao longo do reator em ambas as fases e que as isolinhas sofrem deslocamento na medida que se aumenta a velocidade do fluido escoando no interior do equipamento. Também são maiores os gradientes radiais de temperatura próximos à parede do reator para ambas as fases, o que intensifica ainda mais a taxa de transferência de calor radial nessa região.

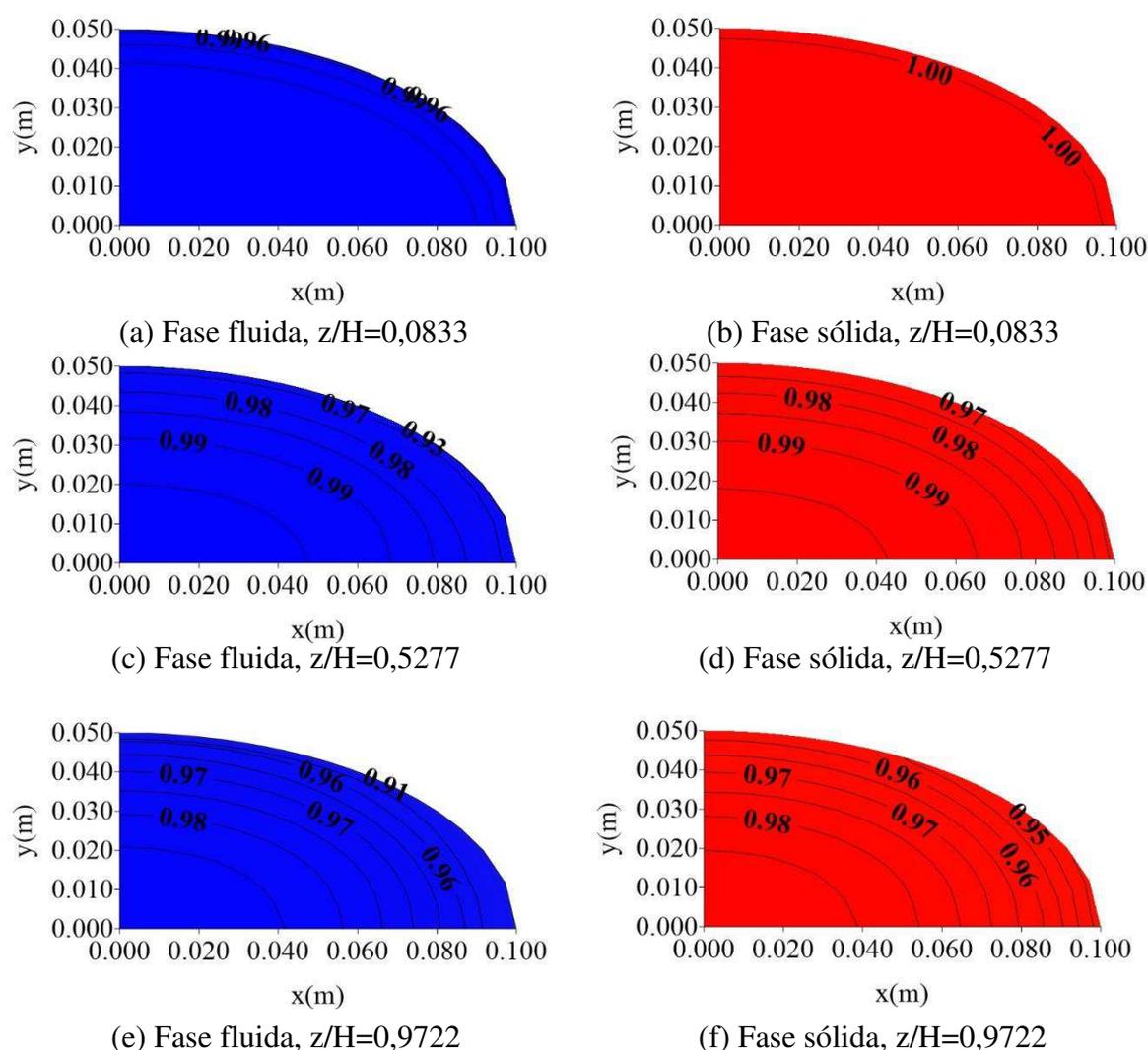
(a) Fase fluida,  $z/H=0,0833$ (b) Fase sólida,  $z/H=0,0833$ (c) Fase fluida,  $z/H=0,5277$ (d) Fase sólida,  $z/H=0,5277$ (e) Fase fluida,  $z/H=0,9722$ (f) Fase sólida,  $z/H=0,9722$

**FIGURA 4.24** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $u_z = 0,2$  m/s (Caso 12).

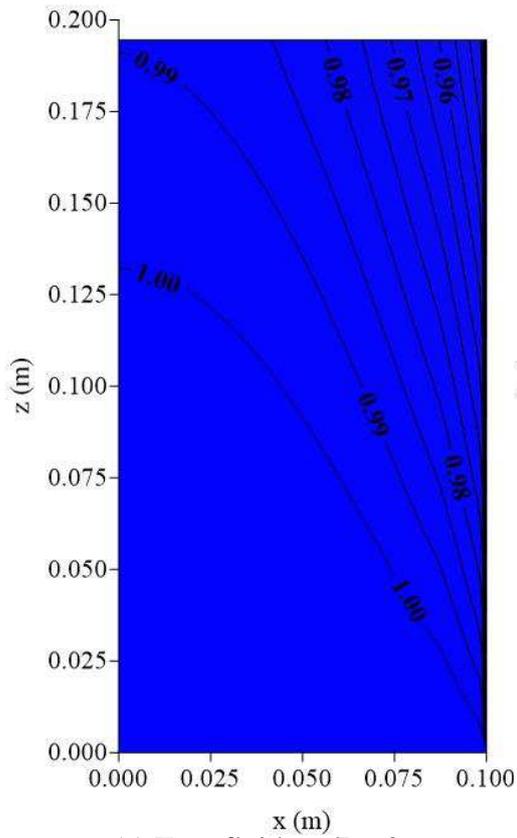
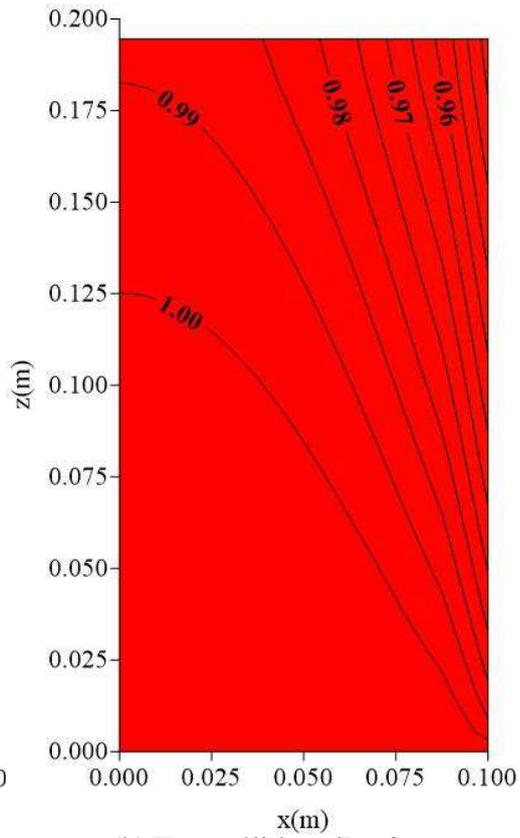
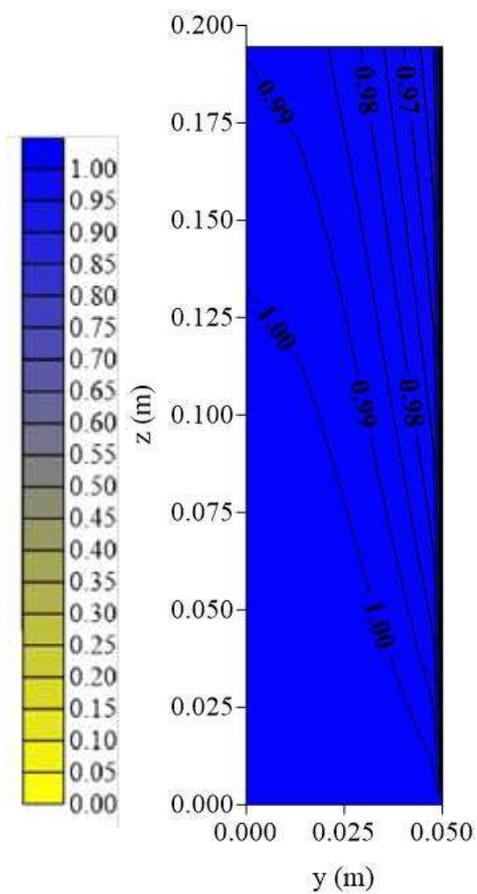
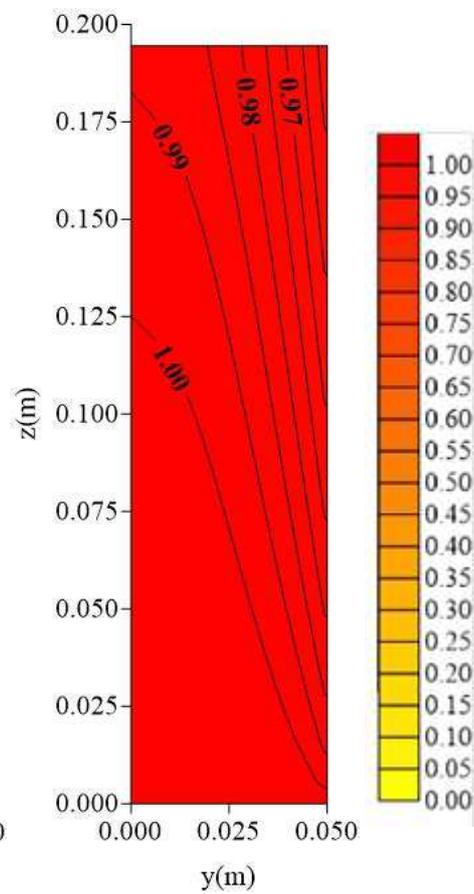


**FIGURA 4.25** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $u_z = 0,2$  m/s (Caso 12).

Analisando as Figuras 4.25 e 4.27 pode-se ver que, quando se aumenta a velocidade na entrada, os gradientes axiais de temperatura são maiores na seção de saída em ambas as fases e que as isolinhas de maiores intensidades se encontram na seção de entrada do reator de leito fixo. Também, é possível perceber um deslocamento das linhas de maior temperatura para a região de saída do reator, evidenciando o efeito convectivo do processo.



**FIGURA 4.26** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $u_z = 0,35$  m/s (Caso 13).

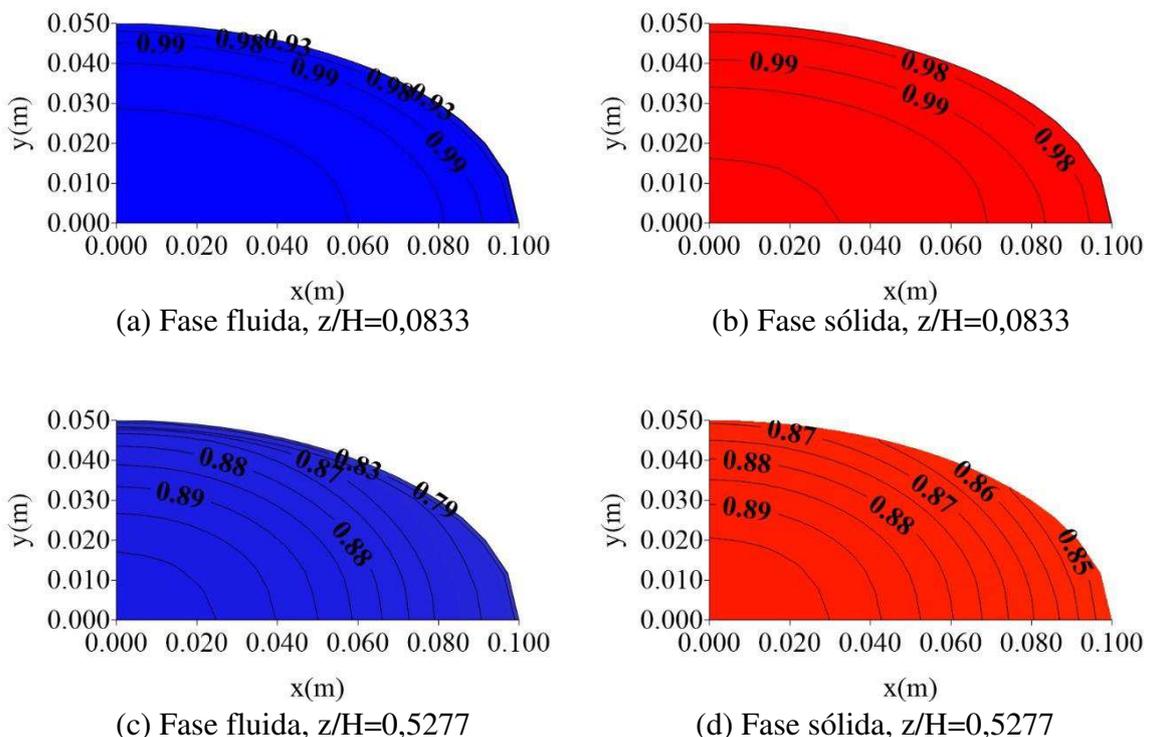
(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$ (c) Fase fluida,  $x/L = 0$ (d) Fase sólida,  $x/L = 0$

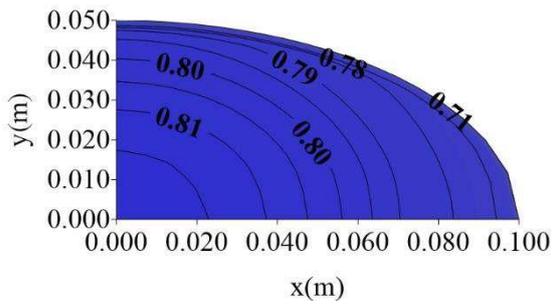
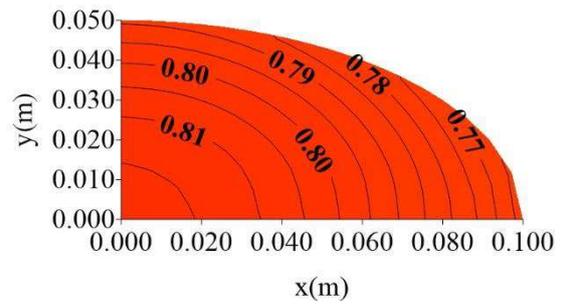
**FIGURA 4.27** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $u_z = 0,35$  m/s (Caso 13).

#### 4.3.4.2 - Efeito da temperatura do fluido na entrada do reator

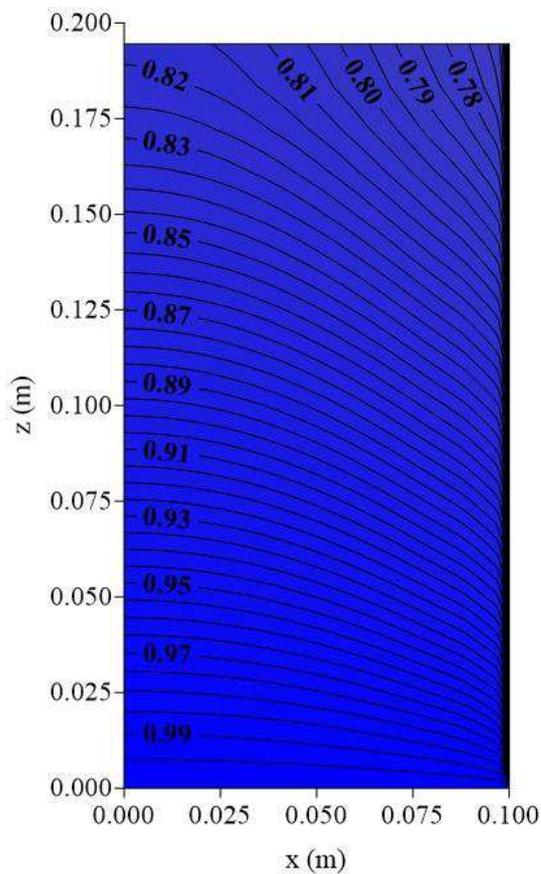
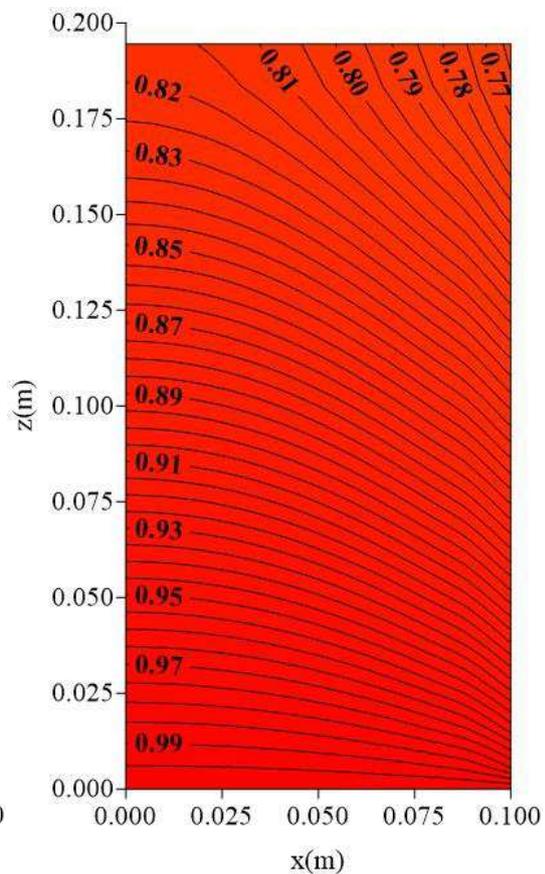
Nas Figuras 4.28 e 4.30 são mostradas a distribuição de temperatura das fases fluida e sólida em planos transversais no interior do reator, em diferentes posições axiais ( $z/H = 0,0833$  m,  $0,5277$  m e  $0,9722$  m), para diferentes temperaturas do fluido de aquecimento na entrada do reator (casos 2, 14 e 15 da Tabela 3.2). As Figuras 4.29 e 4.31 ilustram o mesmo resultado, mas em diferentes planos longitudinais ( $x/L = 0$  e  $y/L = 0$ ).

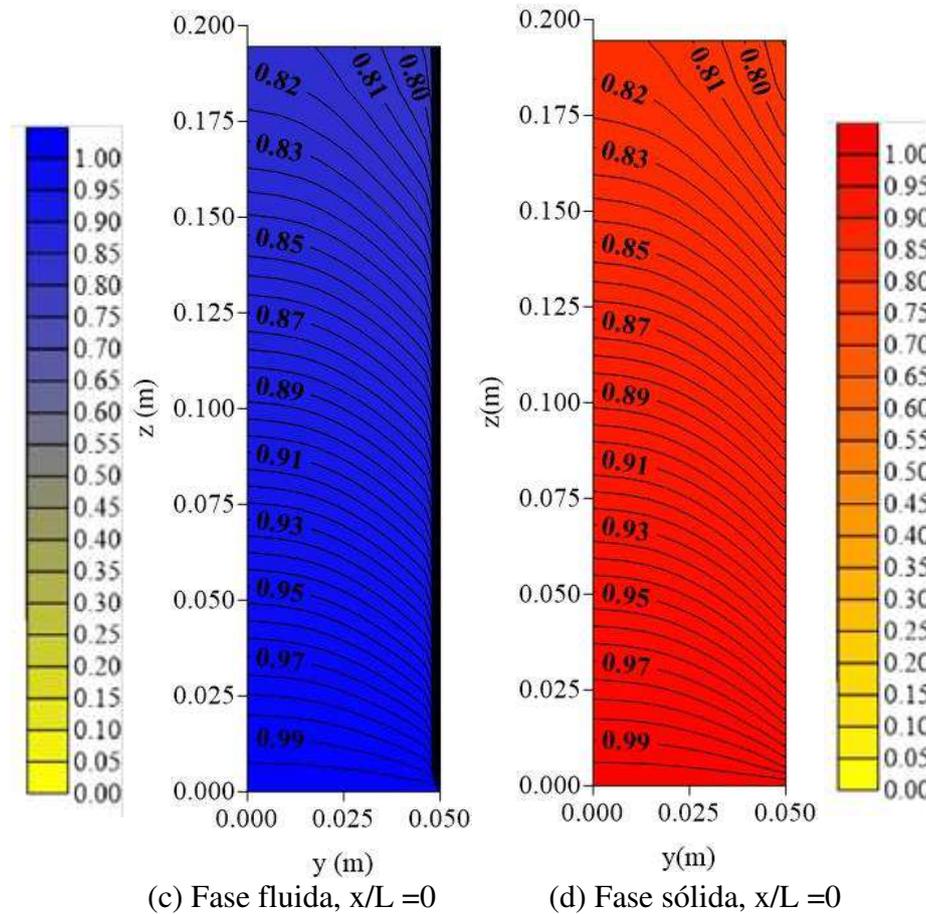
Analisando as Figuras 4.28 a 4.31, verifica-se que a variação da temperatura do fluido na entrada do reator não afeta os gradientes de temperatura no interior do reator, significativamente, isto ocorre porque a distribuição de temperatura é plotada na sua forma adimensional, a qual é independente das temperaturas do fluido na entrada do reator e temperatura do fluido refrigerante.



(e) Fase fluida,  $z/H=0,9722$ (f) Fase sólida,  $z/H=0,9722$ 

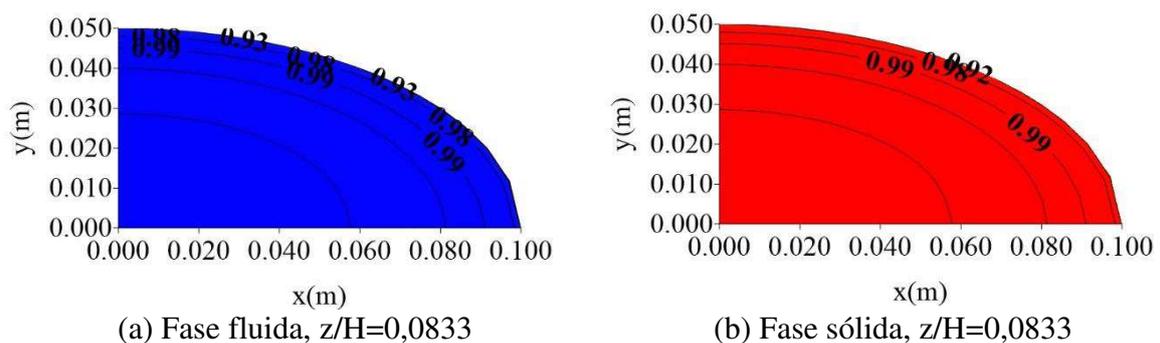
**FIGURA 4.28** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 80^{\circ}\text{C}$  (Caso 14).

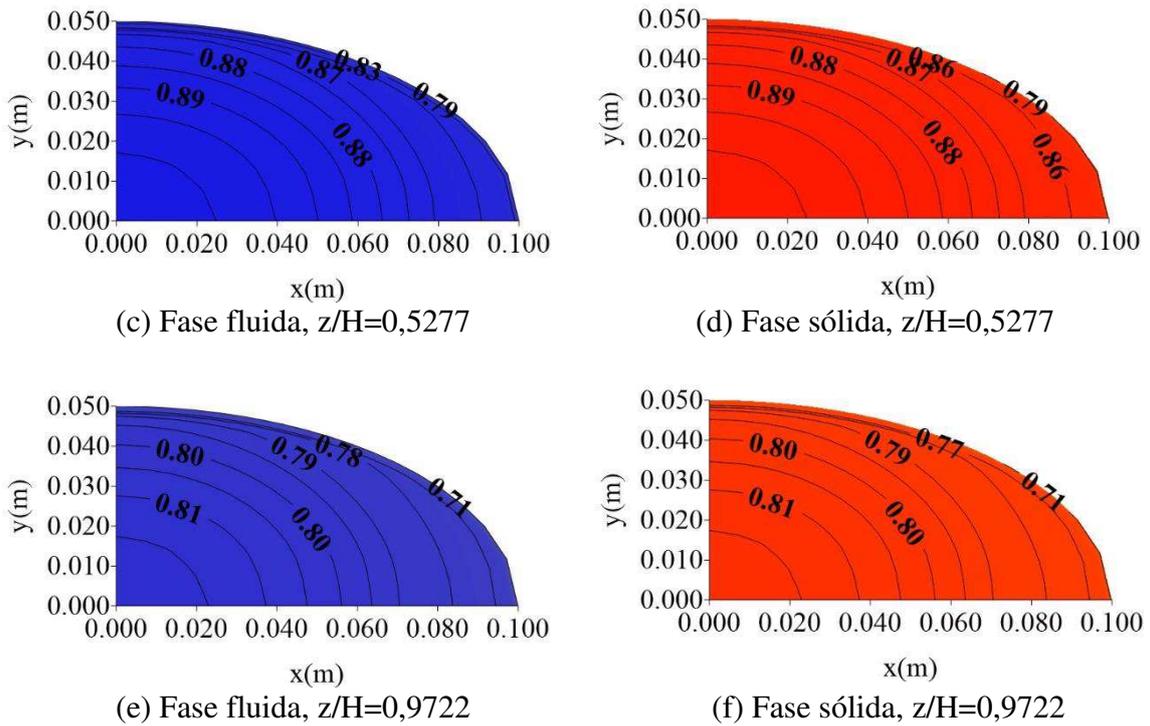
(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$



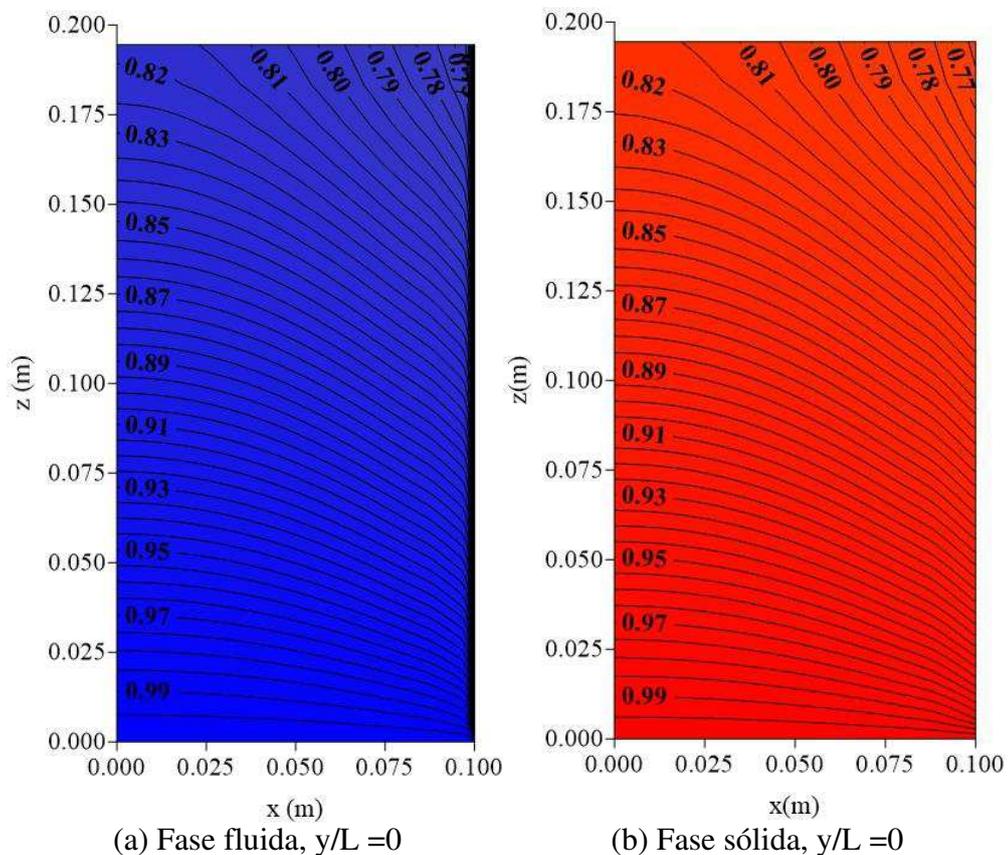
**FIGURA 4.29** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 80^\circ\text{C}$  (Caso 14).

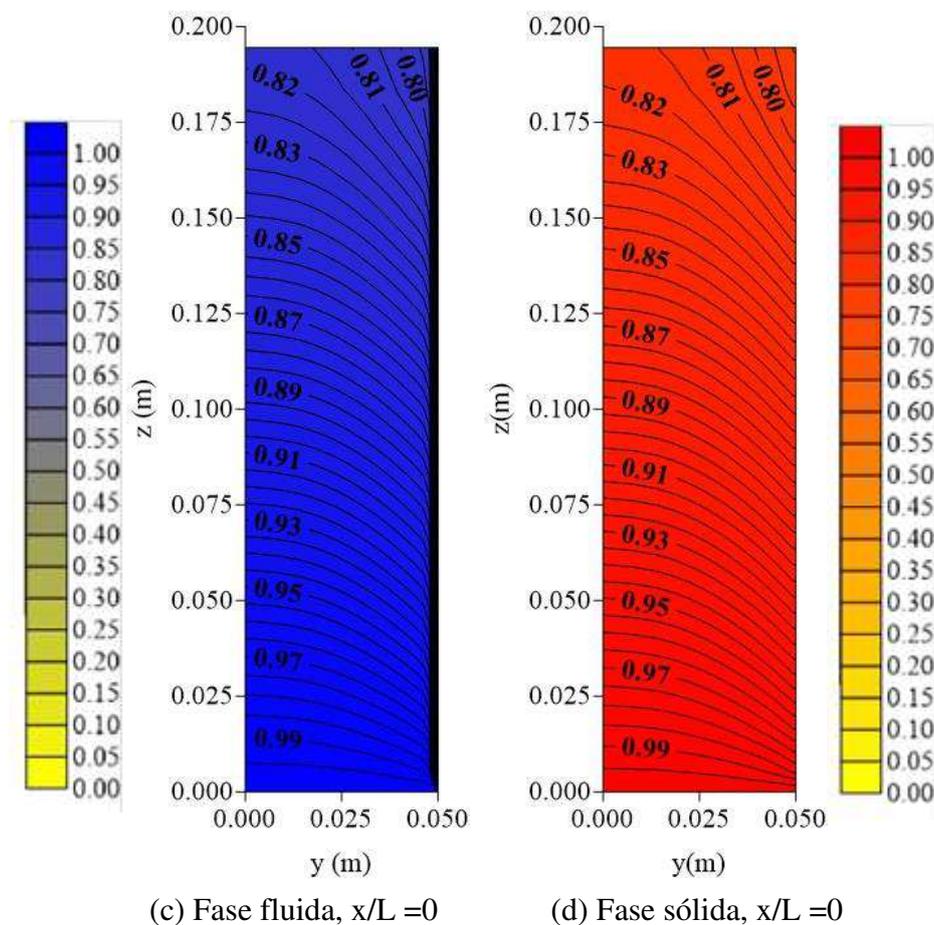
Podemos observar nas Figuras 4.28 e 4.30 que os gradientes radiais de temperatura são maiores nas proximidades da parede do reator e que as isolinhas de temperatura têm maior intensidade nas proximidades do plano de entrada do reator catalítico para ambas as fases. Já nas Figuras 4.29 e 4.31 os gradientes axiais de temperatura são maiores no plano de entrada do reator.





**FIGURA 4.30** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 100^{\circ}\text{C}$  (Caso 15).





**FIGURA 4.31** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $T = 100^\circ\text{C}$  (Caso 15).

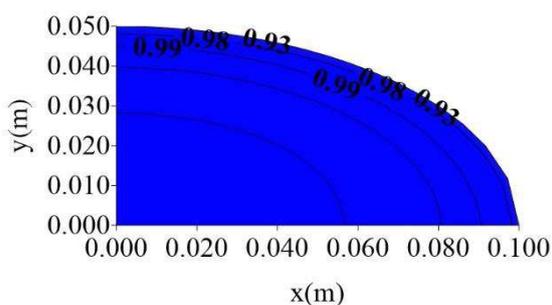
#### 4.3.5 – Influência da forma da partícula no interior do reator

O tamanho e a forma das partículas no processo de transferência de calor em reatores de leito fixo são extremamente importantes para análise do processo físico estudado e são determinantes para as propriedades como: área superficial específica das partículas, a esfericidade, a permeabilidade de um meio poroso, a porosidade, tamanho e distribuição dos poros. Os estudos de transferência de calor em reator de leito fixo reportados na literatura consideram geralmente as partículas como sendo esféricas, mas sabe-se que na prática dificilmente apresentam essa forma.

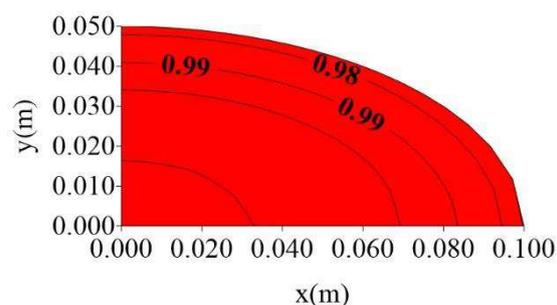
Diante disto, neste item é abordado o efeito da forma das partículas no interior do reator. Duas geometrias são avaliadas: partículas esféricas (caso 16) e esferoidais prolata (casos 2 e 17), conforme pode ser visto na Tabela 3.2. As partículas são feitas de um mesmo material e permanecem com o mesmo arranjo dentro do reator. O formato das partículas afetou muito pouco a porosidade do meio. Para os casos 2 e 17, partículas com forma esferoidal prolata, a porosidade foi aproximadamente 0,4, a esfericidade foi de 0,86 (caso 2) e 0,76 (caso 17), e a área superficial específica da partícula foi de  $844,87 \text{ m}^{-1}$  (caso 2) e  $809,94 \text{ m}^{-1}$  (caso 17). Para o caso da partícula com a forma esférica, a porosidade, a esfericidade e a área específica das partículas foram 0,39, 0,999 e  $902 \text{ m}^{-1}$ , respectivamente.

Nas Figuras 4.32 e 4.34 estão mostradas a distribuição de temperatura das fases fluida e sólida em planos transversais no interior do reator, em diferentes posições axiais ( $z/H = 0,0833 \text{ m}$ ,  $0,5277 \text{ m}$  e  $0,9722 \text{ m}$ ), para diferentes geometrias da partícula que forma o leito poroso (casos 2, 16 e 17 da Tabela 3.2). Já nas Figuras 4.33 e 4.35 estão ilustrados o mesmo resultado, mas em diferentes planos longitudinais ( $x/L = 0$  e  $y/L = 0$ ).

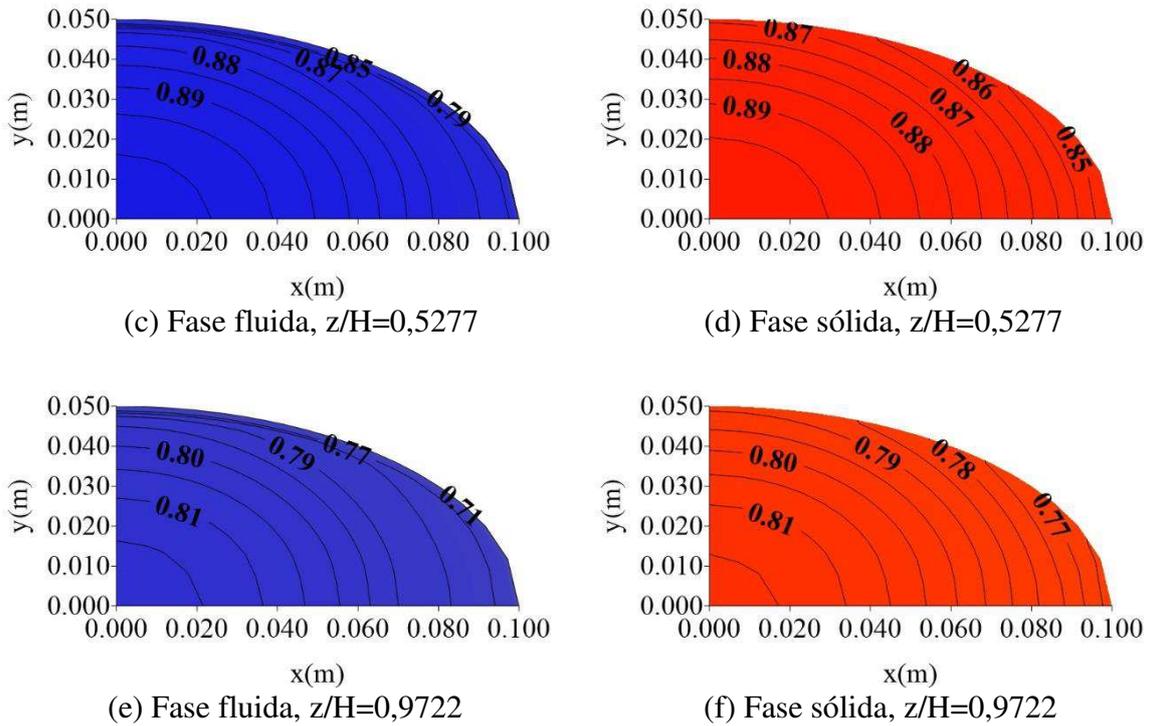
Avaliando a distribuição de temperatura dentro do reator cilíndrico-elíptico para os casos 16 e 17 (Figuras 4.32, 4.33, 4.34 e 4.35), verifica que os gradientes radiais de temperatura são maiores nas proximidades da parede, enquanto que os gradientes axiais de temperatura são maiores no plano de entrada do reator para ambas as fases. Verifica-se ainda que as temperaturas são maiores nas proximidades do plano entrada do reator, e diminuindo axialmente para ambas as fases, ao longo do comprimento do reator, sendo esse comportamento de dinâmica de temperatura e gradientes de temperatura uma tendência em todos os casos estudados, e isso é inerente à geometria do sistema.



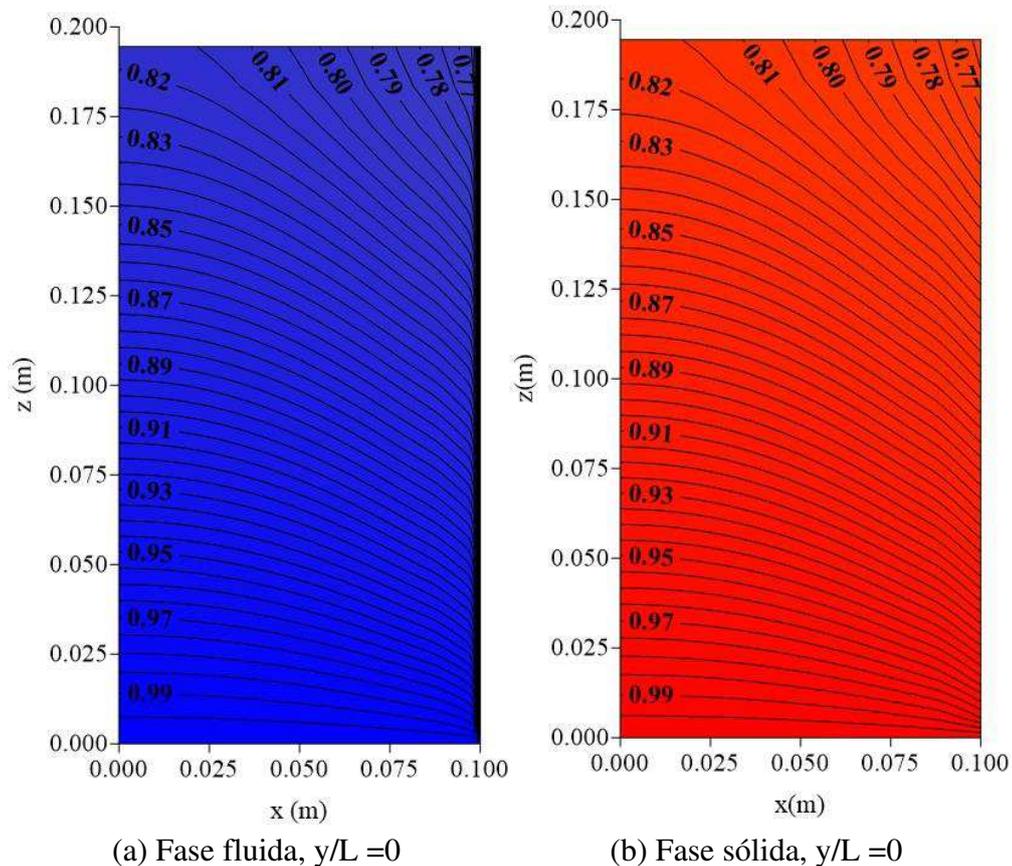
(a) Fase fluida,  $z/H=0,0833$

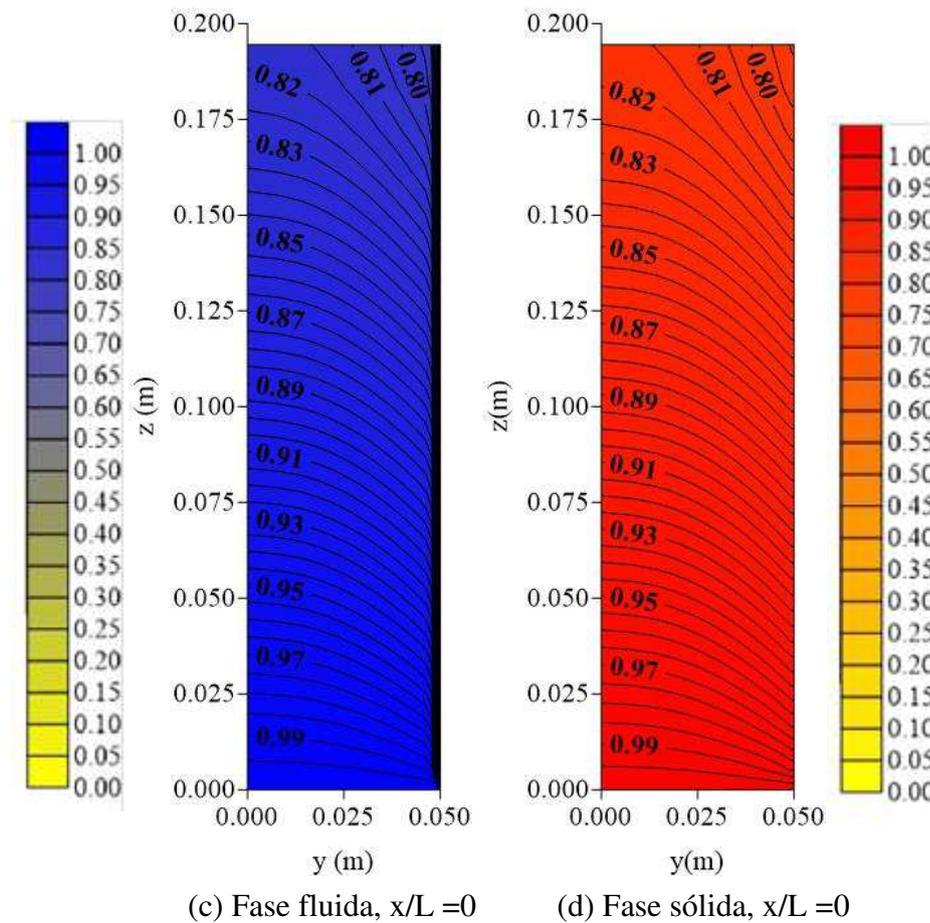


(b) Fase sólida,  $z/H=0,0833$

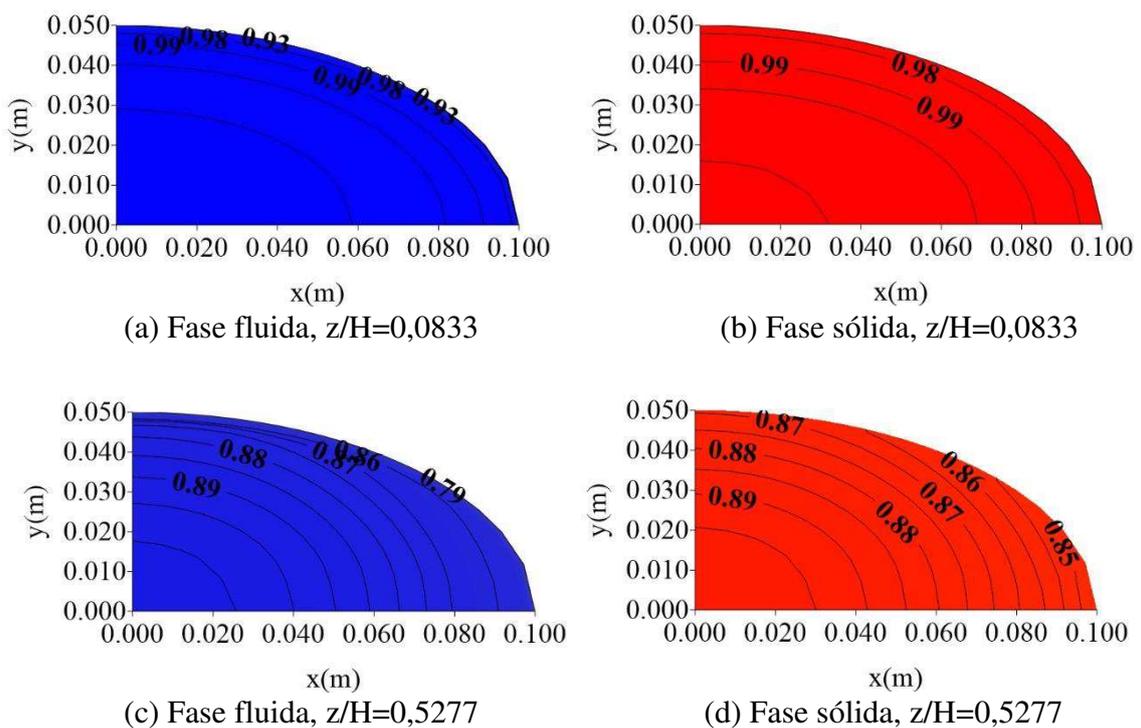


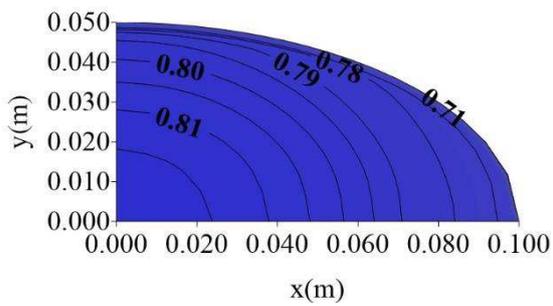
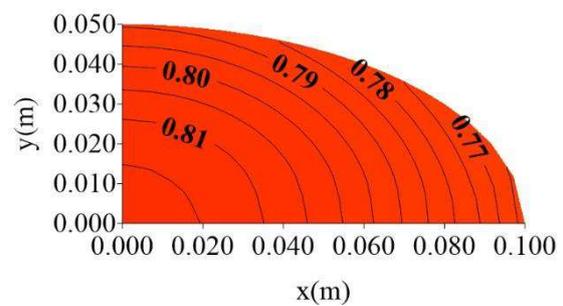
**FIGURA 4.32** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $a = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$  e  $b = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$  (Caso 16).



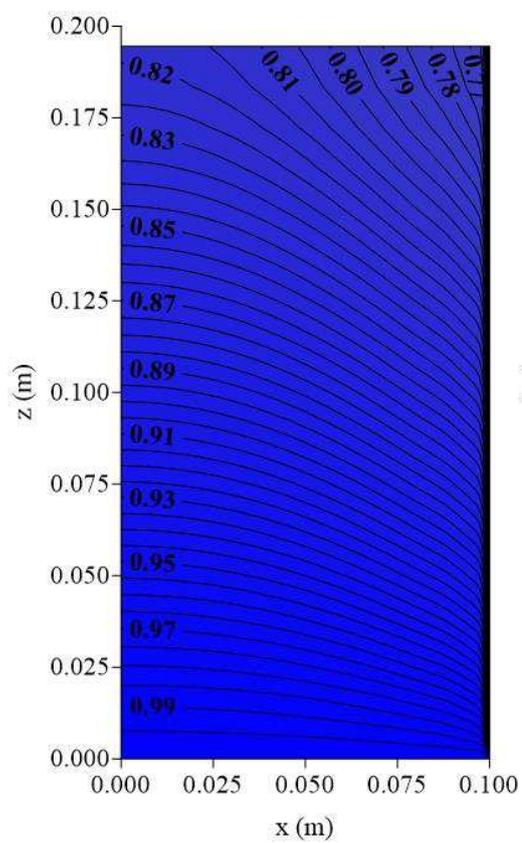
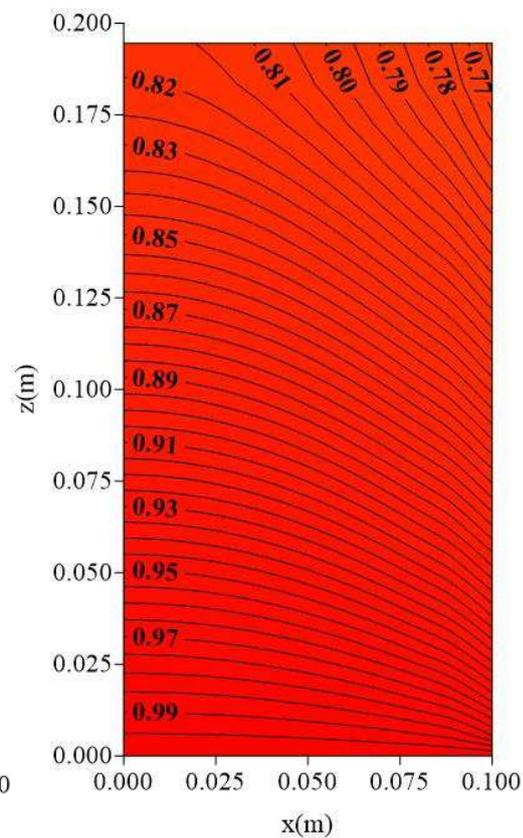


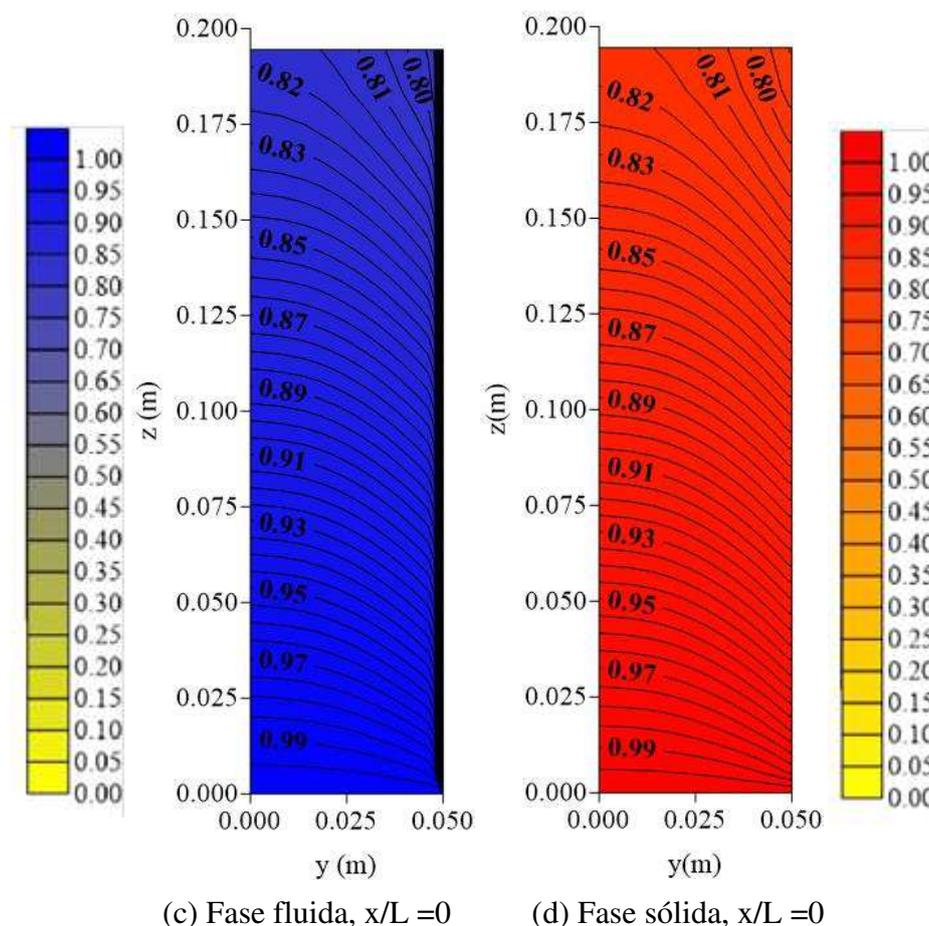
**FIGURA 4.33** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $a = 2,0 \times 10^{-3}$  e  $b = 2,0 \times 10^{-3}$  (Caso 16).



(e) Fase fluida,  $z/H=0,9722$ (f) Fase sólida,  $z/H=0,9722$ 

**FIGURA 4.34** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos transversais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $a = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$  e  $b = 3,0 \times 10^{-3} \text{ m}$  (Caso 17).

(a) Fase fluida,  $y/L = 0$ (b) Fase sólida,  $y/L = 0$



**FIGURA 4.35** - Distribuição de temperatura adimensional das fases fluida e sólida em diferentes planos longitudinais no interior do reator cilíndrico-elíptico de leito empacotado, para  $a = 2,0 \times 10^{-3}$  e  $b = 3,0 \times 10^{-3}$  (Caso 17).

Verificou-se em todos os casos analisados, que o modelo matemático de duas fases descreveu de maneira satisfatória a transferência de calor no reator cilíndrico-elíptico de leito fixo, mostrando-se um modelo versátil e significativo para incorporação de variações desde a forma geométrica do equipamento até a forma da partícula dentro do reator. Observou-se em todos os casos que a distribuição de temperatura dentro do reator sempre apresentou temperaturas maiores para a fase sólida e que os gradientes radiais de temperatura foram sempre maiores próximos da parede do reator para ambos os casos.

Analisou-se que a mudança nas dimensões das partículas que compõe o leito fixo do reator não influenciou significativamente na distribuição de temperatura e nem nos gradientes radiais e axiais em ambas as fases. Já quando se tratou da influência do fluido de aquecimento, onde se analisou os efeitos da velocidade, evidenciou-se em relação aos

outros casos analisados, o deslocamento das linhas de maiores temperaturas para a região de saída do reator e o efeito convectivo como preponderante no processo.

## CAPÍTULO 5

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTURAS PESQUISAS

#### 5.1 – Considerações

Baseados nos resultados obtidos pode-se concluir que:

a) Quanto ao modelo matemático proposto.

- O modelo possui grande versatilidade para incorporar modificações geométricas e termofluidodinâmicas, a fim de se poder avaliar uma gama de efeitos de forma individual ou combinada.

- Sob o ponto de vista físico, o modelo matemático de duas fases mostrou-se fisicamente consistente para o estudo da transferência de calor em reator de leito fixo com geometria cilíndrica elíptica.

b) Quanto aos resultados simulados.

- Os gradientes axial e radial de temperaturas dentro do reator foram levemente maiores para a fase fluida em todos os casos analisados.

- As isolinhas de temperatura são maiores para as posições cada vez mais próximas do centro e entrada do que na saída do reator de leito fixo.

- Os gradientes de temperatura radial e axial são maiores perto da parede do reator de leito fixo para ambas as fases, em todos os casos analisados.

- Os gradientes axiais de temperatura são mais relevantes na região próxima à entrada do reator para as fases fluida e sólida. Exceto quando a velocidade do fluido na entrada do reator for aumentada, altos gradientes axiais de temperatura se concentrarão na parte superior do equipamento.
- Com o aumento do coeficiente de transferência de calor convectivo na parede externa do reator, maiores gradientes axial e radial de temperaturas são obtidos para ambas as fases.
- Aumentando-se o coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator aparentemente não provocou nenhuma mudança no comportamento da variação da temperatura nas fases fluida e sólida.
- As regiões de maiores gradientes térmicos estão situadas exatamente próximas a  $y = L_2$  (região pontiaguda) caracterizando-se dessa forma, como a região mais crítica para a transferência de calor no reator elíptico, principalmente na geometria cilíndrica elíptica com elevada razão de aspecto, tanto para a fase fluida quanto para a fase sólida.
- Na região  $(0, L_1)$  ocorre o ponto de maior temperatura na superfície do reator.
- Aumentando-se a altura do leito ocorre uma maior transferência de calor do fluido (ar) de aquecimento para a parede do reator.
- O material da parede do reator e a temperatura do fluido na entrada do mesmo, não afetaram significativamente a distribuição de temperatura no interior do equipamento.
- Um aumento na velocidade do fluido na entrada do reator provoca um aumento na transferência de calor para parede do reator e na direção axial do reator evidenciando o forte efeito convectivo do processo.
- A forma das partículas não influenciou na distribuição de temperatura e nem nos gradientes de temperatura axial e radial das fases fluida e sólida.

## 5.2 - Sugestões para futuros trabalhos

Como sugestões para futuras pesquisas nesta área de conhecimento usando o modelo heterogêneo, podem ser citadas:

- a) Avaliar o comportamento do reator cilíndrico-elíptico operando em condições transientes com ou sem reação química.
- b) Incorporar reações heterogêneas no meio e analisar o comportamento térmico do reator.
- c) Analisar o efeito da inclusão da porosidade e velocidade variável em função do raio, sobre a estimativa dos coeficientes de transporte e da distribuição de temperatura no interior do leito.
- d) Estudar os efeitos das razões diâmetro do leito/diâmetro da partícula, altura do leito/diâmetro do leito sobre as estimativas dos coeficientes térmicos do equipamento.
- e) Analisar o efeito da esfericidade em função da porosidade em leitos recheados randomicamente com partículas de tamanho uniforme e variável, sobre o processo de transferência de calor no reator.
- f) Analisar o modelo heterogêneo com as propriedades termofísicas variáveis em função da temperatura.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Amhalhel G.A., Furmański P.: Problems of modeling flow and heat transfer in porous media. Bulletin of the Institute of Heat Engineering, Warsaw University of Technology, 85, pp. 55-88, 1997.

Alazmi, B., Vafai, K., Analysis of variants within the porous media transport models, J. Heat Transfer 122, pp. 303-326, 2000.

Amiri, A., Vafai, K., Analysis of dispersion effects and non-thermalequilibrium, non-Darcian, variable porosity incompressible flow through porous media. Int. J. heat mass transfer, Vol.37, pp. 939-954, 1993.

Amundson, N. R., Mathematical Methods in Chemical Engineering, Matrices and Their Application, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1966.

Ancheyta, J. Modeling and Simulation of Catalytic Reactor Petroleum Refining. New Jersey: Wiley; 523 p, 2011.

Aris, R., Introduction to the Analysis of Chemical Reactors, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1965.

Aris, R. and Amundson, N. R., Mathematical Methods in Chemical Engineering, Vol. 2, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.

Aris, R., The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts, Volume I – The Theory of The Steady State, Clarendon Press, Oxford, 1975a.

Aris, R., *The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts, Volume II – Questions of Uniqueness, Stability and Transient Behaviour*, Clarendon Press, Oxford, 1975b.

Azeredo, M. C. R., *Desenvolvimento de um Software para Estudo do Comportamento Dinâmico de Reatores de Leito Fixo*, Dissertação de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1996.

Azevedo, S. F., Romero-Ogawa, M. A., Wardle, A. P., *Modeling of Tubular Fixed Bed Catalytic Reactors; A Brief Review*, *Chemical Engineering Research and Design*, 68(A6), 483-502, 1990.

Balzer, R., *Síntese e caracterização de catalisadores óxidos metálicos para oxidação catalítica total de btx (benzeno, tolueno e orto-xileno) e transformação química de monoterpenos*. Tese de Doutorado, UFSC, Florianópolis, Brasil, 2014.

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

Benanati, R.F., Brosilow, C.B., *Void fraction distribution in beds of spheres*. *AIChE J* 4, 450-464, 1962.

Blaser, H. U. *Heterogeneous catalysis for fine chemicals production*. *Catalysis Today*, Amsterdam, v. 60, n. 3/4, p. 161-165, July 2000.

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.

Caberry, J. J. And But, J. B., On the Status of Catalytic Reaction Engineering, *Cat. Ver. – Sci. Eng.*, 10, 2, 221-242, 1974.

Caberry, J. J., *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, McGraw-Hill, Inc., 1976.

Calderbank, P. H., Pogorski, L. A., Heat transfer in packed beds. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, vol. 35, pp. 195-207, 1957.

"Catalisador e inibidores" em SóQ. *Virtuous Tecnologia da Informação*, 2008-2018. Consultado em 15/08/2018 às 10:54. Disponível na Internet em <http://www.soq.com.br/conteudos/em/cineticaquimica/p6.php>.

Cheng, G. J., Yu, A. B. and Zulli, P., Evaluation of effective thermal conductivity from the structure of a packed bed. *Chem. Eng. Sci.* 54, 4199–4209, 1999.

Cheng, P. and Hsu, C. T., Heat conduction. *Transport Phenomena in Porous Media*, Elsevier, Oxford, pp. 57–76, 1998.

Cheng, P. and Hsu, C. T., The effective stagnant thermal conductivity of porous media with periodic structure. *J. Porous Media.* 2, 19–38, 1999.

Chorkendorff, I.; Niemantsverdriet, J. W. *Concepts of modern catalysis and kinetics*. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 477 p. 2007.

Ciola, R. *Fundamentos de Catálise*. 1 ed. São Paulo Editora Moderna, 1981.

Coberly, C. A., Marshall Jr. W. R., Temperature gradients in gas streams flowing through fixed granular beds. *Chem. Eng. Progr.*, vol. 47, n. 3, pp. 141-150, 1951.

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.

Curry J K. Analysis of sphericity and roundness of quartz grains. Tese de Mestrado em Mineralogia. Pennsylvania State, 1951.

De 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.

Dixon, A.G., Cresswell, D.L. Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds. *AIChE J.*, vol. 25, n. 4 pp. 663-676, 1979.

Dixon, A. G. – The length effect on packed bed effective heat transfer parameters. *The Chem. Eng. Journal.*, 31, 163, 1985.

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

Domingues, A., Modelagem e Simulação de Processo de Oxidação do Etanol a Acetaldeído, Tese de Mestrado, Feq/Unicamp, Campinas, 1992.

Doraiswamy, L. K. and Sharma, M. N., *Heterogeneous Reactions: Analysis, Examples and Reactor Design: Gas-Solid And Solid-Solid Reactions*, Vol.1, John Willey & Sons, Inc, 1984.

Duarte, S. I. P., Martinez, O. M., Ferretti, O. A., Lemcoff, N. O., Comparison of two-dimensional models for fixed bed catalytic reactors. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 39, n. 6, pp. 1017-1024, 1985a.

Duarte, S. I. P., Martinez, O. M., Ferretti, O. A., Lemcoff, N. O., A Heterogeneous one-dimensional model for non-adiabatic fixed bed catalytic reactors. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 39, n. 6, pp. 1025-1031, 1985b.

Duarte, S. I. P., Coeficiente de transferencia de calor unidimensional pseudohomogeneo para un reactor catalítico de lecho fijo. XII das Jornadas sobre Investigaciones em Ciencias de la Ingenieria Quimica y Quimica Aplicada, Tucuman, Argentina, 1983.

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

Fábrega, F. M., Calculo de reatores I. Apostila da Faculdade Pitágoras de Jundiaí, 1ª Edição, Jundiaí – SP, 2012.

Figueiredo, J. L.; Ribeiro, F. R. R. Catálise heterogênea. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1989. 350 p.

Finlayson, B. A., Orthogonal Collocation in Chemical Reaction Engineering, *Cat. Rev.-Sci. Eng.*, 10(1), 69-138, 1974.

Fogler, H. S., *Element of Chemical Reaction Engineering*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1986.

Foust, A. S., L. A. Wenzel, L.A., Clump, C.W., Maus, L. e Andersen, L. B., *Princípios das Operações Unitárias – Ed LTC*, Rio de Janeiro – RJ, 2ª edição, (1982).

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

Freund, H., Zeiser, T., Huber, F., Klemm, E., Brenner, G., Durst, F., Emig, G., Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 58, pp. 903-910, 2003.

Froment, G. F., Bischoff, K.B., *Chemical Reactor Analysis and Design*. 2th ed., John Wiley & Sons, NewYork, 1990.

Froment, G. F., Hofmann, H. P. K., *Chemical Reaction and Reactor Engineering, Design of Fixed-Bed Gas-Solid Catalytic Reactors*. Carbery & Varma, Mareei Dekker, NewYork, 1987.

Froment, G. F., *Fixed Bed Reactor Design, Chemical Engineering: Concepts and Reviews*, Vol. 3, Gordon and Breach Science Publishers S. A., 179-212, 1986.

Freiwald, M. G. and Paterson, W. R. – Accuracy of model predictions and reliability of experimental data for heat transfer in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, 47, 1545, 1992.

Fujiwara, M.M., Simulação de Modelos Bidimensionais de Reatores Catalíticos em Leito Fixo por Elementos Finitos. (Dissertação Mestrado), Faculdade de Engenharia de Campinas- UNICAMP, 1989.

Giordano, R. C. Modelagem e otimização da reforma a vapor de gás natural. (Tese de Doutorado), Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, 1991.

Giudici, R., Modelagem de Reator de Oxidação de Etileno: estudo de parâmetros térmicos e estratégia de diluição de catalisador, Tese De Doutorado, Deq, Usp, 1990.

Gonçalves, N. D. F. Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturada. Tese submetida à Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Porto, 2007.

Gonçalves, A. G. M. Estudo Dirigido de Cinética e Reatores: tipos de reatores e suas respectivas equações de balanço. Disponível em: <http://www.ebah.com.br/content/ABAAAforMAB/tipos-reatores-suas-respectivas-equacoes-balanco>. Acesso em: 08 de junho de 2015.

Gorring, R.L. and Churchill, S.W., Thermal conductivity of heterogeneous materials, *Chem. Engng Prog.* 57(7), 53-59 (1961).

Grangeot, G., Quintard, M. and Whitaker, S., Heat transfer in packed beds: interpretation of experiments in terms of one- and two-equation models. *Heat Transfer* 1994, Inst. Chem. Engrs, Rugby, vol. 5, pp. 291–296, 1994.

Gunn, D. J., Khalid, M., Thermal dispersion and wall heat transfer in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 30, pp. 261-267, 1975.

Guirardello, R., Diagramas de Fases de Temperaturas e Otimização de Reatores Catalíticos-Trocadores de Calor por Simulação Numérica, Msc. Thesis, University Of Campinas, São Paulo, Brazil, (1988).

Gupta, A. V. S. S. K. S., Nag, P. K., Bed-to-wall heat transfer behavior in a pressurized circulating fluidized bed. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 45, pp. 3429-3436, 2002.

Handley D, Heggs PJ. Momentum and heat transfer mechanisms in regular shaped packings, *Trans. IChemE* 46: paper T251, 1968.

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

Happer, C. A., Pietre, E.M..*Plastics Materials and Process: A Concise Encyclopedia*. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2003.

Hill, C. G. Jr., *An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design*. John Wiley & Sons, New York, 1977.

Himmelblau, D. M. and Bischoff, K. B., *Process Analysis and Simulation*, John Willey & Sons, Inc., 1968.

Hsu, C. T., Cheng, P. and Wong, K. W., Modified Zehner-Schundler models for stagnant thermal conductivity of porous media. *Int. J. Heat Mass Transfer* 37, 2751–2759, 1994.

Hsu, C. T., *Heat conduction in porous media*. *Handbook of Porous Media*, New York, pp. 171–200, 2000.

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

Ismail, K. A. R., Henríquez, J. R., Numerical and experimental study of spherical capsules packed-bed latent heat storage system. *Applied Thermal Engineering*, vol. 22, pp. 1705-1716, 2002.

Wenzhou jhenten machinery, Reator de tanque agitado de alta pressão com os tanques circulares verticais SS304 e SS316. Disponível em: <http://portuguese.filter->

[tank.com/sale-8305642-high-pressure-stirred-tank-reactor-with-vertical-circular-tanks-ss304-ss316.html](http://tank.com/sale-8305642-high-pressure-stirred-tank-reactor-with-vertical-circular-tanks-ss304-ss316.html). Acesso em 04 de abril de 2018.

Jorge, L. M. M., Giudici, R., Transferência de calor em leito fixo: verificação e teste de modelos alternativos. Anais do XXI ENEMP, Ouro Preto-MG, 1993.

Jumah, R. Y., Mujumdar, A. S., Raghavan, G. S. V., A Mathematical model for constant and intermittent batch drying of grains in a novel rotating jet spouted bed. Drying Technology, vol. 14 n. 3 & 4, pp. 765-802, 1996.

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

Kulkarni, B. D. Doraswamy, L. K., Estimation of effective transport properties in packed bed reactors. Catal. Rev. Sci. Eng., vol 22, n. 3, pp. 431-483, 1980.

Kirumakki, S. R.; Nagaraju, N.; Chary, K. V. R. Esterification of alcohols with acetic over zeolites H $\beta$ , HY and HZSM5. Applied Catalysis A: General, Amsterdam, v. 299, p. 185-192, jan. 2006.

Lapidus, L. And Amundson, N. R., Chemical Reactor Theory – A Review, Prentice – Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.

Leva, M., Heat transfer to gases through packed tubes: general correlation for smooth spherical particles. Ind. Eng. Chem., vol. 39, pp. 857, 1947.

Leva, M., Grummer, M., Heat transfer to gases through packed tubes: effect of particle characteristics. Ind. Eng. Chem., vol. 40, pp. 415, 1948.

Levenspiel, O., Engenharia das Reações Químicas, Volume 1 – Cinética Química Aplicada, Editora Edgard Blucher Ltda, 1983a.

Levenspiel, O. Engenharia das Reações Químicas, Volume 2 – Cálculo de Reatores, Editora Edgard Blucher Ltda, 1983b.

Levenspiel, O. Engenharia das Reações Químicas. 3ª Edição. São Paulo. Editora Edgard Blucher Ltda, 2011.

Levenspiel, O., The Chemical Reactor Omnibook, Osu Book Stores Inc., Couallis, Oregon, 1989.

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.

Logli, M. A. Desenvolvimento de metodologia da avaliação da resistência ao craqueamento em catalisadores de reforma a vapor por análise térmica. 2008. 244 p. Tese (Doutorado em Química Analítica) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.

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.

Maciel Filho, R., Oxidação Catalítica de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Óxido de Ferro-Molibdênio, Dissertação de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1985.

Maciel Filho, R., Modeling and Control of Multitubular Reactors, Ph.D. Thesis, University of Leeds, Leeds, 1989.

Maciel Filho, R., Moura, J. C. e McGreavy, C., Regimes Cinéticos e Desativação de Catalisadores de Fe-Mo na Oxidação do Etanol a Acetaldeído, 12º Simpósio Ibero-Americano de Catálise, Rio de Janeiro, Brasil, 10-20, 1990.

Maciel Filho, R., Curso de Reatores Químicos, Relatório Interno, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1993.

Magnus, W., Oberhettinger, F.; Soni, R. P., Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics. Berlin, 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.

Manegold, E. The effectiveness of filtration, dialysis, electrolysis and their intercombinations as purification processes. n. 33, pp. 1088-1094, 1937.

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, 1985.

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.

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

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

Mello, V. M, Pousa, P.A.G., Mírian, S.C.P., Dias, I. M., Soares, Z., Metal oxides as heterogeneous catalysts for esterification of fatty acids obtained from soybean oil. Fuel Processing Technology, Amsterdam, v. 92, n. 1, p. 53-57, Jan. 2011.

Meireles, A. L. P. Valorização dos compostos terpênicos via catálise por ácidos: esterificação e eterificação do canfeno. Isomerização do óxido de alfa-pineno. 2013. 79

p. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2013.

Mendes, N. “Modelos para previsão da Transferência de Calor e de Umidade em Elementos Porosos de Edificações”. Tese de Doutorado, UFSC, Florianópolis-SC, 1997.

Miyachi, T. S., Furusaki, S., Morooka, S., Ikeda, Y. Transport Phenomena and Reaction in Catalyst Beds. *Advances in Chemical Engineering*, vol. 11, 1976.

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

Moura, J. C., Oxidação de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Cobre Oxidado, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1984.

Miranda, H. V., Simulação, controle e avaliação das configurações de troca térmica no processo de desidratação de etanol em reator de leito fixo. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Espírito Santo – ES, 2017.

Nauman, E. B., *Chemical Reactor Design*, John Wiley & Sons, New York, 1987.

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

Nield, D. A., Estimation of the stagnant thermal conductivity of saturated porous media. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, pp. 1575-1576, 1991b.

Nield, D. A., A note on the modeling of local thermal non-equilibrium in a structured porous medium. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 45, pp. 4367-4368, 2002a.

Oliveira, L. G., Teruel, B. J., Lima, A. G. B., Transmisión de calor em um reator cilíndrico: Nueva solución analítica del modelo com três parâmetros. *Información tecnológica*, vol. 14, n. 1, 2003.

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.

Owen, S.J., A survey of unstructured mesh generation technology, in: Proc. 7th Internat. Meshing Roundtable, Dearborn, MI, USA, October 1998.

Pakowski, Z., Bartczak, Z., Strumillo, C., Stenström, S., Evaluation of equations approximating thermodynamic and transport properties of water, steam and air for use in cad of drying processes. *Drying Technology*, vol. 9, n. 3, pp. 753-773, 1991.

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

Paterson, W. R. and Carberry, J.J. – Fixed bed catalytic reactor modeling the heat transfer problem. *Chem. Eng. Sci.*, 38, 175, 1983.

Pereira, M. A. Introdução a Engenharia de Reatores. Notas de aula disponível em: <http://www.marco.eng.br/reatores/notasdeaula/aula1.pdf>. Acesso em 25 de Agosto de 2015.

Plautz, D. A., Johnstone, H. F., Heat and mass transfer in packed beds. *AIChE J.*, vol. 1, n. 2, pp. 193-199, 1955.

Polyaev, V. M., Mozhaev, A. P., Galitseysky, B. A. and Lozhkin, A. L., A study of internal heat transfer in nonuniform porous structures. *Expt. Therm. Fluid Sci.* **12**, 426–432, 1996.

Pontes, A. H., Modelagem bidimensional de um reator de leito fixo para a desidratação catalítica de etanol a eteno. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2018.

Prasad, S.V., Das, S. K., An experimental and theoretical investigation into the hyperbolic nature of axial dispersion in packed beds. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 45, pp. 3681-3688, 2002.

Prasad, V., Kladias, N., Bandyopadhaya, A. and Tian, Q., Evaluation of correlations for stagnant thermal conductivity of liquid-saturated porous beds of spheres. *Int. J. Heat Mass Transfer* 32, 1793–1796, 1989b.

Prestes, E., Gomes, D. T., Medeiros, J., Veiga, J. L. B. C., Pandolfelli, V. C.. Concreto nanoligado a base de sílica fundida para aplicação no riser de unidade de craqueamento catalítico fluido. Rio de Janeiro, pp. 6-13, 2015.

Quintard, M., Kaviany, M. and Whitaker, S., Two-medium treatment of heat transfer in porous media: numerical results for effective properties, *Adv. Water Resour.* 20, 77–94, 1997.

Quintard, M. and Whitaker, S., Theoretical analysis of transport in porous media. In K. Vafai, ed., *Handbook of Porous Media*, Marcel Dekker Inc.: New York, pp. 1–52, 2000.

Sahimi, M., *Flow and Transport in Porous Media in Fractured Rock. From Classical Methods to Modern Approches*. Springer - Verlag, 1995.

Saito, M. B. and de Lemos, M. J. S., Interfacial heat transfer coefficient in nonequilibrium convective transport in porous media. *Int. Comm. Heat Mass Transfer* **32**, 666–676, 2005.

Santos, N. A. V. Catalisadores sólidos funcionalizados com núcleo magnético de magnetita: síntese, caracterização e aplicação na produção de biodiesel. Tese de doutorado, Universidade Federal de Lavras. Lavras, Minas Gerais, 2016.

Scheidegger, A. E., *The Physics of Flow Through Porous Media*, 3rd ed., Univ. of Toronto Press, Toronto, Ont., Canada \_1974.

Schmal, Martin. *Cinética e Reatores: Aplicação na Engenharia Química: teoria e exercícios*, Cap. 4, Editora Synergia, 2011.

Silva Filho, A. G., Transporte de calor em reator cilíndrico-elíptico de leito fixo recheado de partículas: modelagem, simulação e otimização. Tese de doutorado, Universidade Federal de Campina Grande –PB, 2013, 170 p.

Silva, E. G., Secagem combinada (convectiva e micro-ondas) de sólidos esferoidais prolatos: modelagem, simulação e experimentação. Tese de doutorado, Universidade Federal de Campina Grande –PB, 2016.

Silva, R.M., Reator cilíndrico - elíptico de leito fixo. Avaliações fenomenológica e geométrica transientes. Tese de doutorado, Universidade Federal de Campina Grande – PB, 2018.

Silveira, A. M., Transferência de calor em meios porosos: análise do modelo a uma fase em leito fixo. Tese de Doutorado, Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, 1991, 201p.

Sousa Jr., L. C. Uma Aplicação dos Métodos dos Elementos Finitos e Diferenças Finitas à Interação Fluido-Estrutura. 2006. 217f. Dissertação (Mestrado em Estrutura e Construção Civil) – Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, 2006.

Souza, M.F.F, Santana, P.L., Estudo do desempenho de reator de leito gotejante aplicado ao processo de hidrodessulfurização do petróleo. Scientia Plena, Vol. 12, 2016.

Stratton, J. A., Morse, P. M., Chu, L. J., Hutner, R. A., Elliptic cylinder and spheroidal wave functions. New York: The technology Press of M. I. T. and John Wiley & Sons, Inc., 1941, 127p.

Thoméo, J. C., Silveira, A. M., Freire, J. T., Efeitos de entrada térmicos sobre os coeficientes de transferência de calor em leito fixo. Anais do XVII ENEMP, São Carlos-SP, 1989.

Thoméo, J. C., Análise experimental dos efeitos de entrada térmicos sobre os coeficientes de transferência de calor em leito fixo. Dissertação de Mestrado, PPG-EQ/UFSCar, São Carlos, 1990, 117p.

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.

Tresmondi, A., Determinação de Parâmetros em Processos Reativos Industriais, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1995.

Varma, A. Packed bed reactors: An overview. *ACS Symposium Series*, (168), 279–286, 1981.

Vasco de Toledo, E.C., Modelagem, Simulação e Controle de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, Tese de Doutorado, UNICAMP, São Paulo, Brasil, (1999).

Védrine, J. C. Revisiting active sites in heterogeneous catalysts: their structure and their dynamic behaviour. *Applied Catalysis A: General*, Amsterdam, v. 474, p. 40-50, Mar. 2014.

Vortmeyer, D., Berninger, R., Comments on the paper, Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds. *AIChE J.*, vol. 28, n. 3, pp. 508, 1982.

Vortmer, D. e Schaefer, R. J. Equivalence of one and two phase models for heat transfer process in packed beds one dimensional theory. *Chemical engineering Science*, 29, 485-491, 1974.

Villadsen, J. and Michelsen, M. L., *Numerical Methods in Reaction Engineering*, *Chemical Reaction and Reactor Engineering*, ed. Carberry and Varma – Marcel Dekker, New York, 1-62, 1987.

V. M. Polyayev, B. V. Kichatov, and V. V. Bagrov, *Teplofiz. Vys. Temp.*, **35**, No. 3, 500–504, 1997.

Wakao, N., Kaguei, S., Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds, *Chem. Engng Sci.* 34, 325-336, 1979.

Wakao, N., Kaguei, S., Heat and mass transfer in packed beds. New York: Gordon and Breach Science Publishers, 1982, 364p.

Wakao, N., Tanaka, K. and Nagai, H., Measurement of particle-to-gas mass transfer coefficients from chromatographic adsorption experiments. *Chem. Engng. Sci.* 31, 1109–1113, 1976.

Wang, Y. N., Xu, Y. Y., Li, Y. W., Zhao, Y. L., Zhang, B. J., Heterogeneous modeling for fixed-bed Fischer-Tropsch synthesis: Reactor model and its applications. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 58, pp. 867-875, 2003.

Wash, A. P., Froment, G. F., Heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 27, n. 03, pp. 567-576, 1972.

Wash, A. P.; Froment, G. F., A Two Dimensional Heterogeneous Model for Fixed Bed Catalytic Reactors. *Chemical Engineering Science*, Vol. 26, pp 629-634, 1970.

Westerterp, K. R., Van Swaaij, W. P. M and Beenackers, A. A. C. M., *Chemical Reactor Design and Operation*. John Wiley & Sons, 1984, 767 pp.

Woodside, W., Messmer, J. H., Thermal conductivity of porous media. *J. Appl. Phys.*, vol. 32, pp. 1688-1706, 1961.

Yagi, S., Kunii, D., Studies on effective thermal conductivities in packed beds. *AIChE J.*, vol. 3, n. 3, pp. 373-381, 1957.

Yagi, S., Wakao, N., Heat and mass transfer from wall to fluid in packed bed. *AIChE J.*, vol. 5, n. 1, pp. 79-85, 1959.

Zhang, J., Chen, S., Yanga, R., Yan, Y., Biodiesel production from vegetable oil using heterogeneous acid and álcali catalyst. *Fuel*, London, v. 89, n. 10, p. 2939-2988, Oct. 2010.