



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

**TESE DE DOUTORADO**

**TRANSPORTE DE CALOR EM REATOR CILÍNDRICO ELÍPTICO DE LEITO  
FIXO RECHEADO DE PARTICULAS: MODELAGEM, SIMULAÇÃO E  
OTIMIZAÇÃO**

**Aguinaldo Araújo Silva Filho**

Campina Grande – Paraíba

Junho, 2013

# **TRANSPORTE DE CALOR EM REATOR DE LEITO FIXO: MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO**

**AGUINALDO ARAÚJO SILVA FILHO**

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

**Orientador: Prof. ANTONIO GILSON BARBOSA DE LIMA**

Campina Grande – Paraíba – Brasil

Junho, 2013

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFPG

S586t Silva Filho, Aguinaldo Araújo.  
Transporte de calor em reator de leito fixo: modelagem, simulação e  
otimização / Aguinaldo Araújo Silva Filho. – Campina Grande, 2013.  
145 f. : il. Color.

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

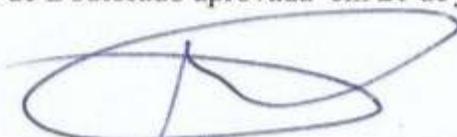
"Orientação: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima".  
Referências.

I. Transferência de Calor. 2. Reator. 3. Cilindro Elíptico. 4. Numérico.  
5. Volumes Finitos. I. Lima, Antonio Gilson Barbosa de. II. Título.

CDU 66.021.4(043)

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

Tese de Doutorado aprovada em 21 de junho de 2013



---

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



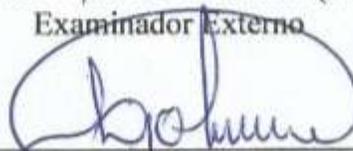
---

Prof. Dr. Vimário Simões Silva (UAEQ/CCT/UFCG)  
Examinador Externo



---

Prof. Dr. José Jefferson da Silva Nascimento (UAEMa/CCT/UFCG)  
Examinador Externo



---

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



---

Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira (DESA/CCT/UEPB)  
Examinador Externo

Campina Grande – Paraíba - Brasil

Junho, 2013

## **DEDICATÓRIA**

A minha companheira Cleide Marinho Bandeira, pelo apoio, pela dedicação e compreensão, nos bons e maus momentos. Obrigado por você existir na minha vida.

Aos meus filhos Vívian Vanessa Araújo de Almeida, Luciane Patrícia Araújo de Almeida e Luiz Henrique Almeida Araújo. Sementes que Deus semeou na minha vida, amo vocês.

Aos meus pais Aguinaldo Araújo Silva e Antonia Maria Silva (in memória), por me dado uma educação de respeito ao próximo e por me mostrar que a dignidade do homem está na qualidade de suas atitudes.

A todos meus irmãos. A família é a base fundamental de uma estrutura sólida para uma convivência em grupo.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus por me contemplar com está benção, pois ele é muito grande e tem seus mistérios que o homem não entende. Ele faz o impossível ser possível basta só ter fé.

À Cleide Marinho Bandeira (minha companheira), a Vívian Vanessa Araújo de Almeida, Luciane Patrícia Araújo de Almeida e Luiz Henrique Almeida Araújo.(meus filhos), pela compreensão durante o período que estive ausente dedicando esse tempo à conclusão desta pesquisa.

Ao professor Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (UAEM/CCT/UFCG), pela oportunidade, pela orientação, pela ajuda, pela confiança, pela sensibilidade. Enfim pela pessoa que possui um coração maior que ele.

Ao engenheiro José Paulo da Silva pela valiosa contribuição durante a fase de simulação dos diversos casos estudados.

Ao professor Pedro Alcântara, diretor da escola politécnica de engenharia (POLI) da UPE-PE, por minha liberação.

Ao professor Dr. Laercio Gomes de Oliveira, por sugerir em seu trabalho o desenvolvimento desta pesquisa e pelo apoio.

À Autarquia do Ensino Superior de Goiana e a FADIMAB na pessoa do professor Lourenço Benedito Bezerra, por minha liberação para realizar o doutorado.

Ao professor Simão Rosembaum, presidente da AMESG-PE, pelo apoio e liberação de minhas aulas para conclusão final da tese.

A meus ex-alunos Iran Rodrigues de Oliveira, João Paulo da Silva e José Vieira da Silva (colegas de curso) pelo apoio e por acreditar em mim.

Ao professor e amigo Paulo Roberto de Carvalho da Escola Politécnica-UPE, pela compreensão e apoio.

Aos amigos Fernando José da Silva e Evaldo Marcos Ascendino Pereira, pelos incentivos a mim dedicado.

Aos colegas usuários do Laboratório Computacional de Térmicas e Fluidos (LCTF) do DEM/CCT/UFCG e da sala dos alunos pesquisadores, que de forma direta ou indireta contribuíram para que este trabalho atingisse seus objetivos.

Aos professores Dr. Laercio Gomes de Oliveira (UAEQ/CCT/UFCG), Dr. Vimário Simões Silva (UAEQ/CCT/UFCG), Dr. José Jefferson da Silva Nascimento (UAEMa/CCT/UFCG) e Dr. Fernando Fernandes Vieira (DESA/CCT/UEPB) pela contribuição a este trabalho durante toda fase de exames até a tese.

Ao programa de Doutorado em Engenharia de Processos na pessoa do professor Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (Coordenador), pela oportunidade neste programa de Pós-graduação de alto nível.

Do fruto de sua boca o homem se beneficia,  
e o trabalho de suas mãos será  
recompensado.

Há palavras que ferem como espada, mas a  
língua dos sábios traz a cura.

Provérbio c.12.v 14-15

## RESUMO

Nesta pesquisa desenvolveu-se um modelo matemático tridimensional transiente no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas aplicadas a um leito poroso, que descreve a distribuição de temperatura no interior do mesmo. Toda formulação foi aplicada para estudar o transporte de calor no interior do reator de leito fixo, usando-se condição convectiva nas paredes interna e externa, condução de calor na parede do reator e propriedades termofísicas variáveis. A modelagem matemática apresentada pode ser aplicada a leitos com forma geométrica variando desde um canal retangular até o cilindro elíptico, inclusive o cilindro circular. A solução numérica tridimensional da equação que descreve o problema de transporte de calor no interior de um reator de leito fixo com geometria cilíndrica elíptica foi obtida utilizando-se o 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 obtido 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 várias posições axiais ao longo do leito são mostradas e analisadas. Várias condições de processo foram estudadas, variando-se o coeficiente convectivo de transferência de calor, a razão de aspecto e altura geométrica do reator, a porosidade do leito, a temperatura e velocidade superficial do fluido na entrada do sistema. Dos resultados obtidos, conclui-se que tanto a porosidade, velocidade superficial do fluido quanto o coeficiente de transferência de calor convectivo são importantes no fenômeno de transferência de calor em reatores de leito fixo parâmetros de grande relevância.

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

## **ABSTRACT**

This research has developed a of the three dimensional transient mathematical model in the elliptic cylindrical coordinate system applied to porous bed which describes the temperature distribution inside the one. Every formulation was applied to study the heat transport within the packed bed reactor, using convective boundary condition in the inner and outer walls, heat conduction in the wall of the reactor and variables thermophysical properties. The mathematical model presented can be applied to geometric shape beds varying from rectangular channel to elliptical cylinder including circular cylinder. The three-dimensional numerical solution of equation that describes the problem of heat transport inside a fixed bed reactor with elliptic cylindrical geometry was obtained by using the finite volume method. To discretize the general equation of energy conservation was used the WUDS (Weighed diference Upstream Scheme) scheme as interpolation function for the diffusive and convective terms and a fully implicit formulation. The linear algebraic equations system, obtained from the discretization of the energy equation at all points of the computational domain is solved iteratively by the Gauss-Seidel method. Results of the temperature distribution inside the reactor at various axial positions along the bed are presented and analyzed. Several process conditions were studied by varying the of convective heat transfer coefficient, dimensions of the reactor, bed porosity, and temperature and superficial velocity of the fluid at the entrance of the system. We conclude that the porosity, superficial velocity and heat transfer convective coefficient are parameters of great importance in the phenomenon of heat transfer in fixed bed reactors.

Keywords: heat transfer, reactor, elliptical cylinder, numerical, finite volume.

# SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>5</b>
2.1 Meios porosos	5
2.1.1 Conceitos gerais	5
2.1.2 Porosidade	9
2.2 Reatores	11
2.2.1 Reatores ideais básicos (foco nas reações homogêneas)	12
2.2.2 Reatores para reações heterogêneas	13
2.2.3 Reatores de leito fixo	18
2.3 Transferência de calor em leitos fixos percolados por um fluido	28
<b>3 MODELAGEM MATEMÁTICA</b>	<b>35</b>
3.1 Modelagem da transferência de calor	35
3.2 O reator cilíndrico elíptico	36
3.3 Equação da energia no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas	40

3.4 Solução numérica do transporte de calor para o cilindro de geometria elíptica	<b>46</b>
3.4.1 Formulação geral	<b>46</b>
3.4.2 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.	<b>58</b>
3.4.2.1 Formulação matemática	<b>58</b>
3.4.2.2 Formulação numérica	<b>61</b>
3.4.2.3 Propriedades termofísicas do fluido e material do reator	<b>67</b>
3.4.2.4 Solução do sistema de equações e casos estudados	<b>71</b>
<b>4 RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>75</b>
4.1 Validação da malha numérica e modelo	<b>75</b>
4.1.1 Malha numérica	<b>75</b>
4.1.2 Modelo	<b>77</b>
4.1.2.1 Validação analítica	<b>77</b>
4.1.2.2 Validação experimental	<b>77</b>
4.2 Avaliação de parâmetros termofísicos na distribuição de temperatura no leito fixo e efeito da porosidade	<b>79</b>
4.2.1 Efeito da porosidade	<b>79</b>
4.2.2 Avaliação do efeito do coeficiente de transferência do calor convectivo	<b>88</b>
4.2.2.1 Parede externa do reator	<b>88</b>
4.2.2.2 Parede interna do reator	<b>97</b>

4.2.3 Avaliação da geometria do reator	101
4.2.3.1 Efeito da razão de aspecto geométrico	101
4.2.3.2 Efeito da altura do leito	107
4.2.4 Efeito da temperatura do fluido	109
4.2.4.1 Efeito da temperatura do ar na entrada do reator	109
4.2.4.2 Efeito da temperatura do fluido refrigerante	114
4.2.5 Efeito da velocidade do ar	119
4.2.6 Efeito do material da parede do reator	125
<b>5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS</b>	<b>130</b>
5.1 Considerações finais	130
5.2 Sugestões para futuros trabalhos	133
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>134</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Representação esquemática de um meio poroso.	6
Figura 2.2: Representação de distribuição da porosidade. (a) granulometria bem distribuída (b) granulometria mal distribuída.	7
Figura 2.3: Porcentagem do volume de vazios em relação ao volume total.	9
Figura 2.4: Principais tipos de reatores ideais. (a) Reator descontínuo (ou batelada) (b) Reator tubular (c) Reator de mistura.	13
Figura 2.5: Esquema de um reator de leito fixo.	15
Figura 2.6: Esquema de um reator de leito fixo fluidizado.	15
Figura 2.7: Leito fixo ou coluna de recheio.	20
Figura 2.8: Torre de recheio.	21
Figura 2.9: Reator adiabático de leito fixo.	23
Figura 2.10: Reator adiabático de leito fixo.	27
Figura 3.1: Esquema de um reator de leito compacto cilíndrico elíptico.	37
Figura 3.2: Sistema de coordenadas cilíndricas elípticas no plano $\xi$ - $\eta$ .	39
Figura 3.3: Configuração numérica do problema físico	48
Figura 3.4: Volume de controle da malha numérica.	49
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.	<b>61</b>
Figura 3.7: Esquema mostrando o fluxo de calor na região de simetria do reator.	<b>64</b>
Figura 4.1: Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ( $Re = 105$ ) em função da altura do reator.	<b>78</b>
Figura 4.2: Distribuição da porosidade do leito em função da distância da parede do reator.	<b>80</b>
Figura 4.3: Perfis de temperatura adimensional na direção axial para diferentes porosidades, $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W/m}^2\text{K}$ , Casos 1 a 5.	<b>80</b>
Figura 4.4: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0.2$ , em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, e $H = 0.20 \text{ m}$ (caso 1).	<b>82</b>
Figura 4.5: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0.4$ , em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, e $H = 0.20 \text{ m}$ (caso 2).	<b>83</b>
Figura 4.6: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0.6$ , em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, e $H = 0.20 \text{ m}$ (caso 3).	<b>84</b>
Figura 4.7: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0.8$ , em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, e $H = 0.20 \text{ m}$ (caso 4).	<b>85</b>
Figura 4.8: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon =$ variável, em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, e $H = 0.20 \text{ m}$ (caso 5).	<b>86</b>
Figura 4.9: Perfis de temperatura adimensional para diferentes porosidades na direção axial $h_{w_{ext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$ , (casos de 6 a 10).	<b>87</b>
Figura 4.10: Perfis de temperatura adimensional para diferentes porosidades na direção axial ( $h_{w_{ext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$ , (casos de 6 a 10)	<b>89</b>
Figura 4.11: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_w = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0,2$ em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e $H = 0.20 \text{ m}$ (caso 6).	<b>90</b>

- Figura 4.12: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 7) **91**
- Figura 4.13: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,6$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 8) **92**
- Figura 4.14: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,8$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 9) **93**
- Figura 4.15: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon =$  variável em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 10) **94**
- Figura 4.16: (a, b, c, d, e) Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , na posição  $z/H = 0,0833$ , e  $H = 0.20 \text{ m}$ , a)  $\varepsilon = 0,2$  b)  $\varepsilon = 0,4$  c)  $\varepsilon = 0,6$  d)  $\varepsilon = 0,8$  e)  $\varepsilon =$  variável **96**
- Figura 4.17: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{int}} = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0.4$  em  $z/H$  a) 0.0833, b) 0.5277 e c) 0.9722 e  $H=0,20\text{m}$ ,(caso 11) **99**
- Figura 4.18: Distribuição de temperatura adimensional Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{int}} = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 12) **100**
- Figura 4.19: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,2$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 13) **102**
- Figura 4.20: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 14) **103**
- Figura 4.21: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,6$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 15) **104**

Figura 4.22: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0,8$ em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 16)	<b>105</b>
Figura 4.23: Distribuição de temperatura adimensional para $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = \text{variável}$ em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 17)	<b>106</b>
Figura 4.24: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0,4$ e $H = 0,30 \text{ m}$ em $z/H$ a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 18)	<b>107</b>
Figura 4.25: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_o = 50^\circ\text{C}$ (caso 20).	<b>108</b>
Figura 4.26: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_o = 60^\circ\text{C}$ (caso 21).	<b>110</b>
Figura 4.27: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_o = 70^\circ\text{C}$ (caso 7).	<b>112</b>
Figura 4.28: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_o = 80^\circ\text{C}$ (caso 22).	<b>112</b>
Figura 4.29: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0,4$ e $H = 0,20\text{m}$ , em $z/H = 0.9722$ a) $T_m = 20^\circ\text{C}$ e b) $T_m = 60^\circ\text{C}$ (casos 23 e 26).	<b>113</b>
Figura 4.30: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_m = 20^\circ\text{C}$ (caso 23).	<b>113</b>
Figura 4.31: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_m = 40^\circ\text{C}$ (caso 24).	<b>115</b>
Figura 4.32: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_m = 50^\circ\text{C}$ (caso 25).	<b>117</b>
Figura 4.33: Temperatura na posição $y = 0,03\text{m}$ fixa em função da coordenada $x$ nas seções $z/H$ 0.0833, 0.5277 e 0.9722 para $T_m = 20^\circ\text{C}$ (caso 26).	<b>117</b>
Figura 4.34: Distribuição de temperatura adimensional $T^*$ para $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ , $\varepsilon = 0,4$	<b>118</b>

e  $u_z = 0,001 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 27).

Figura 4.35: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  **118**  
e  $u_z = 0,01 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 28).

Figura 4.36: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  **120**  
e  $u_z = 0,05000 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 29).

Figura 4.37: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  **121**  
e  $u_z = 0,11417 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 7).

Figura 4.38: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  **122**  
e  $u_z = 0,11700 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 30).

Figura 4.39: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ , **123**  
 $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 13,4 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722  
(caso 34).

Figura 4.40 : Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon =$  **124**  
 $0,4$ ,  $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 14,9 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c)  
0,9722  
(caso 33).

Figura 4.41: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ , **126**  
 $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 15,1 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722  
(caso 32).

Figura 4.42: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ , **127**  
 $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 401 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722  
(caso 31).

## **LISTA DE TABELAS**

Tabela 2.1: Distribuição de partículas em leito poroso	<b>10</b>
Tabela 3.1: Densidade e condutividade térmica de alguns materiais a 300 K	<b>71</b>
Tabela 3.2: Casos simulados na pesquisa.	<b>73</b>
Tabela 4.1: Teste para escolha da malha e custo computacional.	<b>76</b>
Tabela 4.2: Temperatura no interior do reator na posição $y = 0,03$ m para diferentes temperaturas do fluido na entrada do reator.	<b>111</b>
Tabela 4.3: Temperatura no interior do reator na posição $y = 0,03$ m para diferentes temperaturas do fluido refrigerante do reator.	<b>116</b>

# SIMBOLOGIA E ABREVIATURAS

## SIMBOLOGIA

### Letras Latinas

$A_P, A_N, A_S, A_E, A_W, A_F, A_T, A_P, A_P^0$ - coeficientes das equações discretizadas	[-]
B - termo de geração de energia na Equação 3.51	[W/m <sup>3</sup> ]
B* - termo proveniente da discretização das equações 3.75	[W/m <sup>3</sup> ]
$c_p$ - calor específico do fluido	[J/kg/K]
$d_p$ - diâmetro da partícula	[m]
$D_{ij}$ - coeficientes das Equações 3.8, 3.59, 3.60 a 3.62	[-]
e, w, s, n, f, t - faces dos pontos nodais	[-]
E, N, P, W, S - pontos nodais	[-]
$\hat{f}_i$ é o fator de interpolação da Equação 3.69	[-]
$h_w$ - coeficiente de transferência de calor parede-meio poroso	[W/m <sup>2</sup> /K]
$h_{win}$ - coeficiente de transferência de calor na parede interna do leito	[W/m <sup>2</sup> /K]
$h_{wext}$ - coeficiente de transferência de calor na parede externa do leito	[W/m <sup>2</sup> /K]
H - comprimento(altura) do leito	[m]
i, j - posição do ponto nodal na malha	[-]

J - jacobiano da transformação	[1/m <sup>2</sup> ]
J <sub>0</sub> – Função de Bessel de primeira espécie e ordem zero	[-]
K <sub>f</sub> - condutividade térmica do fluido	[W/m/K]
K <sub>s</sub> - condutividade térmica do sólido	[W/m/K]
K <sub>m</sub> - condutividade real do meio	[W/m/K]
K <sub>o</sub> - condutividade térmica na estagnação	[W/m/K]
K <sub>z</sub> - condutividade térmica efetiva axial do leito	[W/m/K]
K <sub>wr</sub> - condutividade térmica do fluido na parede do reator	[W/m/K]
L - distância focal da elipse na Figura 3.4	[m]
L <sub>1</sub> - semi-eixo menor da elipse	[m]
L <sub>2</sub> - semi-eixo maior da elipse	[m]
n - número de iterações em cada instante de tempo	[-]
Pe - número de Peclet para transferência de calor	[-]
q", q̇ - fluxo de calor	[W/m <sup>3</sup> ]
S <sup>ϕ</sup> - termo de geração interna de energia	[W/m <sup>3</sup> ]
$\overline{SM}$ - termo fonte associado ao fluxo	[W/m <sup>3</sup> ]
t - tempo	[s]
T - temperatura	[°C]
T <sub>0</sub> - temperatura na entrada do reator	[°C]
T <sub>w</sub> - temperatura na parede do reator	[°C]
T <sub>m</sub> - temperatura do fluido refrigerante	[°C]
T <sub>E</sub> - temperatura na seção de entrada	[°C]
u <sub>z</sub> - velocidade intersticial de fluido	[m/s]

$\tilde{U}$ , $\tilde{V}$ e $\tilde{W}$ - são as componentes contravariantes do vetor velocidade	[m/s]
$\hat{U}$ , $\hat{V}$ e $\hat{W}$ - coeficientes métricos	[-]
V - volume do reator	[m <sup>3</sup> ]
$\bar{v}$ - vetor velocidade	[m/s]
x, y, z - coordenadas cartesianas	[m]
z - variável da posição axial	[m]

### Letras Gregas

$\alpha_{ij}$ - coeficiente das equações 3.8 e 3.60 a 3.62	[-]
$\alpha$ - coeficiente das equações 3.47 a-b e 3.48	[-]
$\beta$ - coeficiente das equações 3.41 a 3.46, 3.48 e 3.49	[-]
$\delta$ , $\Delta$ - variação	[-]
$\tau$ , $\varphi$ - ângulos definidores nas equações 3.3 a-c e 3.4	[-]
$\varepsilon$ - fração de vazios	[-]
$\mu$ - viscosidade do fluido	[kg/m/s]
$\xi$ , $\eta$ - posição no sistema de coordenadas cilíndricas elíptica	[-]
$\rho_f$ - densidade do fluido	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\Phi$ - função da variável observada	[-]

$\Phi''$ - fluxo de $\Phi$ por unidade de área	[1/m <sup>2</sup> ]
$\Gamma, \Gamma^\Phi$ - propriedade do leito	[-]
$\nabla$ - gradiente	[-]
$\Psi$ - variável do termo de dissipação viscosa	[-]

### Superscritos

* - adimensional	[-]
<b>o</b> - anterior	[-]

### Subscritos

$\xi, \eta, z$ - direção perpendicular ao fluxo	[-]
e, w, s, n, f, t - faces dos pontos nodais	[-]
Wext - parede externa	[-]
Win - parede interna	[-]
n, m - números inteiros	[-]
o - inicial	[-]
w - parede do leito	[-]

## **ABREVIATURAS**

MET - Microscopia Eletrônica de Transmissão

TGA - Análise termogravimétrica

ID - Índice de intensidade da banda D

IG - Índice de intensidade da banda G

ID/IG - Relações das intensidades das bandas D e G

PBR - Reator de leito fixo

SWNT - Nanotubos de carbono de parede simples

CCVD - Decomposição química catalítica de vapor

DQO - Demanda química de oxigênio

# **CAPÍTULO 1**

## **INTRODUÇÃO**

Desde o século passado foram realizadas inúmeras pesquisas para estudar a transferência de calor em meios porosos, percolados por fluidos na direção axial. O interesse em tal estudo está presente em vários ramos da Ciência e Tecnologia. Esse interesse advém de estarem os meios porosos presentes tanto na natureza (solos e plantas, por exemplo) como na maioria das operações unitárias empregadas na Engenharia Química, como: filtração, destilação, absorção e adsorção em colunas recheadas, secagem e reações catalíticas em leitos fixos e fluidizados.

Os reatores tubulares de leito fixo de paredes aquecidas ou resfriadas são frequentemente usadas na indústria para promover reações catalíticas heterogêneas gás-sólido altamente exotérmicas ou endotérmicas. Porém, o projeto eficiente e seguro de tais equipamentos exigem a adoção de modelos confiáveis, baseados em experimentos de fluxo resfriado (ou aquecido), e experimentos cinéticos, que permitem simular situações representando diversas condições experimentais, com a finalidade de se poder fazer uma mudança de geometria ou ampliação de escala de forma segura. Quando se está construindo

um modelo matemático, hipóteses necessitam ser admitidas. Se uma ou mais dessas hipóteses não descrevem adequadamente a física do problema, as predições do modelo tornam-se insatisfatória.

Algumas aplicações de leitos fixos de partículas podem ser encontradas na indústria química e de processamentos de alimentos, alguns exemplos de processos são: colunas de destilação ou extração (produção de etanol, tratamento de resíduos), processos cromatográficos, processos de adsorção (recuperação de aromas), processos de absorção (limpeza de gases, tratamento de água), torres de recheio para resfriamento ou umidificação, secagem (cereais e grãos) e reatores (processos enzimáticos).

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 informações errôneas 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 do modelo matemático adotado. Para tanto, a utilização de valores dos parâmetros que sejam representativos do leito como um todo (valores assintóticos) torna-se uma exigência considerada fundamental.

Vários métodos de estimativa de parâmetros foram propostos e exaustivamente discutidos na literatura, mas sem mencionar o fato de que os coeficientes de transporte de calor dependem do comprimento do leito, ou seja, que em geral eles apresentam um decaimento à medida que a altura do leito poroso aumenta, quando se ajusta o modelo matemático adotado aos perfis radiais a cada altura isoladamente (são os efeitos térmicos de

entrada). Então, cada método pode produzir valores diferentes para os coeficientes mesmo na ausência de erros experimentais (Iordanidis, 2004 ; Nield, 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 contudo, os estudos estão limitados ao uso de geometria circular e poucos são os trabalhos que assumem condições de contorno para o fluido na entrada do reator e propriedades termofísicas variáveis. Desta forma fica evidente a necessidade de serem apresentadas soluções mais amplas e rigorosas para o problema em questão.

O aspecto da modelagem, assim como as hipóteses admitidas no estudo da transferência de calor em leitos fixos tem sido motivo de várias controvérsias, visto que os trabalhos em sua grande maioria fazem uso do modelo pseudo – homogêneo a um e a dois parâmetros e usam uma condição de contorno térmica na entrada do leito tipo plana, quando em determinadas condições experimentais, este perfil é dependente da posição radial. Apesar de vários modelos terem sido apresentados, sempre considerando reator com geometria cilíndrica, e uma gama de dados terem sido publicados, ainda não há consenso sobre o fenômeno do efeito de entrada sobre os valores dos coeficientes de transporte.

Mais recentemente Oliveira (2004), estudou a transferência de calor em reatores cilíndrico elíptico, contudo seu trabalho está limitado ao problema em regime permanente e avaliando o efeito da velocidade do gás e calor de reação na transferência de calor.

Procurando contribuir nesta área de atuação, este trabalho busca contribuir fortemente no entendimento desses fenômenos, por meio do uso de um modelo mais realístico (tridimensional transiente) e com a imposição de condições de contorno térmica variável na entrada do reator, além de inovar no estudo da distribuição de temperatura no interior do

reator, com geometria que varia de um canal retangular até um cilindro circular, inclusive cilindro elíptico. É pretensão deste trabalho, estudar o problema, incluindo efeitos tais como porosidade variável, transferência de calor nas paredes do reator e tipo de material com o qual o reator será construído, visando sua otimização. Neste sentido, esta pesquisa é incipiente.

Sendo assim, os objetivos deste trabalho são:

a) Desenvolver um modelo matemático tridimensional transiente no sistema de coordenadas cilíndrico elíptica, aplicadas a um leito poroso (reator cilíndrico elíptico), que descreve a distribuição de temperatura no interior do mesmo, considerando propriedades termofísicas variáveis, e incluindo condições de contorno do fluido na entrada;

b) Apresentar a solução numérica tridimensional para o problema de transporte de calor transiente no interior de um reator leito fixo com forma cilíndrica elíptica utilizando-se o método dos volumes finitos;

c) Desenvolver um código computacional no ambiente do Software Mathematica ® para o modelo adotado (utilizando o método dos volumes finitos), que seja capaz de considerar várias possibilidades de condições de operação que se deseje para o leito e reator, incluindo também aspectos do material usado na construção do reator.

d) Avaliar os efeitos geométricos e de construção do reator, condições de contorno, porosidade, temperatura e velocidade do gás, sobre a transferência de calor e distribuição de temperatura dentro do leito.

## **CAPÍTULO 2**

### **REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

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

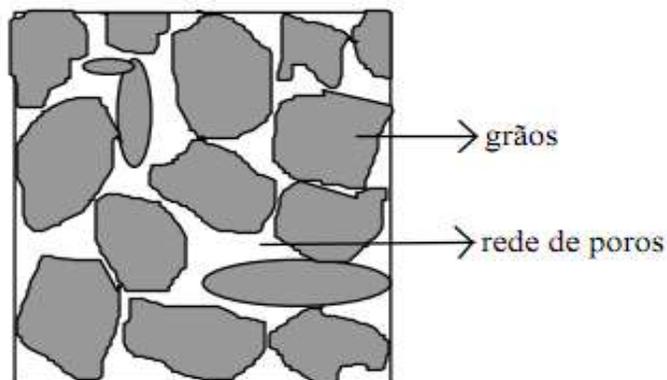
#### **2.1 Meios porosos**

##### **2.1.1 Conceitos gerais**

Um meio poroso pode ser considerado como uma fase sólida contínua que contém muitos espaços vazios, ou poros, em seu interior. São exemplos às esponjas, tecidos, papel, areia e cascalho, tijolos, filtros e os leitos empacotados, ou de recheios, usado na indústria química nas operações de absorção, troca iônica, destilação, extração líquido.

Muitos materiais são porosos, mas os espaços vazios não se comunicam entre si, impedindo que um fluido escoe através deles. Por exemplo, os recipientes de poliestireno, os preservativos e as caixas de isopor contêm muitos poros, mas, devido à estrutura de “cela fechada” dos plásticos, eles não possuem interconexão, formando então uma excelente barreira ao escoamento de fluidos. Uma pilha de areia, contudo, tem menos poros que um recipiente de poliestireno expandido, mas seus poros são interconectados, de modo que os fluidos podem atravessá-los facilmente.

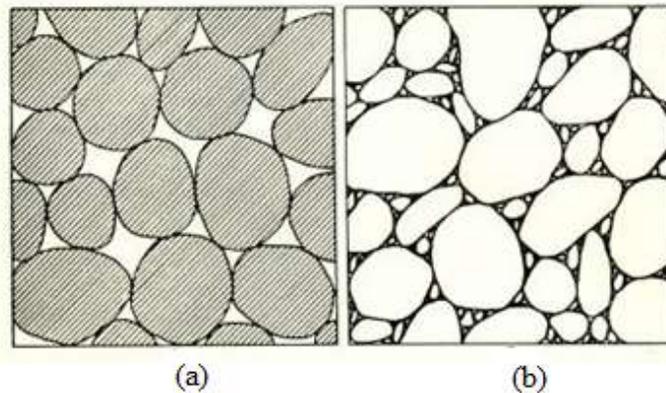
A distribuição de tamanhos de poros é uma das formas mais comuns para caracterizar um meio poroso (Figura 2.1). O estudo em meios porosos, definidos como meio sólido que contém espaços vazios em seu interior vem despertando interesse em diversos campos da ciência e da engenharia. Este estudo é aplicado em mecânica dos solos, hidrologia, engenharia petrolífera, purificação de água, filtragem industrial, geração de energia, refrigeração, engenharia têxteis e diversas outras áreas de atuação.



**Figura 2.1: Representação esquemática de um meio poroso. Fonte: Mendes (1997)**

Avaliando-se a Figura 2.2, podemos ver como a granulométrica e disposição dos grãos estão relacionados com a porosidade. Na Figura 2.2a tem-se uma amostra

granulométrica mais bem distribuída que a da Figura 2.2b, de maneira que os grãos menores preenchem os vazios deixados por grãos de diâmetro maiores, o que conferem a amostra da esquerda uma porosidade menor que a Figura 2.2b.



**Figura 2.2: Representação de distribuição da porosidade (a) granulometria bem distribuída (b) granulometria mal distribuída. Fonte: Mendes (1997)**

Assim, os meios porosos podem ser classificados em função de sua estrutura como granulares ou fibrosos. Os granulares são usualmente modelados como um conjunto de partículas ou grãos, de forma esférica ou não, dispostas regular ou randomicamente, e representam a grande maioria dos meios porosos. Já os fibrosos são modelados como um conjunto de inclusões muito longas, chamadas de fibras, que podem ser naturais ou sintéticas, retas ou curvas, estando randomicamente dispostas ou em malhas regulares. São exemplos de meios porosos: leitos, rochas porosas, agregados fibrosos como tecidos e filtros, e partículas catalíticas contendo microsporos extremamente pequenos, Mendes (1997).

Devido a grande complexidade dos meios porosos reais, fica muito difícil descrevê-los geometricamente de forma precisa. Em teoria, um meio poroso é especificado pelas

equações analíticas que definem o espaço entre os poros. Para objetivos práticos, estas equações são impossíveis de se descrever. Algumas aproximações geométricas são então consideradas, de modo a tornar possível o estudo do meio, obtendo-se características muito próximas das reais.

Diz-se que um meio poroso é homogêneo quando a resistência ao escoamento é a mesma em qualquer ponto e segundo uma direção. A homogeneidade é relativa e depende das dimensões intrínsecas dos materiais. Quando a resistência ao escoamento é igual em todas as direções o meio poroso pode considerar-se isotrópico. A grande maioria dos meios porosos naturais não são isotrópicos, são anisotrópicos. Anisotrópico diz-se de um corpo fisicamente homogêneo, mas cujos valores de certas propriedades físicas e químicas variam com a direção. Os corpos cristalizados são geralmente anisotrópicos.

Darcy (1856) divulgou em Dijon, França, o primeiro trabalho experimental referente ao escoamento em meios porosos, como resultado de suas observações sobre o fluxo de água através de meios de areia de varias espessuras. De seus estudos, Darcy concluiu que a velocidade média, referente à área total do leito, é diretamente proporcional à pressão motora e inversamente proporcional a espessura do meio. Este princípio ficou perpetuado como “Lei de Darcy” e se aplica a uma única fase fluida percolando um meio poroso em escoamento lento, Scheidegger, (1974); Bear, (1988); Dullien, (1979).

Häring et al. (2010), estudaram a influência da poeira sobre a transferência de calor em um reator de leito fixo, para determinar a razão deste efeito. Um reator de leito fixo de escala laboratorial foi construído e os perfis de temperatura transiente medidos em diferentes posições no leito fixo. Foi utilizado no estudo experimental um sistema de três fases (sólido, gás, sólido). Os dados medidos foram avaliados por meio de um modelo modificado de duas fases com balanços térmicos distintos para um sólido pseudo homogêneo e uma fase gasosa que foram resolvidos por aproximação analítica e um método numérico utilizando um programa comercial (Aspen Personalizado Modeler).

Observou-se que o coeficiente de transferência de calor diminui 6%, em comparação com os resultados sem poeira.

### 2.1.2 Porosidade

A porosidade é uma das propriedades mais básicas de um meio poroso (Yu e Standish, 1991). Em um leito poroso existem vazios (zonas sem partículas). Assim, porosidade ( $\epsilon$ ) é definida como a razão entre o volume do leito que não está ocupado com material sólido e o volume total do leito. Porosidade indica a porcentagem do volume de vazios em relação ao volume total (Figura 2.3).

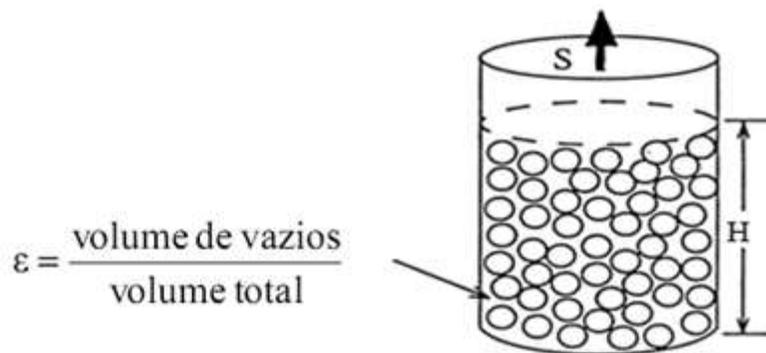


Figura 2.3: Distribuição de partículas no leito do reator e porosidade. Fonte: Mendes (1997).

Observando a distribuição do leito de partículas mostrado na Figura 2.3, pode-se montar a seguinte tabela:

**Tabela 2.1: Distribuição de partículas em leito poroso**

	Vazio	Sólido
Fração	$\varepsilon$	$(1 - \varepsilon)$
Volume	$\varepsilon(SH)$	$(1 - \varepsilon)(SH)$
Massa	$\varepsilon(SH)\rho_s$	$(1 - \varepsilon)(SH)\rho_s$

Além disso pode-se estabelecer uma relação entre porosidade e as densidades do leito, das partículas e do fluido.

A densidade aparente é obtida pela Equação (2.1):

$$\rho_{\text{leito}} = \frac{m_{\text{total}}}{V_{\text{total}}} \quad (2.1)$$

A massa total é igual à massa de sólidos mais a massa de fluido, assim a massa total e o volume total são dadas pela Equação:

$$m_{\text{total}} = (1 - \varepsilon)(SH)\rho_s + \varepsilon(SH)\rho_f \quad (2.2)$$

$$V_{\text{total}} = SH \quad (2.3)$$

Das Equações (2.1) (2.2) e (2.3), pode-se escrever:

$$\varepsilon = \frac{\rho_{\text{leito}} - \rho_s}{\rho_f - \rho_s} \quad (2.4)$$

onde:  $SH$  é o volume total do leito,  $\epsilon SH$  é o volume disponível para fluxo (volume de vazios), e  $(1 - \epsilon) SH$  é o volume ocupado pelas partículas sólidas.

Em muitos estudos constatou-se que a porosidade de leitos compostos por misturas de partículas é dependente da forma como os leitos são formados. Devido à natureza aleatória das misturas de partículas esféricas assim como aos diferentes métodos de obtenção dos empacotamentos, estes apresentam uma oscilação no valor da porosidade, mesmo em misturas monocomponente (MacDonald et al., 1991 ; Dixon et al. 1978).

Os efeitos de parede, por exemplo, observam-se quando o diâmetro das partículas é próximo do diâmetro da coluna utilizada para a construção do leito e são desprezáveis quando o diâmetro da coluna é pelo menos dez vezes superior ao diâmetro das partículas (Mota et al., 2001). Este efeito deve-se à formação de um empacotamento ordenado junto às paredes da coluna (Dixon, 1998).

Nas zonas em que os efeitos de parede são desprezíveis, os valores de porosidade típicos para misturas monocomponente do tipo folgado situa-se no intervalo 0,4 a 0,42, enquanto para o empacotamento do tipo denso esse intervalo é de, aproximadamente, 0,36 a 0,38 (Dixon e VanDongeren 1998). A porosidade mínima depende da forma e tamanho das partículas (granulométrica) e geralmente aumenta com o aumento do diâmetro das mesmas.

## **2.2 Reatores**

Reatores são espaços físicos delimitados, onde processos físicos, químicos ou biológicos são conduzidos em condições controladas, visando atingir um propósito. Eles podem ser classificados como ideais e não ideais.

Reatores ideais são aqueles para os quais se desenvolve um modelo matemático específico a partir de condições pré-estabelecidas e que aplicado às condições reais se ajusta adequadamente. Já os reatores não ideais são aqueles para os quais é necessário um tratamento matemático específico em função de peculiaridades de reação e/ou reator (Fogler, 2005).

### 2.2.1 Reatores ideais básicos (foco nas reações homogêneas)

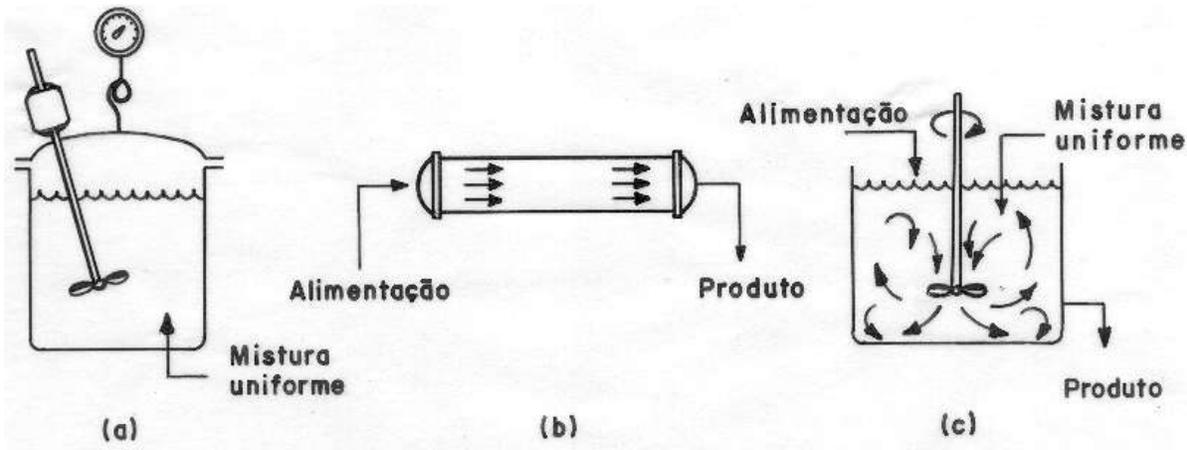
Os principais reatores ideais são descritos a seguir:

a) **Reator descontínuo** (ou batelada) – é um tanque com agitação mecânica no qual todos os reagentes são introduzidos no reator em uma única vez. Em seguida são misturados e reagem entre si. Após um tempo, os produtos obtidos são descarregados de única vez deste reator (Figura 2.4a).

b) **Reator tubular** – é um tubo sem agitação no qual todas as partículas escoam com a mesma velocidade na direção do fluxo (Figura 2.4b).

c) **Reator de mistura** – é um tanque agitado com escoamento contínuo e sem acúmulo de reagentes ou produtos, Figura 2.4c, sendo operado de acordo com as seguintes características:

- composição uniforme dentro do reator;
- composição de saída é igual à composição do interior do reator;
- taxa da reação é a mesma em todo o reator, inclusive na saída.



**Figura 2.4: Principais Tipos de Reatores Ideais. (a) Reator descontínuo (ou batelada) (b) Reator tubular (c) Reator de mistura. Fonte: Fogler (2005).**

## 2.2.2 Reatores para reações heterogêneas

A fluidização é a melhor e mais moderna técnica à disposição da engenharia para efetuar o contato eficiente entre sólidos e fluidos, daí sua grande importância não só como operação unitária, mas principalmente no seu uso em reatores químicos. O contato entre sólidos e fluidos pode ser realizado por três tipos básicos de técnicas. São elas:

- Leito fixo
- Leito móvel
- Leito fluidizado

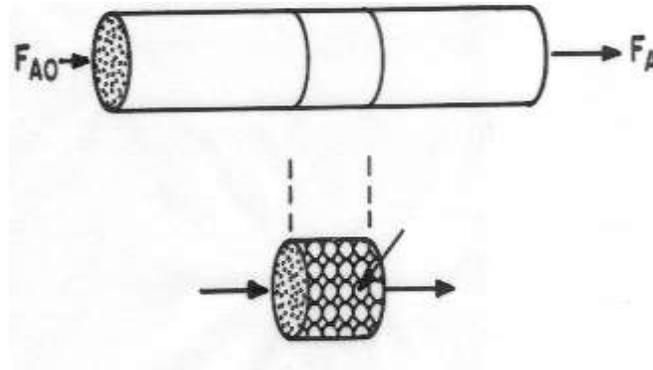
No primeiro tipo, o leito fixo, o sólido (geralmente catalisador particulado), em partículas grandes (5 cm a 10 cm), ou menores (2 mm), é colocado dentro do reator de forma empacotada, com o fluido circulando através dos vazios do leito, de baixo para cima ou de cima para baixo. A impossibilidade de se conseguir um escoamento uniforme do fluido no leito poroso, os problemas mecânicos envolvidos na renovação dos sólidos, os caminhos preferenciais do fluido, e finalmente as obstruções frequentes, são alguns dos

problemas desse tipo de técnica de contato. Tudo isso leva a baixos coeficientes de transferência de calor e de massa no sistema (Levenspiel, 2000).

O leito móvel apresenta um avanço significativo com relação à primeira técnica. Nessa técnica de contato sólido-fluido, o sólido em partículas relativamente grandes é continuamente alimentado pelo topo do leito e removido pela base. O fluido pode subir ou descer pelo leito. Os sólidos movem-se semelhantemente ao movimento efetuado pela areia em uma ampulheta. Apesar de proporcionar um melhor contato sólido-fluido, não se consegue melhorias significativas nos coeficientes de transferência de calor e de massa. O leito móvel apresenta, em linhas gerais, os mesmos problemas apresentados pelo leito fixo, ainda que em menor grau de extensão. Finalmente, a técnica de leito fluidizado introduziu significativa melhora no contato entre as fases reagentes, proporcionando elevação dos coeficientes de transferência de calor e de massa, e tornando o meio reacional com características pseudo-homogêneas, (Levenspiel, 2000).

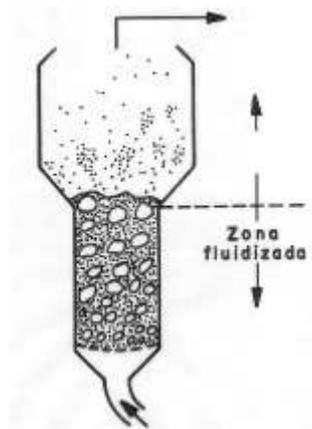
Para promover reações heterogêneas, os reatores podem ser de leito fixo ou de leito fluidizado. O reator de leito fixo é um reator onde normalmente o meio reacional se encontra em uma fase (líquida ou gasosa) e existe um catalisador na fase sólida. Normalmente, também é chamado de reator catalítico de leito fixo, onde o catalisador sólido é constituído de inúmeras e pequenas partículas depositadas ao longo do comprimento de um tubo. O esquema desse reator é apresentado na Figura 2.5. Dos três tipos de reatores ideais apresentados, este reator (PBR) assemelha-se ao reator tubular. A diferença é o “recheio” de partículas sólidas que existem nele.

A transferência de calor em leito fixo está presente em diversos equipamentos de interesse industrial, dentre os quais pode-se destacar reatores químicos e bioquímicos, evaporadores e regeneradores de calor dentre outros, (Ströher et al., 2004).



**Figura 2.5: Esquema de um reator de leito fixo. Fonte: Fogler (2000).**

O reator de leito fluidizado (Figura 2.6) funciona de forma similar ao de leito fixo. Entretanto na prática trata-se de um tubo vertical onde pequenas partículas sólidas são suspensas em uma corrente de fluxo ascendente. A velocidade do fluxo é suficiente para fazer as partículas flutuarem, mas não grande o suficiente para arrastá-las para fora do reator. Em função deste efeito, as partículas sólidas movem-se aleatoriamente no fluido e permitem que se forme uma excelente mistura entre ambos (partículas sólidas e fluido).



**Figura 2.6: Esquema de um reator de leito fixo fluidizado. Fonte: Fogler (2005).**

Geng et al. (2009) realizaram simulações tridimensionais para examinar o comportamento do fluxo de gás em leitos de partículas de material de tabaco em um secador de leito fluidizado. O modelo de Euler foi utilizado para estudar a distribuição de partículas no secador de leito fluidizado. Os resultados desse estudo indicaram que as partículas de tabaco geralmente se concentram na região perto da parede, e que existe uma concentração máxima de partículas no tubo de alimentação.

Von Zedtwitz et al. (2007) desenvolveram um modelo numérico de transferência de calor para a gaseificação do vapor de carvão num leito fluidizado contido num reator tubular de quartzo exposto diretamente à radiação térmica concentrada. Na solução do problema foi aplicado o método de Monte Carlo na troca radiativa dentro das paredes do reator de quartzo, as partículas do leito, e a fase de gás. As equações da conservação da massa e energia em estado estacionário requeridas pela transferência de calor e cinética química são formuladas e resolvidas iterativamente pelo método dos volumes finitos e algoritmo de Newton. Os perfis de temperatura, a composição do produto gasoso e as conversões foram calculados numericamente e comparados com os valores medidos experimentalmente em um reator tubular de quartzo irradiado diretamente e testados em um simulador solar de elevado fluxo., Estes autores observaram que em temperaturas acima 1450 K, a composição do gás é constituído por uma mistura quase equimolar de  $H_2$  e  $CO$ , com menos de 5% de  $CO_2$ . Foi também observado que o calor é transferido para as partículas predominantemente por radiação térmica e para as partículas do gás por convecção, uma vez que a absorção de radiação por partículas sólidas é três ordens de grandeza mais elevadas do que a da fase gasosa.

Rashidi et al. (2011) investigaram o desempenho de reatores de leito fixo e leito fluidizado para a produção de nanotubos de carbono de parede simples (SWNT). Em ambos os reatores, os nanotubos de carbono de parede simples foram produzidas por decomposição química catalítica de vapor (CCVD) de metano sobre nanocatalisadores Co-

Mo/MgO em duas condições operacionais diferentes. As amostras sintetizadas foram caracterizadas por MET, TGA e espectroscopia Raman. Verificou-se que o desempenho de um leito fluidizado na síntese de nanotubos de carbono é muito melhor do que a de um leito fixo. A qualidade dos nanotubos de carbono obtidos a partir do leito fluidizado foi significativamente mais elevada do que a partir do leito fixo e o anterior, com a proporção ID / IG de 0,11, enquanto que o último com a proporção ID / IG de 0,71. Além disso, o rendimento de nanotubos de carbono no leito fluidizado era de 92% em peso, ao passo que no leito fixo era de 78% em peso. Estas vantagens dos reatores de leito fluidizado para a síntese de nanotubos de carbono, podem ser atribuída a mais do espaço disponível para o crescimento dos nanotubos de carbono e de perfis de concentração e temperatura mais uniforme.

Biomateriais podem ser convertidos em combustíveis sólidos, líquidos e gasosos, através de processos de conversão termoquímica ou bioquímica. Conversão termoquímica de biomateriais granulares é difícil por causa de sua natureza física e um dos processos adequados é a gaseificação em leito fluidizado. Neste sentido Subramanian et al. (2011), desenvolveram modelos para estudar a influência das propriedades do biomaterial e as condições de operação sobre a energia produzida e a concentração molar dos constituintes de gasosos e de saída. Nesse estudo foram selecionados a medula da fibra de coco, casca de arroz e pó de serragem, sendo o gás de síntese gerado usando-se um gaseificador de leito fluidizado. Analisaram-se a composição do produto e a percentagem dos gases monóxido de carbono e dióxido de carbono ficou no intervalo de 8,24 a 19,55 e 10,21 a 17,14, respectivamente. O efeito da razão de equivalência (0,3, 0,4 e 0,5) e tempo de reação (em intervalo de 10 min) sobre os constituintes do gás foi estudado. O rendimento de gás de miolo de coco, casca de arroz e do pó da serragem foram encontrados dentro do intervalo de 1,98 a 3,24; 1,79 a 2,81 e 2,18 a 3,70 Nm<sup>3</sup> kg<sup>-1</sup>.

Gordillo e Belghit (2011) desenvolveram um modelo cinético de gaseificação da biomassa carvão-vapor usando um reator de leito fluidizado borbulhante que usava o calor nuclear como fonte de energia. O modelo é capaz de prever os perfis de temperatura e concentração e das fases sólidas e gasosa. O modelo robusto calcula os perfis em estado estacionário e dinâmico. Três gaseificadores em escala piloto foram simulados para que fosse observado o efeito da relação H/D e a dinâmica do leito de aquecimento na cinética de gaseificação. Estes parâmetros são muito importantes para aumentar a reação de deslocamento de água e gás, e, por conseguinte, a produção de hidrogênio. Para o sistema modelado, o hidrogênio é o principal produto da gaseificação (somente vapor), como relatado na literatura. O rendimento de dióxido de carbono obtido foi menor do que os de outros trabalhos, mas essas diferenças são devidas principalmente à fonte de energia (nenhuma combustão é realizada) e a gaseificação (sem oxigênio em sólidos) foi usado como fonte de carbono.

### **2.2.3 reatores de leito fixo**

Reatores de leito fixo também conhecido como reator de leito recheado, é um reator tubular recheado com partículas de catalisador sólido, geralmente usado para catalisar reações gasosas. A reação química ocorre na superfície do catalisador. A vantagem de utilizar um reator de leito fixo é a maior conversão por massa de catalisador quando comparado com outros reatores catalíticos. A taxa de reação é baseada mais na quantidade de massa do catalisador sólido do que no volume do reator. Este sistema apresenta as mesmas dificuldades de controle de temperatura que outros reatores tubulares apresentam.

O escoamento de fluidos (líquidos ou gases) através de leitos de partículas (leito fixo) é uma prática muito comum. Em muitas operações industriais a fase fluida escoar através de uma fase sólida particulada (fase sólida estacionária). As colunas empacotadas como são

também chamados estes equipamentos são usadas para reações com catalisadores, adsorção de um soluto, absorção, leito de filtração, dentre outras aplicações.

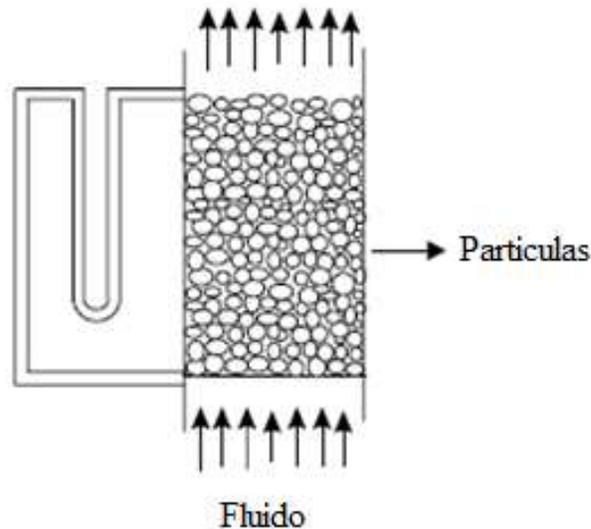
Na literatura, o termo leito fixo é utilizado para descrever o leito móvel descendente dado que normalmente o topo do leito é mantido a um nível razoavelmente constante Reddy et al., (1995). Os reatores verticais são os mais competitivos entre os reatores de leito fixo.

Guardo et al. (2005) afirmam que a modelagem e simulação são ferramentas essenciais no projeto e *scale-up* de reatores de leito fixo, e como as exigências de desempenho destes equipamentos estão crescendo, requer-se que o modelo proposto possa definir não somente a distribuição espacial de perfis envolvidos, mas também da temperatura e da velocidade dentro do reator.

Dentre os trabalhos que abordam o estudo de transferência de calor em leito fixo percolado por líquidos destacam-se os trabalhos de Lamine et al. (1992) e Ferreira et al. (2002).

Um dos principais objetivos de um leito de partículas (recheio) é promover o contato íntimo entre as fases envolvidas no processo (fase fluida gasosa e/ou líquida com a fase estacionária/partículas ou entre diferentes fases fluidas). O material de empacotamento pode ser: esferas, partículas irregulares, cilindros, diversos tipos de materiais disponíveis para comercialização.

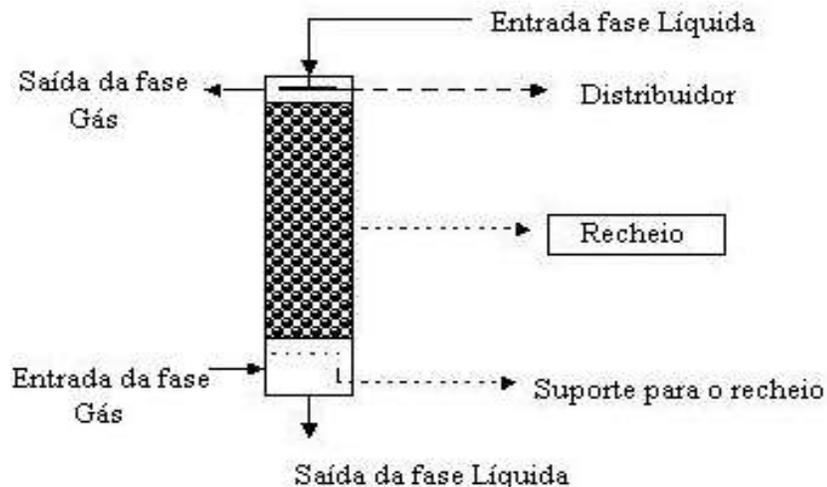
Em um leito fixo, o fluido passa através de um leito de partículas (Figura 2.7), em baixas velocidades, apenas percolando através dos espaços vazios existentes entre as partículas estacionárias.



**Figura 2.7: Leito fixo ou coluna de recheio. Fonte: Geankoplis (1993).**

No escoamento bifásico, as colunas de recheio são muito usadas para provocar o contato íntimo entre dois fluidos imiscíveis ou parcialmente miscíveis, podendo ser um gás e um líquido, ou dois líquidos. Portanto, nos escoamentos em meios porosos as fases que estão em contato podem ser: Gás-sólido; Gás-líquido; Líquido-sólido e Líquido-líquido.

Normalmente usa-se fluxo contra-corrente com o gás ou líquido mais leve entrando pelo fundo e o segundo fluido por cima da coluna (Figura 2.8). Para que se obtenha uma boa velocidade de transferência por unidade de volume da coluna, deve-se escolher um recheio que promova uma elevada área interfacial entre as duas fases e um alto grau de turbulência nos fluidos, com uma menor queda de pressão.



**Figura 2.8: Torre de recheio. Fonte: Geankoplis (1993).**

Reatores de leito fixo são extensamente utilizados em processos químicos, como na produção de gás de síntese tanto na reforma de gás natural ou de nafta, amônia, ácido sulfúrico e metanol. Já os reatores de leito catalítico são os mais usados para a fase gasosa na produção de produtos químicos em grande escala. Na prática várias configurações de reatores são encontradas. Os modelos de reatores contínuos são classificados como pseudo-homogêneos e heterogêneos. Assim, 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 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; não há resistência de transferência de massa e de calor. Nesse modelo, a natureza heterogênea do leito é considerada apenas indiretamente ou implicitamente através de parâmetros efetivos. Ainda, estes modelos pseudo-homogêneos não consideram gradientes de temperatura e concentração entre a fase gasosa e as partículas de catalisador. As restrições de transporte no interior e na superfície das partículas de catalisador e os efeitos cinéticos são implicitamente levados em conta pelo modelo mediante o uso de expressões cinéticas efetivas ou pseudo-homogêneas (Christensen, 1996; Giordano, 1991). Já o modelo heterogêneo toma as equações da conservação para ambas as fases ocorrendo separadamente. Este modelo considera os gradientes de temperatura e concentração no interior da partícula do catalisador, utilizando as restrições de difusão intrapartícula e interfacial na superfície externa do mesmo. O modelo heterogêneo é baseado em expressões cinéticas intrínsecas (Christensen, 1996; Froment e Bischoff, 1990). Os parâmetros de transporte utilizados são função das velocidades de escoamento, distribuição de tamanho de poros do catalisador e outros.

Devido à importância industrial dos reatores catalíticos de leito fixo, estes vêm sendo intensamente estudados, sendo que a determinação dos coeficientes de troca térmica é fundamental para modelagem e otimização de reatores não adiabáticos.

Van-Dal et al. (2009) apresentou uma avaliação da influência da vazão de alimentação e da temperatura do aquecedor sobre o coeficiente global de troca térmica. O coeficiente global de troca térmica foi determinado a partir de dados experimentais obtidos na ausência de reação química empregando-se um reator em escala de bancada. O leito

catalítico foi aquecido por uma fornalha elétrica e preenchido com um catalisador industrial com fase ativa constituída por níquel (57%  $NiO$  suportado em alumina (43%). Para a avaliação do coeficiente global, utilizou-se um modelo unidimensional pseudo-homogêneo sem dispersão axial. O coeficiente global de troca térmica mostrou uma tendência de crescimento do seu valor com o aumento da temperatura e da vazão para a faixa experimentada.

Os reatores podem operar adiabaticamente com múltiplos leitos adiabáticos ou com troca de calor (Andrigo et al., 1999). Em alguns casos a temperatura na entrada do leito é suficiente para alcançar especificações desejadas para a performance do reator. Esta operação é denominada auto-térmica, o que oferece benefícios econômicos através da diminuição da energia requerida no processo. A Figura 2.9 mostra um esquema de um reator adiabático de leito fixo.



**Figura 2.9: Reator adiabático de leito fixo. Fonte: Andrigo et al., (1999).**

Para reatores adiabáticos, quando os efeitos de convecção de calor e de transferência de massa ocorrem na mesma direção, não é necessário considerar modelos bidimensionais. Caso ocorra em um leito adiabático uma reação levemente exotérmica, o modelo pseudo-homogêneo é adequado para descrever o comportamento deste reator. Os modelos “plug-flow” são satisfatórios para descrever a performance de leitos de comprimentos elevados, altas velocidades, baixos efeitos de calor e pequenas dimensões das partículas catalíticas. O número de Peclet é um número adimensional relevante no estudo de fenômenos de transporte em fluxos fluidos. Ele é definido pela razão entre o calor transferido por convecção e o calor transferido por condução. Assim, valores altos do número de Peclet indicam a predominância do transporte de calor convectivo enquanto que valores baixos indicam a predominância do transporte condutivo. O número de Peclet (Pe) relaciona os fenômenos de dispersão com convecção em um reator, quando o Pe assume valores elevados o sistema se comporta como “plug-flow”.

$$Pe = \frac{\text{comprimento} \times \text{velocidade} \times \text{densidade} \times \text{calor específico}}{\text{condutividade térmica}}$$

Izadbakhsh e Khorasheh (2011) desenvolveram um modelo de reator para a previsão do comportamento de desativação do catalisador poroso OMP (Proteína de membrana externa) num reator de leito fixo. Efeito do coque sobre o transporte molecular na estrutura porosa de SAPO-34 (peneira molecular) foi simulado utilizando a teoria da percolação. Os efeitos térmicos da reação foram considerados no modelo e o perfil de temperatura da corrente de gás no reator foi previsto. A perda prevista na atividade do catalisador com o tempo apresentou boa concordância com os dados experimentais.

Entre os pesquisadores que se preocuparam em analisar a equivalência entre os modelos a uma e a duas fases, pode-se citar: Dixon e Cresswell (1979), Nield (2002), Gupta e Nag (2002), Ismail e Henríquez (2002) e Wang et al. (2003).

Leitos empacotados com partículas de catalisador é o mais amplamente tipo de reator usado para reagentes em fase gasosa na produção em grande escala de produtos químicos básicos e intermediários. Reactores de leito fixo também têm sido cada vez mais utilizados no tratamento de substâncias nocivas e tóxicas: a remoção dos óxidos de nitrogênio dos gases de centrais de combustão e purificações dos gases de escape de automóveis representam, de longe, as aplicações mais amplamente empregadas.

A análise desses reatores vai da micro escala, com o sedimento e sua estrutura de poros, onde o fenômenos de reação e difusão ocorrem, à macro escala, com sua geometria e as características do leito do reator, onde os fenômenos convecção de calor e de massa, dispersão e transferência ocorrem.

Andrigo et al., (1999) mostra os fenômenos que ocorrem em reatores de leito fixo abrangendo, desde a pequena escala de sedimento único, onde a reação e difusão são concorrentes, à macro escala do conjunto do equipamento, onde a dispersão e a transferência de calor desempenham papel importante. São examinados também os principais modelos usados para descrever o comportamento dos reatores de leito fixo e a dependência da maioria dos parâmetros relevantes a partir das características geométricas do reator e das propriedades físicas dos gases de reação.

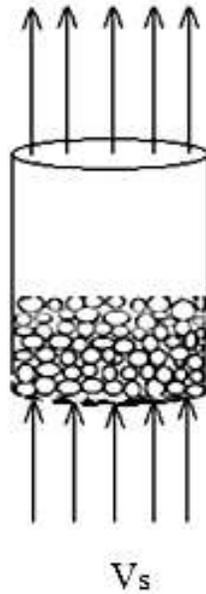
Castro et al. (2006) em seu trabalho propõem a utilização de um reator de leito fixo para a produção de biodiesel utilizando óxido de estrôncio como catalisador para a reação de transesterificação do óleo de babaçu, usando-se o metanol como agente transesterificante. Verificou-se que o biodiesel produzido num reator de leito fixo facilita a remoção do catalisador, pois o mesmo não fica no meio reacional. O aumento da percentagem do catalisador proporciona um melhor rendimento da reação. Isso foi justificado pela diminuição da viscosidade e pelas curvas termogravimétricas.

Os primeiros reatores anaeróbios de leito fixo foram denominados filtros anaeróbios. Os estudos sobre este tipo de reator iniciaram-se com a publicação de Young e Mc Carty (1969). Eles operaram um filtro alimentado por esgoto sintético e obtiveram uma eficiência superior a 80% em termos de redução.

Zaiat e Abreu (2008) relatam a avaliação do desempenho de um reator anaeróbio-aeróbio, preenchido com espuma de poliuretano, para tratamento de esgoto sanitário. Inicialmente, foram testados diferentes tempos de retenção hidráulica (TDH) no reator que operou apenas em condições anaeróbias. Em seguida, foi operado o reator combinado anaeróbio-aeróbio. O melhor resultado para o reator em operação exclusivamente anaeróbia foi para o TDH de 10 horas, no qual se conseguiu reduzir a DQO de  $389 \pm 70$  mg/L para  $137 \pm 16$  mg/L. Para o reator anaeróbio-aeróbio, a DQO foi reduzida de  $259 \pm 69$  mg/L para  $93 \pm 31$  mg/L para TDH de 12 h (6 h no estágio anaeróbio e 6 h no aeróbio). A comparação de todos os resultados obtidos evidenciou a importância do pós-tratamento aeróbio na remoção de parcela de matéria orgânica não removida em tratamento unicamente anaeróbio.

Gomes e Jorge (2007) avaliaram a transferência de calor em reator catalítico de leito fixo, contemplando a avaliação de parâmetros térmicos. Este estudo consistiu na avaliação do coeficiente global, interno e externo, onde foi explorado a sua dependência com a vazão e temperatura. Na avaliação dos coeficientes de transferência de calor, utilizou-se uma modelagem realizada mediante um modelo unidimensional pseudo-homogêneo. Os resultados mostraram uma tendência crescente dos coeficientes de transferência de calor com o aumento da temperatura e da vazão de ar.

A Figura 2.10 mostra o fluxo de um fluido através de um tubo contendo pequenas partículas esféricas. Esta situação é chamada de "fluxo através de um leito fixo".



**Figura 2.10: Reator adiabático de leito fixo.**

A equação de Ergun pode ser usada para prever a queda de pressão ao longo do comprimento do leito fixo, dada a velocidade do fluido, do recheio, e viscosidade e densidade do fluido. Esta equação expressa o fator de atrito em uma coluna empacotada como uma função do número de Reynolds, como segue:

$$f_p = \frac{150}{Re_p} + 1,75 \quad (2.5)$$

Sendo:

$$f_p = \frac{\Delta p}{L} \frac{d_p}{\rho V_s^2} \left( \frac{\varepsilon^3}{1-\varepsilon} \right) \quad (2.6)$$

$$Re_p = \frac{d_p V_s \rho}{(1-\varepsilon)\mu} \quad (2.7)$$

Nas equações (2.5) a (2.7),  $\Delta p$  é a queda de pressão através do leito,  $L$  é o comprimento do leito (não da coluna),  $d_p$  é o diâmetro equivalente esférico da partícula,  $\rho$  é a densidade do fluido,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido,  $V_s$  é a velocidade superficial (isto é, a velocidade que o fluido teria através do tubo vazio na mesma vazão volumétrica), e  $\varepsilon$  é a fração de vazio do leito (porosidade do leito).

Um parâmetro bastante importante em um reator de leito fixo é a queda da pressão sofrida pela fase gasosa ao atravessar o reator.

A equação de Ergun fornece a queda de pressão ao longo do comprimento do leito fixo dado alguma velocidade de fluidos. Nesta equação, a queda de pressão depende do tamanho da partícula, o comprimento do leito, viscosidade do fluido e densidade do fluido.

Carvalho e Coury (2005) determinaram a influência da parede do leito fixo na predição da perda de carga em leitos com razão  $D/d_p$  (diâmetro do leito/diâmetro da partícula) variadas. Para isso, fez-se uso da equação de Ergun corrigida para os dois parâmetros mais influenciados pela parede do leito, a porosidade ( $\varepsilon$ ) e a velocidade do fluido ( $v$ ). Os ensaios de permeabilidade consistiram na passagem de ar atmosférico, à temperatura ambiente, através de um leito de esferas de vidro, observando-se os valores da queda de pressão, com auxílio do manômetro em U, para cada valor de vazão ajustado no rotâmetro. Os resultados gerados, a partir dos dados colhidos em laboratório, mostraram que para baixas razões  $D/d_p$  a não consideração da influência da parede do leito fixo pode acarretar na superestimação da perda de carga.

### **2.3 Transferência de calor em leitos fixos percolados por um fluido**

O desenvolvimento de modelos matemáticos e métodos computacionais para a simulação de escoamentos em meios porosos é um tema de grande interesse devido à sua aplicação em diversas áreas da engenharia e ciências aplicadas. Porém, a simulação de

fenômenos de escoamentos em meios porosos é difícil devido à complexa natureza da geometria e topologia de seu espaço e da heterogeneidade na composição química de suas paredes internas.

Os modelos matemáticos são desenvolvidos para representar o comportamento atual de um sistema. O grau de complexidade de um modelo depende dos objetivos da simulação, estes podem ser: projeto, controle e otimização e *scale-up*. Nas ciências é necessário abstrair-se da complexidade do mundo real e em seu lugar substituir uma situação mais ou menos idealizada que seja mais simples de se analisar (Levenspiel, 2000).

O conceito de modelagem de reatores pode ser descrito como uma forma de traduzir dados existentes e previsões usuais para novas condições. Tais previsões podem envolver:

- melhor entendimento do sistema, o qual pode facilitar melhoramentos no projeto;
- previsões para a dinâmica do sistema objetivando o controle de processos;
- otimização das condições de operação do estado estacionário;
- análise do efeito de matérias-primas diferentes, catalisadores e condições de reação na distribuição do produto;
- scale-up a partir de uma planta piloto.

No processo de modelagem assume-se que existe uma relação verdadeira entre as variáveis de saída e todas as variáveis de entrada do processo. A grande maioria dos processos da indústria química ou indústria do refino do petróleo é baseada em reações catalíticas realizadas em reatores de leito fixo, fluidizado ou reatores de leito transportado (Froment, 1990).

O estudo da transferência de calor em leitos fixos percolados por um fluido é fundamental para a compreensão dos fenômenos térmicos em leitos particulados presentes em importantes operações unitárias nas indústrias químicas, alimentos e farmacêuticas, ou em reatores químicos e bioquímicos, onde o conhecimento do perfil de temperatura é crucial para a previsão da cinética das reações e simulação dos processos reacionais (Thoméo, et al., 2004).

Dentre os mecanismos que podem estar envolvidos na transferência de calor em leitos fixos, tem-se condução de calor através das partículas sólidas; condução de calor através de fluido estagnado em contato com as partículas; convecção entre partícula e fluido; dispersão térmica na fase fluida; condução de calor entre parede e partículas; convecção entre parede e fluido (Thoméo, 1990; Laurentino, 2007).

Existe duas formas de se modelar o fenômeno térmico em leitos fixos: através da modelação de duas fases ou da modelação de uma fase, também conhecida como pseudo-homogênea. A modelação de duas fases é mais abrangente e propõe um equacionamento matemático próprio para cada fase, por considerar que tanto a fase sólida como a fluida, têm uma dinâmica própria na transferência de calor. Entretanto, esse modelo é de difícil aplicação prática, devido aos problemas na obtenção experimental da temperatura de cada fase (Thoméo, 1990).

Na modelação pseudo-homogênea, o meio poroso é tratado como um contínuo, o que é válido para leitos onde a razão do diâmetro do tubo ( $D$ ) pelo diâmetro da partícula ( $d_p$ ) é alta (maior que 10), de modo que a remoção de uma partícula individual causaria uma mudança quase imperceptível no perfil radial de porosidade. Nesta situação, as propriedades hidrodinâmicas, térmicas e de massa são suficientemente uniformes através da maior parte da coluna, de tal forma que as partículas e os interstícios podem ser tratados

como um meio contínuo. Isto facilita significativamente a análise de uma variedade de casos e ajuda na coleta de dados experimentais.

Segundo Dixon e Van Dongeren (1998), a transferência de calor em leito fixo pode ser descrita por um modelo pseudo-homogêneo unidimensional, usando-se um coeficiente global de transferência de calor radial, baseado na diferença entre a temperatura do leito e a temperatura de parede.

Ströher (2004) estudou a dependência do coeficiente global de transferência de calor em relação à vazão e ao diâmetro de partícula. Os valores do coeficiente global foram obtidos a partir do ajuste de um modelo pseudo-homogêneo, unidimensional sem dispersão axial, às medidas de temperatura obtidas em um leito de esferas de aço, percolado por água e aquecido pela parede.

Ferreira et al. (2002) estudaram a transferência de calor em leito fixo percolado por água, recheado com partículas poliméricas, e demonstraram que os parâmetros térmicos podem ser estimados através de medidas experimentais de temperatura, a partir de sensores localizados axial e radialmente em um leito. Seus resultados revelam que a condutividade efetiva axial pode ser desprezada nesse tipo de sistema.

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 foram apresentados por Yagi e Wakao (1959), Gunn e Khalid (1975), Dixon et al. (1978), e Giudici (1990). Porém, nenhum deles considera o perfil de temperatura do fluido na entrada dependente da posição radial.

Além destes, outros pesquisadores estudaram soluções analíticas ou numéricas da equação da condução/convecção de calor em reatores de leito fixo, entre eles pode-se citar: Li e Finlayson, (1977); Lerou e Froment, (1977); Dixon et al. (1978); Dixon (1985); Thoméo (1990); Borkink e Westerterp (1992); Thoméo et. al. (2004) e Oliveira et al. (2003). Contudo, todos os estudos limitam-se ao uso de geometria cilíndrica e poucos são os trabalhos que assumem propriedades termofísicas do fluido variáveis com a temperatura e condição de contorno térmica na entrada do reator variável com a posição radial.

Oliveira (2004) em seu trabalho desenvolveu e apresentou 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. Ele utilizou uma modelagem matemática com 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 para resolver as equações diferenciais que representavam o fenômeno físico baseou-se no método dos volumes finitos. 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.

Oliveira et al. (2008) apresentaram um modelo matemático tridimensional matemáticos para prever a transferência de calor dentro de um trocador de calor de leito fixo cilindro elíptico. O modelo considera velocidade uniforme e perfis de temperatura da fase fluida na entrada do reator, e propriedades térmicas e físicas constantes. A condição de contorno convectiva na superfície do equipamento é assumido como sendo constante. A

equação da energia, escrito em coordenadas cilíndricas elípticas, foi discretizada utilizando um método de volumes finitos, considerando uma formulação totalmente implícita, e esquema WUDS de interpolação. Os resultados numéricos dos perfis de temperatura adimensional no interior do reator leito fixo em estacionário são apresentados e interpretados. Para validar o modelo, os resultados numéricos obtidos para o cilindro circular são comparados com resultados analíticos da literatura e uma boa concordância foi obtida.

Oliveira et al. (2011) apresentaram um trabalho experimental onde foram abordados medidas pontuais (axiais e radiais) de temperatura num reator de leito fixo de 5,7 cm de diâmetro interno, compactado com partículas cilíndricas de óxido de zinco (catalisador industrial) com 3,0 mm de diâmetro médio. O reator é percolado axialmente (de baixo para cima) por uma corrente de ar quente com número de Reynolds variando entre 105 e 185. A temperatura do ar na entrada do reator foi mantida constante e uniforme em 70°C e a parede do leito mantida a 22,5°C por água de refrigeração, que circulava por uma camisa cilíndrica que envolvia o reator. As medidas de temperatura foram realizadas em quatro posições radiais (0,0; 0,855; 1,710; 2,565 cm) ao longo do raio do tubo e em dez posições axiais do leito compactado (1,0; 2,0; 3,0; 4,0; 5,0; 6,0; 7,0; 8,0; 9,0; 10,0 cm). Os dados de temperatura coletados foram tratados estatisticamente. Também foi proposto um modelo matemático para descrever a temperatura do sistema fluido-partícula ao longo da posição radial, que segundo o autor, se ajustou muito bem aos dados experimentais. Ainda no trabalho, verificou-se que ocorreram elevados gradientes de temperatura em ambas as direções axial e radial, até mesmo próximo ao centro do reator, e que estes gradientes de temperatura sofrem forte influência da velocidade mássica do fluido percolante.

Por outro lado, o estudo da transferência de calor em leito fixo pode ser realizado tanto em regime transiente quanto em regime permanente, porém em cada caso, o requisito considerado de importância capital, que deve sempre ser obedecido, é a obtenção da forma

mais fidedigna possível dos perfis de temperatura no interior do leito. Embora, a rigor, as técnicas utilizadas para a obtenção dos perfis de temperatura independam do regime em questão, no caso do regime transiente as coisas se complicam um pouco mais, pois existe a necessidade de uma aquisição frequente e contínua dos perfis de temperatura ao longo do tempo, que podem ser influenciadas pela inércia térmica do tipo de sensor usado no sistema de aquisição de dados (Oliveira et al., 2011).

Pelegri et al. (2004) analisou a transferência de calor em regime transiente em cilindros de seção transversal elíptica submetidos à condição de contorno de Dirichlet. Para tanto, utilizou um sistema de coordenadas ortogonais adequado a fim de facilitar a aplicação das condições de contorno. Os resultados obtidos para o cilindro de seção retangular foram comparados com aqueles obtidos através da solução analítica (solução exata) e verificou uma excelente concordância entre os mesmos. Soluções da equação da energia foram obtidas, através da aplicação da Técnica da Transformada Integral Generalizada. Observou-se que a expansão que determina o potencial da temperatura apresentava convergência lenta no início do transiente. Constantes de tempo definidas em relação à temperatura máxima e a média foram calculadas para diversas razões de aspecto destes cilindros. Finalizando, observou que a TTIG foi aplicada com sucesso para a obtenção de solução de problemas difusivos relativamente complexos.

## CAPÍTULO 3

### MODELAGEM MATEMÁTICA

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

#### 3.1 Modelagem da transferência de calor

O ponto de partida para a modelagem do fenômeno da transferência de calor em reator de leito fixo é a equação geral da conservação de energia; dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda \phi) + \nabla \cdot (\lambda \vec{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \phi \nabla \phi) + S^\phi \quad (3.1)$$

onde na Equação (3.1) tem-se:  $\lambda = \rho \varepsilon c_p$ ;  $\phi = T$  e  $\Gamma^\phi = k$ .

As variáveis  $\rho$ ,  $c_p$ ,  $T$  e  $k$  são respectivamente: a massa específica, o calor específico, a temperatura e condutividade térmica do fluido, enquanto  $\varepsilon$ , é a porosidade do leito. Nesta equação,  $\vec{v}$  é o vetor velocidade e  $S^\phi$ , representa o termo fonte, dado por:

$$S^\phi = \beta T \frac{DP}{Dt} + \mu \Phi + \dot{q} \quad (3.2)$$

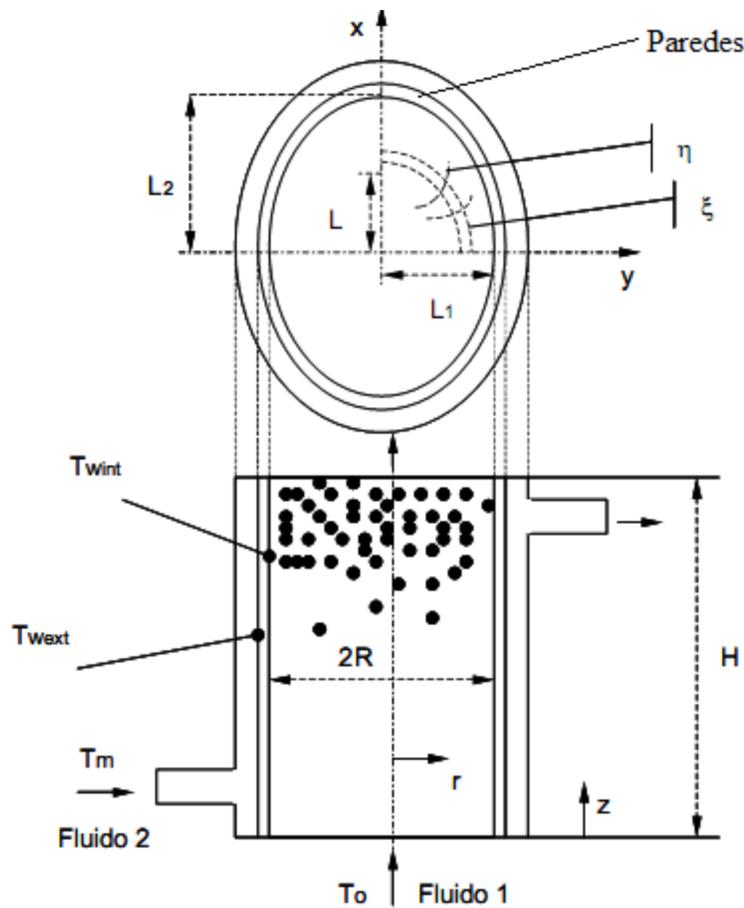
Na Equação (3.2),  $\beta$  é o coeficiente de expansão térmica,  $\frac{DP}{Dt}$  é a derivada material (substantiva) da pressão,  $\mu\Phi$  representa o termo de dissipação viscosa e  $\dot{q}$  é a geração interna de energia que é proveniente de reações químicas.

### 3.2 O reator cilíndrico elíptico

A geometria largamente adotada e amplamente estudada (por razões da prática industrial) é o cilindro circular. Oliveira (2004), abordou em seu trabalho 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.

Esta pesquisa está direcionada para o estudo da transferência de calor em meios porosos contido em tubos cilíndricos elípticos, percolados por fluidos na direção axial, onde a temperatura do fluido na alimentação é diferente daquela que prevalece na parede do leito poroso. O problema físico consiste no escoamento de fluido através de um reator de leito

fixo cilíndrico elíptico recheado de partículas, conforme ilustrado na Figura 3.1. Dependendo da temperatura do fluido 1 na entrada, a parede do reator pode estar sendo resfriada ou aquecida por um fluido 2 que escoar na parte anelar.



**Figura 3.1:** Esquema de um reator de leito compacto cilíndrico elíptico. Fonte: Adaptado de Oliveira (2004).

Para se 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  $(\tau, \varphi, z)$  são apresentadas a seguir (Magnus et al., 1966):

$$x = L \cosh \tau \cos \varphi, \quad y = L \sinh \tau \sin \varphi \quad \text{e} \quad z = z \quad (3.3 \text{ a-c})$$

onde na Figura (3.1) têm-se:  $L$  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-se as seguintes variáveis:

$$\xi = \cosh \tau \quad \text{e} \quad \eta = \cos \varphi \quad (3.4)$$

Substituindo-se as variáveis da Equação (3.4) nas Equações (3.3 a-c), obtêm-se as relações diretas entre os dois sistemas de coordenadas. Assim, têm-se as seguintes relações para  $x, y$  e  $z$ , em função de  $\xi$  e  $\eta$ :

$$x = L \xi \eta, \quad y = L \sqrt{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)} \quad \text{e} \quad z = z \quad (3.5 \text{ a-c})$$

O domínio de validade das variáveis  $\xi, \eta$ , e  $z$  no sistema cilíndrico elíptico, é dado por:

$$1 \leq \xi \leq \frac{L_2}{L}, \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq z \leq H \quad (3.6 \text{ a-c})$$

Fazendo-se a eliminação da variável  $\varphi$ , nas Equações 3.3 e 3.4, gera-se 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  $(x = \pm L, y = 0)$ . Observa-se que a superfície  $\xi = 1$  é uma linha reta que une a origem  $(x = 0)$  e o ponto focal  $(x = +L)$  (Oliveira, 2004).

Ainda, Oliveira (2004) mostra que a eliminação da variável  $\tau$ , nas Equações 3.3 e 3.4, produz uma família de curvas no plano  $xy$ , correspondendo a diferentes valores constantes do parâmetro  $\eta$ , 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  $x > +L$ .

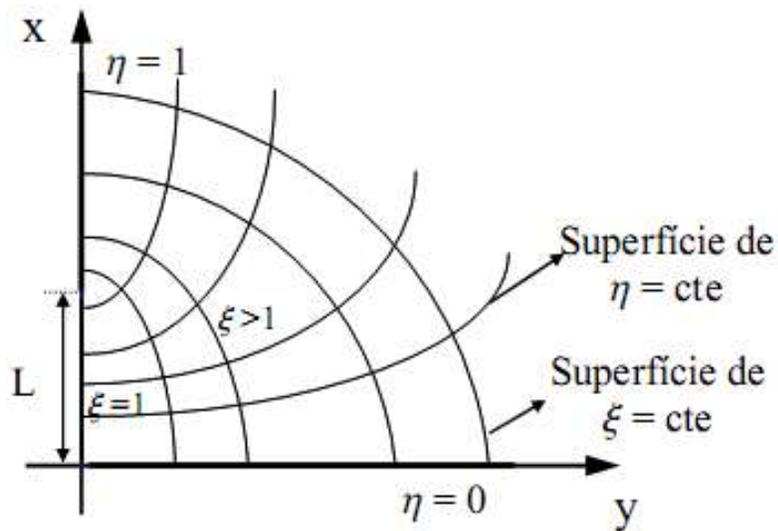


Figura 3.2: Sistema de coordenadas cilíndricas elípticas. Fonte: Oliveira(2004).

### 3.3 Equação da energia no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas

A equação geral da energia em termos de temperatura para qualquer sistema de coordenadas e regime transiente, aplicada a um gás perfeito, é dada por (Bird et. al, 2004):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon c_p T) + \nabla \cdot (\rho \varepsilon c_p \vec{v}T) = \frac{DP}{Dt} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \psi + \dot{q} \quad (3.7)$$

onde 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 escolha de um sistema de coordenadas em particular está condicionada à forma geométrica do sistema em estudo e conduzirá a uma melhor adequação e validade dos resultados obtidos (Lima, 1999).

A obtenção da equação da energia, no novo sistema de coordenadas segue a metodologia utilizada por Maliska (2004), 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  $\Phi$ , escrita de maneira que seja aplicada ao sistema de coordenadas cilíndricas elíptico  $(\xi, \eta)$ , é dada por:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \varepsilon c_p \frac{\Phi}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \rho \varepsilon c_p \tilde{U} \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \rho \varepsilon c_p \tilde{V} \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho \varepsilon c_p \tilde{W} \Phi \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \alpha_{11} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{12} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{13} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \alpha_{21} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{22} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{23} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left( \alpha_{31} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{32} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{33} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \frac{\mu \Psi}{J} + S^\Phi
\end{aligned} \tag{3.8}$$

O termo  $S^\Phi$  na Equação (3.8) representa a geração interna de energia que é calculada por:

$$S^\Phi = \frac{\dot{q}^\Phi}{J} \tag{3.9}$$

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

$$J^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial z} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial z} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial z} \end{vmatrix} \tag{3.10}$$

A determinação da inversa do jacobiano fornece como resultado:

$$J^{-1} = -\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \tag{3.11}$$

Os coeficientes  $\alpha_{ij}$  ( $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$ ) da Equação (3.8) são dados por:

$$\alpha_{11} = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)} \quad \alpha_{22} = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)} \quad \alpha_{33} = \frac{L^4 (\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \tag{3.12 a-b-c}$$

onde, para  $i \neq j$ , têm-se:  $\alpha_{ij} = 0$

Na Equação(3.8), as variáveis  $\tilde{U}$ ,  $\tilde{V}$  e  $\tilde{W}$  são as componentes contravariantes do vetor velocidade e são calculadas por:

$$\tilde{U} = \frac{1}{J} \left( \frac{\partial \xi}{\partial t} + u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} + w \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) \quad (3.13)$$

$$\tilde{V} = \frac{1}{J} \left( \frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} + w \frac{\partial \eta}{\partial z} \right) \quad (3.14)$$

$$\tilde{W} = \frac{1}{J} \left( \frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} + w \frac{\partial z}{\partial z} \right) \quad (3.15)$$

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

$$u_{\xi} = \tilde{U} \left( u \frac{\partial x}{\partial \xi} + v \frac{\partial y}{\partial \xi} + w \frac{\partial z}{\partial \xi} \right) \quad (3.16)$$

$$u_{\eta} = \tilde{V} \left( u \frac{\partial x}{\partial \eta} + v \frac{\partial y}{\partial \eta} + w \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) \quad (3.17)$$

$$u_z = \tilde{W} \left( u \frac{\partial x}{\partial z} + v \frac{\partial y}{\partial z} + w \frac{\partial z}{\partial z} \right) \quad (3.18)$$

Das relações (3.13) a (3.18), obtêm-se:

$$\tilde{U} = -L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} u_{\xi}, \quad \tilde{V} = -L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} u_{\eta} \quad \text{e} \quad \tilde{W} = -\frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} u_z \quad (3.19 \text{ a-c})$$

Fazendo-se  $\Phi = T$ ,  $\Gamma^\Phi = k$  e substituindo-se o jacobiano, os coeficientes  $\alpha_{ij}$ , quando  $i = j, U, V, W$  e rearranjando os termos, a Equação (3.8) passa a ter a seguinte forma:

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

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) é escrita num sistema de coordenadas cilíndricas elíptica da seguinte forma, (Oliveira, 2004):

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

O modelo é transiente, no entanto os resultados são em regime permanente.

Como a equação (3.21) é de segunda ordem em relação à posição e de primeira ordem em relação ao tempo, sua solução exige no mínimo quatro condições de contorno e uma condição inicial. Tais condições são mostradas abaixo:

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

$$T(\xi = L_2 / L, \eta, z, t) = f_2(\eta, z, t) \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \eta}(\xi, \eta = 0, z, t) = 0 \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \eta}(\xi, \eta, z = H, t) = 0 \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \eta}(\xi, \eta, z = 0, t) = f_3(\xi, \eta, t) \quad (3.26)$$

o 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.

Assim, as variáveis de interesse na modelagem tais como o gradiente de  $\Phi$ , as áreas de troca de calor e o volume do corpo no novo sistema de coordenadas, podem ser obtidas, usando-se as relações matemáticas fornecidas por Magnus et al. (1966), Brodkey (1967), Abramowitz e Stegun (1970) e Kreyszing (1988), como segue:

a) Volume diferencial do corpo:

$$dV = \frac{1}{\hat{U} \hat{V} \hat{W}} d\xi d\eta dz = J d\xi d\eta dz \quad (3.27)$$

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

$$dS_\xi = \frac{1}{\hat{V} \hat{W}} d\eta dz = L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)}} d\eta dz \quad (3.28)$$

$$dS_\eta = \frac{1}{\hat{U} \hat{W}} d\xi dz = L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} d\xi dz \quad (3.29)$$

$$dS_z = \frac{1}{\hat{U} \hat{V}} d\xi d\eta = J d\xi d\eta \quad (3.30)$$

c) Gradiente da variável  $\Phi$ :

$$\nabla\Phi = \left( \hat{U} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}; \hat{V} \frac{\partial\Phi}{\partial\eta}; \hat{W} \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) = \left( \frac{1}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi}; \frac{1}{L} \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial\Phi}{\partial\eta}; \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) \quad (3.31)$$

Onde:

$$\frac{1}{\hat{U}^2} = \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial z}{\partial \xi} \right)^2 \quad (3.32)$$

$$\frac{1}{\Delta V} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta}\right)^2 \quad (3.33)$$

$$\frac{1}{\Delta W} = \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial z}\right)^2 \quad (3.34)$$

são os coeficientes métricos, no qual o produto destes parâmetros dá como resultado o jacobiano(J) da transformação.

### 3.4 Solução numérica do transporte de calor para o cilindro de geometria elíptica

#### 3.4.1 Formulação geral

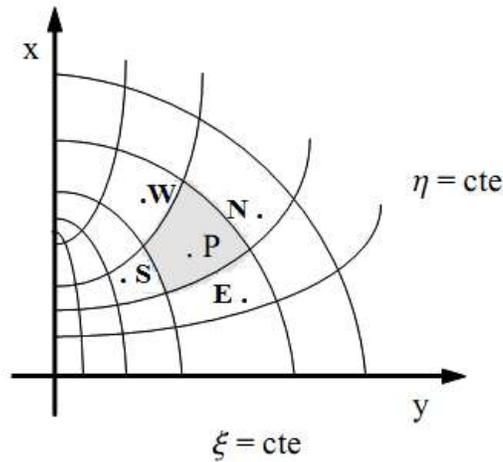
Com o avanço das técnicas computacionais e das velocidades de processamento das máquinas atuais, têm aumentado cada vez mais a busca pela análise de tais problemas, por meio de soluções numéricas. Vários métodos numéricos estão disponíveis na literatura, e vêm sendo largamente utilizados, dentre os quais, pode-se destacar: diferenças finitas, elementos de fronteira, elementos finitos, colocação ortogonal, a Técnica da Transformada Integral Generalizada-TTIG e volumes finitos. As discussões e detalhamento 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); Maliska, (2004) e Cotta (1998). A preferência pelo uso do método dos volumes finitos (MVF) neste trabalho se justifica pelo fato de que com o uso deste 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), o lógico é que

as equações aproximadas (que formam o sistema linear) representem a conservação em nível de volumes elementares.

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, 2004).

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. Assim, 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  $\xi$  e  $\eta$  constantes, demarcando uma vista do volume de controle associado ao ponto nodal P. No plano xy os pontos N, S, E e W, são seus pontos nodais vizinhos, norte, sul, leste e oeste, respectivamente. Já a Figura 3.4 mostra as faces do volume de controle N, S, E e W, em torno do ponto P, as dimensões do volume de controle,  $\Delta\xi$ ,  $\Delta\eta$  e  $\Delta z$ , bem como as distâncias entre o ponto nodal P e os pontos adjacentes.



**Figura 3.3: Configuração numérica do problema físico. Fonte: Oliveira (2004).**

Oliveira (2004) mostra em seu trabalho que o sistema de coordenadas cilíndricas elípticas da Figura 3.3 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). Conforme esse autor, a face de um volume de controle através do qual se calcula o fluxo de uma variável  $\Phi$ , deve ser normal à linha que une os dois pontos nodais adjacentes (a linha PN, na Figura 3.4, exemplifica esta afirmativa). A Equação (3.21) 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, 2004). Outra 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 (3.21), no volume e no tempo, assumindo-se uma formulação totalmente implícita e o esquema WUDS como função de interpolação espacial para os fluxos difusivo e convectivo, sobre o volume de controle (Figura 3.4), gera a

equação discretizada que será válida para todos os pontos internos da malha. Então, para um ponto nodal P do volume de controle, têm-se:

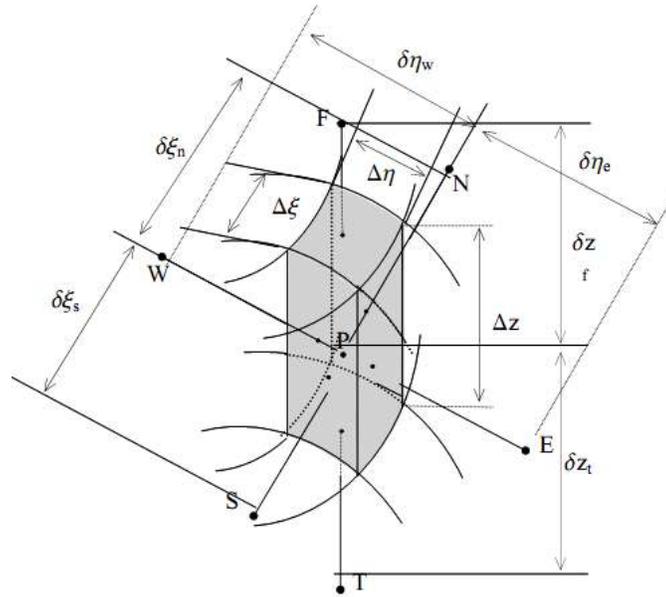


Figura 3.4: Volume de controle da malha numérica. Fonte: Oliveira (2004).

a) Variação da energia interna (Termo temporal)

$$\iint_{t \ v} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\rho \epsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] dv dt \quad (3.35)$$

b) Transporte de calor convectivo (Termo convectivo)

$$\iint_{t \ v} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\rho \epsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] dv dt \quad (3.36)$$

c) Transporte difusivo de calor

$$\iint_{t,v} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \sqrt{\frac{(\xi^2-1)}{(1-\eta^2)}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right] dv dt \quad (3.37)$$

$$\iint_{t,v} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \sqrt{\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-1)}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] dv dt \quad (3.38)$$

$$\iint_{t,v} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) k}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial z} \right] dv dt \quad (3.39)$$

d) Geração da energia interna em P sobre o volume de controle

$$\left[ \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \dot{q}^\phi}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} \right] \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \quad (3.40)$$

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

Face Norte:

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_n \cong \beta_n k_n \left( \frac{T_N - T_P}{\delta \xi_n} \right) \quad (3.41)$$

Face Sul:

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_s \cong \beta_s k_s \left( \frac{T_P - T_S}{\delta \xi_s} \right) \quad (3.42)$$

Face Leste:

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_e \cong \beta_e k_e \left( \frac{T_E - T_P}{\delta \eta_e} \right) \quad (3.43)$$

Face Oeste:

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_w \cong \beta_w k_w \left( \frac{T_P - T_W}{\delta \eta_w} \right) \quad (3.44)$$

Face Frontal:

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_f \cong \beta_f k_f \left( \frac{T_F - T_P}{\delta z_f} \right) \quad (3.45)$$

Face Posterior:

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_t \cong \beta_t k_t \left( \frac{T_P - T_T}{\delta z_t} \right) \quad (3.46)$$

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

$$\Phi_f = \left(\frac{1}{2} + \alpha_f\right)\Phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_f\right)\Phi_F \quad \text{e} \quad \Phi_t = \left(\frac{1}{2} + \alpha_t\right)\Phi_T + \left(\frac{1}{2} - \alpha_t\right)\Phi_P \quad (3.47 \text{ a-b})$$

Os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  que aparecem nas Equações (3.41 a 3.46) e (3.47 a-b) são constantes ponderadoras, calculadas por:

$$\alpha = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2} \quad (3.48)$$

$$\beta = \frac{1 + 0,005Pe^2}{1 + 0,05Pe^2} \quad (3.49)$$

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

$$Pe = \frac{\rho u_z c_p \delta z}{\Gamma^\Phi} \quad (3.50)$$

Assim, o esquema de interpolação linear é usado quando o número de  $Pe$  é pequeno, garantindo assim uma boa precisão; para números de Peclet elevados,  $Pe \geq 2$ , é usado o esquema *upwind* que garante o transporte da variável na direção do escoamento.

Após a integração dos termos da Equação (3.21), usando-se as derivadas nas interfaces dos volumes de controle, Equações (3.47 a-b), a função de interpolação espacial para os fluxos convectivos de transporte de calor, 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:

$$A_P T_P = A_E T_E + A_W T_W + A_N T_N + A_S T_S + A_F T_F + A_T T_T + A_P^0 T_P^0 + B \quad (3.51)$$

Onde:

$$A_E = \sqrt{\frac{(1-\eta_e^2)}{(\zeta_p^2-1)}} \frac{k_e \beta_e \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_e} \quad ; \quad A_W = \sqrt{\frac{(1-\eta_w^2)}{(\zeta_p^2-1)}} \frac{k_w \beta_w \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_w} \quad (3.52 \text{ a-b})$$

$$A_N = \sqrt{\frac{(\zeta_n^2-1)}{(1-\eta_p^2)}} \frac{k_n \beta_n \Delta \eta \Delta z}{\delta \xi_n} \quad ; \quad A_S = \sqrt{\frac{(\zeta_s^2-1)}{(1-\eta_p^2)}} \frac{k_s \beta_s \Delta \eta \Delta z}{\delta \xi_s} \quad (3.53 \text{ a-b})$$

$$A_F = \frac{L^2 (\xi_p^2 - \eta_p^2)}{\sqrt{(\xi_p^2-1)(1-\eta_p^2)}} \left[ (0,5 - \alpha_f) \rho_f \varepsilon_f C_{p_f} u_z + \frac{\beta_f k_f}{\delta z_f} \right] \Delta \xi \Delta \eta; \quad (3.54 \text{ a-b})$$

$$A_T = \frac{L^2 (\xi_p^2 - \eta_p^2)}{\sqrt{(\xi_p^2-1)(1-\eta_p^2)}} \left[ (0,5 - \alpha_t) \rho_t \varepsilon_t C_{p_t} u_z + \frac{\beta_t k_t}{\delta z_t} \right] \Delta \xi \Delta \eta; \quad (3.55)$$

$$A_P^0 = \frac{L^2 (\xi_p^2 - \eta_p^2)}{\sqrt{(\xi_p^2-1)(1-\eta_p^2)}} \frac{\rho^0 C_p^0 \varepsilon^0 \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t}; \quad (3.56)$$

$$B = \dot{q} \frac{L^2 (\xi_p^2 - \eta_p^2)}{\sqrt{(\xi_p^2-1)(1-\eta_p^2)}} \Delta \xi \Delta \eta \Delta z; \quad (3.57)$$

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + A_F + A_T + \frac{L^2 (\xi_p^2 - \eta_p^2)}{\sqrt{(\xi_p^2-1)(1-\eta_p^2)}} \frac{\rho C_p \varepsilon \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t} \quad (3.58)$$

Os coeficientes  $A_K$ , com  $K \neq P$ , representam as contribuições dos transportes difusivo e convectivo da variável  $\Phi$ , provenientes dos pontos nodais vizinhos em direção ao ponto P. Os efeitos da variável  $\Phi$  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 Equação (3.51) tem sua aplicação restrita para qualquer ponto interno do domínio computacional. 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-se a condição de contorno à equação aproximada do volume de fronteira.

A Equação (3.8), discretizada para os volumes de fronteira, passa a ser escrita na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{J_P} \left[ \frac{\rho_P c_{P_p} \varepsilon_P T_P - \rho_P^0 c_{P_p}^0 \varepsilon_P^0 T_P^0}{\Delta t} \right] + \left[ \rho c_P \varepsilon \frac{u_z}{J} T \Delta \xi \Delta \eta \Big|_f - \rho c_P \varepsilon \frac{u_z}{J} T \Delta \xi \Delta \eta \Big|_t \right] = \\ + \left[ q'' dS_\xi - \left( D_{11} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \Big|_s \right] + \left[ \left( D_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e - \left( D_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w \right] + \end{aligned} \quad (3.59)$$

$$+ \left[ \left( \mathbf{D}_{33} \frac{\partial \Gamma}{\partial z} \right) \Big|_f - \left( \mathbf{D}_{33} \frac{\partial \Gamma}{\partial z} \right) \Big|_t \right] + \frac{\dot{q} \Delta V}{J_P}$$

Onde:

$$D_{11} = \Gamma^\Phi J \alpha_{11} \Delta \eta \Delta z \quad (3.60)$$

$$D_{22} = \Gamma^\Phi J \alpha_{22} \Delta \xi \Delta z \quad (3.61)$$

$$D_{33} = \Gamma^\Phi J \alpha_{33} \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.62)$$

$$\Delta V = \Delta \xi \Delta \eta \Delta z \quad \text{e} \quad \Gamma^\Phi = k \quad (3.63)$$

$$q'' dS_\xi = q'' L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)}} \Delta \eta \Delta z \quad (3.64)$$

Neste procedimento, a discretização do domínio é feita com volumes elementares inteiros. Assim, nunca acontecerá termos uma variável sobre a fronteira, sendo sempre necessário realizar os balanços para todos os volumes, independentemente do tipo de condição de contorno adotada (Maliska, 2004). Uma vez que nestes pontos nodais não existe o coeficiente  $A_N$ , o mesmo deve ser substituído pelo fluxo da variável  $\Phi$  na superfície.

A primeira parcela do primeiro termo do segundo membro da Equação (3.39), 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 (2004), três tipos de condições de contorno são possíveis:  $\Phi$  prescrito; fluxo de  $\Phi$  prescrito e convecção.

a)  $\Phi$  prescrito

Neste tipo de condição de contorno, o valor de  $\Phi$ , será substituído por:

$$q'' dS_{\xi} = \Gamma_n \Phi \frac{(T_n - T_p)}{\delta \xi_n} = k_n \beta_n \frac{(T_n - T_p)}{\frac{\Delta \xi}{2}} \quad (3.65)$$

Onde:  $\Phi_n$  é a variável específica na fronteira.

b) Fluxo de  $\Phi$  prescrito

O valor de “ $\Phi$ ”, neste caso, deve ser substituído pelo valor prescrito do fluxo na fronteira. Ou seja:

$$\Phi'' dS_{\xi} = \text{valor conhecido} = D_{11} \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right|_n \quad (3.26)$$

c) Convecção na interface fluido sólido

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

$$\Phi'' dS_{\xi} = D_{11} \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right|_n = \text{fluxo convectivo, que é função de } \Phi_n. \quad (3.67)$$

A discretização da equação para os volumes de controle situados na região de fronteira, segue o mesmo raciocínio mostrado para os pontos internos do domínio computacional.

A formulação numérica que será utilizada neste trabalho é válida se tiver:

- condição de contorno na parede do reator, constante ou convectiva;
- coeficiente de transporte de calor constantes ou variáveis com a posição;
- 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 da variável  $\Gamma^\Phi$  nas interfaces do volume de controle (Patankar, 1980), quando se consideram problemas com  $\Gamma^\Phi$  variável (Figura 3.5), é assumir uma variação de  $\Gamma^\Phi$  entre o ponto e seus vizinhos em qualquer direção (N, S, E ou W), expressa por:

$$\Gamma_i^\Phi = \left( \frac{\hat{1-f}_i}{\Gamma_P^\Phi} - \frac{\hat{f}_i}{\Gamma_E^\Phi} \right)^{-1} \quad (3.68)$$

Onde:  $\hat{f}_i$  é o fator de interpolação, dado por:

$$\hat{f}_i = \frac{(\delta d)_i^+}{(\delta d)_i} \quad (3.69)$$

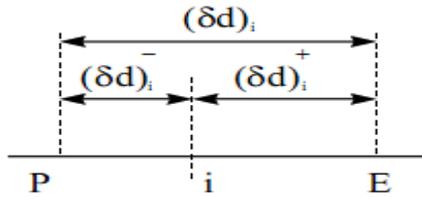


Figura 3.5: Esquema mostrando a posição da interface  $i$  entre os pontos  $P$  e  $E$ .

Fonte: Oliveira (2004).

Se a interface  $i$  situa-se no ponto médio entre os pontos  $P$  e  $E$ , sendo a malha uniforme, então  $\hat{f}_i = 0,5$ , e portanto,  $\Gamma_i^\Phi$  é calculado pela média harmônica de  $\Gamma_P^\Phi$  e  $\Gamma_E^\Phi$ . Assim, têm-se:

$$\Gamma_i^\Phi = \frac{2\Gamma_P^\Phi \Gamma_E^\Phi}{\Gamma_P^\Phi + \Gamma_E^\Phi} \quad (3.70)$$

Esta é uma formulação mais efetiva, uma vez que, se  $\Gamma_P^\Phi$  ou  $\Gamma_E^\Phi$  for nulo, não haverá fluxo de  $\Phi$  e  $\Gamma_i^\Phi$  será também nulo, o que é fisicamente uma realidade.

### 3.4.2 Transporte de calor no interior do reator, condição de contorno convectiva nas superfícies interna e externa da parede do reator, condução de calor na parede do reator e propriedades termofísicas variáveis.

#### 3.4.2.1 Formulação matemática

Na formulação do problema serão utilizadas as seguintes considerações:

- a) O sistema encontra-se em regime estacionário;
- b) Os parâmetros térmicos variam com a posição no leito e com a temperatura;
- c) Existe simetria cilíndrica do perfil de temperatura;
- d) Não ocorre reação química, nem há termo (o) de geração interna de energia;
- e) A porosidade do leito é uniforme ou variável;
- f) A transferência de calor do fluido que percola junto à parede do reator é realizada por condução e convecção no fluido;
- g) A quantidade de calor que chega à parede interna é transferida por condução no interior da parede do reator;
- h) A energia ao chegar à parede externa do reator é transferida por convecção para o fluido refrigerante (fluido 2, apresentado na Figura 3.1) atravessando a camisa de refrigeração.

As condições de contorno na entrada, na saída e nos planos de simetria do reator são dadas da seguinte forma:

- a) Condição de contorno na entrada do reator:

$$T(\xi, \eta, z=0) = T_0 \quad (3.71)$$

- b) Condição de contorno na parede do reator:

$$T\left(\xi = \frac{L_2}{L}, \eta, z, t\right) = T_m \quad (3.72)$$

c) Condição de contorno na saída do reator:

$$\frac{\partial T}{\partial z} (\xi, \eta, z = H, t) = 0 \quad (3.73)$$

d) Condição de contorno nos planos de simetria do reator:

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} (\xi = 1, \eta, z, t) = \frac{\partial T}{\partial \eta} (\xi, \eta = 0, z, t) = \frac{\partial T}{\partial \eta} (\xi, \eta = 1, z, t) = 0 \quad (3.74)$$

Conforme as Figuras 3.1 e 3.6, a condição de contorno na fronteira do reator, é dada por:

$$\begin{aligned} q'' &= -\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_n} + h_{win} (T - T_{win}) = h_{wext} (T_{wext} - T_m) = \\ &= -\frac{k_{wr}}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_n} \end{aligned} \quad (3.75)$$

O subscrito wr na Equação (3.75) significa a localização na parede de reator. Na Figura 3.6, mostra-se a condição de contorno, apresentando-se em detalhes, a direção do fluxo de calor, a espessura da parede, as temperaturas; interna e externa do reator, como também, os coeficientes convectivos de transporte de calor interno e externo.

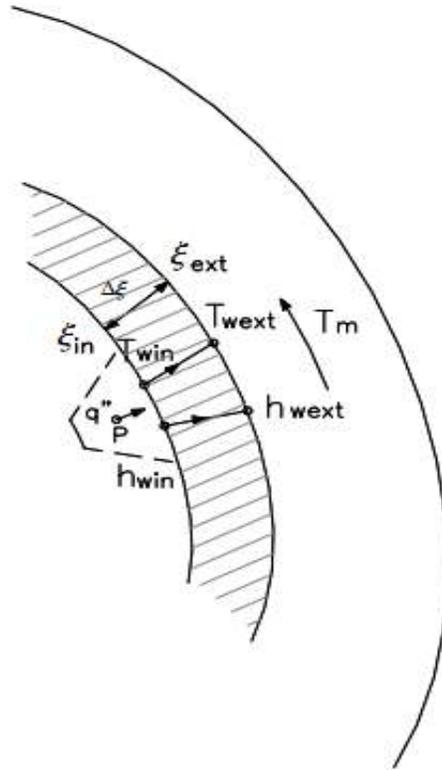


Figura 3.6: Esquema mostrando o fluxo de calor na região da parede do reator.

Fonte: Adaptado de Oliveira (2004).

### 3.4.2.2 Formulação numérica

A formulação numérica para os pontos internos do domínio é obtida usando-se o mesmo procedimento apresentado na obtenção da Equação (3.51). Assim, têm-se:

$$A_P T_P = A_E T_E + A_W T_W + A_N T_N + A_S T_S + A_F T_F + A_T T_T + A_P^0 T_P^0 + B^* \quad (3.76)$$

Sendo os coeficientes  $A_E$ ,  $A_W$ ,  $A_S$ ,  $A_F$ ,  $A_T$  e  $A_P^0$  os mesmos mostrados na Equação (3.51). Os coeficientes  $A_N$  e  $A_P$ , são calculados como segue:

$$A_N = \begin{cases} 0, & \text{para os pontos de fronteiras} \\ \frac{\beta_n k_n}{\delta \xi_n} \Delta \eta \Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(1 - \eta_p^2)}}, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.77)$$

O coeficiente  $A_P$  é calculado por:

$$A_P = \sum A_K + A_P^0 + \overline{SM} \quad (3.78)$$

O termo  $B^*$ , da equação (3.75) calcula-se pela seguinte expressão:

$$B^* = \frac{L \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}} \Delta \eta \Delta z}{\left[ \frac{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{kU}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} U}\right)}{\left(h_{win} + \frac{kU}{\delta \xi_n}\right)} \right]} \quad (3.79)$$

Já o termo  $\overline{SM}$  da Equação (3.78) é calculado pela seguinte expressão matemática:

$$\overline{SM} = \begin{cases} \frac{L \Delta \eta \Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - \eta_p^2)}{(1 - \eta_p^2)}}}{\left[ \frac{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{kU}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} U}\right)}{\left(h_{win} + \frac{kU}{\delta \xi_n}\right)} \right]}, & \text{para os pontos de fronteiras} \\ 0, & \text{para os demais pontos internos} \end{cases} \quad (3.80)$$

Para os pontos de fronteira, utiliza-se a discretização da condição de fronteira dada pela Equação (3.75), de onde obtém-se:

$$\begin{aligned}
 q'' &= \underbrace{-\frac{k}{L}}_{\text{I}} \underbrace{\sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_P^2)}}}_{\text{II}} \underbrace{\frac{(T_P - T_{win})}{\delta \xi_n}}_{\text{III}} + h_{win} (T_P - T_{win}) = \\
 &= \underbrace{-\frac{k_{wr}}{L}}_{\text{IV}} \underbrace{\sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_P^2)}}}_{\text{IV}} \underbrace{\frac{(T_{wext} - T_{win})}{\delta \xi_n}}_{\text{V}} = h_{wext} (T_{wext} - T_m)
 \end{aligned} \tag{3.81}$$

Manipulando-se a Equação (3.81), é possível explicitar a temperatura  $T_{win}$  a partir dos termos (II), (III) e (V). Fazendo-se a substituição de  $T_{win}$  nos termos (II) e (III) desta equação, obtém-se a expressão para o fluxo de calor que atravessa a parede do reator:

$$q'' = \frac{(T_P - T_m)}{\underbrace{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}}\right)}_{\left(h_{win} + \frac{k \hat{U}}{\delta \xi_n}\right)}} \tag{3.82}$$

Onde:  $\hat{U}$  é obtido nas Equações (3.3.32).

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

$$T_{win} = \frac{T_m + T_P \left( \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}} \right)}{\left( 1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}} \right)} \quad (3.83)$$

As equações obtidas na discretização das condições de contorno nos pontos de simetria não participam no conjunto de equações a serem resolvidas. Depois que o sistema de equações é resolvido, sua estimativa é feita. Assim, 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 para as regiões de simetria ( $\eta = 0$ ,  $\eta = 1$  e  $\xi = 1$ ) como na Figura 3.7, tem-se:

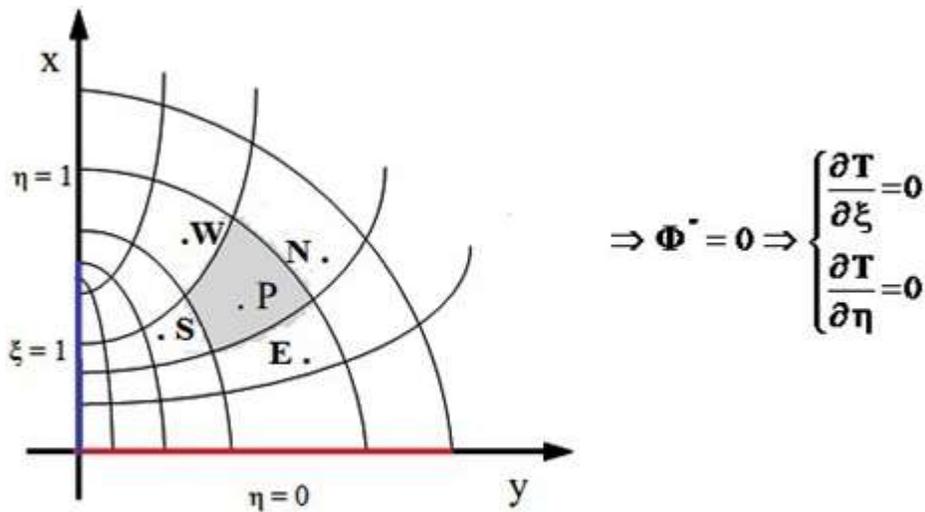


Figura 3.7: Esquema mostrando o fluxo de calor na região de simetria do reator.

Fonte: Adaptado de Oliveira (2004).

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

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

Discretizando-se a expressão (3.84) e evidenciando-se os termos comuns, vem:

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

b) Para pontos localizados em  $\eta = 1$  ( $L < z < L_2$ )

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

Discretizando-se a expressão (3.85), agrupando-se e evidenciando-se os termos comuns, vem:

$$T_W = \left[ 1 + \frac{\left( \frac{k_e}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_P^2-\eta_e^2}} \right)}{\left( \frac{k_P}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_P^2-\eta_w^2}} \right)} \right] T_P - \frac{\left( \frac{k_e}{\delta \eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi_P^2-\eta_e^2}} \right)}{\left( \frac{k_P}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi_P^2-\eta_w^2}} \right)} T_E \quad (3.87)$$

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

$$\left( -\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1^2)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_n = \left( -\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1^2)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_s \quad (3.88)$$

Discretizando-se a expressão (3.88), rearranjando-se e colocando-se em evidencia os termos comuns, vem:

$$T_S = \left[ 1 + \frac{\left( \frac{k_n}{\delta \xi_n} \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{\xi_n^2 - \eta_P^2}} \right)}{\left( \frac{k_P}{\delta \xi_s} \sqrt{\frac{\xi_s^2 - 1}{\xi_s^2 - \eta_P^2}} \right)} \right] T_P - \frac{\left( \frac{k_n}{\delta \xi_n} \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{\xi_n^2 - \eta_P^2}} \right)}{\left( \frac{k_P}{\delta \xi_s} \sqrt{\frac{\xi_s^2 - 1}{\xi_s^2 - \eta_P^2}} \right)} T_N \quad (3.89)$$

### 3.4.2.3 Propriedades termofísicas do fluido e material do reator

No modelo adotado, as equações a seguir foram utilizadas no cálculo das propriedades termofísicas do fluido (ar), (Pakowski et al.,1991; Jumah e Mujumdar, 1996):

$$\rho_f = \frac{\overline{PM}_f}{R_g T} \left( \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \quad (3.90)$$

$$c_{p_f} = 1,00926 \times 10^3 - 4,0403 \times 10^{-2} T + 6,1759 \times 10^{-4} T^2 - 4,097 \times 10^{-7} T^3 \text{ (J/kg K)} \quad (3.91)$$

$$\mu_f = 1,691 \times 10^{-5} - 4,984 \times 10^{-8} T + 3,187 \times 10^{-11} T^2 + 1,3196 \times 10^{-14} T^3 \quad (\text{Pas}) \quad (3.92)$$

$$k_f = 2,425 \times 10^{-2} + 7,889 \times 10^{-5} T - 1,907 \times 10^{-8} T^2 - 8,570 \times 10^{-12} T^3 \quad (\text{W/mK}) \quad (3.93)$$

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

Dentre os requisitos fundamentais de uma aproximação numérica é que esta reproduza com boa precisão a solução exata da equação diferencial que descreve o problema quando o tamanho da malha espacial e o intervalo de tempo se aproximem de zero. Isto é, os erros inerentes aos truncamentos e arredondamentos 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.

O estudo da geometria para reatores de leito compactado é um requisito fundamental para o bom entendimento dos fenômenos envolvidos no movimento de fluidos assim como da transferência de calor através de sistemas particulados. Assim, nesse trabalho o leito compactado é considerado como uma pseudofase, ou seja, como se o mesmo fosse completamente homogêneo. Portanto, 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, contudo, por

simplicidade, as propriedades térmicas efetivas do meio poroso foram consideradas iguais a do fluido percolante.

A correlação empírica para distribuição da porosidade na seção transversal do leito foi adaptada da equação reportada por Taylor e Smith (1999), é dada pela Equação (3.94),

$$\varepsilon = \varepsilon_b + (1 - \varepsilon_b) \times e^{(-b\hat{r})} J_0 \left( a \frac{\hat{r}}{d_p} \right) \quad (3.94)$$

..

Onde:  $\hat{r} = \left( L_1 \sqrt{1 - \frac{x^2}{L_2}} \right) - y$ , sendo x e y dados pela Equação (3.5 a-c)

Na Equação (3.94)  $\varepsilon_b = 0,4$  representa a porosidade dentro do leito empacotado com esferas aleatoriamente,  $\hat{r}$  é a distância da parede do reator mostrada na Figura 3.1,  $a = 1$  e  $b = 20$  são constantes que foram ajustadas empiricamente,  $J_0$  é a função de Bessel de ordem zero e  $d_p = 0,004$  m é o diâmetro da partícula.

A porosidade média sobre todo o leito poroso no reator foi obtida como segue:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon \, dV \quad (3.95)$$

Foram considerados o aços inoxidáveis (AISI 302, 304 e 316) e o cobre puro, como materiais usados nas paredes dos reatores estudados na pesquisa para avaliar o efeito da condutividade térmica, uma vez que os mesmos são inertes a reações e resistentes a corrosão.

O aço inoxidável é uma liga de ferro e cromo, podendo conter também níquel, molibdênio e outros elementos. Apresentam propriedades físico-químicas superiores aos comuns, sendo a alta resistência à oxidação atmosférica a sua principal característica.

A composição química junto com o processamento termomecânico, confere aos aços inoxidáveis propriedades diferentes. Assim, cada grupo de aço inox tem uma aplicação:

**Austenítico:** São resistentes à corrosão e têm aplicações em equipamentos para indústria química e petroquímica, equipamentos para indústria alimentícia e farmacêutica, construção civil, baixelas e utensílios domésticos.

**Ferrítico:** São resistentes à corrosão e mais baratos por não conter níquel. Tem aplicações em eletrodomésticos (fogões, geladeiras, etc.), balcões frigoríficos, moedas, indústria automobilística, talheres, e sinalização visual - Placas de sinalização e fachadas.

**Martensítico:** Tem como característica a dureza elevada. Tem aplicações em cutelaria, instrumentos cirúrgicos como bisturi e pinças, facas de corte, e discos de freio especiais.

**AISI 302:** São aços ao Cromo-Níquel não magnético (estado recozido) e magnético (estado duro) para aplicações gerais com excelente resistência mecânica e à oxidação. Estes aços tem aplicações nas indústria química, alimentícia, hospitalar e farmacêutica. Molas (tração, torção, helicoidal, caracol), ganchos, bijuterias, gancheiras, antenas para auto rádio, artigos de pesca, eixos, arruelas, componentes de válvulas, entre outras.

**AISI 304:** São aços ao Cromo-Níquel não magnético (estado recozido) e levemente magnético (estado duro) que apresenta boa soldabilidade, elevada tenacidade e ótima resistência à corrosão em diversos ambientes. Tem aplicações nas indústrias química, petroquímica, têxtil, aeronáutica, hospitalar, cirúrgica, odontológica, alimentícia, celulose e papel. Ideal para produção de esteiras transportadores, bijuterias, telas, tecidos metálicos, filtros, pentes têxteis, tubos, tanques, equipamentos de fotografia, estampagem geral e profunda.

**AISI 316:** São aços ao Cromo-Níquel não magnético que possui em sua composição química a adição de Molibdênio, o que lhe confere uma maior resistência a ataques químicos e às temperaturas elevadas. Tem aplicações em equipamentos para indústria petroquímica, alimentícia, hospitalar e cirúrgica. Telas, tecidos metálicos, filtros industriais, componentes de refrigeração e artefatos de arame.

O cobre é um material puro e natural. Segundo os historiadores foi o primeiro metal utilizado pelo homem, e seu descobrimento se dá por volta de 13.000 A.C., quando foi encontrado em sua forma pura. Seu uso se torna constante pelos séculos seguintes, marcando presença na evolução tecnológica do homem. As propriedades físicas e químicas do cobre e seus derivados, como o bronze e o latão, pela sua durabilidade e alta resistência à corrosão, os tornaram de significativa utilidade e funcionalidade.

A Tabela 3.1 apresenta a condutividade térmica do cobre puro e dos aços inoxidáveis AISI 302, 304 e 316.

**Tabela 3.1: Densidade e condutividade térmica de alguns materiais a 300 K.**

Fonte: Neto(2010)

Material	$\rho$ [kg / m <sup>3</sup> ]	k [W / mK]
Cobre puro	8933	401
AISI 302	8055	15,1
AISI 304	7900	14,9
AISI316	8238	13,4

#### 3.4.2.4 Solução do sistema de equações e casos estudados

A solução do sistema de equações algébricas geradas pela aplicação das Equações (3.51) e (3.75) ao longo de todos os pontos da malha numérica foi obtida usando-se um algoritmo numérico, denominado ELIPTICODE, implementado no ambiente do Software Mathematica. O sistema de equações é resolvido iterativamente usando-se o método Gauss-Seidel.

A solução numérica é atingida quando esta converge para um determinado valor, onde partindo-se de uma condição inicial os seguintes critérios de convergência são satisfeitos:

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

$$|T^{n+1} - T^n| \leq 10^{-8} \quad (3.96)$$

- Para a equação discretizada em qualquer instante de tempo:

$$\left| \frac{\sum |A_k|}{|A_P|} \right| \leq 1, \text{ para todas as equações} \quad (3.97)$$

Onde; n na Equação (3.96) é a n-ésima iteração em cada instante de tempo. Já na Equação (3.97), o subscrito k representa os pontos nodais vizinhos do ponto nodal P. Satisfazendo os dois critérios mencionados acima, ainda faz-se necessário que os coeficientes  $A_k$  sejam todos positivos, para que a solução do problema tenha coerência física.

Como mencionado, as equações discretizadas foram implementadas no software Mathematica ® para solução do problema físico. Realizou-se várias simulações considerando a porosidade constante no leito, porosidade variável na seção transversal do reator de leito fixo e a porosidade média  $\bar{\epsilon}$  no leito calculada pela integração da Equação (3.94) em todo volume do leito do reator. Os coeficientes de transferência de calor por convecção na parede são assumidos  $h_{w_{ext}} = 2$  e  $5 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

A Tabela 3.2 resume os casos estudados nesta pesquisa. Foram simulados um total de 34 casos. Dentre os casos simulados foram considerados os seguintes aspectos:

Caso 1 a 5,  $h_{w_{ext}} = 2 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  e porosidade variável; Caso 6 a 10,  $h_{w_{ext}} = 2 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  e porosidade variável; Caso 11,  $h_{w_{ext}} = 2 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  e porosidade variável e Caso 12,  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  e porosidade variável, Caso 13 a 17,  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ (W/m}^2\text{K)}$ , porosidade variável e  $L_1 = L_2 = 0,05$ ; Caso 18,  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  porosidade 0,4 e  $H = 0,30 \text{ m}$ ; Caso 19,  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  porosidade 0,4 e  $H = 0,40 \text{ m}$ ; Caso 20 a 22,  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ (W/m}^2\text{K)}$  porosidade 0,4 e  $T_0 = (50, 60, \text{ e } 80)^\circ\text{C}$ ; 23 a 26,

$hw_{ext} = 5$  (W/m<sup>2</sup>K) porosidade 0,4 e  $T_m = (20, 40, 50, e 60)^\circ\text{C}$ ; 27 a 30,  $hw_{ext} = 5$  (W/m<sup>2</sup>K) porosidade 0,4 e  $u_z = (0,00100, 0,01000, 0,05000 e 0,11700)$  m/s; Casos 31 a 34,  $hw_{ext} = 5$  (W/m<sup>2</sup>K),

$k_{wr} = (401, 15,1, 14,9 e 13,4)$  W/mK.

**Tabela 3.2: Casos simulados na pesquisa**

Casos	L <sub>1</sub> (m)	L <sub>2</sub> (m)	H (m)	hw <sub>ext</sub> (W/m <sup>2</sup> K)	hw <sub>int</sub> (W/m <sup>2</sup> K)	T <sub>o</sub> (°C)	T <sub>m</sub> (°C)	u <sub>z</sub> (m/s)	ε	k <sub>wr</sub> (W/mK)
1	0,05	0,25	0,20	2,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,2	1 x 10 <sup>30</sup>
2	0,05	0,25	0,20	2,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
3	0,05	0,25	0,20	2,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,6	1 x 10 <sup>30</sup>
4	0,05	0,25	0,20	2,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,8	1 x 10 <sup>30</sup>
5	0,05	0,25	0,20	2,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	Variável	1 x 10 <sup>30</sup>
6	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,2	1 x 10 <sup>30</sup>
7	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
8	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,6	1 x 10 <sup>30</sup>
9	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,8	1 x 10 <sup>30</sup>
10	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	Variável	1 x 10 <sup>30</sup>
11	0,05	0,25	0,20	5,00	2,0	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
12	0,05	0,25	0,20	5,00	5,0	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
13	0,05	0,05	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,2	1 x 10 <sup>30</sup>
14	0,05	0,05	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
15	0,05	0,05	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,6	1 x 10 <sup>30</sup>
16	0,05	0,05	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,8	1 x 10 <sup>30</sup>
17	0,05	0,05	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	Variável	1 x 10 <sup>30</sup>
18	0,05	0,25	0,30	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
19	0,05	0,25	0,40	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	70	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
20	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	50	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
21	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	60	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>
22	0,05	0,25	0,20	5,00	1 x 10 <sup>-30</sup>	80	30	0,11471	0,4	1 x 10 <sup>30</sup>

23	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	20	0,11471	0,4	$1 \times 10^{30}$
24	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	40	0,11471	0,4	$1 \times 10^{30}$
25	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	50	0,11471	0,4	$1 \times 10^{30}$
26	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	60	0,11471	0,4	$1 \times 10^{30}$
27	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,00100	0,4	$1 \times 10^{30}$
28	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,01000	0,4	$1 \times 10^{30}$
29	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,05000	0,4	$1 \times 10^{30}$
30	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,11700	0,4	$1 \times 10^{30}$
31	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,11471	0,4	401
32	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,11471	0,4	15,1
33	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,11471	0,4	14,9
34	0,05	0,25	0,20	5,00	$1 \times 10^{-30}$	70	30	0,11471	0,4	13,4

## **CAPÍTULO 4**

### **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

Os mecanismos de transporte de calor num leito fixo são muito complexos, e a interpretação dos resultados tem gerado grande controvérsia entre os pesquisadores, em relação ao tipo de modelagem admitida, Oliveira (2004). Visando contribuir no entendimento desses fenômenos, neste capítulo apresentam-se e analisam-se os resultados de temperatura obtidos a partir da solução numérica do modelo adotado para solução do problema.

#### **4.1 Validação da malha numérica e modelo**

##### **4.1.1 Malha numérica**

O efeito do número de pontos da malha no comportamento da solução numérica para um reator cilíndrico elíptico foi avaliado por Oliveira(2004), variando-se o tamanho da

malha numérica. Foram usadas 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. Neste trabalho foi ilustrado 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 ( $z/H$ ), para cada tamanho de malha. Ainda Oliveira (2004) observou 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 apresentaram resultados extremamente semelhantes. Portanto, para se atingir os resultados finais usando-se a malha 30x30x30 pontos, foi utilizado um tempo computacional muito longo, enquanto que sem comprometer a qualidade dos resultados obtidos, a malha 20x20x20 pontos forneceu num tempo computacional muito menor e independência da malha, resultados muito próximos daqueles obtidos pela malha 30x30x30 pontos, razão pela qual a mesma foi desconsiderada. Neste trabalho também constatou-se este fato que pode ser visto na tabela 4.1 que foi obtida com as informações do caso 2 da tabela 3.2, assim optou-se pela malha 20x20x20 pontos para simular os casos da tabela 3.2, sendo  $T^*$  a temperatura adimensional da posição (x,y). Especificação do computador utilizado: processador Intel Core i7, 2,6 Ghz ( 8 Núcleos ), memória DD3 1600 MHz com 8Gb, placa de vídeo geforce 630M com 2Gb e Hd 750 Gb.

**Tabela 4.1: Teste para escolha da malha e custo computacional**

<b>Malha</b>	<b>z/H</b>	<b>(x, y)</b>	<b>T*</b>	<b>T(°C)</b>	<b>t(h,m,s)</b>
10x10x10	0,5277	(0,15, 0,03)	0,912839	66,51	0h0m06s
20x20x20	0,5277	(0,15, 0,03)	0,8681153	64,72	0h03m53s
30x30x30	0,5277	(0,15, 0,03)	0,868715	64,74	1h30m17s

### 4.1.2 Modelo

A verificação de que o modelo experimental, dentro do seu domínio de aplicação, se comporta de maneira suficientemente satisfatória com relação aos objetivos do estudo é chamada de validação do modelo. O domínio de aplicação é o conjunto de condições prescritas para as quais o modelo experimental foi testado, comparado com o sistema real e julgado apto para uso.

A validação do modelo é realizada comparando-se o comportamento do modelo com o comportamento do sistema real quando ambos são submetidos às mesmas condições de entrada. As técnicas para a validação de modelos para simulação podem ser agrupadas em duas grandes áreas: Técnicas subjetivas e Técnicas estatísticas para validação.

#### 4.1.2.1 Validação analítica

O modelo usado nesta pesquisa foi validado analiticamente por Oliveira (2004), para o escoamento de um fluido num reator cilíndrico circular, nas seguintes condições:  $k_{wr}$  tendendo ao infinito,  $hw_{int}$  tendendo ao infinito,  $u_z = 0,11417$  m/s,  $L_2/L_1 = 1$ ,  $Bi = \frac{h_{w_{int}} L_1}{k_f} = 1,0$ ,  $hw_{ext} = 2,0$  W/m<sup>2</sup>K,  $L_1 = 0,05$  m,  $H = 0,20$  m,  $T_0 = 70^0$ C,  $T_m = 22,5^0$ C,  $C_p = 1000$  J/kgK,  $\varepsilon = 0,4$ ,  $k_f = 0,1$  W/mk e  $\rho = 1,09488$  kg/m<sup>3</sup>. Segundo o autor, a comparação entre os resultados numéricos e analíticos apresentaram excelentes concordância.

#### 4.1.2.2 Validação experimental

O modelo usado nesta pesquisa foi validado experimentalmente por Oliveira (2004), para o escoamento de ar num reator cilíndrico circular nas seguintes condições:  $k_{wr}$  tendendo ao infinito,  $hw_{int}$  tendendo ao infinito,  $Re = \frac{\varepsilon \rho u_z d_p}{\mu}$  igual a 105, 125, 145, 165, e 185,  $T_0 = 70^\circ\text{C}$ ,  $T_m = 22,5^\circ\text{C}$ ,  $d_p = 3 \text{ mm}$ ,  $C_p = 1000,35 \text{ J/kgK}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ ,  $\mu = 2,029 \times 10^{-5} \text{ Pas}$ ,  $\rho = 1,09488 \text{ kg/m}^3$ ,  $H = 0,10 \text{ m}$ . Foram feitas comparações da temperatura seccional média em cada posição  $z$ , ao longo do reator. Em todos os casos uma boa concordância foram obtidas, entre os resultados teóricos e preditos. A Figura 4.1 ilustra uma destas comparações, segundo Oliveira (2004), uma constatação óbvia observando-se a Figura 4.1 é que, sem sombra de dúvidas, a qualidade do ajuste fornecida pelo modelo é razoável, uma vez que em todas as situações, ocorre uma considerável dispersão entre os dados experimentais e a curva predita.

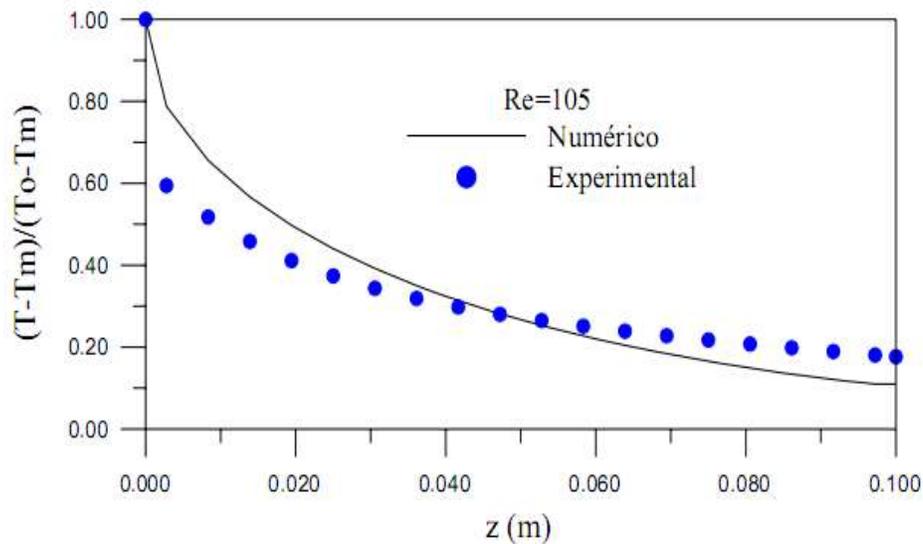


Figura 4.1: Comparação entre os resultados de temperatura média adimensional prevista pelo modelo I e experimental ( $Re = 105$ ) em função da altura do reator. Fonte: Oliveira (2004).

## 4.2 Avaliação de parâmetros termofísicos e geométricos na distribuição de temperatura no leito fixo e efeito da porosidade

### 4.2.1 Efeito da porosidade

A porosidade é um parâmetro importante para a análise do escoamento de um fluido e da transferência de calor num meio poroso. Porosidade indica o grau de compactação do leito, e depende do tamanho e forma das partículas. Com o objetivo de avaliar o efeito da porosidade do leito sobre o fenômeno de transferência de calor ao longo de um reator de leito fixo com geometria cilíndrica elíptica, percolado por um fluido que escoava em regime constante foram realizados diferentes casos de simulação, sendo um considerando-se a distribuição da porosidade do leito em função da distância da parede do reator e outros considerando-se a porosidade constante, todos para  $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

A Figura 4.2 mostra a distribuição da porosidade do leito em função da distância da parede do reator (Equação (3.93)). Avaliando esta figura, pode-se perceber que, a distribuição da porosidade no leito é menor nas proximidades do centro do reator enquanto que nas proximidades da parede ela aumenta. Assim, na Figura 4.2 é possível notar que a maior variação da porosidade está localizada próxima à parede do reator tendendo a se tornar constante quando se aproxima do centro do leito. O comportamento da porosidade apresentada na Figura 4.2 está muito próximo do que foi demonstrado na literatura (Taylor e Smith, 1999).

A Figura 4.3 ilustra a temperatura média seccional adimensional em diferentes posições axiais e diferentes porosidades. Percebe-se que quanto mais varia a porosidade, menor é a variação da temperatura ao longo do reator.

As Figuras 4.4 a 4.8 mostram a distribuição de temperatura adimensional para  $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ .

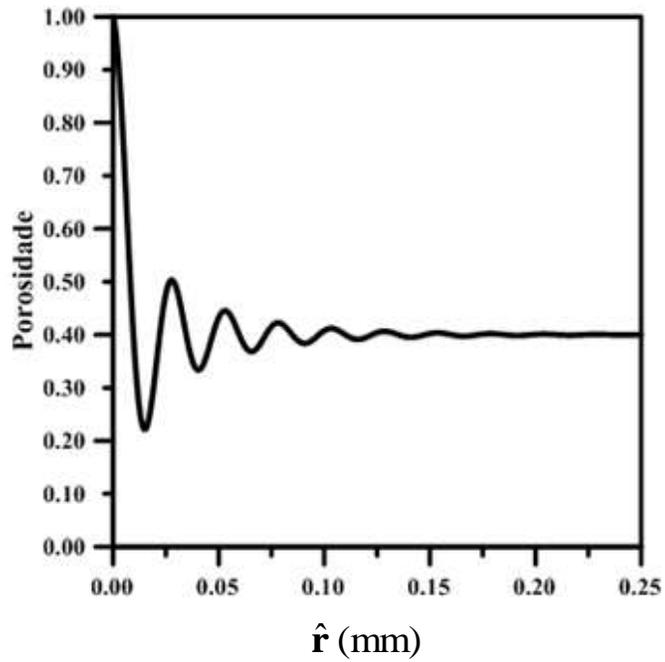


Figura 4.2: Distribuição da porosidade do leito em função da distância da parede do reator.  
 Fonte: Autoria própria

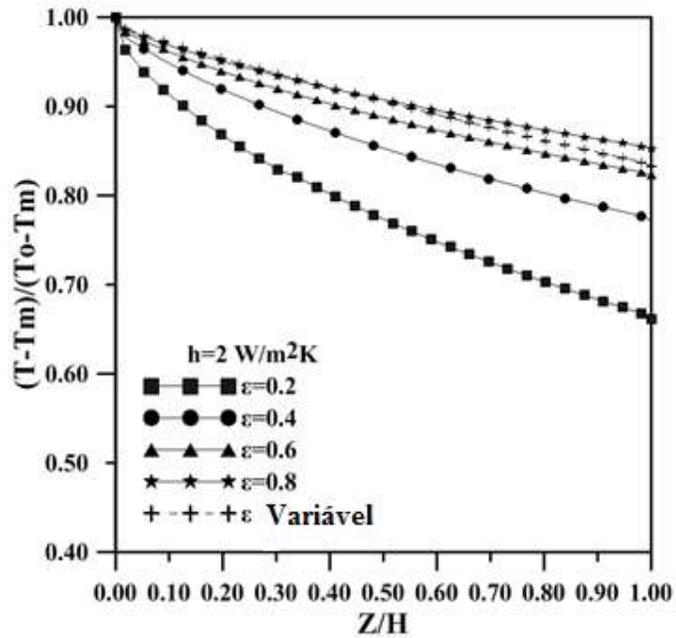


Figura 4.3: Perfis de temperatura adimensional na direção axial para diferentes porosidades, ( $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W/m}^2\text{K}$ , casos 1 a 5) . Fonte: Autoria própria

As Figuras 4.4 a 4.8 (casos 1 a 5 da Tabela 3.2) e 4.10 a 4.14 (casos 6 a 10 da Tabela 3.2) mostram o perfil adimensional da temperatura para as posições axiais  $z/H = 0.0833$ ,  $0.5277$  e  $0.9722$  no interior do leito fixo. Nestas Figuras, as curvas com valores definidos representam campos de isotermas que delimitam regiões de gradientes adimensionais no interior do reator. Estas alturas adimensionais foram escolhidas a fim de se obter perfis de temperatura no início, numa altura intermediária e no final do reator.

Observando-se as Figuras 4.4 a 4.8 (casos 1 a 5 da Tabela 3.2) pode-se dizer que fixando o coeficiente de transferência de calor parede-leito e a porosidade, e variando-se a altura do leito compactado  $z/H$ , provoca-se um deslocamento das isolinhas (isotermas) de maiores temperaturas para posições cada vez mais próximas do centro do reator gerando dessa forma regiões com maiores variações de temperatura. Pode-se observar na Figura 4.4, de menor porosidade ( $\varepsilon = 0.2$ ) maiores gradientes de temperatura em relação s Figuras 4.5, 4.6, 4.7, e 4.8. Pois nestas ultimas, a transferência de calor é menos acentuada o que provoca uma distribuição de calor mais uniforme, em outras palavras pode-se dizer que quando a porosidade é aumentada do leito o gradiente da temperatura na seção transversal tende a ser menor e o fluido passa perder calor com menor intensidade.

Este resultado é esperado pois a passagem do fluido pelo reator poroso ocasiona um processo de troca de calor com o fluido percolante mais efetiva. A transferência de calor tem maior influência da condutividade efetiva do leito tendo em vista que, para situações de baixa porosidade o leito contém mais partículas e neste caso, o fluido tem maior área de contato com a fase sólida e conseqüentemente, passa de forma mais lenta pelo leito ocasionado uma maior transferência de calor. Quando a porosidade do leito é aumentada o fluido escoar de forma mais livre o que provoca uma distribuição de calor mais uniforme. Uma comparação entre a linha isotérmica que se encontra mais próxima da parede na Figura 4.4 ( $T^* = 0,65$  em  $z/H = 0,1875$ ) e a linha isotérmica encontrada na Figura 4.7 ( $T^* =$

0,80 em  $z/H = 0,1875$ ) na mesma posição, fornece uma diferença cerca de 20% na temperatura adimensional. Quando a porosidade variável foi usada, foram encontrados gradientes de temperatura maiores próximos da parede do reator, visto que nesta região ocorre uma variação brusca da porosidade, porém com o comportamento similar ao caso com  $\varepsilon = 0,8$ .

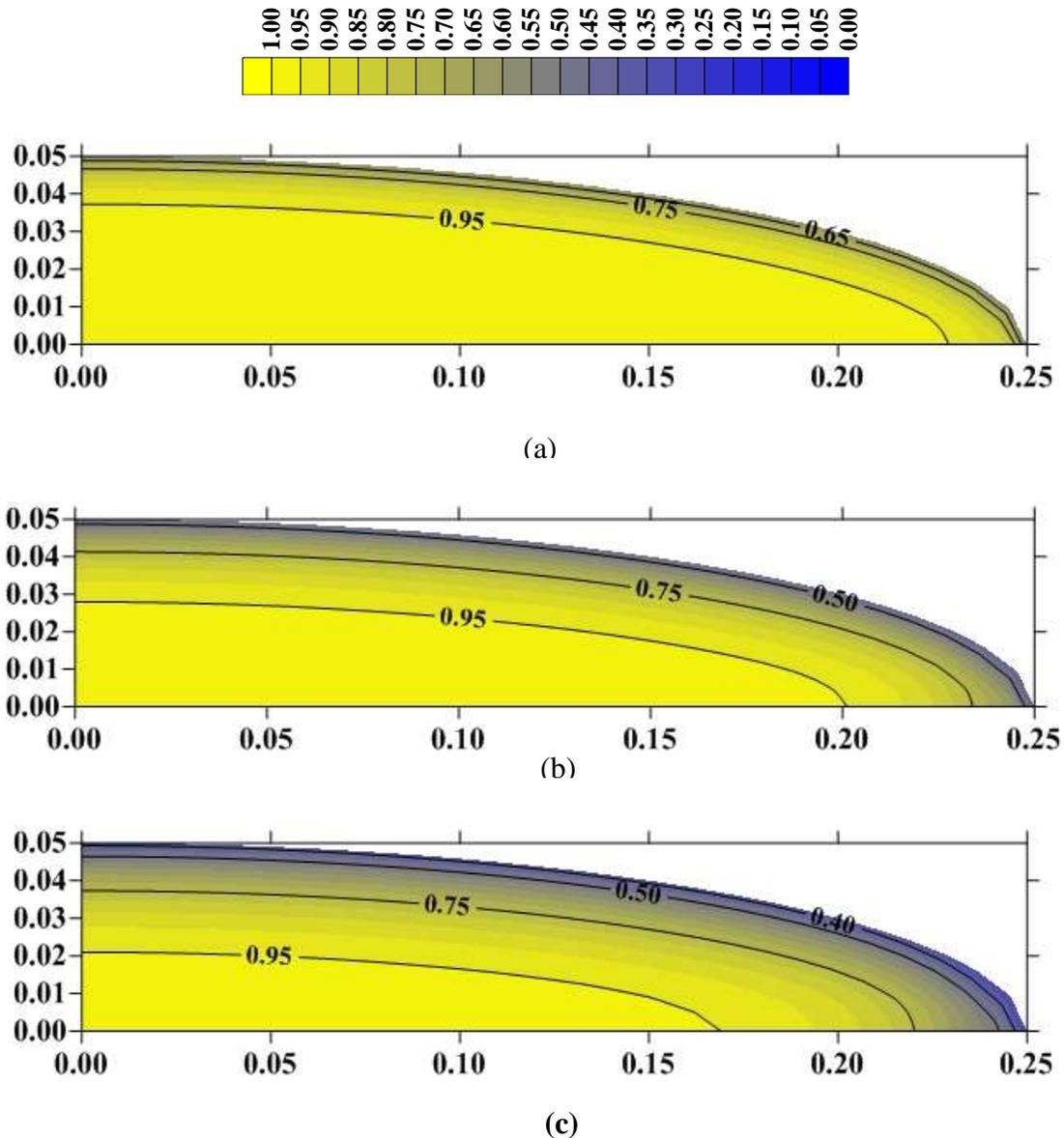
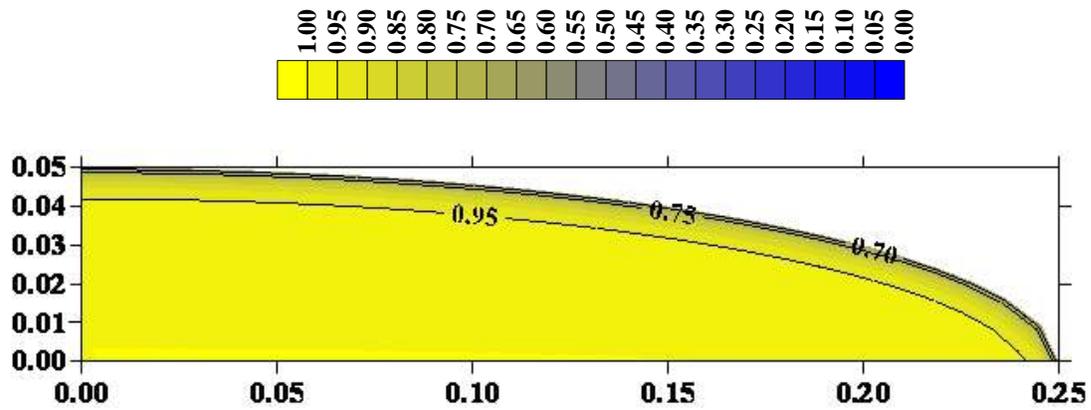
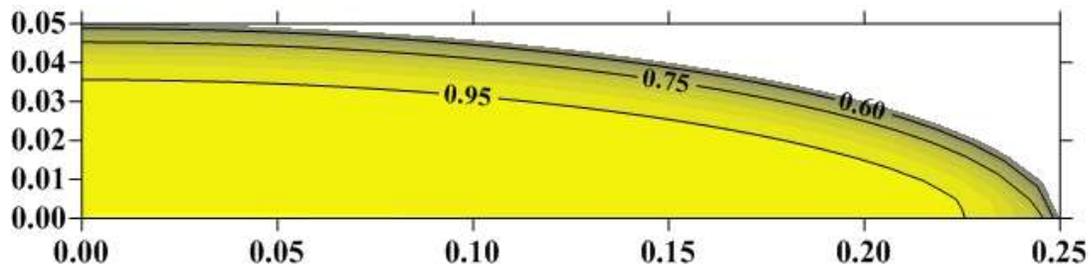


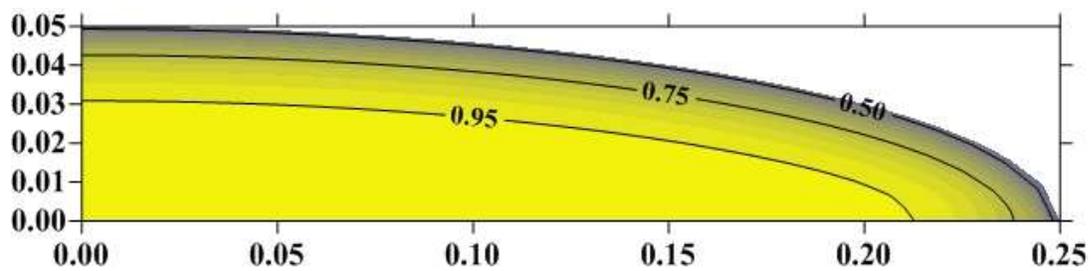
Figura 4.4: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W} / \text{m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0.2$ , em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 1).



(a)



(b)



(c)

Figura 4.5: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ , em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0,20 \text{ m}$  (caso 2).

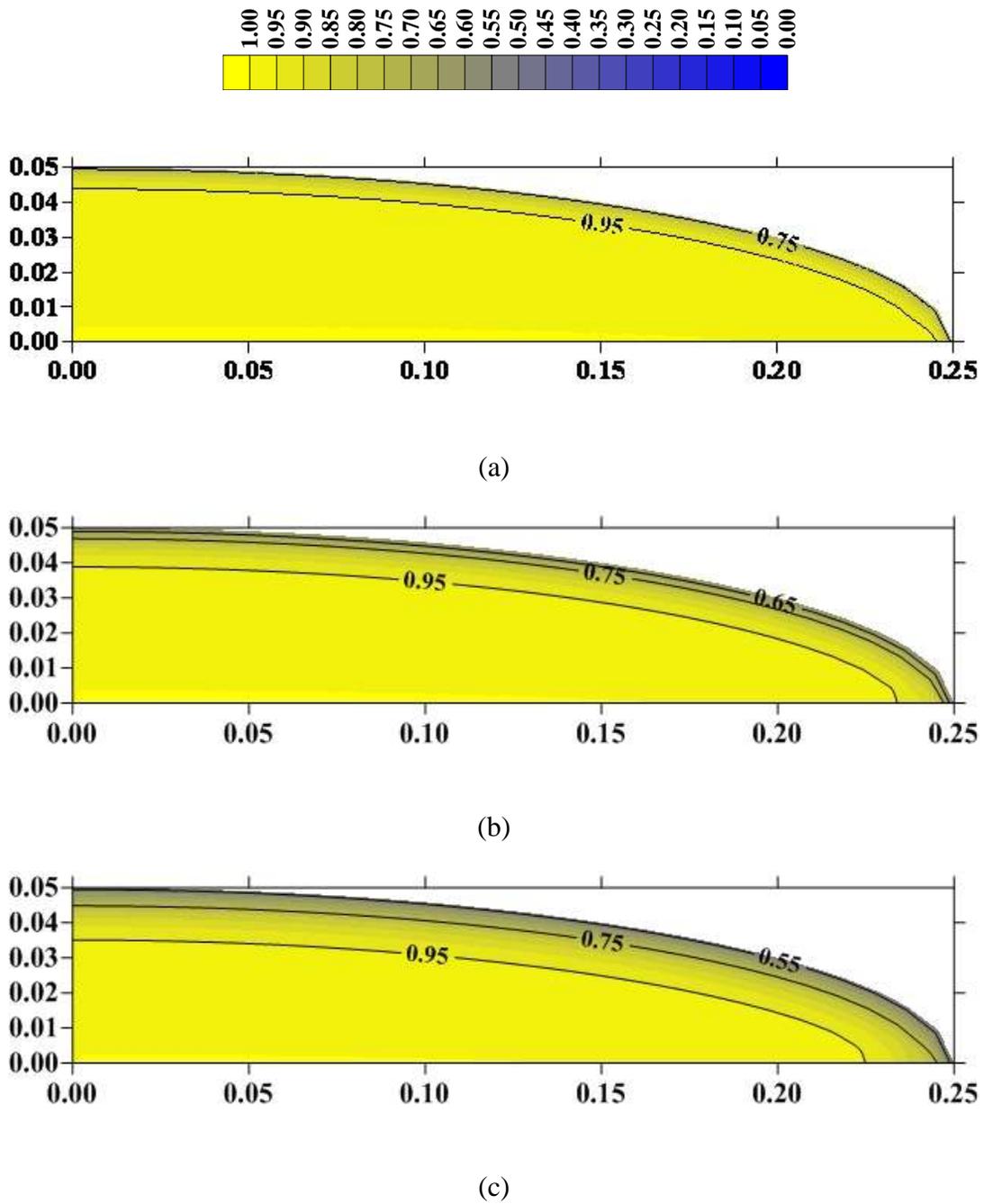


Figura 4.6: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,6$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 3).

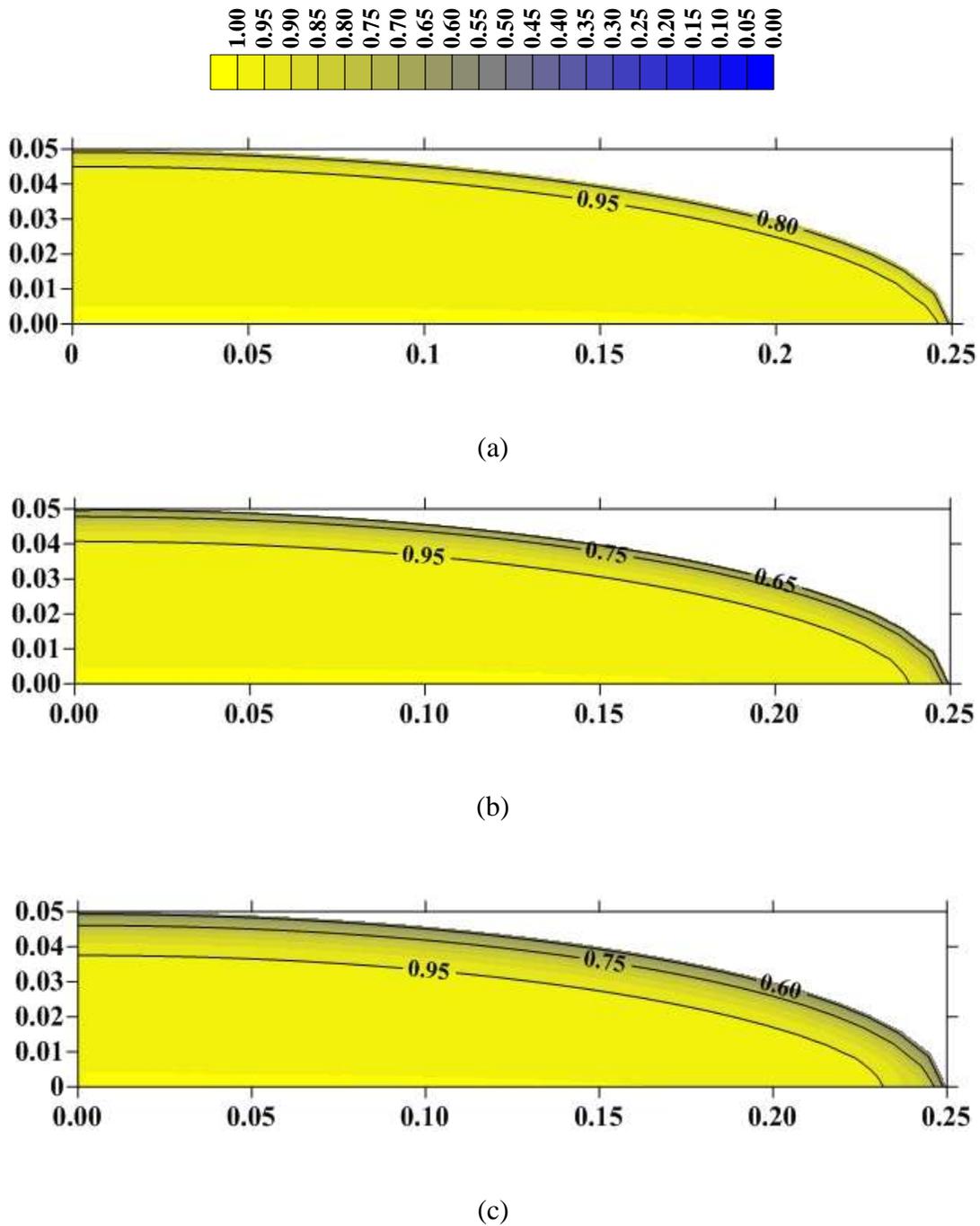
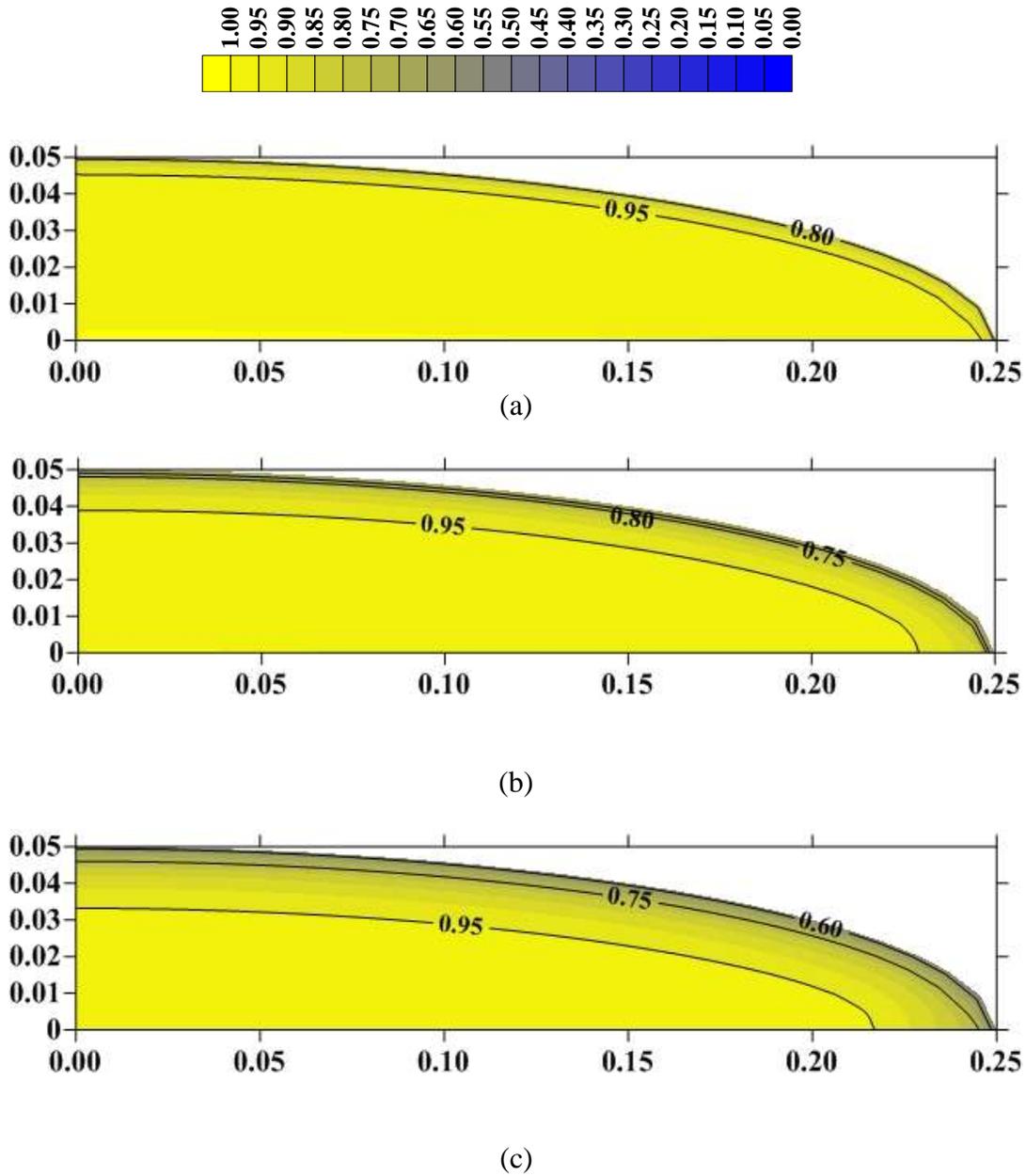


Figura 4.7: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,8$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 4).



**Figura 4.8:** Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon =$  variável em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 5).

As Figuras 4.9 (a, b, c, d, e) ilustram uma comparação da distribuição de temperatura adimensional. Pode-se observar que quando a porosidade aumenta há uma diminuição do

gradiente de temperatura nas direções  $x$  e  $y$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , que pode ser constatada para  $x = 0$  e  $y \geq 0,03$ .

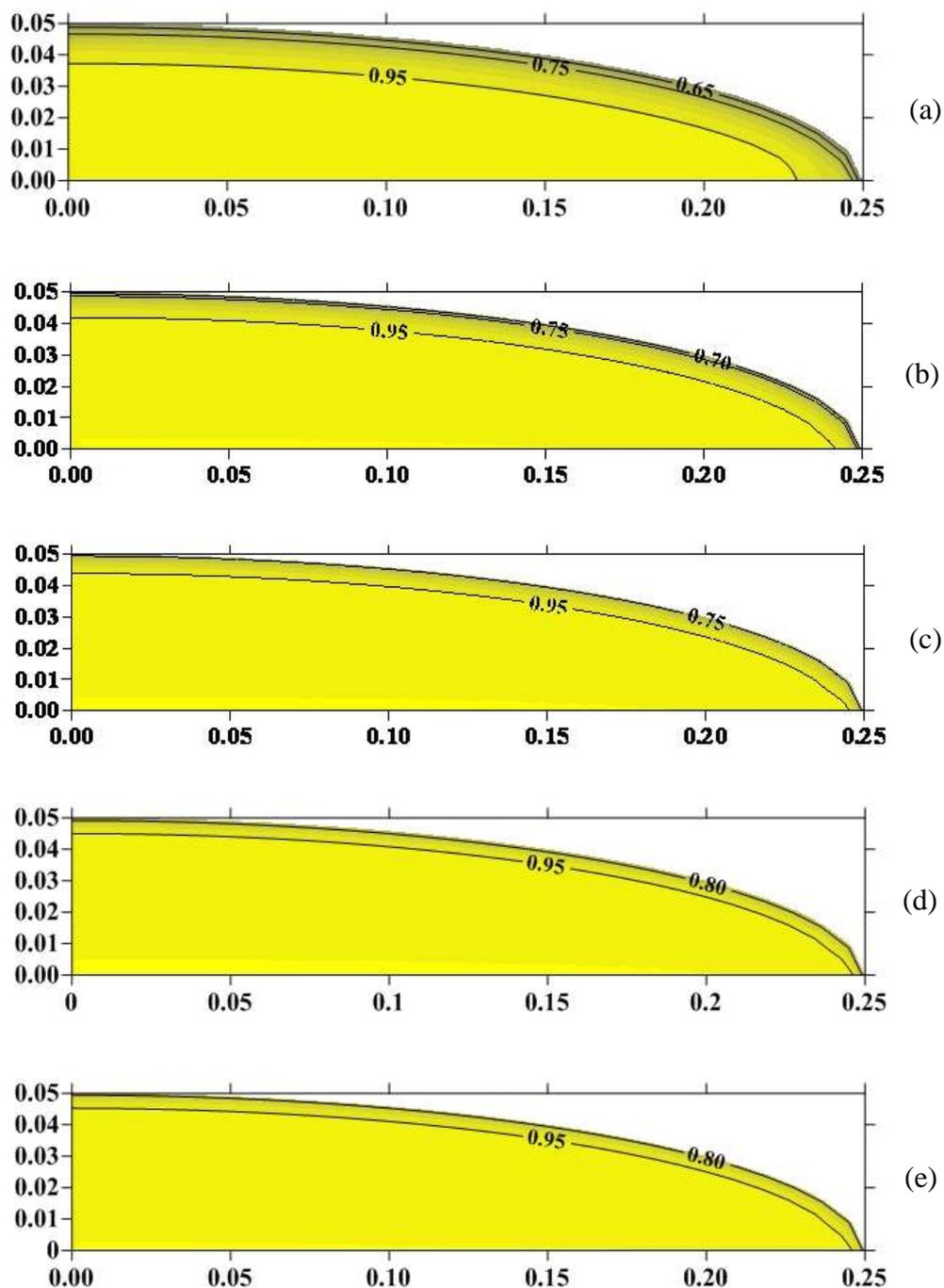


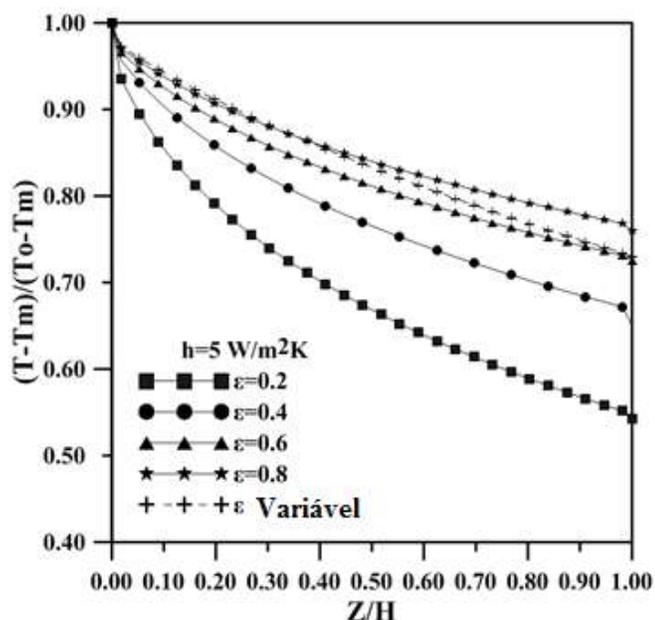
Figura 4.9 (a, b, c, d, e) Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , na posição  $z/H = 0,0833$ , e  $H = 0.20 \text{ m}$ , a)  $\epsilon = 0,2$  b)  $\epsilon = 0,4$  c)  $\epsilon = 0,6$  d)  $\epsilon = 0,8$  e)  $\epsilon = \text{variável}$ .

## 4.2.2 Avaliação do efeito do coeficiente de transferência do calor convectivo

### 4.2.2.1 Parede externa do reator

A Figura 4.10 mostram o perfil de temperatura média adimensional na secção transversal ao longo da direção axial do leito, para  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$  (casos 6 a 10 da Tabela 3.2). Pode-se observar que com o aumento da porosidade do leito, o gradiente de temperatura na direção axial tende a ser menor. Isto ocorre, porque o fluido passa de forma mais livre pelo leito diminuindo a área efetiva de troca de calor. Nota-se também que o perfil de temperatura para o caso avaliado para a condição de porosidade variável, se aproxima bastante daquele de temperatura obtido para porosidade constante e igual 0,8 até altura  $z/H \approx 0,5$ ; a partir deste valor a temperatura média começa a decair aproximando-se da curva de  $\varepsilon = 0,6$ . Comparando-se este resultado com os da Figura 4.3, verifica-se que com o aumento do coeficiente de calor convectivo na parede externa do reator, maiores gradientes axiais de temperaturas são obtidos, para qualquer condição de porosidade.

As Figuras 4.11 a 4.15 (casos 6 a 10 da Tabela 3.2) mostram a distribuição da temperatura na seção transversal do leito para as alturas  $z/H = 0.0833, 0.5277$  e  $0.9722$  e coeficiente de transferência de calor na parede externa do reator  $h_{w_{ext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$ . Verifica-se que os fenômenos abordados são similares aos casos para  $h_{w_{ext}} = 2 \text{ W/m}^2\text{K}$ , porém, neste último caso, é possível observar que os gradientes de temperatura no interior do reator tendem a ser maiores do que os encontrados para o caso com  $h_{w_{ext}}$  menor. Além disso, pode-se verificar que, quando o coeficiente de transferência de calor por convecção é aumentado o efeito da variação na porosidade do leito sobre os gradientes de temperatura na seção transversal do leito é mais intenso. No centro do leito a temperatura sofre pouca variação para todos os casos analisados.



**Figura 4.10:** Perfis de temperatura adimensional para diferentes porosidades na direção axial ( $h_{\text{wext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$ , (casos de 6 a 10).

Uma comparação entre as Figuras 4.4 (caso1) e 4.11 (caso 6) para  $\varepsilon = 0.2$ , mostram que aumentando-se o valor do coeficiente de convecção de  $h_{\text{wext}} = 2 \text{ W/m}^2\text{K}$  para  $h_{\text{wext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$  tem-se uma maior troca de calor com o líquido percolante, pela parede do reator. Isto pode ser constatado observando-se as regiões de maiores variações de temperaturas, nas duas figuras. Para  $h_{\text{wext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$ , estas regiões são notadamente maiores. Está constatação também ocorre quando comparam-se as Figuras 4.5 (caso 2) e 4.12 (caso 7), Figuras 4.5 (caso 2) e 4.13 (caso 8), Figuras 4.6 (caso 4) e 4.14 (caso 9), e as Figuras 4.8 (caso 5) e 4.15 (caso10). Observa-se ainda que para maiores porosidades as variações de temperatura são menos intensas.

As Figuras 4.11 a 4.15 mostram distribuição de temperatura adimensional para  $h_{\text{wext}} = 5 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

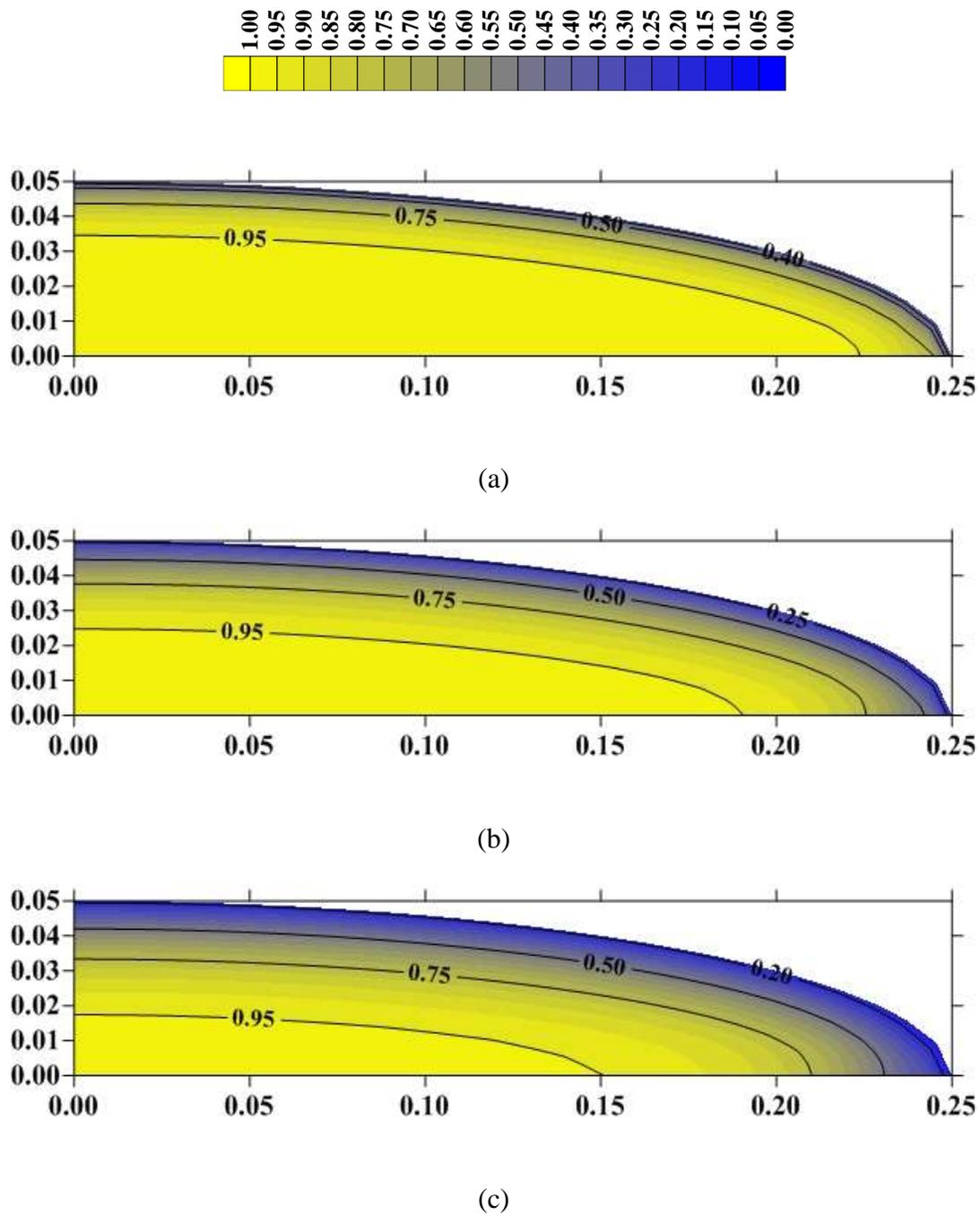
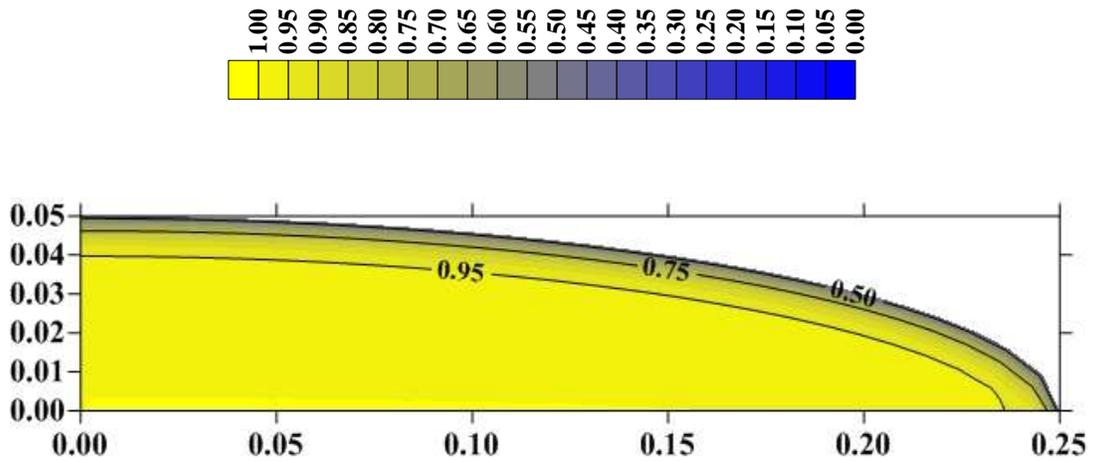
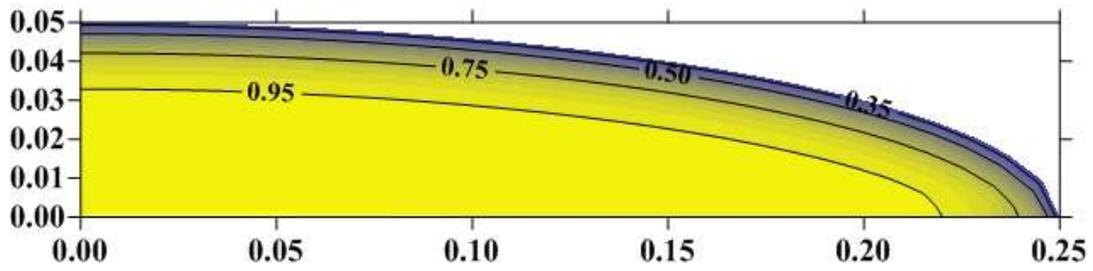


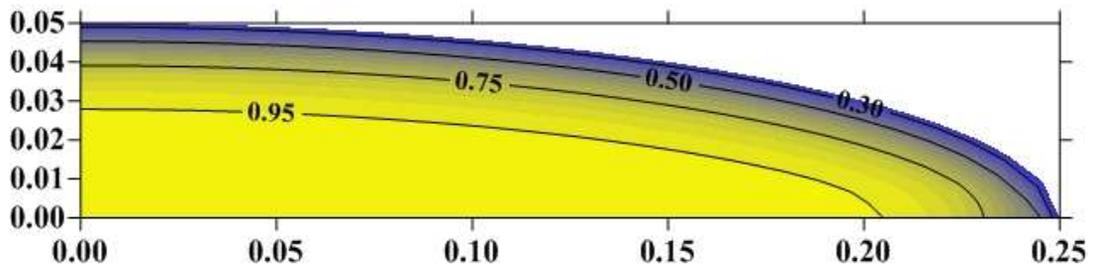
Figura 4.11: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W} / \text{m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,2$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 6).



(a)



(b)



(c)

Figura 4.12: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W} / \text{m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 7).

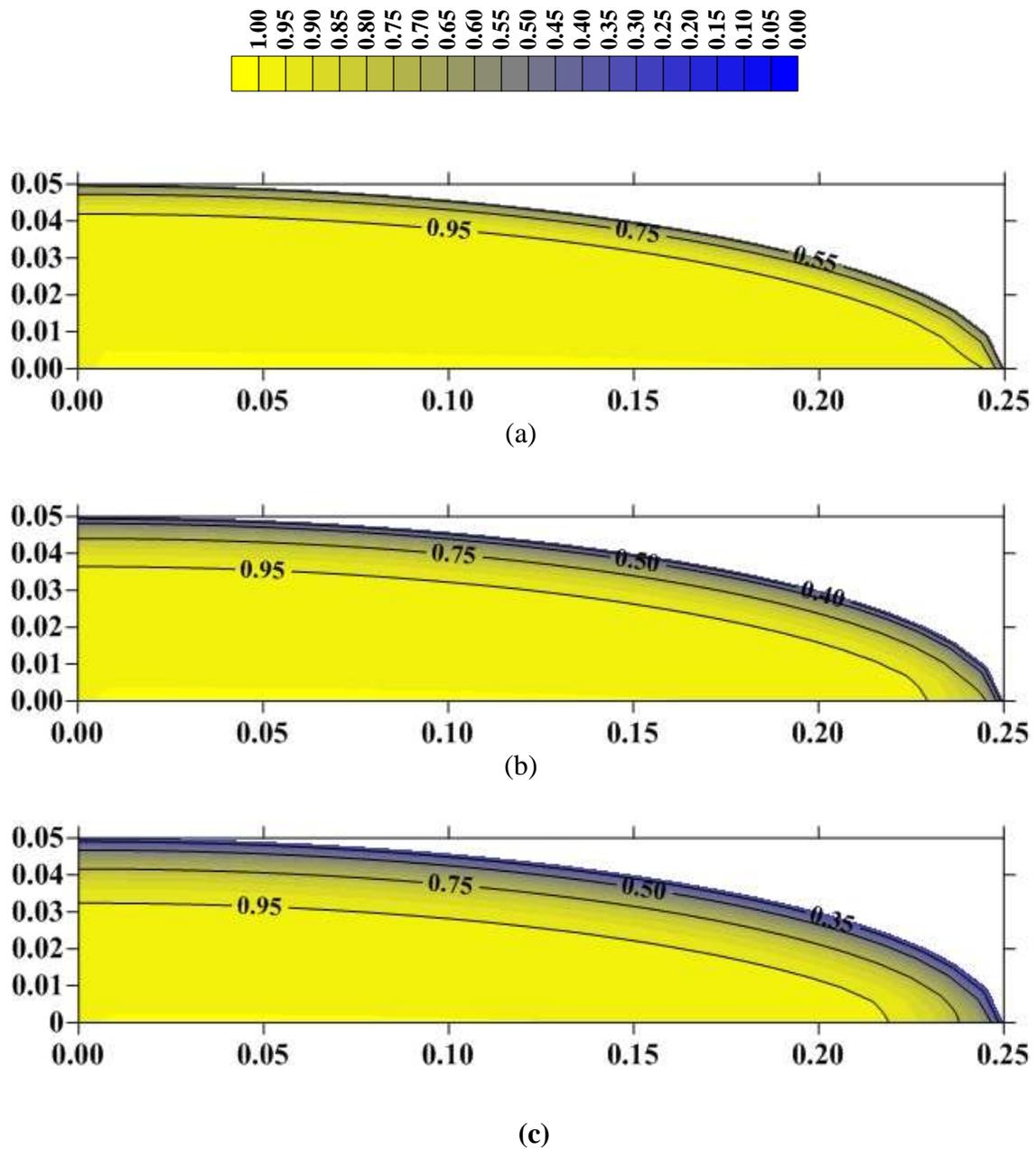


Figura 4.13: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,6$  ) em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 8).

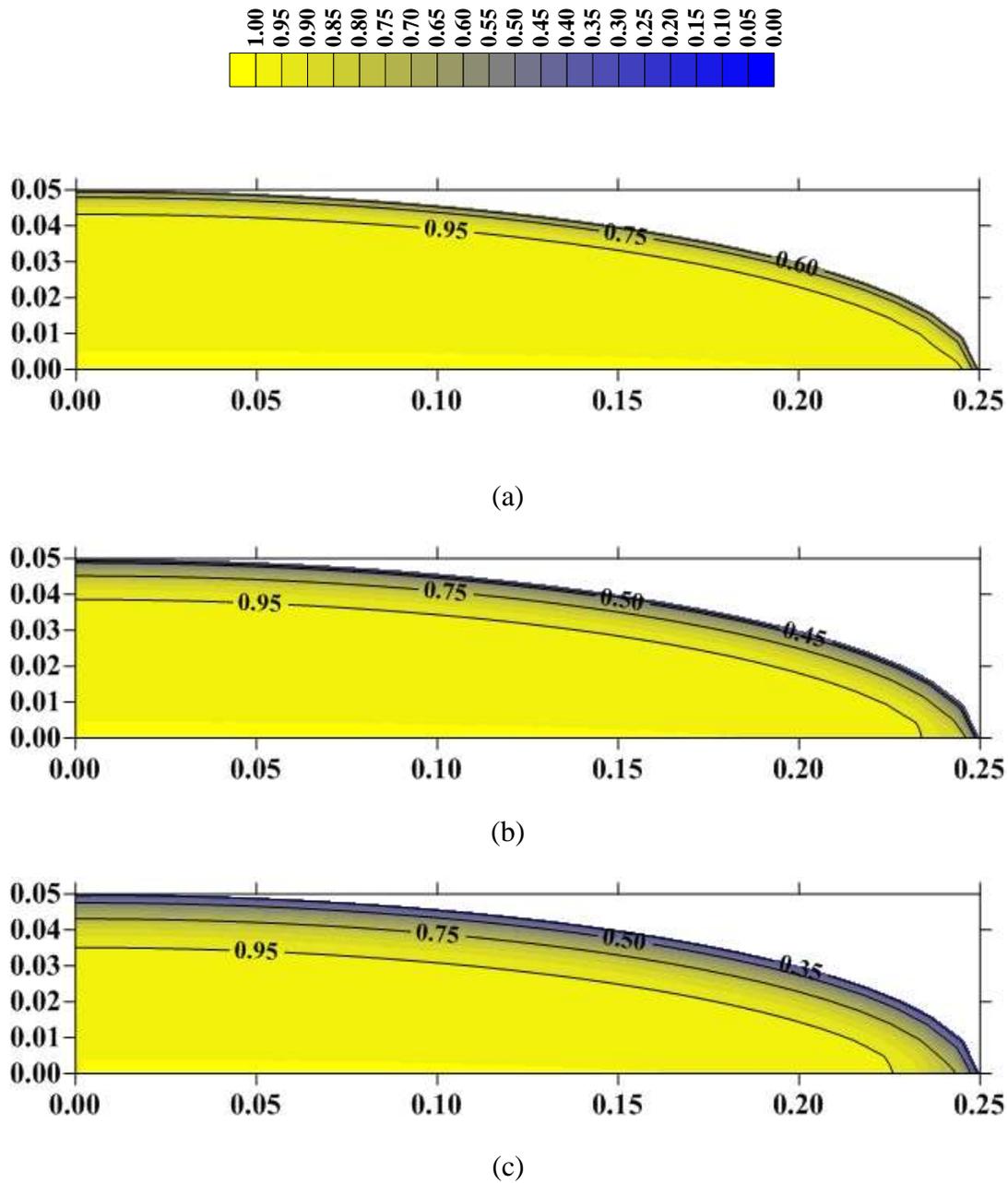


Figura 4.14: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,8$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 9).

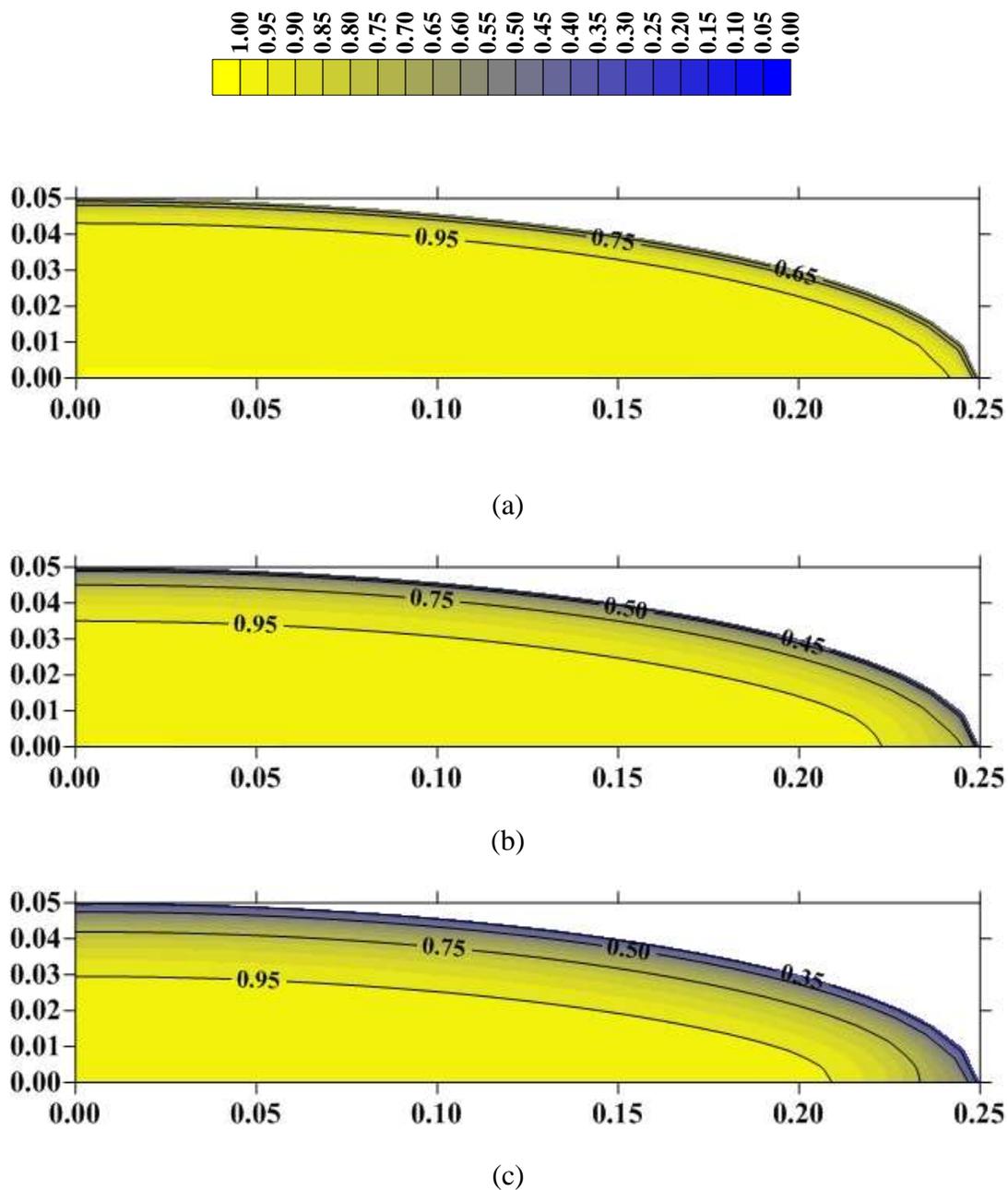


Figura 4.15: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\epsilon =$  variável em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 e  $H = 0.20 \text{ m}$  (caso 10).

Observando-se as Figuras 4.4 (caso 1) e 4.11 (caso 6) e as Figuras 4.7 (caso 4) e 4.14 (caso 9) verifica-se que, aumentando-se o coeficiente de transferência de calor de  $2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  para  $5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  e analisando-se a distribuição de temperatura nas seções de alturas  $z/H=0.0833, 0.5277$  e  $0.9722$  do leito, percebe-se que os valores dos gradientes de temperatura diminuem na direção do escoamento, e geram um deslocamento das isolinhas de maiores temperaturas para posições cada vez mais próximas ao centro do reator de leito fixo, surgindo dessa forma regiões com menores gradientes térmicos.

Numa comparação das Figuras 4.16 (a, b, c, d, e) pode-se observar que quando a porosidade aumenta há uma diminuição do gradiente de temperatura nas direções  $x$  e  $y$  para o valor de  $hw_{\text{ext}} = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , resultado similar para  $hw_{\text{ext}} = 2 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , sendo que para o coeficiente de transferência de calor externo menor apresenta menor variação no gradiente de temperatura em relação ao maior coeficiente.

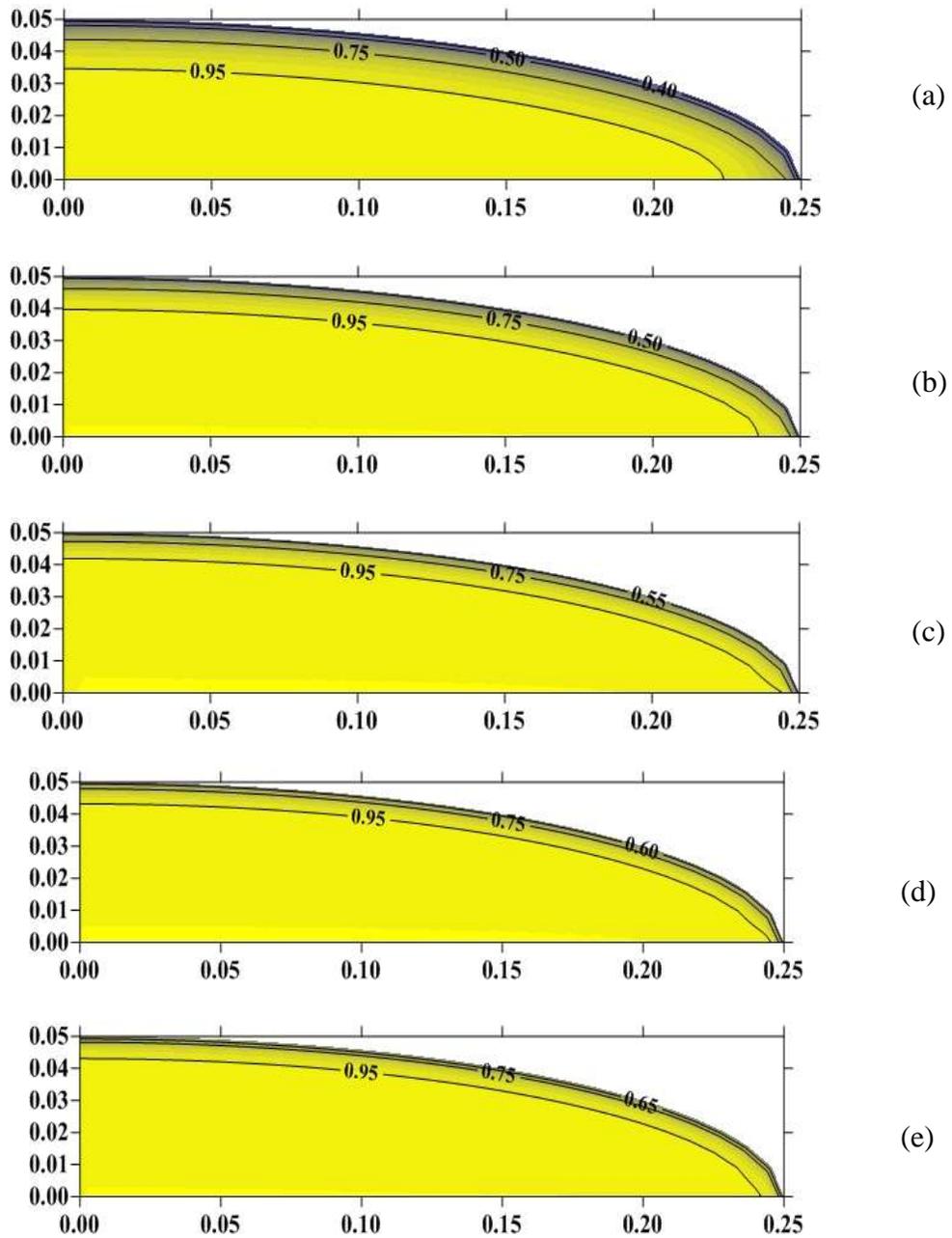


Figura 4.16: (a, b, c, d, e) Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{\text{ext}} = 5 \text{ W / m}^2 \text{ K}$ , na posição  $z/H = 0,0833$ , e  $H = 0.20 \text{ m}$ , a)  $\varepsilon = 0,2$  b)  $\varepsilon = 0,4$  c)  $\varepsilon = 0,6$  d)  $\varepsilon = 0,8$  e)  $\varepsilon = \text{variável}$ .

#### 4.2.2.2 Parede interna do reator

Considerando-se a parede interna do reator, pode-se observar nas Figura 4.17 (caso 11) e Figura 4.18 (caso 12) que aumentando-se o coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator  $hw_{int}$  de  $2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  para  $5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  aparentemente não é provocada nenhuma mudança no deslocamento ou aparecimento de isolinhas de temperatura que permita analisar o fenômeno de transferência de calor devido à variação do  $hw_{int}$ .

Em Engenharia não diz-se que uma grandeza é ‘grande’ ou ‘pequena’ sem estabelecer uma comparação com uma grandeza de referência. É a comparação com um padrão que estabelece a grandeza de uma propriedade. Este conceito também pode ser levado ao estudo da relevância de cada termo da equação. Assim, faz-se necessário uma análise de escala para verificar a influência do coeficiente de transferência do calor interno na solução do problema. A análise de escala não resolve a equação, sua finalidade é estimar a ordem de magnitude de cada termo e se for o caso, simplificá-la ou não.

Fazendo-se uma inspeção de análise de escala e considerando-se  $k_{wr}$  no infinito, considerando apenas o denominador da Equação 3.79, tem-se: a Equação 4.1.

$$\left[ \frac{\left(1 + \frac{k_f}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k_f \hat{U}}{h_{wext} \delta \xi_n} + \frac{h_{win} \delta \xi_n}{k_{wr} \hat{U}}\right)}{\left(h_{win} + \frac{k \hat{U}}{\delta \xi_n}\right)} \right] \quad (4.1)$$

Fazendo-se uma inspeção de análise de escala, considerando  $k_{wr} \rightarrow \infty$ , a Equação (4.1) reduz-se a :

$$\left[ \frac{1}{\left( h_{win} + \frac{k \hat{U}}{\delta \xi_n} \right)} + \frac{1}{h_{wext}} \right] \quad (4.2)$$

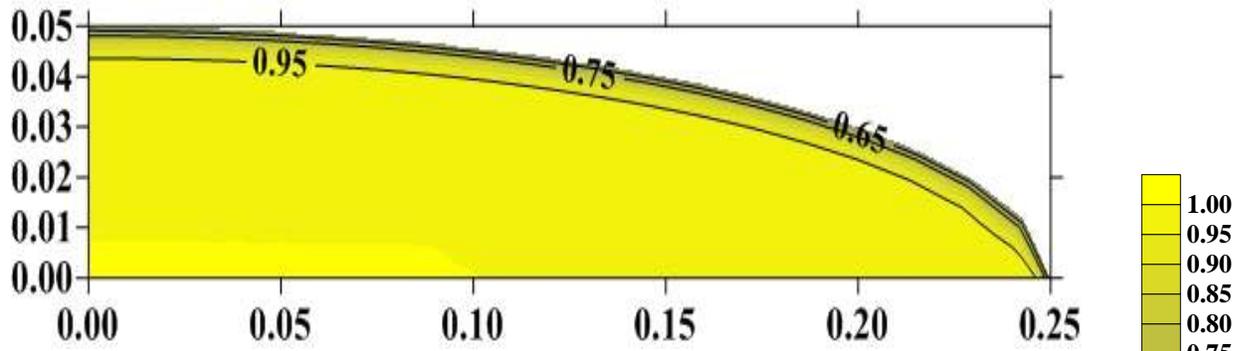
Considerando-se, ainda  $hw_{int} = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $k = 1 \text{ w/mK}$ ,  $hw_{ext} = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\delta \xi_n = 5,6 \times 10^{-4} \text{ m}$  e calculando-se  $\hat{U}$  cujo valor é 400, pode-se escrever a Equação (4.2) da seguinte forma:

$$\left[ \frac{1}{\left( 2 + \frac{1 \times 400}{5,6 \times 10^{-4}} \right)} + \frac{1}{5} \right] \quad (4.2a)$$

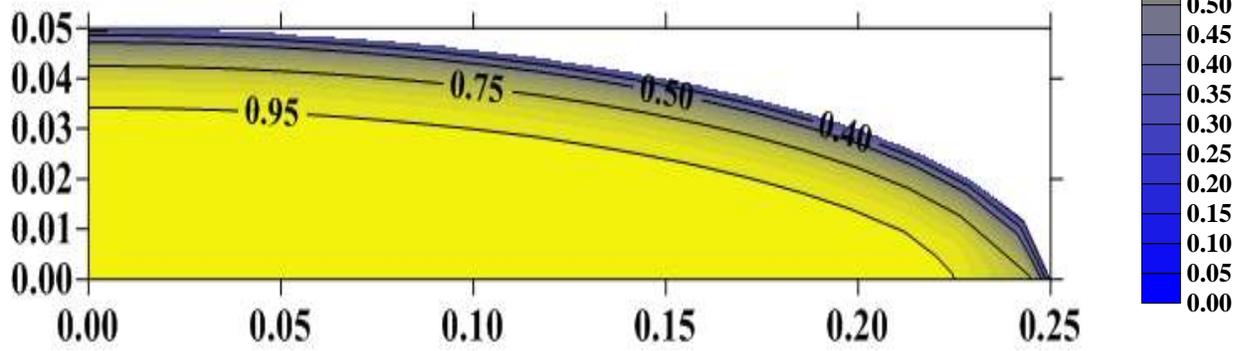
Novamente, usando-se o termo do numerador do 1º termo da Equação (4.2a), obtém-se:

$$2 + \frac{1 \times 400}{5,6 \times 10^{-4}} = 2 + 71,43 \times 10^4 \quad (4.3)$$

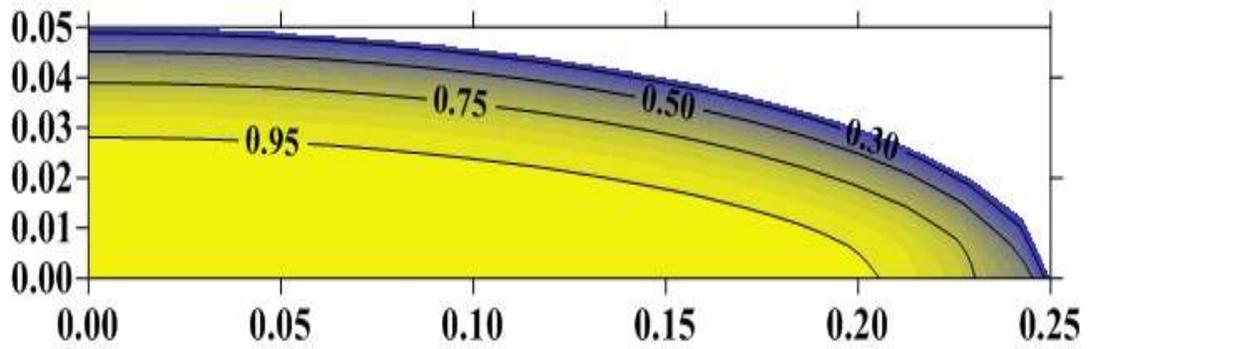
Analisando o valor numerado da Equação (4.2), pode-se concluir que o termo  $hw_{int} < \frac{k_f \hat{U}}{\delta \xi_n}$ , isto mostra que o coeficiente de transporte de calor convectivo interno exerce pouca influência na distribuição da temperatura. Portanto, a influência do aumento do  $hw_{ext}$  na distribuição de temperatura é bem maior do que a do  $hw_{int}$ . Isto pode ser observado também na expressão (4.3) onde o valor deste coeficiente é absorvido pela segunda parcela.



(a)

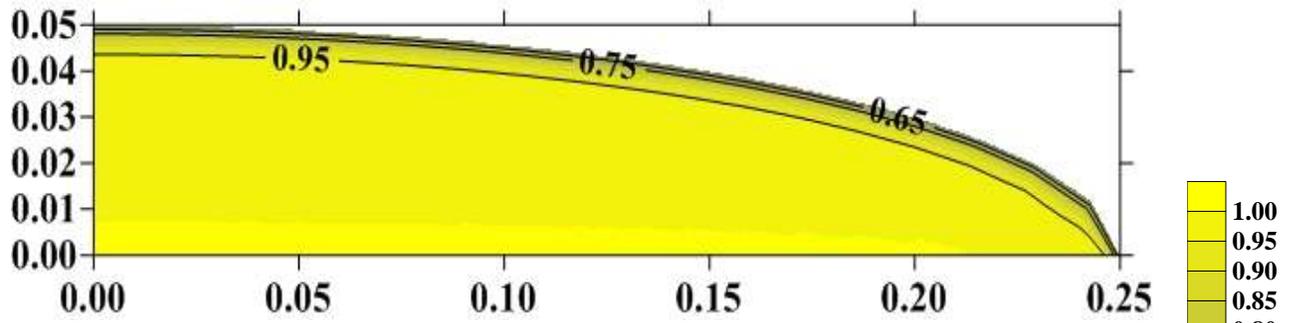


(b)

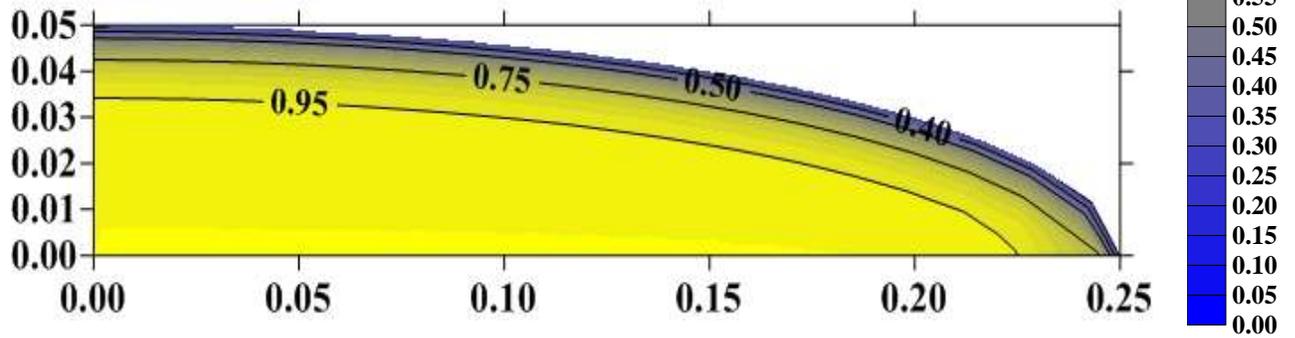


(c)

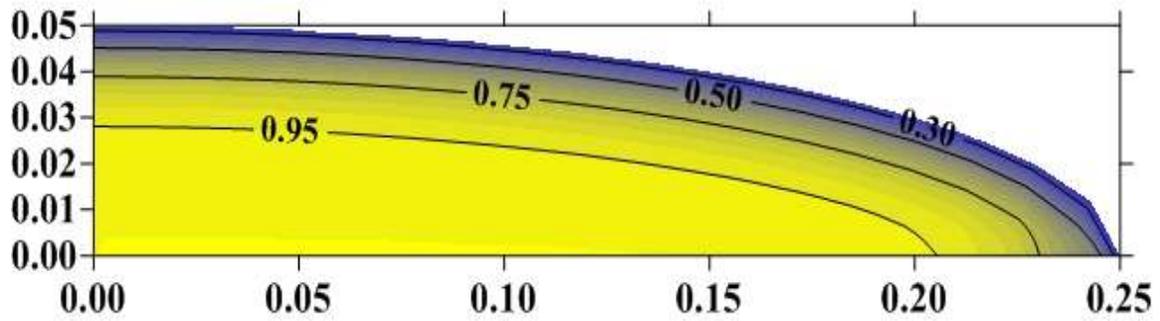
Figura 4.17: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{int} = 2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0.4$  em  $z/H$  a) 0.0833, b) 0.5277 e c) 0.9722 e  $H=0,20\text{m}$ ,(caso 11).



(a)



(b)



(c)

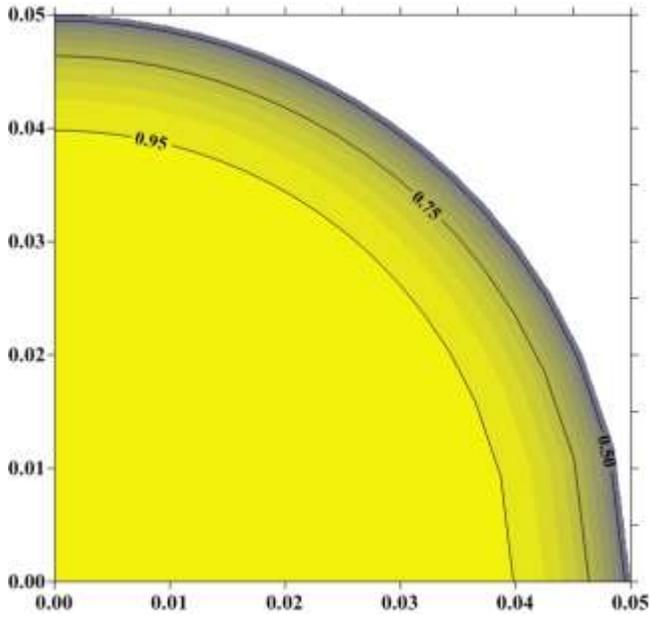
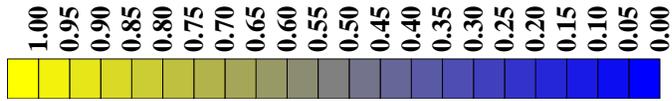
Figura 4.18: Distribuição de temperatura adimensional Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw_{int} = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 12).

### 4.2.3 Avaliação da geometria do reator

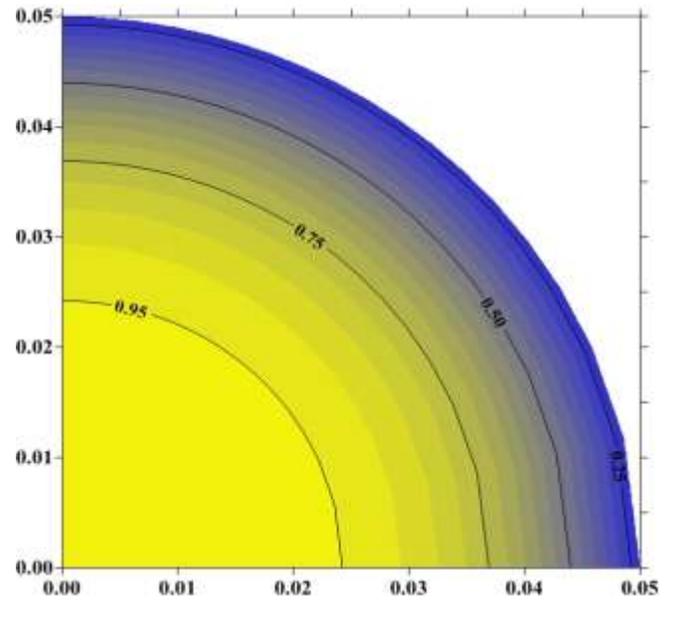
#### 4.2.3.1 Efeito da razão de aspecto geométrico

Nos casos 13 a 17 da Tabela 3.2 considera-se que o reator de leito fixo tem uma geometria cilíndrica circular de razão de aspecto geométrico  $L_2/L_1 = 1$ . Fixando-se o valor do coeficiente de transferência de calor  $hw_{ext} = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  e considerando-se três alturas de seções do leito compactado (0.0833, 0.5277 e 0.9722), observa-se na Figura 4.19 (caso 13) para uma porosidade  $\varepsilon = 0,2$  ocorrem deslocamentos de isolinhas (isotermas) de maiores valores de temperatura na direção radial cada vez mais próxima do centro do reator gerando dessa forma regiões com maiores variações de temperatura. Há ainda grandes variações de temperatura na direção axial do reator. A medida que aumenta-se a porosidade, fato similar pôde ser observado nas Figuras 4.20, 4.21 e 4.22 referentes aos casos 14 a 16, respectivamente. Nos casos de 13 a 16 (Figuras 4.19 a 4.22), as isolinhas apresentam uma forma concêntrica enquanto no caso 17 (Figura 4.21) mostram uma forma irregular, possivelmente devido ao fato da porosidade ser variável neste caso. Ainda observa-se nos casos 13 a 17 (Figuras 4.19 a 4.23) que a transferência de calor ocorre de forma mais intensa, provocando uma distribuição de temperatura bem variada tanto na direção axial quanto na direção radial. Em outras palavras, pode-se dizer, que no caso dessa geometria, um aumento na porosidade do leito implica numa diminuição do gradiente de temperatura na seção transversal do reator e o fluido perde mais calor para parede do reator.

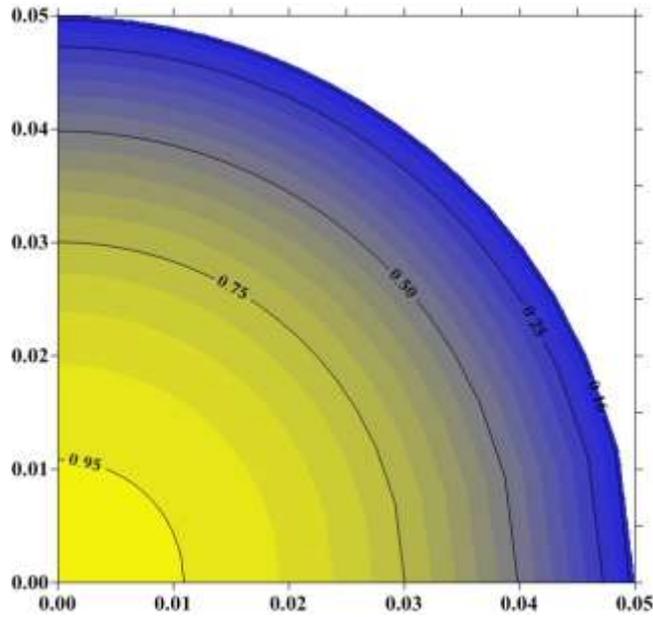
Comparando-se o comportamento da distribuição de temperatura na seção do reator com geometria cilíndrica circular com aquela de um reator com seção cilíndrica elíptica utilizando-se os casos 14 (Figura 4.20) e 7 (Figura 4.12), verifica-se comportamento similar, exceto devido ao efeito de borda mostrado na Figura 4.10 (caso 7) devido a distribuição da porosidade na parte mais pontiaguda do cilindro elíptico e razão de aspecto diferentes. 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.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.19: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,2$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 13).

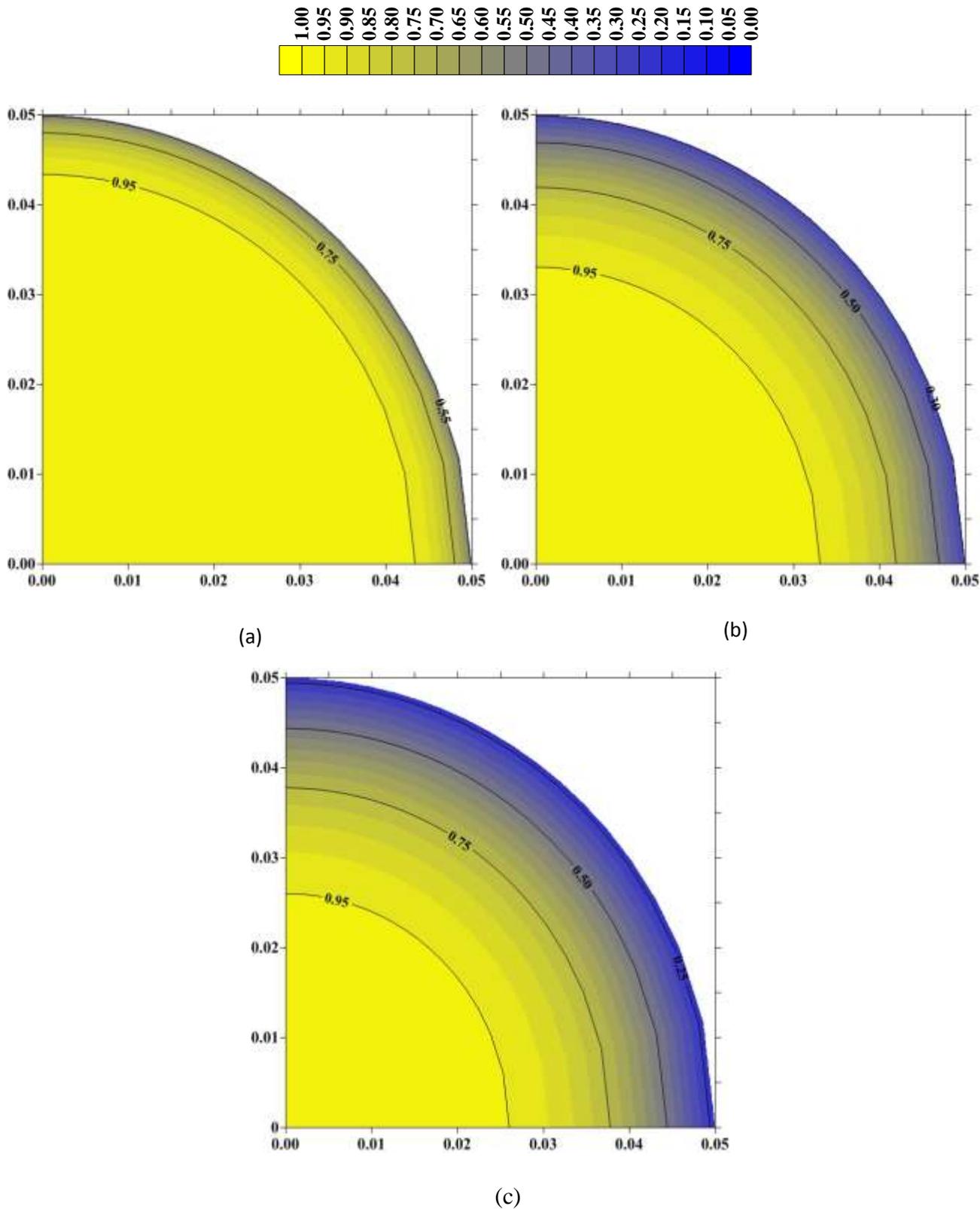


Figura 4.20: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 14).

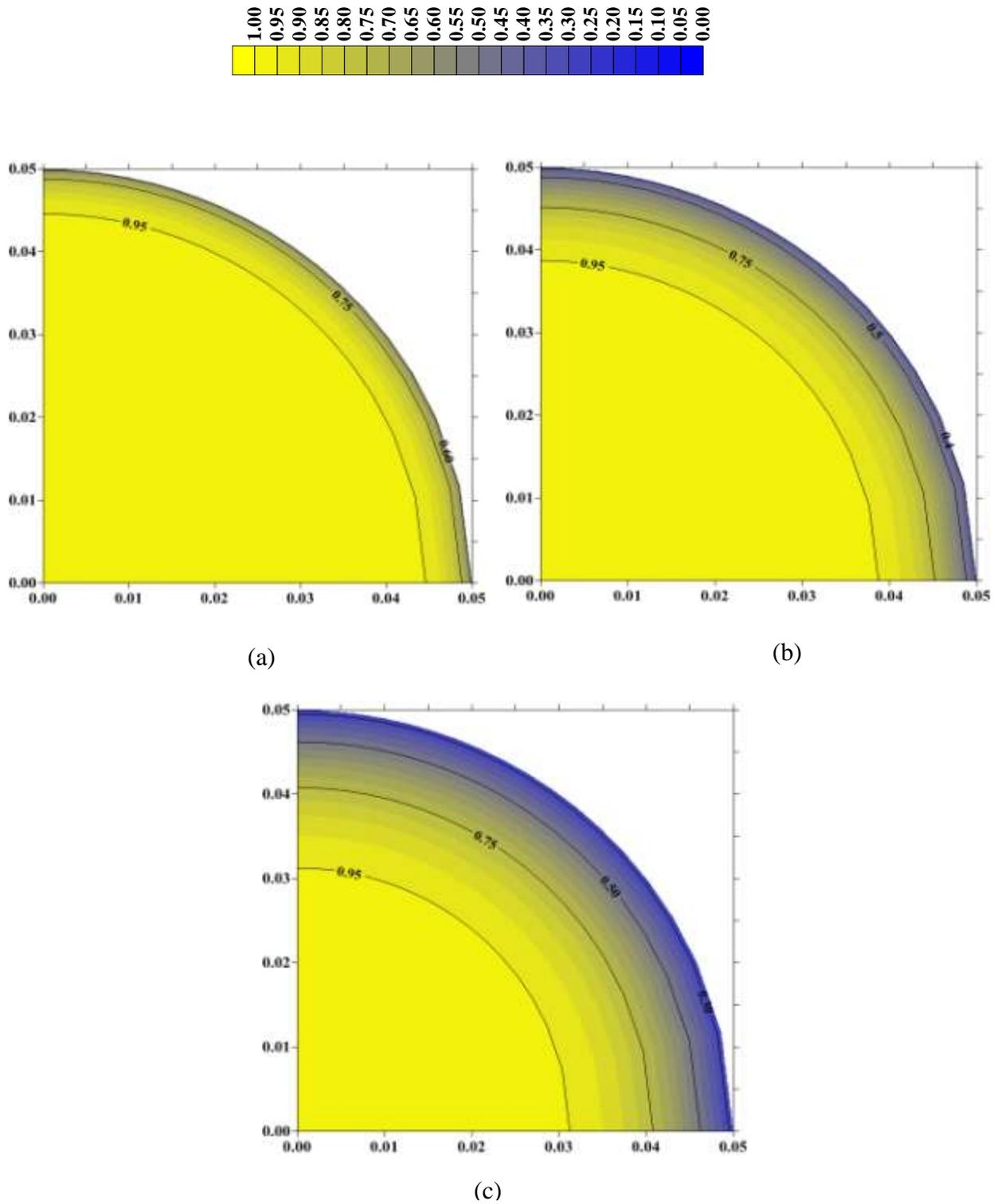


Figura 4.21: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,6$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 15).

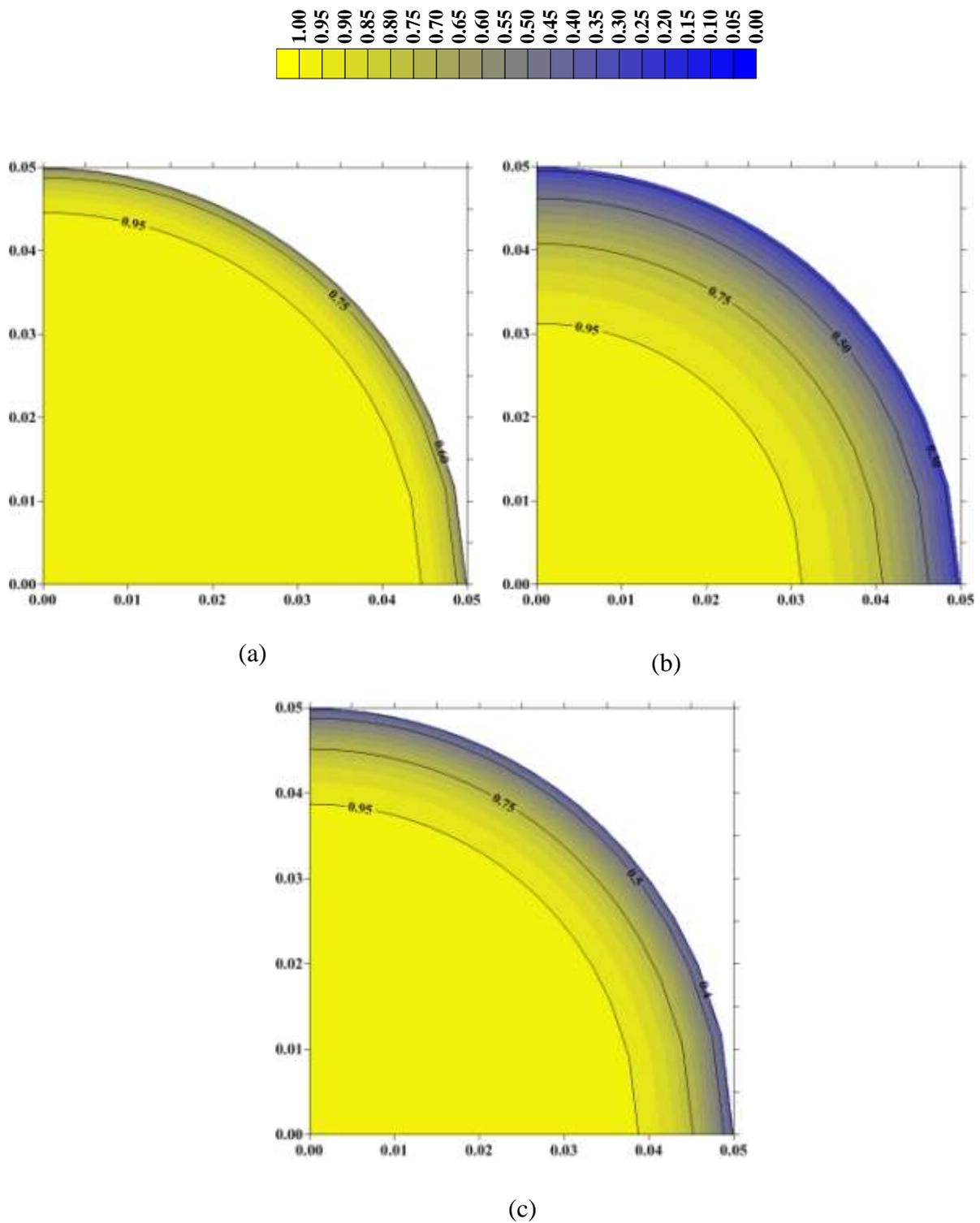


Figura 4.22: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $h_w = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,8$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 16).

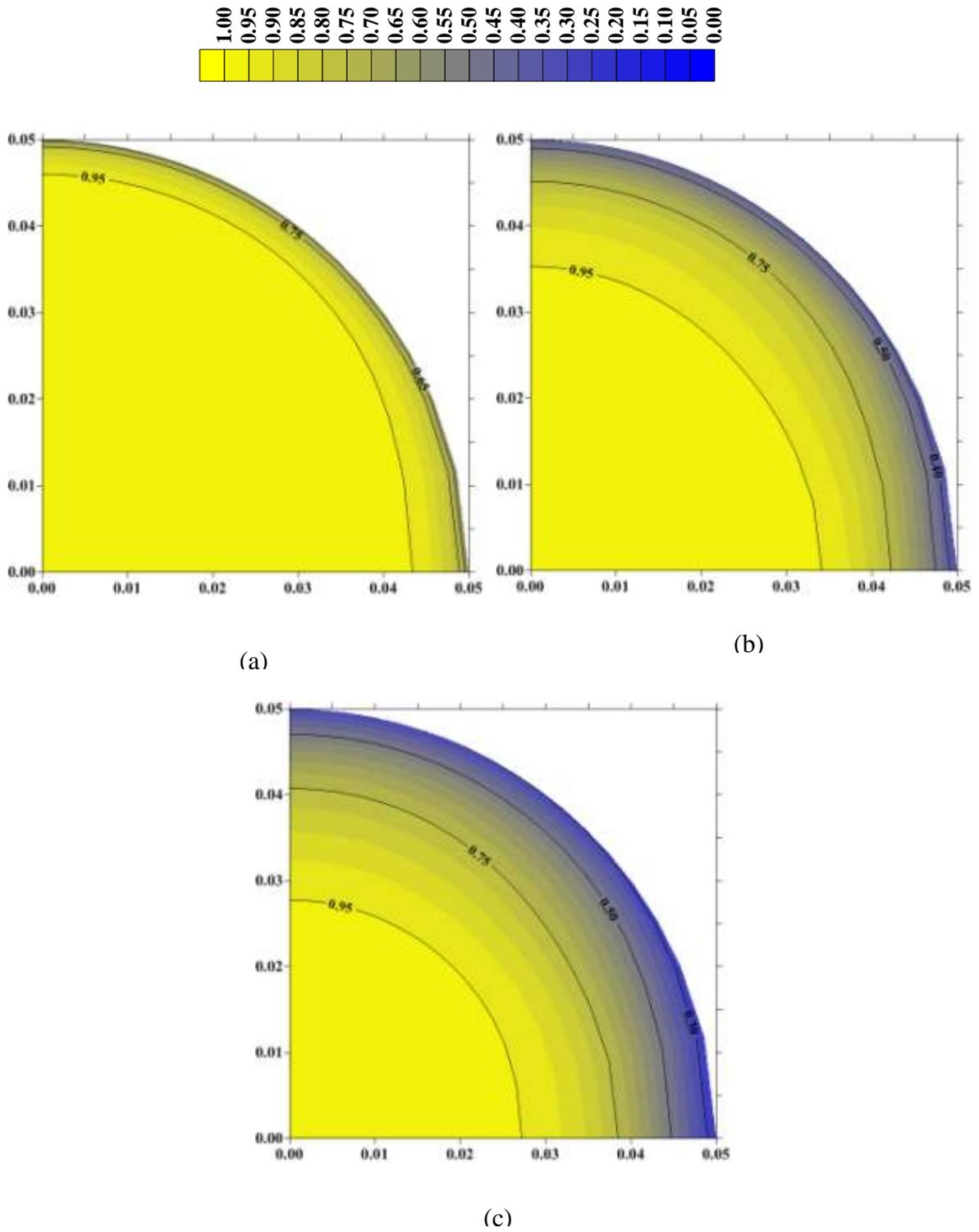


Figura 4.23: Distribuição de temperatura adimensional para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon =$  variável em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 17).

#### 4.2.3.2 Efeito da altura do leito

Quando aumenta-se  $H$  de 0,30 m para 0,40 m ocorre uma diminuição no valor do gradiente de temperatura na direção radial. Assim, pode-se dizer que aumentando-se a altura do leito ocorre uma maior transferência de calor do fluido (ar) para a parede do reator. Percebe-se que um maior resfriamento acontece no maior valor de  $H$  (altura do leito) em virtude de haver maior área para troca de calor, Figura 4.24 (caso 18) e Figura 4.25 (caso19).

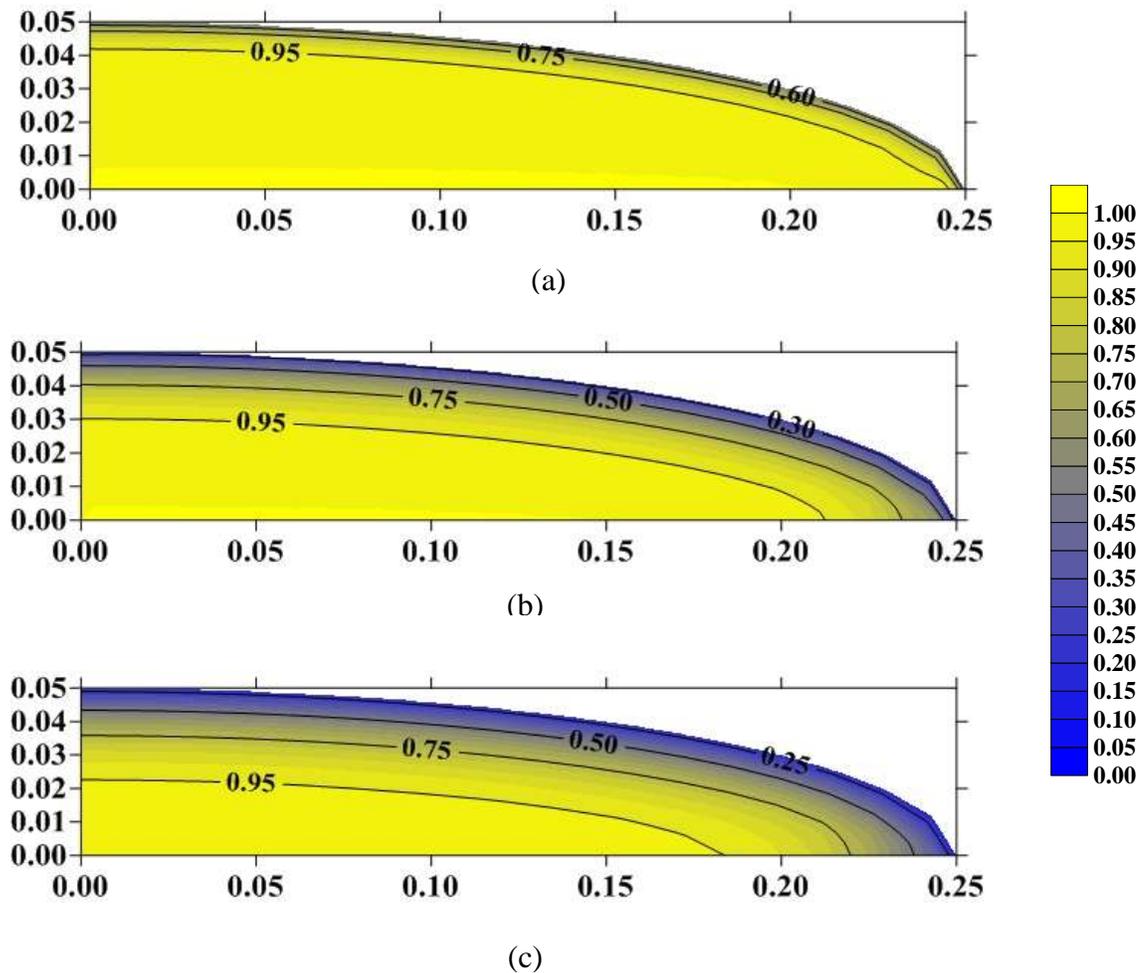
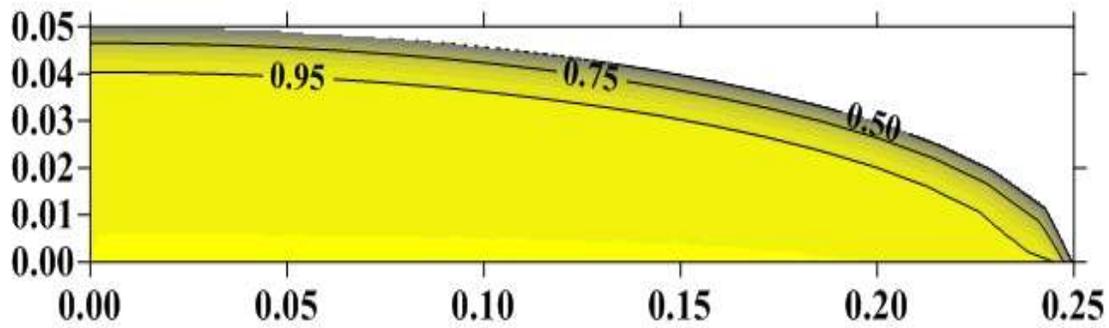
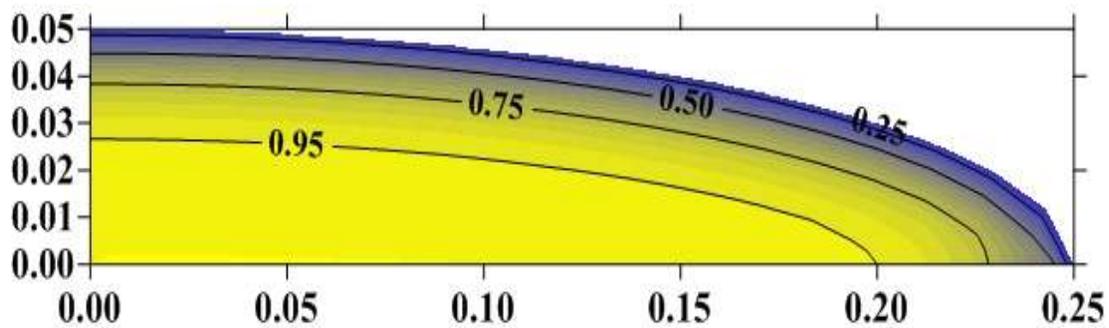


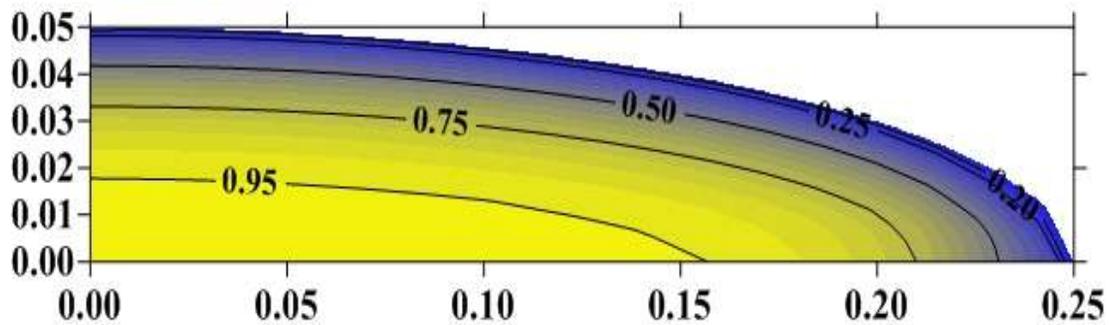
Figura 4.24: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $H = 0,30 \text{ m}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722, (caso 18).



(a)



(b)



(c)

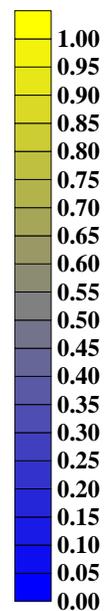


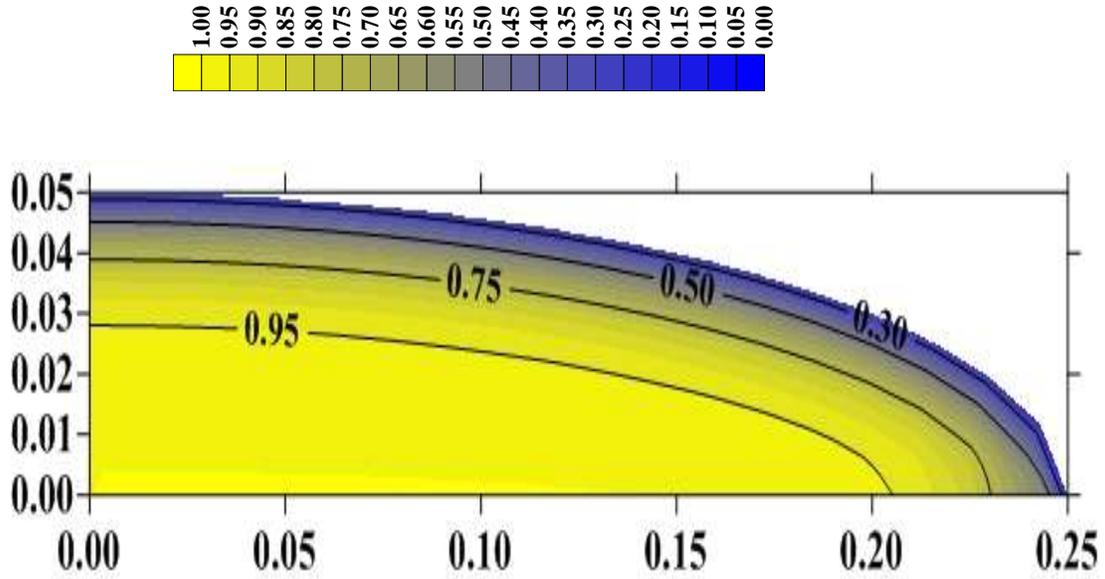
Figura 4.25: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $H = 0,40 \text{ m}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722,(caso19).

## 4.2.4 Efeito da temperatura do fluido

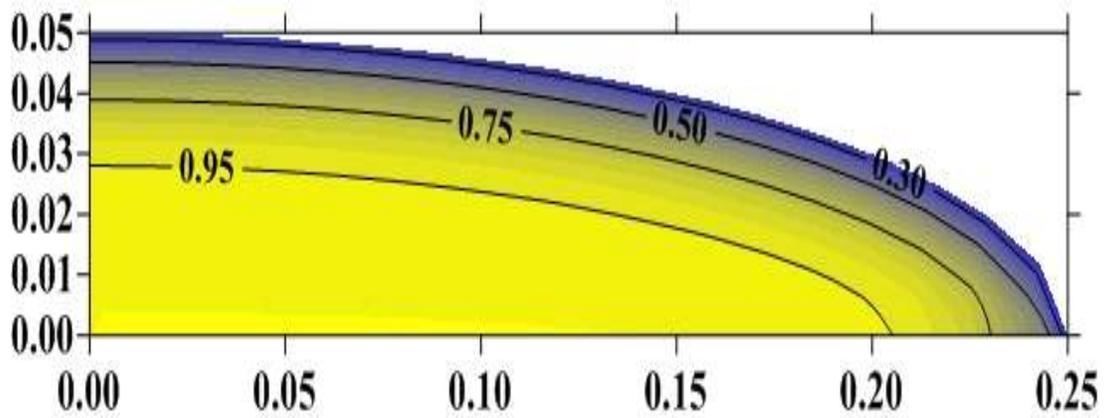
### 4.2.4.1 Efeito da temperatura do ar na entrada do reator

Nos casos simulados de 7, 20, 21, e 22 trabalhou-se com a temperatura de forma adimensional. Desta forma, o efeito da variação da temperatura do fluido na entrada do reator no interior do mesmo. Isto pode ser visualizado na Figura 4.26. Uma alternativa é analisar os resultados na forma dimensional. Assim, para uma melhor análise considerou-se a coordenada  $y = 0,03\text{m}$  fixa, obteve-se a temperaturas nas coordenada  $x$  de 0.00; 0.05; 0.10 e 0.20 m, nas seções de  $z/H$  0.0833, 0.5277 e 0.9722. Com os dados obtidos da simulação foi possível gerar as Figuras 4.26, e 4.30. A Tabela 4.1 sumariza os resultados. Se for fixada as coordenadas  $P(x,y) = (0.10, 0.03)$  de um ponto numa determinada seção digamos  $z/H = 0.9722$ , pode-se observar os valores  $T = 48,64^\circ\text{C}$  para  $T_o = 50^\circ\text{C}$ ;  $T = 57,09^\circ\text{C}$  para  $T_o = 60^\circ\text{C}$ ;  $T = 67,28^\circ\text{C}$  para  $T_o = 70^\circ\text{C}$  e  $T = 77,74^\circ\text{C}$  para  $T_o = 80^\circ\text{C}$ . Assim, o efeito na variação da temperatura do fluido na entrada do reator reflete-se numa variação de temperatura em cada ponto no interior do reator. Uma análise da Tabela 4.1 e na Figura 4.26 mostra que existe uma variação da temperatura na direção  $x$  e que as menores temperaturas ocorrem próximo a parede do reator. Este efeito é mais acentuado para maiores temperatura do fluido na entrada do reator

Verifica-se de forma global que as variações de temperatura na direção  $x$  é bem maior que na direção axial  $Z$ .



(a)



(b)

Figura 4.26: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para o caso 20(  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $H = 0,20\text{m}$ , em  $z/H = 0.9722$  a)  $T_0 = 50^\circ\text{C}$  e b)  $T_0 = 80^\circ\text{C}$  ( casos 20 e 22).

**Tabela 4.2: Temperatura no interior do reator na posição  $y = 0,03\text{m}$  para diferentes temperaturas do fluido na entrada do reator.**

Caso	$T_0(^{\circ}\text{C})$	$z/H$	$T (^{\circ}\text{C})$				
			$x = 0.00\text{m}$	$x = 0.05\text{m}$	$x = 0.10\text{m}$	$x = 0.15\text{m}$	$x = 0.20\text{m}$
20	50	0.0833	50.00	49.99	49.96	48.67	41.36
		0.5277	49.62	49.58	48.63	43.20	36.33
		0.9722	48.64	48.55	46.76	40.62	34.89
21	60	0.0833	60.00	59.91	59.75	58.81	47.04
		0.5277	59.05	57.56	55.87	51.73	39.50
		0.9722	57.09	54.56	52.29	47.77	37.33
7	70	0.0833	70.00	69.97	69.92	67.34	52.72
		0.5277	69.24	68.63	67.26	56.41	42.66
		0.9722	67.28	65.92	63.52	51.26	39.77
22	80	0.0833	80.00	79.97	79.90	79.56	58.40
		0.5277	79.48	78.28	77.73	72.89	45.83
		0.9722	77.74	74.90	73.84	66.84	42.22

As Figuras 4.27 a 4.30 foram geradas a partir das informações obtidas nas simulações dos casos 7, 20, 21 e 22 conforme Tabela 4.1 para que fosse possível analisar o efeito da variação da temperatura na entrada do reator.

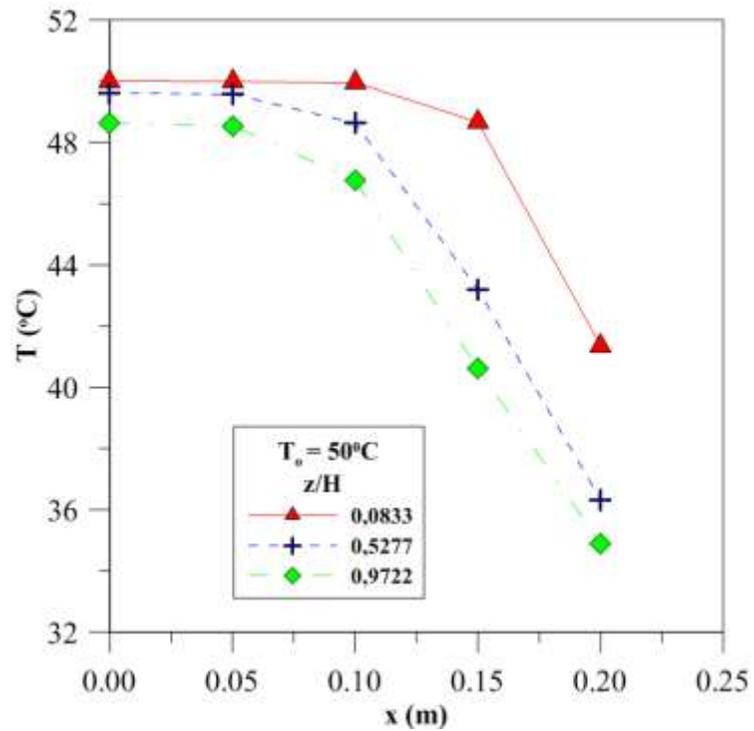


Figura 4.27: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $z/H$  0.0833, 0.5277 e 0.9722 para  $T_0 = 50^\circ\text{C}$  (caso 20).

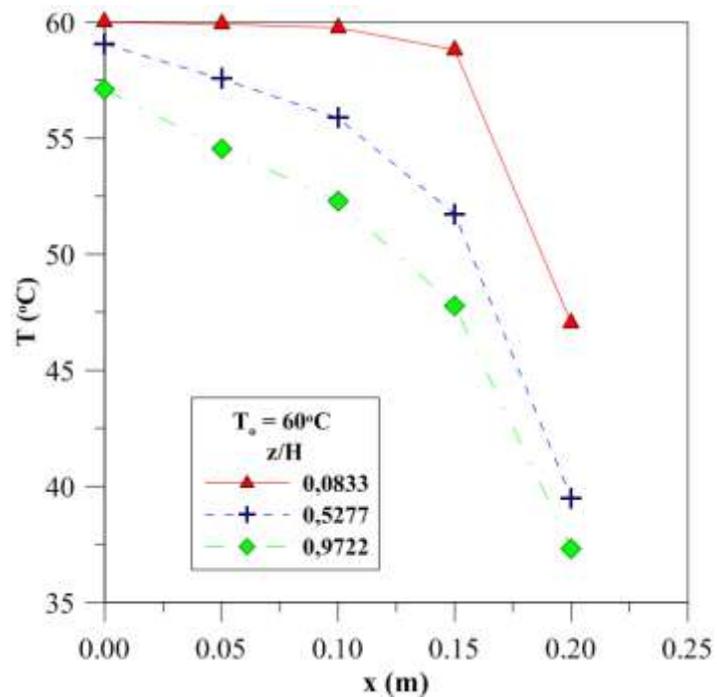


Figura 4.28: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $z/H = 0.0833, 0.5277$  e  $0.9722$  para  $T_0 = 60^\circ\text{C}$  (caso 21).

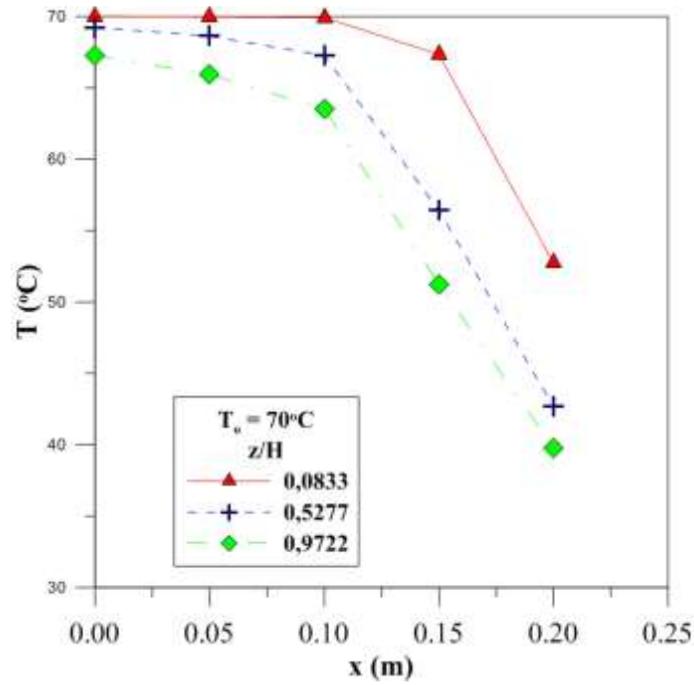


Figura 4.29: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $z/H = 0,0833, 0,5277$  e  $0,9722$  para  $T_0 = 70^\circ\text{C}$  (caso7).

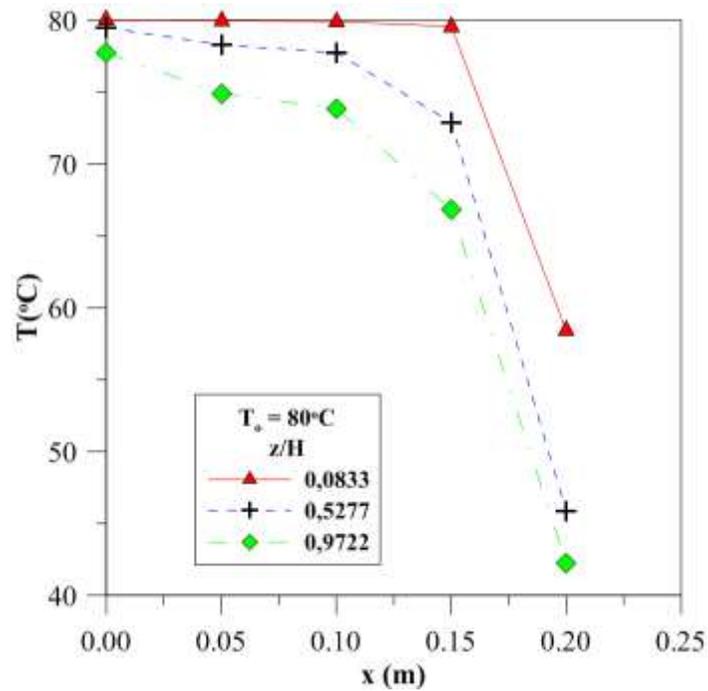


Figura 4.30: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $z/H = 0,0833, 0,5277$  e  $0,9722$  para  $T_0 = 80^\circ\text{C}$  (caso 22).

#### 4.2.4.2 Efeito da temperatura do fluido refrigerante

Nas simulações do caso 7 e dos casos 23 a 26 trabalhou-se com a temperatura na forma adimensional. Considerou-se na entrada do reator a temperatura constante  $T_o = 70^\circ\text{C}$  e considerou-se que a temperatura do fluido refrigerante era de  $T_m = 20, 40, 50, \text{ e } 60^\circ\text{C}$ . Deste modo, o efeito da variação da temperatura do fluido refrigerante no interior do reator, não pode ser verificado. Como visualizado na Figura 4.31. Uma alternativa é fazer uma análise dos resultados na forma dimensional. Assim, considerou-se a coordenada  $y = 0.03\text{m}$  fixa e obteve-se a temperatura nas coordenadas  $x = 0.00, 0.05, 0.10, 0.15 \text{ e } 0.20 \text{ m}$ , nas seções  $z/H = 0.0833, 0.5277 \text{ e } 0.9722$ , conforme apresentados nas figuras 4.32 a 4.35. A Tabela 4.2 resume os resultados obtidos. Se for fixada as coordenadas  $P(x,y) = (0.15, 0.03)$  de um ponto na seção  $z/H = 0.5277$  pode-se observar os valores de  $T = 56,22^\circ\text{C}$  para  $T_m = 20^\circ\text{C}$ ;  $T = 59,80^\circ\text{C}$  para  $T_m = 40^\circ\text{C}$ ;  $T = 65,30^\circ\text{C}$  para  $T_m = 50^\circ\text{C}$  e  $T = 67,24^\circ\text{C}$  para  $T_m = 60^\circ\text{C}$ . Assim, verifica-se que o efeito na variação da temperatura do fluido refrigerante é similar ao efeito da variação da temperatura do fluido na entrada do reator que também se reflete numa variação de temperatura em cada ponto no interior do reator. Analisando-se a Tabela 4.2 e a Figura 4.32 percebe-se que existe uma variação da temperatura na direção  $x$  e que as maiores temperaturas ocorrem próximas a parede do reator. Este efeito é mais acentuado para maiores temperatura do fluido refrigerante.

Ainda, verifica-se de forma global que as variações de temperatura na direção  $x$  é bem maior que na direção axial  $z$ .

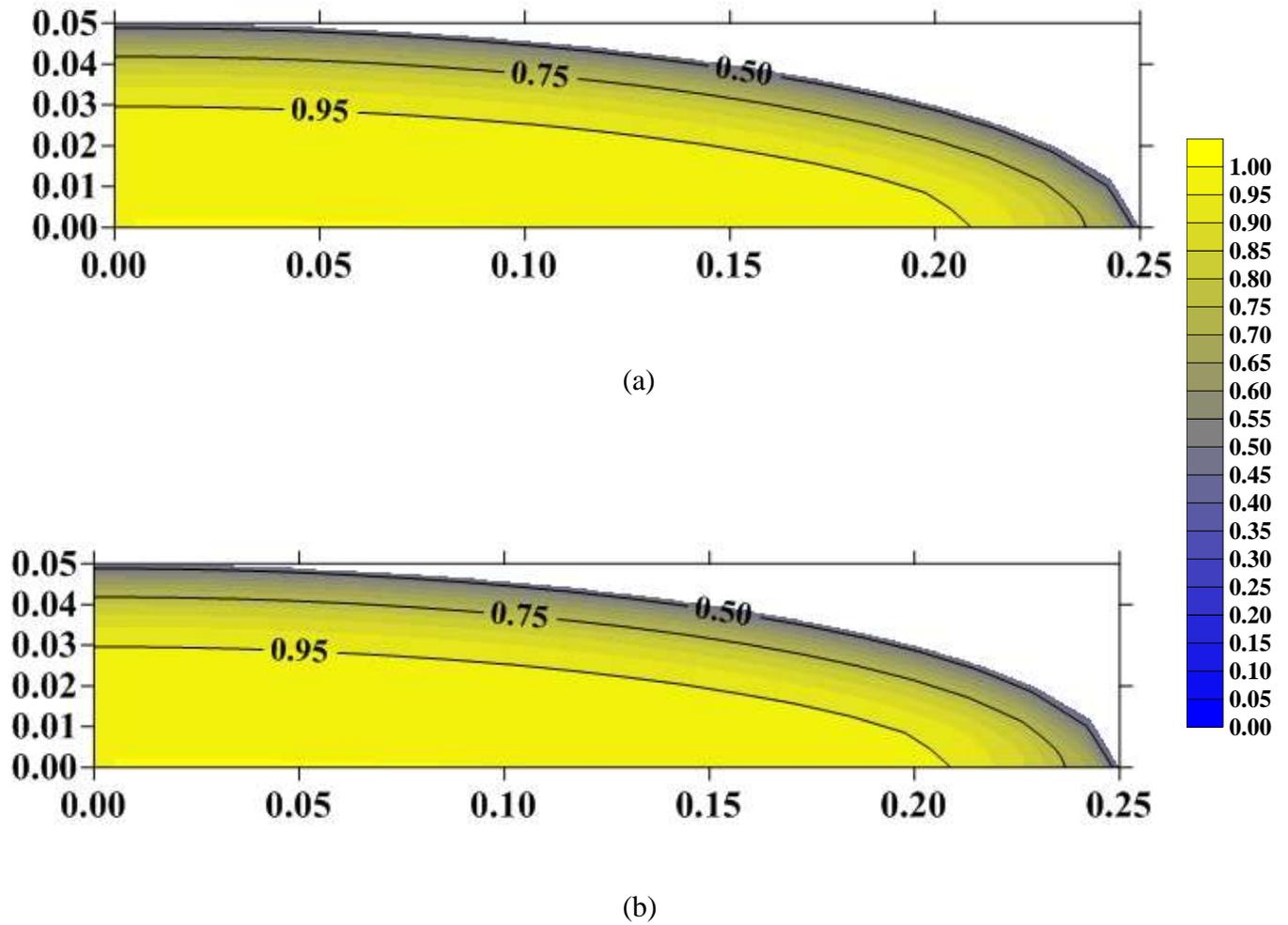


Figura 4.31: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $H = 0,20\text{m}$ , em  $z/H = 0,9722$  a)  $T_m = 20^\circ\text{C}$  e b)  $T_m = 60^\circ\text{C}$  (casos 23 e 26).

**Tabela 4.3: Temperatura no interior do reator na posição  $y = 0,03\text{m}$  para diferentes temperaturas do fluido refrigerante do reator.**

Caso	$T_m(^{\circ}\text{C})$	Z/H	T ( $^{\circ}\text{C}$ )				
			x = 0.00m	x = 0.05m	x = 0.10m	x = 0.15m	x = 0.20m
23	20	0.0833	70,00	69,97	69,95	68,02	49,94
		0.5277	69,06	68,28	66,58	56,22	36,67
		0.9722	66,61	64,90	61,90	49,62	32,88
24	40	0.0833	70,00	69,97	69,95	68,00	57,06
		0.5277	69,43	68,96	68,83	59,80	50,00
		0.9722	67,96	66,94	66,30	55,94	47,73
25	50	0.0833	70,00	69,99	69,89	69,46	61,36
		0.5277	69,62	69,31	69,09	65,30	56,33
		0.9722	68,64	67,96	67,53	62,66	54,89
26	60	0.0833	70,00	69,98	69,89	69,69	65,98
		0.5277	69,68	69,65	69,31	67,24	63,34
		0.9722	69,03	68,98	68,38	65,92	62,57

As Figuras 4.32 a 4.35 foram geradas a partir das informações obtidas nas simulações dos casos 7, 20, 21 e 22 conforme Tabela 4.1 para que fosse possível analisar o efeito da variação da temperatura na entrada do reator.

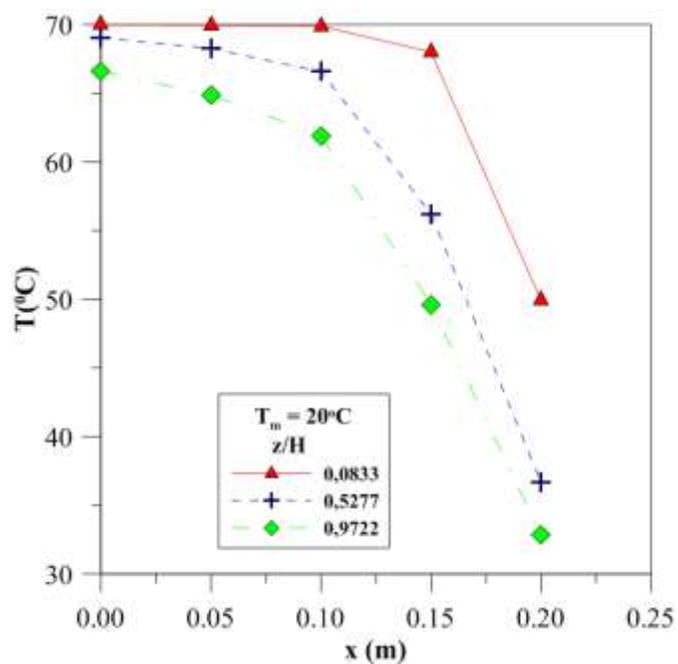


Figura 4.32: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $Z/H$  0.0833, 0.5277 e 0.9722 para  $T_m = 20^\circ\text{C}$  (caso 23).

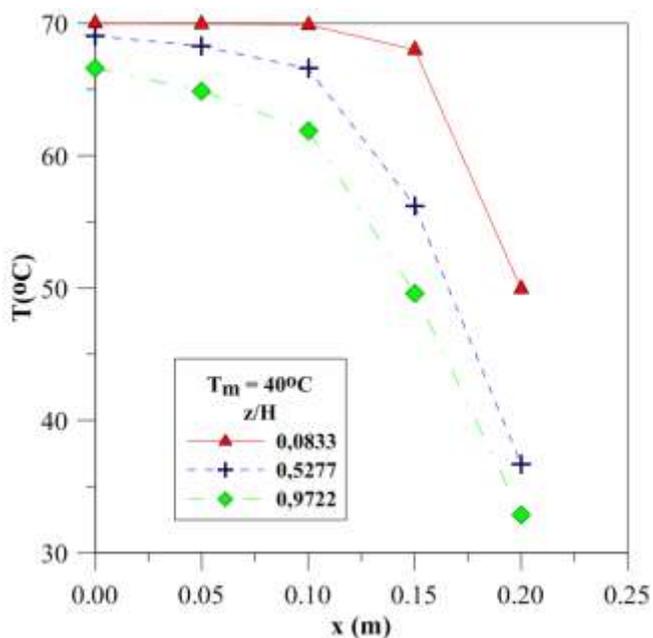


Figura 4.33: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $Z/H$  0.0833, 0.5277 e 0.9722 para  $T_m = 40^\circ\text{C}$  (caso 24).

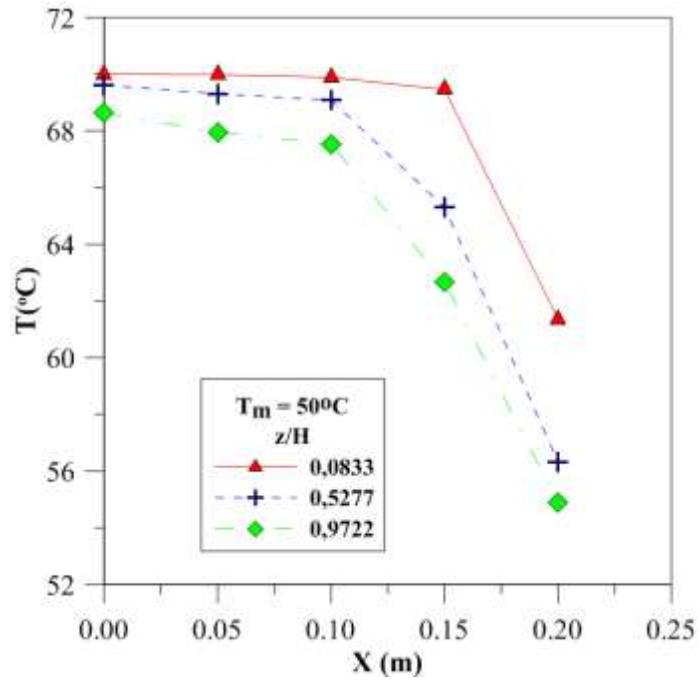


Figura 4.34: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $Z/H$  0.0833, 0.5277 e 0.9722 para  $T_m = 50^\circ\text{C}$  (caso 25).

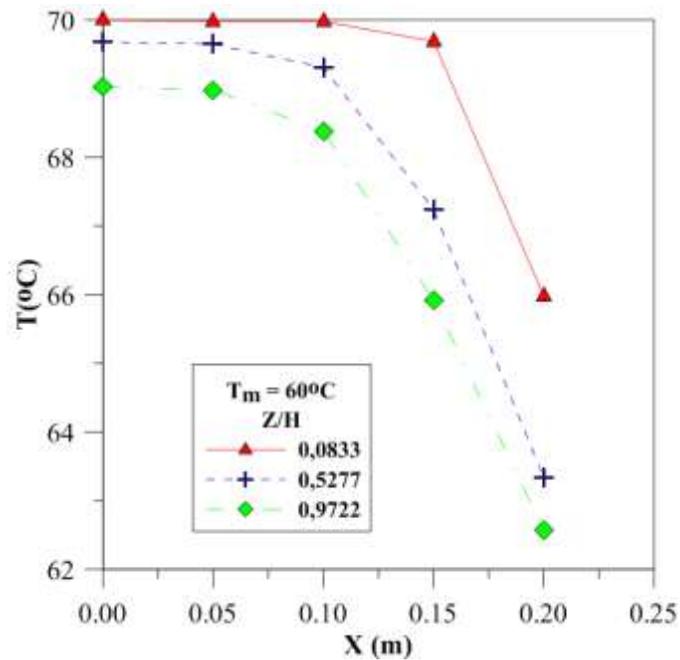


Figura 4.35: Temperatura na posição  $y = 0,03\text{m}$  fixa em função da coordenada  $x$  nas seções  $z/H$  0.0833, 0.5277 e 0.9722 para  $T_m = 60^\circ\text{C}$  (caso 26).

#### 4.2.5 Efeito da velocidade do ar

Para analisar o efeito da velocidade de entrada do ar na distribuição de temperatura no reator, foram simulados os casos 7 e os de 27 a 30 conforme Tabela 3.2 para  $hw_{\text{ext}} = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  e  $\varepsilon = 0,4$ . Os resultados estão plotados nas Figuras 4.36 (caso 27) a 4.40. Analisando-se a Figura 4.36 (caso 27), pode-se dizer que o escoamento do fluido ocorre lentamente para  $u_z = 0,001 \text{ m/s}$ . Nesta mesma figura, observa-se que a transferência de calor no meio poroso ocorre gradativamente de acordo com a altura da seção transversal. Isolinhas de maiores valores de temperatura começam a aparecer na seção mais baixa do leito enquanto nas mais altas aparecem isolinhas de menores valores de temperatura. Isto implica dizer que a transferência de calor radial supera bastante a transferência de calor axial. O efeito convectivo é bem inferior ao efeito difusivo. Comparando-se as Figuras 4.36 a 4.39 e 4.11, pode-se observar que ao aumentar a velocidade começam aparecer isolinhas de maiores valores de temperatura e as de menor valor desaparecem. Isto significa que um aumento na velocidade  $u_z$  provoca um aumento na transferência de calor para parede do reator e na direção axial do reator. Os efeitos; convectivo e difusivo ocorreram simultaneamente e ambos são importantes no fenômeno de transferência de calor.

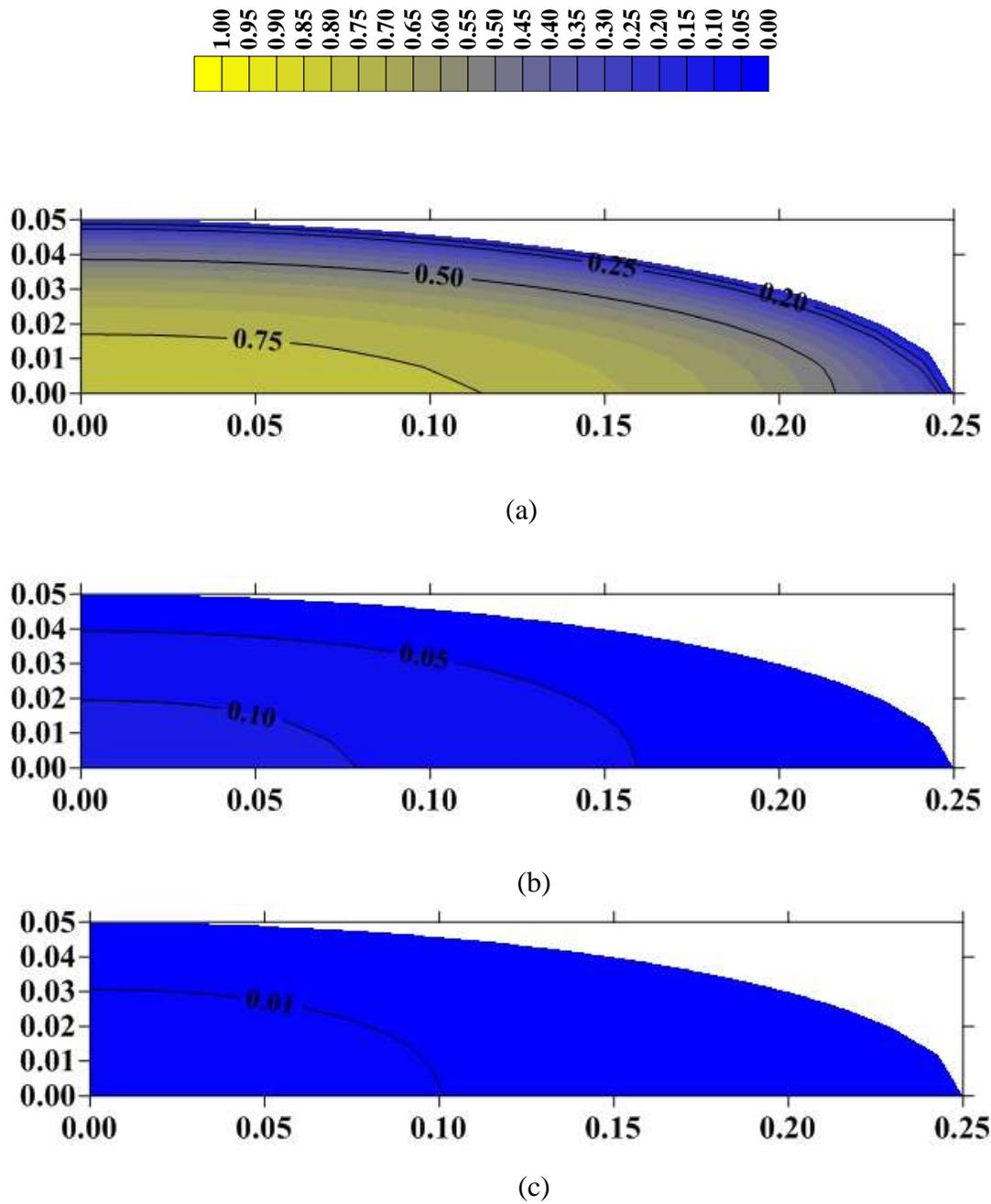


Figura 4.36: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $u_z = 0,001 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 27).

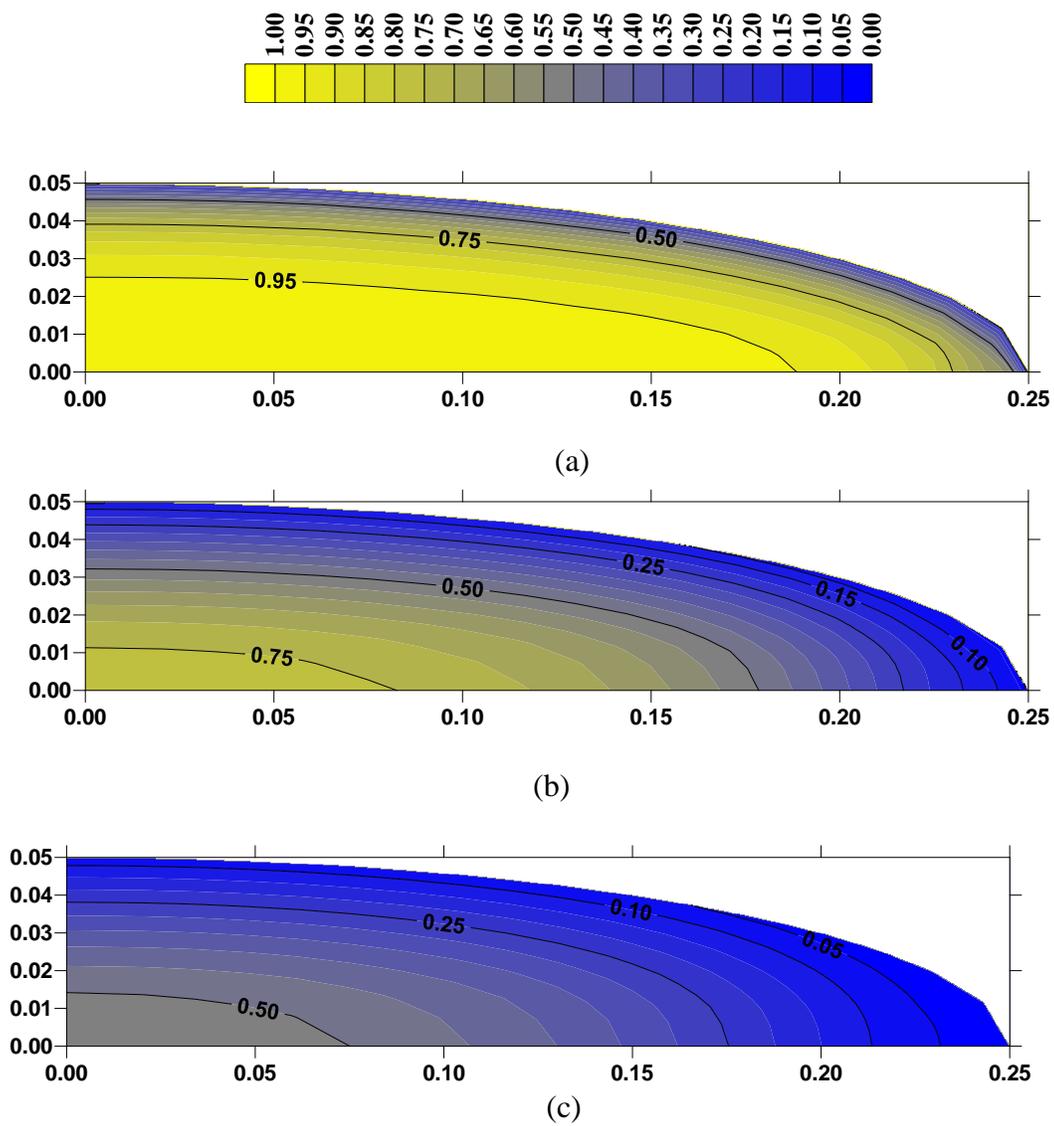


Figura 4.37: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $u_z = 0,01 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 28).

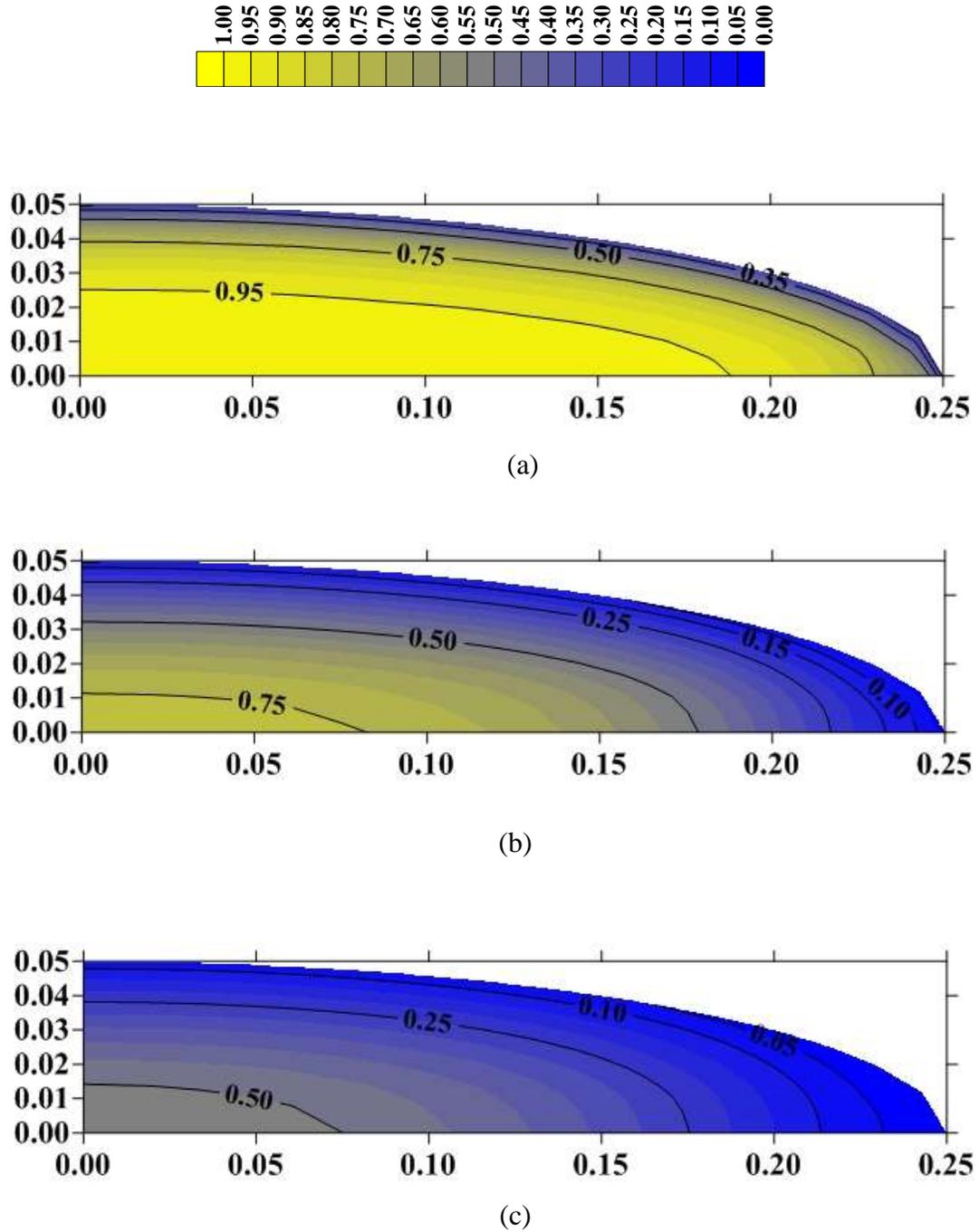


Figura 4.38: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $u_z = 0,05 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 29).

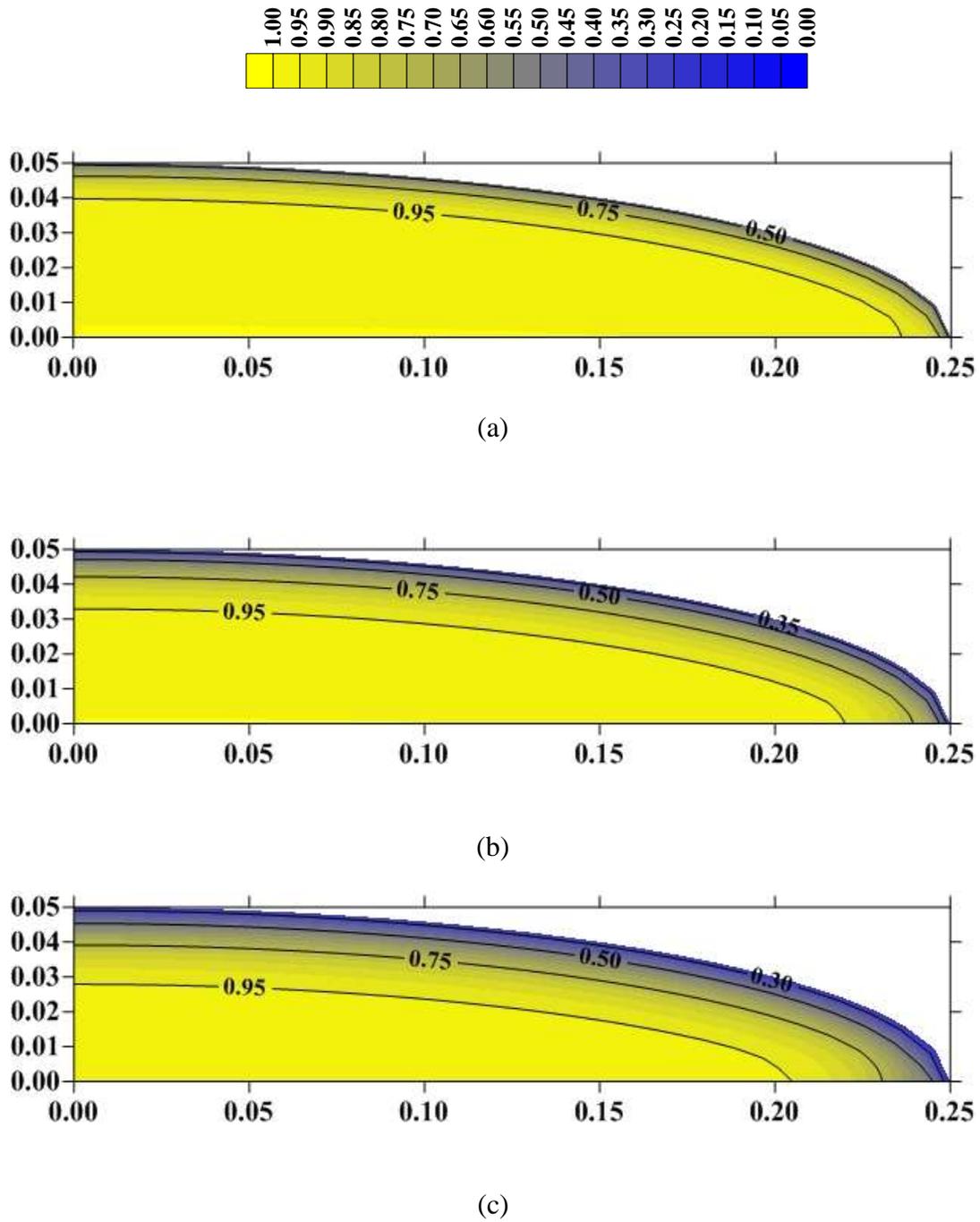


Figura 4.39: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $u_z = 0,11417 \text{ m/s}$  em  $Z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722(caso 7).

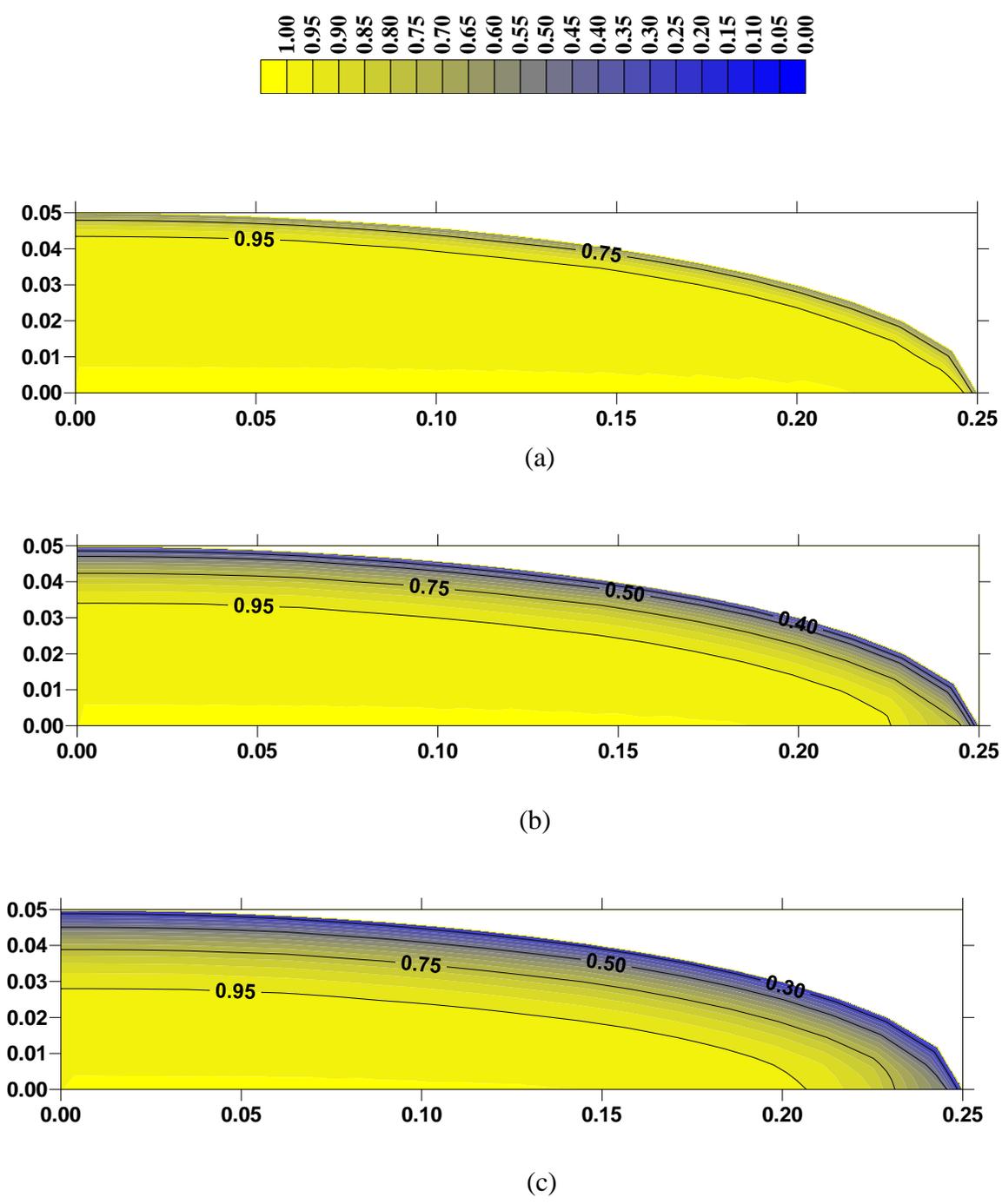


Figura 4.40: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$  e  $u_z = 0,11700 \text{ m/s}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722(caso 30).

#### **4.2.6 Efeito do material da parede do reator**

Para estudar o efeito do material da parede do reator sobre a distribuição de temperatura no interior do reator, foi selecionado três tipos de aços inoxidáveis e cobre puro conforme os casos 31 a 34 na Tabela 3.2 e as condutividades dos materiais podem ser vistas na Tabela 3.1. Os perfis adimensionais de temperatura obtidos são mostrados nas Figuras 4.41 a 4.44. Verificou-se, após análise das figuras, que o gradiente de temperatura axial é menor quando a condutividade térmica da parede do reator é mais elevado. Contudo, os resultados são muito similares, do ponto de vista de transferência do calor quem está dominando o fenômeno é o coeficiente de transferência do calor convectivo externo. No entanto, sob o aspecto do efeito do calor no equipamento, aços inoxidáveis são mais recomendáveis para a parede do reator por serem mais resistentes ao calor e a corrosão.

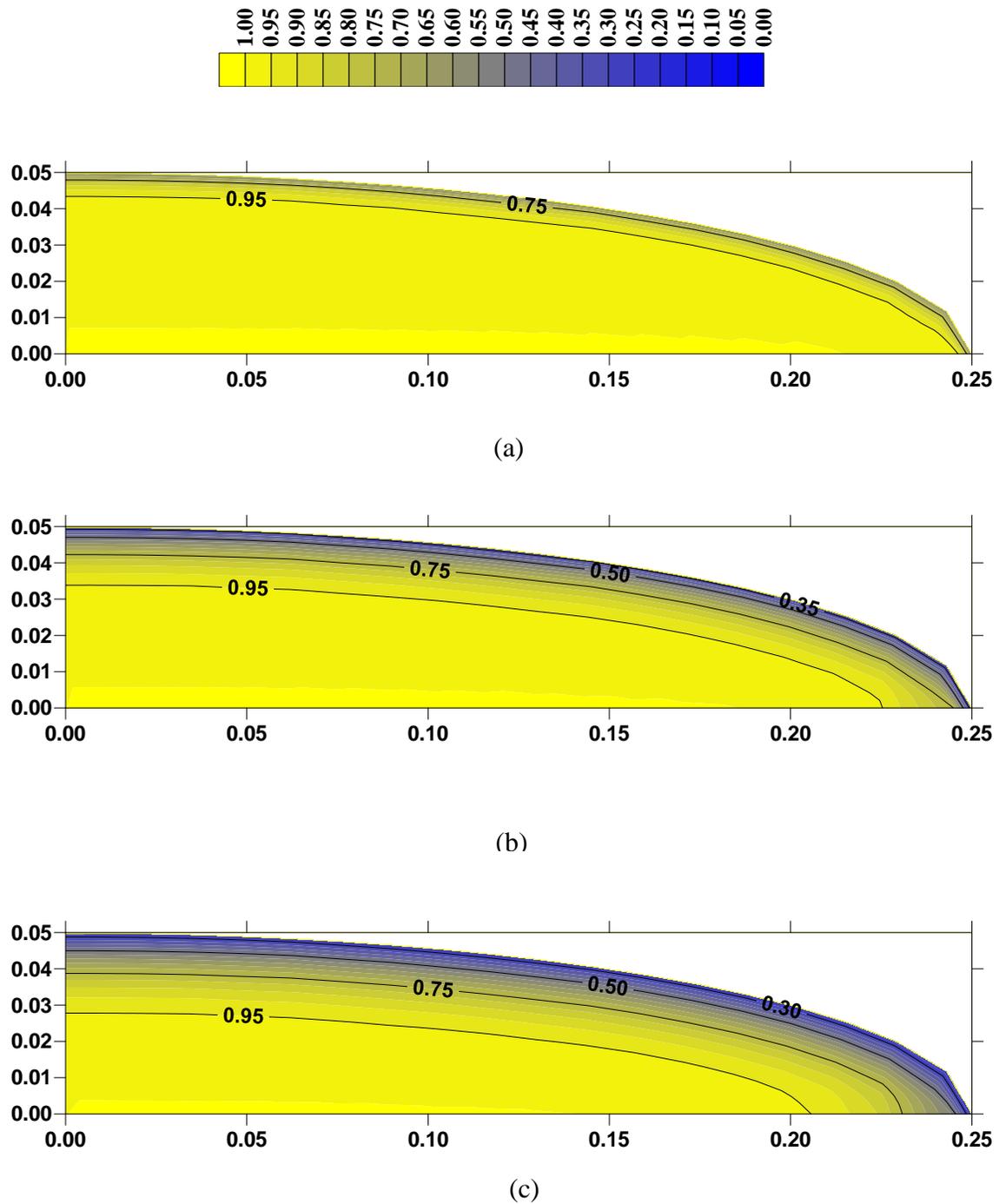


Figura 4.41: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ ,  $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 13,4 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 34).

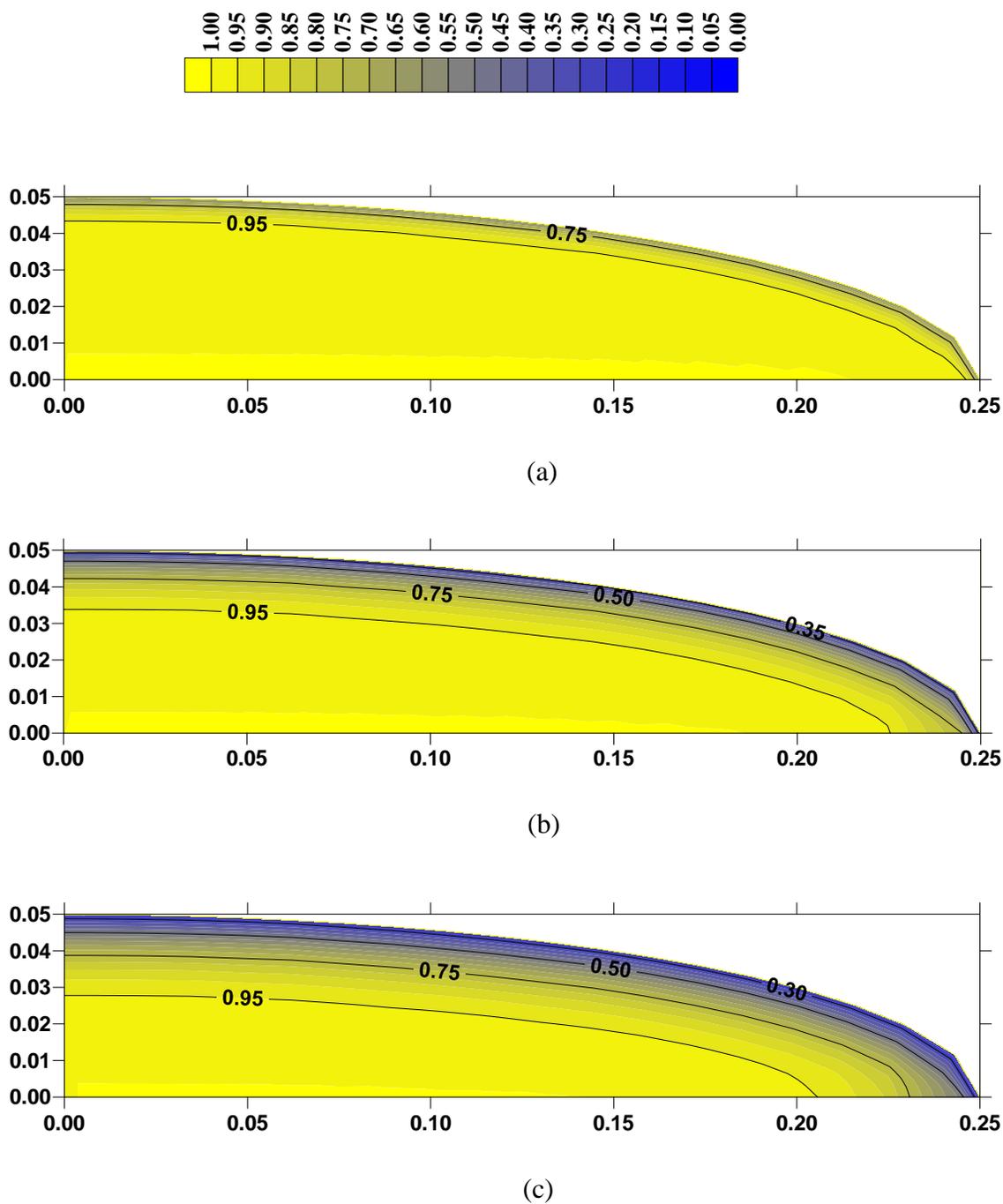


Figura 4.42: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ ,  $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wt}=14,9 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 33).

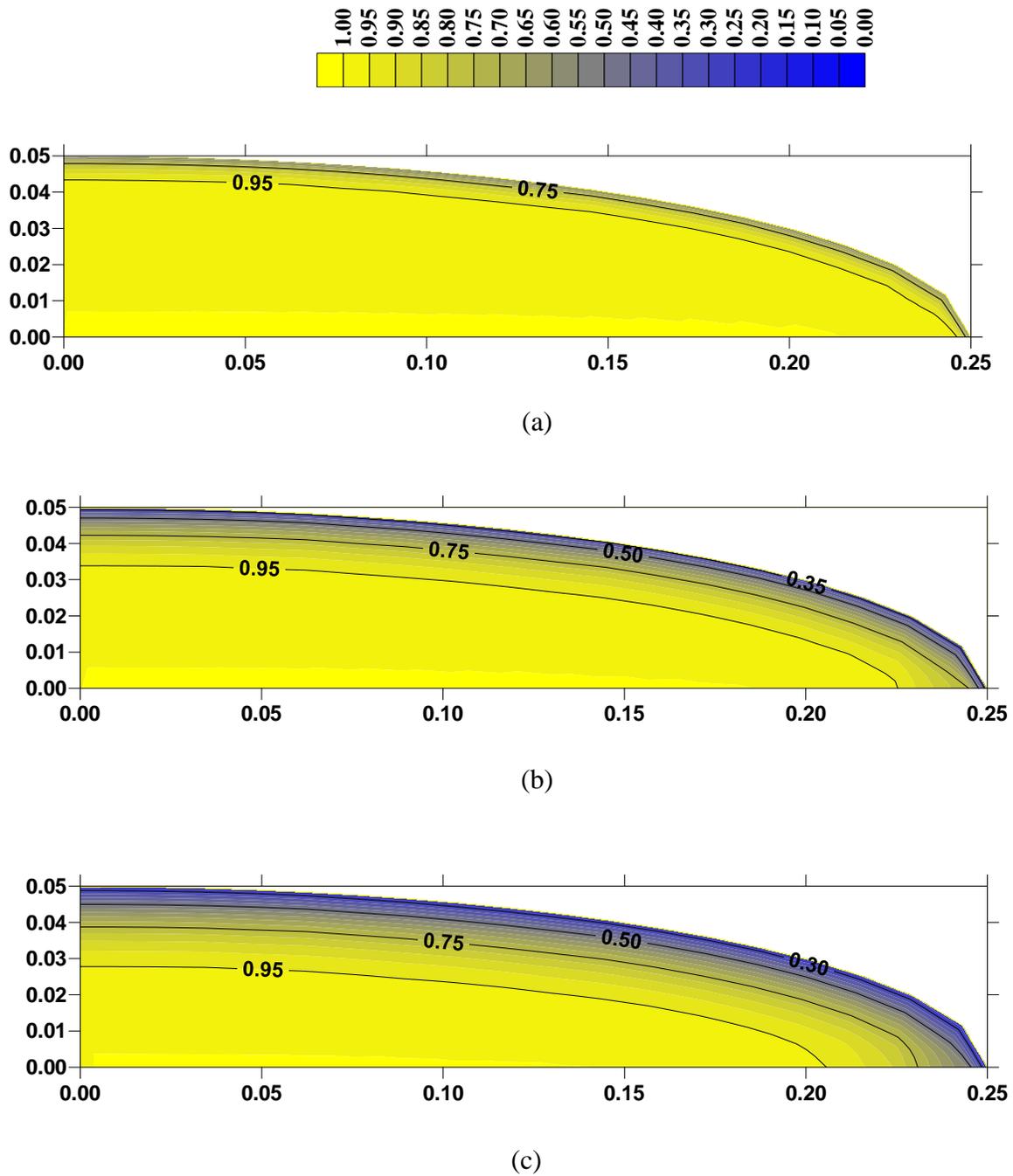


Figura 4.43 Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ ,  $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 15,1 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 32).

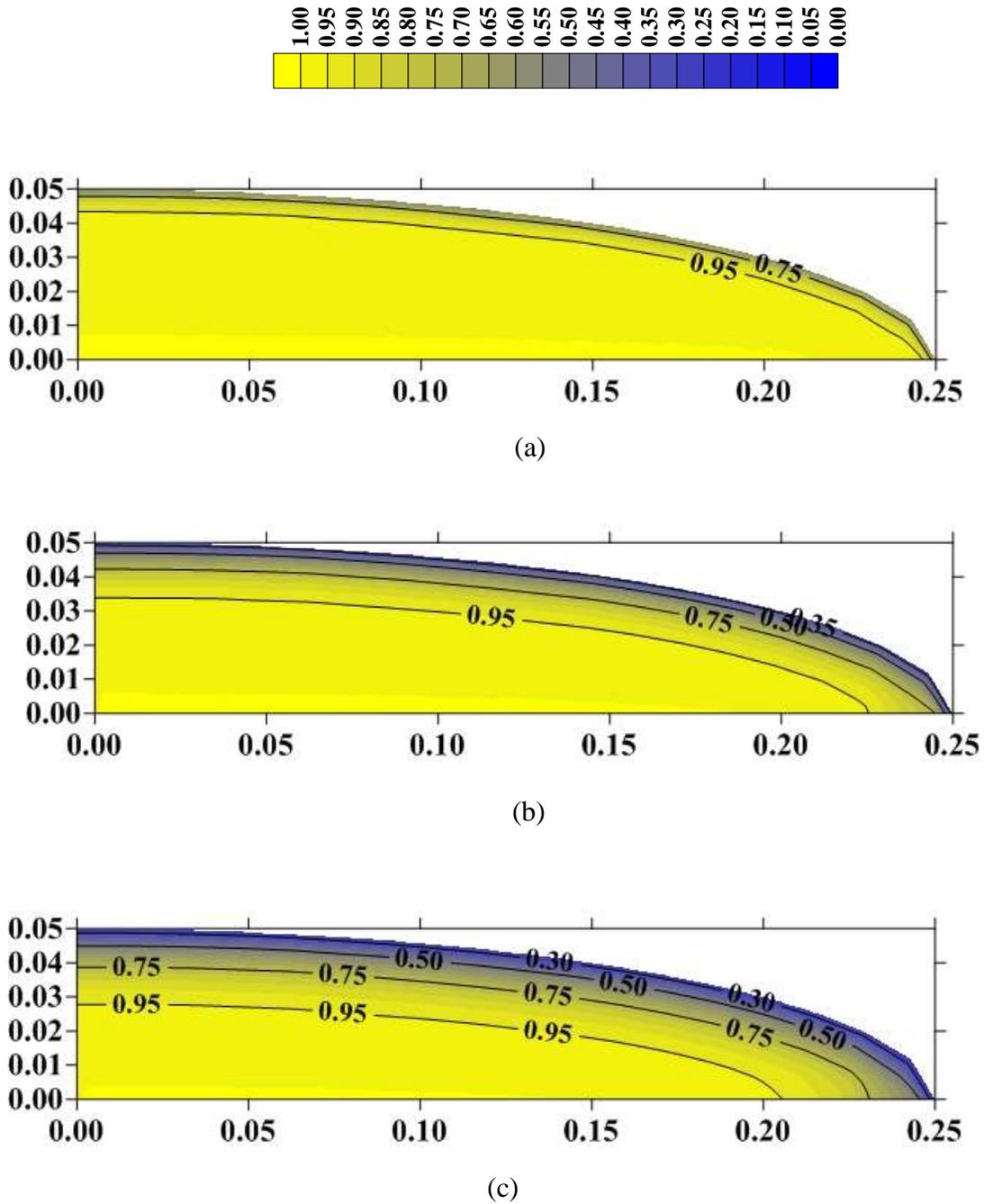


Figura 4.44: Distribuição de temperatura adimensional  $T^*$  para  $hw = 5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ ,  $\varepsilon = 0,4$ ,  $u_z = 0,11471 \text{ m/s}$  e  $k_{wr} = 401 \text{ W/mK}$  em  $z/H$  a) 0,0833, b) 0,5277 e c) 0,9722 (caso 31).

## **CAPÍTULO 5**

### **CONSIDERAÇÕES FINAIS E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS**

Neste capítulo, são apresentadas as principais conclusões obtidas neste trabalho, bem como, as sugestões para o desenvolvimento de trabalhos futuros.

#### **5.1 Considerações finais**

Baseado na literatura consultada pode-se concluir que:

- A geometria cilíndrica elíptica tem sido pouco estudada no que diz respeito a transferência de calor em reatores de leito fixo recheado de partículas, visto que sua aplicação industrial é inexistente, sendo usado apenas em coletores de efluente automotivos.

De acordo com os casos estudados nesta pesquisa conclui-se que:

- A porosidade no fenômeno de transferência de calor em reatores de leito fixo é um parâmetro de grande relevância, afetando os gradientes de temperatura no leito.

Com o aumento da porosidade do leito obtém-se menores gradientes de temperaturas tanto na direção transversal, quanto na direção axial do reator.

- Os maiores gradientes de temperatura ocorreram próximos a parede, principalmente ao se usar porosidade variável, pois neste caso, ocorre uma variação brusca da porosidade nas proximidades da parede do reator.
- Os perfis de temperatura apresentam um comportamento assintótico, variando nas direções axial e transversal do reator. Verifica-se de forma global que as variações de temperatura na direção  $x$  é bem maior que na direção axial  $z$ .
- Com o aumento do coeficiente de transferência de calor convectivo na parede externa do reator, maiores gradientes; axial, radial e angular de temperaturas, são obtidos.
- Aumentando-se o coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator de  $2 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  para  $5 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  aparentemente não é provocada nenhuma mudança no comportamento da variação da temperatura, a influência do coeficiente de transferência de calor convectivo na parede externa do reator na distribuição de temperatura é bem maior do que este parâmetro na parede interna deste equipamento.
- As regiões de maiores gradientes térmicos estão situadas exatamente próximas a  $y = L_2$  (região pontiaguda) caracterizando-se dessa forma, como a região mais crítica para a transferência de calor no reator elíptico, principalmente na geometria cilíndrica elíptica com elevada razão de aspecto.

- Aumentando-se a altura do leito ocorre uma maior transferência de calor do fluido (ar) para a parede do reator. Percebe-se que um maior resfriamento do fluido acontece no maior valor de altura do leito em virtude de haver maior área para troca de calor.
- Uma variação na temperatura do fluido na entrada do reator reflete-se numa variação de temperatura em cada ponto no interior do reator, e que as menores temperaturas ocorrem próximo a parede do reator. Este efeito é mais acentuado para maiores temperatura do fluido na entrada do reator.
- O efeito da variação da temperatura do fluido refrigerante é similar ao efeito da variação da temperatura do fluido na entrada do reator que também se reflete numa variação de temperatura em cada ponto no interior do reator.
- Um aumento na velocidade do fluido provoca um aumento na transferência de calor para parede do reator e na direção axial do reator. Os efeitos convectivo e difusivo ocorrem simultaneamente e ambos são importantes no fenômeno de transferência de calor.
- O gradiente de temperatura axial é menor quando a condutividade térmica da parede do reator é mais elevada, porém este efeito é pouco observado. Do ponto de vista de transferência do calor, o coeficiente de transferência do calor convectivo externo é o parâmetro dominante.

## 5.2 Sugestões para futuros trabalhos

- Analisar o efeito da inclusão da temperatura e velocidade do fluido na entrada do reator em função da posição transversal (angular e radial).
- Avaliar o comportamento do reator operando em condições transientes com ou sem reação química.
- Avaliar o efeito da forma e dimensões da partícula no interior do reator sobre a distribuição de temperatura.
- Desenvolver modelo matemático para descrever a temperatura nas partículas e fluido separadamente, no interior do reator (modelo heterogêneo).
- Incorporar reações heterogêneas no meio e analisar o comportamento térmico do reator.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Andrigo, P., Bagatin, R., Pagani, G., Fixed bed reactors. Catalysis Today, V. 52, n. 2-3 pp. 197-221, 1999.

Bear, J., Dynamics of fluids in porous media. New York: Dover, 1988.

Bird, R. B.; Stewart, W. E.; Lightfoot, E.N. Fenômenos de transporte. Rio de Janeiro: LTC, 2004

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

Borkink, J. G. Harold e Westerterp, K. Roel. Significance of axial heat dispersion for the description of heat transport in wall-cooled packed beds. Chemical Engineering & Technology, 15 (6). pp. 371-384. ISSN 0930-7516, (1992).

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

Carvalho, R. V. P. e Coury, J. R., Estudos do efeito da parede no escoamento de fluidos compressíveis em leitos fixos. VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, Universidade Federal de São Carlos, 6p, 2005.

Castro, A. G.; Moura, C. V. R.; Moura, E. M. Otimização de reator a leito fixo para a produção de biodiesel, utilizando análise termogravimétrica e viscosimétrica. Sociedade Brasileira de Química ( 31ª Reunião Anual), 2006.

Christensen, T. S. Adiabatic pre-reforming of hydrocarbons an important step in syngas production. Applied Catalysis A- General, v. 138, n. 2, p. 285-309, 1996.

Cotta, R. M., The integral transform method in thermal and fluids science and engineering, Begell House Inc., New York, USA, 1998.

Darcy, H. Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon, Editions V DALMONT, Paris, 1856.

Dixon, A. G., The length effect on packed bed effective transfer parameters. The Chemical Engineering Journal, vol. 31, pp. 163-173, 1985.

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

Dixon, A. G.; VanDongeren, J. H. The influence of the tube and particle diameters at constant ratio on heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering and Process. Lausanne*, v.37, n. 23, p.23–32, 1998.

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

Dullien, F. A. L. *Porous media: Fluid transport and pore structure*. New York: Academic, 1979.

Ferreira, L. M., Castro, J.A.M, Rodrigues, A. E., An analytical and experimental study of heat transfer in fixed bed. *International Journal Heat Mass and Transfer*, v.45, n. 5, p. 951-961, 2002.

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

Fogler, H. S. *Elements of chemical reaction engineering; 3rd Edition*. Prentice Hall, Englewood Clifs, New Jersey, 1999.

Fogler, H. S. *Elements of chemical reaction engineering; 4rd Edition*. Prentice Hall, Englewood Clifs, New Jersey, 2005.

Franks, R. G. E., *Modelling and simulation in chemical engineering*. New York: John Wiley & Sons, 1972.

Froment, G. F.; Bischoff, K. B. Chemical reactor analysis and design, Wiley & Sons, 2nd edition, 1990.

Geankoplis, C. J., Transport Processes and Unit Operations. n and Bacon, London, 3ª edição, 1993.

Geng, F.; Xu, D.; Yuan, Z.; Yan, Y.; Luo, D.; Wang, H.; Li, B.; Chyang, C.S., Numerical simulation on fluidization characteristics of tobacco particles in fluidized bed dryers Chemical Engineering Journal, v.150, n. 2, pp.581-592, 2009.

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

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

Gomes, P. & Jorge, R. M. M., Estudo do processo de reforma de gás natural: Estudo da transferência de calor em reator catalítico de Leito Fixo. 4º PDPETRO, Campinas-SP, 21-24 de outubro de 2007.

Gordillo, E. D. e Belghit, A., A two phase model of high temperature steam-only gasification of biomass char in bubbling fluidized bed reactors using nuclear heat. International Journal of Hydrogen Energy, v.36, n. 1, pp.374-381, 2011.

Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M. A., Recasens, F., Egusquiza, E., Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds. Chemical engineering science, Amsterdam, v. 60, n. 6 p. 1733-1742, 2005.

Gunn, D. J., Khalid, M., Thermal dispersion and wall heat transfer in packed beds. Chemical Engineering. Science . v. 30, pp. 261-267, 1975.

Gupta, A. V. S. S. K. S., Nag, P. K., Bed-to-wall heat transfer behavior in a pressurized circulating fluidized bed. International Journal Heat and Mass Transfer, v. 45, n. 16 pp. 3429-3436, 2002.

Häring, H., Weiss, B., Winter, F., Lange, R., Aichinger, G., Wurm, J. Influence of Dust on the Heat Transfer in a Fixed Bed Reactor. Source: Computational Thermal Sciences v. 2, n. 2, p. 111 – 123, Published MAR 2010.

Incropera, F. P.; Dewitt, D. P. Heat and mass transfer. New York: JohnWiley & Sons, 2008.

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

Ismail, K. A. R. e Henriquez, J. R., Numerical and experimental study of spherical capsules packed bed latent heat storage system. Appl. Thermal Eng., 22, 1705-1716, (2002).

Izadbakhsh, A., Khorasheh, F., Simulation of activity loss of fixed bed catalytic reactor of MTO conversion using percolation theory. Chemical Engineering Science, v. 66, n. 23, pp.6199-6208, 2011.

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.

Karlo, D. E. C., Lyra, P. R. M. e Willmersdorf, R. B., Solução de equações de transporte em meios porosos utilizando uma formulação do método dos volumes finitos com malhas não-estruturadas, *Anais da 57<sup>a</sup> Reunião Anual da SBPC – Fortaleza, CE – Julho, 2005*.

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

Lamine, A. S. et al. Hydrodynamics and heat transfer in packed beds with concurrent up flow. *Chem. Eng. Sci.*, New York, v. 47, p.3493-3500, 1992.

Laurentino, C. L. “Transferência de calor em leitos fixos com aplicação em reatores de fermentação em estado sólido”. 2007. 105f. Dissertação (Mestre em Engenharia e Ciência de Alimentos) – Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, São José do Rio Preto, 2007.

Levenspiel, O. *Engenharia das Reações Químicas*. São Paulo: Edgard Blücher, 2000.

Lerou, J. J., Froment, G. F., Velocity, temperature and conversion profiles in fixed bed catalytic reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 32, n. 2, pp. 853-861, 1977.

Li, C. H., e Finlayson, B. A., Heat transfer in packed beds - a reevaluation. *Chem. Eng. Sci.*, v. 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, 244p, 1999.

MacDonald, M. J., Chu, C. F., Pierre, P. P., Ng, K. M., A Generalized Blake – Kozeny Equation for Multisized Spherical Particles, *AIChE Journal*, Vol.37, Nº. 10, pp. 1583-1588, 1991.

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

Maliska, C. R., “Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional”. Rio de Janeiro: LCT-Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 2ª edição, 453p, 2004.

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

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

Mota, M., Teixeira, J. A., Bowen, R., Yelshin, A., “Binary Spherical Particle Mixed Beds: Porosity and Permeability Relationship Measurement”, *The Filtration Society*, v. 1, n. 4, pp. 101-106, 2001.

Neto, C. B., *Transfência de Calor. Volume I, parte 2*, UFSC, 2010.

Nield, D. A. e Bejan, A., “Convection in porous media”, Springer-Verlag, New York, 1992.

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.

Oliveira, L. G., Lima, W. C. P. B, Lima, A. G. B, Transporte de calor em regime permanente em um reator cilíndrico circular de leito fixo: um estudo experimental. *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, v.6.1, 48-58, ISSN 1809-8797, (2011). Revista de acesso livre no site [www.dema.ufcg.edu.br/revista](http://www.dema.ufcg.edu.br/revista).

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

Oliveira, L. G., Swarnakar, R., Lima, A. G. B. Modelo de estado estacionário de transferência de calor em um reator de leito fixo de forma cilíndrica elíptica, *International Journal of Chemical Engineering Reactor*: vol. 6: A: A71, 2008. Disponível em <http://www.bepress.com/ijcre/vol/A71>.

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

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, 197p., 1980.

Pelegriani, M. F., Alves, T. A., Maia, A. C. R. M., Solução de Problemas Difusivos Transientes em Domínios de Geometria Retangular Utilizando a Técnica da Transformada Integral Generalizada. XI CREEM, Instituto Politécnico, Nova Friburgo, Rio de Janeiro, Paper CRE04-MC02, Agosto-Setembro, 2004.

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*, 45, pp. 3681-3688, 2002.

Rashidi, A., Lotfi, R., Fakhrmosavi, E., Zare, M., Production of single-walled carbon nanotubes from methane over Co-Mo/MgO nanocatalyst: A comparative study of fixed and fluidized bed reactors. *Journal of Natural Gas Chemistry*, v. 20, n. 4, pp.372-376, 2011.

Reddy, S.; Farrell, A.; Stanford, T. Evaluation and implementation of control strategies for moving-bed coal gasifiers using MGAS. *The Chemical Engineering Journal*, v. 59, n. 2, p. 133-141, 1995.

Rodrigues, A. E., Ferreira, R. M. Q., Effect of Intraparticle Convection on the Steady-State Behavior of a Fixed-bed Catalytic Reactors. *Chemical Engineering Science*, 45, 2653-2660, 1990.

Scheidegger, A. E. *The Physics of Flow through Porous Media*. 3.ed. Toronto: University of Toronto Press, 1974.

Shahamiri, S. A.; Wierzba, I., Modeling catalytic oxidation of lean mixtures of methane-air in a packed-bed reactor. *Chemical Engineering Journal*, v. 149, p. 102-109, 2009.

Shih, T., Numerical heat transfer. Washington: Hemisphere Publishing Corp., 536p, 1984.

Silva, C. K. F., “Aplicação da Análise Inversa ao Modelo Difuncional de Transferência de Massa”. Dissertação de M.Sc. UFPB, João Pessoa, Brasil, 2007.

Ströher, G. R., “Avaliação experimental do coeficiente global de transferência de calor em leito fixo percolado com água”. *Acta Scientiarum. Technology*. Maringá, v. 26, n. 1, p. 39-43, 2004.

Subramanian, P. ; Sampathrajan, A. ; Venkatachalam, P., Fluidized bed gasification of select granular biomaterials. *Bioresource Technology*, v.102, n. 2, pp.1914-1920, 2011.

Taylor, K.; Smith, A. G.; S., The Prediction of Pressure Drop and Flow Distribution in Packed Bed Filters. *Second International Conference On CFD in the Minerals And Process Industries (CSIRO)*, Melbourne, Australia, p. 273. 1999.

Theuerkauf J., Witt P. and Schwesig D., “Analysis of particle porosity distribution in fixed beds using the discrete element method”, *Powder Technology*, 165p. 2006.

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

Thoméo, J. C.; Rouiller, C. O.; Freire, J. T. “Experimental analysis of heat transfer in packed beds with air flow”. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Washington, v. 43, n. 15, p. 4140 – 4148, July 2004.

Transferência de Calor em Reator Catalítico de Leito Fixo”. 4º PDPETRO, Campinas-SP, 21-24 de outubro de 2007.

Valipour, M. S. and Saboohi, Y., “Modeling of multiple non catalytic gas–solid reactions in a moving bed of porous pellets based on finite volume method”, *Heat Mass Transfer*, v. 43:881–894, 2007.

Van-Dal, É. S., Giudici, R., Luiz, M. M. J., Regina M. M. J., Modelagem e Estudo de Transferência de Calor em Reator Catalítico de Leito Fixo .VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, Uberlândia, Minas Gerais, Brasil, 27 a 30 de julho de 2009.

Villadsen, J., and Michelsen, M. L., *Solution of differential equation models by polynomial approximation*. Prentice-Hall, 1978.

Von Zedtwitz, P.; Lipiński, W.; Steinfeld, A. *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 1, pp.599-607, 2007.

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.*, v. 58, pp. 867-875, 2003.

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

Young, J. C.; Mc Carty, P. L. “The anaerobic filter for waste treatment”. *Journal WPCF.* v. 41, n. 5, p. 160-173, 1969.

Yu, A. B., Standish, N., “Estimation of the Porosity of Particle Mixtures by a linear – Mixture Packing Model”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 30, n. 6, pp. 1372 – 1385, 1991.

Zaiat, M. & Abreu, S. B, “Performance of anaerobic-aerobic packed-bed reactor in the treatment of domestic sewage”. *Eng. Sanitária ambiental.* v.13, n. 2, p.181-188, abr/jun 2008.

Zaiat, M.; Cabral, A. K. A.; Foresti, E. “Reator Anaeróbio Horizontal de Leito Fixo Para Tratamento de Águas Residuárias: Concepção e Avaliação Preliminar de Desempenho”. *Revista Brasileira de Engenharia – Caderno de Engenharia Química*, v. 11, n. 2, p. 33-42, 1994.

Zotin, F. M. Z., O efeito de parede em colunas de recheio. *Dissertação de Mestrado*, São Carlos, PPG-EQ UFSCar, 85p, 1985.