

Desenvolvimento e Análise da solução analítica de um problema convectivo dominante com reação química
Development and analysis of the analytical solution of a dominant convective problem with chemical reaction

Jaqueline Alves Roberto^{1*}, Jordana Silva Abreu², Andréa Oliveira Souza da Costa^{1,2}, Esly Ferreira da Costa Junior^{1,2}

¹Universidade Federal de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

²Universidade Federal de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

^{1*}jaqueline.alvesroberto@gmail.com

Resumo

A modelagem e simulação é uma ferramenta utilizada em industriais para avaliar o comportamento de um processo em diferentes condições operacionais. Na literatura, existem pesquisas diversas relacionadas à modelagem matemática e simulação de reatores. Porém, tem-se a dificuldade numérica na solução de problemas com termo convectivo dominante. Assim, o presente trabalho desenvolve a solução analítica a partir de uma equação diferencial parcial para o problema de um reator em regime transiente, considerando difusão e convecção dominante. Essa solução analítica depende do adimensional número de Péclet mássico e módulo de Thiele. Como o número de Péclet fornece uma razão entre os fluxos convectivo e difusivo, a solução analítica empregada usou elevados valores de Péclet para simular condições de escoamento com efeito convectivo mais significativo que o difusivo, e consequentemente empregou-se também elevados valores para o módulo de Thiele. São simulados os perfis com o número de Péclet variando de 2 a 50, sendo que no valor mais elevado fica evidenciada a dominância da convecção pelo perfil praticamente linear de concentração de reagente ao longo do reator em regime permanente. Os resultados obtidos são fisicamente coerentes e a solução analítica pode ser usada na análise de convergência e estabilidade de soluções numéricas.

Palavras-chave: Fluxo convectivo, Fluxo difusivo, Modelagem matemática, Reator, Simulação, Solução analítica.

Abstract

Modeling and simulation is a tool used in industrial to assess the behavior of a process under different operating conditions. In the literature, there are many researches related to mathematical modeling and simulation of reactors. However, there is a numerical difficulty in problems with dominant convective term. Thus, the present work develops the analytical solution from a partial differential equation for the problem of a transient reactor, considering diffusion and dominant convection. This analytical solution depends on the dimensionless Peclet's number mass and Thiele's modulus. As the Peclet's number provides a ratio between convective and diffusive flows, the analytical solution was used to simulate a process using high Peclet values to simulate flow conditions with a more significant convective effect than the diffusive one, and consequently, high values for the Thiele modulus were also used. Profiles with the number of Peclet varying from 2 to 50 are simulated, with the highest value evidencing the dominance of convection by the practically linear profile of reagent concentration along the reactor in steady state. The results obtained are physically consistent and the analytical solution can be used in the analysis of convergence and stability of numerical solutions.

Keywords: Convective flow diffusive flow, Mathematical Modeling, Simulation, Reactor, Analytical solution.

1 Introdução

A modelagem e simulação é uma ferramenta utilizada em processos industriais, para simular e prever suas condições operacionais. Essa modelagem de processos é representada por equações matemáticas diferenciais. Existem diversas pesquisas na literatura relacionadas ao assunto [4], [9], [12], [16]. Artur [1] utilizou a simulação CFD para estudar o escoamento no interior de dois leitos fluidizados. Como também, a mesma metodologia foi aplicada por Rosa [19] para a modelagem e simulação em um trocador de calor, usando correlações de transferência de calor para o número de Nusselt.

Os modelos matemáticos são utilizados em simuladores de processos com o objetivo de analisar o comportamento de um processo e/ou parâmetros para diferentes condições operacionais, como por exemplo em reatores. Leonzio [13] desenvolveu um modelo matemático unidimensional para um reator multitubular industrial em condições de regime permanente, que apresenta como função a produção de metanol. No estudo foram considerados os balanços de massa e energia, levando em consideração a convecção e difusão. A equação de Ergun e as condições de contorno de Dirichlet, também foram aplicadas para a modelagem matemática. Já os pesquisadores Hamedi et. al. [10], com o objetivo de prever o desempenho de um reator para a produção simultânea de xilenos, hidrogênio e tolueno, desenvolveram um modelo matemático bidimensional em regime permanente a partir do método de diferenças finitas.

Os reatores químicos tem a funcionalidade de transformar a matéria-prima em produtos comercializáveis, com maior eficiência e rendimento. Esses equipamentos devem promover o contato entre os reagentes e fornecer um ambiente adequado em termos de temperatura, pressão, concentração dos reagentes e agitação, durante o tempo necessário para que os reagentes se convertam em produtos.

O modelo de reator mais utilizado para determinar as constantes de taxa de reação é o reator de tanque agitado. Segundo Rosa [19], essa determinação das constantes e mecanismo de taxa de reação é feita pela análise do comportamento transiente do reator, fato que permite uma análise cinética detalhada das etapas elementares.

A partir da simulação numérica, é possível analisar os efeitos de transferência de calor e massa no reator em regime transiente. Para isso, aproximam-se as equações de desempenho dos reatores reais das equações dos reatores ideais, diminuindo consideravelmente o número de variáveis que influenciam no processo e simplificam as equações [14].

Recentemente, estudos vêm sendo realizados com o objetivo de avaliar o comportamento das variáveis operacionais presentes no reator, baseando em modelagem matemática e simulação numérica. Por exemplo, Gutiérrez [8] desenvolveu um novo projeto de distribuidores de entrada/saída para reatores tubulares fotoeletroquímicos, com objetivo de avaliar o perfil de velocidade dentro do reator. Esse projeto foi realizado a partir da simulação 3D da hidrodinâmica em estado estacionário e a equação de conservação de massa em regime transiente, para projetar a geometria dos distribuidores de entrada/saída, o comprimento do reator e o espaçamento entre os eletrodos. Além disso, a modelagem matemática e simulação foi utilizada por Pitkaoja [18] para avaliar as condições de operação do reator na gaseificação de leito fluidizado borbulhante.

Além disso, Tandon e Jain [21] aplicaram modelagem e simulação para avaliar o desempenho do reator de membrana na decomposição de iodeto de hidrogênio. Na literatura existe o modelo matemático isotérmico para avaliar o desempenho do reator nesse tipo de processo. Porém, os pesquisadores desenvolveram um modelo matemático não isotérmico, a partir de material microscópico e do balanço de energia ao longo do reator de membrana. Com a finalidade de validar o modelo, foram utilizados dados experimentais. Assim, concluíram que o modelo não isotérmico obtido apresenta relevância para a análise no comportamento do reator de membrana. Um modelo de fluxo bifásico de Euler-tridimensional transiente foi desenvolvido por Karadimou [11], para avaliar o fluxo turbulento e a mistura de líquidos e bolhas no reator de tanque agitado induzido por gás, usando a técnica de malha deslizante. A Tabela 1 compila uma breve revisão da literatura sobre os estudos recentes envolvendo modelagem matemática e simulação numérica para reatores.

Tabela 1: Estudos relacionados a modelagem matemática e simulação numérica para reatores

ESTUDO	REFERÊNCIAS
<u>Objetivo:</u> avaliar os efeitos das variáveis operacionais na conversão de ácido oleico em oleato de etila, em um reator tubular em regime transiente. <u>Modelo:</u> modelagem matemática descrita por sistemas de equações diferenciais parciais, a partir da dispersão axial e balanços de massa e energia.	[5]
<u>Objetivo:</u> estudar a distribuição da temperatura interna e o campo de fluxo de um reator de polissilício tipo belljar da Siemens. <u>Modelo:</u> simulação numérica usando modelo CFD combinado com Gambti.	[9]
<u>Objetivo:</u> avaliar o impacto da distribuição do tamanho de partículas na nitrificação parcial em um reator granular aeróbio. <u>Modelo:</u> modelagem matemática descrita por sistemas de equações diferenciais. Esse sistema de EDP representa a mudança espacial e temporal dos componentes solúveis e sólidos de cada grânulo. Também foi usado balanço de massa para representar o soluto (lama de grânulos) presente dentro do grânulo.	[23]
<u>Objetivo:</u> estabelecer um método de desenvolvimento digital e enxuto para reatores tubulares impressos em 3D, que permite ciclos de desenvolvimento mais curtos e configuração de processo direcionada. <u>Modelo:</u> simulação numérica para reatores em fluxo laminar incompressível, em que utilizou primeiramente o modelo CAD. Em seguida, as informações foram transferidas para o software CFD. Assim, a simulação numérica foi baseada no método de elementos finitos.	[2]
<u>Objetivo:</u> avaliar o desempenho de um reator empacotado com fenda única e prever a conversão de CO para a síntese de metanol. <u>Modelo:</u> modelagem matemática 3D-pseudo-homogênea descrita pelo método de elementos finitos, em que acopla balanços de massa e energia.	[6]

Fonte: Autores.

A partir da análise numérica, é possível resolver problemas matemáticos utilizando métodos numéricos apropriados, conforme foi exemplificado na Tabela 1, que apresentou alguns estudos envolvendo modelagem e simulação para reatores [17]. A solução numérica das equações de transporte dentro do reator pode ser aplicada pela simulação da dinâmica de fluidos computacional (CFD) hidrodinâmica, transporte de massa e calor e distribuição de corrente e potencial [3]. Entretanto, a resolução de equações diferenciais parciais com o termo convectivo sendo mais significativo do que o difusivo (convectivo dominante) ainda é uma dificuldade numérica. De acordo com Maliska [15], essa dificuldade numérica é justificada pelo uso de aproximações de diferenças centrais e outros esquemas de alta ordem, que produzem soluções não realísticas, por serem esquemas não dissipativos. Assim, para se evitar as soluções não realistas, recorre-se aos esquemas *upwind*, que produzem soluções fisicamente coerentes, entretanto têm a propriedade de suavizar os altos gradientes, por serem dissipativos [15].

Sendo assim, neste trabalho é apresentado a solução analítica que descreve o comportamento de um reator com uma reação de primeira ordem em regime transiente, considerando difusão e convecção dominante. A solução analítica é obtida a partir da equação diferencial parcial e realizando os devidos procedimentos algébricos, fornece a solução geral para o problema. Essa solução analítica foi empregada na simulação de um processo usando elevados valores para o adimensional número de Péclet mássico e módulo de Thiele, com o propósito de avaliar o efeito convectivo e difusivo no reator.

2 Modelagem Matemática

O problema simulado consiste na decomposição isotérmica de uma espécie A ao longo de um reator tubular em regime transiente, sendo consideradas somente as variações de propriedades na direção axial (unidimensional), conforme Figura 1.

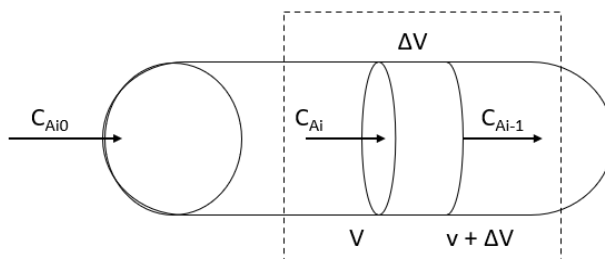


Figura 1: Esquema de um reator tubular.

Fonte: Autores.

Todas as propriedades são assumidas constantes e a reação é irreversível com cinética de primeira ordem, sendo $r_A = -K_A C_A$. Assim, assumindo o princípio da conservação de massa:

Taxa molar da espécie i que entra no volume de controle (V)	-	Taxa molar da espécie i que sai do volume de controle (v+\Delta V)	+	Taxa molar de geração da espécie i dentro do volume de controle (\Delta V)	=	Taxa molar de acúmulo da espécie i dentro do volume de controle (\Delta V)
---	---	--	---	--	---	--

O balanço de massa na forma diferencial assume a forma da Equação 1, com as condições iniciais e de contorno dadas pelas Equações 2 a 4, respectivamente.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - K_A C_A \quad (1)$$

$$\text{C.I.: } C_A(x, 0) = 0 \quad (2)$$

$$\text{C.C.1: } C_A(0, t) = C_{A0} \quad (3)$$

$$\text{C.C.2: } \frac{\partial C_A}{\partial x}(1, t) = 0 \quad (4)$$

em que $C_A(x, t)$ é a concentração da espécie A na direção axial, x, no instante t, v é a velocidade da mistura reagente, D é a difusividade mássica de A no meio reacional, L é o comprimento do reator e K é a constante cinética.

Verifica-se que o modelo é composto por uma Equação diferencial parcial (EDP) de 2ª ordem, sendo uma das condições de contorno não homogênea. Para tornar a solução geral e evitar ordens de grandezas distintas, os seguintes adimensionais foram empregados conforme Tabela 2.

Tabela 2: Adimensionais

ADIMENSIONAL	DEFINIÇÃO
Comprimento adimensional: θ	$\frac{x}{L}$
Número de Péclet mássico: Pe	$\frac{vL}{D}$
Módulo de Thiele: ϕ	$L\sqrt{\frac{K}{D}}$
Número de Fourier mássico: τ	$\frac{D}{L^2}t$
Concentração adimensional: U	$\frac{C_A}{C_{Ac}}$

Reescrevendo-se o modelo a partir dos adimensionais de comprimento e concentração, tem-se após manipulação:

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} \frac{D}{L^2} - \frac{v}{L} \frac{\partial U}{\partial \theta} - KU \quad (5)$$

Dividindo a Equação 5 por D/L^2 , tem-se:

$$\frac{\partial U}{\partial \left(\frac{D}{L^2}\tau\right)} = \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} - \frac{vL}{D} \frac{\partial U}{\partial \theta} - \frac{KL^2U}{D} \quad (6)$$

Substituindo-se o adimensional de tempo (Número de Fourier mássico), o número de Péclet mássico e o Módulo de Thiele, tem-se:

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} - Pe \frac{\partial U}{\partial \theta} - \phi^2 U \quad (7)$$

Nesta Equação (7) a variável dependente é a concentração adimensional, função dos adimensionais de comprimento e de tempo: $U(\theta, \tau)$. As condições iniciais e de contorno da Equação 7, na forma adimensional, são dadas por:

$$\text{C.I.: } U(\theta, 0) = 0 \quad (8)$$

$$\text{C.C.1: } U(0, \tau) = 1 \quad (9)$$

$$\text{C.C.2: } \frac{\partial U}{\partial \theta}(1, \tau) = 0 \quad (10)$$

Percebe-se que existe uma condição de contorno não homogênea, representada pela Equação 9. Sendo assim, para a determinação da solução analítica, é necessário realizar uma mudança de variável que torne o problema homogêneo. Para tal, primeiramente deve-se determinar a concentração em regime permanente definida como $\Pi(\theta)$, cuja equação diferencial ordinária (EDO) é obtida zerando-se a derivada temporal na Equação 7 e substituindo-se U por Π :

$$\frac{\partial^2 \Pi}{\partial \theta^2} - Pe \frac{\partial \Pi}{\partial \theta} - \phi^2 \Pi = 0 \quad (11)$$

Como a Equação 11 é uma EDO de 2ª ordem com coeficientes constantes, deve-se encontrar as 2 raízes (λ_1 e λ_2) de sua equação característica que são funções de Pe e ϕ , Equação 12 e 13, respectivamente.

$$\lambda_1 = \frac{Pe}{2} + \sqrt{Pe^2 + 4\phi^2} \quad (12)$$

$$\lambda_2 = \frac{Pe}{2} - \frac{\sqrt{Pe^2 + 4\phi^2}}{2} \quad (13)$$

Verifica-se que ambas as raízes são reais e a solução geral da Equação 11 é:

$$\Pi(\theta) = c_1 e^{\lambda_1 \theta} + c_2 e^{\lambda_2 \theta} \quad (14)$$

Ressalta-se que a solução geral também pode ser escrita, de forma equivalente, usando funções hiperbólicas. As constantes c_1 e c_2 são determinadas de forma a satisfazer as condições de contorno para $\Pi(\theta)$, dadas por $U(0, \tau) = \Pi(0)$ e $\frac{\partial U}{\partial \theta}(1, \tau) = \frac{\partial \Pi}{\partial \theta}(1)$, Equações 9 e 10, respectivamente. Assim, as constantes c_1 e c_2 são representadas por:

$$c_1 = 1 - \left(\frac{-\lambda_1 e^{\lambda_1}}{\lambda_2 e^{\lambda_2} - \lambda_1 e^{\lambda_1}} \right) \quad (15)$$

$$c_2 = \frac{-\lambda_1 e^{\lambda_1}}{\lambda_2 e^{\lambda_2} - \lambda_1 e^{\lambda_1}} \quad (16)$$

Logo, a solução particular para $\Pi(\theta)$ é dada por:

$$\Pi(\theta) = \left(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} e^{\lambda_1 - \lambda_2} \right)^{-1} \left[e^{\lambda_1 \theta} - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} e^{\lambda_1 + (\theta-1)\lambda_2} \right] \quad (17)$$

Definida a solução de regime permanente, é possível fazer uma mudança na variável dependente da Equação 7, definindo-se a nova variável $V(\theta, \tau) = U(\theta, \tau) - \Pi(\theta)$, de tal forma que se tenha um problema com condições de contorno homogêneas dado por:

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2} - Pe \frac{\partial V}{\partial \theta} - \phi^2 V \quad (18)$$

Sendo as condições iniciais e de contorno para a Equação 18:

$$\text{C.I.: } V(\theta, 0) = -\Pi(\theta) \quad (19)$$

$$\text{C.C.1: } V(0, \tau) = 0 \quad (20)$$

$$\text{C.C.2: } \frac{\partial V}{\partial \theta}(1, \tau) = 0 \quad (21)$$

A solução da Equação 18 baseia-se na suposição de $V(\theta, \tau)$ como produto de uma função somente de θ , $Q(\theta)$, por uma função somente de τ , $T(\tau)$, ou seja,

$$V(\theta, \tau) = Q(\theta) * T(\tau) \quad (22)$$

Substituindo-se este produto da Equação 22 na Equação 18, é possível separar as funções de cada variável em lados distintos da igualdade, que só poderá ser satisfeita se ambos os lados forem iguais a uma constante negativa, definida por $-p^2$, conforme Equação 23.

$$\frac{T'}{T} = \frac{Q''}{Q} - Pe \frac{Q'}{Q} - \phi^2 = -p^2 \quad (23)$$

Na realização de procedimentos algébricos são obtidas duas EDOs, dadas pelas Equações 24 e 25.

$$T' + p^2 T = 0 \quad (24)$$

$$Q'' - PeQ' + (p^2 - \phi^2) = 0 \quad (25)$$

Resolvendo-se a Equação 24, que apresenta uma EDO de 1ª ordem, tem-se como solução geral a Equação 26:

$$T(\tau) = C e^{-p^2 \tau} \quad (26)$$

A análise da Equação 23 explica o uso do sinal negativo na constante p^2 da Equação 26. Sem esse sinal a função do tempo aumentaria exponencialmente com o tempo, fato que promoveria valores ilimitados de concentração, o que não seria fisicamente possível.

A Equação 25 é uma EDO de 2ª ordem com coeficientes constantes, cujas raízes da equação característica são $\frac{1}{2}Pe \pm \frac{1}{2}\sqrt{-Pe^2 + 4\phi^2 - 4p^2}$. Assumiu-se que estas raízes formam um par complexo conjugado (o termo dentro da raiz é negativo). Conforme demonstrado posteriormente, esta suposição possibilita adequar a solução às condições iniciais e de contorno (Equações (19) a (21)). Para simplificar a notação, o módulo da parte imaginária foi definida pela variável v (de valor positivo), conforme Equação 27, e a solução geral da EDO é dada pela Equação 28.

$$v = \frac{1}{2}\sqrt{Pe^2 - 4\phi^2 + 4p^2} \quad (27)$$

$$Q(\theta) = e^{\frac{1}{2}Pe\theta} [A \cos(v\theta) + B \sin(v\theta)] \quad (28)$$

A partir da Equação 28 para $Q(\theta)$, é necessário satisfazer as condições de contorno apresentadas pelas Equações 20 e 21. A condição de contorno da Equação 20, $V(0, \tau) = 0$, requer que se tenha $Q(0) = 0$ e assim $A = 0$. Ademais, a 2ª condição de contorno, Equação 21, $\frac{\partial v}{\partial \theta}(1, \tau) = 0$, implica em $Q'(1) = 0$, que resolvida para v gera um conjunto de infinitos valores positivos (v_i , $i = 1$ a ∞) que são as raízes da Equação 29. Baseado nestes valores, também pode-se determinar os valores de p_i , segundo a Equação 30.

$$v_i - \frac{1}{2}Pe \cdot \tan(v_i) = 0 \quad (29)$$

$$p_i^2 = \frac{1}{4}Pe^2 + v_i^2 - \phi^2 \quad (30)$$

Verifica-se que há infinitas soluções da EDP dada pela Equação (18) que atende às condições de contorno dadas pelas Equações (19) e (20) na forma:

$$V_i(\theta, \tau) = C_i e^{-p_i^2 \tau} e^{\frac{1}{2}Pe\theta} \sin(v_i \theta) \quad (31)$$

Para se determinar a solução que também atenda à condição inicial dada pela Equação (21), é necessário determinar os valores de C_i , sendo determinados a partir da condição inicial. Verifica-se que embora as funções $V_i(\theta, 0)$ não formem um conjunto ortogonal no intervalo $[0, 1]$, elas são ortogonais neste intervalo em relação à função peso $f(\theta) = e^{-Pe\theta}$, o que possibilita a determinação das constantes C_i por meio da Equação 32 (Zill e Cullen, 2001).

$$C_i = \frac{\int_0^1 e^{-Pe\theta} [-\Pi(\theta)] e^{\frac{1}{2}Pe\theta} \sin(v_i\theta) d\theta}{\int_0^1 e^{-Pe\theta} [e^{\frac{1}{2}Pe\theta} \sin(v_i\theta)]^2 d\theta} \quad (32)$$

Realizando os cálculos das integrais presentes na Equação 32 e definindo os parâmetros A, B, C e D, como mostrado na Tabela 3, tem-se a Equação 33 para a determinação das constantes C_i .

$$C_i = \frac{\frac{A}{C} - \frac{B}{D}}{\frac{\sin(2v_i)}{4v_i} - \frac{1}{2}} \quad (33)$$

Tabela 3: Termos da Equação 33

PARÂMETROS	TERMOS DA EQUAÇÃO 33
A	$4v\lambda_1 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} - 4v\lambda_1 e^{(\lambda_1-\frac{Pe}{2})} \cos(v) + 4\lambda_1\lambda_2 e^{(\lambda_1-\frac{Pe}{2})} \sin(v) - 2Pe\lambda_1 e^{(\lambda_1-\frac{Pe}{2})} \sin(v)$
B	$4v\lambda_2 - 4v\lambda_2 e^{(\lambda_1-\frac{Pe}{2})} \cos(v) + 4\lambda_1\lambda_2 e^{(\lambda_1-\frac{Pe}{2})} \sin(v) - 2Pe\lambda_2 e^{(\lambda_1-\frac{Pe}{2})} \sin(v)$
C	$Pe^2\lambda_2 - 4Pe\lambda_2^2 + 4v^2\lambda_2 + 4\lambda_2^3 - 4v^2\lambda_1 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} - 4\lambda_1\lambda_2^2 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} - Pe^2\lambda_1 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} + 4Pe\lambda_1\lambda_2 e^{(\lambda_1-\lambda_2)}$
D	$Pe^2\lambda_2 + 4v^2\lambda_2 + 4\lambda_1^2\lambda_2 - 4\lambda_1^3 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} - 4v^2\lambda_1 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} - 4Pe\lambda_1\lambda_2 + 4Pe\lambda_1^2 e^{(\lambda_1-\lambda_2)} - Pe^2\lambda_1 e^{(\lambda_1-\lambda_2)}$

Após todos os termos definidos, a solução analítica é apresentada pela Equação 34.

$$U(\theta, \tau) = \Pi(\theta) + \sum_{i=1}^{\infty} C_i e^{-p_i^2 \tau} e^{\frac{1}{2}Pe\theta} \sin(v_i\theta) \quad (34)$$

Deve-se observar que a Equação 34 está em função do comprimento e tempo adimensionais, e depende dos adimensionais número de Péclet mássico (Pe) e módulo de Thiele (ϕ). Assim, a partir de valores distintos empregados para o adimensional Péclet, pode-se obter conclusões significativas para um problema que apresenta convecção e difusão dominantes.

3 Resultados da Pesquisa

A solução analítica obtida no presente estudo foi empregada na simulação de um processo, em que foi avaliada a influência do adimensional número de Péclet e do módulo de Thiele, para a previsão do perfil de concentração no reator em função do tempo. Portanto, foram empregados distintos valores de Péclet ($Pe = 2, Pe = 10$ e $Pe = 50$) e módulo de Thiele igual a $\phi = \sqrt{50}$, conforme Figura 2. A concentração inicial foi definida como 1.

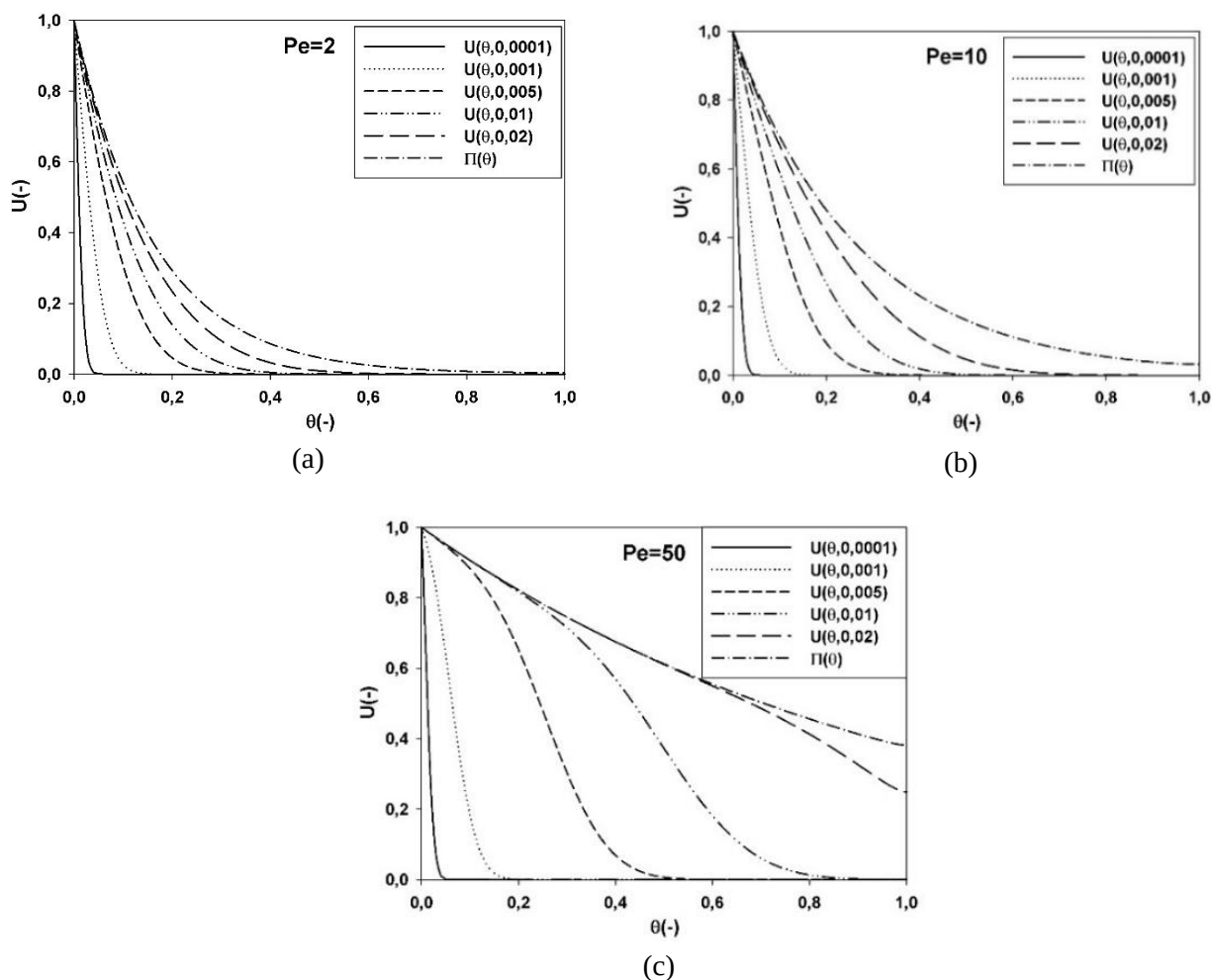


Figura 2: Variação temporal dos perfis de concentração para módulo de Thiele igual a $\phi = \sqrt{50}$.

A Figura 2 representa o comportamento de um fluido que escoar na direção axial no reator em condição de regime transiente. Assim, ao longo do tempo, a concentração diminui no reator.

É relevante observar a influência do adimensional número de Péclet mássico e módulo de Thiele. Ressalta-se que o número de Péclet mede a relação do fluxo convectivo para o difusivo, sendo calculado por $Pe = \frac{V \cdot L}{D}$, em que V é a velocidade, L o comprimento e D coeficiente de difusão de massa. Segundo Seymour et al [20], para fluxo com valor baixo de Pe , os efeitos difusivos dominam o convectivo, caso contrário os efeitos convectivos são dominantes. Portanto, empregou-se valores elevados para Péclet mássico, pois o objetivo é analisar o problema com convecção dominante.

Nota-se, ainda na Figura 2, que variando o valor de Péclet definidos como $Pe = 2, Pe = 10$ e $Pe = 50$, Figura 2a, 2b e 2c, respectivamente, existe uma diferença significativa na concentração. Com isso, o efeito convectivo é mais significativo que o difusivo, pelo comportamento quase linear para Péclet igual a 50, Figura 2c. Esse fato também pode ser observado variando-se o módulo de Thiele ($\phi=2, \phi=5$ e $\phi=\sqrt{50}$) e empregando número de Péclet igual a $Pe = 50$, conforme Figura 3.

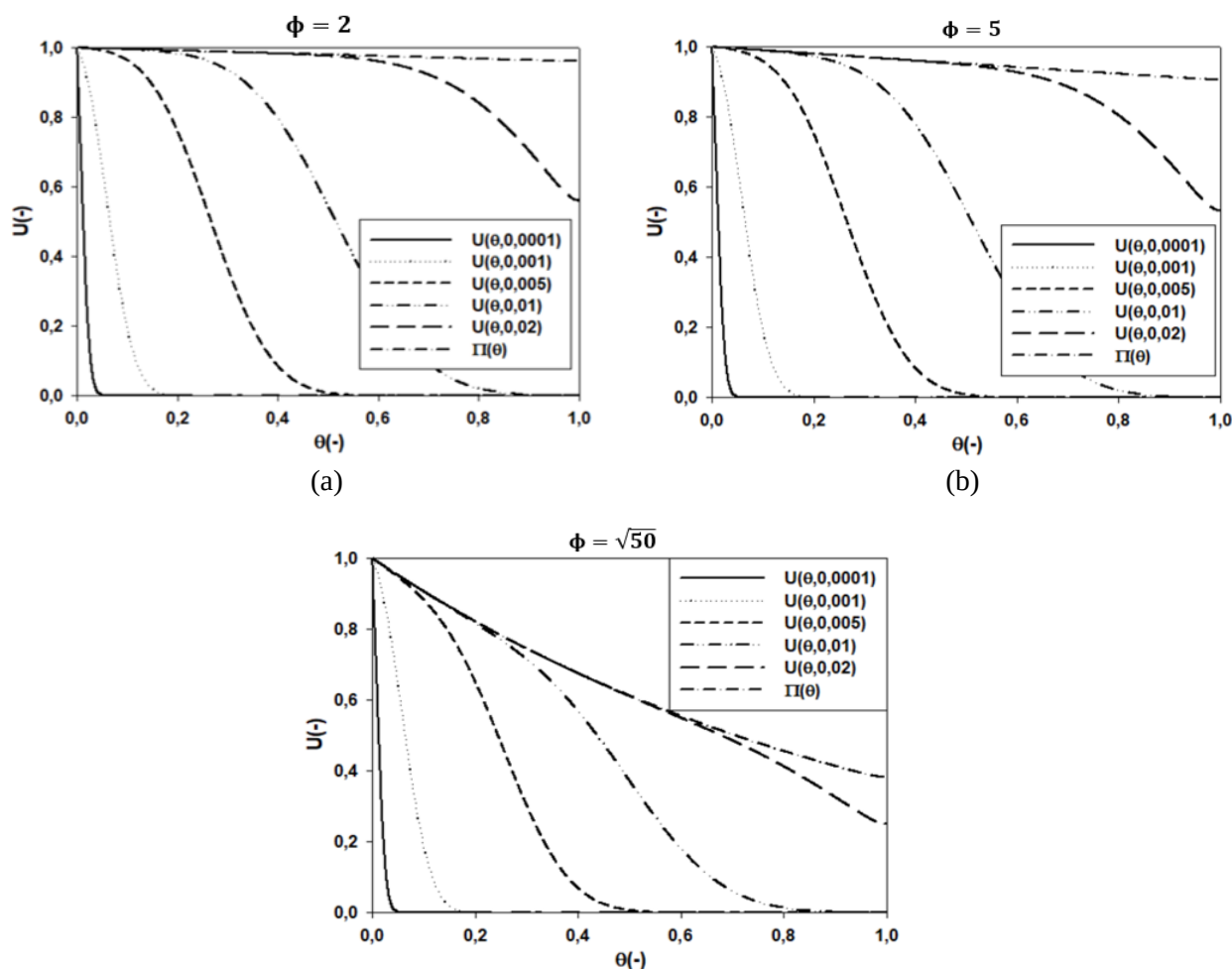


Figura 3: Variação temporal dos perfis de concentração para número de Peclet igual a $Pe = 50$.

A partir do perfil de concentração apresentados nas Figuras 2 e 3, ao empregar-se valores tão elevados para Péclet mássico faz com que seja necessário o uso de um também elevado módulo de Thiele, ou seja, a constante cinética deve ser elevada para que o tempo de residência seja o suficiente para que a reação se processe em elevadas velocidades da mistura reacional.

Além disso, foram necessários empregar 150 termos na série para o cálculo da solução na convergência para $\tau = 0,0001$. Este número fica inferior a uma dezena para os demais valores mais elevados de τ apresentados nas Figuras 2 e 3.

Verifica-se que os comportamentos dos perfis de concentração determinados são fisicamente consistentes e estão como o esperado, para um reator tubular em condição de regime transiente. Ressalta-se que a solução analítica desenvolvida pode contribuir na análise da convergência de posteriores soluções numéricas do problema estudado.

4 Conclusão

A solução analítica do modelo para o reator em regime transiente, considerando difusão e convecção dominante, foi desenvolvida e analisada neste trabalho. A equação resultante depende do número de

Péclet mássico e módulo de Thiele. Assim, foram testados valores distintos de Péclet e módulo de Thiele para avaliar o comportamento do perfil de concentração no reator.

Nota-se que os resultados foram fisicamente consistentes, e a solução analítica obtida para o problema de um reator em regime transiente, considerando difusão e convecção dominante, pode contribuir para a análise da convergência e de estabilidade em uma posterior solução numérica desse problema.

O perfil quase linear de concentração em regime permanente para $Pe = 50$, indica que o efeito convectivo é realmente muito mais significativo que o difusivo. Ressalta-se que a evolução temporal do perfil de concentração apresenta gradientes bastante elevados para o início da operação do reator, o que dificulta uma solução numérica convergida e fisicamente consistente. Nestas condições, a disponibilidade da solução analítica é muito útil na análise de estratégias numéricas de solução do problema.

Referências

- [1] A. P. S. Artur et al, Use of the CFD tool to check fluid dynamic behavior of a fluidized bed with different geometric characteristics. Exatas Online, v. 11, p. 55–63, 2020.
- [2] S. Bettermann et al, Digital and lean development method for 3D-printed reactors based on CAD modeling and CFD simulation. Chemical Engineering Research and Design, v. 152, p. 71–84, 2019.
- [3] L. F. Catañeda et al, Mathematical modeling and simulation of the reaction environment in electrochemical reactors. Current Opinion in Electrochemistry, v. 16, p. 75–82, 2019.
- [4] I. J. Costa; S. C. Ramos, Modelos Matemáticos Aplicados à Molhabilidade de Superfície Sólida. Exatas Online, v. 10, n. 2, p. 147–161, 2019.
- [5] A. A. De Jesus et al, Mathematical modeling and experimental esterification at supercritical conditions for biodiesel production in a tubular reactor. Energy Conversion and Management, v. 171, n. April, p. 1697–1703, 2018.
- [6] DAVIJANY Modelling and simulation of a single slit micro packed bed reactor for methanol synthesis, Catalysis Today, 343 (2020) 226-233.
- [7] E. D. S. Filho et al, Modelagem matemática para descrição da cinética de secagem do caldo de cana in natura. Revista Principia - Divulgação Científica e Tecnológica do IFPB, v. 1, n. 40, p. 28, 2018.
- [8] M. I. J. Gutiérrez et al. Design, mathematical modelling, and numerical simulation of a novel tubular photoelectrochemical reactor and experimental validation by residence time distribution and mass transfer coefficients. Chemical Engineering Journal, v. 386, n. June 2019, p. 123895, 2020.
- [9] T. Guoqiang et al, Numerical Simulations of a 96-rod Polysilicon CVD Reactor, Journal of Crystal Growth, 489 (2018) 68-71.
- [10] N. Hamed et al. Development of a rigorous two-dimensional mathematical model for a novel thermally coupled reactor for simultaneous production of xylenes, hydrogen, and toluene. Chemical Engineering Research and Design, v. 127, p. 126–145, 2017.
- [11] D. P. Karadimou; P. A. Papadopoulos; N. C. Markatos, Mathematical modelling and numerical simulation of two-phase gas-liquid flows in stirred-tank reactors. Journal of King Saud University - Science, v. 31, n. 1, p. 33–41, 2019.

- [12] S. Karagoz; T. T. Tsotsis; V. I. Manousiouthakis, Multi-scale modeling and simulation of a novel membrane reactor (MR)/adsorptive reactor (AR) process. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, v. 137, n. November 2018, p. 148–158, 2019.
- [13] G. Leonzio, Mathematical modeling of a methanol reactor by using different kinetic models. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, v. 85, p. 130–140, 2020.
- [14] O. Levenspiel, "Engenharia das Reações Químicas", São Paulo: Edgard Blücher Ltda., 2000.
- [15] C. R. Maliska, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", 2. ed, Rio de Janeiro LTC Editora, 2004.
- [16] D. B. Monteiro; J. M. L. Moreira; J. R. Maiorino, A new management tool and mathematical model for decommissioning cost estimation of multiple reactors site, *Progress in Nuclear Energy*, v. 114, n. August 2018, p. 61–83, 2019.
- [17] J. M. Pereira; M. B. B. Siqueira, Linguagem de programação JULIA: uma alternativa open source e de alto desempenho ao MATLAB. *Revista Principia - Divulgação Científica e Tecnológica do IFPB*, v. 1, n. 34, p. 132, 2017.
- [18] A. Pitkajä et al, Simulation of a sorbent enhanced gasification pilot reactor and validation of reactor model. *Energy Conversion and Management*, v. 204, n. August 2019, p. 112318, 2020.
- [19] J. O. M. D. L. Rosa et al, An analytic solution to the transient diffusion-reaction problem in particles dispersed in a slurry reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 8, p. 1409–1417, 2002.
- [20] J. D. Seymour; S. L. Codd; R. Kimmich, Peclet number dependent superdiffusive hydrodynamic dispersion in a site percolation porous media measured by NMR. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 269, p. 56–59, 2018.
- [21] P. Tandon; M. Jain, Modeling and simulation of non-isothermal packed-bed membrane reactor for decomposition of hydrogen iodide. *Environmental Technology and Innovation*, v. 20, p. 101162, 2020.
- [22] H. Wang; S. M. Kissick, Modeling and simulation of a supercritical CO₂-liquid sodium compact heat exchanger for sodium-cooled fast reactors. *Applied Thermal Engineering*, v. 180, n. June, p. 115859, 2020.
- [23] T. Zhu; B. Xu; J. Wu, Experimental and mathematical simulation study on the effect of granule particle size distribution on partial nitrification in aerobic granular reactor. *Biochemical Engineering Journal*, v. 134, p. 22–29, 2018.
- [24] ZILL, D. G. Zill; M. R. Cullem, "Equações Diferenciais", Volume 2. São Paulo: Pearson Education, 2001.