

# Numerical Simulation of the Heat Transfer for a Three-Phase Reactor of Fixed Bed

E. Anjos, and J. Silva

**Abstract**—Heat transfer plays an important role in several applications of fixed bed reactors with concurrent down-flow of liquid and gas. Because of the possibility of forming hot spots on the bed of this reactor, which can inhibit the process catalyst and impair the proper functioning of the equipment. Thus, the present paper presents a mathematical model to simulate the process of heat transfer in these reactors. The mathematical modeling was performed by the technique known as Coupled Integral Equation Approach (CIEA). It is a new formulation, based on Hermite integral approximations ( $H_{0,0}/H_{0,0}$  and  $H_{0,0}/H_{1,1}$ ), present more accurate results with a shorter CPU time, than the more traditional techniques and transforms the partial differential equations (PDEs) into ordinary differential equations (ODEs). From this formulation, the results of the ODEs were obtained through the Euler method and the variation of the temperature over time with different values of the heat transfer coefficient was perceptible, being clear the influence of this parameter for the good application of the equipment the desired processes, such as steam reforming of hydrocarbons. In addition, the paper contains a comparison of the mathematical techniques of the approximations ( $H_{0,0}/H_{0,0}$  and  $H_{0,0}/H_{1,1}$ ), making it clear that  $H_{0,0}/H_{1,1}$  is the best technique to be used in the simulation.

**Index Terms**—Mathematical model, Fixed Bed Reactor, Heat Transfer.

## I. INTRODUÇÃO

ATUALMENTE, as indústrias em geral estão enfrentando diversos desafios econômicos e ambientais por causa do aumento do consumo de energia e esgotamento dos combustíveis fósseis. Desta forma, existe uma pressão social e tecnológica para que as empresas busquem estratégias para produzir novas formas de energia limpa. Neste contexto, os reatores de leito fixos trifásicos (RLFTs) podem ser usados para processar e produzir gás combustível [1-4]. Recentemente, estes tipos de reatores são usados nas aplicações do processo de reforma a vapor do metano para produção de hidrogênio.

Os RLFTs têm uma configuração clássica de alta eficiência catalítica para as aplicações nas indústrias químicas, bioquímicas, petroquímicas e refinarias de petróleo. Esses reatores são usados nos processos de hidrodessulfurização, hidrotreatamento e hidrocrackeamento. Além disso, esse tipo de

reatores apresentam grande vantagens em relação outros reatores trifásicos, como: simplicidade de operação devido a não ter parte móvel; menor desgaste do catalisador devido ao empacotamento das partículas e ausência de atritos entre as partículas; maior tamanho do reator para aumentar o tempo de residência; menor retenção de líquidos que resulta em menor homogeneidade secundária; baixa queda de pressão com baixa concentração do soluto; alta conversão devido ao padrão de fluxo de tomada da fase líquida e baixa taxa de dissipação de energia. O RLFT é definido pela característica do fluxo de fluidos em sentido concorrente descendente através do leito fixo das partículas na fase sólida. Neste equipamento, uma película líquida sob a superfície do catalisador é formada possibilitando que a fase gasosa possa fluir de forma contínua entre as partículas catalíticas. Dessa forma, fica perceptível que a hidrodinâmica do leito fixo é um processo importante no desenvolvimento de modelos matemáticos que descrevem os fenômenos interfaciais no leito catalítico do RLFT, tais como a transferência de massa e calor [5-6].

Nas últimas décadas, diversos pesquisadores realizaram grandes esforços para melhorar a compreensão do processo concorrente descendente das fases gasosa e líquida sob o leito fixo. A maioria dos trabalhos foram focados em questões como a queda de pressão [7], retenção da fase líquida [8-9], distribuição de fluxo [10], eficiência de umidade [11] e fenômenos das fases fluidas [12]. Porém, poucos são os trabalhos que se relacionam com o fenômeno de transferência de calor nas fases fluidas e sólidas no leito fixo. Além disso, a transferência de calor em processos multifásicos, para sistemas não-isotérmicos em RLFT, é considerada uma das áreas mais significativas da engenharia térmica, pois uma principal desvantagem desses reatores é a sua pobre capacidade de controlar o calor envolvido nas reações exotérmicas. [5,13].

A transferência de calor nos RLFTs envolve os processos de condução e convecção. Esses temas têm sido abordados por vários pesquisadores na literatura. Heidari e Hashemabadi [5] analisaram a troca de calor interfacial usando um modelo simplificado para um reator de leito gotejante de 60 mm de diâmetro interno com quatorze esferas de 40 mm alinhadas com o eixo da coluna. Nesta pesquisa, os autores consideraram o fluxo de gás escoando de forma concorrente para examinar o número de Nusselt interfacial como uma função dos números de Reynolds e Prandtl. Estes autores concluíram que houve um aumento da transferência de calor com o aumento dos números de Reynolds e Prandtl com relação a fase gasosa e o decréscimo com os números de Reynolds, Prandtl e Eötvös com relação a fase líquida. Mudde *et al.*, [14] analisaram a condutividade térmica radial efetiva em um leito fixo sob regime de baixa interação com aplicação de simulação numérica. Os autores

Os autores gostariam de agradecer ao CNPQ pelo suporte financeiro dado.  
E.B. Anjos, Universidade de Pernambuco, Laboratório de Tecnologia Energética e Ambiental (LATEA), Pernambuco, Brasil, emersonanjos@poli.br.  
J.D. Silva, Universidade de Pernambuco, Laboratório de Tecnologia Energética e Ambiental (LATEA), Pernambuco, Brasil, jornandesdias@poli.br.

usaram o modelo de Ranz-Marshall para explicar o processo de transferência de calor gás-líquido interfacial desenvolvido para fluxos multifásicos dispersos. Phabhu *et al.*, [3] realizaram um trabalho experimental para analisar o coeficiente de transferência de calor volumétrico em leitos fixos com esferas uniformes. Os autores concluíram que o coeficiente de transferência de calor volumétrico é maior para partículas com diâmetros menores de 2,38 mm em comparação com partículas de diâmetros maiores. Além disso, os autores perceberam, também, que há um crescimento para este coeficiente com o aumento do número de Reynolds.

Nos RLFTs, a simulação numérica para o processo dinâmico não-isotérmico ainda é pouco estudada na literatura com base em modelos matemáticos envolvendo a equação da partícula. Como uma justificativa, a modelagem completa, reunindo o efeito de difusão intraparticular, é bastante complexa. Nesta contribuição, o artigo apresenta um modelo matemático formado por equações acopladas do balanço de energia para as fases gás-líquido e sólida no RLFT.

Neste trabalho, é apresentado um modelo unidimensional para simular matematicamente o processo de transferência de calor em um RLFT. Desta forma, considerando as equações de balanço de energia para as fases gás-líquido e sólida no leito fixo, simulações foram realizadas usando os modelos fornecidos para o processo de transferência de calor verificando o comportamento das temperaturas nas fases gasosa e sólida dentro do RLFT. Por fim, as simulações foram apresentadas em termos de evoluções de temperaturas como uma função do tempo variando o coeficiente de transferência de calor.

II. MODELAGEM MATEMÁTICA

Os modelos com configuração de fluido concorrente sobre partículas (como mostrado na Fig. 1) podem ser considerados como um problema de valor inicial, assim será possível estimar as temperaturas em função do tempo. Os modelos matemáticos podem ser usados para analisar os projetos de reatores e as condições de operações. Este trabalho apresenta um modelo unidimensional para prever a evolução das temperaturas nas fases gasosa e sólida.

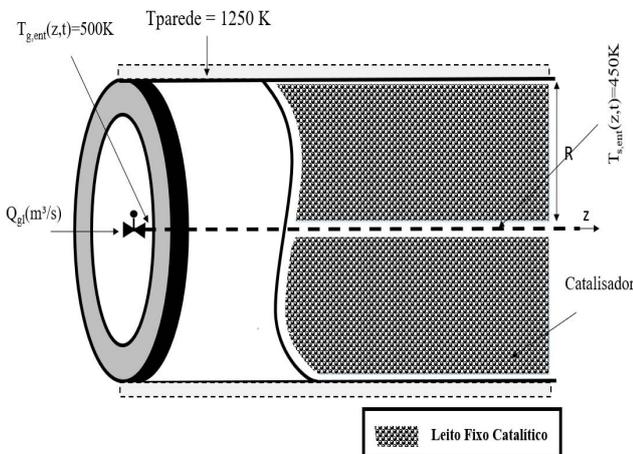


Fig. 1. Modelo de um reator de leito fixo trifásico (RLFT) para estudar o processo de reforma catalítica para produção de combustível.

Um modelo adequado ajudará na identificação da sensibilidade de atuação de um reator através da variação de diferentes condições de operação e parâmetros do projeto [15-17]. Por causa da complexidade geométrica dos RLFTs, o transporte de fluido em meio poroso é descrito por modelos matemáticos complicados que devem ser simplificados antes de serem resolvidos. A fim de desenvolver um modelo matemático dinâmico para a transferência de calor em meio poroso do RLFT proposto neste trabalho, a temperatura das fases fluidas foi considerada na direção axial do reator e a temperatura na fase sólida foi considerada na direção radial da partícula.

As equações diferenciais parciais (EDPs) do modelo desenvolvido, são deduzidas por serem consideradas um elemento infinitesimal do reator. Para analisar as variáveis térmicas da modelagem matemática proposta, foram adotadas as seguintes suposições:

- (i) Gradientes de temperaturas na direção axial do RLFT foram considerados.
- (ii) Gradientes de temperaturas na direção radial das partículas foram considerados.
- (iii) O sistema opera sob regime dinâmico.
- (iv) Na modelagem proposta, foram considerados apenas os efeitos térmicos em ambas as fases.
- (v) A temperatura da parede do RLFT foi considerada constante.
- (vi) Dimensão das partículas uniformes.
- (vii) Porosidade na direção axial foi considerada constante.

Baseado nas suposições acima, as equações de balanços de energia para a fase gasosa, bem como para a fase sólida são dadas como segue:

- Balanço de energia para as fases gás-líquido;

$$\varphi_{g\ell} \frac{\partial T_{g\ell}(z, t)}{\partial t} + \vartheta_{g\ell} \frac{\partial T_{g\ell}(z, t)}{\partial z} = \mu_{g\ell} \frac{\partial^2 T_{g\ell}(z, t)}{\partial z^2} - h_{fp} \frac{3}{r_p} (1 - \varepsilon_b) [T_{g\ell}(z, t) - T_s(r, t)|_{r=R}] \tag{1}$$

Onde  $\varphi_{g\ell}$  (kJ/m<sup>3</sup>K) é o coeficiente do termo de acumulação térmica,  $T_{g\ell}$  (K) é a temperatura das fases gás-líquido,  $\vartheta_{g\ell}$  (kJ/m<sup>3</sup>K s) é o coeficiente do termo de convecção térmica,  $t$  (s) é o tempo,  $z$  (m) é a coordenada na direção axial do RLFT, respectivamente,  $\mu_{g\ell}$  (kJ/m<sup>3</sup>K s) é o coeficiente do termo de dispersão térmica,  $h_{fp}$  (kJ/m<sup>2</sup>K s) é o coeficiente de transferência de calor fluido-partícula,  $r_p$  (m) raio da partícula,  $\varepsilon_b$  (m<sup>3</sup> de fluido/m<sup>3</sup> de reator) é a porosidade do leito,  $T_s$  (K) é a temperatura da fase sólida, respectivamente.

Os coeficientes da Eq. 1  $\varphi_{g\ell}$ ,  $\vartheta_{g\ell}$  e  $\mu_{g\ell}$  são dados pelas Equações abaixo.

$$\varphi_{g\ell} = h_g \rho_g C_{p,g} + h_\ell \rho_\ell C_{p,\ell} \tag{2}$$

$$\vartheta_{g\ell} = \frac{h_g \rho_g C_{p,g} V_{sg} + h_\ell \rho_\ell C_{p,\ell} V_{s\ell}}{L} \tag{3}$$

$$\mu_{g\ell} = \frac{h_g \lambda_g + h_\ell \lambda_\ell}{L^2} \quad (4)$$

Nas Eqs. de 2-4,  $h_g$  ( $m^3$  de gás/ $m^3$  de reator) é a retenção da fase gasosa,  $\rho_g$  ( $kg/m^3$ ) é a densidade da fase gasosa,  $C_{p,g}$  ( $kJ/kg K$ ) é capacidade calorífica do gás,  $h_\ell$  ( $m^3$  de líquido/ $m^3$  de reator) é a retenção da fase líquida,  $\rho_\ell$  ( $kg/m^3$ ) é a densidade da fase líquida,  $C_{p,\ell}$  ( $kJ/kg K$ ) é capacidade calorífica do líquido, respectivamente;  $V_{sg}$  ( $m/s$ ) é a velocidade superficial da fase gasosa,  $V_{s\ell}$  ( $m/s$ ) é a velocidade superficial da fase líquida,  $L$  ( $m$ ) é o comprimento do leito,  $\lambda_g$  ( $kJ/m K s$ ) é a condutividade térmica para a fase gasosa,  $\lambda_\ell$  ( $kJ/m K s$ ) é a condutividade térmica para a fase líquida, respectivamente.

- Condições iniciais e de contornos para a Eq. 1;

$$T_{g\ell}(z,0) = T_{g\ell,0}; T_{g\ell}(z,0) \in (0,L) \text{ e } T_{g\ell}(z,0) \in (t_0, t_{\text{final}}) \quad (5)$$

$$\mu_{g\ell} \left. \frac{\partial T_{g\ell}(z,t)}{\partial z} \right|_{z=0^+} = \mathfrak{A}_{g\ell} \left[ T_{g\ell}(z,t) \Big|_{z=0^+} - T_{g\ell,0} \right] \quad (6)$$

$$\left. \frac{\partial T_{g\ell}(z,t)}{\partial z} \right|_{z=L} = 0 \quad (7)$$

- Balanço da energia para a fase sólida;

$$\rho_s C_{p,s} \frac{\partial T_s(r,t)}{\partial t} = \frac{\lambda_s}{R^2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \frac{\partial T_s(r,t)}{\partial r} \right] \quad (8)$$

Onde  $\rho_s$  ( $kg/m^3$ ) é a densidade da fase sólida,  $C_{p,s}$  ( $kJ/kg \cdot K$ ) é a capacidade calorífica da fase sólida, respectivamente;  $\lambda_s$  ( $kJ/m K s$ ) é a condutividade térmica para a fase sólida,  $R$  ( $m$ ) é o raio da partícula na superfície da fase sólida,  $r$  ( $m$ ) é o raio da partícula, respectivamente.

- Condições iniciais e de contornos para a Eq. 8;

$$T_s(z,0) = T_{s,0}; T_s(z,0) \in (0,L) \text{ e } T_s(z,0) \in (t_0, t_{\text{final}}) \quad (9)$$

$$\lambda_s \left. \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial r} \right|_{r=R} = h_{fp} \left[ T_{g\ell} - T_s \Big|_{r=R} \right] \quad (10)$$

$$\left. \frac{\partial T_s(z,t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (11)$$

### III. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO DO PROBLEMA

Para resolver a modelagem matemática da equação do balanço de energia das fases gas-líquido acoplada com a

equação da fase sólida juntamente com as condições iniciais e de contornos, foi adotada uma nova formulação matemática conhecida como *coupled integral equation approach (CIEA)* que transforma as EDPs em equações diferenciais ordinárias (EDOs), sendo possível apresentar resultados mais precisos do que outros métodos mais convencionais, em menor tempo de CPU [18-20]. Para realizar tal transformação, o esquema de integração de Hermite [21] foi usado. Esse esquema corresponde como uma forma de aproximar uma integral, baseado nos valores do integrando e suas derivadas nos limites de integração, sob a seguinte forma:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} y(x) dx = \sum_{v=0}^{\alpha} C_v y_{i-1}^{(v)} + \sum_{v=0}^{\beta} D_v y_i^{(v)} \quad (12)$$

Onde  $y(x)$  e sua derivada  $y^{(v)}(x)$  são definidas para todo  $x$  ( $x_{i-1}, x_i$ ). Além disso, assume-se que os valores numéricos de  $y^{(v)}(x_{i-1}) \equiv y_{i-1}^{(v)}$  para  $v = 0, 1, 2, 3, \dots, \alpha$  e  $y^{(v)}(x_i) \equiv y_i^{(v)}$  para  $v = 0, 1, 2, 3, \dots, \beta$  estão disponíveis nos pontos finais dos intervalos. Por outro lado, a integral de  $y(x)$  é expressa como combinação linear de  $y(x_{i-1})$ ,  $y(x_i) \equiv y_{i-1}^{(v)}$  e suas derivadas,  $y^{(v)}(x_{i-1})$  são da ordem  $v = \alpha$  e  $y^{(v)}(x_i)$  são da ordem de  $v = \beta$ . Sendo assim, chamada de aproximação  $H_{\alpha,\beta}$ . A expressão resultante para essa aproximação, de acordo com Ref. [22], é dada por:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} y(x) dx \cong \sum_{v=0}^{\alpha} C_v(\alpha, \beta) h_i^{v+1} y_{i-1}^{(v)} + \sum_{v=0}^{\beta} C_v(\alpha, \beta) (-1)^v h_i^{v+1} y_i^{(v)} + O(h_i^{\alpha+\beta+3}) \quad (13)$$

Onde:

$$h_i = x_i - x_{i-1}; C_v(\alpha, \beta) = \frac{(\alpha+1)!(\alpha+\beta+1-v)!}{(v+1)!(\alpha-v)!(\alpha+\beta+2)!}$$

Nesta contribuição, as aproximações abaixo foram usadas.

$$H_{0,0} \rightarrow \int_0^h f(x) dx \cong \frac{h}{2} [f(0) + f(h)] \quad (14)$$

$$H_{1,1} \rightarrow \int_0^h f(x) dx = \frac{h}{2} [f(0) + f(h)] + \frac{h^2}{12} [f'(x) + f'(0)] \quad (15)$$

As Eqs. 14 e 15 correspondem a regra trapezoidal e a regra trapezoidal corrigida, respectivamente [23]. Assim, neste trabalho, as integrais que definem as temperaturas médias do modelo e o fluxo de temperatura são dadas como seguem:

$$\int_0^{L|R} T_n(z,t) ds = \bar{T}_n(t) \quad (16)$$

$$\int_0^{L|R} \frac{\partial T_n(z,t)}{\partial s} ds = T_n(L,t) - T_n(0,t) \quad (17)$$

Nas quais, pode-se afirmar que  $n$  é gás-líquido ( $g\ell$ ) ou sólido ( $s$ ) e  $s$  é a direção axial para a fase fluida e radial para fase sólida.

Para resolver a modelagem proposta neste artigo, foram usadas as formulações de  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$ . Sendo o modelo  $H_a/H_b$  definido como:  $H_a$  é a expressão da integral e  $H_b$  é expressão de sua derivada.

- Primeiro Caso:  $H_{0,0}|H_{0,0}$

$$\bar{T}_n(t) \cong \frac{L}{2} [T_n(0,t) + T_n(L,t)] \quad (18)$$

$$T_n(L,t) - T_n(0,t) \cong \frac{L}{2} \left[ \frac{\partial T_n}{\partial s} \Big|_{s=0} + \frac{\partial T_n}{\partial s} \Big|_{s=L|R} \right] \quad (19)$$

A partir das expressões matemáticas (16)-(19), as Eqs.1 e 8 juntamente com as suas condições de contornos, foram transformadas nas seguintes EDOs:

$$\frac{d\bar{T}_{g\ell}(t)}{dt} = \delta_{5,g\ell}(T_{g\ell},0) - \delta_{6,g\ell}\bar{T}_{g\ell}(t) + \delta_{7,g\ell}\bar{T}_s(t) \quad (20)$$

$$\frac{d\bar{T}_s(t)}{dt} = \eta_{7,s}(T_{g\ell},0) + \eta_{8,s}\bar{T}_{g\ell}(t) - \eta_{9,s}\bar{T}_s(t) \quad (21)$$

Onde  $\bar{T}_{g\ell}(K)$  é a temperatura média das fases gás-líquido e  $\bar{T}_s(K)$  é a temperatura média da fase sólida, respectivamente.

Os parâmetros  $\delta_{5,g\ell}$ ,  $\delta_{6,g\ell}$ ,  $\delta_{7,g\ell}$ ,  $\eta_{7,s}$ ,  $\eta_{8,s}$  e  $\eta_{9,s}$  das Eqs. 20 e 21 são obtidos da dedução matemática aplicando as expressões (16)-(19) nas Eqs. 1 e 8 com as devidas condições de contornos. Estes parâmetros são mostrados nas Tabelas AII e AIII do apêndice A.

- Segundo Caso:  $H_{1,1}|H_{0,0}$

$$\bar{T}_n(t) \cong \frac{L}{2} [T_n(0,t) + T_n(L,t)] + \frac{L^2}{12} \left[ \frac{\partial T_n}{\partial s} \Big|_{s=0} - \frac{\partial T_n}{\partial s} \Big|_{s=L|R} \right] \quad (22)$$

$$T_n(L,t) - T_n(0,t) \cong \frac{L}{2} \left[ \frac{\partial T_n}{\partial s} \Big|_{s=0} + \frac{\partial T_n}{\partial s} \Big|_{s=L|R} \right] \quad (23)$$

Neste caso, as expressões matemáticas (16), (17), (22) e (23) são usadas nas Eqs. 1 e 8 juntamente com as suas condições de contornos, transformando, novamente, em outras EDOs, como:

$$\frac{d\bar{T}_{g\ell}(t)}{dt} = \alpha_{5,g\ell}(T_{g\ell},0) - \alpha_{7,g\ell}\bar{T}_{g\ell}(t) + \alpha_{6,g\ell}\bar{T}_s(t) \quad (24)$$

$$\frac{d\bar{T}_s(t)}{dt} = \beta_{6,s}\alpha_{4,g\ell}(T_{g\ell},0) + \beta_{6,s}\alpha_{3,g\ell}\bar{T}_{g\ell}(t) - \beta_{7,s}\bar{T}_s(t) \quad (25)$$

Os parâmetros  $\alpha_{3,g\ell}$ ,  $\alpha_{4,g\ell}$ ,  $\alpha_{5,g\ell}$ ,  $\alpha_{6,g\ell}$ ,  $\alpha_{7,g\ell}$ ,  $\beta_{6,s}$ ,  $\beta_{7,s}$  e  $\beta_{8,s}$  das Eqs. 24 e 25 são obtidos da dedução matemática aplicando as expressões (16), (17), (22) e (23) nas Eqs. 1 e 8 com as devidas condições de contornos. Estes parâmetros são mostrados nas Tabelas AIV e AV do apêndice A.

#### IV. RESULTADOS

Um modelo matemático dinâmico foi desenvolvido para analisar as variações de temperatura ( $T_{g\ell}$ ) nas fases gás-líquido, bem como a temperatura ( $T_s$ ) na fase sólida em um RLFT. Os valores dos parâmetros usados na simulação para obter as evoluções das temperaturas ( $T_{g\ell}$ ,  $T_s$ , respectivamente) são fornecidos na Tabela BVI do apêndice B. Além disso, um código computacional (na linguagem FORTRAN 95) foi elaborado pelos autores para resolver o conjunto de equações mencionadas neste trabalho. Como resultados, essa tabela apresenta em detalhes todas as condições para simular o modelo proposto.

A Fig. 2 mostra as evoluções da  $\bar{T}_{g\ell}(K)$  usando as formulações  $H_{0,0}|H_{0,0}$ ,  $H_{1,1}|H_{0,0}$ , respectivamente. Como pode ser visto nos gráficos, uma região tracejada foi ampliada conforme as Figs. (c) e (d) dentro das Figs. (a) e (b). A Fig. 2a mostra uma maior transferência de energia das fases gás-líquido para a fase sólida em um intervalo de tempo de  $1 \leq t \leq 2s$  conforme a Fig. (c). Por outro lado, a Fig. 2b apresenta uma menor transferência de energia das fases gás-líquido para a fase sólida em um intervalo de tempo de  $1 \leq t \leq 2s$  conforme a Fig. (d). Este fenômeno, acontece nos processos de reforma, com reação química endotérmica, para produção de gás combustível e pode ser encontrado na Ref. [24].

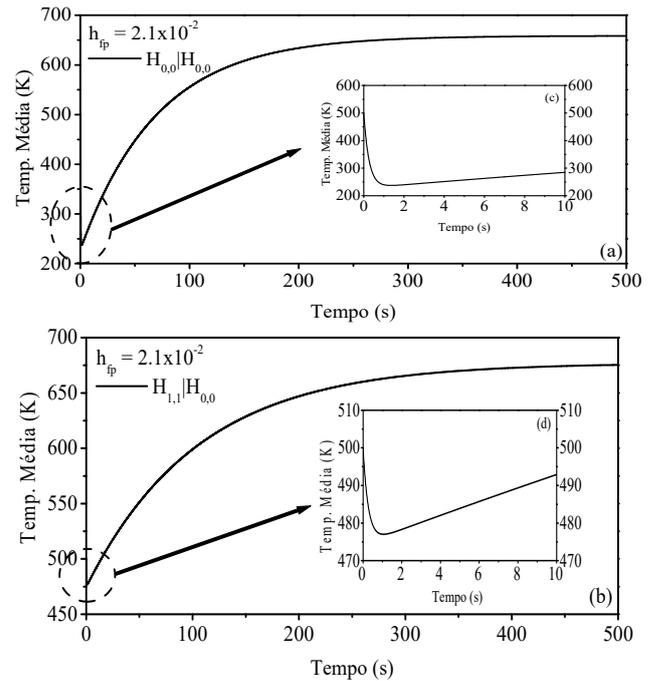


Fig. 2. Evolução da temperatura média com as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$ .

**A. Efeito do Coeficiente de Transferência de Calor Fluido-Partícula ( $h_{fp}$ ) para Aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$  sobre a Temperatura Média  $\bar{T}_{gl}(K)$  das Fases Gás-Líquido**

A Fig. 3 relata o efeito do  $h_{fp}$  sobre as evoluções da  $\bar{T}_{gl}(K)$  para as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$ ,  $H_{1,1}|H_{0,0}$ , respectivamente. Para propósito de comparação, foram mostrados três valores diferentes de  $h_{fp}$  sobre a  $\bar{T}_{gl}(K)$  para as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$ ,  $H_{1,1}|H_{0,0}$ .

A Fig. 3e apresenta a aproximação do  $H_{0,0}|H_{0,0}$  com a região tracejada de ampliação (Fig. 3f). Foi observado que a variação do  $h_{fp}$  entre  $0 \leq t \leq 3s$  sobre as evoluções da  $\bar{T}_{gl}(K)$  é praticamente nula. O efeito de  $h_{fp}$  fica claro, sobre a  $\bar{T}_{gl}(K)$ , quando o tempo aumenta. Além disso, a  $\bar{T}_{gl}(K)$  aumenta quando aumentamos o  $h_{fp}$  segundo o gráfico da Fig. 3e. Por outro lado, os níveis estáveis das curvas são alcançados em torno de 350s partindo do estado inicial.

A Fig. 3g mostra a aproximação do  $H_{1,1}|H_{0,0}$  com a região tracejada de ampliação (Fig. 3h). Neste caso, tem sido verificado que a variação do  $h_{fp}$  entre  $0 \leq t \leq 12s$  sobre as evoluções da  $\bar{T}_{gl}(K)$  é aproximadamente nula. O efeito de  $h_{fp}$  é observado, sobre a  $\bar{T}_{gl}(K)$ , quando o tempo aumenta. Como resultado, a  $\bar{T}_{gl}(K)$  aumenta quando elevamos o  $h_{fp}$  conforme o gráfico da Fig. 3g. Como pode ser visto na Fig. 3g, os níveis estáveis das curvas são alcançados em torno de 450s partindo do estado inicial. Para propósito de conclusão entre as duas figuras, o efeito de  $h_{fp}$  sobre a transferência de energia das regiões tracejadas das figuras é maior para a aproximação  $H_{0,0}|H_{0,0}$ .

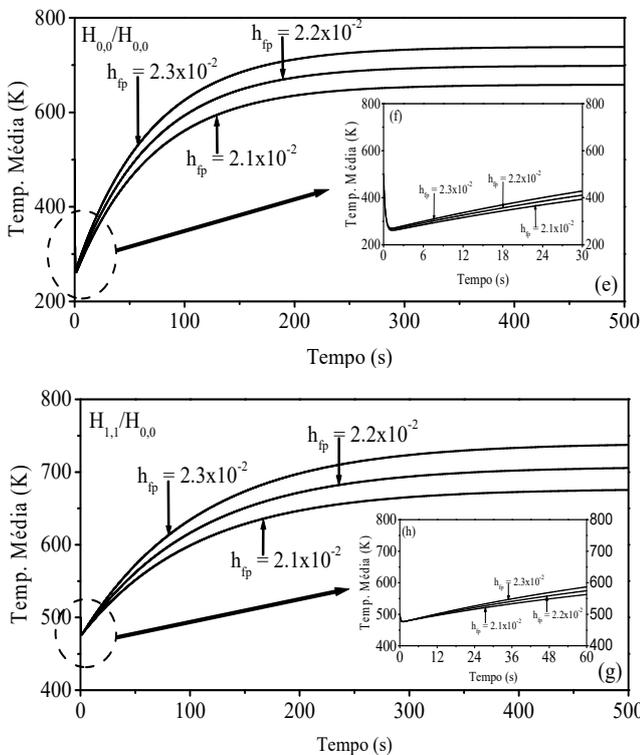


Fig. 3. Variação da temperatura do fluido ao longo do tempo com diferentes valores de  $h_{fp}$ , sendo aplicada com as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$ .

**B. Efeito do  $h_{fp}$  para Aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  E  $H_{1,1}|H_{0,0}$  sobre a Temperatura Média  $\bar{T}_s(K)$  da Fase Sólida**

A Fig. 4 reporta o efeito do  $h_{fp}$  sobre as evoluções da  $\bar{T}_s(K)$  para as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$ ,  $H_{1,1}|H_{0,0}$ , respectivamente. Para propósito de comparação, foram relatados três valores diferentes de  $h_{fp}$  sobre a  $\bar{T}_s(K)$  para as devidas aproximações.

A Fig. 4i descreve a aproximação do  $H_{0,0}|H_{0,0}$  com a variação de três valores de  $h_{fp}$  sobre a  $\bar{T}_s(K)$ . Baseado nos resultados dessa figura, o efeito de  $h_{fp}$ , nos primeiros segundos, pode ser considerado nulo. O efeito de  $h_{fp}$  sobre a  $\bar{T}_s(K)$  torna-se claro quando o tempo cresce. Como visto na Fig. 3i, à medida que o  $h_{fp}$  cresce, também cresce a temperatura. As evoluções de  $\bar{T}_s(K)$  alcançam os níveis estáveis em torno de 400s partindo do estado inicial.

A Fig. 4j mostra a aproximação do  $H_{1,1}|H_{0,0}$  com a variação de três valores de  $h_{fp}$  sobre a  $\bar{T}_s(K)$ . Para este caso, tem sido verificado um decrescimento da temperatura  $\bar{T}_s(K)$  em comparação com a Fig. 4i, que relata a aproximação do  $H_{0,0}|H_{0,0}$ .

Como visto nos resultados do gráfico (Fig. 4j), o efeito de  $h_{fp}$ , nos primeiros segundos, pode ser visto como nulo. Nesta figura, à medida que o  $h_{fp}$  cresce também cresce a temperatura. As evoluções de  $\bar{T}_s(K)$  atingem os níveis estáveis, próximo dos 480s partindo do estado inicial.

Para concluir, o efeito de  $h_{fp}$  sobre  $\bar{T}_s(K)$  nas duas figuras, a aproximação  $H_{0,0}|H_{0,0}$  apresenta um maior aquecimento e a aproximação  $H_{1,1}|H_{0,0}$  mostra um menor aquecimento segundo os respectivos gráficos 4i e 4j.

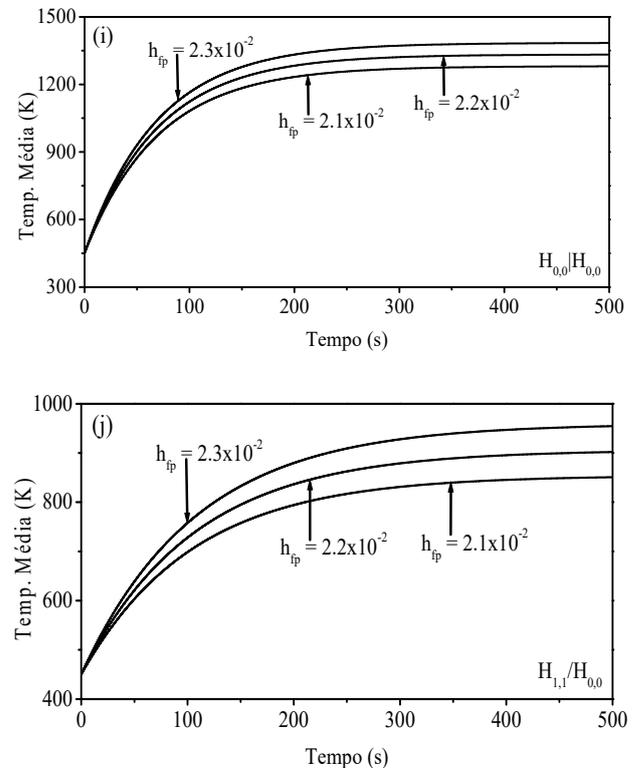


Fig. 4. Variação da temperatura do sólido ao longo do tempo com diferentes valores de  $h_{fp}$  nas aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$ .

C. Comparação das Aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$  sobre as Temperaturas Médias  $\bar{T}_{g\ell}(K)$  e  $\bar{T}_s(K)$

A Fig. 5 mostra uma comparação da temperatura na fase sólida ao longo do tempo com  $h_{fp} = 2.1 \times 10^{-2}$  para as duas formulações propostas. Como um resultado, pode ser observado que as duas curvas ( $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$ ) da temperatura na fase sólida (partindo a partir da temperatura inicial) alcançam um estado estável depois da alimentação. A aproximação  $H_{0,0}|H_{0,0}$  apresenta um maior aquecimento do que a  $H_{1,1}|H_{0,0}$ . Dessa forma, nota-se que a temperatura na fase sólida apresenta um comportamento muito sensível, pois a implementação de diferentes aproximações da modelagem a temperatura teve uma diferença significativa.

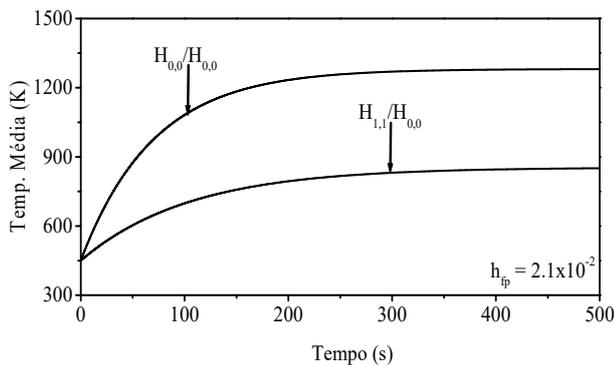


Fig. 5. Temperaturas ao longo do tempo para os dois casos propostos de aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{1,1}|H_{0,0}$

A Tabela I, mostra as temperaturas finais das formulações matemáticas propostas em diferentes valores de  $h_{fp}$ , mostrando os reais valores que a temperatura atinge aos 500 segundos do processo, ficando mais perceptível a influência do parâmetro e as diferenças das duas aproximações.

TABELA I  
TEMPERATURAS NOS PROCESSOS AOS 500SEGUNDOS

$h_{fp}$	$H_{0,0} H_{0,0}$		$H_{1,1} H_{0,0}$	
	$T_{g\ell}$ -final	$T_s$ -final	$T_{g\ell}$ -final	$T_s$ -final
$2.13 \times 10^{-2}$	724,273	1408,356	742,777	935,445
$2.23 \times 10^{-2}$	768,075	1465,500	775,948	991,664
$2.33 \times 10^{-2}$	812,168	1522,069	810,993	1049,496

V. CONCLUSÃO

Os processos de transferência de calor em RLFTs são de grande importância devido à desvantagem desses equipamentos em controlar o calor das reações exotérmicas. Pois, o descontrole da liberação de calor dessas reações poderá gerar pontos-quentes (hot-spot) no leito do reator [13 e 25]. O funcionamento desse equipamento segue o comportamento das temperaturas das fases gás-líquido e sólido é mostrado nas Fig. de 2-5, respectivamente. Nestas figuras, foram mostrados a evoluções das temperaturas versus o tempo até alcançar seus níveis de estabilidade, especialmente para a definição de estratégias de controle e/ou operações otimizadas do reator. Desta forma, pode-se concluir que o comportamento é definido

como a evolução destas temperaturas a partir do valor de entrada até alcançar as condições de estabilidade destas temperaturas.

Os reatores de leito fixo são usados no processo de reforma de hidrocarboneto para a produção de gás de síntese e hidrogênio, desta forma é perceptível que esse equipamento tem boa aplicação prática. Porém, caso o efeito da transferência de calor seja negligenciado nos reatores, o rendimento dos processos de reforma não irá apresentar bons resultados, uma vez que o rendimento do processo é função do calor fornecido para o reator.

Desta forma, com o objetivo de realizar uma previsão segura e detalhada do processo de transferência de calor nos reatores de leito fixo, o presente artigo realizou a modelagem matemática em um modelo unidimensional. A modelagem matemática foi realizada a partir de uma nova formulação matemática, conhecida como CIEA, com as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{0,0}|H_{1,1}$ , e aplicando-as as equações de balanço de energia ao modelo proposto no artigo. Desta forma, nas condições admitidas para esta pesquisa, as EDOs foram resolvidas numericamente usando o método de Euler, permitindo a obtenção de um estudo comparativo entre as duas aproximações ( $H_{0,0}|H_{0,0}$  e  $H_{0,0}|H_{1,1}$ ) e a variação da temperatura ao longo do tempo com diferentes valores do coeficiente de transferência de calor ( $h_{fp}$ ). Desta maneira, foi perceptível a influência desse coeficiente no presente modelo e poderá servir como referência para a boa aplicação desse equipamento nos processos desejados, como no processo de reforma a vapor de hidrocarbonetos para a produção de hidrogênio. Desta forma, a elaboração do código computacional para processar e analisar o comportamento das variáveis em estudo ( $\bar{T}_{g\ell}(K)$  e  $\bar{T}_s(K)$ ) desta pesquisa, permitiu conduzir as seguintes conclusões:

- As evoluções da  $\bar{T}_{g\ell}(K)$  foram avaliadas a partir das formulações  $H_{0,0}|H_{0,0}$ ,  $H_{1,1}|H_{0,0}$  segundo a Fig. 2. Nesta figura, foi mostrado a transferência de energia das fases gás-líquido para a fase sólida em intervalos de tempo de  $1 \leq t \leq 2s$
- O efeito do  $h_{fp}$  sobre as evoluções da  $\bar{T}_{g\ell}(K)$  para as aproximações  $H_{0,0}|H_{0,0}$ ,  $H_{1,1}|H_{0,0}$  foi realizado. Nas duas figuras, a  $\bar{T}_{g\ell}(K)$  cresce à medida que  $h_{fp}$  aumenta. Como consequência do efeito de  $h_{fp}$ , este parâmetro deve ser considerado no controle de processo do RLFT.
- Para propósito de comparação, a temperatura da fase sólida atinge valores mais altos em relação à fase fluida, controlando o comportamento térmico do reator e sendo bem sensível às mudanças de aproximações.
- Os resultados das aproximações propostas pelo modelo matemático comprovou que  $H_{1,1}|H_{0,0}$  obtém resultados mais precisos e confiáveis do que  $H_{0,0}|H_{0,0}$ , em virtude de ser uma aproximação mais detalhada da integral de Hermite, Ref. [20].

## APÊNDICE A

TABELA AII  
PARÂMETROS DA EQ. 20

$\delta_{1,g^l} = \frac{\vartheta_{g^l}}{\mu_{g^l}}$	$\delta_{4,g^l} = \left[ \delta_{41,g^l} - \frac{\delta_{1,g^l}}{2} \right]$
$\delta_{2,g^l} = \left( 1 + \frac{\delta_{1,g^l}}{4} \right)$	$\delta_{51,g^l} = h_{fp} \left( \frac{3}{r_p} \right) \times (1 - \varepsilon_s)$
$\delta_{3,g^l} = \left( 1 + \frac{\delta_{1,g^l}}{2} \right) \times \frac{1}{\delta_{2,g^l}}$	$\delta_{5,g^l} = \left[ \frac{-\vartheta_{g^l} \times \delta_{3,g^l} - \delta_{51,g^l}}{\varphi_{g^l}} \right]$
$\delta_{41,g^l} = \left[ \left( 1 + \frac{\delta_{1,g^l}}{2} \right) \times \left( \frac{\delta_{1,g^l}}{4\delta_{2,g^l}} \right) \right]$	$\delta_{7,g^l} = \frac{\delta_{51,g^l}}{\varphi_{g^l}}$

TABELA AIII  
PARÂMETROS DA EQ. 21

$\eta_{1,s} = \frac{h_{fp}}{\lambda_s}$	$\eta_{5,s} = \left( \frac{\eta_{2,s}}{2} - \frac{\eta_{1,s}}{4\eta_{2,s} \times \eta_{3,s}} \right) \times \frac{1}{\eta_{2,s}}$
$\eta_{2,s} = \left( 1 + \frac{\eta_{1,s}}{2} \right)$	$\eta_{6,s} = \left( \frac{3}{\rho_s C_{p,s}} \frac{\lambda_s}{R^2} \right) \eta_{1,s}$
$\eta_{3,s} = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2\eta_{2,s}} \right)$	$\eta_{7,s} = (\eta_{6,s} - \eta_{6,s} \eta_{5,s}) \times \delta_{3,g^l}$
$\eta_{4,s} = \left( \frac{1}{\eta_{2,s} \times \eta_{3,s}} \right)$	$\eta_{8,s} = (\eta_{6,s} - \eta_{6,s} \eta_{5,s}) \times \delta_{4,s}$
	$\eta_{9,s} = (\eta_{6,s} \eta_{4,s})$

TABELA AIV  
PARÂMETROS DA EQ. 24

$\alpha_{1,g^l} = \left( \frac{3\mu_{g^l} + \vartheta_{g^l}}{3\mu_{g^l}} \right)$	$\alpha_{43,g^l} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\vartheta_{g^l}}{\mu_{g^l}} \right]$
$\alpha_{2,g^l} = \frac{1}{3} \frac{\vartheta_{g^l}}{\mu_{g^l}}$	$\alpha_{5,g^l} = \frac{(\vartheta_{g^l} - \vartheta_{g^l} \alpha_{4,g^l})}{\varphi_{g^l}}$
$\alpha_{3,g^l} = \left( \frac{1}{2} \frac{\vartheta_{g^l}}{\mu_{g^l}} + 1 \right) \frac{1}{\alpha_{1,g^l}}$	$\alpha_{6,g^l} = \frac{h_{fp}}{\varphi_{g^l}} \frac{3}{r_p} (1 - \varepsilon_s)$
$\alpha_{4,g^l} = [\alpha_{42,g^l} + \alpha_{43,g^l}]$	$\alpha_{7,g^l} = \frac{\vartheta_{g^l} \alpha_{3,g^l}}{\varphi_{g^l}} + \alpha_{6,g^l}$
$\alpha_{42,g^l} = \left( \frac{1}{2} \frac{\vartheta_{g^l}}{\mu_{g^l}} + 1 \right) \times \left( \frac{\alpha_{2,g^l}}{\alpha_{1,g^l}} \right)$	

TABELA AV  
PARÂMETROS DA EQ. 25

$\beta_{2,s} = \left( \frac{1}{3} \frac{h_{fp}}{\lambda_s} \right)$	$\beta_{5,s} = \left( \frac{3}{\rho_s C_{p,s}} \frac{\lambda_s}{R^2} \frac{h_{fp}}{k_s} \right)$
$\beta_{1,s} = \left( \frac{3\lambda_s + h_{fp}}{3\lambda_s} \right)$	$\beta_{6,s} = \left( \beta_{5,s} - \beta_{5,s} \frac{\beta_{2,s}}{\beta_{1,s}} \right)$
$\beta_{3,s} = \left[ -\frac{h_{fp}}{2\lambda_s} + \left( \frac{h_{fp}}{2\lambda_s} + 1 \right) \frac{\beta_{2,s}}{\beta_{1,s}} \right]$	$\beta_{7,s} = \beta_{5,s} \frac{1}{\beta_{1,s}}$
$\beta_{4,s} = \left[ \left( \frac{h_{fp}}{2\lambda_s} + 1 \right) \frac{1}{\beta_{1,s}} \right]$	

## APÊNDICE B

TABELA BVI  
DADOS DE ENTRADA PARA A SIMULAÇÃO

Categorias	Propriedades	Valor Numérico
Condições de Operações	$T_{g^l,0}$	500
	$T_{s,0}$	450
	L	1,0
	$\varepsilon_s$	0,59
	$r_p$	$3,2 \times 10^{-4}$
	R	1,0
Propriedades da Fase gasosa	$C_{p,g}$	$2,101 \times 10^{-1}$
	$h_g$	0,80
	$V_{s,g}$	$29,46 \times 10^{-1}$
	$\lambda_g$	0,0347
	$\rho_g$	$0,933 \times 10^{-2}$
Propriedades da Fase líquida	$C_{p,l}$	2,101
	$h_l$	0,791
	$V_{s,l}$	1,51
	$\lambda_l$	$1,80 \times 10^{-2}$
	$\rho_l$	$1,01 \times 10^{-2}$
Propriedades da Fase sólida	$C_{p,s}$	$2,001 \times 10^3$
	$h_{fp}$	$2,135 \times 10^{-2}$
	$\lambda_s$	$1,559 \times 10^{+2}$
	$\rho_s$	$1,250 \times 10^{-1}$

## AGRADECIMENTOS

Os autores desse artigo gostariam de agradecer ao CNPQ (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) ao suporte financeiro dado.

## REFERÊNCIAS

- [1] D.L. Molina, J.R. Vidal, F.González, "Mathematical Modeling Based on Exergy Analysis for a Bagasse Boiler". IEEE Latin America Transactions, Vol.15, no.01, pp. 65- 74, Jan. 2017.
- [2] M.A. Hernández, F. Lozada, J.L. Azcue, J.A. Torrico, A.J. Sguarezi, "Battery Energy Storage System Applied to Wind Power System Based on Z-Source Inverter Connected to Grid". IEEE Latin America Transactions, Vol.14, no.09, pp 4035-4041, Sept. 2016.
- [3] S.S. Halkarni, A. Sridharan, S.V. Prabhu, "Estimation of volumetric heat transfer coefficient in randomly packed beds of uniform sized spheres with water as working medium". International Journal of Thermal Sciences, Vol. 110, no. 10, pp. 340-355, Dec. 2016.
- [4] Z. Erregueragi, N. Boutammachte, A. Bouatem, O. Merroun, E.M. Zemmouri, "Packed-bed Thermal Energy Storage Analysis: Quartzite and Palm-Oil Performance". Energy Procedia, Vol 99, pp. 370-379, Mar.2016.
- [5] A. Heidari; S.H. Hashemabadi, "Numerical evaluation of the gas-liquid interfacial heat transfer in the trickle flow regime of packed beds at the micro and meso-scale". Chemical Engineering Science, Vol.104, no. 18 pp.674-689, Dec, 2013.
- [6] J. D. Silva; C.A.M. Abreu; "Mathematical modeling of a three-phase trickle bed reactor". Brazilian Journal of Chemical Engineering, Vol.29, no. 03, pp. 567-576, July, 2012.
- [7] M.Bazmi, S.H. Hashemabadi, M. Bayat, "Extrudate Trilobe Catalysts and Loading Effects on Pressoure Drop and Dynamic Liquid Holdup in Porous Media of Trickle Bed Reactors", Transp Porous Med, Vol. 99, pp. 535-553, July, 2013.
- [8] I.M.S.K Ilankoon, S.J. Neethling, "Transient liquid holdup and drainage variations in gravity dominated non-porous and porous packed beds", Chemical Engineering Science, Vol. 116, pp. 398-405, May, 2014
- [9] M. Bazmi., S.H. Hashemabadi.,M. Bayat, "CFD simulation and experimental study of liquid flow mal-distribution throught the randomly trickle bed reactors". International Communications in Heat and Mass Transfer, Vol 39, no. 05, pp. 736-743, May 2012.
- [10] R.G.M Van Der Sman, "Flow through a filter pate becked by a packed bed of spheres", Chemical Engineering Science, Vol. 158, no. 02, PP. 154-163, Feb, 2017

- [11] S. Das, C. Narayanam, S. Roy, R. Khanna, "A model of wetting of partially wettable porous solids by films". *Chemical Engineering Journal*, Vol 320, pp. 104-115, March 2017.
- [12] H.J. Pant, V.K. Sharma, "Investigation of flow dynamics of liquid phase in a pilot-scale trickle bed reactor using radiotracer technique", *Applied Radiation and Isotopes*, Vol. 116, no 10, pp. 163-173, Oct. 2016.
- [13] M.J. Taulamet, N.J. Mariani, G.F. Barreto, O.M. Martínez, "Prediction of thermal behavior of trickle bed reactors: The effect of the pellet shape and size", *Fuel*, Vol. 202, no 15, pp. 631-640, Aug. 2017.
- [14] F.Mousazadeh, H.E.A van den Akker, R.F. Mudde, "Eulerian simulation of heat transfer in a trickle bed reactor with constant wall temperature". *Chem. Eng. J*, Vol 207, no.10, pp. 674-689, Oct, 2013.
- [15] J. D. Silva, "Dynamic modelling for a Trickle-bed reactor using the numerical inverse Laplace transform technique". *Procedia Engineering*, Vol.42, pp. 454-470, Aug, 2012.
- [16] J.D. Silva; F. R. A. Lima; C.A.M. Abreu; A. Knoechelmann, "Experimental analysis and evaluation of the mass transfer process in a trickle-bed reactor", *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, Vol.29, no. 4, pp.375-390, Oct,2003.
- [17] MR. K arim, J. Naser, "Numerical modelling of solid biomass combustion: difficulties in initiating the fixed bed combustion", *Energy Procedia*, Vol 11, pp. 390-395, March, 2017
- [18] L.B. Dantas; H.R.B. Orlande; R.M. Cotta, "Improved lumped-differential formulations and hybrid solution methods for drying in porous media", *International Journal of Thermal Sciences*, Vol.46, no. 9, pp.878-889, Sep,2007.
- [19] D.C. Knupp; C.P. Naveira-Cotta; J.V.C. Ayres; R.M. Cotta; H.R.B. Orlande, "Theoretical experimental analysis of heat transfer in nonhomogeneous solids via improved lumped formulation, integral transforms and infrared thermography". *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 62, pp. 71-84, Dec,2012.
- [20] E.J. Corrêa, R.M; Cotta, "Enhanced lumped-differential formulations of diffusion problems", *Applied Mathematical Modelling*, Vol 22, no 3, pp 137-152, Mar, 1998.
- [21] M.Ch. Hermite, "Sur la Formule d'Interpolation de Lagrange", *J Crelle*, 1878.
- [22] J. Menning, T. Auerbach, W. Halg, "Two Point Hermite approximations For the Solution of Linear Initial Value and Boundary Value Problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol 39, pp. 199-224, 1983.
- [23] S.A. Cardoso, E.N. Macêdo, J.N.N. Quaresma, "Improved lumped solutions for mass transfer analysis in membrane separation process of metals", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol 68, pp 599-611, Oct 2014.
- [24] B.M. Cruz, J.D. Silva "A two-dimensional mathematical model for the catalytic steam reforming of methane in both conventional fixed-bed and fixed bed membrane reactors for the production of hydrogen", *Int. Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 42, pp23690-23670, 2017.
- [25] M.J. Taulamet, N.J. Mariani, G.F. Barreto, O.M. Martínez. "A critical review on heat transfer in trickle bed reactors." *Reviews in Chemical Engineering*, Vol. 31, pp. 97-118, April, 2015



**Jornandes Dias da Silva** possui graduação em Engenharia Química pela Universidade Católica de Pernambuco em 1987, mestrado em Engenharia Química pela Universidade Federal de Pernambuco (1996) e doutorado em Tecnologias Energéticas Nucleares pela Universidade Federal de Pernambuco (2003).

Atualmente é professor associado e livre docente do quadro efetivo da Universidade de Pernambuco/Escola Politécnica de Pernambuco; Professor permanente dos Mestrados em Tecnologia da Energia e Engenharia de Sistemas da Universidade de Pernambuco (UPE). Tem experiência na área de pesquisa e desenvolvimento de processo, com ênfase em Aproveitamento de Energia da biomassa para geração de energia elétrica e Combustão Catalítica atuando principalmente nos seguintes temas: modelagem de processo, simulação computacional de processo, petróleo e gás, projeto de gaseificadores de leito fluidizado e leito fixo, projeto de reatores catalíticos para combustão catalítica, Projeto de equipamento para limpeza de gases resultantes dos processos gaseificação e combustão e produção de hidrogênio em reator de leito fixo com membrana.



**Emerson Barbosa dos Anjos** atualmente é estudante de graduação do curso de Engenharia Civil pela Escola Politécnica de Pernambuco (POLI), vinculada a Universidade de Pernambuco (UPE). Participa do Programa de Excelência Acadêmica pelo edital PIBEC-POLI 2019. Na graduação atuou como monitor das disciplinas de Cálculo Diferencial e

Integral I e Cálculo Numérico. Foi bolsista PIBIC - Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica pelo CNPQ da UPE (2016, 2017 e 2018), desenvolvendo trabalhos com foco em modelagem matemática.