

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE

CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

DOUTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS

TESE DE DOUTORADO

TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM REATOR CILÍNDRICO

ELÍPTICO DE LEITO FIXO: ASPECTOS

TERMOFLUIDODINÂMICOS E GEOMÉTRICOS

LAERCIO GOMES DE OLIVEIRA

Campina Grande - Paraíba

Outubro, 2004

**TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM REATOR CILÍNDRICO
ELÍPTICO DE LEITO FIXO: ASPECTOS
TERMOFLUIDODINÂMICOS E GEOMÉTRICOS**

LAERCIO GOMES DE OLIVEIRA

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

Orientador: Prof. Dr. ANTONIO GILSON BARBOSA DE LIMA

Campina Grande - Paraíba - Brasil

Outubro, 2004

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

O48t

2007 Oliveira, Laercio Gomes de.

Transferência de calor em reator cilíndrico de leito fixo: aspectos termofluidodinâmicos e geométricos/ Laercio Gomes de Oliveira. — Campina Grande, 2007.

175f. : il.

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

Referências.

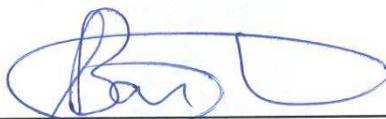
Orientador : Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima.

1. Transferência de Calor. 2. Reator. 3. Cilindro Elíptico. 4. Numérico. 5. Experimental. 6. Volumes Finitos. I. Título.

CDU – 66.021.4(043)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
LAERCIO GOMES DE OLIVEIRA APRESENTADA AO PROGRAMA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS DO CENTRO DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE
CAMPINA GRANDE

Tese de Doutorado **Aprovada com distinção** em 08 de outubro de 2004



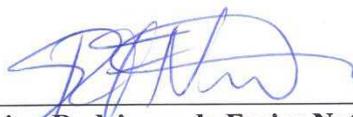
Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (DEM/CCT/UFCG)
Orientador



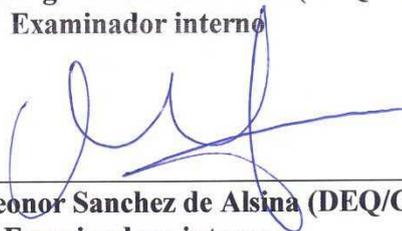
Profa. Dra. Araújo August Bernárdez Pécora (DETF/FEM/UNICAMP)
Examinadora externa



Profa. Dra. Vanja Maria de França Bezerra (DEQ/UFRN)
Examinadora externa



Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto (DEQ/CCT/UFCG)
Examinador interno



Profa. Dra. Odelsia Leonor Sanchez de Alsina (DEQ/CCT/UFCG)
Examinadora interna

Campina Grande, PB - Brasil
Outubro de 2004

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, defendida por Laércio Gomes de Oliveira e aprovada pela banca examinadora em 08 de outubro de 2004.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'A. G. B. de Lima', is written over a horizontal line. The signature is stylized and cursive.

Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (Orientador)
UFMG/CCT/UAEM

DEDICATÓRIA

A minha adorável esposa Edina Ferreira de Oliveira, pelo afeto, dedicação e compreensão, nos bons e maus momentos. A vida seria difícil sem a sua presença.

Aos meus filhos Luan Diago, Larry Diego e Lincoln Diogo. Obrigado por existirem em minha vida, amo vocês.

Aos meus pais Laurindo Gomes Câmara e Auta Mafaldo de Oliveira Câmara, por terem sempre apostado na minha pessoa.

A todos os meus irmãos. A família é a base fundamental da cultura do homem.

AGRADECIMENTOS

A Deus por ter criado o mundo tão grande e tão misterioso, e por ter dado ao homem raciocínio e inteligência suficientes para nele viver e usar a ciência para desvendar seus mistérios.

À Edina Ferreira de Oliveira (minha esposa), a Luan Diago, Larry Diego e Lincoln Diogo (nossos filhos), pelo carinho e amor a mim dedicado nos momentos de dificuldades, bem como pela compreensão durante o período que estive ausente dedicado à conclusão deste trabalho de cunho científico.

Aos meus pais que, desde os meus primeiros passos, procuraram mostrar que a dignidade do homem está na qualidade de suas atitudes. Com esse ensinamento me conduziram ao futuro que hoje desponta à minha frente.

Ao Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (DEM-UFSCG), pela orientação, pelo desafio, pela ajuda, pela confiança, pelas incansáveis críticas que me mantiveram sempre alerta. Enfim pela incrível pessoa que se mostrou no transcorrer deste trabalho, mostrando-se ser mais que um orientador, mas acima de tudo, um grande amigo.

Ao Prof. Dr. José Maria Correa Bueno (DEQ-UFSCar), por ter cedido os dados experimentais coletados sob sua supervisão no Laboratório de Sistemas Particulados e Transporte de Calor, do Departamento de Engenharia Química, da Universidade Federal de São Carlos - São Paulo.

Ao Prof. Dr. Samuel Conceição de Oliveira (DEQ-FAENQUIL), do Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia Industrial, da Faculdade de Engenharia Química de Lorena - São Paulo, pela prestimosa ajuda na coleta destes dados experimentais.

Aos alunos do Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da UFCG, Rodrigo Moura da Silva e Júzio Pereira Cambuí, Bolsistas PIBIC/CCT/UFCG, pela valiosa contribuição durante a etapa de simulação das condições operacionais nos diversos modelos numéricos.

A todos os colegas usuários do Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos (LCTF) do DEM/CCT/UFCG, que direta ou indiretamente contribuíram para que este trabalho de cunho científico atingisse o seu objetivo.

Ao programa de Doutorado em Engenharia de Processos, na pessoa da Profa. Dra. Odélsia Leonor Sanchez de Alsina (Coordenadora), pela oportunidade oferecida com a criação do Doutorado, bem como pelo esforço dispensado para o reconhecimento e manutenção de Programa de Pós - Graduação de alto nível.

*Apesar da ciência, a grandeza do universo
continua tão vasta como antes.*

(Darwin)

RESUMO

Neste trabalho, foram desenvolvidos e apresentados vários modelos matemáticos tridimensionais analíticos e numéricos para estudar a transferência de calor no interior de um reator de leito fixo, usando condição na fronteira do sistema: de equilíbrio ou convectiva, condutividade térmica do reator constante ou variável e sistema com ou sem reação química. A modelagem matemática apresentada tem a flexibilidade de adaptar-se a leitos com forma geométrica variando desde um canal retangular até o cilindro elíptico, incluindo o cilindro circular. A metodologia numérica utilizada para resolver as equações diferenciais que representam o fenômeno físico baseia-se no método dos volumes finitos. Para discretizar a equação geral da conservação da energia foi utilizado o esquema WUDS (Weighed Upstream Difference Scheme) como função de interpolação para os termos convectivos e difusivos e uma formulação totalmente implícita. O sistema de equações algébricas lineares resultantes da discretização da equação da energia em todos os pontos do domínio computacional é resolvido iterativamente pelo método Gauss-Seidel. Resultados da distribuição de temperatura no interior do reator em função das posições radial e angular, em várias posições ao longo do equipamento são mostradas e analisadas. Várias condições de processo foram estudadas, variando-se o coeficiente convectivo de transferência de calor, a razão de aspecto geométrica do reator, a concentração do reagente, a temperatura do fluido na entrada do sistema e a velocidade superficial do fluido. Como uma aplicação deste trabalho, os modelos matemáticos desenvolvidos foram utilizados para ajustar os dados experimentais de temperatura coletados numa célula de medidas térmicas (reator de leito fixo) de seção transversal cilíndrica circular, visando obter estimativas da condutividade térmica e coeficiente de transferência de calor do leito de partículas sob várias condições experimentais, usando-se a técnica do erro quadrático mínimo.

Palavras-chave: Transferência de calor, reator, cilindro elíptico, numérico, experimental, volumes finitos.

ABSTRACT

In this work, various analytic and numeric three-dimensional mathematical models were developed and presented to study heat transfer inside a fixed bed reactor, using a equilibrium or convective boundary condition, constant or variable thermal conductivity of the reactor and system with or without chemical reaction. The mathematical modeling presented has been the flexibility of adapting to beds with geometric shape varying from a rectangular channel to the elliptic cylinder, including the cylinder circular. The numeric methodology used to solve the differential equations that represent the physical phenomenon is based in the finite volume method. For discretize the general conservation energy equation the WUDS (Weighted Upstream Differentiates Scheme) scheme was used as interpolation function for convective and diffusive terms and a totally implicit formulation. The linear algebraic equations system resultant of the discretization of the energy equation in all points of the computational domain is iteratively solved by Gauss-Seidel method. Results of the temperature distribution inside the reactor in function of the radial and angular positions, in different positions along the equipment are shown and analyzed. Several process conditions were studied, varying the heat transfer convective coefficient, the reactor geometric aspect ration, the reagent concentration, the temperature and superficial velocity of the fluid in entrance of the system. As an application of this work, the mathematical models developed were used to adjust the temperature experimental data collected in a thermal measures cell (fixed bed reactor) of cylindrical traverse section, seeking estimate thermal conductivity and heat transfer coefficient of the particles bed under several experimental conditions, using the minimum quadratic error technique.

Key words: Heat transfer, reactor, elliptic cylinder, numeric, experimental, finite volumes.

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1 - Aspectos estruturais do leito compactado	3
2.2 - Caráter estatístico e flutuações angulares de temperatura.....	7
2.3 - Modelos matemáticos.....	10
2.3.1 - Modelos pseudo-homogêneos	11
2.3.1.1 - Modelo unidimensional.....	11
2.3.1.2 - Modelos bidimensionais.....	12
2.3.1.3 - Efeitos de uma reação química na temperatura do leito.....	23
2.3.2 - Modelos heterogêneos.....	26
2.3.3 - Determinação da condutividade térmica de um meio poroso	29
2.3.4 - Correlações para a condutividade térmica do leito na estagnação (fluido estagnado)..	30
2.3.5 - Correlações para a condutividade térmica efetiva do leito com fluxo de fluido.....	32
CAPÍTULO 3 - MODELAGEM MATEMÁTICA	34
3.1 - A equação da energia no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas.....	34
3.2 - Solução da equação de transporte de calor convectivo/difusivo em leito fixo	44
3.2.1 - Uma nova solução analítica do transporte de calor para cilindro circular	44
3.2.2 - Solução numérica do transporte de calor para cilindro de geometria elíptica	49
3.2.2.1 - Modelos numéricos utilizados neste trabalho	58
CAPÍTULO 4 - METODOLOGIA EXPERIMENTAL	76

4.1 - Equipamento	76
4.1.1 - Célula de medidas térmicas.....	78
4.1.2 - Seção de entrada.....	78
4.1.3 - Seção térmica	78
4.1.4 - Conjunto de sustentação dos termopares	80
4.2 - Métodos experimentais	81
4.2.1 - Empacotamento do leito poroso.....	81
4.2.2 - Medida dos perfis de temperatura	82
4.3 - Tratamento estatístico dos dados experimentais	83
CAPÍTULO 5 - RESULTADOS E DISCUSSÕES	86
5.1 - Resultados da solução analítica.....	86
5.2 - Resultados da solução numérica	91
5.2.1 - Refinamento de malha.....	91
5.2.2 - Validação da solução numérica.....	93
5.2.3 - Distribuições de temperatura no leito fixo, previstas pelos modelos I e II	94
5.2.4 - Distribuições de temperatura no leito fixo, previstas pelo modelo IV.....	101
5.2.4.1 - Efeito do coeficiente de transferência de calor h_w , sobre os perfis de temperatura no reator.....	101
5.2.4.2 - Efeito da concentração do reagente sobre os perfis de temperatura no reator	105
5.2.4.3 - Efeito da temperatura do reagente na entrada sobre os perfis de temperatura no reator.....	107
5.2.4.4 - Efeito do fator pré-exponencial de Arrhenius sobre os perfis de temperatura no reator.....	108
5.2.5 - Dados experimentais de temperatura no reator	109
5.2.5.1 - Característica dos dados e reprodutibilidade do empacotamento	109
5.2.5.2 - Estimativa não-linear de parâmetros	112
5.2.5.3 - Aplicação dos modelos numéricos.....	123

5.2.5.5 - Estimativa dos coeficientes de transporte de calor.....	127
CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES	132
6.1 – Conclusões.....	132
6.2 – Sugestões para trabalhos futuros	135
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	137

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 - Perfil radial de velocidade medido por Schwartz e Smith (1953), para cilindros de diâmetros de 3,2 mm e 6,4 mm numa coluna de 100 mm de diâmetro interno.....	5
FIGURA 2.2 - Perfil radial de porosidade em função da distância da parede para esferas e cilindros, medidos experimentalmente por Zotin (1985).	6
FIGURA 3.1 - Esquema de um reator de leito compactado cilíndrico elíptico.....	36
FIGURA 3.2 - Sistema de coordenadas cilíndricas elípticas no plano ξ - η	37
FIGURA 3.3 - Configuração geométrica do problema físico.	51
FIGURA 3.4 - Volume de controle da malha numérica.....	52
FIGURA 3.5 - Esquema mostrando a posição da interface i entre os pontos P e E.....	58
FIGURA 3.6 - Esquema mostrando o fluxo de calor na região da parede do reator.....	68
FIGURA 4.1 - Diagrama esquemático do equipamento e periféricos.....	77
FIGURA 4.2 - A célula de medidas térmicas.....	79
FIGURA 5.1 - Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r = 0,1$ W/m K, $k_z = 0,0$ W/m K, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000$ J/kg K e $G = 0,05$ kg/s/m ²	87
FIGURA 5.2 - Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r = 0,1$ W/m K, $k_z = 0,1$ W/m K, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000$ J/kg K e $G = 0,05$ kg/s/m ²	88
FIGURA 5.3 - Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r = 0,1$ W/m K, $k_z = 10,0$ W/m K, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000$ J/kg K e $G = 0,05$ kg/s/m ²	88
FIGURA 5.4 - Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r = 0,1$ W/m K, $k_z = 0,1$ W/m K, Bi infinito, $c_p = 1000$ J/kg K e $G = 0,05$ kg/s/m ²	89

FIGURA 5.5 - Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r = 0,1 \text{ W/m K}$, $k_z = 0,1 \text{ W/m K}$, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000 \text{ J/kg K}$ e $G = 0,08 \text{ kg/s/m}^2$	90
FIGURA 5.6 - Influência do número de pontos da malha sobre o perfil de temperatura no leito fixo elíptico, para $L_2/L_1 = 1$, $Bi = 1,0$ e $u_z = 0,11417 \text{ m/s}$	92
FIGURA 5.7 - Perfis adimensionais de temperatura, obtidos pelo modelo numérico II e solução analítica, num leito fixo cilíndrico ($L_2/L_1 = 1$) para $Bi = 1,0$	93
FIGURA 5.8 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 2$ e $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$	96
FIGURA 5.9 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 2$ e h_w infinito.....	97
FIGURA 5.10 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 5$ e $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$	98
FIGURA 5.11 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 5$ e h_w infinito.....	99
FIGURA 5.12 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$; $T_0 = 100^\circ\text{C}$, h_w infinito e $L_2/L_1 = 2$	103
FIGURA 5.13 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$, $T_0 = 100^\circ\text{C}$, $h_w = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $L_2/L_1 = 2$	104
FIGURA 5.14 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, quando $m = 1$, $T = 120^\circ\text{C}$, $z = 0,10556 \text{ m}$, $h_w = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$, $C = 0,0008 \text{ kmol/m}^3$, $L_2/L_1 = 2$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$	105
FIGURA 5.15 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 120^\circ\text{C}$, $z = 0,10556 \text{ m}$, $h_w = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$, $C = 0,008 \text{ kmol/m}^3$, $L_2/L_1 = 2$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$	106
FIGURA 5.16 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 120^\circ\text{C}$, $z = 0,10556 \text{ m}$, $h_w = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$, $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$, $L_2/L_1 = 2$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$	106
FIGURA 5.17 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 100^\circ\text{C}$, $z = 0,10556 \text{ m}$, h_w infinito, $C = 0,0008 \text{ kmol/m}^3$, $L_2/L_1 = 2$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$	108
FIGURA 5.18 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 100^\circ\text{C}$, $z = 0,10556 \text{ m}$, h_w infinito, $C = 0,0008 \text{ kmol/m}^3$, $L_2/L_1 = 2$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{23} \text{ s}^{-1}$	108
FIGURA 5.19 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 100^\circ\text{C}$, $z = 0,10556 \text{ m}$, h_w infinito, $C = 0,0008 \text{ kmol/m}^3$, $L_2/L_1 = 2$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{25} \text{ s}^{-1}$	109

FIGURA 5.20 - Distribuição de resíduos de temperatura em função da posição radial, representação do valor médio de cada réplica e o valor médio entre as réplicas.....	112
FIGURA 5.21 - Perfis radiais de temperatura em várias alturas de leito, para $Re = 105$	113
FIGURA 5.22 - Perfis radiais de temperatura no reator cilíndrico de leito compactado em vários números de Reynolds, para a altura de leito compactado de $z = 5,0$ cm.	117
FIGURA 5.23 - Comparação entre os perfis de temperatura radial médio ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação (4.3), para a condição de $Re = 105$	120
FIGURA 5.24 - Comparação entre os perfis de temperatura radial médio ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação (4.3), para a condição de $Re = 125$	121
FIGURA 5.25- Comparação entre os perfis de temperatura radial médio ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação (4.3), para a condição de $Re = 145$	121
FIGURA 5.26- Comparação entre os perfis de temperatura radial médio ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação (4.3), para a condição de $Re = 165$	122
FIGURA 5.27- Comparação entre os perfis de temperatura radial médio ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação (4.3), para a condição de $Re = 185$	122
FIGURA 5.28 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 105$) em função da altura do reator...	123
FIGURA 5.29 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 125$) em função da altura do reator...	124
FIGURA 5.30 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 145$) em função da altura do reator...	124
FIGURA 5.31 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 165$) em função da altura do reator...	125
FIGURA 5.32 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 185$) em função da altura do reator...	125

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1 - Condições de contorno e soluções da Equação (2.5).	13
TABELA 5.1 - Temperatura em experimentos réplicas, valores médios em cada réplica e entre elas, e seus desvios, para $z = 1,0$ cm e $Re = 145$.	110
TABELA 5.2 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 105$.	114
TABELA 5.3 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 125$.	115
TABELA 5.4 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 145$.	116
TABELA 5.5 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 165$.	118
TABELA 5.6 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 185$.	118
TABELA 5.7 - Valores médios da temperatura radial ao longo da altura do leito.	119
TABELA 5.8 - Parâmetros da Equação 4.3, ajustada aos dados das Tabelas 5.2 a 5.6.	119
TABELA 5.9 - Coeficientes de transporte estimados pelos modelos numéricos e variância.	128
TABELA 5.10 - Condutividade térmica do leito em W/m K, obtida por várias correlações.	130

SIMBOLOGIA

Letras Latinas

a', b', c', d', e', f' - coeficientes das Equações 3.10 a 3.15	[-]
a_1^*, a_2^*, a_3^* - coeficientes das Equações 3.47 e 3.49	[-]
a_n - raízes das equações características das Equações 2.8, 2.9 e 3.56	[-]
a_p - área da superfície da partícula	[m ²]
$A_P, A_N, A_S, A_E, A_W, A_F, A_T, A_p^0$ - coeficientes das equações discretizadas	[-]
A_n - constante das Equações 2.12, 2.13, 3.58, 3.59, 5.2 e 5.3	[-]
A_i - constante da Equação 2.17	[-]
$b_i, i = 1, 2, \dots, 16$ - coeficientes das Equações 3.48, 3.51, 3.52, 4.1, 4.3, 5.1, e 5.3	[-]
B - termo de geração de energia na Equação 3.66	[W/m ³]
Bi - número de Biot para transferência de calor	[-]
B_n - constante na Equação 2.13	[-]
B^* - termo proveniente da discretização das equações 3.91 e 3.99	[W/m ³]
c_1, c_3 - constantes da Equação 3.53	[-]
c_p - calor específico do fluido	[J/kg/K]
d_n - constante das Equações 5.2 e 5.3	[-]
d_p - diâmetro da partícula	[m]
D - diâmetro do leito	[m]
D_{ij} - coeficientes das Equações 3.60 e 3.61	[-]
e, w, s, n, f, t - faces dos pontos nodais	[-]

exp - exponencial	[-]
E, N, P, W, S - pontos nodais	[-]
ERRO - desvio médio quadrático entre os dados e o valor previsto pelo modelo	[°C]
\hat{f}_i - fator de interpolação na Equação 3.71	[-]
G - fluxo mássico específico, dado por $\rho_f u_z \varepsilon$	[kg/m ² /s]
h_w - coeficiente de transferência de calor parede-meio poroso	[W/m ² /K]
h_{win} - coeficiente de transferência de calor na parede interna do leito	[W/m ² /K]
h_{wext} - coeficiente de transferência de calor na parede externa do leito	[W/m ² /K]
H - comprimento (altura) do leito	[m]
i, j - posição do ponto nodal na malha	[-]
J - jacobiano da transformação	[1/m ²]
J_0, J_1, J_2, J_3 - funções de Bessel de primeira espécie e ordens zero, um, dois e três, respectivamente	[-]
k_f - condutividade térmica do fluido	[W/m/K]
k_s - condutividade térmica do sólido	[W/m/K]
k_m - condutividade real do meio	[W/m/K]
k_0 - condutividade térmica na estagnação	[W/m/K]
k_{er}, k_r - condutividade térmica efetiva radial do leito	[W/m/K]
k_z - condutividade térmica efetiva axial do leito	[W/m/K]
k_{wr} - condutividade térmica do fluido na parede do reator	[W/m/K]
L - distância focal da elipse na Figura 3.1 e comprimento do leito	[m]
L_1 - semi - eixo menor da elipse	[m]
L_2 - semi - eixo maior da elipse	[m]
\hat{n} - número de iterações em cada instante de tempo	[-]
\bar{n} - número de pontos experimentais	[-]
\bar{p} - número de parâmetros do modelo	[-]
Pe - número de Peclet para transferência de calor	[-]

\dot{q}, q'' - fluxo de calor	[W/m ³]
r - coordenada radial no leito	[m]
r^* - coordenada radial adimensional no leito	[-]
R - raio do leito	[m]
R^2 - coeficiente de correlação	[-]
\bar{R} - função dependente da posição radial	[-]
Re - número de Reynolds de partícula	[-]
S_ξ - área perpendicular ao fluxo radial de Φ	[m ²]
S_η - área perpendicular ao fluxo angular de Φ	[m ²]
S_z - área perpendicular ao fluxo axial de Φ	[m ²]
\bar{S}^2 - variância decorrente do ajuste do modelo aos dados	[°C ²]
S^Φ - termo de geração interna de energia	[W/m ³]
\overline{SM} - termo fonte associado ao fluxo convectivo na parede do reator	[W/m ³]
t - tempo	[s]
T - temperatura	[°C]
T_0 - temperatura na entrada do reator	[°C]
T_w - temperatura na parede do reator	[°C]
T_U - temperatura média na saída do leito no modelo unidimensional	[°C]
T_m - temperatura do fluido refrigerante	[°C]
T_E - temperatura na seção de entrada	[°C]
$\bar{T}_\theta(\theta)$ - média angular das temperaturas ao longo do diâmetro do leito	[°C]
$\bar{T}_r(r)$ - temperatura média radial	[°C]
u_z - velocidade intersticial de fluido	[m/s]
U - coeficiente global de transferência de calor	[kg/m ² /s/K]
$\hat{U}, \hat{V}, \hat{W}$ - coeficientes métricos	[-]
V - volume do reator	[m ³]

\vec{v} - vetor velocidade	[m/s]
x, y, z - coordenadas cartesianas	[m]
z - variável posição axial	[m]
\bar{Z} - função dependente da posição axial	[-]

Letras Gregas

α_{ij} - coeficientes das equações 3.6 e 3.9	[-]
α - coeficiente da Equação 3.64-b	[-]
β - coeficiente da Equação 3.64-a	[-]
β'' - razão da distância efetiva entre partículas e o diâmetro da partícula	[-]
δ, Δ - variação	[-]
δ - medida da espessura da camada de fluido estagnado	[cm]
τ e φ - ângulos definidos nas equações 3.2 e 3.3	[-]
ε - fração de vazios do leito	[-]
μ - viscosidade do fluido	[kg/m/s]
λ_1 - auto-valor definido nas equações 2.18, 3.45 e 3.46	[1/m]
ξ, η - variáveis posição no sistema de coordenadas cilíndrico elíptico	[-]
θ - posição angular	[-]
ρ_f - densidade do fluido	[kg/m ³]
σ - raízes da 3.49	[-]
Φ - função da variável observada	[-]
Φ'' - fluxo de Φ por unidade de área	[1/m ²]
Γ, Γ^Φ - propriedade do leito	[-]
∇ - gradiente	[-]
Ψ - variável do termo de dissipação viscosa	[-]

Superescritos

* - adimensional

o - anterior

Subscritos

ξ, η, z - direção perpendicular ao fluxo

e, w, n, s, f, t - faces dos volumes de controle dos pontos nodais

wext - externa

E - entrada

win - interna

n, m - números inteiros

o - inicial

r - radial

t - tubo

w - parede do leito

Abreviações

Exp - experimental

Num - numérico

Mod - modelo

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O estudo da transferência de calor em meios porosos percolados por fluidos tem despertado o interesse de pesquisadores de vários ramos da ciência e da tecnologia desde o século passado. Esse interesse advém de estarem os meios porosos presentes tanto na natureza (solos e plantas, por exemplo) quanto na maioria das operações unitárias normalmente 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, com paredes aquecidas (ou resfriadas), são freqüentemente usados na indústria para promover reações catalíticas gás-sólido, exotérmicas ou endotérmicas. Porém, o projeto seguro de tais equipamentos exige a adoção de modelos matemáticos confiáveis, baseados em experimentos com fluxo de fluido e experimentos cinéticos, que permitam simular situações que representem diversas condições experimentais, visando uma futura mudança de geometria ou ampliação de escala (Azevedo et al., 1990; Freund et al., 2003).

Particularmente quando o objetivo é o controle da temperatura no leito, os modelos adotados são de preferência aqueles mais simples, que exigem menores esforços e tempos computacionais, embora simplificações demasiadas possam levar a previsão errônea dos perfis de temperatura. Desse modo, a modelagem matemática adequada do fenômeno torna-se um requisito considerado imprescindível. Previsões confiáveis dos perfis de temperatura no leito advêm do conhecimento exato dos parâmetros térmicos do modelo matemático adotado. Para tanto, o uso de valores dos parâmetros de transporte de calor que sejam representativos para qualquer altura do leito torna-se uma exigência considerada fundamental.

Vários métodos de estimativa de parâmetros foram propostos e exaustivamente discutidos na literatura, (Coberly e Marshal, 1951; Wash e Froment, 1972; Gunn e Khalid, 1975; Li e Finlayson, 1977; Dixon, 1985; Thoméo e Freire, 2000), porém sem mencionar o fato de que os coeficientes de transporte de calor dependem do comprimento do leito. Em geral, estes coeficientes apresentam um decaimento à medida que a altura do leito poroso aumenta, quando se ajusta o modelo matemático adotado aos perfis radiais de temperatura em cada altura isoladamente (são os efeitos térmicos de entrada). Então, cada método de estimativa pode produzir diferentes valores para os coeficientes, mesmo quando as diferenças entre os resultados de temperatura previstos com o modelo e os dados experimentais são mínimas. De uma maneira geral, os métodos encontrados na literatura admitem que as medições experimentais sejam isentas de erros, ou seja, as medidas são exatas (Li e Finlayson, 1977; Lerou e Froment, 1977; Dixon et al., 1978; Dixon, 1985; Borkink e Westerterp, 1992a; Dixon, 1996; Thoméo e Freire, 2000; Ferreira et al., 2002).

Soluções analíticas ou numéricas da equação da difusão/convecção de calor em reator de leito fixo, para vários casos têm sido reportadas na literatura (Wash e Froment, 1972; Gunn e Khalid, 1975; Li e Finlayson, 1977; Wakao e Kaguei, 1982; Dixon, 1985; Freiwald e Paterson, 1992; Oliveira et al., 2003). Todavia, os estudos estão limitados ao uso de equipamentos cilíndricos, com seção transversal circular, portanto, usam modelos bidimensionais. Poucos são os trabalhos que assumem propriedades termofísicas do fluido variáveis com a temperatura e velocidade e/ou temperatura na entrada do reator dependente da coordenada radial (Hunt e Tien, 1988; Hunt e Tien, 1990; Borkink e Westerterp, 1992b). Desta forma, fica evidente a necessidade de que sejam apresentadas soluções rigorosas e mais abrangentes para o problema em questão.

Neste sentido, os objetivos deste trabalho são: apresentar modelos matemáticos tridimensionais transientes para descrever a distribuição de temperatura no interior de um reator de leito fixo com geometria cilíndrica elíptica; apresentar solução analítica da equação da difusão/convecção da energia aplicada a um reator cilíndrico circular; apresentar solução numérica da equação da difusão/convecção da energia aplicada a um reator de leito fixo cilíndrico de seção transversal elíptica; fornecer previsões do perfil de temperatura no interior do leito poroso sob diversas condições de processo; estudar os aspectos termofluidodinâmicos e geométricos do reator de leito fixo sobre a distribuição de temperatura; aplicar os modelos desenvolvidos para descrever a transferência de calor no interior de um reator cilíndrico de

seção transversal circular, visando avaliar os efeitos térmicos de entrada sobre as estimativas dos coeficientes de transporte de calor.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo serão apresentados e discutidos tópicos abordados na literatura, relacionados aos aspectos da modelagem da transferência de calor em leito fixo, e da estimativa dos coeficientes de transporte, visando acompanhar a evolução histórica dos estudos do transporte de calor em meios porosos.

2.1 - Aspectos estruturais do leito compactado

As previsões de um modelo matemático para a transferência de calor são fortemente influenciadas pela qualidade das hipóteses admitidas. Entre as hipóteses geralmente utilizadas pelos pesquisadores em seus modelos e reportadas na literatura, aquela que se refere ao escoamento tipo pistonado (fluxo tubular) parece ser um aspecto comum a quase todos os modelos disponíveis. Em tais modelos, as propriedades estruturais do meio poroso e do fluxo do fluido são caracterizadas por meio de uma fração de vazios (porosidade) média e de uma velocidade intersticial uniforme, respectivamente (Foumeny et al., 1991).

A razão para se adotarem simplificações na modelagem é que, entre os anos trinta e setenta, pouco se tinha avançado no desenvolvimento de algoritmos numéricos capazes de resolver as equações diferenciais parciais do modelo, quando se estabeleciam condições de escoamento diferentes daquela normalmente utilizada (fluxo pistonado) para representar o meio. Além disso, a dificuldade experimental da medida exata do perfil real de temperatura na entrada do leito, que perdura até os dias de hoje, representa uma enorme limitação para obter uma modelagem segura e confiável dos reatores catalíticos de leito fixo. Contudo, Schwartz e Smith (1953), medindo a velocidade de fluido, encontraram que o perfil radial de velocidade,

conforme mostrado na Figura 2.1, alcançou um valor máximo a aproximadamente um diâmetro de partícula da parede, decaindo depois para um valor constante em direção a região central do leito. Seus resultados experimentais conduziram posteriormente a estudos sobre as variações da porosidade com a posição radial, por vários grupos de pesquisadores.

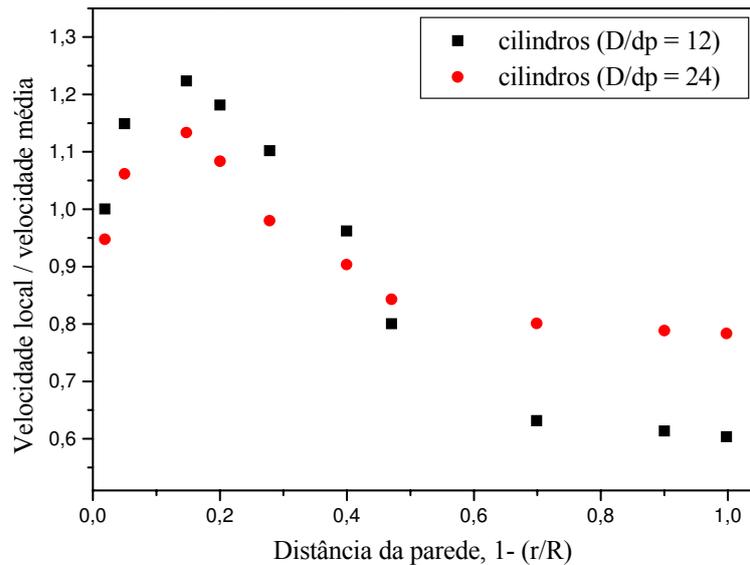


FIGURA 2.1 - Perfil radial de velocidade medido por Schwartz e Smith (1953), para cilindros de diâmetros de 3,2 mm e 6,4 mm numa coluna de 100 mm de diâmetro interno.

Os resultados dos estudos de porosidade apresentados por pesquisadores tais como Roblee et al. (1958), Pillai (1977), Stanek e Eckert (1979), Vortmeyer e Schuster (1983) entre outros, concordam que no caso de partículas esféricas, a fração de vazios, conforme mostrado na Figura 2.2, alcança um valor mínimo a uma distância de meio diâmetro de partícula da parede, com alternados máximos e mínimos ocorrendo em sucessivos raios de partículas. A amplitude do ciclo diminui quando a distância da parede aumenta. Isto explica bem os resultados experimentais de Schwartz e Smith (1953), corroborando a afirmativa de que o perfil radial de velocidade do fluido terá um máximo a aproximadamente um diâmetro de partícula da parede. A elevada fração de vazios próxima à parede proporciona a formação de um escoamento preferencial de fluido nesta porção do leito, resultante da menor resistência ao fluxo do fluido. A consequência imediata deste efeito é que os perfis de velocidade e condutividade térmica efetiva próximos à parede serão diferentes daqueles no centro do leito.

Porém, na grande maioria dos trabalhos encontrados na literatura, estes são geralmente assumidos como constantes com a posição radial.

Zotin (1985) mediu experimentalmente a fração de vazios de um leito fixo e apresentou detalhes sobre o seu comportamento, quando testava diferentes técnicas de empacotamento. Esta autora observou que a porosidade apresenta variações tanto radiais quanto axiais e que esta sempre parte de um valor unitário junto a um contorno físico sólido que acomoda o leito, decaindo de forma oscilatória amortecida, longe deste contorno sólido. A existência de um perfil axial de porosidade influencia o desenvolvimento de um perfil de velocidade e consequentemente, em equipamentos sem a presença de uma seção que garanta o desenvolvimento do perfil de velocidade (seção de entrada), os efeitos de troca térmica e desenvolvimento do perfil de velocidade serão superpostos e mais acentuados no início do leito, tornando a tarefa do estudo do transporte de calor muito mais árdua.

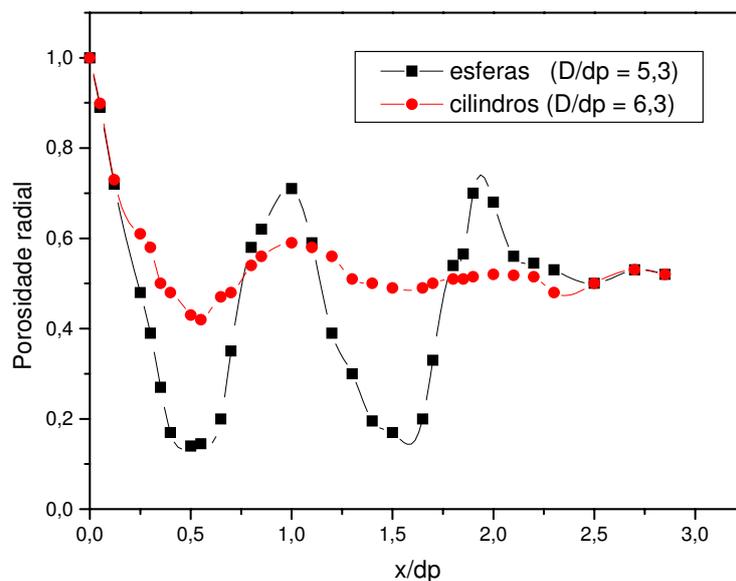


FIGURA 2.2 - Perfil radial de porosidade em função da distância da parede para esferas e cilindros, medidos experimentalmente por Zotin (1985).

Recentemente, Afandizadeh e Foumeny (2001) publicaram um trabalho sobre o projeto de reatores de leito compactado, ressaltando a importância da estrutura do leito em relação aos espaços vazios entre as partículas na “performance” do sistema, em termos de coeficientes cinéticos e de transporte. Nesse artigo, os autores destacam que a estrutura da

matriz de empacotamento é governada pela forma, dimensão, assim como a metodologia usada no empacotamento das partículas que compõem o meio poroso.

Visto que as não-uniformidades radiais do leito provocam valores diferenciados na velocidade do fluido e na condutividade térmica do leito nas regiões do centro e da parede, o coeficiente de transferência de calor obtido, não representa unicamente a transferência de calor intrínseca parede-fluido, mas também inclui os efeitos resultantes das variações na velocidade do fluido e condutividade térmica efetiva nas vizinhanças da parede. Dessa forma, fica evidente que a qualidade das estimativas de um dado modelo está associada ao nível de detalhes que este apresenta em relação aos aspectos estruturais do empacotamento, bem como ao caráter estatístico aleatório do meio poroso. Borkink e Westerterp (1994) destacam a influência do fenômeno da formação de caminhos preferenciais do fluido na região da parede, sobre o desempenho de um reator tubular de leito compactado.

2.2 - Caráter estatístico e flutuações angulares de temperatura

Uma das características mais importantes relacionada aos aspectos estruturais do empacotamento de um leito fixo diz respeito ao caráter estatístico dos parâmetros de transporte de calor (temperatura, condutividade térmica, coeficiente de transferência de calor, etc). Wijngaarden e Westerterp (1992), realizando medidas de perfis radiais de temperatura num leito compactado, observaram que existe muita dispersão nos dados quando o leito é reempacotado, ainda que os experimentos replicados sejam realizados sob as mesmas condições operacionais. Segundo esses autores, parte da dispersão nas medidas de temperatura em leitos compactados surge do fato que o leito é heterogêneo na escala da partícula, isto é, se um perfil radial é seguido numa única posição axial, a porosidade é uma variável sem uma característica bem estabelecida, apresentando alternados máximos e mínimos. A outra parte na dispersão dos dados, surge do fato de que a corrente de gás dentro dos vazios é direcionada no espaço de uma maneira estatística. Como resultado, os perfis de temperatura medidos também exibem uma certa quantidade de espalhamento.

Perfis radiais de temperatura medidos na saída de um leito compactado reportados por Cresswell (1986), confirmam as citações de Wijngaarden e Westerterp (1992), em cujos valores medidos, encontraram uma dispersão da ordem de até 10°C entre as réplicas angulares, quando existia um gradiente total de temperatura no leito de 40°C.

Segundo Wijngaarden e Westerterp (1992), se os parâmetros térmicos do modelo matemático proposto forem determinados comparando os dados obtidos com o modelo com os perfis experimentais de temperatura, em alturas individuais, o espalhamento nos perfis experimentais induzirá um espalhamento estatístico nos valores dos parâmetros estimados. Este espalhamento é considerável e fornece uma explicação para a grande discrepância entre as correlações para a condutividade térmica radial e o coeficiente de transferência de calor convectiva reportadas na literatura.

Diversos pesquisadores (Roblee et al., 1958; Pillai, 1977; Stanek e Eckert, 1979; Vortmeyer e Schuster, 1983; Zotin, 1985; Cresswell, 1986; Foumeny et al., 1991; Afandizadeh e Foumeny, 2001) observaram que existem flutuações significativas, mas aparentemente aleatórias, de temperatura em leitos porosos. Tais flutuações são devido às não-uniformidades locais de empacotamento, inerentes ao próprio leito, e parecem ser mais acentuadas quanto menor for a relação entre o diâmetro do leito e da partícula. Todavia, os modelos normalmente utilizados não consideram estas flutuações. Assim, torna-se necessário “filtrar” tais flutuações no tratamento de dados, pois de outra forma os parâmetros térmicos serão estimados com grandes intervalos de incerteza, ou seja, com pequena precisão. Uma forma de se obter dados precisos é utilizar a técnica de medida adequada. Dentre as técnicas consagradas na literatura, destaca-se a do uso do suporte dos termopares em forma de cruz e a dos sensores anelares introduzida por Giudici e Nascimento (1989; 1994).

Schouten e Westerterp (1996) apresentam três diferentes métodos usados para filtrar as variações de temperatura com a posição angular e encontrar um perfil radial de temperatura “adequado” para ajustar os parâmetros térmicos. Uma aproximação é localizar sensores térmicos em várias posições angulares e calcular a média das temperaturas em torno da circunferência do leito compactado, de acordo com a equação:

$$\bar{T}_\theta(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} T(\theta) d\theta \quad (2.1)$$

Ainda segundo Schouten e Westerterp (1996), perfis radiais suavizados são obtidos com este método se um número suficiente de medidas radiais de temperaturas é realizado, mesmo em leitos com baixa razão diâmetro de tubo para diâmetro de partícula. Pelo menos oito termopares são necessários para esta finalidade, de acordo com Dixon (1993). A variação

observada em torno da média é tratada como se esta fosse devido a um erro aleatório de medida, que contribui para aumentar o desvio padrão dos parâmetros térmicos obtidos. Dixon (1985) apresentou erros no número de Bodenstein e no número de Biot na parede, de 10% e 20%, respectivamente, os quais, ele atribuiu principalmente às variações angulares de temperatura. O número de Bodenstein é definido matematicamente como a razão entre o fluxo convectivo de calor na fase fluida pelo fluxo difusivo de calor tomando por base a condutividade térmica efetiva do leito.

Uma outra aproximação para a média das variações angulares é o reempacotamento do leito (Wijngaarden e Westerterp, 1992). Variações angulares são específicas de um certo empacotamento e, para as mesmas condições de operação, o reempacotamento resulta em um perfil radial diferente. Perfis radiais alisados também podem ser obtidos pela média desses diferentes perfis. Em seu trabalho, Borkink e Westerterp (1994) reempacotaram o leito de 5 a 7 vezes, enquanto Wijngaarden e Westerterp (1992), 20 vezes. Embora o reempacotamento altere a estrutura local do leito e, portanto a taxa local de transporte de calor, quase nenhuma diferença foi encontrada na escala do leito nos valores dos parâmetros.

Um terceiro método foi introduzido por Giudici e Nascimento (1989, 1994), que conduziram experimentos de transferência de calor com o ar como fluido percolante, para seis diferentes materiais de empacotamento. Eles desenvolveram um sensor de temperatura em forma de anel consistindo de quatro arames de cobre com um termopar soldado em cada um deles. As medidas de temperatura foram realizadas acima do empacotamento. Ficou evidente segundo estes autores que, tanto experimentalmente quanto teoricamente, a temperatura angular média era medida por tal dispositivo. As variações angulares na temperatura já são filtradas pelas próprias medidas deste dispositivo.

Schouten e Westerterp (1996) estudando especificamente o caráter estatístico das variações angulares de temperatura do leito chegaram às seguintes conclusões: (i) o reempacotamento do leito conduz aproximadamente às mesmas temperaturas médias, apesar das diferenças nos desvios padrões, após cada reempacotamento; (ii) nos experimentos de transferência de calor, as maiores variações angulares de temperatura, provocadas pelos gradientes radiais de temperatura, ocorrem na região de entrada; (iii) apesar do caráter estatístico do leito resultar em significativas variações de temperatura, estas podem ser desprezadas se uma temperatura angular média for usada. Portanto, um modelo determinístico

bidimensional pode ser usado para interpretar os dados térmicos e calcular os parâmetros do modelo.

Os três métodos descritos anteriormente podem, portanto, ser usados para nivelar as variações angulares de temperatura e produzir perfis radiais “adequados” para serem comparados aos obtidos pela solução das equações que compõem um dado modelo determinístico bidimensional. Mesmo assim, ainda permanece a questão: as variações angulares em torno da média podem se negligenciadas? De acordo com Schouten e Westerterp (1996), a resposta para esta pergunta é obtida, fazendo-se um paralelo do uso do modelo unidimensional com uma temperatura média na saída, obtida de dados cujos gradientes radiais de temperatura não sejam elevados.

Além das informações anteriores, com relação às técnicas para a determinação experimental das temperaturas do gás e do sólido, Sartori (1978) apresenta uma ampla revisão, em diferentes tipos de leito, inclusive o fixo.

2.3 - Modelos matemáticos

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

No modelo a duas fases (sólida + fluida), cada uma 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. Embora esse modelo seja fisicamente mais realista, tem sido pouco utilizado 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 (especialmente nos casos onde $d_p \leq 3$ mm).

No modelo pseudo-homogêneo não existe distinção entre as fases. Desse modo, em termos de transferência de calor, a mistura (sólido + fluido) está à mesma temperatura em

cada ponto do leito. Nesse modelo, a natureza heterogênea do leito é considerada apenas indiretamente ou implicitamente através de 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) e Wang et al. (2003).

2.3.1 - Modelos pseudo-homogêneos

Vários modelos pseudo-homogêneos foram propostos na literatura na tentativa de fornecer um ajuste satisfatório entre a temperatura medida experimentalmente e a temperatura prevista pelo modelo.

2.3.1.1 - Modelo unidimensional

Colburn (1931) foi 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. 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:

$$Gc_p D_t \frac{dT}{dz} = 4U(T_w - T) \quad (2.2)$$

com as condições de contorno $T = T_0$, em $z = 0$ e $T = T_U$ em $z = L$, onde T_w é constante para todo z . A integração da Equação 2.2 sugere que o logaritmo natural de T^* depende

linearmente da profundidade do leito z , com o coeficiente angular dado por $-4U/D_t G c_p$, onde, $G = \rho_f u_z \varepsilon$ e $T^* = (T - T_0)/(T_w - T_U)$.

A temperatura média na saída do leito compactado T_U é obtida do perfil radial medido na saída pela seguinte equação:

$$T_U = \frac{2 \int_0^R r T(r) dr}{R^2} \quad (2.3)$$

Dixon (1996) usando o modelo pseudo-homogêneo 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 contemplando 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 pseudo-homogêneo 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.

2.3.1.2 - Modelos bidimensionais

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:

$$Gc_p \frac{\partial T}{\partial z} = k_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + k_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.4)$$

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 2.4, é desprezado (Wash e Froment, 1972; Li e Finlayson, 1977). Neste caso, a Equação 2.4 reduz-se a:

$$Gc_p \frac{\partial T}{\partial z} = k_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) \quad (2.5)$$

A Tabela 2.1 apresenta o conjunto de condições de contorno e as respectivas soluções para a Equação 2.5. Vale salientar que as soluções apresentadas na Tabela 2.1 para a Equação 2.5 são aplicadas apenas na situação de leito fixo cilíndrico, de seção transversal circular.

TABELA 2.1 - Condições de contorno e soluções da equação (2.5).

Condições de contorno	Solução da equação de balanço de energia
$z = 0, \quad T = T_0 \quad (2.6a)$ $r = 0, \quad \partial T / \partial r = 0 \quad (2.6b)$ $r = R, \quad T = T_w \quad (2.6c)$	$\frac{T - T_w}{T_0 - T_w} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0 \left(a_n \frac{r}{R} \right)}{a_n J_1(a_n)} \exp \left(\frac{-k_r a_n^2}{Gc_p R^2} z \right) \quad (2.8)$ $J_0(a_n) = 0$
$z = 0, \quad T = T_0 \quad (2.7a)$ $r = 0, \quad \partial T / \partial r = 0 \quad (2.7b)$ $r = R,$ $-K_r \frac{\partial T}{\partial r} = h_w (T - T_w) \quad (2.7d)$	$\frac{T - T_w}{T_0 - T_w} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi J_0 \left(a_n \frac{r}{R} \right)}{(Bi^2 + a_n^2) J_1(a_n)} \exp \left(\frac{-k_r a_n^2}{Gc_p R^2} z \right) \quad (2.9)$ $Bi J_0(a_n) - a_n J_1(a_n) = 0, \quad Bi = \frac{h_w R}{k_r}$

Vários trabalhos (Plautz e Johnstone, 1955, Calderbank e Pogorski, 1957, Yagi e Wakao, 1959, Wash e Froment, 1972, Li e Finlayson, 1977, Thoméo et al., 1989, 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. Pesquisadores como Li e Finlayson (1977), Sartori (1978) e Freire (1979) descrevem detalhadamente os vários métodos propostos na literatura, de como calcular os parâmetros térmicos a partir da Equação 2.9 da Tabela 2.1.

- **Efeitos térmicos de entrada**

Os resultados de alguns autores (Wash e Froment, 1972; Li e Finlayson, 1977; Paterson e Carberry, 1983; Dixon, 1985; e Freiwald e Paterson, 1992, Dixon, 1996; Thoméo e Freire, 2000) revelaram que existe uma forte dependência dos parâmetros térmicos com a altura do leito. Esta constatação é sem dúvida inconsistente com os princípios básicos dos

modelos pseudo-homogêneo e heterogêneo. Wash e Froment (1972) observaram que, em relação à profundidade do leito, k_r e h_w têm elevados valores para leitos de pequena altura, decrescendo à medida que a altura do leito aumenta, atingindo no final seus valores assintóticos.

Uma causa razoavelmente convincente para o aparecimento do efeito do comprimento sobre os coeficientes de transporte de calor em leitos fixos reais, é a existência da não-homogeneidade no campo de velocidade do fluido percolante. A dispersão real de calor, portanto não ocorre sob velocidade mássica constante, como geralmente se presume na maioria dos modelos. A não-homogeneidade no campo de velocidade pode ser induzida por não-homogeneidades estruturais do leito e/ou provocada devido à não-homogeneidade do campo de temperatura (Vortmeyer e Schuster, 1983; Dixon, 1985, Borman e Westerterp, 1992).

Wash e Froment (1972), Dixon et al. (1978), Dixon (1985), Chalbi et al. (1987), Herman et al. (1987), Thoméo et al. (1989); Thoméo e Freire (2000) e Ferreira et al. (2002), utilizaram mais de um termo da série na Equação 2.9 para estimar os valores de k_r e h_w , aplicando o método dos mínimos quadrados, variando apenas a técnica de otimização empregada. Observaram que o comportamento de k_r com a altura do leito é análogo ao observado no modelo a um parâmetro, isto é, k_r parte de valores elevados para leitos curtos e cai assintoticamente para um valor constante à medida que a altura do leito aumenta. Já h_w , apresentou um comportamento bastante irregular, apesar de partir de valores altos para leitos de pequena altura. Quanto ao comportamento destes parâmetros com relação ao número de Reynolds, ambos têm uma dependência linear crescente com o mesmo.

O emprego do modelo a dois parâmetros faz com que o ajuste entre as temperaturas experimental e a prevista pelo modelo seja de boa qualidade somente para leitos longos. Para leitos curtos, este ajuste ainda é considerado ruim, como pode ser confirmado pelos resultados apresentados por inúmeros pesquisadores (Gunn e Khalid, 1975; Dixon et al., 1978; Stanek e Vychodil, 1984; Dixon, 1985 e Herman et al., 1987).

Visando eliminar a forte influência dos parâmetros com a altura do leito, atribuída por alguns autores (Li e Finlayson, 1977; Stanek e Vychodil, 1984; Mc Greavy e Ikponmwosa, 1988 e Thoméo et al., 1989) aos efeitos térmicos de entrada e por outros (Gunn e Khalid,

1975; Dixon et al. 1978, Chalbi et al. 1987; Oliveira e Lima, 2001 e Oliveira et al., 2003), a fortes deficiências de caráter físico, existente no modelo, Gunn e Khalid (1975) e Dixon et al. (1978) propõem um modelo a uma fase que leva em conta o termo de dispersão axial e considera o leito composto de duas seções: uma seção de entrada para o desenvolvimento do perfil de velocidade do fluido e uma seção térmica na qual se desenvolveriam os fenômenos de transferência de calor. A primeira seção está contida no domínio $z < 0$, e a segunda no domínio $z > 0$. O modelo a três parâmetros é representado matematicamente pela Equação 2.4, e as seguintes condições de contorno axiais e radiais:

(a) para a seção de entrada teremos:

$$z \rightarrow -\infty \quad T_E \rightarrow T_0 \quad (2.10a)$$

$$z = 0 \quad \partial T_E / \partial z = \partial T / \partial z \quad (2.10b_1)$$

$$r = 0 \quad \partial T_E / \partial r = 0 \quad (2.10c)$$

$$r = R \quad -k_r \frac{\partial T_E}{\partial r} = h_w (T_E - T_0) \quad (2.10d)$$

(b) para a seção de troca térmica:

$$z = 0 \quad \partial T / \partial z = \partial T_E / \partial z \quad (2.11a)$$

$$z \rightarrow \infty \quad T \rightarrow T_w \quad (2.11b_1)$$

ou

$$z = L \quad \partial T / \partial z = 0 \quad (2.11b_2)$$

$$r = 0 \quad \partial T / \partial r = 0 \quad (2.11c)$$

$$r = R \quad -k_r \frac{\partial T}{\partial r} = h_w (T - T_w) \quad (2.11d)$$

A solução da Equação 2.4, usando as condições de contorno dadas pelas Equações 2.11a, 2.11b₁, 2.11c e 2.11d, produzem o modelo de fluxo pistonado axialmente disperso e condição de contorno infinita, cuja solução matemática é dada por:

$$\frac{T - T_w}{T_0 - T_w} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi(1 + A_n)J_0\left(a_n \frac{r}{R}\right)}{A_n(Bi^2 + a_n^2)J_0(a_n)} \exp\left[\frac{-Gc_p}{2k_z}(A_n - 1)z\right] \quad (2.12)$$

onde:

$$A_n = \left[1 + \left(\frac{2a_n}{RGc_p}\right)^2 k_r k_z\right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{e } a_n, \text{ são as raízes positivas da seguinte equação}$$

característica,

$$BiJ_0(a_n) - a_n J_1(a_n) = 0.$$

Já com as condições de contorno dadas pelas Equações 2.11a, 2.11b₂, 2.11c e 2.11d, obtém-se como solução o modelo de fluxo pistonado axialmente disperso e condição de contorno finita, cuja solução matemática é dada por:

$$\frac{T - T_w}{T_0 - T_w} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi(1 + A_n)J_0\left(a_n \frac{r}{R}\right)}{A_n(Bi^2 + a_n^2)J_0(a_n)} \left\{ \exp\left[\frac{-Gc_p}{2k_z}(A_n - 1)z\right] + B_n \right\} \quad (2.13)$$

onde:

$$B_n = \left(\frac{A_n - 1}{A_n + 1}\right) \exp\left[\frac{Gc_p}{2k_z}(A_n(2L - z) - z)\right]$$

sendo a_n , obtido de maneira similar ao obtido para a Equação 2.12.

Vale salientar que Silveira (1991), utilizando o modelo de fluxo pistonado axialmente disperso e condição de contorno infinita, observou que os parâmetros condutividade térmica efetiva radial k_r , coeficiente de transporte de calor parede-meio h_w e a condutividade térmica efetiva axial k_z , não apresentaram comportamento bem definido em relação à posição axial,

não sendo possível visualizar qualquer tendência entre estes parâmetros e essa variável. Em relação à estimativa do parâmetro k_z , este se revelou altamente impreciso, apresentando valores dentro da faixa de 0,0042 a 41,82 W/m°C. Giudici e Nascimento (1989, 1994) realizaram um estudo sobre a sensibilidade paramétrica e concluíram que este modelo é pouco sensível às variações no parâmetro k_z , o que em parte explica a alta imprecisão obtida na estimativa deste parâmetro e justifica a pequena quantidade de dados sobre o mesmo, disponível na literatura.

As tentativas de Dixon (1985) para explicar o efeito do comprimento sobre os coeficientes de transporte de calor, provocado pela condução através do sólido e pela não-uniformidade no perfil de velocidade, mostraram que esses não eram os únicos responsáveis. A condutividade térmica efetiva axial k_z , no modelo a três parâmetros, engloba outros efeitos além da condução através do sólido (k_{zs}) e não-uniformidade no perfil de velocidade $G(r)$. Stanek e Vychodil (1984) chegaram à mesma conclusão a partir de uma análise de seus próprios dados experimentais.

Dixon (1985) afirmou que a elevada anormalidade da condutividade térmica efetiva axial k_z , observada nos experimentos com leitos compactados, está relacionada a um mecanismo adicional de transferência de calor axial presente, além daqueles mencionados acima. Este autor sugeriu que a fuga de calor por condução ao longo das paredes, a partir da seção de entrada aquecida, pode ser responsável pelos efeitos do comprimento e anomalias sobre os valores de k_z . Segundo ele, os efeitos de entrada térmicos seriam minimizados caso fosse incluído no modelo adotado, a existência de um perfil radial de temperatura na entrada do leito provocado pela fuga de calor da seção aquecida para a seção térmica.

Borkink e Westerterp (1992a, 1994), mesmo utilizando um modelo a dois parâmetros junto com as hipóteses de perfil de velocidade plano e desenvolvido, porosidade do leito uniforme e constante, e impondo um perfil de temperatura radial do tipo parabólico na entrada do leito ($z = 0$), obtiveram estimativas dos coeficientes térmicos efetivos ausentes do efeito do comprimento. Segundo estes autores, assumir um perfil de temperatura plano na entrada, enquanto o perfil real é curvo, pode conduzir a uma influência aparente da dispersão axial de calor e assim obter estimativas dos parâmetros dependentes do efeito de entrada.

Uma superestimativa da temperatura do gás na entrada, no caso de resfriamento, pode ser compensada pela suposição de uma temperatura inferior ou, um pico de temperatura na entrada, como é feito quando se usa a condição de contorno tipo Danckwerts, na entrada do reator, dada por:

$$k_z \frac{\partial T}{\partial z} = GC_p (T_0^+ - T_0^-) \quad \text{em } z = 0 \quad (2.14)$$

onde T_0^- e T_0^+ , representam as temperaturas medidas por termopares inseridos imediatamente antes e depois da entrada do leito (posição axial $z = 0$).

A virtual dependência dos coeficientes de transporte de calor com o comprimento aparentemente desaparecem, se o termo de dispersão axial de calor for incluído na modelagem do leito fixo, juntamente com a condição de contorno acima (Borkink e Westerterp, 1992).

- **Efeito da não-uniformidade radial**

A análise descrita nas seções anteriores, para o modelo pseudo-homogêneo, a um, a dois e a três parâmetros mostra que o mesmo, em suas várias formas, considera que a porosidade é constante em todo o leito e que o perfil de velocidade do fluido é do tipo pistonado. Entretanto, alguns pesquisadores (Lerou e Froment, 1977; Zotin, 1985; Mc. Greavy et al. 1988; e Afandizadeh e Foumeny, 2001), verificaram experimentalmente que a porosidade apresenta variações tanto radiais quanto axiais. Quanto menor a razão diâmetro do leito/diâmetro da partícula, mais acentuadas serão as variações radiais de porosidade. Tais flutuações podem causar significativas variações locais no perfil de velocidade do fluido, e em consequência, flutuações tanto radiais quanto angulares na temperatura no interior do leito compactado.

Jorge e Giudici (1993) apresentam uma ampla revisão dos trabalhos que incluem uma distribuição radial de porosidade no leito e conseqüentemente de um perfil radial de velocidade. Trabalhos como os de Lerou e Froment (1977) e Kalthoff e Vortmeyer (1980) apresentam de forma brilhante, uma descrição detalhada da não-uniformidade radial estrutural do leito, de modo a conseguir uma representação mais fiel do comportamento do reator de

leito fixo, mantendo ainda, entretanto, o uso de um coeficiente parede-leito. Outros trabalhos, como os de Ahmed e Fhien (1980), Delmas e Froment (1988) e Hunt e Tien (1988 e 1990) incorporam a não-uniformidade radial, todavia sem o uso de um coeficiente de transferência de calor parede-leito.

Alazmi e Vafai (2002) analisando uma condição de contorno de fluxo de calor constante na parede de um meio poroso, na ausência de equilíbrio térmico local, destacaram que, quando os efeitos de porosidade variável e dispersão térmica são excluídos do modelo, os reflexos do número de Reynolds, número de Darcy, diâmetro da partícula e a razão de condutividades sólido-fluido são extremamente marcantes nas predições de temperatura do modelo.

Segundo Yagi e Kunii (1957), pelo fato de a condutividade térmica ser um parâmetro efetivo, esta deve englobar tanto mecanismos condutivos quanto os mecanismos convectivos, e se o perfil de velocidade do fluido depender da posição radial, a condutividade térmica também dependerá. Baseado nestas hipóteses, Kwong e Smith (1957) propuseram um modelo que leva em conta a dependência do parâmetro condutividade térmica efetiva, da velocidade do fluido e da porosidade do leito com a posição radial. Este modelo parte da equação da energia sem o termo de dispersão axial na forma:

$$\rho c_p u(r) \frac{\partial T}{\partial z} = k_r(r) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \left(\frac{\partial T}{\partial r} \cdot \frac{\partial k_r(r)}{\partial r} \right) \quad (2.15)$$

As condições de contorno admitidas por estes autores foram as seguintes:

$$\text{em } z = 0 \quad T = T_0(r) \quad (2.16a)$$

$$\text{em } r = 0 \quad \partial T / \partial r = 0 \quad (2.16b)$$

$$\text{em } r = R \quad T = T_w \quad (2.16c)$$

A solução da Equação 2.15, obtida a partir de um produto de duas funções $\hat{\phi}_i(r)$ e $\zeta(z)$, tem a forma:

$$T^* = \sum_{i=1}^n A_i \hat{\phi}_i(r) \exp(-\lambda_i z) \quad (2.17)$$

onde A_i é uma constante a ser determinada.

Adotando-se a assertiva de Coberly e Marshall (1951) de que, se o leito for suficientemente longo, somente o primeiro termo da série será significativo, pode-se então determinar o auto-valor λ_1 através da integração numérica da Equação 2.17, uma vez que a inequação $\frac{k_r L}{Gc_p R^2} > 0,2$ será satisfeita. Assim, ter-se-á para o autovalor λ_1 :

$$\lambda_1 = \frac{1}{L} \ln \left[\frac{\int_0^R T_0(r) T_L(r) u(r) \rho c_p r dr}{\int_0^R T_L^2(r) u(r) \rho c_p r dr} \right] \quad (2.18)$$

De posse do valor de λ_1 , pode-se então obter o perfil de condutividade térmica numa altura qualquer de leito, em particular em $z = L$, através da equação:

$$k_r(r) = -\lambda_1 \frac{\int_0^R T_L(r) u(r) \rho c_p r dr}{r \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_L} \quad (2.19)$$

Bunnel et al., (1949) e Kwong e Smith (1957) obtiveram valores pontuais de k_r através do uso da Equação 2.8 e diferenciação gráfica do perfil radial experimental. Foi observado por Kwong e Smith (1957), um comportamento de k_r similar ao do perfil radial de velocidade do fluido, ocorrendo um pico próximo à parede do leito, sendo que a razão de aspecto diâmetro do leito/diâmetro da partícula é quem determina a amplitude deste pico. Quanto ao comportamento de k_r frente ao número de Reynolds, Thoméo (1990) observou que para leitos curtos, k_r não obedece a uma relação linear, porém, para leitos longos, esta relação é linear crescente conforme atestam os resultados publicados por Wash e Froment (1972), Li e Finlayson (1977) e Ferreira et al. (2002). O perfil de condutividade térmica assim determinado apresenta um ponto de máximo, na região próxima à parede do leito, região esta onde a porosidade do leito é maior, permitindo que uma maior quantidade relativa de fluido por aí passe, tornando-se mais efetiva a troca de calor. Porém, este perfil tem pouca utilidade

prática tornando-se necessário obter um valor médio de condutividade através da definição de uma variável média como segue:

$$\overline{k_r(r)} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^R k_r(r) r dr d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\theta} \quad (2.20)$$

O significado físico deste parâmetro médio é semelhante ao de k_r do modelo a um parâmetro, vindo este parâmetro a ser representativo de todo o leito.

Silveira (1991) utilizando a Equação 2.20 para obter $\overline{k_r(r)}$ e analisando seus dados de transferência de calor em leito fixo, obteve os seguintes resultados: (i) o ajuste entre as temperaturas previstas por este modelo e as medidas experimentalmente foi muito superior àquele apresentado pelo modelo a um parâmetro sem considerar as não-uniformidades radiais do leito; (ii) a condutividade térmica do meio poroso não apresenta modificações significativas com a introdução dos perfis radiais de velocidade e condutividade no modelo, mostrando a consistência física desta formulação; (iii) o parâmetro condutividade térmica média $\overline{k_r(r)}$, definido pela Equação 2.20 é praticamente constante em todo o leito, não sofrendo influência da posição axial.

Observa-se dos trabalhos apresentados neste capítulo que a preocupação em se avaliar a qualidade do dado experimental, frente ao nível de informação paramétrica da posição de medida, sobre as estimativas dos parâmetros tem sido relegada em segundo plano. A grande maioria dos trabalhos relacionados à transferência de calor em leitos compactados está direcionada objetivando explorar ora o aspecto da modelagem do fenômeno, ora o aspecto das características da técnica experimental utilizada. Poucos são os trabalhos que se preocupam com o nível de informação paramétrica dos dados experimentais.

Uma tentativa neste sentido foi realizada por Sklivaniotis et al. (1988) em um trabalho de simulação utilizando o modelo pseudo-homogêneo a dois parâmetros, com um perfil de temperatura plano na entrada do leito. Esses autores estudaram a sensibilidade paramétrica do modelo e chegaram à conclusão que a distribuição e os valores numéricos da sensibilidade paramétrica no leito, são fortemente dependentes da vazão mássica de fluido e dos valores

atribuídos aos parâmetros. Eles definem sensibilidade de um sistema em relação aos parâmetros, como a mudança no valor de uma variável de estado, causada por uma pequena mudança nos valores dos parâmetros. Portanto, a sensibilidade paramétrica pode ser usada como guia para obter localizações ótimas dos sensores de temperatura em experimentos de estimativa de parâmetros. Se o método de estimativa de parâmetros é baseado na performance de um índice quadrático (mínimos quadrados, por exemplo), os valores da sensibilidade paramétrica servem para fixar os valores dos elementos da matriz da função residual, para aumentar a velocidade de convergência e segurança nas estimativas dos parâmetros.

Giudici (1990) realizou um estudo de sensibilidade paramétrica em um reator catalítico de leito fixo, utilizando o modelo de fluxo pistonado axialmente disperso e condição de contorno infinita, e concluiu que o modelo é pouco sensível a variações no valor do parâmetro condutividade térmica axial k_z , e, por conseguinte, esse parâmetro é determinado com grande intervalo de incerteza no tipo de experimento que comumente vem sendo estudado.

2.3.1.3 - Efeito de uma reação química na temperatura do leito

Nos parágrafos a seguir, serão abordados vários estudos de transferência de calor e massa, acompanhados por reação química em um reator de leito fixo reportados na literatura, cada um com suas condições de operação e hipóteses particulares.

Andrigo et al. (1999) afirmaram que os leitos fixos de partículas catalíticas são os tipos de reatores mais largamente usados na indústria para promover reações heterogêneas (gás-sólido) na produção de intermediários e produtos químicos básicos. Nos últimos anos, os reatores de leito fixo também vêm sendo crescentemente usados para tratar substâncias tóxicas e prejudiciais aos seres vivos e ao ambiente. A remoção de óxidos de nitrogênio de chaminés de centrais elétricas e purificação de efluentes gasosos de escapamentos automotivos representam atualmente sem dúvida as aplicações mais amplamente empregadas entre os engenheiros químicos e pesquisadores.

Young e Finlayson (1973) desenvolveram um critério para reatores de leito compactado não-isotérmico com parede aquecida ou resfriada para prever quando o termo de dispersão axial de calor é importante ou não. O critério independe do comprimento do

reator, tanto que a importância da dispersão axial de calor não pode ser minimizada pelo aumento do comprimento do reator. O critério é aplicado aos dados experimentais apresentados por Schuler et al. (1954), para oxidação do SO_2 num catalisador de alumina impregnado com platina, e o critério sugere que a dispersão axial de calor seja considerada. Os dados experimentais aparentemente não podem ser ajustados com o modelo excluindo a dispersões axial de calor, contudo um modelo incluindo ambas as dispersões radial e axial de calor prediz corretamente os dados experimentais.

Kalthoff e Vortmeyer (1980) compararam os perfis de temperatura, medidos num reator de leito fixo, de parede resfriada (os experimentos foram realizados com a reação de oxidação exotérmica do etano) com a solução do modelo pseudo-homogêneo bidimensional. Uma melhor concordância com os resultados experimentais foi obtida quando as equações governantes foram resolvidas considerando a existência de um perfil de porosidade radial e distribuição radial de velocidades. Esses autores chegaram à mesma conclusão que Lerou e Froment (1977), em relação a que elevados perfis axiais de temperatura só são obtidos quando a solução inclui perfis radiais de velocidades e porosidade em comparação com a hipótese de sistemas de fluxos pistonados.

Puszynski et al. (1981) utilizando modelos de uma única fase incluindo tanto os efeitos de dispersão axial quanto dispersão radial e axial simultaneamente resolveram a equação utilizando o método das diferenças finitas e o método de Newton-Raphson. Estes autores mostraram que podem existir dois estados estacionários estáveis quando se utiliza reator de leito compactado não adiabático muito longo. Segundo esses autores, a ocorrência de múltiplos estados estacionários é influenciada por uma série de fatores, dentre os quais podemos citar: (i) intensidade do resfriamento, (ii) tempo de contato do fluido com o meio poroso, (iii) magnitude da energia gerada na reação e (iv) tipos de reações envolvidas.

Duarte et al. (1984) introduziram um modelo heterogêneo unidimensional (levando em conta uma reação química irreversível de primeira ordem) que considera separadamente a transferência de calor através das fases sólida e fluida. A resposta deste modelo é comparada com a de um modelo heterogêneo bidimensional. Seu desempenho é melhor que modelos unidimensionais anteriores, e os desvios são explicados em termos de condições operacionais.

Gatica et al. (1989), estudaram a interação entre os termos de reação química e convecção natural em um meio poroso, com várias condições de entrada para convecção natural representados pelo valor crítico do número de Rayleigh de transferência de calor. O problema de valor inicial é analisado por rotinas contínuas e diagramas de bifurcação são mostrados. Resultados mostraram que os efeitos da convecção natural são proeminentes no regime de difusão. Neste regime a solução é usualmente caracterizada por condições de contorno próximas a saída do sistema. Se a direção do fluxo é invertida (alimentação por baixo do reator) a convecção natural será estabelecida para valores extremamente negativos do número de Rayleigh.

Rodrigues e Ferreira (1990) destacam em seu trabalho, o efeito da convecção intrapartícula em catalisadores de poros grandes, sobre o comportamento global do reator, utilizando neste estudo, modelos heterogêneos e pseudo-homogêneos para encontrar condições de operação estáveis e mais favoráveis.

Azevedo et al. (1990) apresentaram uma revisão extremamente elegante sobre fatos e conceitos relacionados à modelagem e operação de reatores tubulares catalíticos de leito fixo. Nesse artigo, 55 (cinquenta e cinco) sistemas experimentais são reportados, incluindo os tipos de modelo adotados e os objetivos dos vários estudos envolvidos. A metodologia da modelagem do reator é discutida em associação com aproximações alternativas para modelos clássicos mais recentes do problema da transferência de calor.

Assaf et al. (1995) apresentam um trabalho que estudou o comportamento fluidodinâmico de um reator de leito fixo onde ocorre a reação de oxidação do etileno a óxido de etileno através de um modelo fenomenológico que considera as não uniformidades radiais da porosidade e da velocidade. Duas equações matemáticas foram ajustadas aos dados obtidos: uma representando um perfil de porosidade simplificado na forma exponencial e outra, o perfil de porosidade na forma oscilatória amortecida. Os perfis radiais de velocidade foram gerados, para cada posição axial, através da resolução da equação diferencial de quantidade de movimento pelo método da colocação ortogonal sobre elementos finitos. Os perfis axiais de pressão foram obtidos pela resolução das equações diferenciais do modelo unidimensional pseudo-homogêneo estacionário do processo de oxidação.

Balakotaiah et al. (1999), estudaram a relação existente entre a razão diâmetro do reator e diâmetro da partícula sobre as não-uniformidades no perfil de temperatura e perfil transversal de concentração quando se contempla na modelagem do reator, a ocorrência de uma reação catalítica heterogênea complexa do tipo mecanismo Langmuir-Hinshelwood.

Burghardt et al. (1999) estudaram a influência de uma reação de primeira ordem juntamente com a adoção da hipótese de uma frente térmica ideal de temperatura se deslocando uniformemente ao longo do reator, sobre o perfil de temperatura na saída.

Wang et al. (2003) desenvolveram um modelo unidimensional heterogêneo para simular o comportamento de um reator de leito fixo sobre o andamento de uma reação catalítica heterogênea do tipo Fischer-Tropsch, para a produção de hidrocarbonetos.

Dos parágrafos descritos neste capítulo em relação aos estudos reportados na literatura, fica caracterizado que inúmeras variáveis podem interferir no comportamento, desempenho e projeto de tais sistemas reacionais, sendo um deles, a ocorrência de reação química que dependendo do valor da energia envolvida, afeta significativamente o comportamento do reator em análise.

2.3.2 - Modelos heterogêneos

Segundo Azevedo et al. (1990) um modelo geral de conservação para um reator catalítico de leito fixo de fluxo tubular (TFBCR) deve considerar o transporte de calor e massa intrapartícula e interfase. As estruturas mais complexas reconhecem a existência de fases distintas no meio poroso, e constituem os chamados modelos heterogêneos. A forma mais comum da descrição determinística dos processos físicos e químicos ocorrendo num TFBCR é a conhecida aproximação Fickiana. Para o caso de partículas esféricas num reator cilíndrico, os balanços bifásicos transientes de massa e energia considerando ambas as fases fluida e sólida como um meio contínuo, são representados matematicamente por:

Para a fase fluida

Balanço de energia

$$\varepsilon \rho_f c_{p_f} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_{rf} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{af} \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{\partial (\rho_f u_z c_{p_f} T)}{\partial z} + a_p h (T_p^s - T) \quad (2.21)$$

Balanço de massa

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{rf} \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{af} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial (u_z C)}{\partial z} + a_p k_c (C_p^s - C) \quad (2.22)$$

Para a fase sólida

Balanço de energia

$$(1 - \varepsilon) \rho_s c_{p_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_{rs} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{as} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + \quad (2.23)$$

$$+ (1 - \varepsilon) \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + (1 - \varepsilon) (-\Delta H) \eta r_A (C_p^s, T_p^s)$$

Balanço de massa

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial C_p}{\partial t} = a_p k_c (C_p^s - C) - (1 - \varepsilon) \eta r_A (C_p^s, T_p^s) \quad (2.24)$$

Na solução das equações desse modelo, a seguinte condição inicial e de contorno são adotadas:

Para $t = 0$ e $z \geq 0$,

$$T(r, z) = T_{inicial}(r, z)$$

$$T_s(r, z) = T_{sinicial}(r, z) \quad (2.25a-d)$$

$$C(r, z) = C_{inicial}(r, z)$$

$$C_s(r, z) = C_{sinicial}(r, z)$$

$$\text{Em } t > 0 \text{ e } z = 0, \quad T = T_0, \quad C_f = C_0$$

$$\text{Em } r = 0, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = \frac{\partial T_f}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial C_s}{\partial r} = \frac{\partial C_f}{\partial r} = 0 \quad (2.26a-c)$$

$$\text{Em } r = R, \quad \frac{\partial C_s}{\partial r} = \frac{\partial C_f}{\partial r} = 0 \quad T_f = T_s = T_w$$

A aproximação heterogênea básica constitui um procedimento de aprendizagem complexa envolvendo um custo computacional tão elevado que impede o seu uso para propósitos de controle e otimização de um reator, mesmo com o poder e velocidade dos computadores disponíveis atualmente. Porém, como os modelos preditivos são continuamente procurados - em ambos os níveis, de partícula e reator global - simplificações são necessárias. As diretrizes pragmáticas para tais simplificações são:

- (i) o modelo não deve ser mais detalhado que o absolutamente necessário para os propósitos práticos envolvidos;
- (ii) o modelo deve conter o menor número de parâmetros possível;
- (iii) correlações confiáveis devem existir para os parâmetros do modelo escolhido;
- (iv) o esforço matemático/computacional requerido para a solução das equações do modelo deve ser razoável.

Algumas das hipóteses simplificatórias comumente aceitas pela comunidade científica da área são:

- (a) a pressão se mantém constante no reator;
- (b) a condutividade térmica da partícula é constante;
- (c) valores médios para as propriedades físicas e de transporte são usados;
- (d) perfil de temperatura plano na entrada do reator;
- (e) a temperatura da parede do reator se mantém constante;
- (f) porosidade do leito constante;

- (g) perfil radial de velocidade plano;
- (h) atividade catalítica constante

As hipóteses (a), (b) e (c) são empregadas na maioria dos casos. Contudo, variações na pressão, na condutividade da partícula, e nas propriedades físicas e de transporte são relativamente fáceis de serem incluídas se o modelo está sendo resolvido numericamente (o grau de dificuldade de tais implementações varia com a técnica numérica específica adotada). Porosidade do leito constante e perfil de velocidade plano [(f) e (g)] são hipóteses geralmente adotadas, embora alguns autores (Kalthoff e Vortmeyer, 1980; Ahmed e Fahien, 1980, Delmas e Froment, 1988) tenham considerado variações nessas variáveis também.

2.3.3 - Determinação 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 (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:

- a) Mecanismos de condução de calor
 - a1). Condução através das partículas sólidas;
 - a2). Condução através do fluido nos poros;
 - a3). Condução através do fluido estagnado na região do contato entre as partículas;
 - a4). Condução pela região do contato entre as partículas.

- b) Mecanismos de convecção de calor
 - b1). Convecção forçada - transferência de calor sólido-fluido;
 - b2). Dispersão térmica na fase fluida.

c) Mecanismos de radiação de calor

c1). Radiação entre as superfícies das partículas;

c2). Absorção de calor por radiação pelo fluido.

Tendo em vista os mecanismos de transporte de calor acima mencionados, é de se esperar que a condutividade térmica efetiva de um meio poroso seja uma função de muitos parâmetros, como por exemplo, as propriedades físicas do fluido e do sólido (viscosidade, condutividade térmica, forma e orientação das partículas), pontos de contato entre as partículas, porosidade do meio, velocidade do fluido, etc.

Nield e Bejan (1992), afirmam que em geral, a condutividade térmica global de um meio poroso depende da natureza complexa da geometria do meio.

Nos parágrafos a seguir serão apresentadas algumas correlações propostas na literatura para o cálculo da condutividade térmica do meio, levando em conta a influência de alguns parâmetros acima mencionados, que serão utilizadas para comparar com os resultados obtidos a partir dos modelos matemáticos propostos.

2.3.4 - Correlações para a condutividade térmica na estagnação (fluido estagnado)

Tsao (1961) e Nield e Bejan (1992) propõem que se a condução de calor nas fases fluida e sólida ocorrer em paralelo, então a condutividade térmica do meio será calculada pela média aritmética ponderada das contribuições das fases individuais, ou seja,

$$k_0 = (1 - \varepsilon)k_s + \varepsilon k_f \quad (2.27)$$

nesta equação, ε 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, Tsao (1961) e 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, dada por:

$$k_0 = \frac{k_s k_f}{k_s \varepsilon + k_f (1 - \varepsilon)} \quad (2.28)$$

Em geral, os valores obtidos pelas Eqs. (2.28) e (2.29) fornecem os limites superior e inferior, respectivamente, da real condutividade do meio, k_m . Sempre ter-se-á os valores obtidos pela Equação 2.28 menores que aqueles obtidos com a Equação 2.27, com a igualdade ocorrendo se e somente se $k_s = k_f$. Para propósitos práticos, uma estimativa 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, determinada por:

$$k_0 = k_f^\varepsilon k_s^{(1-\varepsilon)} \quad (2.29)$$

esta correlação fornece uma boa estimativa para a condutividade térmica do meio, somente quando k_s e k_f forem muito diferentes um do outro (Nield, 1991b).

Gorring e Churchill, citados por Kulkarni e Doraswamy (1980), apresentaram uma correlação para estimativa de k_0 , 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:

$$k_0 = \left[\varepsilon + (1 - \varepsilon) \left(\frac{\beta''}{\delta + \frac{2}{3} \left(\frac{k_f}{k_s} \right)} \right) \right] k_f \quad (2.30)$$

nesta expressão, β'' 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 δ é a medida da espessura da camada de fluido estagnado, sendo obtida através de uma carta gráfica apresentada por estes autores e que é função da relação k_f/k_s .

2.3.5 - Correlações para a condutividade térmica efetiva com fluxo de fluido

Dentre as inúmeras correlações propostas na literatura, apresentam-se aqui, somente aquelas que, de certa forma, foram obtidas em condições operacionais semelhantes àsquelas usadas neste trabalho e com partículas com a mesma forma e faixa granulométrica.

Baseado em estudos teóricos sobre a transferência de calor em meios porosos, Yagi e Kunii (1957), propuseram uma expressão constituída de dois termos, um dependente e outro independente, da velocidade do fluido, na forma:

$$k_{er} = k_0 + (\alpha\beta)RePr k_f \quad (2.31)$$

o parâmetro $(\alpha\beta)$ serve para caracterizar a dinâmica do escoamento, sendo definido como o inverso do número de Peclet de transferência calor modificado, assumindo no caso de partículas cilíndricas o valor 0,1, para razão diâmetro de partícula-diâmetro do tubo na faixa de $0,0360 < dp/D < 0,24$ e número de Reynolds de partícula na de faixa $20 < Re < 800$.

Bunnell et al. (1949) realizaram medidas de condutividade térmica para um meio poroso de 50,8 cm de diâmetro percolado por ar. O meio poroso era constituído de partículas cilíndricas de alumina de 3,2 mm, com vazões de ar correspondentes a números de Reynolds de partícula no intervalo compreendido entre $35 < Re < 120$. A seguinte correlação foi proposta:

$$k_{er} = k_0 + 0,061Re k_f \quad (2.32)$$

nestas equações, Re é o número de Reynolds de partícula, Pr o número de Prandtl e k_0 , representa o valor da condutividade térmica do meio na estagnação, podendo ser calculada por meio de qualquer correlação anterior.

Molino e Hougen, citados por Freire (1979), realizaram várias medidas de condutividade efetiva radial de meios porosos constituídos de partículas cilíndricas de celite, percolados por ar. A granulometria das partículas situava-se na faixa de 1,6 a 9,5 mm, para número de Reynolds de partícula variando entre 50 e 4000. A correlação empírica que melhor representa seus dados é da forma:

$$k_{er} = \frac{1,23}{\varepsilon} \left(\frac{G\sqrt{a_p}}{\mu} \right)^{0,49} k_f \quad (2.33)$$

na Equação 2.33, a_p , representa a superfície específica da partícula, G é o fluxo mássico específico e μ , a viscosidade do fluido percolante.

Wash e Froment (1972) executaram experimentos com catalisadores de óxido de ferro (para síntese de amônia) com $d_p = 9,5$ mm, pentóxido de vanádio (para obtenção de ácido sulfúrico) com $d_p = 5,9$ mm e pentóxido de vanádio (para produção de anidrido ftálico) com $d_p = 5,7$ mm, para número de Reynolds de partícula variando entre 25 e 900, usando em todos os casos, o ar como fluido percolante. Analisando seus resultados, propuseram uma correlação empírica para o cálculo da condutividade térmica, dada por:

$$k_{er} = k_0 + \frac{0,0025}{1 + 46 \left(\frac{d_p}{D} \right)^2} Re \quad (2.34)$$

na Equação 2.34, os valores obtidos para k_{er} e k_0 são expressos em kcal/h m K.

Algumas das correlações apresentadas nos parágrafos anteriores foram utilizadas para determinar a condutividade térmica do meio poroso em estudo, e os valores obtidos serão apresentados e discutidos no Capítulo 5 conjuntamente com as estimativas obtidas pelos modelos numéricos apresentados neste trabalho.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM MATEMÁTICA

Uma intensa pesquisa em transferência de calor em leitos compactados tem sido realizada por vários pesquisadores ao longo dos anos, devido a sua elevada importância nas operações unitárias da Engenharia Química, assim como sua grande aplicação nos processos industriais. Da revisão bibliográfica apresentada no capítulo anterior, fica evidente que todos os trabalhos relacionados com o problema do transporte de calor em meios porosos estão restritos a considerações geométricas limitadas. A geometria largamente adotada e amplamente estudada (por razões da prática industrial) é o cilindro circular. Por essa razão, decidiu-se abordar neste trabalho uma outra forma geométrica: um leito compactado cilíndrico elíptico, 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.

O enfoque que será apresentado neste capítulo será norteado em dois objetivos: a obtenção de uma nova solução analítica da equação da energia aplicada a um leito fixo, para a geometria convencional e de uma solução numérica da equação da energia tridimensional transiente num leito compactado cilíndrico elíptico.

3.1 - Equação da energia no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas

A equação geral da energia para o caso tridimensional transiente é dada por (Bird et al., 1973):

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

o primeiro termo do primeiro membro representa o fluxo transiente de energia e o segundo, o transporte convectivo de calor nas três direções. DP/Dt , é a derivada substantiva da pressão, $\mu\Psi$, representa o termo de dissipação viscosa, $\nabla \cdot (k\nabla T)$, o transporte de calor por condução e \dot{q} , a geração interna de energia.

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).

Caso, na abordagem, seja necessário trabalhar num 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 (τ, φ, z) são dadas a seguir (Magnus et al., 1966):

$$x = L \cosh \tau \cos \varphi \quad y = L \operatorname{senh} \tau \operatorname{sen} \varphi \quad z = z \quad (3.2)$$

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

$$\xi = \cosh \tau \quad \eta = \cos \varphi \quad (3.3)$$

Dessa forma, a substituição dessas variáveis nas Equações 3.2, fornece as relações diretas entre os dois sistemas de coordenadas, conforme discussão apresentada detalhadamente em Magnus et al. (1966). Feito isso, obtêm-se as seguintes relações para x , y e z , em termos de ξ e η :

$$x = L\xi\eta \quad y = L\sqrt{(1-\eta^2)}(\xi^2 - 1) \quad z = z \quad (3.4)$$

A Figura 3.1 apresenta a representação esquemática de um reator de leito fixo com seção transversal elíptica.

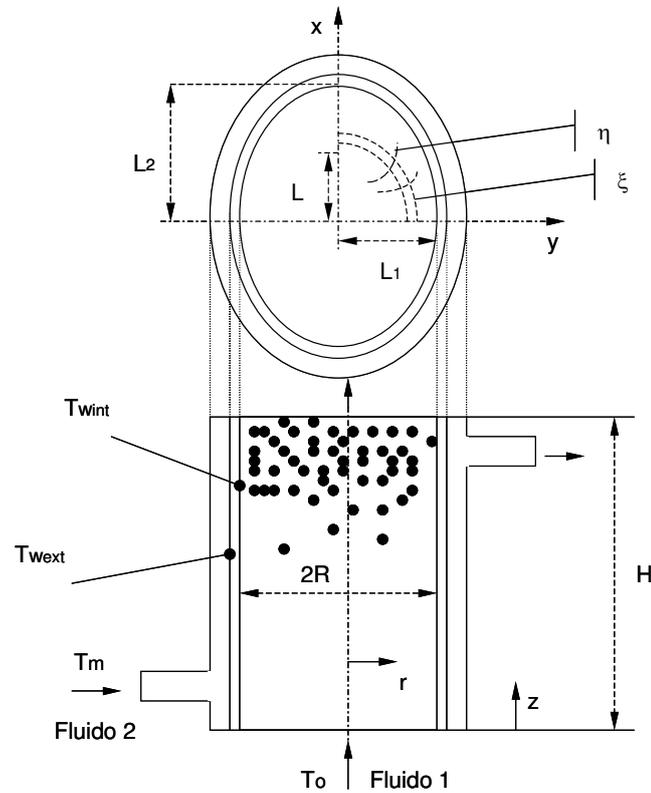


FIGURA 3.1 - Esquema de um reator de leito compactado cilíndrico elíptico.

O domínio de validade das variáveis ξ , η e z no sistema cilíndrico elíptico é dado por:

$$1 \leq \xi \leq L_2/L \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad 0 \leq z \leq H \quad (3.5)$$

A eliminação da variável φ , nas Equações 3.2 e 3.3, 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 τ , nas Equações 3.2 e 3.3, produz uma família de curvas no plano xy , correspondendo a diferentes valores constantes do parâmetro η , que são hiperbolóides 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 ξ - η .

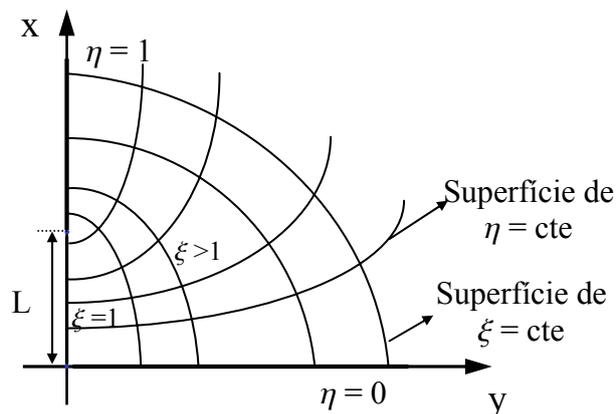


FIGURA 3.2 - Sistema de coordenadas cilíndricas elípticas no plano ξ - η .

De acordo com a Figura 3.1, quando $L_2 \rightarrow L_1$, o cilindro elíptico tende a um cilindro convencional de diâmetro $2R$. Assim sendo, no limite quando a distância interfocal tende a zero, o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas se reduz ao sistema de coordenadas cilíndricas normais. Para L finito, as superfícies ξ constantes serão cilindros retos, quando ξ tende ao infinito. Em outras palavras, significa dizer que: $L\xi \rightarrow r$ e $\eta \rightarrow \cos\theta$, quando $\xi \rightarrow \infty$, onde r e θ são as coordenadas cilíndricas normais. 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) entre outros que serão descritos ao longo deste capítulo.

A obtenção da equação da energia, no novo sistema de coordenadas segue a metodologia descrita em Maliska (1995), onde neste estudo considerou-se que o termo da derivada substantiva da pressão, $DP/Dt \approx 0$. Esta é uma hipótese considerada verdadeira, em situações onde a velocidade do fluido percolante no meio poroso é muito menor que a velocidade sônica (Prasad e Das, 2002).

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

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \varepsilon c_p \frac{\Phi}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho \varepsilon c_p U \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho \varepsilon c_p V \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \varepsilon c_p W \Phi \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\alpha_{11} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{12} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{13} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\alpha_{21} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{22} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{23} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left(\alpha_{31} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{32} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{33} J \Gamma^{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \frac{\mu \Psi}{J} + S^{\Phi}
\end{aligned} \tag{3.6}$$

onde J , representa o jacobiano da transformação, expresso matematicamente por:

$$J^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial z} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial z} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial z} \end{vmatrix} \tag{3.7}$$

A determinação da inversa do jacobiano fornece como resultado:

$$J^{-1} = - \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1) \cdot (1 - \eta^2)}} \tag{3.7a}$$

O termo S^Φ na Equação 3.6, representa a geração interna de energia sendo calculado matematicamente por:

$$S^\Phi = \frac{\dot{q}^\Phi}{J} \quad (3.8)$$

Os coeficientes α_{ij} , que aparecem na Equação 3.6, são fornecidos pelas seguintes relações matemáticas:

$$\alpha_{11} = \frac{a'}{J^2}; \quad \alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{d'}{J^2}$$

$$\alpha_{22} = \frac{b'}{J^2}; \quad \alpha_{13} = \alpha_{31} = \frac{e'}{J^2} \quad (3.9a-f)$$

$$\alpha_{33} = \frac{c'}{J^2} \quad \alpha_{23} = \alpha_{32} = \frac{f'}{J^2}$$

com os coeficientes presentes nestas relações, sendo calculados dados por :

$$a' = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z}\right)^2 \quad (3.10)$$

$$b' = \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial z}\right)^2 \quad (3.11)$$

$$c' = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial z}\right)^2 \quad (3.12)$$

$$d' = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z}\right) \quad (3.13)$$

$$e' = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) \quad (3.14)$$

$$f' = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z} \right) \quad (3.15)$$

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

As condições necessárias e suficientes que devem ser obedecidas para que um sistema de coordenadas seja considerado ortogonal, são dadas por (MacRobert, 1967):

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) = 0 \quad (3.16)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial z} \right) = 0 \quad (3.17)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) + \left(\frac{\partial y}{\partial z} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \xi} \right) = 0 \quad (3.18)$$

Pode ser demonstrado facilmente que todas estas condições são satisfeitas pelo sistema de coordenadas cilíndricas elípticas, nas variáveis ξ , η , z . Portanto, os coeficientes d' , e' , e f' (nas Equações 3.13 a 3.15) serão eliminados. Sendo assim, a Equação 3.6 reduz-se a:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon c_P \frac{\Phi}{J}) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \varepsilon c_P \frac{u_\xi}{J} \Phi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \varepsilon c_P \frac{u_\eta}{J} \Phi) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho \varepsilon c_P \frac{u_z}{J} \Phi) = \\ & = \frac{\partial}{\partial \xi} (\alpha_{11} J \Gamma \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\alpha_{22} J \Gamma \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta}) + \frac{\partial}{\partial z} (\alpha_{33} J \Gamma \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z}) + \frac{\dot{q} \Phi}{J} + \frac{\mu \Psi}{J} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Substituindo-se o jacobiano J , os coeficientes α_{ij} , quando $i = j$, $\Phi = T$ e $\Gamma^\Phi = k$ e rearranjando os termos, a Equação 3.19 passa a ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_\xi T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_\eta T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) k}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \dot{q}^\Phi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \mu \Psi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

Considerando que $u_z \gg u_\xi$ e $u_z \gg u_\eta$, e que o termo de dissipação viscosa seja desprezível, quando comparados aos demais, a Equação 3.20 reduz-se a:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) k}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \dot{q}^\Phi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] \end{aligned} \quad (3.21)$$

Como esta equação é de segunda ordem em relação à posição e de primeira em relação ao tempo, sua solução exige no mínimo quatro condições de contorno e uma condição inicial. Tais condições são mostradas abaixo:

$$T(\xi, \eta, z, t = 0) = f_1(\xi, \eta, z) \quad (3.22a)$$

$$T(\xi = L_2/L, \eta, z, t) = f_2(\eta, z, t) \quad (3.22b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \eta}(\xi, \eta = 0, z, t) = 0 \quad (3.22c)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta, z = H, t) = 0 \quad (3.22d)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta, z = 0, t) = f_3(\xi, \eta, t) \quad (3.22e)$$

que correspondem à condição inicial ($t = 0$), e as condições de fronteira ($\xi = L_2/L$, $z = 0$ e $z = L$) e de simetria ($\eta = 0$, $\eta = 1$ e $\xi = 1$), respectivamente.

As variáveis de interesse na modelagem tais como o gradiente de Φ , as áreas de troca de calor e o volume do corpo no novo sistema de coordenadas, podem facilmente ser obtidas, usando-se as relações matemáticas fornecidas por Magnus et al. (1966); Brodkey (1967); Abramowitz e Stegun (1972) e Kreyszig (1988), como segue:

- Volume diferencial do corpo:

$$dV = \frac{1}{\hat{U}\hat{V}\hat{W}} d\xi d\eta dz \quad (3.23)$$

- Áreas diferenciais de fluxo da variável Φ :

$$dS_\xi = \frac{1}{\hat{V}\hat{W}} d\eta dz \quad (3.24)$$

$$dS_\eta = \frac{1}{\hat{U}\hat{W}} d\xi dz \quad (3.25)$$

$$dS_z = \frac{1}{\hat{U}\hat{V}} d\xi d\eta \quad (3.26)$$

- Gradiente da variável Φ :

$$\nabla\Phi = \text{Grad}\Phi = \left(\hat{U} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}; \hat{V} \frac{\partial\Phi}{\partial\eta}; \hat{W} \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) \quad (3.27)$$

onde:

$$\frac{1}{\hat{U}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \right)^2 \quad (3.28)$$

$$\frac{1}{\hat{V}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} \right)^2 \quad (3.29)$$

$$\frac{1}{\hat{W}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \right)^2 \quad (3.30)$$

são os coeficientes métricos, cujo produto é o próprio jacobiano da transformação J . A substituição das equações envolvendo o jacobiano (Equações 3.7 e 3.8) e aquelas dos coeficientes métricos (Equações 3.28 a 3.30), para $\Phi = T$, fornecem como resultados:

$$dV = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta dz \quad (3.31)$$

$$dS_\xi = L \sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{1 - \eta^2}} d\eta dz \quad (3.32)$$

$$dS_\eta = L \sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} d\xi dz \quad (3.33)$$

$$dS_z = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta \quad (3.34)$$

$$\nabla\Phi = \left(\frac{1}{L} \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \xi}; \frac{1}{L} \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta}; \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.35)$$

Complementando dessa forma, todo o equacionamento necessário à modelagem.

3.2 - Solução da equação de transporte de calor convectivo/difusivo em leito fixo

3.2.1 - Uma nova solução analítica do problema para cilindro circular

Na Figura 3.1, quando os semi-eixos da elipse são iguais ($L_1 = L_2$), o cilindro elíptico assume a forma cilíndrica circular, isto é, o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas tende ao sistema de coordenadas cilíndricas. Neste caso, a Equação 3.21 passa a ser escrita na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r\rho\epsilon c_p T) + \frac{\partial}{\partial z}(r\rho\epsilon c_p u_z T) = \frac{\partial}{\partial r}(rk \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial \theta}(\frac{1}{r}k \frac{\partial T}{\partial \theta}) + \frac{\partial}{\partial z}(rk \frac{\partial T}{\partial z}) + \dot{q}r \quad (3.36)$$

A determinação da distribuição de temperatura no interior do reator envolve a obtenção da solução da Equação 3.36.

Vários autores, entre eles Yagi e Wakao (1959), Gunn e Khalid (1975), Dixon et al. (1978), Giudici (1990), apresentaram soluções analíticas para o problema do transporte de calor em reatores de leitos compactados cilíndrico circular, usando o modelo pseudo-homogêneo bidimensional com três parâmetros, porém, nenhum deles considera o perfil de temperatura do fluido na entrada dependente da posição radial. Neste trabalho uma nova solução foi obtida tendo-se a flexibilidade de se supor qualquer perfil radial de temperatura na entrada do leito.

Nesta forma de solução do problema de transferência de calor, as seguintes hipóteses foram adotadas:

- i) o sistema encontra-se em regime estacionário;
- ii) os parâmetros térmicos não variam com a posição no leito;
- iii) as propriedades termofísicas das fases são constantes;
- iv) existe simetria cilíndrica do perfil radial de temperatura;
- v) não ocorre reação química, nem há termo(s) de geração interna de energia;
- vi) a velocidade superficial do fluido é constante em qualquer posição no interior do reator ao longo de z , e nula nas direções r e θ ;
- vii) a porosidade do leito é uniforme e constante;
- viii) os gradientes angulares de temperatura são desprezíveis;
- ix) a parede do reator tem espessura desprezível.

Desta forma, a Equação 3.36 reduz-se a:

$$Gc_p \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + k_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.37)$$

onde, $G = \rho \epsilon u_z$ é o fluxo mássico.

As condições de contorno usadas, na obtenção da solução analítica, representada pela Equação 3.37, de acordo com a Figura 3.1, são como segue:

$$T(r, z = 0) = T_0(r) \quad (3.38)$$

$$T(r, z \rightarrow \infty) = T_m \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(r = 0, z) = 0 \quad (3.40)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial r}(r = R, z) = h_w (T - T_m) \quad (3.41)$$

A Equação 3.39, aplicada na saída do reator, representa a condição de coeficiente de transferência de calor na superfície do reator tendendo a infinito, ou que a temperatura do

fluido aquecido tende ao equilíbrio térmico com o fluido refrigerante que circula externamente no reator.

Para facilitar a obtenção da solução da Equação 3.37, considera-se as seguintes variáveis adimensionais,

$$T^* = \frac{(T - T_m)}{(T_0(r=0) - T_m)}; \quad Bi = \frac{h_w R}{k_r} \quad (3.42a-b)$$

Onde Bi é o número de Biot para transferência de calor, definido como sendo a razão entre a resistência interna à transferência de calor por convecção a resistência à transferência de calor na camada limite externa por condução.

Derivando-se a Equação 3.42-a em relação as variáveis r e z, substituindo na Equação (3.37), obtém-se:

$$Gc_p \frac{\partial T^*}{\partial z} = \frac{k_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T^*}{\partial r} \right) + k_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial T^*}{\partial z} \right) \quad (3.43)$$

A metodologia empregada para obter a solução da Equação 3.43 é a técnica da separação de variáveis (Luikov, 1968; Kakaç e Yener, 1993) assumindo-se que a função T^* possa ser escrita como o produto de duas outras funções, \bar{R} e \bar{Z} ; uma dependente só de r e a outra, dependente só de z. Então, T^* será representada por:

$$T^*(r, z) = \bar{R}(r)\bar{Z}(z) \quad (3.44)$$

Derivando-se T^* da Equação 3.44 em relação às variáveis r e z, substituindo-se os resultados na Equação 3.43, separando as variáveis e reagrupando os termos comuns, obtém-se duas equações diferenciais ordinárias homogêneas, como segue:

$$\frac{d^2 \bar{Z}}{dz^2} - \frac{Gc_p}{k_z} \frac{d\bar{Z}}{dz} - \frac{k_r \lambda^2}{k_z} \bar{Z} = 0 \quad (3.45)$$

$$\frac{d^2 \bar{R}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\bar{R}}{dr} + \lambda^2 \bar{R} = 0 \quad (3.46)$$

onde λ é uma constante de separação ou autovalor.

A Equação 3.45 pode ainda ser escrita da seguinte forma:

$$a_1^* \bar{Z}'' + a_2^* \bar{Z}' + a_3^* \bar{Z} = 0 \quad (3.47)$$

com $a_1^* = 1$, $a_2^* = -Gc_p/k_z$ e $a_3^* = -k_r \lambda^2 / k_z$, cuja solução é dada por:

$$\bar{Z} = b_1 e^{\sigma_1 z} + b_2 e^{\sigma_2 z} \quad (3.48)$$

onde σ_1 e σ_2 , são as raízes da equação característica

$$a_1^* \sigma^2 + a_2^* \sigma + a_3^* = 0 \quad (3.49)$$

com os valores de σ sendo calculados diretamente através da seguinte equação que envolve apenas propriedades físicas do fluido e do meio:

$$\sigma = \frac{Gc_p}{2k_z} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4 \left(\frac{\lambda}{Gc_p} \right)^2 k_r k_z} \right) \quad (3.50)$$

A solução da Equação 3.46 possui a seguinte forma:

$$\bar{R} = b_3 J_0(\lambda r) + b_4 Y_0(\lambda r) \quad (3.51)$$

A Equação 3.51 está escrita como uma combinação linear das funções de Bessel de primeira e segunda espécies, ambas de ordens zero. Assim, a solução geral da Equação 3.44, será:

$$T^*(r, z) = (b_1 e^{\sigma_1 z} + b_2 e^{\sigma_2 z}) [b_3 J_0(\lambda r) + b_4 Y_0(\lambda r)] \quad (3.52)$$

A Equação 3.40 indica que a temperatura no centro do reator em qualquer posição axial é finita. Uma vez que a função de Bessel de segunda espécie e ordem zero, aplicada no ponto zero, tende para o infinito, tem-se, portanto que o coeficiente $b_4 = 0$. A determinação do valor do coeficiente b_2 decorre do uso da Equação 3.39. Essa equação afirma que a temperatura do reator tende para a temperatura da parede quando a altura do leito tende para infinito, implicando dessa forma que $T^* \rightarrow 0$, quando $z \rightarrow \infty$ e então, o coeficiente $b_2 = 0$. Portanto, T^* passa a ser escrita como segue:

$$T^* = c_1 c_3 J_0(\lambda r) \exp \frac{Gc_p z}{2k_z} \left(1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{\lambda}{Gc_p} \right)^2 k_r k_z} \right) \quad (3.53)$$

Uma vez que a combinação linear (soma) das soluções particulares também é solução, e utilizando-se o princípio da superposição de soluções, pode-se escrever:

$$T^*(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(\lambda_n r) \exp \frac{Gc_p z}{2k_z} \left(1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{\lambda_n}{Gc_p} \right)^2 k_r k_z} \right) \quad (3.54)$$

Os valores de λ_n são obtidos a partir da condição de contorno na parede do reator.

Desde que em $r = R$, tem-se $-k_r \frac{\partial T}{\partial r} = h_w (T - T_m)$, pode-se escrever que:

$$-k_r \frac{\partial T^*}{\partial r} = h_w T^* \quad (3.55)$$

Utilizando-se as Equações 3.54 e 3.55, obtém-se:

$$Bi J_0(a_n) - a_n J_1(a_n) = 0 \quad (3.56)$$

sendo $Bi = h_w R / k_r$ e $a_n = \lambda_n R$ as raízes positivas da equação característica acima. As constantes A_n são obtidas sabendo-se que na entrada do reator ($z = 0$), a temperatura é uma função da coordenada radial, $T^*(r, z) = T_0^*(r)$. Dessa forma, tem-se que:

$$T_0^*(r) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0\left(a_n \frac{r}{R}\right) \quad (3.57)$$

Multiplicando-se a equação acima por $rJ_0\left(a_n \frac{r}{R}\right)$, integrando termo a termo, e usando-se a propriedade de ortogonalidade das funções de Bessel em relação à função peso r , obtém-se:

$$A_n = \frac{2}{R^2} \frac{\int_0^R r J_0\left(a_n \frac{r}{R}\right) T_0^*(r) dr}{J_0^2(a_n) + J_1^2(a_n)} \quad (3.58)$$

desde que $J_0(a_n) = (a_n/Bi)J_1(a_n)$, a Equação 3.58 passa a ser escrita finalmente como:

$$A_n = \frac{2}{R^2} \frac{\int_0^R r J_0\left(a_n \frac{r}{R}\right) T_0^*(r) dr}{\left[\left(\frac{a_n}{Bi}\right)^2 + 1\right] J_1^2(a_n)} \quad (3.59)$$

Observe que a Equação 3.59 acima tem a flexibilidade de utilizar na entrada do reator um perfil de temperatura dependente da posição radial. Resultados oriundos desta solução analítica serão apresentados e discutidos no capítulo 5.

3.2.2 - Solução numérica do transporte de calor para cilindro de geometria elíptica

Geralmente, problemas físicos relacionados aos fenômenos de transporte (momento linear, massa e energia), são de alto nível de complexidade e inevitavelmente recaem em equações diferenciais parciais, principalmente quando o problema contempla termos não-lineares. Obter uma solução analítica para problemas dessa natureza, quando se consegue, exige um tratamento matemático rigoroso e refinado. Dessa forma, uma solução numérica pode ser de grande valia na interpretação do problema físico.

Com o avanço das técnicas computacionais e a velocidade de processamento das máquinas atuais, têm aumentado cada vez mais a busca pela análise de tais problemas, através de soluções numéricas. Diversos métodos numéricos estão disponíveis na literatura, e vêm sendo largamente utilizados, dentre os quais, pode-se destacar: diferenças finitas, elementos de fronteira, elementos finitos, colocação ortogonal e volumes finitos. Discussões e detalhes sobre cada um destes métodos podem ser encontrados em Franks (1972); Villadsen e Michelsen (1978); Finlayson (1980); Patankar (1980); Shih (1984); Minkowicz et al. (1988); Brebbia (1989) e Maliska, (1995). A preferência pelo uso do método dos volumes finitos (MVF) neste trabalho é justificada pelo fato de que este método obtém as equações aproximadas, realizando um balanço da variável em nível de volumes elementares. Se o que se busca com o método numérico é a solução da equação diferencial que representa a conservação da variável em nível de ponto (infinitesimal), parece lógico que as equações aproximadas (que formam o sistema linear) representem a conservação em nível de volumes elementares. No restante dessa seção, descreve-se resumidamente a metodologia desenvolvida neste trabalho para resolver o problema do transporte de calor em um reator de leito compactado com geometria cilíndrica elíptica.

O princípio básico do método dos volumes finitos é a transformação de equações diferenciais parciais em equações algébricas elementares. O conceito fundamental do método dos volumes finitos 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. Os subdomínios são chamados de volumes de controle, com os pontos nodais localizados no centróide dos mesmos (Maliska, 1995).

O domínio computacional usado para representar o problema físico no leito fixo cilíndrico elíptico é mostrado na Figura 3.3. Desde que a equação diferencial parcial para o problema é elíptica, faz-se necessário definir condições de contorno ao longo de toda a fronteira do domínio. Além disso, observa-se que existe simetria nos quatro quadrantes da elipse. Portanto, optou-se neste trabalho, pelo uso apenas do primeiro quadrante $x \geq 0$ e $y \geq 0$. A Figura 3.3 mostra as linhas de ξ e η constantes, demarcando o volume de controle associado ao ponto nodal P. Os pontos N, S, E e W, são seus pontos nodais vizinhos, norte, sul, leste e oeste, respectivamente. A Figura 3.4 mostra 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 Δz , bem como as distâncias entre o ponto nodal P e os pontos adjacentes.

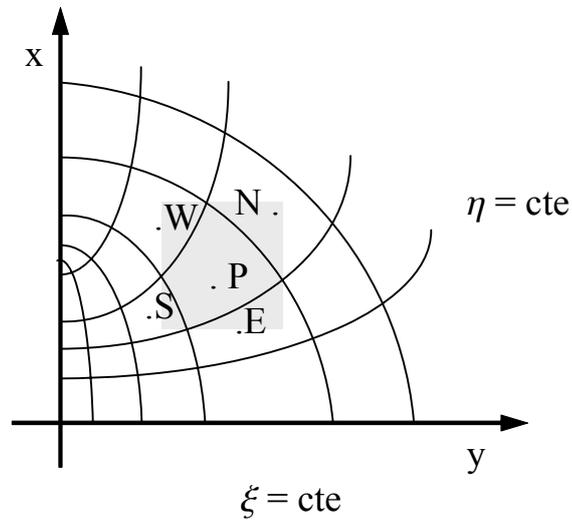


FIGURA 3.3 - Configuração geométrica do problema físico.

Ficou demonstrado através do uso das Equações 3.16 a 3.18, que o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas é ortogonal. A ortogonalidade do sistema de coordenadas e, conseqüentemente, da malha numérica associada, é um requisito considerado essencial na aplicação do método dos volumes finitos, segundo Patankar (1980). De acordo com esse autor, a face de um volume de controle através do qual se calcula o fluxo de uma variável Φ , deve ser normal à linha que une os dois pontos nodais adjacentes (a linha PN, na Figura 3.4, exemplifica esta afirmativa).

A Equação 3.19 em coordenadas cilíndricas elípticas, que descreve a transferência da variável de interesse no leito, é resolvida numericamente pela técnica dos volumes finitos, junto com a prática B, que localiza os pontos nodais no centro do volume de controle e usa uma malha com volumes inteiros ao longo de todo o domínio (Patankar, 1980 e Maliska, 1995). A justificativa da escolha desta metodologia neste trabalho reside no fato que esta torna o processo de determinação dos coeficientes de transporte mais simples, assim como, facilita a incorporação das condições de contorno admitidas na modelagem.

A integração da Equação 3.19, no volume e no tempo, assumindo-se uma formulação totalmente implícita e o esquema WUDS como função de interpolação espacial para os fluxos difusivo e convectivo, sobre o volume de controle (Figura 3.4), produz a equação que será válida para todos os pontos internos da malha.

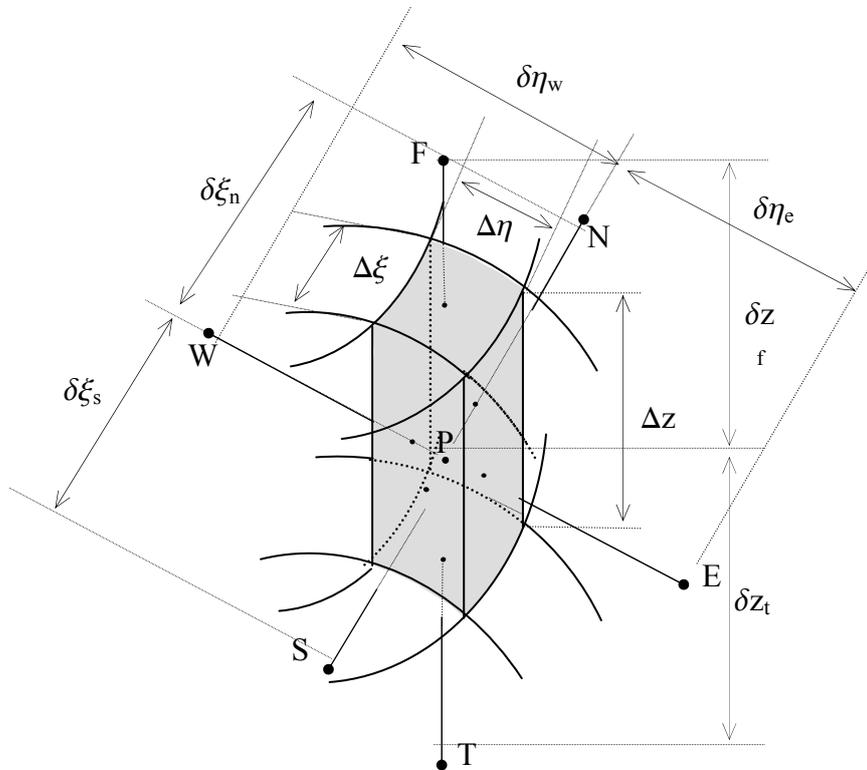


FIGURA 3.4 - Volume de controle da malha numérica.

Após a integração da Equação 3.19, considerando-se $u_z \gg u_\xi$, $u_z \gg u_\eta$ e o termo de dissipação viscosa desprezível, encontra-se a seguinte equação:

$$\frac{\Delta V}{J_p} \left[\frac{\rho_p c_p \varepsilon_p \Phi_p - \rho_p^0 c_p^0 \varepsilon_p^0 \Phi_p^0}{\Delta t} \right] + \left[\rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta \Big|_f - \rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta \Big|_t \right] =$$

$$\left[\left(D_{11} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) \Big|_n - \left(D_{11} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) \Big|_s + \left(D_{22} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) \Big|_e - \left(D_{22} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) \Big|_w \right] +$$

$$+ \left(D_{33} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \Big|_f - \left(D_{33} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \Big|_t + \frac{\dot{q} \Delta V}{J_p} \quad (3.60)$$

A integração da variável Φ no tempo foi realizada admitindo-se uma perturbação do tipo degrau. Os coeficientes D_{ij} e o ΔV equação são avaliados pelas seguintes expressões:

$$D_{11} = \Gamma^\Phi J\alpha_{11}\Delta\eta\Delta z;$$

$$D_{22} = \Gamma^\Phi J\alpha_{22}\Delta\xi\Delta z$$

(3.61a-d)

$$D_{33} = \Gamma^\Phi J\alpha_{33}\Delta\xi\Delta\eta;$$

$$\Delta V = \Delta\xi\Delta\eta\Delta z$$

Nestas equações os coeficientes α_{ij} , já foram previamente definidos através das Equações 3.9a até 3.9f, e ΔV , é o elemento infinitesimal de volume, na Figura 3.4, utilizado para localizar o ponto nodal P.

Considerando-se que, para o problema em estudo, a função de interpolação espacial entre dois pontos nodais adjacentes seja uma função do tipo linear, as derivadas relativas ao fluxo difusivo nas faces dos volumes de controle, referentes à Figura 3.3, segundo o esquema WUDS de interpolação são dadas por:

$$\Gamma_n^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\Big|_n = \frac{\Gamma_n^\Phi\beta_n(\Phi_N - \Phi_P)}{\delta\xi_n}; \quad \Gamma_s^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\Big|_s = \frac{\Gamma_s^\Phi\beta_s(\Phi_P - \Phi_S)}{\delta\xi_n}$$

$$\Gamma_e^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\Big|_e = \frac{\Gamma_e^\Phi\beta_e(\Phi_E - \Phi_P)}{\delta\eta_e}; \quad \Gamma_w^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\Big|_w = \frac{\Gamma_w^\Phi\beta_w(\Phi_P - \Phi_W)}{\delta\eta_w} \quad (3.62a-f)$$

$$\Gamma_f^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\Big|_f = \frac{\Gamma_f^\Phi\beta_f(\Phi_F - \Phi_P)}{\delta z_f}; \quad \Gamma_t^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}\Big|_t = \frac{\Gamma_t^\Phi\beta_t(\Phi_P - \Phi_T)}{\delta z_t}$$

Já para os termos correspondentes aos fluxos convectivos, Maliska (1995) recomenda as seguintes funções de interpolação para o valor da variável na face dos volumes de controle:

$$\Phi_f = \left(\frac{1}{2} + \alpha_f\right)\Phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_f\right)\Phi_F \quad \Phi_t = \left(\frac{1}{2} + \alpha_t\right)\Phi_T + \left(\frac{1}{2} - \alpha_t\right)\Phi_P \quad (3.63)$$

Os coeficientes α e β que aparecem as Equações 3.62 e 3.63 acima, são constantes ponderadoras, calculadas por:

$$\alpha = \frac{Pe^2}{(10 + 2Pe^2)} \quad e \quad \beta = \frac{(1 + 0,005Pe^2)}{(1 + 0,05Pe^2)} \quad (3.64a-b)$$

onde Pe é o número de Peclet que representa fisicamente a razão entre o fluxo difusivo e o fluxo convectivo na direção coordenada, calculado através de:

$$Pe = \frac{\rho u_z c_p \delta z}{\Gamma^\Phi} \quad (3.65)$$

As derivadas nas interfaces dos volumes de controle, a função de interpolação espacial para os fluxos convectivos de transporte de calor, e também os coeficientes D_{ij} , com $i = j$, são substituídos diretamente na Equação 3.60. Rearranjando e colocando em evidência os termos comuns, a equação na forma algébrica linear discretizada, aplicada no ponto nodal P, passa a ser escrita como segue:

$$A_P \Phi_P = A_E \Phi_E + A_W \Phi_W + A_N \Phi_N + A_S \Phi_S + A_F \Phi_F + A_T \Phi_T + A_P^0 \Phi_P^0 + B \quad (3.66)$$

onde:

$$A_E = \sqrt{\frac{1 - \eta_e^2}{\xi_e^2 - 1}} \frac{\Gamma_e^\Phi \beta_e \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_e}; \quad A_W = \sqrt{\frac{1 - \eta_w^2}{\xi_w^2 - 1}} \frac{\Gamma_w^\Phi \beta_w \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_w};$$

$$A_N = \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{1 - \eta_n^2}} \frac{\Gamma_n^\Phi \beta_n \Delta \eta \Delta z}{\delta \eta_n}; \quad A_S = \sqrt{\frac{\xi_s^2 - 1}{1 - \eta_s^2}} \frac{\Gamma_s^\Phi \beta_s \Delta \eta \Delta z}{\delta \eta_s};$$

$$A_F = \frac{L^2 (\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} [(0,5 - \alpha_f) \rho_f \varepsilon_f c_{pf} u_z + \frac{\beta_f \Gamma_f^\Phi}{\delta z_f}] \Delta \xi \Delta \eta;$$

$$A_T = \frac{L^2(\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} [(0,5 - \alpha_t) \rho_t \varepsilon_t c_{pt} u_z + \frac{\beta_t \Gamma_t^\Phi}{\delta z_t}] \Delta \xi \Delta \eta ;$$

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

$$B = \dot{q} \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \Delta \xi \Delta \eta \Delta z ;$$

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + A_F + A_T + \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\rho c_p \varepsilon \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t}$$

Os coeficientes A_K , com $K \neq P$, representam as contribuições dos transportes difusivo e convectivo da variável Φ , provenientes dos pontos nodais vizinhos em direção ao ponto P. Os efeitos da variável Φ 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 a atingir o regime permanente.

A aplicação da Equação 3.66 fica restrita aos pontos internos do domínio computacional. Já para os pontos da malha localizados na fronteira, que são aqueles localizados nos volumes de controle adjacentes à superfície do reator, as condições de contorno devem ser incorporadas na formulação. Nestes volumes de controle, o procedimento adotado consiste na integração da equação de conservação, considerando-se as condições de contorno existentes. Em outras palavras, necessita-se, portanto realizar um balanço da variável em estudo, para o volume de controle de fronteira, incorporando a condição de contorno à equação aproximada do volume de fronteira.

A Equação 3.60, discretizada para os volumes de fronteira, assume a forma:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{J_p} \left[\frac{\rho_p c_p \varepsilon_p \Phi_p - \rho_p^0 c_p^0 \varepsilon_p^0 \Phi_p^0}{\Delta t} \right] + \left[\rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Phi \Delta \xi \Delta \eta \Big|_f - \rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Phi \Delta \xi \Delta \eta \Big|_t \right] = \\ + \left[\Phi'' dS_\xi - \left(D_{11} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) \Big|_s \right] + \left[\left(D_{22} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) \Big|_e - \left(D_{22} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) \Big|_w \right] + \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$+ \left[\left(D_{33} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \Big|_f - \left(D_{33} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \Big|_t \right] + \frac{\dot{q} \Delta V}{J_p}$$

Neste procedimento, a discretização do domínio é feita com volumes elementares inteiros. Assim, nunca ter-se-á uma variável sobre a fronteira, sendo sempre necessário realizar os balanços para todos os volumes, independentemente do tipo de condição de contorno adotada (Maliska, 1995).

Uma vez que nestes pontos nodais não existe o coeficiente A_N , o mesmo deve ser substituído pelo fluxo da variável Φ na superfície. Os coeficientes D_{11} , D_{22} e D_{33} , são os mesmos já mencionados anteriormente.

A primeira parcela do primeiro termo do segundo membro da Equação 3.67, decorrente da aplicação do método dos volumes finitos aos pontos localizados na fronteira, depende do tipo de condição de contorno imposta ao problema real. De acordo com Maliska (1995), três tipos de condições de contorno são possíveis: Φ prescrito, fluxo de Φ prescrito e convecção.

- Φ prescrito

Neste tipo de condição de contorno, o valor de Φ'' , será substituído por:

$$\Phi'' dS_\xi = \Gamma_n^\Phi \frac{(\Phi_n - \Phi_p)}{\delta \xi_n} \quad (3.68)$$

onde Φ_n é a variável específica na fronteira.

- Fluxo de Φ prescrito

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

$$\Phi'' dS_{\xi} = \text{valor conhecido} = D_{11} \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_n \quad (3.69)$$

- Convecção na interface

Para esta situação, o fluxo difusivo que atravessa a fronteira é igualado ao fluxo convectivo na vizinhança da mesma e fora do domínio em estudo. Isto é:

$$\Phi'' dS_{\xi} = D_{11} \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_n = \text{fluxo convectivo, que é função de } \Phi_n \quad (3.70)$$

A discretização da equação para os volumes de controle localizados na região de fronteira, segue o mesmo procedimento apresentado para os pontos internos ao domínio computacional.

A formulação numérica a ser utilizada neste trabalho é válida quando se tiver:

- condições de contorno na parede do reator, constante ou convectiva;
- coeficientes de transporte de calor constantes ou variáveis com a posição;
- padrão de malha uniforme ou não-uniforme;
- propriedades físicas do fluido constantes ou variáveis com a temperatura;
- reator de leito fixo com forma que varia de um cilindro circular até um canal retangular, passando por um cilindro elíptico, dependendo da razão L_2/L_1 .

O procedimento básico usado para se obter o valor de uma variável Γ^{Φ} nas interfaces do volume de controle (Patankar, 1980), quando se consideram problemas com Γ^{Φ} variável, é assumir uma variação de Γ^{Φ} entre o ponto P e seus vizinhos em qualquer direção (N, S, E ou W), expressa por:

$$\Gamma_i^{\Phi} = \left(\frac{1 - \hat{f}_i}{\Gamma_P^{\Phi}} - \frac{\hat{f}_i}{\Gamma_E^{\Phi}} \right)^{-1} \quad (3.71)$$

onde \hat{f}_i é o fator de interpolação, dado por: $\hat{f}_i = \frac{(\delta d)_i^+}{(\delta d)_i}$.

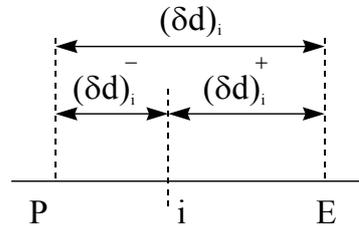


FIGURA 3.5 - Esquema mostrando a posição da interface i entre os pontos P e E .

Se a interface i situa-se no ponto médio entre os pontos P e E (malha uniforme), então $\hat{f}_i = 0,5$, e portanto Γ_i^Φ é dado pela média harmônica de Γ_P^Φ e Γ_E^Φ . Isto é:

$$\Gamma_i^\Phi = \frac{2\Gamma_P^\Phi\Gamma_E^\Phi}{\Gamma_P^\Phi + \Gamma_E^\Phi} \quad (3.72)$$

Esta é uma formulação mais efetiva, uma vez que, se Γ_P^Φ ou Γ_E^Φ forem zero, não haverá fluxo de Φ e portanto Γ_i^Φ será nulo, o que é fisicamente realista.

Na seção a seguir, apresentar-se-ão em detalhes, os modelos matemáticos utilizados para acompanhar os fenômenos de convecção/difusão de calor no leito compactado, para as condições de contorno anteriormente mencionadas, exceto a de fluxo de Φ prescrito, utilizando os resultados obtidos nesta seção e que antecedem o item 3.2.2.1, a seguir.

3.2.2.1 - Modelos numéricos utilizados neste trabalho

Modelo I - Transporte de calor no reator com condição de equilíbrio na parede e propriedades termofísicas constantes.

*** Formulação analítica**

Este modelo é utilizado para descrever o comportamento da transferência de calor no interior do leito, através da predição dos perfis radiais de temperatura em qualquer profundidade do leito. Na representação matemática do problema, foram adotadas as mesmas suposições do modelo analítico, listadas na seção 3.2.1, exceto o item viii. Já no que se refere às condições de contorno, exceção é feita àquela que considera a temperatura na entrada do leito dependente da posição radial. Neste modelo, utilizou-se:

- ◆ Condição de contorno na entrada do reator:

$$T(\xi, \eta, z = 0) = T_0 = \text{constante} \quad (3.73)$$

As demais condições contorno são expressas pelas seguintes equações:

- ◆ Condição de contorno na parede do reator:

$$T\left(\xi = \frac{L_2}{L}, \eta, z, t\right) = T_m \quad (3.74)$$

- ◆ Condição de contorno na saída do reator

$$\frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta, z = H, t) = 0 \quad (3.75)$$

- ◆ Condição de contorno nos planos de simetria do reator:

$$\frac{\partial T}{\partial \xi}(\xi = 1, \eta, z, t) = \frac{\partial T}{\partial \eta}(\xi, \eta = 0, z, t) = \frac{\partial T}{\partial \eta}(\xi, \eta = 1, z, t) = 0 \quad (3.76)$$

* **Formulação numérica**

Neste caso, usando a Equação 3.66 e trocando Φ por T , obtém-se a seguinte equação discretizada:

$$A_P T_P = A_E T_E + A_W T_W + A_N T_N + A_S T_S + A_F T_F + A_T T_T + A_P^0 T_P^0 \quad (3.77)$$

com os coeficientes A_K presentes na Equação 3.77 sendo calculados através das equações relacionadas a seguir:

$$A_E = \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_e^2-1}} \frac{k_e \beta_e \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_e}; \quad A_W = \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_w^2-1}} \frac{k_w \beta_w \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_w};$$

$$A_N = \sqrt{\frac{\xi_n^2-1}{1-\eta_n^2}} \frac{k_n \beta_n \Delta \eta \Delta z}{\delta \eta_n}; \quad A_S = \sqrt{\frac{\xi_s^2-1}{1-\eta_s^2}} \frac{k_s \beta_s \Delta \eta \Delta z}{\delta \eta_s};$$

$$A_F = \frac{L^2 (\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} [(0,5 - \alpha_f) \rho_f \varepsilon_f c_{pf} u_z + \frac{\beta_f k_f}{\delta z_f}] \Delta \xi \Delta \eta;$$

$$A_T = \frac{L^2 (\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} [(0,5 - \alpha_t) \rho_t \varepsilon_t c_{pt} u_z + \frac{\beta_t k_t}{\delta z_t}] \Delta \xi \Delta \eta;$$

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

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + A_F + A_T + \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\rho c_p \varepsilon \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t}$$

Esta equação pode ser aplicada para qualquer ponto interno do domínio, inclusive os pontos localizados na região de fronteira da malha computacional.

Apesar de o programa elaborado ter a flexibilidade de trabalhar com qualquer tipo de malha numérica, neste trabalho adotou-se uma malha ortogonal, regular escrita em coordenadas elípticas. A distância do j -ésimo ponto nodal ao eixo x ao longo de uma linha de η constante, de acordo com a Figura 3.3 é dada pela seguinte relação:

$$\xi_j = 1 + (j-1) \frac{\Delta \xi}{2}; j = 1, 2, 4, \dots, m. \quad (3.78)$$

com:

$$\Delta\xi = \frac{\left(\frac{L_2}{L} - 1\right)}{\left(\frac{m-1}{2}\right)}, m = (2mm+1), mm \text{ par}$$

que representa o espaçamento de ξ .

De maneira semelhante, a distância do i -ésimo ponto nodal ao eixo y ao longo de uma linha de ξ constante é dada por:

$$\eta_i = (i-1)\frac{\Delta\eta}{2}; i = 1, 2, 4, \dots, n. \quad (3.79)$$

com $\Delta\eta$ sendo calculado por:

$$\Delta\eta = \frac{1}{\left(\frac{n-1}{2}\right)}, n = (2nn+1), nn \text{ par.}$$

que representa o espaçamento na direção de η . Nestas equações, nn e mm representam o número de pontos nas direções das coordenadas ξ e η , respectivamente sendo i e j a localização destes pontos na malha numérica.

A solução do sistema de equações algébricas geradas pela aplicação da Equação 3.77 ao longo de todos os pontos da malha numérica foi alcançada usando-se um algoritmo numérico, denominado de ELIPTICODE, implementado no ambiente do Software Mathematica[®]. O sistema de equações resultante foi resolvido iterativamente usando o método de Gauss-Seidel. A escolha deste método foi espontânea, contudo qualquer outro método de solução de sistema de equações algébricas lineares, por exemplo, método linha por linha, inversão de matrizes entre outros, poderia ser usado.

Aqui neste trabalho assumiu-se que a resposta desejada era atingida quando a solução numérica convergia para um determinado valor, quando partindo de uma condição inicial os seguintes critérios de convergência eram satisfeitos:

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

$$|T^{\hat{n}+1} - T^{\hat{n}}| \leq 10^{-8} \quad (3.80)$$

- Para a equação discretizada em qualquer instante de tempo:

$$\frac{\sum |A_K|}{|A_P|} \leq 1 \text{ para todas as equações} \quad (3.81)$$

onde \hat{n} na Equação 3.80 representa a n -ésima iteração em cada instante de tempo. Na Equação 3.81, K representa os pontos nodais vizinhos do ponto nodal P . Além de satisfazer os critérios acima mencionados, existe a necessidade de que os coeficientes A_K sejam todos positivos, para que a solução obtida tenha coerência física.

As equações provenientes da discretização das condições de contorno nos pontos de simetria não entram no conjunto de equações a serem resolvidas. Após o sistema de equações ter sido resolvido, sua estimativa é feita. Neste caso, assume-se que o fluxo de calor que sai do ponto adjacente ao ponto de simetria seja igual ao fluxo de calor que chega neste ponto. Matematicamente, tem-se:

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

$$\left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-\eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e = \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-\eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w \quad (3.82)$$

Discretizando-se e colocando-se em evidência os termos comuns, tem-se:

$$T_E = \left[1 + \frac{\left(\frac{k_w}{\delta\eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_P^2 - \eta_w^2}} \right)}{\left(\frac{k_p}{\delta\eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_P^2 - \eta_e^2}} \right)} \right] T_P - \frac{\left(\frac{k_w}{\delta\eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_P^2 - \eta_w^2}} \right)}{\left(\frac{k_p}{\delta\eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_P^2 - \eta_e^2}} \right)} T_W \quad (3.83)$$

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

$$\left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w = \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e \quad (3.84)$$

Discretizando e rearranjando os termos comuns, tem-se:

$$T_W = \left[1 + \frac{\left(\frac{k_e}{\delta\eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_P^2 - \eta_e^2}} \right)}{\left(\frac{k_p}{\delta\eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_P^2 - \eta_w^2}} \right)} \right] T_P - \frac{\left(\frac{k_e}{\delta\eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_P^2 - \eta_e^2}} \right)}{\left(\frac{k_p}{\delta\eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_P^2 - \eta_w^2}} \right)} T_E \quad (3.85)$$

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

$$\left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_n = \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_s \quad (3.86)$$

Procedendo de maneira similar às situações anteriores, discretizando-se a Equação 3.86, rearranjando e colocando-se em evidência os termos comuns encontra-se:

$$T_S = \left[1 + \frac{\left(\frac{k_n}{\delta\xi_n} \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{\xi_n^2 - \eta_P^2}} \right)}{\left(\frac{k_p}{\delta\xi_s} \sqrt{\frac{\xi_s^2 - 1}{\xi_s^2 - \eta_P^2}} \right)} \right] T_P - \frac{\left(\frac{k_n}{\delta\xi_n} \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{\xi_n^2 - \eta_P^2}} \right)}{\left(\frac{k_p}{\delta\xi_s} \sqrt{\frac{\xi_s^2 - 1}{\xi_s^2 - \eta_P^2}} \right)} T_N \quad (3.87)$$

Para se obter valores de temperatura na forma adimensional, será utilizada a seguinte

$$\text{variável } T^* = \frac{(T - T_m)}{(T_0 - T_m)}.$$

Modelo II - Transporte de calor no reator com condição de contorno convectiva na parede interna e propriedades termofísicas constantes.

*** Formulação analítica**

Neste modelo, como uma simplificação do problema estudado, foram assumidas todas as suposições utilizadas no modelo I, acrescentando-se que:

- o fenômeno do transporte de calor entre o leito sólido e o fluido refrigerante ocorre sob condição de contorno convectiva na parede, com temperatura dependente da posição;
- o coeficiente de transferência de calor por convecção é constante;

As condições na entrada, na saída e simetria do reator são idênticas ao modelo I. Para as condições de contorno na parede, tem-se:

- Superfície livre: o fluxo difusivo de calor é igual ao fluxo convectivo na superfície da parede interna do reator elíptico.

$$-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_n} = h_w [T(\xi = \xi_n, \eta, t) - T_m], \quad \xi_n = L_2/L \text{ na superfície} \quad (3.88)$$

Para obter valores de temperatura na forma adimensional, são utilizadas as variáveis adimensionais:

$$T^* = \frac{(T - T_m)}{(T_0 - T_m)} \quad \text{Bi} = \frac{h_w L}{k} \quad (3.89)$$

$$q'' = \frac{(T_p - T_m)}{\left[\frac{1}{h_w} + \frac{L\delta\xi_s}{k\sqrt{\left(\frac{\xi_n^2 - 1}{\xi_n^2 - \eta_p^2}\right)}} \right]} \quad (3.92)$$

A substituição da Equação 3.92 na Equação 3.67, arrumando os termos comuns, conduz a obtenção de uma equação na forma discretizada, semelhante à Equação 3.77, dada por:

$$A_p T_p = A_E T_E + A_W T_W + A_N T_N + A_S T_S + A_F T_F + A_T T_T + A_p^0 T_p^0 + B^* \quad (3.93)$$

Os coeficientes A_E , A_W , A_S , A_F , A_T e A_p^0 são exatamente iguais aos apresentados antes. Já os coeficientes A_N e A_p , serão calculados por:

$$A_N = \begin{cases} 0, & \text{para os pontos de fronteira} \\ \frac{\beta_n k_n}{\delta\xi_n} \Delta\eta\Delta z \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{1 - \eta_p^2}}, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.94)$$

$$A_p = \sum A_k + A_p^0 + \overline{SM} \quad (3.95)$$

O termo B^* , que aparece na Equação 3.93 é calculado pela seguinte equação:

$$B^* = \frac{L\sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{1 - \eta^2}} \Delta\eta\Delta z T_m}{\frac{1}{h_w} + \frac{L\delta\xi_s}{k\sqrt{\left(\frac{\xi_n^2 - 1}{\xi_n^2 - \eta_p^2}\right)}}} \quad (3.96)$$

A quantidade \overline{SM} que aparece no cálculo do coeficiente A_p é o termo fonte, associado ao fluxo convectivo de calor junto à parede do leito e que deve ser adicionado aos pontos nodais de fronteira. Seu valor é calculado por:

$$\overline{SM} = \begin{cases} L\Delta\eta\Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}}, & \text{para os pontos de fronteira} \\ \left[\frac{1}{h_w} + \frac{L\delta\xi_s}{k \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}}} \right], & \\ 0, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.97)$$

O método de solução do sistema de equações gerado e o critério de convergência adotado são idênticos àqueles utilizados no modelo I. As temperaturas nos planos de simetria são estimadas tal qual no modelo I. Para calcular a temperatura na superfície do reator (T_n), utilizou-se a Equação 3.91. O modelo I é um caso particular do modelo II, quando $h_w \rightarrow \infty$.

Modelo III - Transporte de calor no interior do reator, condição de contorno convectiva nas paredes interna e externa, condução de calor na parede do reator e propriedades termofísicas variáveis.

*** Formulação analítica**

Nesse modelo são usadas as considerações i, ii, iv, v, vii e viii, apresentadas no item 3.2.1. Esse modelo admite ainda que o fluxo de calor entre o fluido percolante no reator de leito fixo e o fluido refrigerante na camisa ocorre da seguinte maneira: a) a transferência de calor do fluido percolante junto à parede do reator é realizada por condução e convecção no fluido; b) por sua vez esta quantidade de calor que chega à parede interna é transferida por condução no interior da parede do reator; c) esta energia ao chegar na parede externa do reator é transferida por convecção para o fluido refrigerante (fluido 2, na Figura 3.1) atravessando a camisa de refrigeração. Neste modelo admite-se ainda que as propriedades termofísicas do sólido e do fluido são dependentes da temperatura.

Nessa forma de modelagem, as condições de contorno na entrada, na saída e nos planos de simetria do reator, são análogas àquelas usadas nos modelos I e II, e fornecidas

pelas Equações 3.73, 3.75 e 3.76. Já a condição de contorno na fronteira do reator, neste caso será dada por (ver Figuras 3.1 e 3.6):

$$q'' = -\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_n} + h_{\text{win}} (T - T_{\text{win}}) =$$

$$= h_{\text{wext}} (T_{\text{wext}} - T_m) = -\frac{k_{\text{wr}}}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_n} \quad (3.98)$$

onde o subscrito wr significa a localização na parede do reator. A Figura 3.6, mostrada a seguir apresenta a condição de contorno, ilustrando em detalhes, a direção do fluxo de calor, a espessura da parede, as temperaturas nas paredes interna e externa do reator, bem como os coeficientes convectivos de transporte de calor interno e externo.

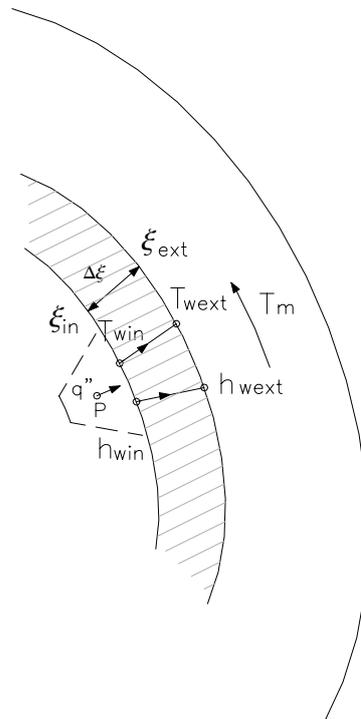


FIGURA 3.6 - Esquema mostrando o fluxo de calor na região da parede do reator.

*** Formulação numérica**

Neste modelo, a formulação numérica nos pontos internos do domínio é idêntica àquela apresentada para os modelos I e II. Nos pontos de fronteira, o procedimento adotado segue a maneira relatada a seguir.

A discretização da condição de fronteira dada pela Equação 3.98 fornece:

$$\begin{aligned}
 q'' &= -\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}} \frac{(T_p - T_{win})}{\delta\xi_n} + h_{win} (T_p - T_{win}) = \\
 &\quad \text{I} \qquad \qquad \qquad \text{II} \qquad \qquad \qquad \text{III} \\
 &= -\frac{k_{wr}}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}} \frac{(T_{wext} - T_{win})}{\delta\xi_n} = h_{wext} (T_{wext} - T_m) \\
 &\quad \qquad \qquad \qquad \qquad \text{IV} \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \text{V}
 \end{aligned} \tag{3.99}$$

Após manipulação matemática da múltipla igualdade apresentada pela Equação 3.99, é possível explicitar a temperatura na parede interna T_{win} a partir dos termos (II), (III) e (V). Substituindo-se agora o valor de T_{win} nos termos (II) e (III) desta equação, encontra-se a seguinte expressão para o fluxo de calor que atravessa a parede do reator:

$$q'' = \frac{(T_p - T_m)}{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta\xi_n} + \frac{h_{win} \delta\xi_n}{k_{wr} \hat{U}}\right) / \left(h_{win} + \frac{k \hat{U}}{\delta\xi_n}\right)} \tag{3.100}$$

onde \hat{U} é dado pela Equação 3.28.

A equação representativa do cálculo da temperatura na parede interna do leito compactado é dada por:

$$T_{win} = \frac{T_m + T_p \left(\frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}} \right)}{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}} \right)} \quad (3.101)$$

Utilizando o mesmo procedimento que no modelo II, as equações que compõem este modelo são formadas pelas Equações 3.93, sendo os coeficientes A_E , A_W , A_N , A_S , A_F , A_T e A_p^0 exatamente iguais aos apresentados antes para o modelo II. O coeficiente A_p é calculado por uma equação semelhante à Equação 3.95, ou seja,

$$A_p = \sum A_K + A_p^0 + \overline{SM} \quad (3.102)$$

O termo \overline{SM} que aparece na Equação 3.102 é diferente daquele que aparece na Equação 3.95 e é calculado pela seguinte relação matemática:

$$\overline{SM} = \begin{cases} \frac{L \Delta \eta \Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}}}{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}} \right)}, & \text{para os pontos de fronteira} \\ \frac{\left(h_{win} + \frac{k \hat{U}}{\delta \xi_n} \right)}{\left(h_{win} + \frac{k \hat{U}}{\delta \xi_n} \right)}, & \\ 0, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.103)$$

O termo B^* , proveniente da discretização, neste modelo é matematicamente dado por:

$$B^* = \frac{L\Delta\eta\Delta z \sqrt{\frac{\xi_n^2 - \eta_p^2}{(1 - \eta_p^2)}}}{\left[\frac{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} + \frac{h_{win}\delta\xi_n}{k_{wr}\hat{U}}\right)}{\left(h_{win} + \frac{k\hat{U}}{\delta\xi_n}\right)} \right]} \quad (3.104)$$

A metodologia iterativa de solução do sistema de equações algébricas, a geração da malha numérica, a determinação dos pontos de simetria e os critérios de convergência do método numérico são exatamente iguais aos dos modelos I e II.

Neste modelo, as equações a seguir foram usadas para calcular as propriedades termofísicas do fluido (o ar), (Pakowski et al., 1991, Jumah e Mujumdar, 1996):

$$\rho_f = \frac{P\bar{M}_f}{R_g T} \quad (\text{kg/m}^3)$$

$$c_{p_f} = 1,00926 \times 10^3 - 4,0403 \times 10^{-2} T + 6,1759 \times 10^{-4} T^2 - 4,097 \times 10^{-7} T^3 \quad (\text{J/kg K})$$

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

$$k_f = 2,425 \times 10^{-2} + 7,889 \times 10^{-5} T - 1,907 \times 10^{-8} T^2 - 8,570 \times 10^{-12} T^3 \quad (\text{W/m K})$$

Já para as partículas do meio poroso, (partículas cilíndricas de óxido de zinco) e para o leite, foram usadas as seguintes propriedades termofísicas (Zotin, 1985, He et al., 2003):

$$\rho_s = 487 + 0,828T \quad (\text{kg/m}^3); \quad c_{p_s} = 5500 \quad (\text{J/kg K}); \quad \varepsilon = 0,40$$

$$k_s = 5,69 \quad (\text{W/m K}); \quad k_{rw} = 1 \times 10^{30} \quad (\text{W/m K}); \quad h_{wext} = 1 \times 10^{30} \quad (\text{W/m}^2 \text{ K}); \quad h_{win} = 0$$

Nestas equações, \overline{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, $\overline{M}_f = 28,966$ kg/kmol.

Neste modelo, foi admitida que a condutividade térmica do leito era uma função da temperatura, conforme segue:

Numa primeira tentativa, usou-se uma equação para representar a condutividade térmica do leito sendo uma função linear com a temperatura, dada por:

$$k = \tilde{A} + \tilde{B}T \quad (3.105)$$

onde \tilde{A} corresponde à condutividade térmica obtida com o modelo I. No entanto, esta suposição gerou resultados (com erro mínimo) muito similares aos apresentados pelo modelo I.

Mesmo comportamento foi observado quando se admitiu que a condutividade térmica do leito fosse representada por uma função quadrática com a temperatura, como sendo:

$$k = \tilde{A} + \tilde{B}T + \tilde{C}T^2 \quad (3.106)$$

indicando dessa forma, que este parâmetro tem uma variação com a temperatura cuja forma necessita ser melhor estudada.

Modelo IV - Transporte de calor no reator com condição de contorno convectiva na parede interna, propriedades termofísicas constantes e geração de energia devido à ocorrência de uma reação química.

Esse modelo é semelhante em formulação ao modelo II, com a diferença estando no fato que esse modelo assume a ocorrência de uma reação química simples, que provoca geração de energia, computada na equação da energia pelo termo \dot{q} . Toda a formulação matemática desse modelo é exatamente igual à do modelo II, sendo a parcela de energia gerada, calculada conforme descrito nos parágrafos seguintes.

Nield e Bejan (1992), afirmam que nem sempre é permissível negligenciar os efeitos da convecção presente em reatores químicos de leito fixo. Suponha-se que se tenha uma solução de um reagente de concentração C_A , e ainda que esteja ocorrendo uma reação simples cuja equação da taxa de reação seja dada por:

$$r_A = \frac{dC_A}{dt} = -\hat{k}C_A^m \quad (3.107)$$

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

$$\hat{k} = A_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (3.108)$$

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

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

$$\dot{q} = \Delta\hat{H} \frac{dC_A}{dt} = -A_0(\Delta\hat{H}) \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) C_A^m \quad (3.109)$$

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

$$C_A = \frac{y_A P}{RT} \quad (3.110)$$

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

$$\dot{q} = \Delta\hat{H} \frac{dC_A}{dt} = -A_0 (\Delta\hat{H}) \left(\frac{y_A P}{RT} \right)^m \exp\left(\frac{-E_a}{RT} \right) \quad (3.109)$$

Levenspiel (1999) escreveu que existe uma dependência da taxa de reação com a temperatura que é caracterizada pela variação da velocidade específica de reação com a temperatura, e na maioria dos sistemas de reação, essa verificação é expressa pela equação de Arrhenius. Nesta equação, \hat{k} (constante de velocidade) é proporcional ao número de colisões das moléculas por unidade de concentração, e o termo $\exp(-E_a/RT)$ é conhecido como fator de Boltzmann, e representa a fração de colisões com capacidade energética suficiente para que ocorra a reação. Desde que a concentração dos componentes do sistema de reação independe da temperatura, afirmou-se que a taxa de reação varia igualmente com a temperatura. Para reações elementares simples, irreversíveis ou reversíveis, a constante A_0 e a energia de ativação E_a independem da temperatura. Porém para reações não elementares, podem depender da temperatura.

Atkins e Jones (2001) afirmam que as duas constantes A_0 e E_a , são conhecidas como parâmetros de Arrhenius da reação e são encontradas experimentalmente; Estas duas constantes são praticamente independentes da temperatura, mas depende da reação que esta sendo estudada. A energia de ativação é a energia mínima que as moléculas precisam possuir para que numa colisão efetiva entre elas ocorra e haja quebra de ligação e formação de novas ligações e novos compostos. As reações com energia de ativação baixa (ao redor de 10 kJ/mol, com gráficos de Arrhenius não muito inclinados) têm velocidades que crescem apenas ligeiramente com a temperatura. Reações com energias de ativação altas (60 kJ/mol, com gráficos de Arrhenius não muito inclinados) têm velocidades que dependem fortemente da temperatura.

Fogler (2002) reporta que a constante da velocidade \hat{k} , não é verdadeiramente uma constante, mas apenas é independente das espécies envolvidas na reação. A quantidade A_0 é quase sempre fortemente dependente da temperatura. Em reação de fase gasosa, depende do

catalisador e pode ser uma função da pressão total. Em sistemas líquidos, ela também pode ser uma função da pressão total e, adicionalmente, pode também depender de outros parâmetros. Estas outras variáveis têm menor efeito sobre a velocidade específica de reação do que a temperatura.

De uma forma geral, os seguintes fatores afetam a velocidade de reação: energia de ativação, temperatura, concentração dos reagentes, pressão (participantes gasosos), superfície de contato (participante sólido) e catalisador (Lembo e Sardella, 1981; Sardella e Mateus, 1982; Russel, 1994; Covre, 2001).

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

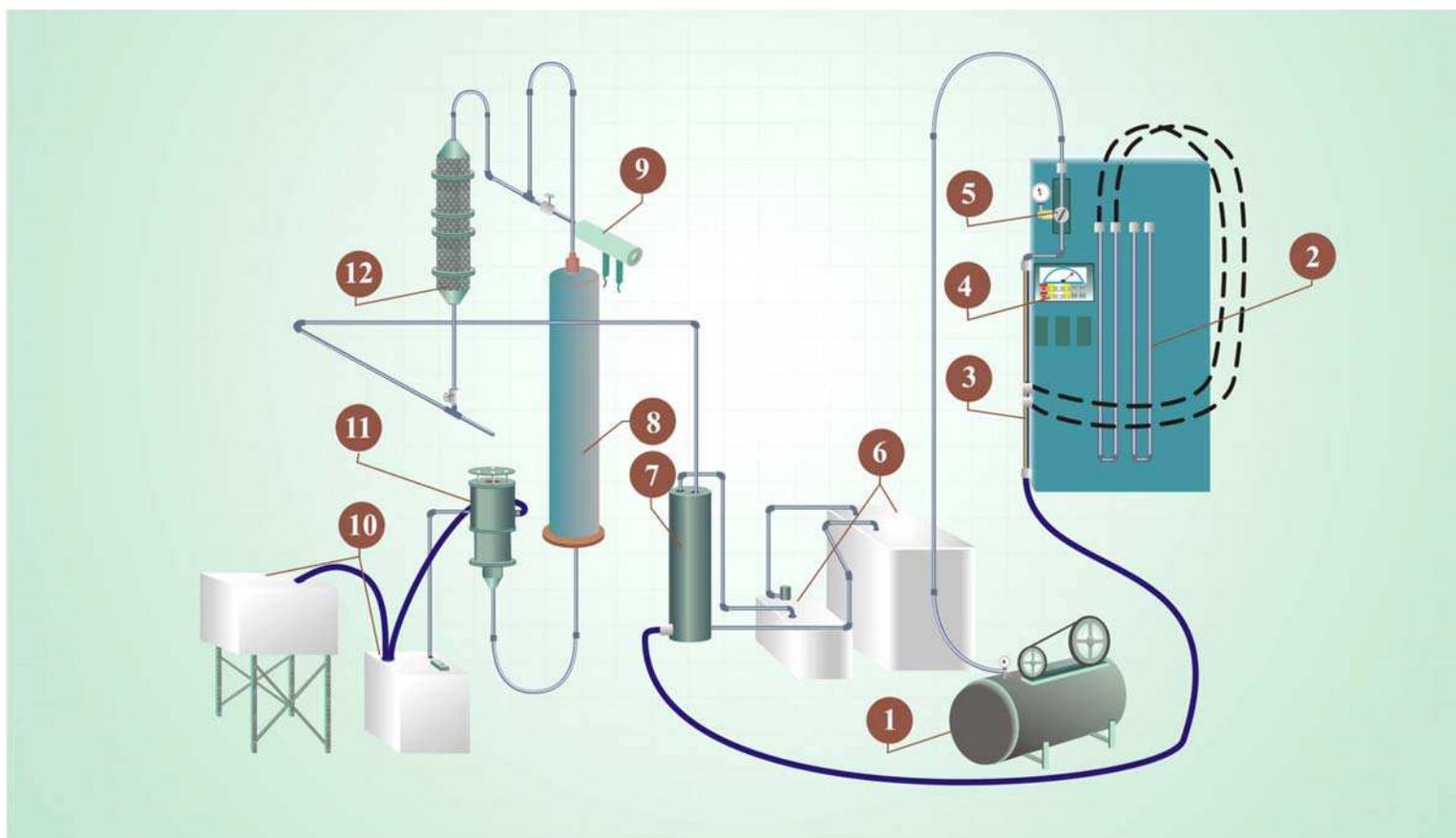
A metodologia iterativa de solução do sistema de equações algébricas provenientes da inclusão do termo de geração de energia, a geração da malha numérica, o tamanho do reator, a determinação dos pontos de simetria e os critérios de convergência do método numérico são exatamente iguais aos dos modelos I, II e III.

CAPÍTULO 4

METODOLOGIA EXPERIMENTAL

4.1 - Equipamento

A Figura 4.1 apresenta um diagrama simplificado do equipamento e periféricos utilizados para coletar medidas de temperatura (radial, axial e angular), num reator cilíndrico de leito fixo, com o objetivo de estudar e analisar o transporte de calor no reator. Este equipamento foi projetado e montado por Thoméo (1990), para operar em regime estável na faixa de número de Reynolds de partícula de 40 a 240, sendo o número de Reynolds de partícula definido como $Re = Gd_p/\mu$, onde G é a vazão mássica de fluido, d_p o diâmetro da partícula e μ a viscosidade do fluido. Nesta figura, o fluido percolante (ar) é fornecido ao sistema por um compressor (1) e passa por um filtro regulador de pressão (1A) onde são retiradas gotículas de água e óleo. Em seguida, atravessa um medidor de vazão de duplo orifício (2), que está acoplado a um sistema de manômetros diferenciais de água e mercúrio (3), sendo posteriormente seco no desumidificador (4). Em seguida, passa através de uma coluna de sílica-gel (5), visando reduzir a umidade. O rendimento desta unidade era fornecido pelo psicrômetro (6). Posteriormente, o ar é aquecido no trocador termelétrico (7), cuja diferença de potencial é controlada por um sistema de controle digital, que mantém a temperatura do ar na entrada da seção térmica da célula de medidas (8) num valor desejado e pré-estabelecido no experimento. A célula de medidas térmicas (8) é resfriada na parede por um fluido refrigerante (água), proveniente do conjunto de refrigeração (9). As temperaturas no interior do leito são lidas por termopares instalados na célula de medidas, e ligados a uma chave seletora (10), acoplada a um milivoltímetro digital.



1. Compressor; 2. Manômetros; 3. Medidor de vazão; 4. Chave seletora para termopares; 5. Filtro;
6. Conjunto de refrigeração do desumificador; 7. Desumificador; 8. Trocador de calor; 9. Psicrômetro;
10. Conjunto de refrigeração da célula de medidas; 11. Célula de medidas; 12. Coluna de sílica gel.

FIGURA 4.1 - Diagrama esquemático do equipamento e periféricos.

4.1.1 - Célula de medidas térmicas

A Figura 4.2 mostra a célula de medidas térmicas utilizada para obter as medidas de temperatura no leito compactado. A célula de medidas térmicas, neste estudo foi operada de forma estável com números de Reynolds de partícula entre 105 e 185. É formada basicamente por uma seção de entrada, uma seção térmica e um conjunto de sustentação de termopares dispostos axialmente, que serão descritos em detalhes nas seções a seguir.

4.1.2 - Seção de entrada

A seção de entrada é constituída por um tubo de latão com 246,0 mm de comprimento, 57,0 mm de diâmetro, e 3,0 mm de espessura de parede, sendo a mesma empacotada do mesmo modo e com partículas de mesma classificação granulométrica que aquelas usadas na seção térmica. Informações detalhadas do empacotamento são dadas posteriormente na seção 4.2.1.

A flange inferior desta seção está firmemente unida à flange de um cabeçote cônico-cilíndrico, que tem como função primordial, alimentar e distribuir uniformemente o fluido percolante do leito compactado desta seção. Entre tais flanges, foram colocadas duas juntas de borracha, entre as quais foi inserida uma tela de sustentação do meio poroso.

A principal finalidade do uso da seção de entrada é favorecer o desenvolvimento do perfil de velocidade do fluido percolante, e eliminar ou pelo menos minimizar os efeitos de variação da porosidade axial sobre a hidrodinâmica do sistema, sem a qual, pronunciados efeitos manifestar-se-iam na região próxima à entrada da seção térmica.

4.1.3 - Seção térmica

A seção térmica, também de latão, é formada basicamente por um módulo composto por dois cilindros concêntricos de 57,0 mm e 95,0 mm de diâmetro interno e externo, respectivamente, com espessura de parede de 3,0 mm e 100,0 mm de comprimento. O espaço anular entre os tubos é aproveitado como camisa por onde circula água de refrigeração, cujas temperaturas na entrada e saída foram medidas para verificar a uniformidade nos seus valores.

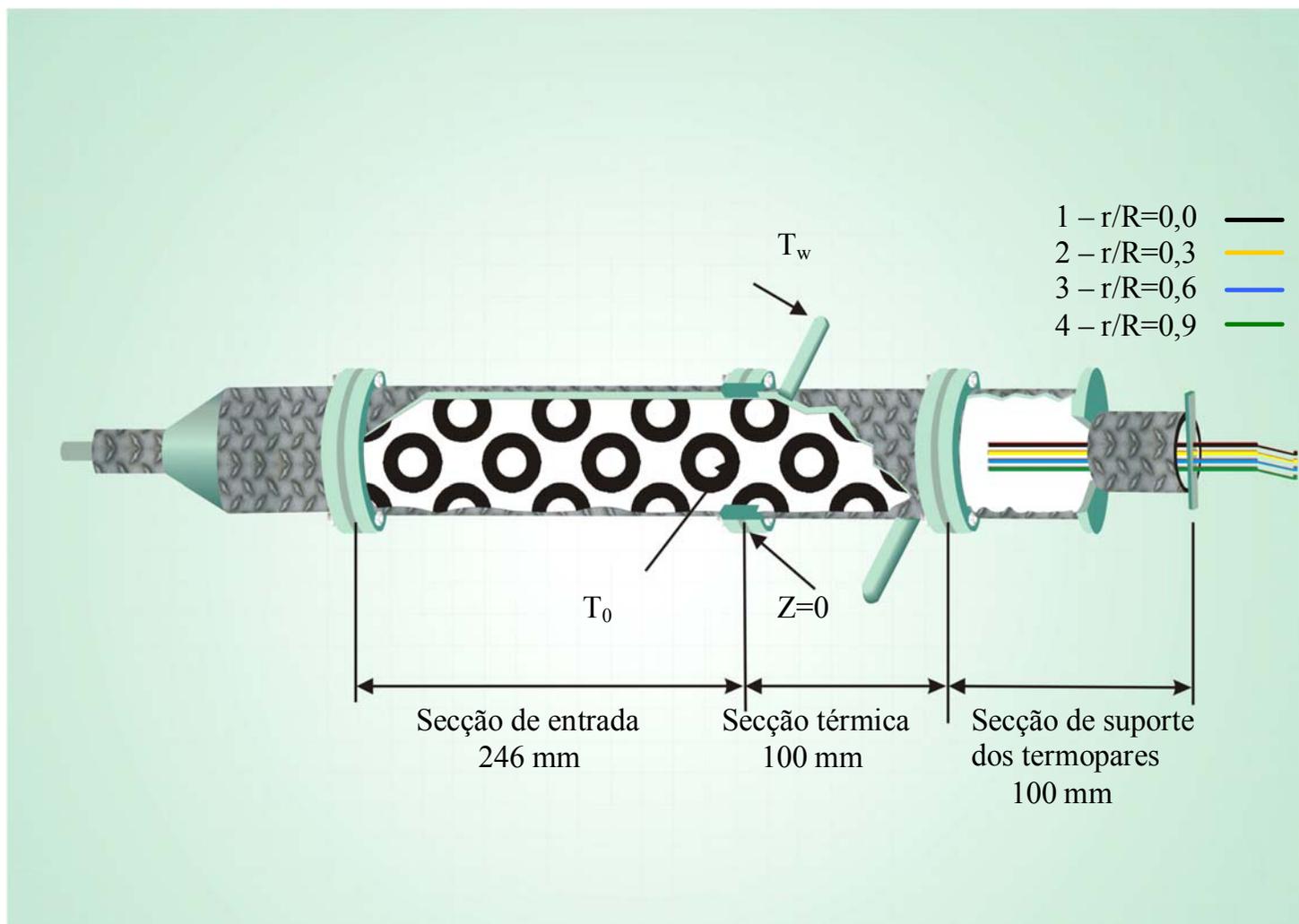


FIGURA 4.2 - A célula de medidas térmicas.

Neste trabalho, esta temperatura foi considerada constante e designada por T_m . Usando este mesmo equipamento e operando sob condições semelhantes, mediante termopares instalados ao longo da parede do leito poroso, Thoméo (1990 e 1995), verificou que as medidas de temperatura da água de resfriamento na entrada e saída da camisa de refrigeração tinham diferença desprezível, o que torna absolutamente válida a aproximação, de que a temperatura da água de refrigeração é essencialmente constante.

A seção de entrada, a seção térmica, assim como a seção de suporte dos termopares, são todas separadas por juntas de borracha exatamente iguais àsquelas usadas na separação das seções de entrada e o cabeçote cônico-cilíndrico, descrito na Seção 4.1.2, deste capítulo.

Um termopar estrategicamente inserido na posição radial central ($r = 0$ cm) e posição axial 1,0 cm da entrada da seção térmica garantiu, juntamente com o sistema de controle digital, constância da temperatura do fluido percolante (o ar) em 70°C , temperatura esta admitida neste estudo como sendo a temperatura do ar na entrada da seção de medidas térmicas, (T_0).

Ambas as seções da célula de medidas são empacotadas com partículas de óxido de zinco de forma geométrica semelhante, com diâmetro médio de 3,0 mm, sendo a técnica de empacotamento análoga para as duas seções.

4.1.4 - Conjunto de sustentação dos termopares

O conjunto suporte de termopares é composto por um módulo semelhante em características e dimensões ao da seção térmica, no qual foi posicionado no centro um tubo metálico, em cujo interior, foram afixadas duas peças em PVC, visando diminuir o problema da condução tipo aleta ao longo dos termopares, e que serviam de sustentação para quatro termopares localizados nas posições radiais adimensionais ($r^* = r/R$) 0,0; 0,3; 0,6; e 0,9, com a finalidade de obter medidas do perfil radial de temperaturas na saída do leito. O tubo metálico no qual estavam inseridas as peças em PVC que seguravam os termopares, possuía mobilidade tanto angular quanto axial, permitindo estudar as flutuações angulares de temperatura, assim como as distribuições radiais de temperaturas em várias profundidades de leito.

A célula de medidas térmicas é completamente isolada termicamente do ambiente, com isolante de lã mineral, com espessura de aproximadamente 40,0 mm, visando evitar perda de calor para o exterior.

Todos os termopares usados neste estudo foram de ferro-constantan, com 3,0 mm de diâmetro e 150 mm de comprimento, sendo os mesmos devidamente calibrados em banho de água termostaticado contra um termômetro de precisão de 0,5°C.

4.2 - Métodos experimentais

4.2.1 - Empacotamento do leito poroso

Visando trabalhar numa região de razão de aspecto ($D/d_p = 20$) onde as variações radiais de porosidade e velocidade pudessem ser consideradas desprezíveis, o leito poroso foi empacotado com partículas cilíndricas de óxido de zinco (catalisador industrial) com diâmetro médio de aproximadamente 3,0 mm, gerando uma porosidade média para o leito de $\varepsilon = 0,4$.

A técnica de empacotamento empregada neste trabalho seguiu a mesma metodologia utilizada e descrita por Zotin (1985), que se caracteriza basicamente no “derramamento” de uma quantidade prefixada de partículas, em etapas, de forma que todas as partículas da porção adicionadas sofram o mesmo processo de acomodação e mesma altura de queda. Após a adição de cada porção, foram realizadas algumas batidas na parede do tubo, visando se atingir uma acomodação aleatória das partículas do leito. Quando se observava que não mais havia variação na altura no interior do meio poroso, cessavam-se as batidas, e uma nova quantidade de partículas era acrescentada, e o procedimento repetido até se atingir a altura desejada no experimento.

A Figura 2.2 apresenta os resultados do perfil radial de porosidade para partículas cilíndricas e esféricas em função da distância da parede do reator, medidos por Zotin (1985). A razão ($D/d_p = 6,3$), trabalhada por esta autora, para partículas cilíndricas é bem menor que a utilizada neste trabalho ($D/d_p = 20$), porém ficou caracterizado dos resultados apresentados pela mesma que a porosidade do leito tende para um valor médio em torno de 0,48.

4.2.2 - Medida dos perfis de temperatura

Os dados experimentais de temperatura apresentados e discutidos neste trabalho foram obtidos pelo autor, juntamente com o Professor Doutor Samuel Conceição de Oliveira, do Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia Industrial, da Faculdade de Engenharia Química de Lorena - São Paulo, em uma outra etapa do trabalho, no Laboratório de Sistemas Particulados e Transporte de Calor, do Departamento de Engenharia Química, da Universidade Federal de São Carlos - São Paulo, sob a supervisão do Professor Doutor José Maria Corrêa Bueno, que gentilmente cedeu os dados.

O procedimento experimental adotado para a obtenção das medidas de temperatura na saída do leito poroso, consistia basicamente do seguinte: Depois de estabelecidas as condições de operação do ensaio (vazão mássica superficial de fluido e altura do leito poroso), circulava-se água a 22,5°C pela camisa de refrigeração e ligavam-se os equipamentos periféricos de aquecimento e controle da temperatura do fluido percolante, até que a mesma atingisse na entrada do leito o valor desejado (70°C). A monitoração e comprovação desta temperatura foram feitas por um termopar inserido imediatamente antes da entrada da seção térmica. Quando o ar atingia 70°C, o mesmo era admitido à célula de medidas. Então, a cada 15 minutos eram realizadas as leituras das temperaturas de todos os termopares, até que as mesmas fossem reproduzidas por três vezes consecutivas, indicando que o regime estacionário havia sido estabelecido, o que demandava um tempo médio de aproximadamente 2 horas. Estabelecido o regime permanente, o conjunto suporte dos termopares era deslocado angularmente de 30 em 30°, até perfazer doze posições angulares desejadas entre 0 e 330°.

Neste estudo foram utilizadas vazões superficiais de ar correspondentes aos de número de Reynolds de partícula de 105, 125, 145, 165 e 185, sendo esta estreita faixa fixada pelo excessivo desgaste mecânico das partículas de catalisador quando se utilizava número de Reynolds acima de 185. Para um dado número de Reynolds de partícula fixo, foram empregadas as seguintes alturas de leito poroso: 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 e 100 mm.

Visando obter uma boa reprodutibilidade dos ensaios, a temperatura da água de refrigeração foi mantida fixa num valor desejado (22,5°C), através de um eficiente conjunto

de refrigeração, que garantia a reprodutibilidade das condições de temperatura na entrada da seção de medidas térmicas.

Maiores detalhes de projeto e confecção do equipamento, bem como do procedimento experimental podem ser obtidos em Thoméo (1990).

4.3 - Tratamento estatístico dos dados experimentais

Neste trabalho, os resultados experimentais coletados na célula de medidas térmicas (Figura 4.2) são campos de temperatura em função das três direções, axial, angular e radial. Uma vez que um dos objetivos é obter os coeficientes de transporte de calor num reator de leito fixo, a saber, o coeficiente de transporte de calor parede-leito (h_w) e a condutividade térmica efetiva (k), e visto que se dispõe de campos tridimensionais de temperatura, o procedimento numérico de estimativa se torna muito difícil. Optou-se então, por obter um perfil radial $T(r)$, em cada altura do leito, minimizando desta forma a influência da posição angular. Vale salientar que aqui, experimentos replicados foram executados visando comprovar que a reprodutibilidade do empacotamento foi alcançada conforme será mostrada no capítulo de Resultados e Discussões. Neste caso, o procedimento usado para filtrar as flutuações angulares de temperatura foi obter o valor médio das medidas de temperatura realizadas, nas doze posições angulares defasadas entre si de 30° .

Como os dados experimentais da temperatura ao longo do raio foram obtidos em apenas quatro posições, a partir dos valores médios calculados conforme o procedimento mencionado acima, optou-se por obter uma equação de T em função da posição radial, através do ajuste não-linear de uma função parabólica a três termos e a três parâmetros, que é uma metodologia estatisticamente mais adequada, do que utilizar um número reduzido de dados. A forma da equação proposta no ajuste é dada como segue:

$$T(r) = b_5 + b_6 r + b_7 r^2 \quad (4.1)$$

A estimativa não-linear dos parâmetros da Equação 4.1 foi realizada usando-se o Software Statística®. O método numérico de ajuste escolhido foi o Rosebroock e Quasi-Newton, para todos os testes, adotando-se como valor para o critério de parada 0,001. A

forma da curva proposta é baseada nos trabalhos de Thoméo (1990), Borkink e Westerterp (1994) e Oliveira e Lima (2003) que afirmam ser o perfil de temperatura ao longo do reator de leito fixo, parabólico em relação à posição radial.

Desde que, obter estimativas de parâmetros num campo bi-dimensional também não é estatisticamente conveniente, optou-se por se trabalhar com a temperatura média radial, através da integração das equações obtidas no ajuste não-linear (Equação 4.1), pela seguinte expressão:

$$\bar{T}_r(r) = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^R rT(r) dr d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\theta} \quad (4.2)$$

A integração expressa pela Equação 4.2 foi realizada analiticamente para todas as curvas usando o Software Mathematica®. Obteve-se dessa forma os valores das médias radiais para todas as alturas de leito e números de Reynolds utilizados. Desta maneira, dispunha-se nesse ponto de perfis de temperatura radiais médios em função da posição z .

Procedimento semelhante ao utilizado na Equação 4.1 foi adotado nestes perfis, visando obter agora, equações representativas da temperatura radial média em função da altura do leito. Neste caso, baseando-se nos trabalhos de Lima (1999) e Nascimento (2002), propõe-se nesta etapa, uma equação exponencial a três termos e a seis parâmetros. A equação proposta nesta etapa tem a seguinte forma matemática:

$$\bar{T}_r(z) = b_8 \exp(b_9 z) + b_{10} \exp(b_{11} z) + b_{12} \exp(b_{13} z) \quad (4.3)$$

Novamente, o ajuste não-linear foi realizado usando o Software Statistica® com o método numérico de Rosebroock e Quasi-Newton, com um critério de convergência de 0,001 para todos os casos.

A Equação 4.3 obtida no ajuste não-linear foi utilizada para obter os valores dos coeficientes de transporte (k e h_w). A comparação dos valores da temperatura obtidos por esta

equação (em qualquer altura de leito) com os valores previstos pelos modelos I, II e III, apresentados no Capítulo 3, serviu para minimizar o erro entre esses valores, e para estimar os coeficientes de transporte de calor.

Os desvios provenientes da comparação entre os valores da temperatura previstos a partir do uso dos modelos numéricos e aquelas obtidas com as equações representativas dos dados experimentais, bem como a variância, são calculados respectivamente por:

- Desvio entre os dados experimentais e os preditos

$$\text{ERRO} = \sum_{i=1}^n (\Phi_i^{\text{num}} - \Phi_i^{\text{exp}})^2 \quad (4.4)$$

- Variância decorrente do ajuste dos modelos aos dados

$$\bar{S}^2 = \frac{\text{ERRO}}{(n - p)} \quad (4.5)$$

onde \bar{n} representa o número de pontos experimentais usados no ajuste e \bar{p} o número de parâmetros estimados no modelo, que por sua vez significa o número de graus de liberdade (Figliola e Beasley, 1995).

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os mecanismos de transporte de calor num leito fixo são muito complexos, e a interpretação dos resultados tem gerado uma grande controvérsia entre os pesquisadores, em relação ao tipo de modelagem admitida. Visando contribuir no entendimento desses fenômenos, neste capítulo apresentam-se e discutem-se os resultados de temperatura obtidos a partir da solução analítica, dos modelos numéricos I, II, III e IV, bem como os dados experimentais.

5.1 - Resultados da solução analítica

Na aplicação da solução para um leito fixo, optou-se por um leito cilíndrico com dimensões $2R \times H$ (0,1m x 0,20m). Para obter os resultados, foi gerado um programa computacional codificado no Software Mathematica[®]. Em todos os casos, adotou-se na entrada, um perfil de temperatura plano tipo $T_0^* = 1$. As Figuras 5.1 a 5.5 mostram a distribuição de temperatura adimensional e as linhas isotérmicas no interior do leito, sob várias condições de trabalho.

A legenda apresentada na Figura 5.1 também é válida para as Figuras 5.2, 5.3 e 5.5. Observando-se as Figuras 5.1 a 5.5, é nítida a dependência da temperatura com ambas as direções, radial e axial. Contudo, fica evidente que os maiores gradientes existem na direção radial. Comparando-se as Figuras 5.1, 5.2 e 5.3, verifica-se que um aumento no valor da condutividade térmica axial k_z de 0,0 para 0,1 W/m K, praticamente não influencia o perfil de temperatura no leito, porém, quando o valor de k_z é 100 vezes maior que k_r , fica evidente a forte

influência deste parâmetro sobre o perfil de temperatura no leito, uma vez que o fluxo mássico de fluido foi mantido constante. Observa-se claramente que para $k_z = 10,0$ W/m K, os gradientes de temperatura nesta direção são visivelmente menores, que nos casos onde $k_z = 0$ e $k_z = 0,1$ W/m K, exceção feita na região do primeiro quadrante compreendida entre $0,0 \leq z/L \leq 0,4$ e $0,0 \leq r/R \leq 0,4$, onde os gradientes são mantidos.

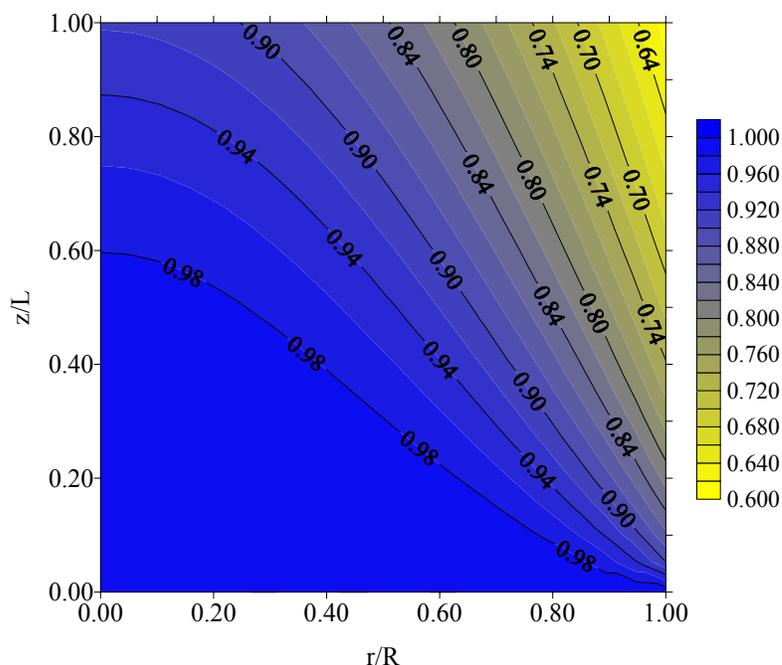


FIGURA 5.1 - Distribuição de temperatura adimensional quando $k_r = 0,1$ W/m K, $k_z = 0$, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000$ J/kg K e $G = 0,05$ kg/s/m².

Comparando-se as Figuras 5.2 e 5.4, observa-se uma forte influência do coeficiente de transferência de calor sobre a distribuição de temperatura no leito. À medida que o número de Biot aumenta, a temperatura do fluido percolante próximo à parede do reator, tende à sua temperatura de equilíbrio em todos os pontos ao longo da coordenada axial. Neste caso, os gradientes de temperatura preditos são mais pronunciados em ambas as direções, axial e radial. Como nestas figuras estão fixados os valores da condutividade térmica radial e o raio do leito, a provável causa para o reflexo no aumento dos perfis recai sobre a forte influência do coeficiente de transferência de calor sobre a distribuição de temperatura no interior do leito, mostrando que neste caso, o mecanismo de transporte de calor por convecção é dominante quando o número de Biot tende a infinito.

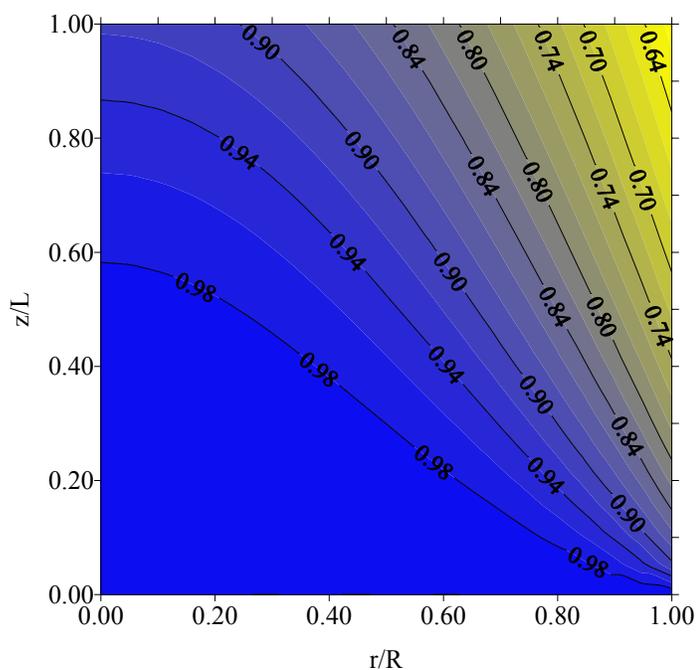


FIGURA 5.2 - Distribuição da temperatura adimensional quando $k_r = 0,1 \text{ W/m K}$, $k_z = 0,1 \text{ W/m K}$, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000 \text{ J/kg K}$ e $G = 0,05 \text{ kg/s/m}^2$.

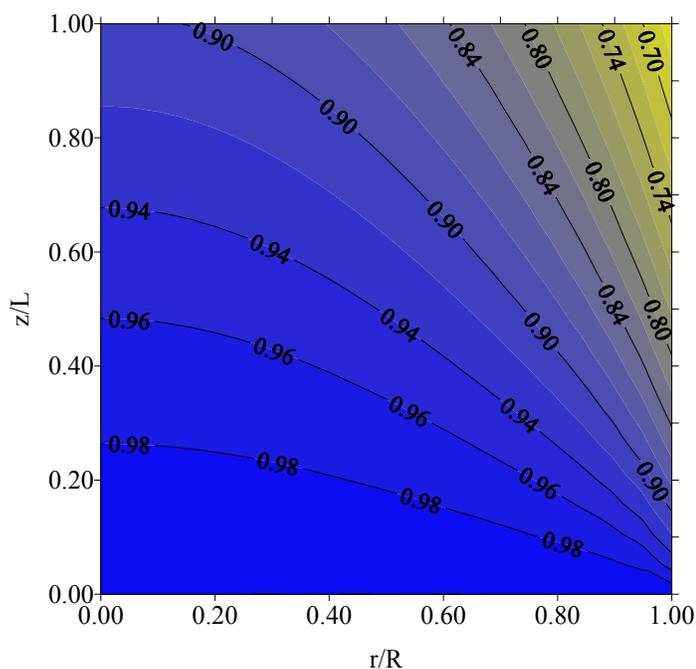


FIGURA 5.3 - Distribuição da temperatura adimensional quando $k_r = 0,1 \text{ W/m K}$, $k_z = 10,0 \text{ W/m K}$, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000 \text{ J/kg K}$ e $G = 0,05 \text{ kg/s/m}^2$.

Comparando-se as Figuras 5.2 e 5.5, verifica-se que aumentando o fluxo mássico (G), de 0,05 para 0,08 kg/s/m^2 , mantendo-se fixas as demais variáveis, altera-se sensivelmente as temperaturas locais no leito, aumentando a região de menores gradientes de temperatura. Neste caso, como esperado, o termo relativo à dispersão axial de calor, tende a tornar-se menos importante que o termo convectivo e assim o transporte de calor acontece, predominantemente, por convecção, através dos caminhos preferenciais de fluido próximo da região da parede do leito, conforme mencionado por Silveira (1991).

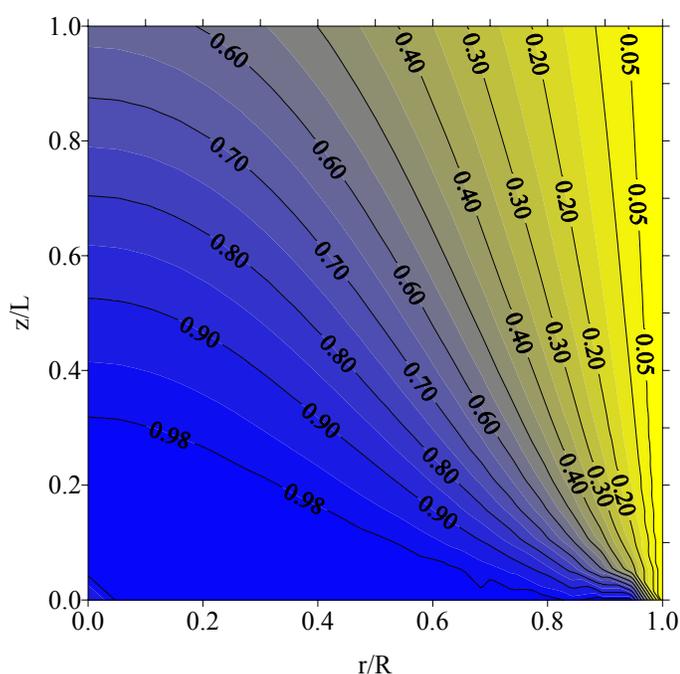


FIGURA 5.4 - Distribuição da temperatura adimensional quando $k_r = 0,1 \text{ W/m K}$, $k_z = 0,1 \text{ W/m K}$, Bi infinito, $c_p = 1000 \text{ J/kg K}$ e $G = 0,05 \text{ kg/s/m}^2$.

Os resultados apresentados nas Figuras 5.1 a 5.5 admitem um perfil de temperatura pistonado na entrada do leito. Contudo, vale salientar que, assumir um perfil de temperatura plano na entrada, enquanto o perfil real é parabólico, pode provocar uma aparente influência do termo de dispersão axial de calor, e assim fornecer estimativas dos coeficientes de transporte (condutividade térmica efetiva e coeficiente de transferência de calor) dependentes do efeito de entrada. Borkink e Westerterp (1994) chegaram a esta mesma conclusão, quando apresentaram os resultados de sua solução analítica, trabalhando com um modelo pseudo-homogêneo

bidimensional, sem contemplar o termo dispersão axial, porém, imputando na modelagem um perfil de temperatura na entrada do reator do tipo parabólico a dois termos.

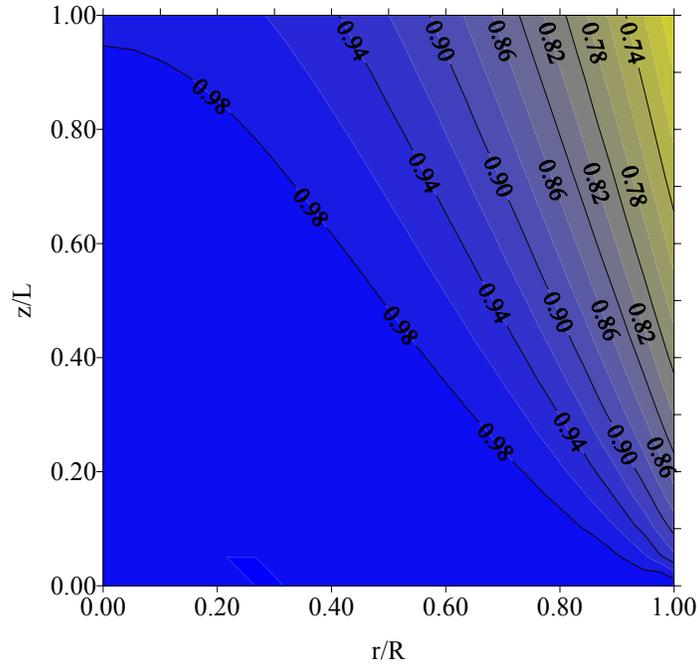


FIGURA 5.5 - Distribuição da temperatura adimensional para o caso $k_r = 0,1 \text{ W/m K}$, $k_z = 0,1 \text{ W/m K}$, $Bi = 1,0$, $c_p = 1000 \text{ J/kg K}$ e $G = 0,08 \text{ kg/s/m}^2$.

Apresenta-se a seguir o resultado para as constantes A_n , da Equação 3.59, quando se admite na entrada do reator, um perfil de temperatura radial a três termos, como segue:

$$T_0^*(r) = b_{14} + b_{15}r + b_{16}r^2 \quad (5.1)$$

sendo b_i , os parâmetros do perfil admitido. Neste caso, os valores da constante A_n (obtidos da Equação 3.59) são calculados por:

$$A_n = \frac{2}{R^2} \frac{d_n}{\left[\left(\frac{a_n}{Bi}\right)^2 + 1\right] J_1^2(a_n)} \quad (5.2)$$

onde as constantes d_n , presentes na Equação 5.2 são obtidas através do uso das funções hipergeométricas generalizadas, descritas matematicamente por uma combinação linear de

funções de Bessel de primeira espécie e ordens 1, 2 e 3, respectivamente. Para o tipo de perfil radial de temperatura proposto, o valor de d_n será calculado pela seguinte equação:

$$d_n = \frac{1}{3a_n^2} (3b_{14}R^2a_nJ_1(a_n) + 6b_{16}R^4J_2(a_n) - 3b_{16}a_nR^4J_3(a_n) + b_{15}a_n^2R^3 \text{HipergeometricaPFQ}[\{\frac{3}{2}\}, \{1, \frac{5}{2}\}, -\frac{a_n^2}{4}]) \quad (5.3)$$

Informações detalhadas sobre as funções hipergeométricas generalizadas podem ser obtidas em Abramowitz e Stegun (1970) e Oliveira e Maiorino (1997).

5.2 - Resultados da solução numérica

5.2.1 - Refinamento de malha

Um dos requisitos fundamentais de uma aproximação numérica é que ela reproduza com boa precisão a equação diferencial quando o tamanho da malha espacial e o intervalo de tempo tendam a zero. Isto é, os erros de truncamento e arredondamento devem tender a zero quando a malha numérica tender a um número infinito de pontos. A aproximação numérica que possuir esta característica é dita consistente e estável.

A aplicação de qualquer método numérico (e em particular neste trabalho, o método dos volumes finitos) é fortemente condicionada ao critério de estabilidade de Von Neumann, $\Gamma^{\Phi} \Delta t / L^2$ e ao número de pontos da malha utilizados no cálculo da propriedade de interesse. Com o propósito de gerar resultados numéricos que sejam independentes do tamanho da malha, resultados utilizando o modelo I foram obtidos com malhas de três tamanhos diferentes.

O efeito do número de pontos da malha no comportamento da solução numérica para um reator cilíndrico elíptico foi avaliado variando-se o tamanho da malha numérica. Usaram-se malhas 10x10x10, 20x20x20 e 30x30x30 pontos, para uma razão de aspecto geométrica $L_2/L_1 = 1$ e velocidade superficial de fluido, $u_z = 0,11417$ m/s. A Figura 5.6 ilustra o perfil de temperatura

adimensional no reator em função da posição adimensional $(\xi-1)/(L_2/L_1-1)$, em três alturas adimensionais do leito (z/L), para cada tamanho de malha.

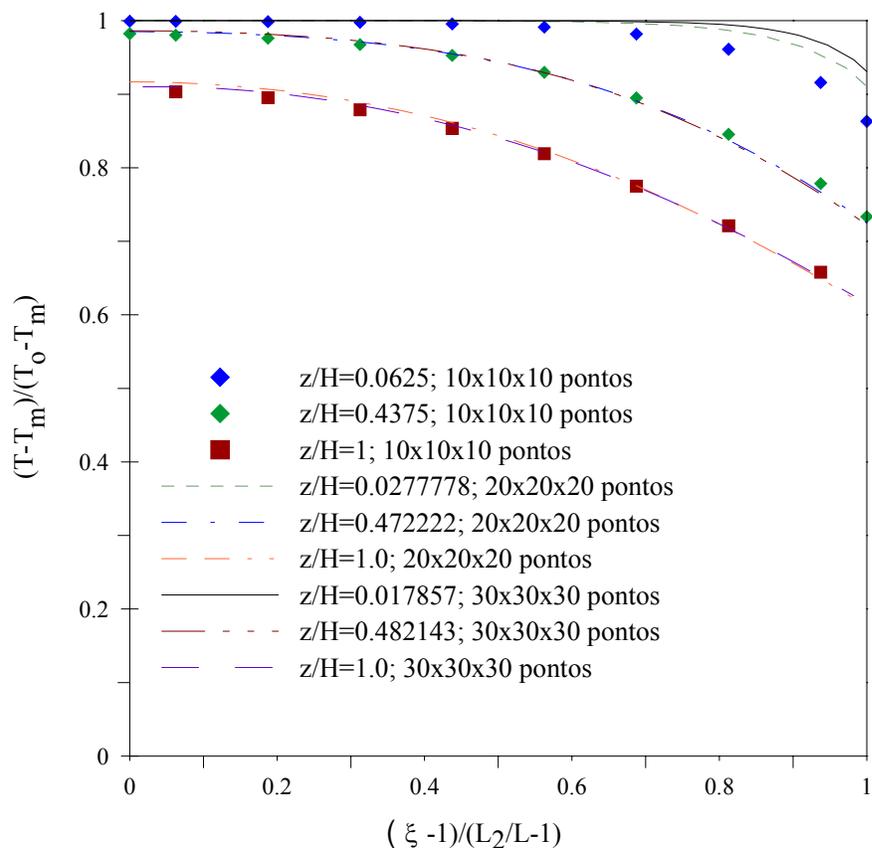


FIGURA 5.6 - Influência do número de pontos da malha sobre o perfil de temperatura no leito fixo elíptico, para $L_2/L_1 = 1$, $Bi = 1,0$ e $u_z = 0,11417$ m/s.

Observa-se da Figura 5.6 que apesar dos valores das alturas adimensionais z/L , não serem exatamente iguais de uma malha para outra, para uma dada altura de leito, as três malhas apresentam resultados extremamente semelhantes. Todavia, para se atingir os resultados finais usando-se a malha 30x30x30 pontos, é requerido um tempo computacional muito longo. Por esta razão, esta malha numérica foi descartada, uma vez que sem comprometer a qualidade dos resultados obtidos, a malha 20x20x20 pontos fornece num tempo computacional muito menor, resultados muito próximos daqueles fornecidos pela malha 30x30x30 pontos, razão pela qual a mesma foi considerada adequada e adotada nos demais casos estudados e modelos apresentados neste trabalho.

5.2.2 - Validação da solução numérica

Para validar a solução numérica, resultados obtidos com o modelo II foram comparados com resultados analíticos reportados por Oliveira e Lima (2003), para um reator de leito fixo com forma geométrica cilíndrica circular ($L_2/L_1 = 1$), e condição de contorno convectiva na parede do reator, quando $Bi = 1,0$. A Figura 5.7 ilustra a comparação em três posições axiais ao longo do reator.

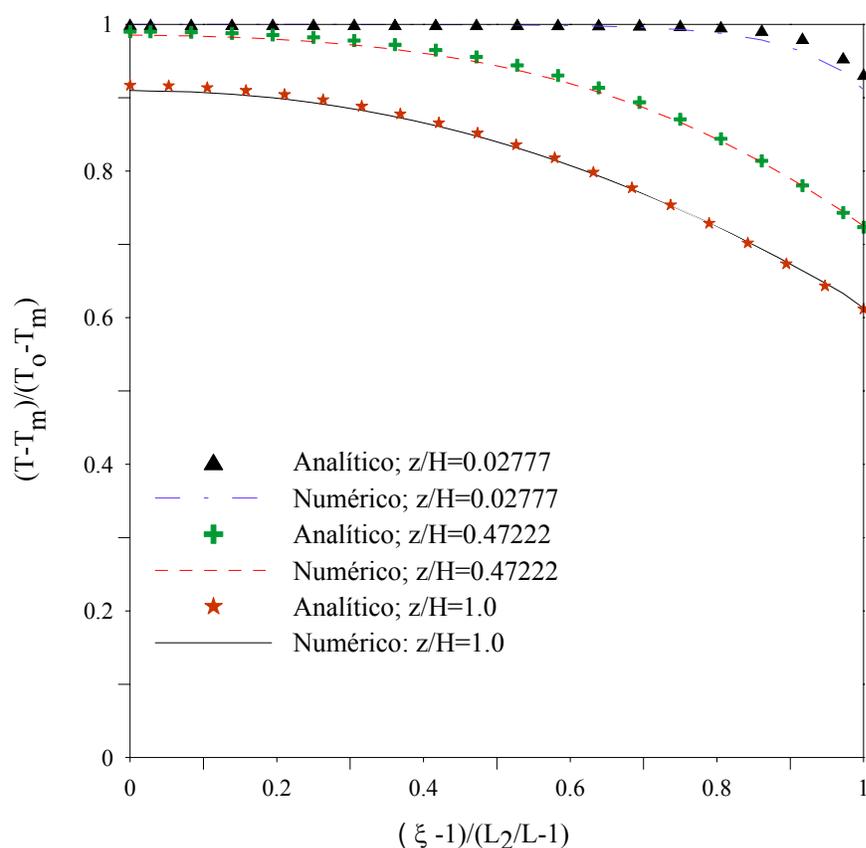


FIGURA 5.7 - Perfis adimensionais de temperatura, obtidos pelo modelo II e solução analítica, num leito fixo cilíndrico ($L_2/L_1 = 1$) para $Bi = 1,0$.

Na obtenção dos resultados da solução analítica (Equação 3.57), utilizou-se cinquenta termos da série. Como pode ser observado nessa figura, existe uma excelente concordância entre os resultados. A pequena diferença existente entre os resultados numérico e analítico nas posições

radiais próximas ao centro do leito é uma consequência da própria estimativa numérica da temperatura no centro do leito.

5.2.3 - Distribuições de temperatura no leito fixo, previstas pelos modelos I e II

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.

Aqui, o leito compactado é considerado como uma pseudofase, ou seja, como se o mesmo fosse completamente homogêneo. A forma, tamanho, direções dos interstícios e a localização detalhada das partículas dentro do leito são ignoradas. O fluxo de fluido no leito na direção axial é assumido como pistonado, considerando-se também a existência de dispersão axial, radial e angular de calor. Uma vez que na realidade duas fases estão envolvidas no sistema, as propriedades térmicas denominadas como efetivas, são dependentes da natureza das fases individuais que formam o leito compactado.

Para estudar o comportamento da distribuição de temperatura no interior do reator de leito compactado os seguintes valores da condutividade térmica efetiva, velocidade intersticial, densidade e calor específico do gás, porosidade e dimensões do leito foram utilizados: $k = 0,1$ W/m K, $u_z = 0,11417$ m/s, $\rho = 1,09488$ kg/m³, $c_p = 1000$ J/kg K, $\varepsilon = 0,40$, $L_1 = 0,05$ m, $L_2 = 0,10$ e $0,25$ m e $H = 0,2$ m.

A distribuição de temperatura no interior do reator é muito importante a fim de verificar a estabilidade térmica do equipamento, assim como analisar se a solução numérica proposta é estatisticamente adequada para descrever o processo. A representação dos perfis de temperatura adimensionais radiais e angulares no interior do leito fixo em estado estacionário, nas posições axiais $z = 0,00556$ m, $z = 0,03889$ m, $z = 0,10556$ m e $z = 0,19444$ m são mostradas nas Figuras 5.8 a 5.11, para valores da razão de aspecto geométrica $L_2/L_1 = 2$ e 5 , e coeficiente de transferência de calor parede-leito, $h_w = 2,0$ W/m² K e infinito. Nestas figuras, as curvas com valores definidos representam isotermas que delimitam os gradientes adimensionais no interior do reator.

Observando-se as Figuras 5.8 a 5.11, pode-se afirmar que fixando a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 e o coeficiente de transferência de calor h_w , variando-se apenas a altura do leito compactado, provoca-se um deslocamento das isolinhas de maiores temperaturas para posições cada vez mais próximas ao centro do reator de leito fixo, gerando-se dessa forma regiões com maiores gradientes térmicos. Isto pode estar associado talvez ao fato de que para leitos cada vez maiores, a razão altura do leito para diâmetro do leito, H/L_1 , torna-se cada vez maior, fazendo com que os efeitos térmicos de entrada tornem-se cada vez menos pronunciados.

Outra constatação que se pode perceber observando-se estas figuras é que aumentando o valor do coeficiente de transferência de calor de $2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ para infinito, mantendo-se constante a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 , aumenta-se conseqüentemente as regiões de maiores gradientes térmicos, provocando o aparecimento de novas isolinhas de temperatura com valores cada vez menores. A explicação para tal ocorrência reside no fato de que para elevados valores do coeficiente de transferência de calor (h_w tendendo para infinito), o mecanismo de transporte de calor convectivo torna-se dominante quando comparado com a taxa de transporte de calor por condução. Isto pode ser facilmente visualizado comparando-se as Figuras 5.8 e 5.9, assim como as Figuras 5.10 e 5.11, onde, em todas as alturas de leito, fica claro que o efeito torna-se cada vez mais pronunciado à medida que se trabalha com leitos cada vez mais profundos.

A modificação da razão geométrica de aspecto L_2/L_1 , de 2,0 para 5,0 não revelou influência significativa sobre os mecanismos de transporte de calor, apesar de haver um aumento na área de fluxo de calor quando se aumenta L_2/L_1 . Comparando-se as Figuras 5.8 e 5.10, para um valor do coeficiente de transferência de calor $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ assim como as Figuras 5.9 e 5.11, para um coeficiente de transferência de calor h_w tendendo a infinito, o comportamento das isolinhas de temperatura sofre pouco ou nenhum deslocamento das regiões de maiores gradientes térmicos em direção ao centro do reator. Na comparação entre as figuras, nota-se claramente que 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.

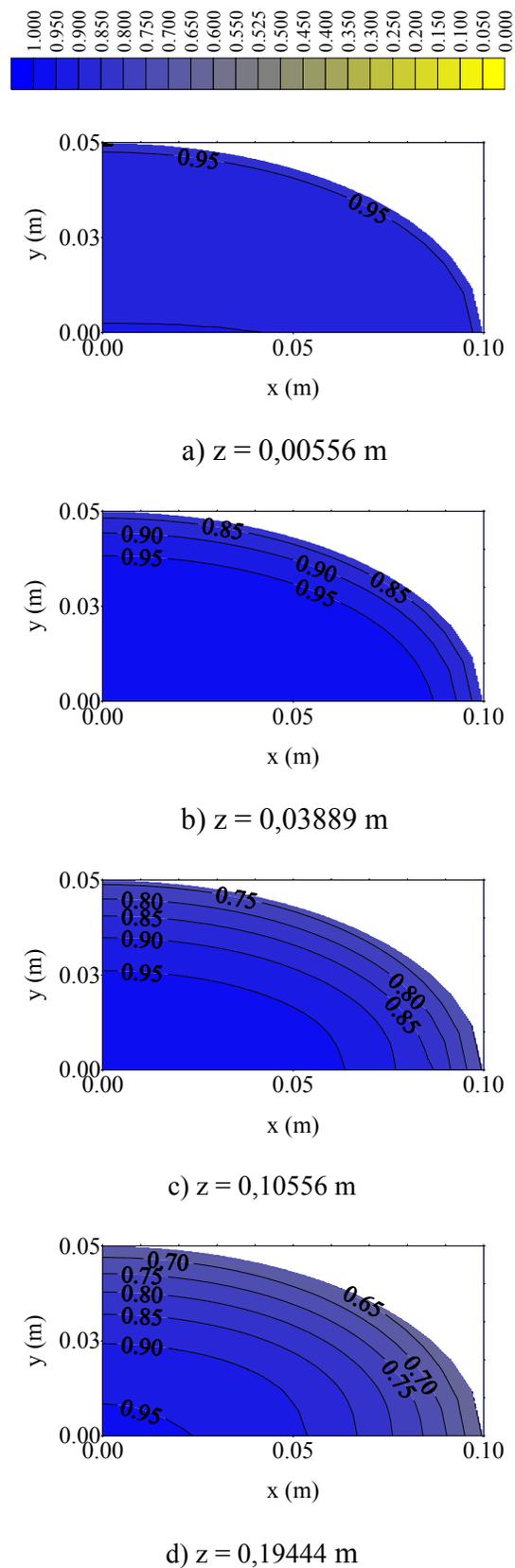


FIGURA 5.8 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 2$ e $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$.

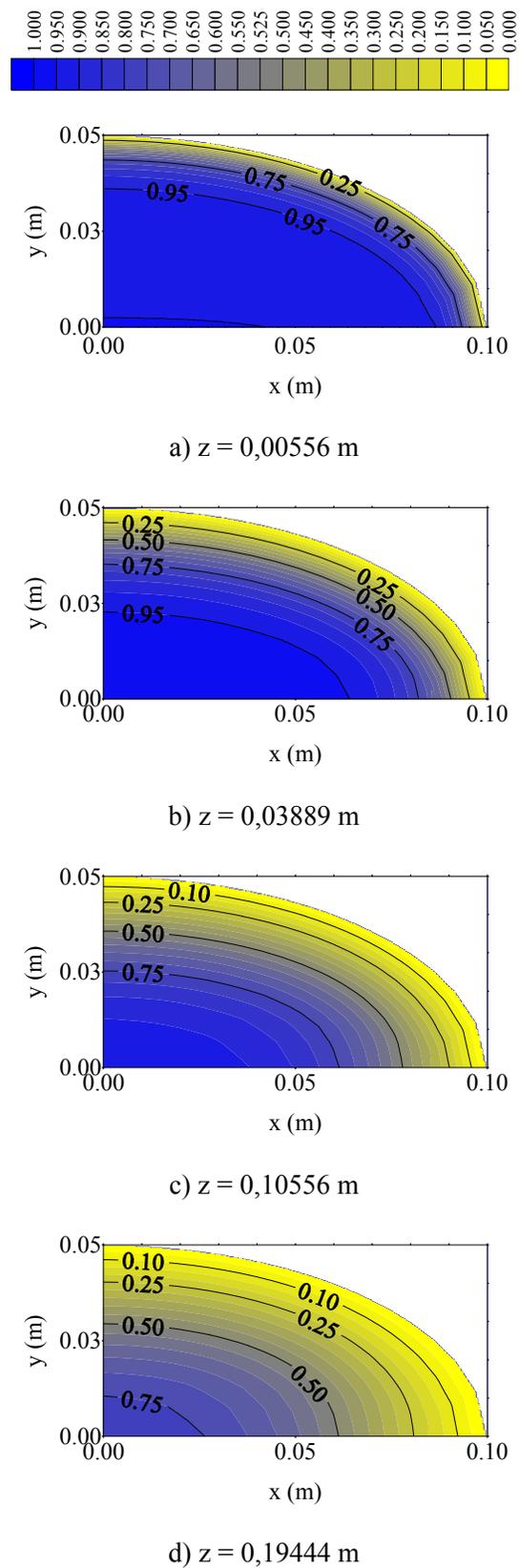


FIGURA 5.9 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 2$ e h_w infinito.

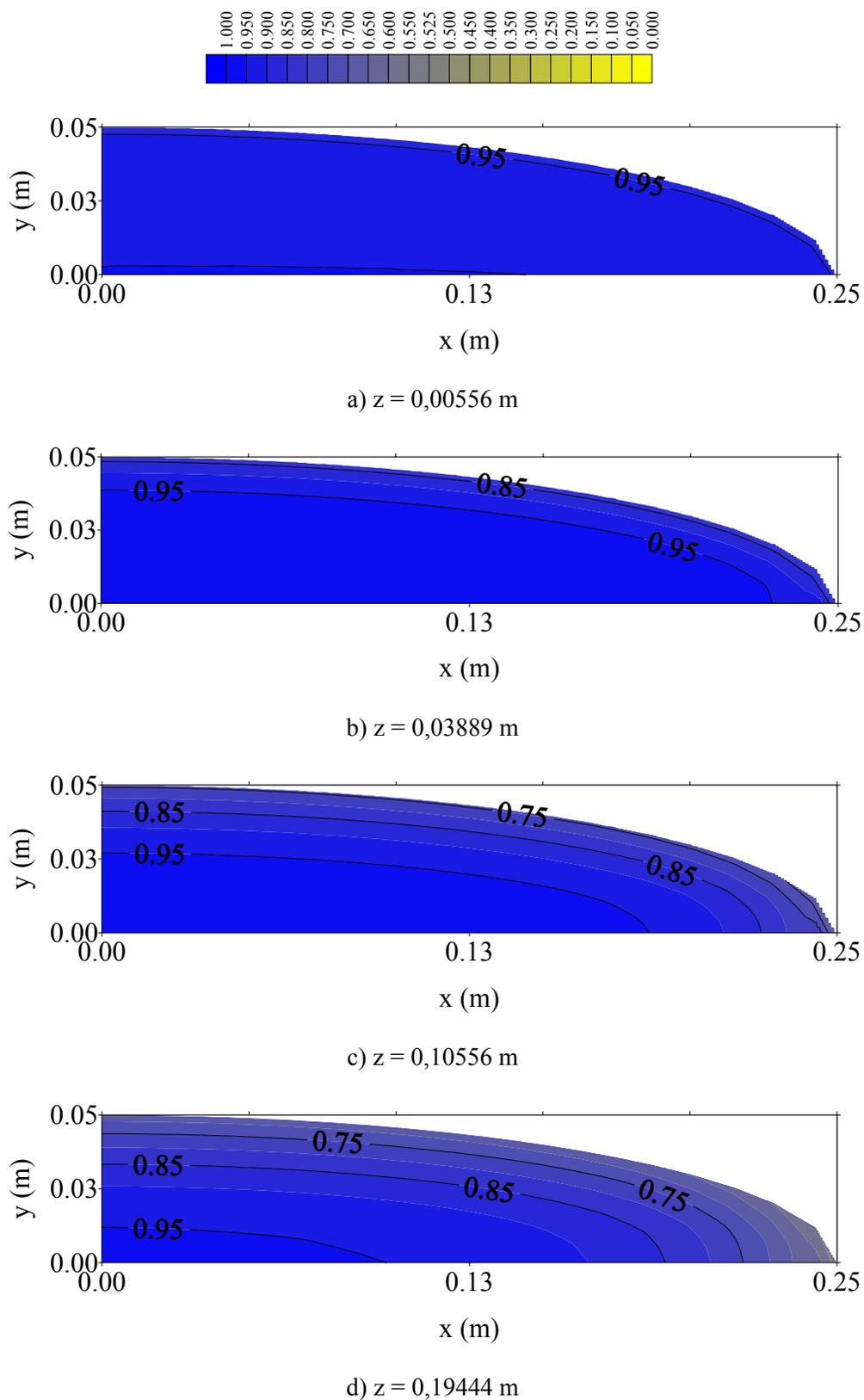


FIGURA 5.10 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 5$ e $h_w = 2,0$ W/m² K.

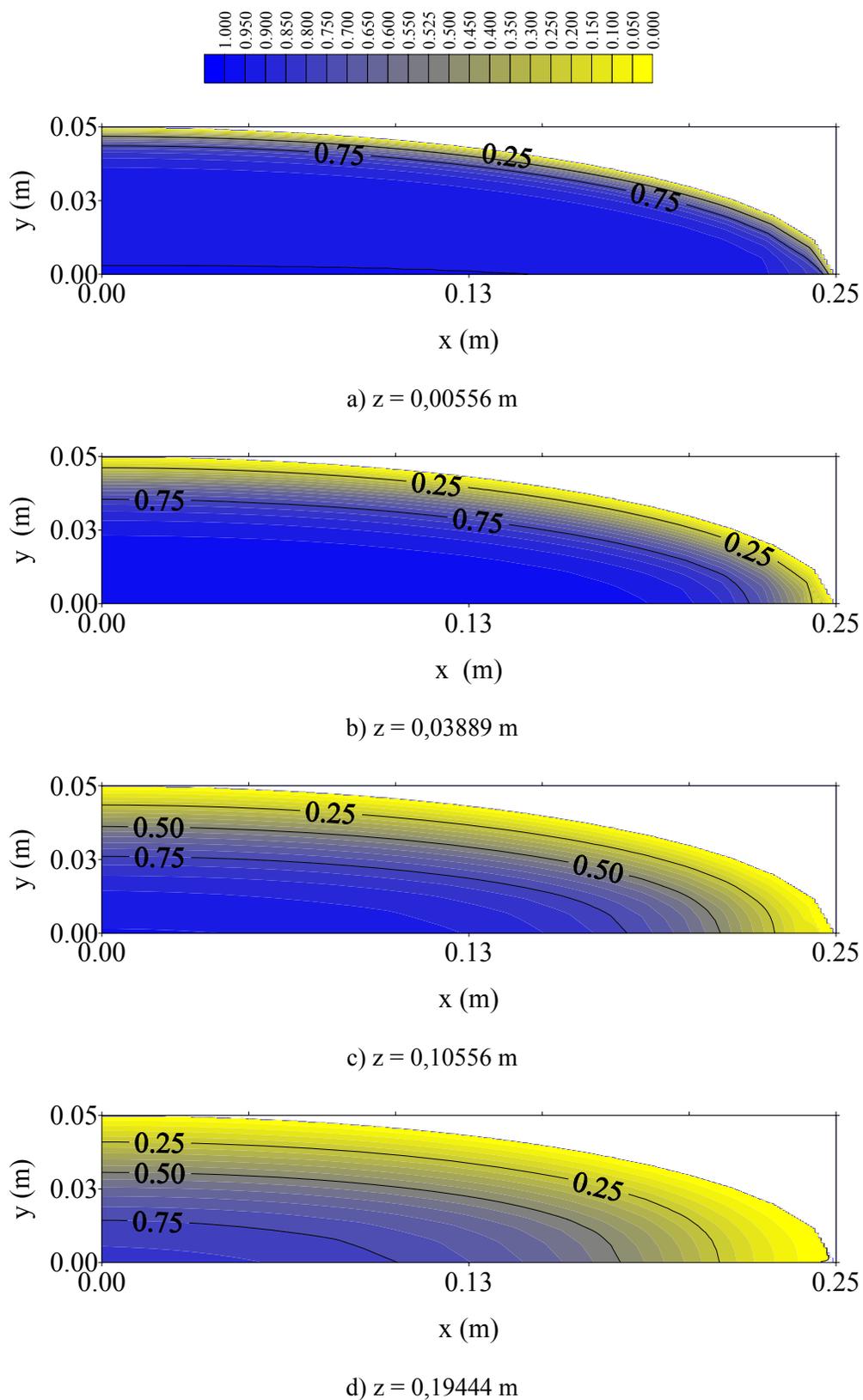


FIGURA 5.11 - Distribuição de temperatura no leito, para $L_2/L_1 = 5$ e h_w infinito.

Fica evidenciado a partir das figuras apresentadas que, quando a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 e h_w aumentam, o fluxo de calor também aumenta, resultando em perfis de temperatura com elevados gradientes nas direções axial, radial e angular.

A diferença nos valores da temperatura adimensional no leito indica que o fluxo de calor ocorre do centro em direção à parede do reator (direções angular e radial) e na direção axial, da região de entrada até a saída, conforme esperado. Pode ser visto, de acordo com as linhas isotérmicas, que os maiores gradientes de temperatura acontecem perto da região da parede, principalmente para valores elevados de h_w . Existe também um forte aquecimento próximo ao ponto focal da elipse que se eleva com o aumento do valor da razão de aspecto geométrica (L_2/L_1) do reator.

Vale salientar que a taxa de transferência de calor em meio poroso com um fluido percolante é determinada por uma combinação de vários mecanismos. Quando a transferência de calor ocorre simultaneamente com o fluxo de um fluido através de um leito compactado, os mecanismos de dispersão e difusional ocorrem misturados. A dispersão axial de calor pode ocorrer, por exemplo, por condução molecular, irregularidades no fluxo do fluido através do leito devido às irregularidades no empacotamento do leito, alternativamente convergindo e divergindo nos espaços vazios e taxa de fluxo de fluido. Quando os poros são pequenos, a transferência de calor por convecção pode ser desprezada. Portanto, a contribuição da transferência de calor através da fase sólida é muito maior, contudo esta situação não é usada na prática. A difusão axial de calor em reatores industriais é de importância secundária.

Outro comentário importante é que, neste trabalho, a velocidade intersticial do gás é assumida sendo independente das posições radial e angular. Todavia, a distribuição de velocidade perpendicular ao leito depende das variações na resistência ao fluxo sobre diferentes partes do leito. A velocidade real do fluido percolante alterna de zero na parede do leito, para o valor máximo em um (01) diâmetro de partícula da parede, decaindo para um valor mínimo no centro do leito.

5.2.4 - Distribuições de temperatura no leito fixo, previstas pelo Modelo IV

Neste modelo, os fenômenos de transporte de calor sob condições de contorno convectiva ou de temperatura de equilíbrio na parede do reator foram simuladas juntamente com a hipótese da ocorrência de uma reação simples, num reator de leito fixo, com as mesmas dimensões usadas nos demais modelos anteriores. A parcela de energia gerada devido à ocorrência da reação química foi calculada em cada ponto pelo produto velocidade de reação, dada pela lei da potência e o valor da entalpia associada à reação considerada.

As distribuições de temperatura foram obtidas em quatro diferentes alturas (z) do leito, diferentes valores da concentração molar do reagente e um único valor da razão de aspecto geométrica L_2/L_1 . Os efeitos desses parâmetros são mostrados a seguir. Aqui os resultados foram obtidos quando se adotou valores para o coeficiente de transferência de calor por convecção $h_w = 2,0 \text{ W/m K}$ e infinito.

Os resultados obtidos com este modelo adotaram os seguintes valores de parâmetros: $\rho = 1,09488 \text{ kg/m}^3$, $\varepsilon = 0,4$, $u_z = 0,11417 \text{ m/s}$, $k = 0,1 \text{ W/m K}$, $c_p = 1000 \text{ J/kg K}$, $H = 0,20 \text{ m}$, $L_1 = 0,05 \text{ m}$, $L_2 = 0,10 \text{ m}$, $\Delta H = 25000 \text{ kcal/kmol}$, $E_a = 38000 \text{ kcal/kmol}$, ordem global da reação $m = 1$, e temperaturas do fluido na entrada $T_0 = 100$ e $120 \text{ }^\circ\text{C}$ variando-se a concentração do reagente, C e o fator pré-exponencial de Arrhenius A_0 , de acordo com os valores do trabalho de Pereira et al. (1984).

5.2.4.1 - Efeito do coeficiente de transferência de calor h_w , sobre os perfis de temperatura no reator

A Figura 5.12 mostra os perfis adimensionais de temperatura em estado estacionário no reator, correspondente às alturas do leito $z = 0,00556 \text{ m}$, $z = 0,03889 \text{ m}$, $z = 0,10556 \text{ m}$ e $z = 0,19444 \text{ m}$, para uma temperatura do fluido percolante na entrada do reator $T_0 = 100^\circ\text{C}$, ordem global de reação $m = 1$, coeficiente de transferência de calor h_w infinito e concentração do reagente $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$. É possível observar que o perfil de temperatura varia fortemente nas

três direções no reator (axial, radial e angular), porém os maiores gradientes ocorrem na direção radial.

Aumentando-se a altura do leito, a taxa de transferência de calor também aumenta, fazendo com que as regiões de maiores temperaturas sejam progressivamente substituídas por regiões de menores gradientes térmicos, conforme mostra a Figura 5.12, desde a entrada ($z = 0,00556$ m) até a saída em ($z = 0,19444$ m), mostrando que quando a altura do leito aumenta, a temperatura do reagente tende à temperatura de equilíbrio na superfície do reator. Os maiores gradientes de temperatura acontecem próximos à parede do reator. Os diferentes gradientes de temperatura indicam que o fluxo de calor ocorre (nas direções angular e radial) do centro para a parede do reator (e na direção axial) da entrada para a saída, em acordo com os trabalhos Wash e Froment (1972), Gunn e Khalid (1977) e Dixon (1985).

A Figura 5.13 apresenta os perfis adimensionais de temperatura em estado estacionário, nas posições axiais $z = 0,00556$ m, $z = 0,03889$ m, $z = 0,10556$ m e $z = 0,19444$ m, para uma temperatura do fluido na entrada $T_0 = 100^\circ\text{C}$, ordem global de reação $m = 1$, coeficiente de transferência de calor $h_w = 2,0$ W/m² K e concentração $C = 0,8$ kmol/m³.

Observa-se das Figuras 5.12 e 5.13 que, diminuindo-se o valor do coeficiente de transferência de calor de infinito para $2,0$ W/m² K, mantendo-se constante a razão de aspecto geométrica L_2/L_1 , a ordem de reação m e a temperatura do fluido na entrada do reator T_0 , diminuem-se conseqüentemente as regiões de maiores gradientes térmicos, como pode ser notado pelo surgimento de novas isolinhas de temperatura com valores cada vez maiores, em todas as alturas do reator de leito fixo. A explicação de tal ocorrência reside provavelmente no fato de que para elevados valores do coeficiente de transferência de calor (h_w tendendo para infinito) o mecanismo de transporte de calor convectivo torna-se dominante quando comparado com a taxa de transporte de calor por condução molecular e a taxa de liberação de energia decorrente da reação química, dentro da faixa de condições aqui trabalhadas.

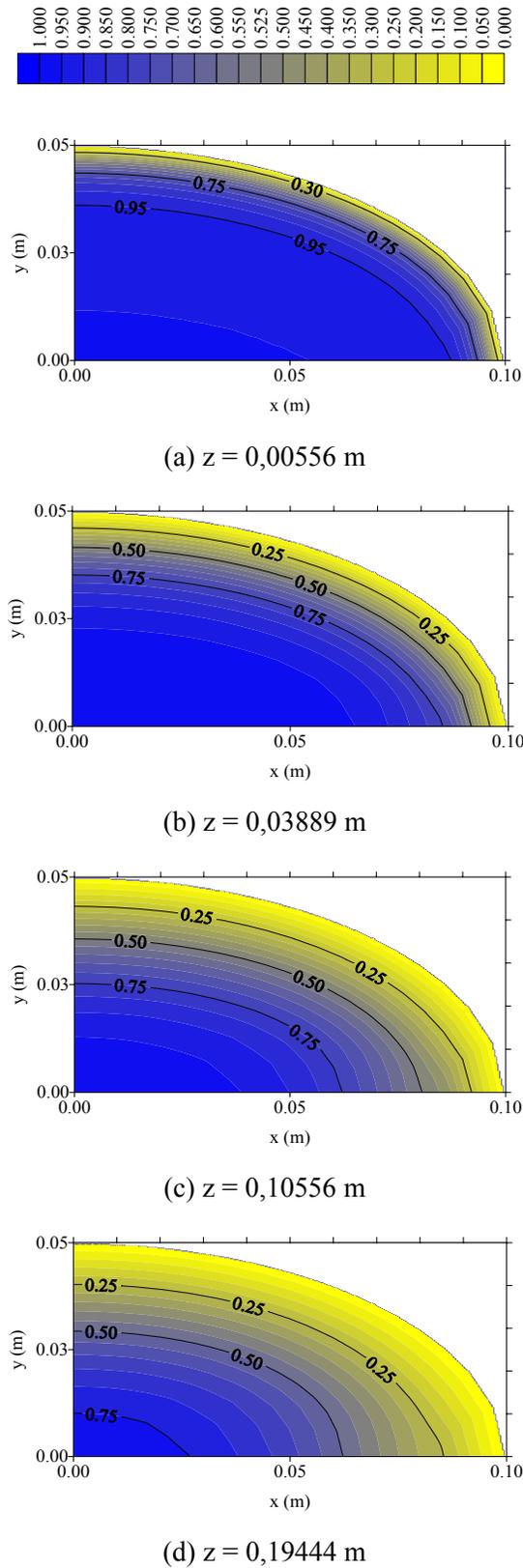


FIGURA 5.12 - Distribuição da temperatura adimensional no reator, quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$; $T_0 = 100^\circ\text{C}$, h_w infinito e $L_2/L_1 = 2$.

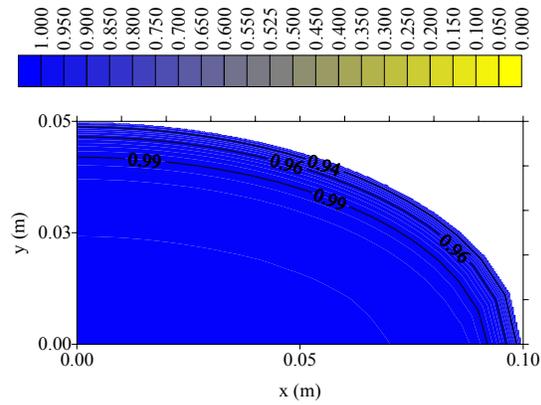
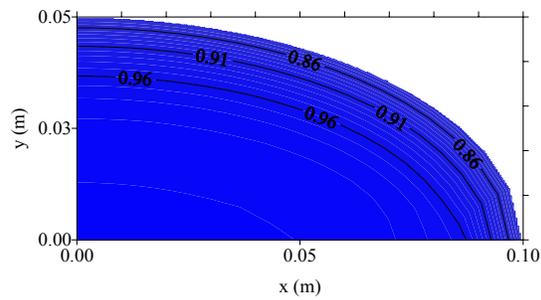
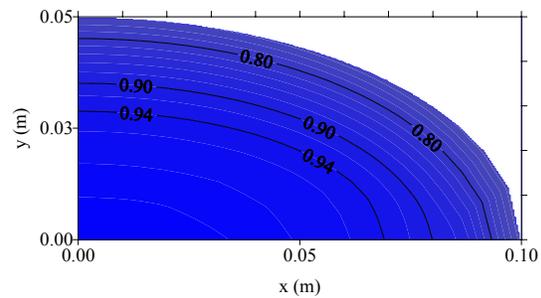
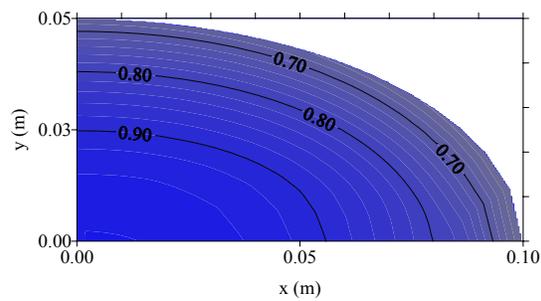
(a) $z = 0,00556$ m(b) $z = 0,03889$ m(c) $z = 0,10556$ m(d) $z = 0,19444$ m

FIGURA 5.13 - Distribuição da temperatura adimensional no reator, quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$, $T_0 = 100^\circ\text{C}$, $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $L_2/L_1 = 2$.

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

Com o objetivo de estudar a influência da geração de energia provocada pelo termo de reação química sobre os perfis adimensionais de temperatura na saída do reator, o modelo apresentado contemplou o termo de reação química, conforme apresentado anteriormente na modelagem. Aqui se adotou diferentes valores para a concentração do reagente e fator pré-exponencial de Arrhenius, para valores do coeficiente de transferência de calor $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e infinito, respectivamente.

As Figuras 5.14 a 5.16 apresentam os perfis adimensionais de temperatura na saída do reator ($z = 0,19444 \text{ m}$) para ordem global de reação $m = 1$, concentrações do reagente iguais a $0,0008$, $0,008$ e $0,8 \text{ kmol/m}^3$, $h_w = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$, $T_0 = 120^\circ\text{C}$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$. A legenda apresentada na Figura 5.14 é válida também para as Figuras 5.15 a 5.19.

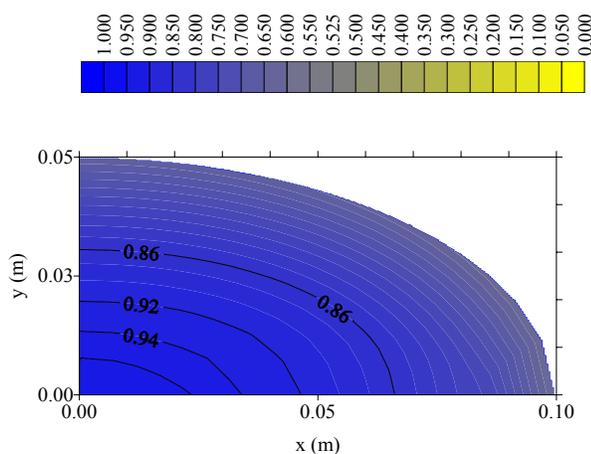


FIGURA 5.14 - Distribuição da temperatura adimensional no reator, quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,0008 \text{ kmol/m}^3$, $z = 0,1944 \text{ m}$, $T_0 = 120^\circ\text{C}$, $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $L_2/L_1 = 2$.

Comparando-se as Figuras 5.14, 5.15 e 5.16, observa-se que nas condições trabalhadas, aumentando-se a concentração do reagente de $0,0008$ para $0,008 \text{ kmol/m}^3$ (um aumento de 10 vezes), a energia proveniente da reação química, não provoca nenhuma modificação perceptível nos perfis adimensionais de temperatura na saída do reator, uma vez que as distribuições de temperatura para concentrações do reagente $0,0008$ e $0,008 \text{ kmol/m}^3$, são exatamente idênticas, ou seja, os resultados obtidos se colocados juntos em um mesmo gráfico, seriam superpostos. Isto

se deve ao fato que, sob as condições estudadas, a energia gerada na reação tem menor importância que os fluxos difusivo e convectivo de calor.

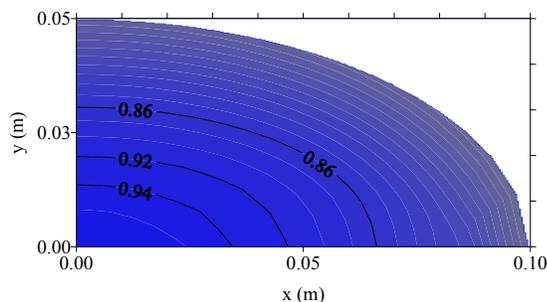


FIGURA 5.15 - Distribuição da temperatura adimensional no reator, quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,008 \text{ kmol/m}^3$, $z = 0,19444 \text{ m}$, $T_0 = 120^\circ\text{C}$, $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $L_2/L_1 = 2,0$.

Quando a concentração aumenta 1000 vezes, (de 0,0008 para 0,8 kmol/m^3) observa-se uma modificação significativa nos perfis de temperatura na saída do reator, uma vez que as isolinhas de maiores temperaturas vão gradativamente sendo deslocadas para posições cada vez mais próximas do centro do reator, conforme pode ser visualizado comparando-se as Figuras 5.14 e 5.16. Sob as condições simuladas, quando se aumenta a concentração molar do reagente por um fator considerável, aumenta-se conseqüentemente o número de moléculas dentro do volume do reator, aumentando-se dessa forma o número e a frequência de colisões efetivas entre as moléculas, proporcionando um considerável aumento na taxa de energia gerada na reação química, favorecendo que ocorra uma maior homogeneidade térmica próxima à saída do reator.

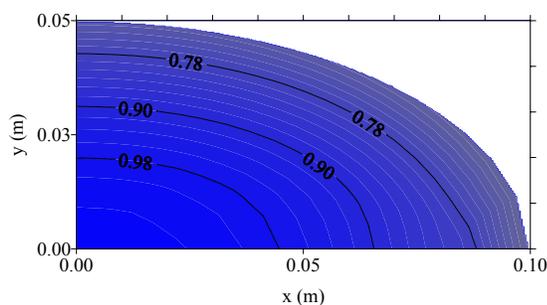


FIGURA 5.16 - Distribuição da temperatura adimensional no reator, quando $m = 1$, $A_0 = 9,4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, $C = 0,8 \text{ kmol/m}^3$, $z = 0,19444 \text{ m}$, $T_0 = 120^\circ\text{C}$, $h_w = 2,0 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $L_2/L_1 = 2$.

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

Um aspecto observado quando se comparam as Figuras 5.13(d) e 5.16, é que nas condições operacionais simuladas, um aumento de 20°C, na temperatura do fluido na entrada do reator, mantendo-se fixos a ordem da reação m , o coeficiente de transferência de calor h_w e a concentração molar do reagente C , numa dada seção do reator, nenhuma modificação apreciável é apresentada sobre perfil adimensional de temperatura.

Percebe-se, observando as figuras que, quando se trabalha com reagentes mais aquecidos na entrada do reator, acontece um deslocamento moderado das regiões de maiores gradientes térmicos do centro do reator em direção à parede, provocado pelo aumento da taxa de transferência de calor gerada por reação química, em consequência da maior energia cinética interna das moléculas.

Nas condições simuladas neste trabalho, fica evidenciado, das figuras, que o uso de temperaturas maiores (no caso, $T_0 = 120^\circ\text{C}$) na entrada do reator, não afeta significativamente os mecanismos de troca térmica nas diversas seções (coordenada axial z) do leito, de maneira que venha a modificar severamente o processo de perda de calor tipo aleta pela parede do reator. Ao contrário, propicia-se que esta troca pela parede seja cada vez mais acentuada, conforme já haviam reportado Dixon (1985) e Cresswell (1986), nos resultados obtidos em seus estudos.

Vale salientar que devido à limitação do Software utilizado (Software Mathematica[®]) para gerar os resultados, não foi possível determinar a distribuição de temperatura ao longo do reator de geometria cilíndrica elíptica, para temperaturas superiores a 120°C. Várias tentativas foram executadas, obtendo-se resultados sem nenhum significado físico, devido à não-convergência do método ou a ocorrência de “overflow” proveniente do algoritmo elaborado, tendo em vista que o termo de geração de energia \dot{q} era calculado ponto a ponto. Para a situação onde se manteve \dot{q} constante, não houve qualquer problema de execução numérica do algoritmo. Neste caso, não foram apresentados quaisquer resultados, tendo em vista que estes não se apresentarem realistas do ponto de vista físico.

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

As Figuras 5.17, 5.18 e 5.19 apresentam a distribuição da temperatura adimensional aproximadamente na metade do reator (posição axial $z = 0,10556$ m), para valores do fator pré-exponencial de Arrhenius A_0 , iguais a $9,4 \times 10^{18}$, $9,4 \times 10^{23}$ e $9,4 \times 10^{25}$ s^{-1} . Observa-se que nas condições de operações estudadas, fixando-se a concentração molar do reagente, o coeficiente de transferência convectiva de calor e a temperatura do fluido reagente na entrada do reator, a parcela de energia proveniente da modificação do valor do fator pré-exponencial, não provoca nenhuma modificação perceptível nos perfis adimensionais de temperatura na metade do reator, uma vez que ocorre uma superposição de resultados obtidos, conforme se observa nas figuras.

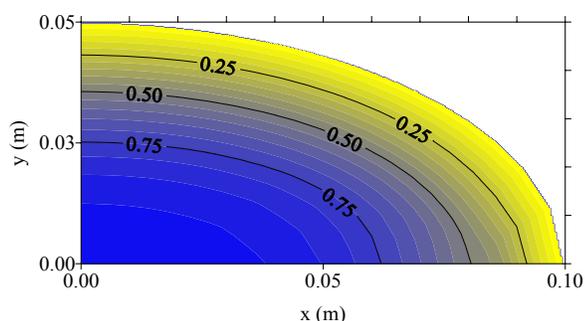


FIGURA 5.17 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 100^\circ\text{C}$, $z = 0,10556$ m, h_w infinito, $C = 0,0008$ kmol/m³, $L_2/L_1 = 2,0$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{18}$ s⁻¹.

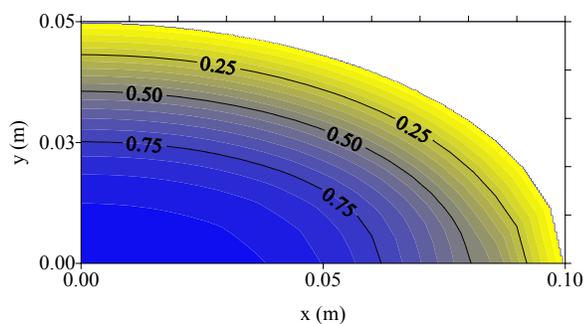


FIGURA 5.18 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 100^\circ\text{C}$, $z = 0,10556$ m, h_w infinito, $C = 0,0008$ kmol/m³, $L_2/L_1 = 2,0$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{23}$ s⁻¹.

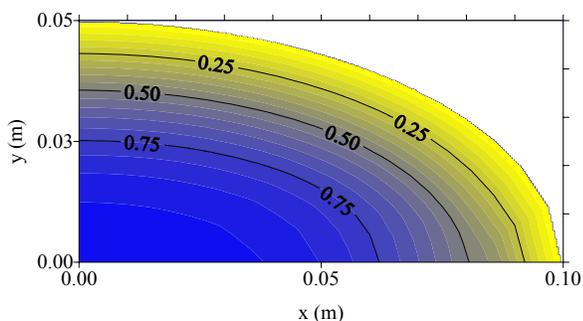


FIGURA 5.19 - Distribuição adimensional de temperatura na saída do reator, para $m = 1$, $T = 100^\circ\text{C}$, $z = 0,10556$ m, h_w infinito, $C = 0,0008$ kmol/m³, $L_2/L_1 = 2,0$ e $A_0 = 9,4 \times 10^{25}$ s⁻¹.

A principal observação de todos os resultados obtidos com o modelo IV e apresentados nos parágrafos anteriores é que de uma maneira geral, nas condições operacionais simuladas, a parcela de energia gerada pela ocorrência de uma reação química apresenta importância secundária frente aos demais termos presentes na equação geral da conservação da energia apresentada no Capítulo 3 deste trabalho, devido à baixa concentração do reagente usada nas simulações. No entanto, vale salientar que teoricamente este termo tem forte influência sobre o comportamento global do reator.

5.2.5 - Dados experimentais de temperatura no reator

5.2.5.1 - Característica dos dados e reprodutibilidade do empacotamento

Os dados de temperatura coletados na célula de medidas (Figura 4.2), exibem variações tanto na direção radial quanto na angular que são nitidamente percebidas quando experimentos replicados são executados. Porém, esta variabilidade é geralmente desconsiderada pela maioria dos modelos de transporte de calor em leito fixo. Com o objetivo de verificar a qualidade dos dados coletados, foram executados 8 réplicas do experimento com um leito de altura $z = 1,0$ cm e número de Reynolds de partícula $Re = 145$. Uma análise de variância nos dados é mostrada na Tabela 5.1. Nesta tabela, são apresentados as medidas de temperatura e seus respectivos desvios, em diferentes posições radiais do leito quando se trabalhou com um leito compactado de 1,0 cm de altura e $Re = 145$. Esta análise foi realizada visando-se obter a estimativa da variância

experimental das medidas de temperatura e análise do grau de reprodutibilidade do empacotamento do leito.

TABELA 5.1 Temperatura em experimentos réplicas, valores médios em cada réplica e entre elas, e seus desvios, para $z = 1,0$ cm e $Re = 145$.

Número da réplica	Temperatura na réplica \pm desvio, ($^{\circ}\text{C}$)			
	$r/R = 0,0$	$r/R = 0,3$	$r/R = 0,6$	$r/R = 0,9$
1	$68,5 \pm 0,8$	$65,4 \pm 1,7$	$59,2 \pm 3,1$	$44,8 \pm 4,5$
2	$67,0 \pm 1,0$	$65,0 \pm 1,2$	$58,2 \pm 3,1$	$43,4 \pm 2,7$
3	$68,5 \pm 0,6$	$66,9 \pm 1,3$	$60,2 \pm 3,5$	$44,6 \pm 3,7$
4	$70,4 \pm 1,0$	$67,0 \pm 0,8$	$60,2 \pm 2,3$	$45,6 \pm 1,8$
5	$71,5 \pm 0,4$	$67,6 \pm 1,5$	$61,0 \pm 2,3$	$47,9 \pm 2,0$
6	$68,9 \pm 0,6$	$68,5 \pm 1,0$	$60,2 \pm 3,1$	$43,8 \pm 3,7$
7	$70,8 \pm 0,4$	$68,0 \pm 1,5$	$60,8 \pm 3,9$	$45,6 \pm 4,3$
8	$68,9 \pm 0,6$	$68,1 \pm 1,3$	$60,9 \pm 3,1$	$45,8 \pm 3,0$
Média e seu desvio	$69,3 \pm 0,7$	$67,1 \pm 1,3$	$60,1 \pm 3,1$	$45,2 \pm 3,2$

Na Tabela 5.1, a temperatura em cada réplica numa dada posição radial, representa a média aritmética das medidas de temperatura realizadas em 12 posições angulares defasadas entre si de 30° , sendo este procedimento adotado, visando “filtrar” os efeitos de variabilidade nos dados, devido a flutuações angulares de porosidade sobre o valor da medida. As variações de porosidade, decorrentes de eventuais diferenças no processo de empacotamento, constituem as maiores fontes de dispersão nos dados (Ziolkowski e Legawiek, 1987). Em anexo se encontram as Tabelas A1 a A50 com todos os dados de temperatura, em graus Celsius, coletados na célula de medidas, para todas as condições experimentais de número de Reynolds (105, 125, 145, 165, 185) e alturas de leito (1,0 cm, 2,0 cm, 3,0 cm, 4,0 cm, 5,0 cm, 6,0 cm, 7,0 cm, 8,0 cm, 9,0 cm, 10,0 cm) trabalhadas.

Observa-se da Tabela 5.1, que em todas as réplicas o desvio em relação à média de temperatura vai aumentando com a posição radial em direção à parede, comportamento este

atribuído às possíveis oscilações da porosidade nesta mesma direção, podendo provocar uma distribuição desigual de fluido e conseqüentemente uma dispersão mais acentuada nos dados de temperatura (Lerou e Froment, 1977; Zotin, 1985; Mc Greavy et al., 1986), visto que nesta região do leito, os caminhos preferenciais de fluido são predominantes, em razão da baixa resistência ao escoamento. Portanto, essa maior variabilidade nas medidas de temperatura na região próxima à parede se traduz em graves conseqüências aos valores estimados dos parâmetros (Freiwald e Paterson, 1992).

Verifica-se da Tabela 5.1, que em cada réplica, os desvios em relação à média de temperatura numa dada posição radial, (exceto no centro do leito) mantêm a mesma ordem do desvio observado entre as réplicas, evidenciando claramente que o experimento pode ser considerado reprodutível, pois a variabilidade dos dados verificada angularmente é sempre mantida num mesmo nível de magnitude. Uma vez que o termopar localizado no centro do leito não sofre mudança na sua posição angular, o desvio de cada réplica representa as flutuações nos valores das variáveis de entrada, incorporando dessa forma a dispersão dos diferentes empacotamentos.

Thoméo (1990), trabalhando sob diferentes condições operacionais, realizou estudo semelhante em seus dados e chegou a conclusões semelhantes, todavia alertava que experimentos futuros evitassem o uso de leitos de baixas alturas e alturas sucessivas próximas, para que os gradientes de temperaturas medidos fossem elevados, mesmo sabendo que dessa maneira, se perderia informação sobre os efeitos de entrada.

A Figura 5.20 apresenta uma análise de resíduos da média de temperatura entre réplicas e a posição radial adimensional, para número de Reynolds $Re = 145$ e altura de leito $z = 1,0$ cm. Observa-se uma distribuição de resíduos aleatória, independente e identicamente distribuída; justificando estatisticamente o uso do método dos mínimos quadrados ordinários para estimativa de parâmetros de qualquer modelo matemático. A realização de réplicas mesmo representando um esforço experimental adicional, torna possível uma análise estatística refinada da variância dos dados e estimativa do erro puro associado às medidas. Sua importância está no teste da adequabilidade estatística do modelo, assim como refletir o comportamento dos resultados de

temperatura obtidos nas demais condições experimentais. O procedimento descrito acima foi aplicado às demais alturas do reator em toda faixa de números de Reynolds trabalhadas neste estudo. Observa-se claramente na Figura 5.20, que a distribuição dos resíduos de temperatura apresenta um comportamento nítido de uma curva de Gauss em relação ao eixo y .

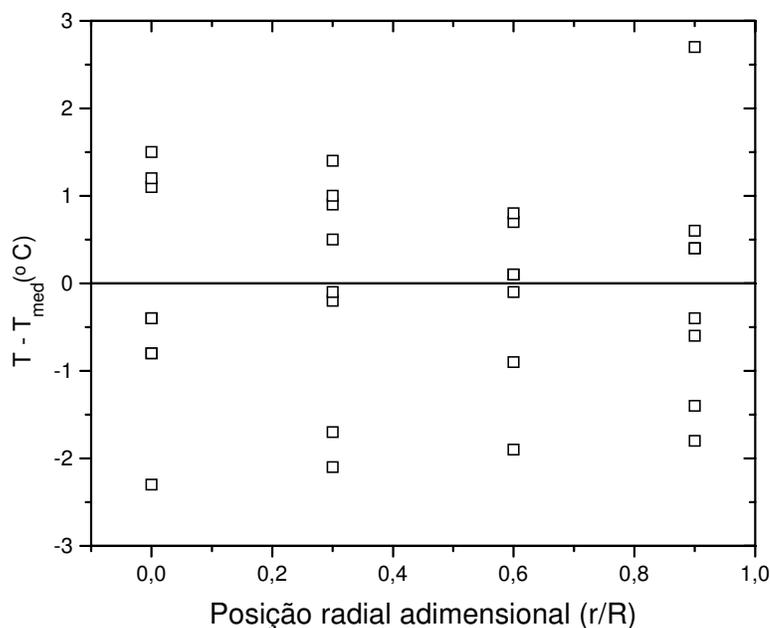


FIGURA 5.20 - Distribuição de resíduos de temperatura em função da posição radial, representação do valor médio de cada réplica e o valor médio entre as réplicas.

5.2.5.2 - Estimação não-linear de parâmetros

A Figura 5.21 apresenta uma comparação entre as medidas de temperaturas radiais, e o ajuste da Equação 4.1 a esses dados experimentais em várias posições axiais no reator de leito fixo, para o número de Reynolds de partícula igual a 105. Pode-se observar na figura que em todas as alturas de leito, os perfis radiais de temperatura medidos apresentam um comportamento essencialmente parabólico estando, portanto de pleno acordo com a equação proposta e com a literatura (Thoméo, 1990 e Borkink e Westerterp, 1992a).

Para posições axiais situadas próximas da entrada (baixas alturas de leito), nota-se a ocorrência dos maiores gradientes radiais de temperatura, que vão sendo gradualmente diminuídos à medida que se trabalha com leitos mais profundos, fato este atribuído provavelmente ao amortecimento do perfil axial de porosidade, com o aumento da altura do leito (Zotin, 1985).

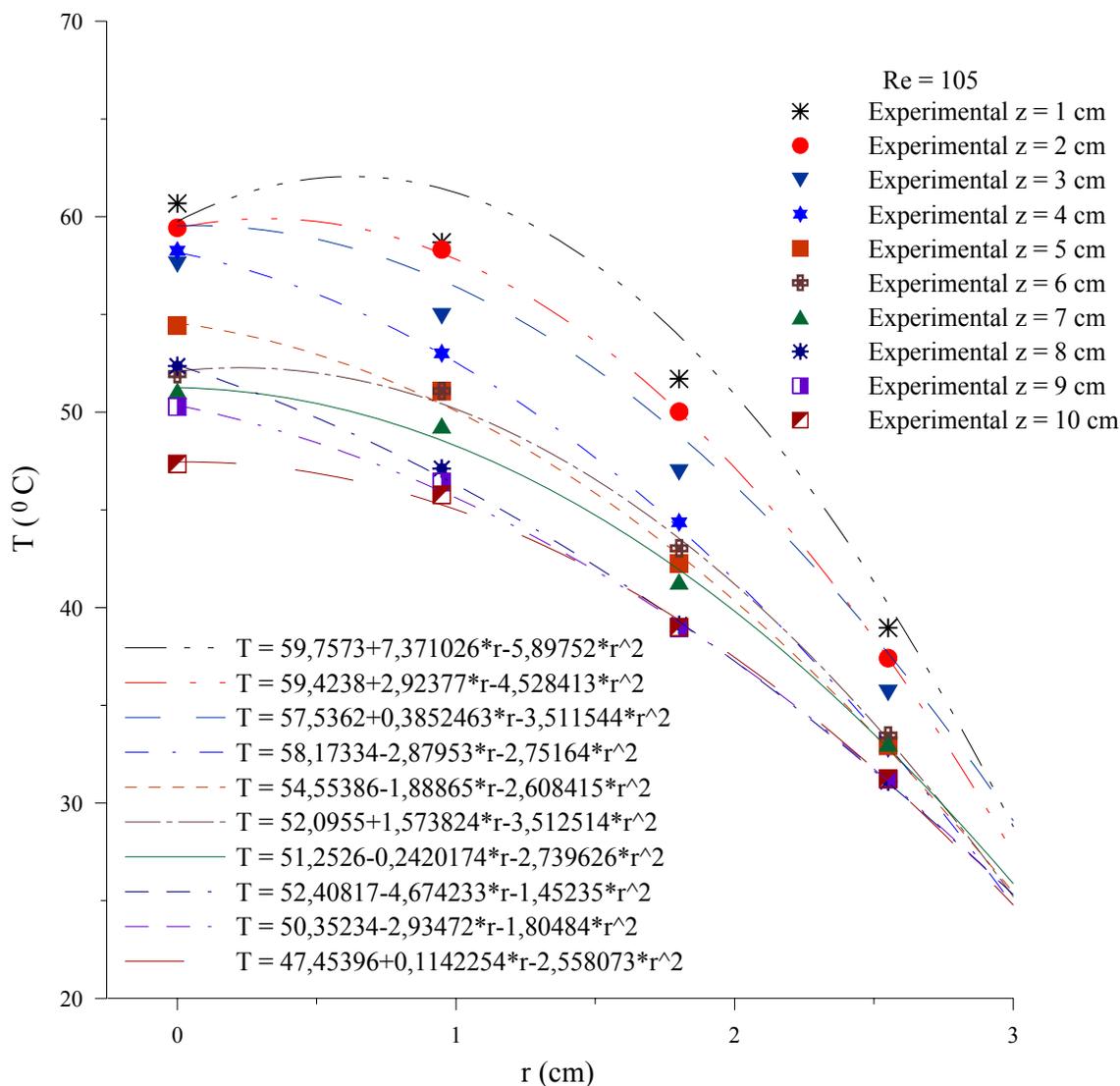


FIGURA 5.21 - Perfis radiais de temperatura em várias alturas de leito, para $Re = 105$.

Observa-se ainda da Figura 5.21 que os gradientes de temperatura são fortemente dependentes de ambas as posições axial e radial, todavia os gradientes mais elevados estão

concentrados na posição radial, associado talvez as maiores flutuações que sofre o perfil de porosidade nessa mesma direção. À medida que se afasta da região de entrada do reator, é nítida a tendência do perfil de temperatura na posição axial tornar-se cada vez menos pronunciado, chegando a existir uma superposição dos perfis para posições radiais mais próximas à parede do reator e posições axiais mais próximas à saída do reator. Esta constatação segundo Dixon (1985), pode estar relacionada de certa forma ao fato de que em maiores alturas (leitos mais profundos) a fuga de calor por condução (tipo aleta) pela parede do reator é menos intensa do que próximo à região de entrada, onde prevalecem os maiores gradientes de temperatura, em qualquer posição radial. A Tabela 5.2 apresenta os valores das constantes da Equação 4.1 e os respectivos valores do coeficiente de correlação, obtidos a partir do ajuste aos dados experimentais, para cada posição longitudinal do reator.

TABELA 5.2 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 105$.

z (cm)	Parâmetros da Equação 4.1			R^2
	b_5	b_6	b_7	
1,0	59,75730	7,371026	-5,89752	0,96469
2,0	59,42379	2,923773	-4,52841	1,0000
3,0	57,53622	0,385246	-3,51154	0,99998
4,0	58,17334	-2,87953	-2,75164	0,99975
5,0	54,55386	-1,88865	-2,60842	0,99932
6,0	52,09551	1,573824	-3,51251	0,99883
7,0	51,25258	-0,24202	-2,73963	0,99821
8,0	52,40818	-4,67423	-1,45535	0,99989
9,0	50,35234	-2,93472	-1,80484	0,99970
10,0	47,45396	0,114225	-2,55807	0,99918

Outra característica extremamente perceptível, de acordo com a Figura 5.21 e Tabela 5.2 é que o ajuste aos dados de um modelo parabólico, só não pode ser considerado de excelente qualidade na região próxima à entrada do leito ($z = 1,0$ cm), visto que o coeficiente de correlação para essa altura de leito foi de 0,96469. Para as demais alturas o ajuste pode ser considerado de

excelente qualidade, uma vez que os respectivos valores dos coeficientes de correlação estão situados no intervalo entre 0,99821 e 1,0000. A mesma tendência nos resultados da Tabela 5.2 aconteceu nos resultados apresentados nas Tabelas 5.3 a 5.6, para as demais velocidades mássicas de fluido, ou seja, para os demais números de Reynolds de partículas (125, 145, 165 e 185).

A Figura 5.22 apresenta uma comparação entre os dados experimentais de temperaturas radiais, e os resultados do ajuste da Equação 4.1 a estes dados para um de leito fixo de altura $z = 5$ cm, quando se variou o número de Reynolds de partícula, visando avaliar a influência da vazão mássica superficial sobre os perfis radiais de temperatura no interior do reator.

TABELA 5.3 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 125$.

z (cm)	Parâmetros da Equação 4.1			R^2
	b_5	b_6	b_7	
1,0	63,40005	1,896105	-4,06122	0,99929
2,0	60,05149	4,286083	-4,94232	0,99986
3,0	60,28157	0,663431	-3,53186	0,99973
4,0	59,29901	-1,71135	-3,12400	1,00000
5,0	57,98843	-2,35621	-2,58558	0,99952
6,0	54,36005	-0,82829	-2,63807	0,99998
7,0	53,76501	-0,835503	-2,69022	0,99854
8,0	54,13943	-3,52916	-2,03184	0,99979
9,0	53,69764	-339491	-1,72165	0,99999
10,0	49,32991	0,067353	-2,66275	0,99966

Observa-se da Figura 5.22 que o ajuste parabólico apresenta uma excelente concordância com os dados experimentais, para todos os números de Reynolds empregados. Percebe-se que, o aumento da vazão mássica superficial provoca uma maior taxa de transporte de calor na direção radial, visto que numa mesma posição axial, os gradientes de temperatura em duas posições radiais distintas são sempre maiores entre números de Reynolds consecutivos. Este fenômeno está provavelmente relacionado ao fato de que quando se aumenta a vazão mássica superficial, mantendo-se fixas as demais condições de operação, a taxa de transporte de calor por convecção

se torna mais importante que o transporte de calor por condução (Silveira, 1991; Oliveira et al., 2003).

A elevada modificação da temperatura no sentido radial com a velocidade mássica evidencia que, para um reator de leito compactado gás-sólido, a condutividade térmica efetiva desempenha mais o papel de um coeficiente de transferência de calor do que uma verdadeira condutividade térmica de cada fase isoladamente, gás ou sólido conforme afirmativa de Bunnell et al. (1949). A Tabela 5.7 apresenta os valores médios da temperatura radial, obtidos a partir da integração numérica da Equação 4.1, para cada posição axial z , em diversos números de Reynolds de partícula Re , conforme descrito na Equação 4.2.

TABELA 5.4 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 145$.

z (cm)	Parâmetros da Equação 4.1			R^2
	b_5	b_6	b_7	
1,0	62,20249	2,143428	-3,89133	0,99862
2,0	61,04795	4,253602	-4,82178	0,99954
3,0	61,03314	-0,226985	-3,14440	0,99985
4,0	60,29648	-2,13426	-2,88149	0,99996
5,0	59,23230	-1,32013	-2,96246	1,00000
6,0	55,24756	-0,314894	-2,87071	0,99999
7,0	55,02303	-1,71887	-2,38622	0,99860
8,0	55,79105	-3,49856	-1,97015	0,99996
9,0	54,65366	-2,11782	-2,17479	0,99999
10,0	50,86168	0,847900	-2,92687	0,99953

Os resultados apresentados na Tabela 5.1 e nas Figuras 5.21 e 5.22, revelaram a importância da medida exata dos dados e da realização de experimentos replicados, para se filtrar as possíveis flutuações angulares e radiais de temperatura, mesmo em leitos composto de uma seção calma (seção de entrada) para o desenvolvimento do perfil de velocidades. Os

experimentos replicados serviram para demonstrar que a reprodutibilidade do empacotamento do leito foi alcançada.

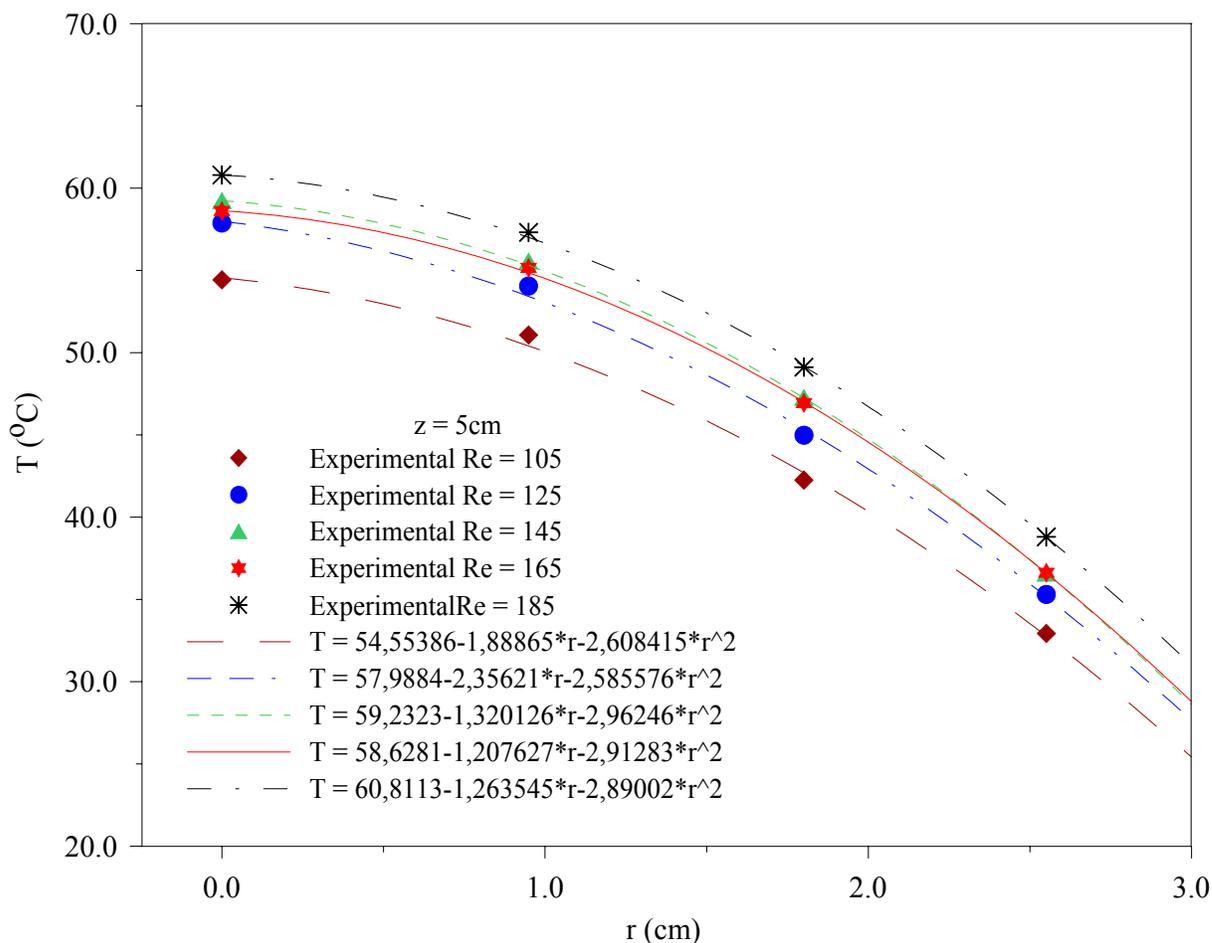


FIGURA 5.22 - Perfis radiais de temperatura no reator em vários números de Reynolds de partícula, para a altura de leito compactado de $z = 5$ cm.

No que diz respeito aos gradientes de temperatura, talvez a observação mais importante que se pode tirar dos dados coletados é que ocorrem elevados gradientes radiais de temperatura numa mesma posição axial, para qualquer número de Reynolds de partícula, mostrando que a mistura completa do gás no leito compactado não é alcançada. Isto sugere que os fluxos de gás através dos espaços vazios no leito ocorrem na forma de canais preferenciais ou de feixes e que um dado feixe não interage com os adjacentes.

TABELA 5.5 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 165$.

z (cm)	Parâmetros da Equação 4.1			R^2
	b_5	b_6	b_7	
1,0	62,67605	2,4683330	-3,94346	0,99765
2,0	59,73706	4,2554541	-4,58460	0,99986
3,0	61,41090	0,200959	-3,34979	0,99984
4,0	60,10255	-1,61366	-3,03400	0,99949
5,0	58,62810	-1,20763	-2,91283	0,99999
6,0	58,01518	-0,578331	-3,08009	0,99975
7,0	56,88304	-1,94759	-2,38213	0,99924
8,0	56,89777	-2,98302	-2,18183	0,99997
9,0	56,35894	-2,61118	-2,12615	0,99940
10,0	52,46528	1,614552	-3,33887	0,99964

TABELA 5.6 - Ajuste não-linear da Equação 4.1 aos dados experimentais, para $Re = 185$.

z (cm)	Parâmetros da Equação 4.1			R^2
	b_5	b_6	b_7	
1,0	63,47240	3,121131	-3,91886	0,99737
2,0	61,69894	3,719661	-4,48472	0,99968
3,0	60,72852	1,384344	-3,59621	0,99885
4,0	60,44425	-0,351988	-3,31050	0,99901
5,0	60,81133	-1,26355	-2,899002	0,99999
6,0	59,24934	0,212083	-3,55234	0,99994
7,0	57,59580	-1,56638	-2,56334	0,99979
8,0	57,67223	-2,25730	-2,30247	0,99991
9,0	56,83181	-2,54560	-2,19389	0,99975
10,0	53,79283	0,779886	-3,03434	0,99982

TABELA 5.7 - Valores médios da temperatura radial ao longo da altura do leito.

z (cm)	$\bar{T}_r(r)$, (°C)				
	$Re_p = 105$	$Re_p = 125$	$Re_p = 145$	$Re_p = 165$	$Re_p = 185$
0,0	70,0000	70,0000	70,0000	70,0000	70,0000
1,0	49,8109	50,5090	50,4713	51,3505	53,4871
2,0	46,5880	48,1231	49,5473	49,2039	50,5527
3,0	44,0069	47,1931	47,8081	48,1884	48,7537
4,0	41,5271	43,2461	44,5389	44,7148	46,3307
5,0	40,3720	43,0109	44,6928	44,5039	46,6735
6,0	40,8206	42,0724	42,9906	44,4073	45,2254
7,0	39,6664	41,2519	42,0661	43,5082	44,2093
8,0	37,6166	39,1822	41,1426	42,3691	44,0325
9,0	37,4465	40,2553	41,7974	42,7629	43,0852
10,0	37,2820	38,6438	40,5859	35,8376	42,9514

Com o objetivo de correlacionar a temperatura média radial com a posição axial z, os dados da Tabela 5.7 em diferentes números de Reynolds, foram ajustados com a Equação 4.3 e seus parâmetros obtidos, visando posteriormente determinar os valores dos coeficientes de transporte de calor, com os modelos apresentados no Capítulo 3. A Tabela 5.8 apresenta os valores dos parâmetros da Equação 4.3, assim como os respectivos coeficientes de correlação.

TABELA 5.8 - Parâmetros da Equação 4.3, ajustada aos dados das Tabelas 5.2 a 5.6.

Re_p	Parâmetros da Equação 4.3						
	b_8	b_9	b_{10}	b_{11}	b_{12}	b_{13}	R^2
105	43,06921	-1,52293	12,50598	-51,02519	14,42479	-2161,25011	0,99853
125	111,59468	-2,63429	20,32948	-215,49357	-61,93727	-2,63429	0,99544
145	16,96975	-81390,47141	51,10693	-4,93277	1,92332	16,18995	0,99780
165	20,09896	-200,76272	49,88191	-1,93818	0,00000	410,98548	0,99619
185	253,66539	-157,32931	-234,46281	-157,32931	50,760699	-1,802583	0,99784

As Figuras 5.23 a 5.27 apresentam as curvas representativas do ajuste da temperatura média radial em função da altura do leito, em diferentes números de Reynolds de partícula. É claramente evidente da Tabela 5.8 e das Figuras 5.23 a 5.27, que a qualidade do ajuste entre os dados experimentais e os valores preditos pela Equação 4.3, em todas as condições experimentais é excelente, uma vez que os valores do coeficiente de correlação são todos muito próximos da unidade.

Dessa forma, fica caracterizado que se pode, portanto dentro das condições estudadas, estimar os parâmetros térmicos dos modelos numéricos apresentados no Capítulo 3, usando para representar os pontos experimentais a Equação 4.3, ao invés de usar os próprios dados experimentais (que são poucos e representam apenas quatro posições radiais no reator) e não permitem se ter uma confiável significância estatística quando da estimativa dos parâmetros condutividade térmica e coeficiente convectivo de transferência de calor.

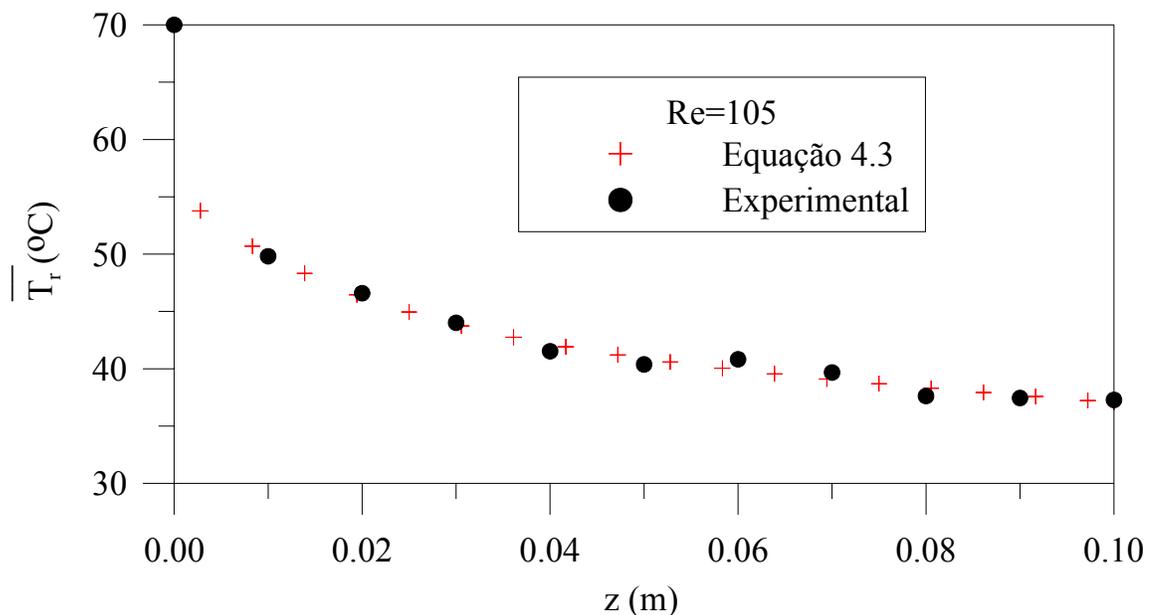


FIGURA 5.23 - Comparação entre a temperatura radial média ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação 4.3, para $Re = 105$.

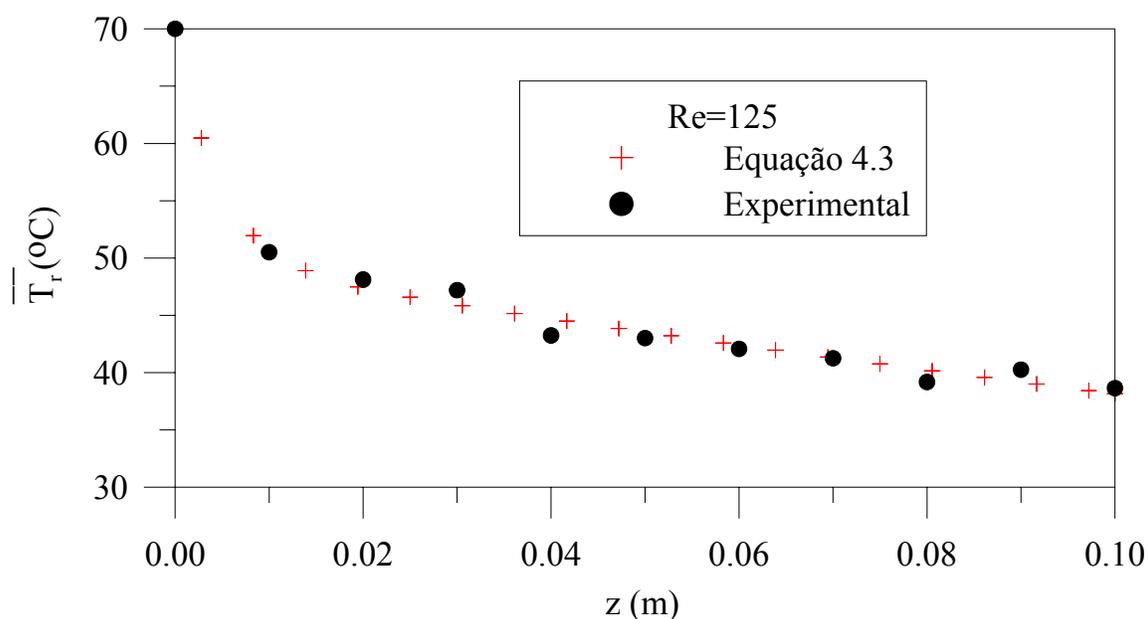


FIGURA 5.24 - Comparação entre a temperatura radial média ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação 4.3, para $Re = 125$.

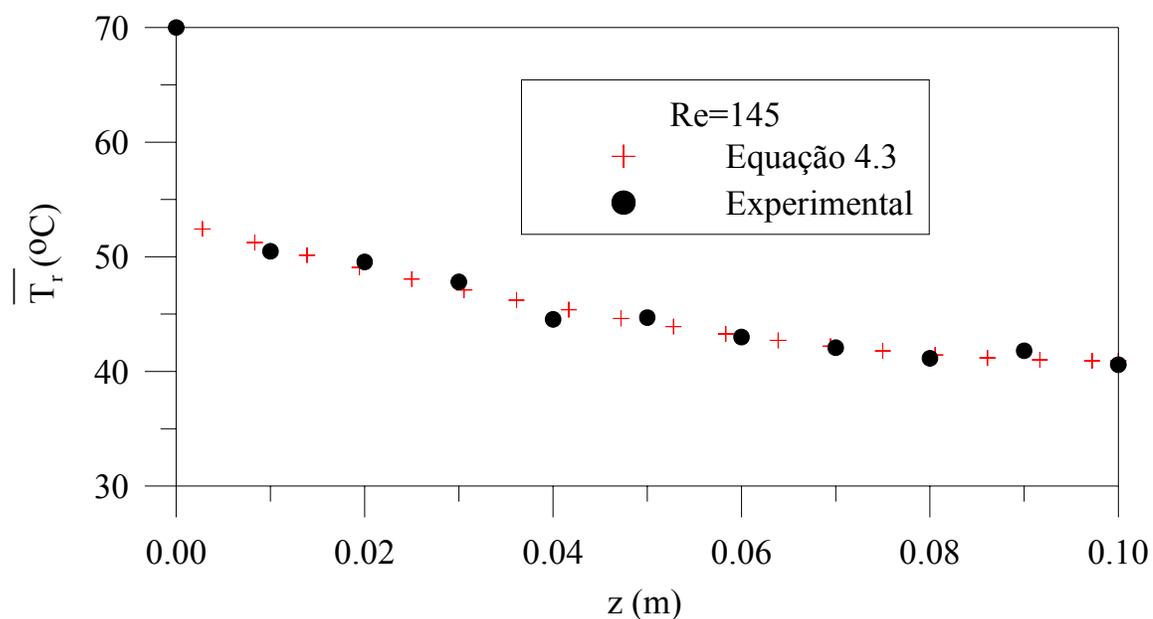


FIGURA 5.25 - Comparação entre a temperatura radial média ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação 4.3, para $Re = 145$.

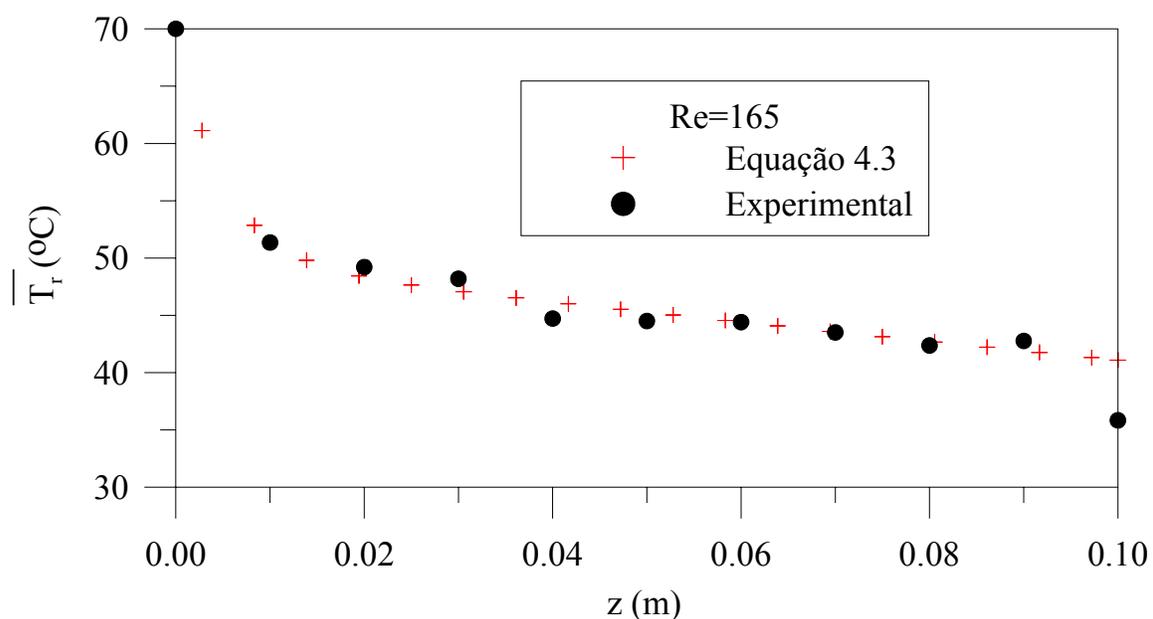


FIGURA 5.26 - Comparação entre a temperatura radial média ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação 4.3, para $Re = 165$.

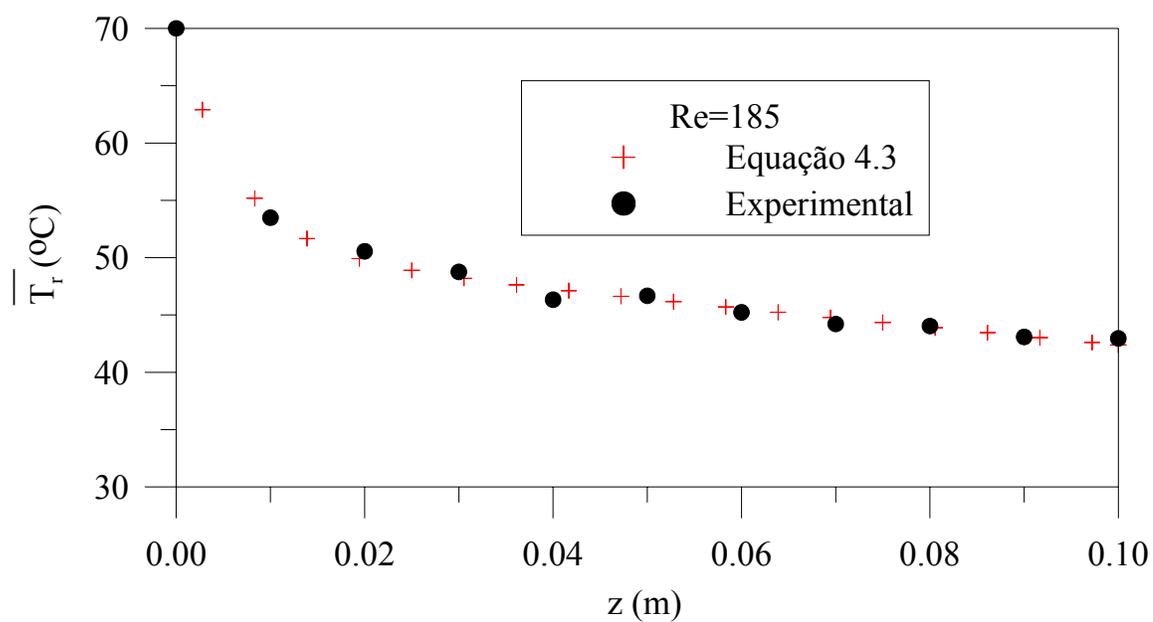


FIGURA 5.27 - Comparação entre a temperatura radial média ao longo da posição axial z , (●) experimental e (+) predito pela Equação 4.3, para $Re = 185$.

5.2.5.3 - Aplicação dos modelos numéricos

- **Modelo I**

As Figuras 5.28 a 5.32 apresentam os resultados da comparação entre os valores das temperaturas adimensionais experimentais e previstas pelo modelo I, para todas as condições de números de Reynolds de partícula, conforme valores mostrados na Tabela 5.7. Neste modelo, considera-se os seguintes valores para as propriedades físicas do fluido, $\rho = 1,09488 \text{ kg/m}^3$, $c_p = 1000,35 \text{ J/kg K}$, $\mu = 2,029 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$. Para o leito, considerou-se a fração de vazios $\varepsilon = 0,40$.

Analisando as figuras observa-se que para todas as condições experimentais estudadas, trabalhando-se com recheio de partículas até em alturas próximas à metade do comprimento total do reator, a curva de temperatura adimensional prevista pelo modelo I apresenta sempre um decréscimo exponencial inferior àquele referente aos dados experimentais, quando a partir de então um comportamento inverso começa a ocorrer, e que se mantém para as demais alturas até atingir a saída do reator.

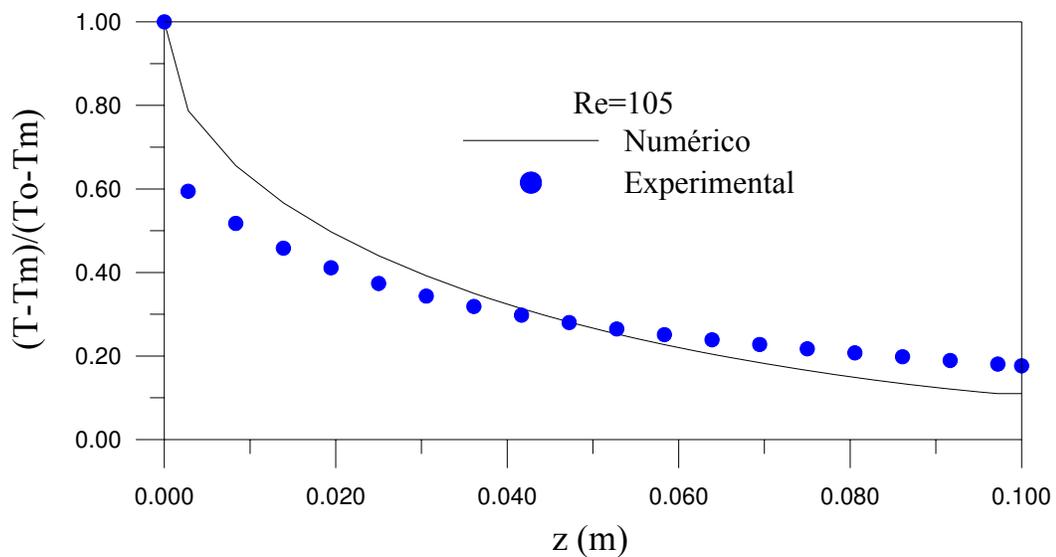


FIGURA 5.28 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 105$) em função da altura do reator.

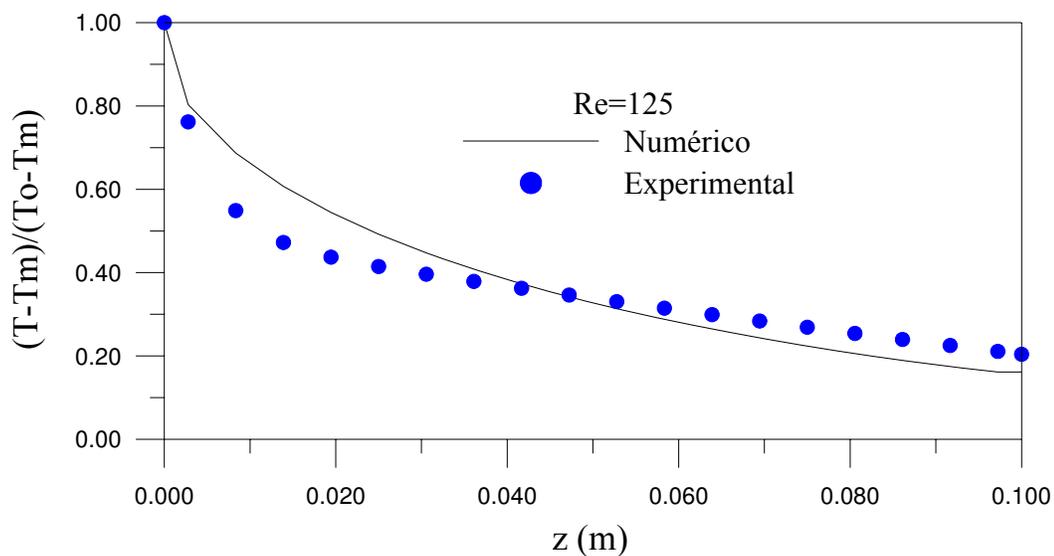


FIGURA 5.29 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 125$) em função da altura do reator.

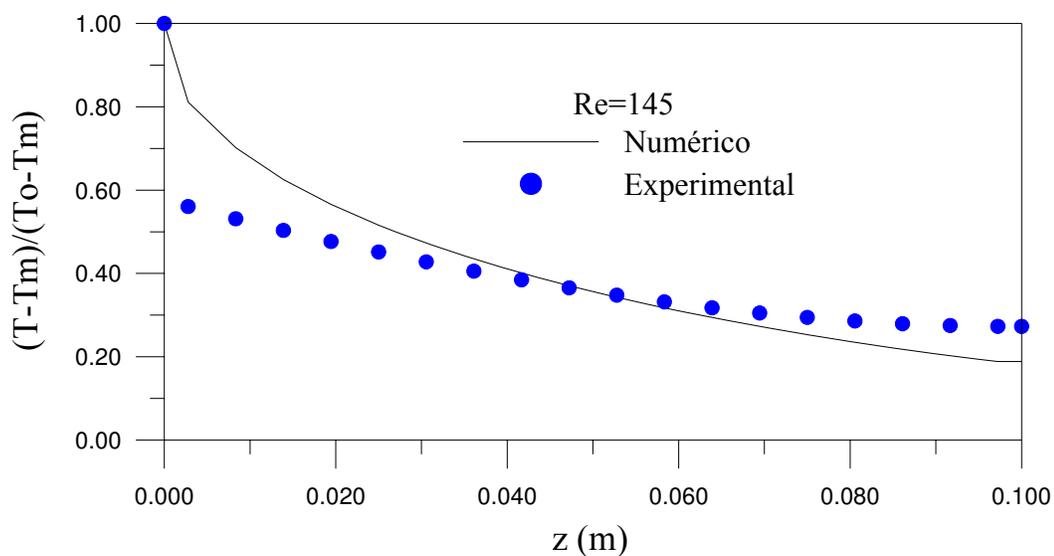


FIGURA 5.30 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 145$) em função da altura do reator.

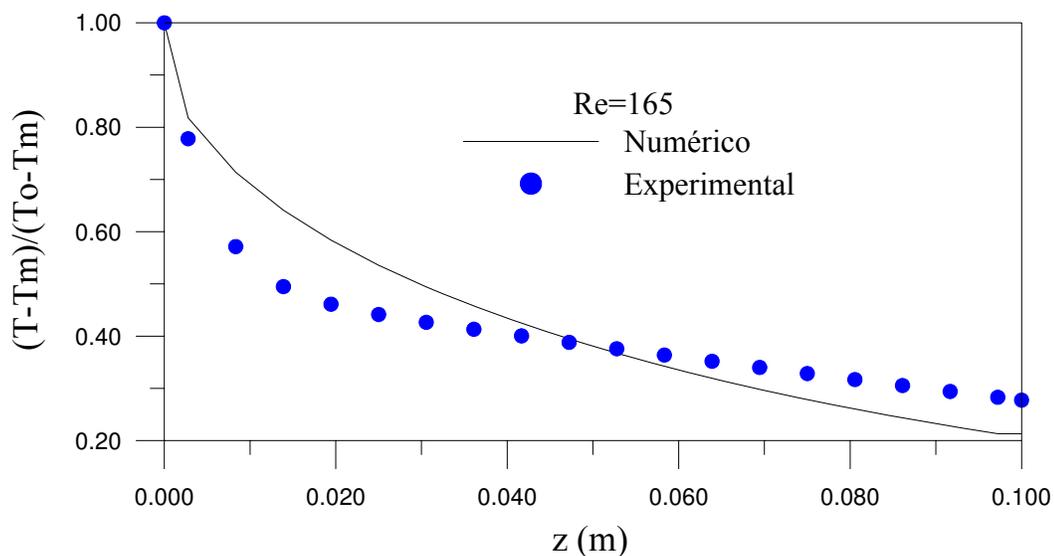


FIGURA 5.31 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 165$) em função da altura do reator.

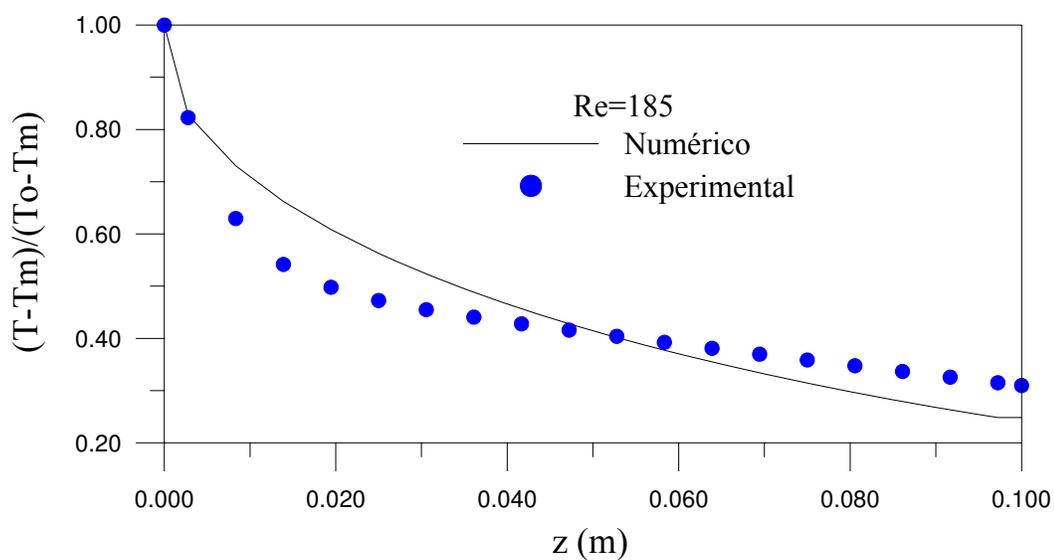


FIGURA 5.32 - Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ($Re = 185$) em função da altura do reator.

De uma maneira geral, estes resultados já eram esperados, visto que nesta forma de modelagem adotaram-se coeficientes de transporte de calor constantes e condição de contorno de equilíbrio térmico na parede do leito. Além disso, para leitos de pequena altura, o efeito térmico de entrada torna-se mais evidente ocorrendo fuga mais acentuada de calor pela parede do reator, da seção térmica para a seção de entrada, conforme atestado por Dixon (1985) e Thoméo (1990), fenômeno que vai sendo gradativamente equacionado à medida que se trabalha com leitos de alturas maiores.

Uma constatação óbvia observando-se as Figuras 5.28 a 5.32 é que, sem sombra de dúvidas, a qualidade do ajuste fornecida pelo modelo I é razoável, uma vez que em todas as situações, ocorre uma considerável dispersão entre os dados experimentais e a curva predita. Esta constatação só vem confirmar que o fenômeno real da perda de calor pela parede, descrito por Dixon (1985), presente no dado experimental e não contemplado na modelagem interfere na estimativa dos parâmetros do modelo e na qualidade do ajuste.

- **Modelo II**

Visando contornar o problema da fuga de calor pela parede do reator, consequência da não inclusão de um coeficiente de transporte de calor parede-leito, o modelo II assume uma condição de contorno convectiva na parede do leito e propriedades termofísicas do fluido constantes. No entanto, os perfis de temperatura preditos com este modelo foram exatamente idênticos aos obtidos com o modelo I, produzindo estimativas de parâmetros com valores extremamente próximos aos do modelo anterior, e com o fator agravante de produzir maiores valores para os erros na estimativa não-linear dos coeficientes de transporte de calor. Para não ser redundante, as figuras que representam a comparação entre os perfis de temperatura adimensionais experimentais e preditos pelo modelo II foram, portanto omitidas. Neste modelo, considerou-se para as propriedades físicas do fluido, $\rho = 1,09488 \text{ kg/m}^3$, $c_p = 1000,35 \text{ J/kg K}$, $\mu = 2,029 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$. Para o leito, considerou-se a fração de vazios $\varepsilon = 0,40$.

- **Modelo III**

Com a finalidade de melhorar a qualidade do ajuste e obter valores mais confiáveis para os coeficientes de transporte de calor no leito, usou-se o modelo III que considera uma condição de contorno convectiva nas paredes interna e externa do leito e propriedades termofísicas do fluido variáveis com a temperatura. Apesar de este modelo ser mais realista do ponto de vista fenomenológico, os resultados obtidos com o uso deste modelo foram muito similares àqueles fornecidos com os modelos I e II. Novamente, para evitar redundância, os resultados obtidos do ajuste deste modelo aos resultados experimentais são omitidos.

5.2.5.5 - Estimativa dos coeficientes de transporte de calor

Os coeficientes de transporte de calor em todos os modelos numéricos apresentados no Capítulo 3 (exceto o modelo IV) foram estimados através de uma função objetivo previamente definida. Neste trabalho, a função objetivo adotada na estimativa de parâmetros foi a minimização do quadrado dos resíduos entre os valores experimentais coletados na célula de medidas (Figura 4.2) e os valores preditos pelos modelos.

A Tabela 5.9 mostra os valores dos parâmetros de transporte de calor do leito, condutividade térmica k e coeficiente de transporte convectivo de calor h_w , assim como o erro produzido no ajuste em função do número de Reynolds para os modelos I, II e III.

Pode ser verificado pelos valores contidos na Tabela 5.9 que em todos os casos estudados, o modelo I apresenta sempre melhores estimativas dos parâmetros térmicos do leito, uma vez que para todos os números de Reynolds de partícula estudados, o erro decorrente da estimativa segundo este modelo é sempre inferior aos dos modelos II e III.

De acordo com os valores apresentados na Tabela 5.9, a condutividade térmica do leito k , pode ser considerada essencialmente independente do número de Reynolds, visto que a sua estimativa apresenta valores sempre próximos de 1,90 W/m K, em todos os modelos utilizados no ajuste. Estes resultados a princípio contrariam os resultados apresentados na Tabela 5.10 e

reportados na literatura (Wash e Froment, 1972, Stanek e Vychodil, 1984; Dixon, 1985; Thoméo, 1990; Silveira 1991) que afirmam que os parâmetros térmicos de um leito fixo aumentam linearmente com o número de Reynolds para leitos longos. No entanto, para leitos curtos (Li e Finlayson, 1977; Thoméo, 1990; Silveira, 1991; Ferreira et al., 2002) os parâmetros de transporte de calor k_r e h_w não obedecem a uma relação linear bem definida.

TABELA 5.9 - Coeficientes de transporte estimados pelos modelos numéricos e variância.

Modelo	Experimento	k do leito (W/m K)	h_w (W/m ² K)	ERRO
I	1 – Re = 105	2,02000	-	0,1082180
	2 – Re = 125	1,86000	-	0,0761913
	3 – Re = 145	1,91000	-	0,1446440
	4 – Re = 165	1,96000	-	0,0967854
	5 – Re = 185	1,90000	-	0,0716479
II	1 – Re = 105	2,02000	8000	0,1215790
	2 – Re = 125	1,86000	8000	0,0861641
	3 – Re = 145	1,91000	8000	0,1601610
	4 – Re = 165	1,96000	9000	0,1075140
	5 – Re = 185	1,90000	8000	0,0814863
III	1 – Re = 105	1,46150	$1,0 \times 10^{30}$	0,096005
	2 – Re = 125	1,72033	$1,0 \times 10^{30}$	0,080866
	2 – Re = 125	1,99956	$1,0 \times 10^{30}$	0,100797
	3 – Re = 145	1,77024	$1,0 \times 10^{30}$	0,148605
	3 – Re = 145	2,04967	$1,0 \times 10^{30}$	0,169796
	4 – Re = 165	2,09975	$1,0 \times 10^{30}$	0,126103
	4 – Re = 165	1,82018	$1,0 \times 10^{30}$	0,10452
	5 – Re = 185	2,03983	$1,0 \times 10^{30}$	0,107648
	5 – Re = 185	1,76011	$1,0 \times 10^{30}$	0,083232

Desde que as condutividades térmicas da partícula de óxido de zinco $k_s = 5,69$ W/m K (He et al., 2003) e do ar $k_f = 0,02798$ W/m K (Holman, 1983) foram obtidas pela temperatura média entre os valores das temperaturas do fluido na entrada e saída do reator, pode-se dizer que

os resultados obtidos pelos modelos, levando-se em consideração a complexidade dos fenômenos envolvidos no meio poroso, são razoáveis.

O próprio Thoméo (1990) e Silveira (1991) já chamavam a atenção para o fato de que a metodologia empregada na estimativa de parâmetros pode traduzir graves reflexos sobre os valores dos coeficientes de transporte e dos seus intervalos de confiança. Segundo estes autores se as estimativas forem realizadas altura por altura isoladamente, o parâmetro inicia com altos valores na entrada do leito decrescendo à medida que a altura do leito aumenta até o parâmetro atingir o seu valor assintótico. Porém, se o parâmetro for estimado em todas as alturas simultaneamente, o mesmo tenderá a atingir o valor assintótico.

Silveira (1991), trabalhando numa célula de medidas semelhante àquela usada neste trabalho, com o mesmo fluido percolante, condições experimentais próximas e usando a técnica de estimativa proposta por Kwong e Smith (1957), obteve valores médios da condutividade térmica do leito, e verificou que este valor se aproxima do valor assintótico quando a estimativa é realizada de uma forma global, sendo o valor obtido para condições experimentais próximas àquelas usadas neste trabalho situando-se entre 1,01 e 2,54 W/m K.

A Tabela 5.10 apresenta valores para a condutividade térmica do leito, obtidos através de algumas correlações disponíveis na literatura e já apresentadas no Capítulo 4, provenientes de estudos de transporte de calor em leito fixo sob condições experimentais semelhantes àquelas usadas neste trabalho. Nesta tabela, os valores determinados na ausência de fluxo fluido (condição de número de Reynolds nulo) correspondem nas correlações à condutividade térmica do leito na estagnação. Nas demais situações, os valores obtidos correspondem à condutividade térmica do meio com escoamento de fluido.

Analisando minuciosamente a Tabela 5.10, pode-se observar que os valores da condutividade térmica obtidas por diferentes correlações, apresentam discrepâncias relativas situadas na ordem de 20,09 a 97,97% para a situação de $Re = 0$, e na ordem de 69% para os demais valores de número Reynolds.

TABELA 5.10 - Condutividade térmica do leito em W/m K, obtida por várias correlações.

Correlações para k_{er} , (W/m K)	Número de Reynolds de partícula, Re					
	0	105	125	145	165	185
Tsao (1961), média aritmética	3,4252	-	-	-	-	-
Tsao (1961), média harmônica	0,0694	-	-	-	-	-
Woodside e Messmer (1961)	0,6789	-	-	-	-	-
Gorring e Churchill (1961)	0,5425	-	-	-	-	-
Bunnell et al. (1949)	0,1399	0,3191	0,3532	0,3873	0,4215	0,4556
Wash e Froment (1972)	(*) 0,6789	1,0600	1,1112	1,1633	1,2149	1,2665
Yagi e Kunii (1957)	(*) 0,6789	0,8922	0,9328	0,9734	1,0141	1,0547

(*) valores obtidos com a correlação de Woodside e Messmer (1961).

Comparando-se as Tabelas 5.9 e 5.10, verifica-se que significantes diferenças existem entre os resultados da condutividade térmica obtida com os modelos propostos neste trabalho e os reportados na literatura, que podem ser atribuídos a:

- Quanto ao modelo:

- Suposição de porosidade e velocidade constantes e uniformes ao longo do leito;
- Suposição que a condutividade térmica do material do reator é infinita;
- Suposição que a condutividade térmica do leito é constante ou função da temperatura nas formas linear ou quadrática;
- Suposição que o termo de dispersão axial na equação da energia é desprezível;
- Suposição que a temperatura do fluido na entrada do leito é constante e uniforme;
- Uso de modelos uni e bi-dimensional com apenas um parâmetro.

- Quanto às correlações propostas:

- Uso de condições experimentais distintas por diferentes grupos de pesquisadores;
- Tipos de empacotamentos usados e forma de medida da porosidade do leito;
- Tipos de materiais usados no empacotamento do leito;

- Forma e granulometria das partículas usadas no recheio;
- Tipos de mecanismos térmicos considerados ocorrendo no meio poroso.

- Quanto aos dados experimentais coletados:

- Tipo de dado coletado (os perfis temperatura obtidos consideram as flutuações radial, axial ou angular);
- Tipo de sensor usado na medida dos perfis de temperatura (sensor em forma de cruz, sensor anelar, etc.);
- Erros na medida dos dados coletados;
- Incertezas na obtenção da temperatura ao longo da posição z , obtida por sucessivos ajustes;
- Execução de experimentos réplicas para verificar a reprodutibilidade do empacotamento;
- Presença ou não de um trecho cilíndrico anterior à célula de medida para o desenvolvimento dos perfis de porosidade e velocidade;
- Magnitude do gradiente total de temperatura no equipamento, que influencia nos tipos de mecanismos de transporte de calor no meio poroso.

Apesar do razoável ajuste obtido nesta pesquisa, o autor recomenda que novos estudos (mais detalhado e criterioso, que englobem outros fenômenos não contemplados neste trabalho) sejam conduzidos para que resultados dos parâmetros estimados sejam mais confiáveis obtidos.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

6.1 - Conclusões

Dos resultados analíticos obtidos nesta pesquisa, pode-se concluir que:

- Existe uma dependência da temperatura adimensional com ambas as coordenadas, radial e axial, no entanto, os maiores gradientes de temperatura existem na direção radial;
- Aumentando o valor do parâmetro k_z de 0,0 para 0,1 W/m K, nenhuma influência sobre o perfil de temperatura adimensional no leito, porém, quando o valor de k_z é modificado de 0,0 para 10,0 W/m K, fica evidente a forte influência deste parâmetro. Neste caso, os gradientes de temperatura são bem menores, em relação aos casos onde $k_z = 0,0$ e 0,1 W/m K, exceto na região do primeiro quadrante ($0,0 \leq z/L \leq 0,4$ e $0,0 \leq r/R \leq 0,4$);
- À medida que o número de Biot aumenta, a temperatura do fluido percolante próximo à parede do reator tende mais rapidamente à sua temperatura de equilíbrio, em todos os pontos ao longo da posição axial. Neste caso, os gradientes de temperatura são mais pronunciados em todas as direções;
- Um aumento no valor do fluxo mássico específico altera sensivelmente as temperaturas locais no leito, aumentando a região de menores gradientes de temperatura. Neste caso, o termo de dispersão axial tende a tornar-se menos importante que o termo convectivo, e o transporte de calor por convecção é mais acentuado;

- Assumir que na entrada do leito o perfil de temperatura é constante, quando o perfil real é parabólico, conduz a uma aparente influência da dispersão axial de calor e as estimativas dos coeficientes de transporte passam a ser dependentes do efeito de entrada.

Dos resultados obtidos com os modelos I, II, III e IV conclui-se que:

- A modelagem matemática apresentada na obtenção da solução do problema de transporte de calor num leito fixo pode ser considerada adequada, podendo-se desta forma utilizar as soluções obtidas para obter previsões dos perfis de temperatura num leito com geometria que varia de um canal retangular até cilindro circular;
- Sob o ponto de vista da transferência de calor, é possível observar a existência de gradientes de temperatura em larga escala, principalmente para elevados valores do coeficiente convectivo de transporte de calor;
- Os gradientes de temperatura entre o leito e o gás indicam que o fluxo de calor ocorre do centro em direção à parede do reator (direções angular e radial) e na direção axial, da região de entrada para a saída do mesmo;
- Os maiores gradientes de temperatura acontecem próximos da região da parede. Existe também um forte aquecimento próximo ao ponto focal da elipse e nas regiões pontiagudas;
- Para um valor fixo da razão de aspecto geométrica, um aumento da altura do leito provoca um aumento na taxa de transporte de calor, alterando sensivelmente as temperaturas locais no interior do mesmo;
- Fixando-se o valor do coeficiente convectivo de transporte de calor e aumentando-se a razão de aspecto geométrica, nenhuma influência significativa foi observada sobre o perfil de temperatura adimensional em qualquer posição axial do reator;

- Os perfis de temperatura preditos decrescem à medida que aumenta o valor da posição radial, para qualquer altura do leito fixo;
- Na faixa de condições estudadas, a temperatura do fluido na entrada do reator e o fator pré-exponencial de Arrhenius parecem não exercer nenhuma influência significativa sobre os perfis de temperatura adimensionais em qualquer posição axial do reator;
- Na faixa de condições estudadas, a concentração molar do reagente mostrou uma influência moderada sobre o comportamento do reator, uma vez que não provoca modificações abruptas nas isolinhas de temperatura numa dada posição axial;
- Na faixa de condições estudadas, a parcela de energia gerada na reação química parece ter importância secundária frente aos demais termos da equação da conservação de energia;
- Dos modelos numéricos apresentados, o Modelo I foi aquele que melhor comportamento apresentou frente aos dados experimentais, produzindo como resultado em todas as estimativas, uma condutividade térmica de aproximadamente 1,90 W/m K para o leito;

Dos dados experimentais conclui-se que:

- Uma boa reprodutibilidade do empacotamento do leito foi alcançada, uma vez que as flutuações angulares e radiais de temperatura, numa dada altura de leito se mantiveram sempre num mesmo patamar;
- Na região próxima à entrada do leito, as flutuações angulares e radiais são mais pronunciadas, devido ao provável efeito de condução de calor tipo aleta pela parede do reator, da seção térmica em direção à seção de entrada;

- Os perfis radiais de temperatura são muito bem representados por uma equação parabólica, pois o ajuste produziu sempre coeficientes de correlação muito próximos da unidade;
- O aumento da vazão mássica de fluido, em qualquer altura de leito, altera significativamente os perfis radiais e axiais de temperatura, indicando que a transferência de calor por convecção passa a ser o mecanismo dominante;
- A porosidade do leito desempenha um papel determinante sobre o comportamento térmico do reator, visto que os maiores gradientes térmicos estão concentrados na direção radial, associado possivelmente às maiores flutuações que sofre a porosidade nessa mesma direção;
- A dispersão axial de calor pode ocorrer, por exemplo, por condução molecular, irregularidades no fluxo do fluido através do leito devido às irregularidades no empacotamento do leito, alternativamente convergindo e divergindo nos espaços vazios e taxa de fluxo de fluido;
- Quando se realiza a estimativa dos coeficientes térmicos do leito a partir de dados experimentais provenientes de uma célula de medidas onde a razão $H/D = 1,8$, é muito menor que 30, o fenômeno da fuga de calor pela parede torna-se bem mais pronunciado.

6.2 - Sugestões para trabalhos futuros

Como sugestões para futuras pesquisas nesta área de conhecimento, podem ser citadas:

- Incorporar na solução numérica o termo de geração de energia proveniente de uma reação química, numa ampla faixa de condições experimentais a fim de analisar o seu efeito sobre a distribuição de temperatura no interior do reator;
- Estudar o efeito da forma, da granulometria e atividade das partículas do recheio, sobre os perfis de temperatura no interior do leito;

- Comparar os resultados experimentais da distribuição de temperatura no interior de um reator cilíndrico elíptico com os valores preditos pelos modelos numéricos I, II e III e estimar os coeficientes difusivo e convectivo de transporte de calor em várias condições de fluxo;
- Estudar os efeitos dos coeficientes de transporte convectivo sobre a distribuição de temperatura no interior do leito;
- Analisar o efeito da inclusão da porosidade e velocidade em função do raio, sobre a estimativa dos coeficientes de transporte e perfis de temperatura no interior do leito;
- Realizar um estudo comparativo entre a solução analítica apresentada neste trabalho com aquela proposta por Borkink e Westerterp (1992), quando se incorpora um perfil de temperatura na entrada do reator tipo parabólico;
- No modelo matemático apresentado, incorporar a transferência de massa, quando estiver ocorrendo uma reação química visando prever o gradiente de concentração no interior do reator;
- Estudar as características térmicas do leito, quando o mesmo estiver sendo operado sob condições não-estacionárias;
- Aplicar os modelos apresentados neste trabalho para estudar o comportamento térmico do coletor de efluentes gasosos de um automóvel, visto que o mesmo apresenta uma forma geométrica cilíndrica elíptica;
- 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.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abramowitz, M., Stegun, I., Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, New York: John Wiley & Sons, 1970, 1044p.

Afandizadeh, S., Foumeny, E. A., Design of packed bed reactors: guides to catalyst shape, size, and loading selection. Applied Thermal Engineering, vol. 21, pp. 669-682, 2001.

Ahmed, M., Fahien, R. W., Tubular reactor design-I two dimensional model. Chem. Eng. Sci., vol. 35, pp. 889-895, 1980.

Alazmi, B., Vafai, K., Constant wall heat flux boundary conditions in porous media under local thermal non-equilibrium conditions. Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 45, pp. 3071-3087, 2002.

Andrigo, P., Bagatin, R., Pagani, G., Fixed Bed Reactors. Catalysis Today, vol. 52, pp. 197-221, 1999.

Assaf, E. M., Giordano, R. C., Freire, J. T., Modelagem do reator de oxidação do etileno: Modelo bidimensional com perfil radial de porosidades e velocidades. Anais do XXIII ENEMP, Maringá-PR, 1995.

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

Azevedo, S. F., Romero, M. A. O., Wardle, A. P., Modeling of tubular fixed bed catalytic reactor : a brief review. Trans. Instn. Chem.Engrs., vol. 68, pp. 483-502, 1990.

Balakotaiah, V., Christoforatos, E.L., West, D.H., Transverse Concentration and Temperature Nonuniformities in Adiabatic Packed-Bed Catalytic Reactors. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, pp. 1725-1734, 1999.

Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N., Fenómeno de transporte. Barcelona: Editorial Reverté S. A., 1973, 780p.

Borkink, J. G. H., Westerterp, K. R., Determinations of effective heat transport coefficients for wall-cooled packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 47, pp. 2337-2342, 1992a.

Borkink, J. G. H., Westerterp, K. R., The significance of axial heat dispersion for the description of heat transport in wall-cooled packed beds. *Chem. Eng. Techn.*, vol. 15, pp. 371-384, 1992b.

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

Borman, P., C., Westerterp, K. R., - An experimental study of the selective oxidation of ethane in wall cooled tubular packed bed reactor. *Chem. Eng. Sci.*, vol.47, pp. 2451-2546, 1992.

Brebbia, C. A., Dominguez, J., Boundary elements an introductory course. New York: McGraw-Hill Company, 1989, 292p.

Brodkey, R. S., The phenomena of fluid motions. London: Addison-Wesley Publishing Company, 1967, pp. 18-23.

Burghardt, A., Berezowski, M., Jacobsen, E.W., Approximate Characteristics of a Moving Temperature Front in a Fixed-Bed Reactor. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 38, pp. 19-34, 1999.

Bunnell, D. G.; Irvin, H. B.; Olson, R. W., Smith, J. M., Effective thermal conductivities in gas-solid systems. *Ind. Eng. Chem.*, vol. 41, pp. 1977-1981, 1949.

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

Chalbi, M.; Castro, J. A.; Rodrigues, A. E., Zoulaian, A., Heat transfer in fixed bed exchangers. *Chem. Eng. J.*, vol. 34, pp. 89-97, 1987.

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.

Covre, G. J., *Química geral*. São Paulo: FTD Editora, 2001, 359p.

Cresswell, D. L., Heat transfer in packed beds. *NATO ASI Ser. E (Chem. React. Des. Technol.)*, vol. 110, pp. 687, 1986.

Delmas, H., Froment, G. F., A simulation model accounting for structural radial nonuniformities in fixed bed reactors. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 43, pp. 2281-2287, 1988.

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

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

Dixon, A. G., The length effect on packed bed effective heat transfer parameters. *The Chem. Eng. J.*, vol. 31, pp. 163-173, 1985.

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., Paterson, W. R., Cresswell, D. L., Heat transfer in packed beds of low tube/particle diameter ration. *ACS - Symp. Series*, vol. 65, pp. 238-253, 1978.

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.

Ferreira, M. F., Castro, J. A. M., Rodrigues, A. E., Na analytical and experimental study of heat transfer in fixed bed. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 45, pp. 951-961, 2002.

Figliola, R. S., Beasley, D. E. *Theory and Design for mechanical measurements*. New York: John Wiley & Sons, 1995, 607p.

Finlayson, B. A., *Non-Linear Analysis in Chemical Engineering*. New York: Mc Graw-Hill, 1980.

Franks, R. G. E., *Modelling and Simulation in Chemical Engineering*. New York: John Wiley & Sons, 1972.

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

Freiwald, M. G., Paterson, W. R., Accuracy of model predictions and reliability of experimental data for heat transfer in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 47, pp. 1545-1560, 1992.

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.

Fogler, H. S., *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 3^a Edição, Rio de Janeiro: LTC Editora, 2002, 892p.

Foumeny, E. A., Moallemi, H. A., Mc Greavy, C., Castro, J. A. A., Elucidation of mean voidage in packed beds. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 69, pp. 1010-1015, 1991.

Gatica, J. E., Viljoen, J. H., Hlavacek, V., Interaction Between chemical reaction and natural convection in porous media. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 44, pp. 1853-1870, 1989.

Giudici, R., Modelagem de reator de oxidação de etileno: estudo de parâmetros térmicos e estratégia de diluição de catalisador. Tese de Doutorado, Poli/USP, São Paulo, 1990, 183p.

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

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

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

Gunn, D. J., Ahmad, M. M., Sabri, M. N., Radial heat transfer to fixed beds of particles. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 42, pp. 2163-2171, 1987.

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.

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

He, J., Zeng, R., Chen, S., Tu, Y., Thermal Characteristics of high voltage whole-solid-insulated polymeric ZnO surge arrester. IEEE Transactions on Power Delivery, vol. 18, n. 4, pp. 1221-1227, 2003.

Herman, J. M., Vanderberg, P. J., Scholten, J. J. F., The industrial hydroformylation of olefins with a rhodium-based supported liquid phase catalyst IV: Heat transfer measurements in fixed bed containing alumina SCS9 particles. Chem. Eng. J., vol. 34, pp. 133-142, 1987.

Holman, J. P., Transferência de Calor. São Paulo: McGraw-Hill Editora, 1983, 693p.

Hunt, M. L., Tien, C. L., Non-Darcian convection in cylindrical packed beds. Journal of heat transfer. vol. 110, pp. 378-384, 1988.

Hunt, M. L., Tien, C. L., Non-Darcian flow, heat and mass transfer in catalytic packed-bed reactors. Chem. Eng. Sci., vol. 45, pp. 55-63, 1990.

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.

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.

Kakaç, S., Yener Y., Heat conduction, Washington: Ed. Taylor & Francis Inc., 1993.

Kalthof, O., Vortmeyer, D., Ignition/extinction phenomena in wall cooled fixed bed reactor. Chem. Eng. Sci., vol. 35, pp. 1637-1643, 1980.

Kreyszig, E., Advanced engineering mathematics. New York: 6. ed. vol.1, John Wiley & Sons, 1988, pp. 211-215.

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.

Kwong, S. S., Smith, J. M., Radial heat transfer in packed beds. Ind. Eng. Chem., vol. 49, pp. 894-903, 1957.

Lembo, A., Sardella, A., Química. São Paulo: 5^a ed. vol. 2, Editora Ática S/A, 1981, 360p.

Lerou, J. J., Froment, G. F., Velocity, temperature and conversion profiles in fixed bed catalytic reactors. Chem. Eng. Sci., vol. 32, pp. 853-861, 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. São Paulo: Edgard Blucher Editora LTDA, 1999, 563p.

Li, C. H., Finlayson, B. A., Heat transfer in packed beds - a reevaluation. Chem. Eng. Sci., vol. 32, 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, 244p.

Luikov, A. V., Analytical heat diffusion theory. London: Academic Press, Inc. Ltd., 1968, 684p.

MacRobert, T. M., Spherical harmonics: an elementary treatise on harmonic functions with applications. Oxford: Pergamon Press, 1967, 349p.

Magnus, W., Oberhettinger, F., Soni, R. P., Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics. Berlin: Springer-Verlag, 1966, pp. 472-495.

Maliska, C. R., Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. Rio de Janeiro: LCT-Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 1995, 424p.

Mc Greavy, C., Ikponmwo, A. N., Anais do XI Simp. Iberoam. Cat., Guanajuato, México, 1988.

Mac Robert, T. M., Spherical Harmonics: an elementary treatise on harmonic functions with applications. Oxford: Pergamon Press, 1967, 349p.

Minkowicz, W. J., Sparrow, E. M., Schneider, G. E., Pletcher, R. H., Handbook of numerical heat transfer. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1988, 1024p.

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

Nascimento, J. J. S., Fenômenos de difusão transiente em sólidos paralelepípedos. Estudo de caso: secagem de material cerâmico. Tese de Doutorado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Brasil, 2002.

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, 2002.

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

Oliveira, E. C., Maiorino, J. E, Introdução aos métodos de matemática aplicada. Campinas, Editora da UNICAMP, 1997.

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

Oliveira, L. G., Lima, A. G. B., Numerical simulation of the steady-state heat transfer in packed beds reactors with elliptic cylindrical shape. Anais of the XXII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Campinas, Brazil, 2001.

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, 197p.

Paterson, W. R., Carberry, J. J., Fixed bed catalytic reactor modelling the heat transfer problem. Chem. Eng. Sci., vol. 38, pp. 175-180, 1983.

Pillai, K. K., Voidage variation at the wall of a packed bed of spheres. Chem. Eng. Sci., vol. 32, pp. 59-61, 1977.

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

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.

Puszynski, D. S., Hlavacek, V., Hofmann, H., A revision of multiplicity and parametric sensitivity concepts in nonisothermal nonadiabatic packed bed reactors. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 36, pp. 1605-1609, 1981.

Roblee, L. H. S., Baird, R. M., Tierney, J. W., Radial porosity variations in packed beds *AIChE J.*, vol. 4, pp. 460-464, 1958.

Rodrigues, A. E., Ferreira, R. M. Q., Effect of intraparticle convection on the steady-state behavior of fixed-bed catalytic reactors, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 45, pp. 2653-2660, 1990.

Russel, J. B., *Química Geral*. São Paulo: McGraw-Hill Editora, 2ª edição, vol. 1, 1994, 766p.

Sardella, A., Mateus, E., *Química*. São Paulo: Editora Ática S/A, 1982, 456p.

Sartori, D. J. M., *Transferência de calor em leito deslizante*. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1978, 103p.

Schouten, E. P. S., Westerterp, K. R., Angular temperature variations in a wall-cooled packed-bed reactor. *AIChE J.*, vol. 42, n. 9, pp. 2635-2644, 1996.

Schuler, R. W., Stallings, V. P., Smith, J. M., *Chem. Eng. Progr. Symp. Ser.*, vol. 48, n. 4, pp. 19-26, 1954.

Schwartz, C. E., Smith, J. M., Flow distribution in packed beds. *Ind. Eng. Chem.*, vol. 45, pp. 1209-1218, 1953.

Shih, T., *Numerical heat transfer*. Washington: Hemisphere Publishing Corp., 1984, 536p.

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.

Sklivaniotis, M. Castro, J. A. A., Mc Greavy, C., Characteristic features of parametric sensitivity in a fixed-bed heat exchanger. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 43, pp. 1517-1522, 1988.

Stanek, V., Vychodil, P., On the length effect of the heat dispersion parameters. *Chem. Eng. Comun.*, vol. 27, pp. 69-78, 1984.

Stanek, V., Vychodil, P., Mathematical model and assessment of thermally induced gas flow inhomogeneities in fixed beds. *Chem. Eng. Process.*, vol. 22, pp. 107-115, 1987.

Stanek, V., Eckert, V., A study of the area porosity profiles in a bed of equal-diameter spheres confined by a plane. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 34, pp. 933-940, 1979.

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., Transferência de calor em leito fixo: O modelo a dois parâmetros tradicional revisitado. *Tese de Doutorado*, São Carlos, PPG-EQ/UFSCar, 1995, 127p.

Thoméo, J. C., Freire, J. T., Heat transfer in fixed bed: a model non-linearity approach. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 2329-2338, 2000.

Villadsen, J., Michelsen, M. L., Solution of differential equation models by polynomial approximation. Prentice-Hall, 1978.

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.

Vortmeyer, D., Schaefer, R. J., Equivalence of one - and two phase models for heat transfer processes in packed beds: one-dimensional theory. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 29, pp. 485-491, 1974.

Vortmeyer, D., Schuster, J., Evaluation of steady flow profiles in rectangular and circular packed beds by a variational method. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 38, pp. 1691-1699, 1983.

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

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. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 27, pp. 567-576, 1972.

Wijngaarden, R. J., Westerterp, K. R., The statistical character of packed beds heat transport properties. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 47, pp. 3125-3129, 1992.

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.

Young, L. C., Finlayson, B. A., Axial dispersion in nonisothermal packed bed chemical reactors. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, vol. 12, n. 04, pp. 412-422, 1973.

Ziolkowski, D., Legawiec, B., Remarks upon thermokinetic parameters of the one-and two-dimensional mathematical models of heat transfer in tubular flow apparatus with packed bed. *Chem. Eng. Process*, vol. 21, pp. 65-76, 1987.

Zotin, F. M. Z., O efeito de parede em colunas de recheio. Dissertação de Mestrado, São Carlos, PPG-EQ UFSCar, 1985, 85p.