



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

Área de Concentração:

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR DE
LEITO FLUIDIZADO TRIFÁSICO POR MEIO DE
UMA ABORDAGEM VARIACIONAL**

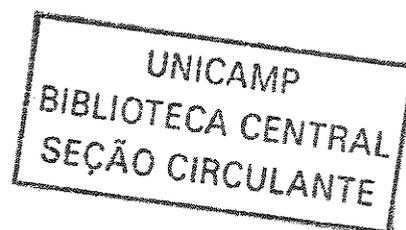
Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Autor: IRAÍ SANTOS JÚNIOR

Orientador: Prof. Dr. REGINALDO GUIRARDELLO

Campinas - São Paulo - Brasil

Julho / 2002



UNIDADE	BC
Nº CHAMADA	
	UNICAMP
	Sa59m
V	EX
TOMBO BC/	52199
PROC.	124103
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	13/02/03
Nº CPD	

CM00180083-1

BIBID. 283787

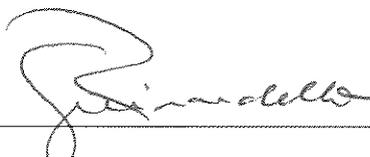
FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

Sa59m Santos Júnior, Iraí
Modelagem e simulação de um reator de leito fluidizado trifásico por meio de uma abordagem variacional / Iraí Santos Júnior. --Campinas, SP: [s.n.], 2002.

Orientador: Reginaldo Guirardello.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Cálculo das variações. 2. Reatores fluidizados. 3. Otimização matemática. 4. Modelos matemáticos. 5. Simulação (Computadores). 6. Dinâmica dos fluidos. I. Guirardello, Reginaldo. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida por Iraí Santos Júnior e aprovada pela comissão julgadora em 30 de Julho de 2002.

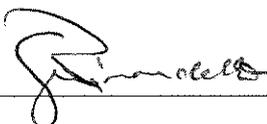


Prof. Dr. REGINALDO GUIARDELLO (orientador)

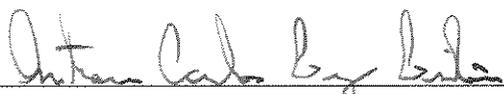
200304817

FOLHA DE APROVAÇÃO

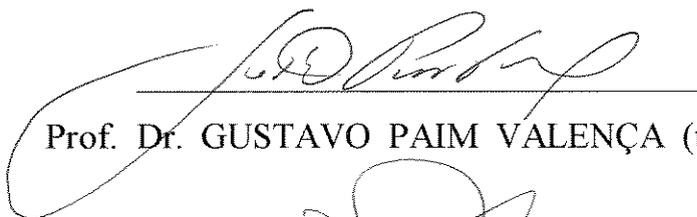
Tese de Doutorado defendida por IRAÍ SANTOS JÚNIOR e aprovada em 30 de JULHO de 2002 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



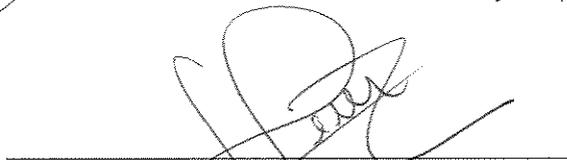
Prof. Dr. REGINALDO GUIRARDELLO (orientador)



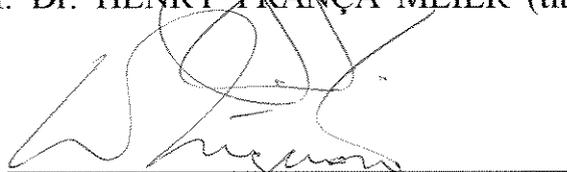
Prof. Dr. ANTÔNIO CARLOS LUZ LISBÔA (titular)



Prof. Dr. GUSTAVO PAIM VALENÇA (titular)



Prof. Dr. HENRY FRANÇA MEIER (titular)



Dr. WALDIR PEDRO MARTIGNONI (titular)

Dedicatória

*Dedico este trabalho
aos meus pais, IRAÍ e DIVA,
aos meus irmãos, FRANCISCO e MARCELO,
aos meus sobrinhos, MATHEUS e JULIA
e a minha namorada, ELIS ANE.*

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a DEUS pela sabedoria e saúde na condução deste trabalho, sem as quais ele não seria possível.

Aos meus pais, aos meus irmãos e a minha namorada que quase nunca compreenderam meu trabalho, entretanto deram todo o apoio necessário a minha formação profissional.

Ao amigo e orientador prof. Reginaldo pela sua postura e sugestões valiosas na condução do trabalho.

Aos colegas, amigos e amigas da UNICAMP, pelo convívio diário e pela inúmeras experiências trocadas, destacando-se os colegas do Laboratório de Simulação e Otimização de Processos Químicos (LSOPQ).

Aos amigos e amigas não ligados à UNICAMP pelas várias vezes em que não foi possível estarmos juntos para um convívio social.

À Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) pela oportunidade da realização do meu trabalho.

À FAPESP (processo: 97/05505-9) pelo apoio financeiro e pelo reconhecimento da importância do trabalho aqui desenvolvido.

*Epígrafe**O GRANDE HOMEM*

Mantém o seu modo de pensar independentemente da opinião pública.
É tranqüilo, calmo, paciente, não grita e nem desespera.
Pensa com clareza, fala com inteligência, vive com simplicidade.
É do futuro e não do passado.
Sempre tem tempo.
Não despreza nenhum ser humano.
Causa a impressão dos vastos silêncios da natureza: o CÉU.
Não é vaidoso.
Como não anda à cata de aplausos, jamais se ofende.
Possui sempre mais do que julga merecer.
Está sempre disposto a aprender, mesmo das crianças.
Vive dentro do seu próprio isolamento espiritual,
aonde não chega nem o louvor nem a censura.
Não obstante, seu isolamento não é frio: Ama – Sofre – Pensa – Compreende.
O que você possui, dinheiro, posição social, não significam para ele.
Só lhe importa o que você é.
Despreza a opinião própria tão depressa verifica o seu erro.
Não respeita usos estabelecidos e venerados por espíritos tacanhos.
Respeita somente a verdade.
Tem mente de homem e coração de menino.
Conhece-se a si mesmo, tal qual é, e conhece a DEUS.

ANÔNIMO.

Diante de mim
tendo eu mesmo por testemunha
e sob pena de perder o respeito por minha própria palavra
eu me comprometo buscar e defender qualidade de vida
em tudo o que eu faço e em todos os lugares onde eu esteja.

E me comprometo também a estar presente
aqui e agora
a despeito do prazer ou dor que este momento me traz
fazendo a parte que me cabe do melhor modo que sei
sem me queixar do mundo
nem culpar os outros pelos meus erros e fracassos,
mas antes me aceitando imperfeito, limitado e humano.

Mesmo que tudo recomende o contrário,
eu me comprometo amar, confiar e ter esperança
sem limites nem condições.

E embora eu só possa fazer pequeno
Eu me comprometo pensar grande
me preparando com disciplina e coragem
para os ideais que ainda espero e vou alcançar
sabendo que tudo começa simples e singelo.

De corpo, cabeça e coração
eu me comprometo crescer
sempre
muito
de todos os modos possíveis
de todos os jeitos sonhados
até que a vida me considere apto para a morte.

Geraldo Eustáquio de Souza

“A GRANDEZA NÃO CONSISTE EM RECEBER HONRAS, MAS EM MERECE-LAS”

(Aristóteles)

“O QUE VOCÊ SABE NÃO VALE NADA, O ÚNICO VALOR ESTÁ NO QUE VOCÊ FAZ COM AQUILO QUE SABE”

(Provérbio Kung-Fu)

“PARA CHEGAR A VITÓRIA, ANTES É PRECISO PASSAR PELA GUERRA”

(Willy Prüss)

“NO CARÁTER, NA CONDUTA, NO ESTILO, EM TODAS AS COISAS, A SIMPLICIDADE É A SUPREMA VIRTUDE”

(Henry Wadsworth Longfellow)

“OBSERVA-TE A TI MESMO”

(Sócrates)

RESUMO

SANTOS JR., IRAÍ. *Modelagem e simulação de um reator de leito fluidizado trifásico por meio de uma abordagem variacional*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002. Brasil. Tese (Doutorado)

Nesta tese é modelado matematicamente e simulado numericamente, por meio do cálculo variacional, a fluidodinâmica do escoamento das fases dentro de um reator químico operando no modo coluna de lama. Diferentemente dos métodos matemáticos que envolvem as equações diferenciais, o método variacional utiliza uma equação integral que deve ser estacionária em relação a todas as suas variáveis, o que permite aplicar algum método de otimização. Um rigoroso modelo para o reator é estudado e os resultados obtidos da simulação são comparados com dados disponíveis na literatura. Os resultados são satisfatórios e possibilita a extensão do método a outros processos da engenharia química.

O reator apresenta um leito fluidizado trifásico com agitação dada pelo fluxo do gás. Não existe agitação mecânica. Considera-se ou não a presença de reações químicas. O fluxo do fluido é modelado por meio das equações unidimensionais da continuidade e do momento médio no tempo. Assume-se uma aproximação Euleriana em coordenadas cilíndricas. Na prática este tipo de modelo é satisfatório. Devido a sua forma matemática, faz-se necessário apresentar o modelo do reator na forma de uma equação integral.

O presente método está fundamentado em princípios físicos, permitindo modelar os processos com geometria e condições de contorno complexas, pois permite o ajuste das variáveis junto à simulação. O modelo integral está baseado no critério de mínima energia.

O modelo integral é numericamente idêntico ao diferencial. Apesar da extensa manipulação algébrica envolvida, os resultados justificam a sua aplicação. O método, ao ser estendido para outros processos químicos, deve ser devidamente aplicado, uma vez que não existe uma regra geral aplicável a todos os casos.

Palavras-chave: Cálculo das variações; reator coluna de lama; otimização; modelagem matemática; simulação numérica; fluidodinâmica.

ABSTRACT

SANTOS JR., IRAÍ. *Three-phase fluidized bed reactor modeling and simulation by variational methods*. Campinas: School of Chemical Engineering, State University of Campinas, 2002. Brasil. Dissertation (D.Sc.)

In this work it is applied the variational method for modeling and simulating the hydrodynamic flux of a slurry bubble column reactor. Instead of applying mathematical methods to solve a differential equation, this method employs a stationary integral equation, so it leads to the possibility of applying optimization methods. A rigorous model for the reactor is studied. Simulated data are compared with data available in literature. The results are satisfactory and the method can be explored in similar processes.

The reactor shows a three-phase fluidized bed agitated by gas flux. There is not mechanical agitation. Chemical reactions may be included. Fluid-dynamic is modeled by one-dimensional averaged-time continuity and momentum equations. It assumes an Eulerian approach in cylindrical coordinate. The practical results of this model were satisfactory. Due to the mathematical form, it is necessary a integral equation for the model.

The numerical method is based in physical principles. It allows to model processes with complex geometry and boundary conditions. In turn it allows to describe the variables during the simulation. The integral model is analogous to the minimum energy criterion.

Differential and integral models results are numerically identical. In spite of extensive algebraic manipulation necessary in the integral method, the results obtained for the method justify its application. The method can be extended for others processes in chemical engineering. It must be correctly applied for each case, since one general rule for application does not exist.

Keywords: Calculus of variations, slurry bubble column reactor, optimization, mathematical modeling, numerical simulation, fluid-dynamic.

SUMÁRIO

Nomenclatura	xxv
I INTRODUÇÃO	1
I.1 Reator químico de leito fluidizado	4
I.2 Cálculo das variações	7
I.3 Descrição das etapas	11
II MOTIVAÇÃO	13
II.1 Reator químico	15
II.2 Modelo unidimensional	15
II.3 Modelo bidimensional	19
II.4 Equação limite	23
II.5 Cálculo das variações	24
III REATOR COLUNA DE LAMA – Revisão da literatura	27
III.1 Problemas gerais de projeto e análise	33
III.2 Considerações sobre o modelo matemático	33
III.3 Aspectos da fluidodinâmica	35
III.4 Modelo matemático na forma diferencial	36
III.5 Análise do efeito de parede na fluidodinâmica	43
III.6 Reações químicas	48
III.7 Dados experimentais	51
IV MÉTODOS NUMÉRICOS	53
IV.1 Pontos principais do cálculo das variações	56
IV.2 Quadratura de Gauss	58
IV.3 Programação não-linear (otimização)	62
IV.4 Funções matemáticas dependentes	63
IV.5 Análise estatística de funções	65
V DESENVOLVIMENTO E MODELAGEM VARIACIONAL	67
V.1 Sem efeito de parede	70
V.2 Com efeito de parede	70
V.3 Com reação química	73
V.4 Equivalência entre o modelo diferencial e o integral	90
V.5 Equivalência entre o modelo integral e a otimização	90
V.6 Obtendo uma expressão analítica para a queda de pressão	92

V.7	Ajuste dos perfis radiais de velocidade axial	92
V.8	Otimização do perfil radial de fração volumétrica	93
V.9	Caracterização do ponto de extremo	93
V.10	Análise estatística	94
VI	RESULTADOS	97
VI.1	Comparação entre as soluções analítica e numérica	102
VI.1.1	Precisão e exatidão da quadratura de Gauss	102
VI.1.2	Precisão dos resultados para diferentes funções dependentes	104
VI.2	Comparação entre os modelos diferencial e variacional	106
VI.3	Comparação entre o modelo variacional e a otimização	108
VI.3.1	Inter-relação dos multiplicadores de Lagrange	110
VI.4	Análise do efeito de parede	112
VI.4.1	Verificação da aplicação da correlação de Prandtl	117
VI.5	Análise dos perfis de concentração	119
VI.6	Outras investigações numéricas	122
VI.6.1	Ajuste simultâneo dos perfis radiais de velocidade	122
VI.6.2	Otimização do perfil radial de fração volumétrica	123
VI.6.3	Comparação com dados experimentais	125
VI.6.4	Influência da densidade nos perfis radiais de velocidade	129
VI.6.5	Análise estatística dos dados experimentais	133
VI.6.6	Caracterização do ponto de extremo	136
VI.6.7	Instabilidade numérica da função dependente	138
VI.6.8	Sensibilidade da modelagem variacional	141
VI.6.9	Influência do diâmetro do reator	142
VI.6.10	Influência do termo de dispersão	145
VI.6.11	Derivando relações para a fluidodinâmica	148
VII	CONSIDERAÇÕES FINAIS	151
VII.1	Discussões	153
VII.2	Conclusões	159
VII.3	Sugestões para trabalhos futuros	160
	Referências bibliográficas	163
<i>Anexo A:</i>	Cálculo das variações – formalismo matemático	173
<i>Anexo B:</i>	Artigos científicos	213

NOMENCLATURA

Símbolo	Descrição	Unidade
<i>a</i>	Perfil axial de concentração	[kg / kg]
<i>A</i>	Área da secção do escoamento	[m ²]
<i>b</i>	Perfil axial de concentração	[kg / kg]
<i>C</i>	Concentração em fração mássica	[kg / kg]
<i>C_w</i>	Fator de interação entre as fases (força de arraste)	[kg / m ³ . s]
<i>d</i>	Diâmetro	[m]
<i>D</i>	Coefficiente de dispersão	[m ² / s]
<i>F</i>	Força de interação entre as fases	[kg / m ² . s ²]
<i>g</i>	Constante gravitacional (9,80665...)	[m / s ²]
<i>H</i>	Altura da secção principal do reator	[m]
<i>k</i>	Constante da taxa de reação	[dm ³ / s]
<i>l</i>	Comprimento de mistura de Prandtl	[m]
<i>L</i>	Comprimento do reator	[m]
<i>ṁ</i>	Vazão mássica	[kg / s]
<i>P</i>	Queda de pressão	[kg / m . s ²]
<i>Q</i>	Vazão volumétrica	[m ³ / s]
<i>r</i>	Posição radial	[m]
<i>r*</i>	Raio de Prandtl	[m]
<i>R</i>	Raio interno do reator	[m]
<i>T</i>	Temperatura	[Kelvin]
<i>U</i>	Velocidade superficial	[m / s]
<i>v</i>	Volume de controle do reator	[m ³]

V	Velocidade axial local	[m / s]
z	Posição axial	[m]

Letras gregas

ε	Fração volumétrica (“ <i>holdup</i> ”)	[m ³ / m ³]
ϕ	Diâmetro	[m]
λ	Multiplicador de Lagrange	
μ	Viscosidade dinâmica	[kg / m . s]
ν	Velocidade radial local	[m / s]
π	Constante transcendental (3,14159265...)	
ρ	Massa específica	[kg / m ³]
τ	Tensão	[kg / m . s ²]
ν	Viscosidade cinemática	[m ² / s]

Superescritos

e	Região de entrada
eff	Propriedade efetiva
s	Região de saída
t	Propriedade turbulenta
–	Propriedade média
+	Variável adimensional

Subscritos

eff	Propriedade efetiva
g	Fase gás

<i>i</i>	Espécie química ou índice genérico
<i>j</i>	Espécie química ou índice genérico
<i>k</i>	Fase <i>g</i> ou <i>sl</i>
<i>l</i>	Fase líquida
<i>m</i>	Propriedade média
<i>p</i>	Propriedade da partícula
<i>r</i>	Propriedade do reator
<i>s</i>	Fase sólida
<i>sl</i>	Pseudo-fase lama
<i>w</i>	Propriedade na parede do reator
<i>x</i>	Direção espacial genérica
<i>y</i>	Direção espacial genérica
<i>z</i>	Direção axial

Abreviatura

<i>EDP</i>	Equação diferencial parcial
<i>SLG</i>	Sólido-Líquido-Gás
<i>SQP</i>	Programação quadrática sucessiva (“ <i>successive quadratic programming</i> ”)

Capítulo I

INTRODUÇÃO

O objetivo desta tese é verificar em quais condições matemáticas e físicas são possíveis modelar e simular a fluidodinâmica do escoamento das fases no interior de um reator químico por meio do cálculo das variações (cálculo variacional ou princípio variacional). O reator em estudo apresenta um leito fluidizado trifásico, do tipo sólido-líquido-gás (*SLG*), e opera no modo de coluna de bolhas. O modelo fenomenológico da fluidodinâmica neste reator é baseado nas equações macroscópicas dos balanços da continuidade e momento médio no tempo e nas relações de equilíbrio. O cálculo variacional é postulado em certos princípios físicos e requer um modelo matemático (formulação variacional) descrito na forma de uma equação integral.

O escoamento das fases dentro do reator ocorre de forma ascendente e o leito constitui um sistema pseudo-bifásico, formado pelas fases gás e lama (líquido + sólido finos em suspensão). O escoamento é agitado pelo fluxo gasoso. Não existem partes mecânicas móveis dentro do reator (p.ex.: agitador mecânico). Os resultados das simulações da fluidodinâmica do leito sofrem influência das condições de contorno e da presença das reações químicas.

O interesse no desenvolvimento de um simulador computacional baseado no cálculo variacional para o reator em estudo se deve principalmente à escassez, ou mesmo à ausência, de correlações empíricas aplicáveis nas situações de interesse industrial. Isto pode ser justificado pelo comportamento caótico da fluidodinâmica, pois ocorrem variações tanto espaciais quanto temporais, e pela dificuldade de se obter dados experimentais nas condições industriais.

O cálculo das variações tem como particularidade, para este caso em estudo, evitar o uso de correlação empírica no modelo matemático. O método possibilita expandir matematicamente a correlação para um perfil de variável por meio de uma função dependente, onde as suas constantes ou funções desconhecidas são auto-ajustáveis e variam de acordo com as equações restritivas e condições operacionais utilizadas, sendo os seus valores determinados no decorrer da resolução numérica. Portanto, o cálculo variacional considera o modelo matemático de forma equivalente a um problema de otimização, onde se tem para função objetivo uma equação integral (YANG, 1994). Esta particularidade é interessante e torna o método variacional muito útil.

A solução numérica da formulação integral deve ser estacionária em relação à variável dependente, ou seja, o valor da integral é um ponto de máximo, mínimo ou inflexão. Este procedimento é análogo à programação não-linear (otimização). A diferença reside no fato do ponto estacionário na otimização ser dado em relação a cada variável e na formulação integral ser dado não somente em relação a cada variável, mas também em relação à integral ou funcional. As condições necessárias e suficientes para caracterizar o ponto de extremo (máximo, mínimo) na formulação variacional são complexas e envolvem muito esforço algébrico.

Antes da aplicação do cálculo das variações faz-se necessário demonstrar a equivalência numérica entre a formulação integral e a diferencial. Além disso, deve ser demonstrado que o cálculo das variações é, por natureza, um método de otimização.

L1 – REATOR QUÍMICO DE LEITO FLUIDIZADO

O projeto e a operação do reator de leito fluidizado tem recebido muita atenção desde 1960, fato este justificado pela sua importância e sua característica estratégica para as indústrias de manufaturados químicos e bioquímicos. Neste período é verificado um rápido avanço nos estudos e nas formulações teóricas e empíricas deste complexo processo. (DECKWER, 1992; RAMACHANDRAN e CHAUDHRI, 1992; REILLY et al., 1990; FAN, 1989; WESTERTERP et al., 1984)

Os reatores de leito fluidizado estão entre os mais importantes nas indústrias petroquímicas e processam um grande número de reações químicas, e a sua aplicação nas indústrias biotecnológicas tem aumentado consideravelmente (MITRA-MAJUNDAR et al., 1998; HAN et al., 1998; SCHUGERL, 1997; KRISHNA et al., 1997; HILLMER et al., 1994; RAMACHANDRAN e CHAUDHRI, 1992; GHARAT e JOSHI, 1992; FAN, 1989; HIKITA et al., 1981; NAKANOH e YOSHIDA, 1980).

Dentre as suas aplicações industriais destacam-se: hidrogenação de compostos orgânicos (p.ex.: etil-benzeno e antra-quinonas); hidro-tratamento (denitrogenação, demetalização, deoxigenação, dessulfurização ou craqueamento) de frações de petróleo; reação de Fischer-Tropsch (MITRA-MAJUNDAR et al., 1998; GHARAT e JOSHI, 1992; DORAISWANY e SHARMA, 1984) e liquefação de coque. De forma geral, este tipo de reator também é aplicado quando no sistema ocorrem reações altamente exotérmicas, fato

este justificado pela elevada homogeneidade do leito fluido, que é garantido pelo elevado coeficiente de transferência de massa, calor e momento (DECKWER, 1980).

O reator de leito fluidizado trifásico *SLG* constitui uma das áreas mais promissoras e com muitos trabalhos a serem desenvolvidos (HAN et al., 1998), pois neste reator existem complicadas relações entre as inúmeras variáveis físico-químicas do processo, tornando-as mais complexas quando associadas aos parâmetros geométricos do equipamento e as suas condições operacionais. Muitas importantes reações químicas podem ocorrer neste tipo de reator (FAN, 1989; DORAISWANY e SHARMA, 1984).

A inter-relação dos parâmetros e das variáveis fazem com que o esforço no desenvolvimento de um bom simulador numérico seja bastante árduo, e muitas vezes incapaz de descrever satisfatoriamente uma situação prática, principalmente na descrição das regiões críticas para a fluidodinâmica, tais como na entrada e saída de processo. Devido ao desenvolvimento de modelos matemáticos mais detalhados para a fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado trifásico, os dados obtidos das simulações computacionais têm possibilitado a melhoria das técnicas experimentais empregadas para a obtenção de dados (WESTERTERP et al., 1984).

Tipos de reatores de leito fluidizado

Os reatores de leito fixo (empacotado) e de leito móvel (confinado ou de arraste) são as duas principais categorias dos reatores de leito fluidizado *SLG* no que diz respeito ao tipo do movimento das partículas sólidas. Na primeira categoria, os sólidos não apresentam movimento em relação ao reator e na segunda os reatores são classificados de acordo com o mecanismo de agitação e da forma do movimento fluidodinâmico das fases.

Na categoria dos reatores de leito móvel, as partículas sólidas estão suspensas na fase líquida, formando uma pseudo-fase denominada lama, e podem ser catalisadores, reagentes ou produtos das reações químicas. A classificação desses reatores é dada por (FAN, 1989):

- i) Reator do tipo coluna de lama agitado pelo fluxo de gás (“*slurry bubble column reactor*”).

O escoamento das fases é agitado pela indução da fase gasosa e as partículas sólidas são arrastadas para fora do reator pelo fluxo do líquido;

- ii) Reator do tipo coluna de lama com leito fluidizado (“*fluidized bed slurry reactor*”).

O escoamento das fases é agitado pela indução do fluxo de líquido e/ou gás, sendo que as partículas sólidas não são arrastadas para fora do reator;

- iii) Reator do tipo coluna de lama agitado mecanicamente (“*mechanically agitated slurry reactor*”).

O escoamento das fases é agitado pela ação de partes mecânicas móveis e as partículas sólidas são arrastadas para fora do reator pelo fluxo do líquido.

Conforme mencionado, o reator do tipo coluna de lama agitado pelo fluxo de gás é o processo em estudo. Entretanto, falta mencionar que a fase sólida é o catalisador. Com estas especificações, este reator tem se mostrado importante em vários segmentos das indústrias. Devido à sua complexa fluidodinâmica, um modelo matemático rigoroso e uma simulação precisam fornecer uma solução adequada e satisfatória (VILJOEN et al., 1990).

A aplicação do método variacional para modelar e simular o reator em estudo é desenvolvido sobre o modelo diferencial proposto por CARBONELL e GUIRARDELLO (1996). Apesar da modelagem ser unidimensional, o resultado é satisfatório e concorda com outros resultados da literatura (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 2001, 1999). Outros autores (Di FELICE, 2000; CHEN et al., 1995; GASHE et al., 1990) também adotaram modelos unidimensionais e comprovaram que este tipo de modelo são representativos para o estudo do reator do tipo coluna.

O avanço tecnológico dos computadores, bem como a melhoria do seu desempenho, possibilita para a engenharia das reações químicas a utilização dos modelos

matemáticos mais representativos, o que permite uma exploração detalhada das inúmeras particularidades envolvidas no reator de leito fluidizado (TORVIK e SVENDSEN, 1990; REILLY et al., 1990; WESTERTERP et al., 1984).

I.2 – CÁLCULO DAS VARIAÇÕES

O cálculo das variações aborda uma equação ou um sistema de equações do modelo matemático diferencial (modelagem matemática usual) sob o ponto de vista da equação integral, sendo ambas formulações matematicamente idênticas (GAL-OR e WEIHS, 1972; FINLAYSON, 1972). Assim, o desenvolvimento da integral variacional não necessariamente precisa estar aplicado sobre todas as equações do modelo, ou seja, pode estar desenvolvida para apenas uma parte das equações do modelo e as demais equações constituem em restrições da integral variacional (FINLAYSON, 1972). Isto possibilita sumarizar as equações do modelo matemático, permitindo avaliar os efeitos dos parâmetros e proporcionando também uma forma de aproximação para o modelo diferencial.

O procedimento deste método constitui em obter um modelo integral que seja equivalente ao modelo diferencial, e que posteriormente será integrado por técnicas apropriadas de integração numérica (p.ex.: quadratura de Gauss). Assim, a técnica consiste em transformar a equação diferencial em uma equação integral através do teorema de Euler-Lagrange, e assim garantir a existência de um modelo variacional (FINLAYSON, 1972; SCHECHTER, 1967).

Conforme mencionado, a formulação variacional deve assumir a característica de um ponto estacionário em relação às suas variáveis. Somente isto não é o suficiente quando for associado a um problema de otimização. Assim, no decorrer dos estudos o ponto estacionário deve ser caracterizado como de mínimo, máximo ou inflexão.

A solução numérica obtida deve tornar a formulação variacional do processo como sendo estacionária em relação à função dependente, minimizando-a ou maximizando-a com respeito às constantes ou funções desconhecidas. Portanto, o mecanismo desta técnica está baseado na minimização ou na maximização de certos parâmetros aplicados ao sistema em análise (ise (YAU Assim, efetua-se um processo de otimização simultaneamente, garantindo a obtenção da solução ótima para o sistema e, conseqüentemente, a sua aplicação na prática (GORLA e MADDEN, 1984).

Por tratar-se de um processo de otimização, a existência da solução ótima global da formulação variacional (GAL-OR e WEIHS, 1972) é garantida pelo princípio físico em que se baseia o cálculo das variações em estudo, podendo este princípio estar estruturado na maximização de entropia ou na minimização da taxa de energia dissipada. Estes conceitos são consistentes e universalmente aceitos (YANG, 1994).

A eficiência do cálculo das variações é demonstrada utilizando-se as equações fundamentais da termodinâmica (GAL-OR e WEIHS, 1972) – tais como as equações de entropia e energia (YANG, 1994; RETI e RETI, 1982) – e as equações fundamentais da fluidodinâmica (quantidade de momento representada por Navier–Stokes) (ZHU, 1995; BECKER et al., 1994; YANG, 1994; GORLA e MADDEN, 1984; ECER e ROUT, 1983).

Como em qualquer outro método matemático, este também pode apresentar problemas de convergência e de estabilidade numérica, dependendo da complexidade do sistema em análise (GORLA e MADDEN, 1984). Para os casos modelados e analisados por GAL-OR e WEIHS (1972), a formulação integral fornece bons resultados numéricos.

A principal desvantagem do método, o que torna menos atrativo quando comparado com os métodos diferenciais, diz respeito à manipulação algébrica das equações. Entretanto, isto é compensado pelos resultados obtidos, que associado ao fato de seus fundamentos estarem elaborados sobre princípios físicos consistentes, torna-o aplicável em situações onde a forma diferencial não é capaz de quantificar satisfatoriamente o processo.

Algumas dificuldades no que diz respeito à aplicação desta técnica são encontradas em BECKER et al. (1994), principalmente na estimativa dos valores dos coeficientes de transferência de massa e de energia (JARZEBSKI e MALINOWSKI, 1987, 1986a, 1986b; GAL-OR e WEIHS, 1972), uma vez que os conceitos e procedimentos desta técnica envolvem argumentos flexíveis e abstratos (YANG, 1994). Os valores destes coeficientes são indispensáveis no estudo do reator de leito fluidizado *SLG*.

GAL-OR e WEIHS (1972) afirmam que para muitos problemas de fluxo e de transferência de massa e calor que não podem ser resolvidos analiticamente, podem ser facilmente manipulados pelo cálculo das variações, desde que tratados corretamente. Ressalta-se que a equação da difusão de Fick também é deduzida a partir da análise variacional (YANG, 1994).

Segundo FINLAYSON (1972), esta técnica pode ser aplicada muito bem para casos matemáticos específicos em fluidodinâmica, mas não pode ser generalizada; JARZEBSKI e MALINOWSKI (1987, 1986a, 1986b) observam que a sua aplicação clássica na modelagem e no estudo do movimento dos fluidos está limitada aos modelos matemáticos lineares. Entretanto, YANG (1994) afirma que pode ser estendida para casos não-lineares, e ZHU (1995) sugere investigações para sistemas com comportamento altamente não-newtoniano e complexo. Então, a questão essencial é saber se para um dado problema de interesse existe ou não a possibilidade de aplicação da técnica do cálculo das variações (FINLAYSON, 1972).

Num problema variacional em particular, a existência de um ponto de extremo não pode ser dado como factível (COURANT e HILBERT, 1953). Assim, a prova de existência da solução do problema, ou classe de problemas, deve ser investigada para cada caso em específico, conforme sugere FINLAYSON (1972). A prova da existência e da possibilidade de aplicação e exploração desta técnica na modelagem matemática do reator em estudo, associado aos aspectos intrínsecos da técnica, constitui o nosso principal objetivo.

Finalizando, o cálculo das variações constitui um método altamente especializado e encontra-se bastante difuso na literatura (FOX, 1954), e a sua aplicação em processos químicos ainda é bastante escassa.

Justificativas para o uso do método

O cálculo das variações é escolhido para os estudos de modelagem e simulação numérica deste trabalho pelos seguintes fatores:

- i) A aplicação desta técnica é uma metodologia diferente da tradicional, de resolução de sistemas de equações diferenciais. Assim, deseja-se estudar e avaliar a sua aplicação para processos da indústria química;
- ii) A técnica proposta permite a resolução de sistemas descritos por geometrias e condições de contorno complexas, o que é mais difícil com a metodologia usual, dada pela formulação diferencial;

- iii) A modelagem e a simulação de reatores trifásicos por meio de equações diferenciais dependem de correlações empíricas, escassas na literatura, e quando estas existem são aplicáveis somente para casos bastante específicos. Entretanto, no método variacional, a modelagem e simulação são realizadas por meio de equações integrais e, quando associada às características intrínsecas de otimização do método, a utilização de correlações empíricas pode ser evitada, pois estas são substituídas por um princípio físico (energia, entropia, etc.);
- iv) A técnica em si já fornece uma resolução otimizada, o que não acontece com outros métodos matemáticos. Nos métodos tradicionais de resolução de equações diferenciais (p.ex.: elementos finitos e colocação ortogonal) teremos uma solução que, posteriormente deverá ser submetida à algum método de otimização, gerando um sistema matemático bastante tedioso e complexo;
- v) A técnica em si é bastante promissora e encontra-se fundamentada em princípios da termodinâmica e da fluidodinâmica.

Esta técnica visa-se complementar as metodologias de resoluções dos modelos matemáticos diferenciais, permitindo uma abordagem e análise para as variáveis numa forma mais concisa no que diz respeito aos efeitos no escoamento das fases causados pelas regiões críticas do processo, tais como na entrada e saída. A análise destas regiões faz com que os resultados numéricos sejam mais satisfatórios, pois a análise destas regiões é muito importante para o conhecimento do comportamento da dinâmica do fluido.

As técnicas tradicionais de resoluções dos modelos matemáticos diferenciais são limitadas para várias aplicações de interesse prático, pois existem regiões no escoamento das fases nas quais não se consegue modelar satisfatoriamente (ZHU, 1995; BECKER et al., 1994; YANG, 1994; ECER e ROUTH, 1983; RETI e RETI, 1982; GAL-OR e WEIHS, 1972).

Concluindo, deseja-se utilizar um método bastante promissor, pois em outros casos, tais como nas aplicações em problemas mecânicos e térmicos, são utilizadas com bastante sucesso e tem uma direta aplicação na prática.

I.3 – ORGANIZAÇÃO DA TESE

No Capítulo I são apresentados os objetivos e as justificativas para o desenvolvimento desta tese, bem como alguns comentários sobre o reator químico em estudo e sobre o cálculo das variações.

No Capítulo II apresenta-se a motivação para a aplicação do método.

No Capítulo III, de forma breve, revisa-se a literatura para o reator estudado e o modelo matemático diferencial empregado para gerar o modelo variacional. O efeito de parede sobre a fluidodinâmica e alguns aspectos para a análise comparativa dos resultados numéricos e a ocorrência de reações químicas são também considerados.

No Capítulo IV são mostrados os elementos essenciais para a aplicação do cálculo das variações e a demonstração das condições necessárias e suficientes para a caracterização do ponto de extremo. Desta forma, procura-se de forma lógica, concisa e completa identificar e fornecer todas as ferramentas matemáticas empregadas na aplicação do cálculo das variações como método matemático para a modelagem e simulação de processos. O formalismo matemático deste método é apresentado no Anexo-A. Outros métodos matemáticos, necessários para o desenvolvimento da tese, também são revisados.

No Capítulo V é desenvolvida toda a modelagem variacional para o reator em estudo, bem como as análises do efeito de parede e da presença de reações químicas.

No Capítulo VI são apresentados os resultados numéricos do trabalho, validando-se o modelo integral (com e sem o efeito de parede) e mostrando-se a sua equivalência com o modelo diferencial e com as técnicas de programação não-linear (otimização). Adicionalmente, comparam-se estes resultados com dados experimentais obtidos da literatura. Para finalizar, analisa-se a característica do ponto de extremo do modelo integral.

No Capítulo VII são discutidos os resultados, expostas as conclusões e apresentadas algumas sugestões para trabalhos futuros.

Para finalizar, existem dois anexos à tese. No primeiro, para um melhor entendimento do cálculo das variações, é demonstrado um amplo formalismo matemático com todas as suas definições. No segundo são apresentados os artigos científicos, revisados por corpo qualificado, já publicados durante o desenvolvimento desta tese.

Capítulo II

MOTIVAÇÃO

O desenvolvimento dessa tese surgiu da necessidade de se evitar a rigidez numérica do modelo matemático proposto por CARBONELL e GUIARDELLO (1999) para o estudo dos perfis de velocidade das fases na presença de reação química dentro do reator operando no modo coluna de lama. Essa rigidez se deve à necessidade da utilização de duas técnicas matemáticas diferentes de resolução, uma para a fluidodinâmica e outra para a reação química, sendo a rigidez consequência das características intrínsecas do problema. Assim, com o cálculo das variações deseja-se utilizar apenas uma técnica.

II.1 – REATOR QUÍMICO

O reator em estudo tem geometria cilíndrica na sua maior parte e a fluidodinâmica das fases em seu interior apresenta o escoamento de forma ascendente, com operação permanente e isotérmica. Existem três regiões do escoamento com características fluidodinâmicas distintas: região de entrada (na base, onde se localizam as correntes de alimentação), região intermediária ou principal (parte cilíndrica ou tubo do reator) e região de saída (no topo, onde se localizam as correntes de retirada).

II.2 – MODELO UNIDIMENSIONAL

O modelo unidimensional descreve a região de escoamento perfeitamente desenvolvido, ou seja, nessa região não ocorre variação dos perfis de velocidade na direção axial; portanto, as derivadas parciais em r tornam-se derivadas ordinárias. Essa região é caracterizada pela ausência dos efeitos das regiões de entrada e de saída no escoamento, ou melhor, tais efeitos existem, mas podem ser em apenas uma parte do início e do final da secção cilíndrica. As equações macroscópicas da continuidade e do momento descrevem a fluidodinâmica para todas as posições no cilindro, $0 \leq z \leq H$ e $0 \leq r \leq R$, e são dadas por:

Equação da continuidade

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot v_{sl}) = 0 \quad (\text{II.2.1})$$

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot v_g) = 0 \quad (\text{II.2.1})$$

As Equações II.2.1 e II.2.2, juntamente com as condições de contorno dadas pelas Equações II.2.8, II.2.9, II.2.12 e II.2.13, resultam em:

$$v_{sl} = 0 \quad (\text{II.2.3})$$

$$v_g = 0 \quad (\text{II.2.4})$$

Equação do momento

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{\partial V_{sl}}{\partial r} \right) - \varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial P}{\partial z} - \varepsilon_{sl} \cdot \rho_{sl} \cdot g - C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V_{sl} - V_g) = 0 \quad (\text{II.2.5})$$

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \varepsilon_g \cdot \mu_g^{eff} \cdot \frac{\partial V_g}{\partial r} \right) - \varepsilon_g \cdot \frac{\partial P}{\partial z} - \varepsilon_g \cdot \rho_g \cdot g - C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V_g - V_{sl}) = 0 \quad (\text{II.2.6})$$

$$-\varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial P}{\partial r} = 0 \quad (\text{II.2.7})$$

$$-\varepsilon_g \cdot \frac{\partial P}{\partial r} = 0 \quad (\text{II.2.8})$$

As densidades e as viscosidades das fases, e a constante da força interfacial de arraste que aparecem no modelo, são conhecidas. A análise da estratégia de cálculo, ou

grau de liberdade do modelo, é semelhante ao caso onde essas são obtidas por expressões ou equações empíricas.

Balço das fases

$$\varepsilon_{sl} + \varepsilon_g = 0 \quad (\text{II.2.9})$$

Condições de contorno ($0 \leq z \leq H$)

$$v_{sl}|_{r=R} = 0 \quad (\text{II.2.10})$$

$$v_g|_{r=R} = 0 \quad (\text{II.2.11})$$

$$V_{sl}|_{r=R} = 0 \quad (\text{II.2.12})$$

$$V_g|_{r=R} = 0 \quad (\text{II.2.13})$$

$$v_{sl}|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.2.14})$$

$$v_g|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.2.15})$$

$$\left. \frac{\partial V_{sl}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.2.16})$$

$$\left. \frac{\partial V_g}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.2.17})$$

Existem ainda as condições de contorno dadas pelos balanços de massa na entrada:

$$\dot{m}_{sl} = \int_0^R (\varepsilon_{sl} \cdot \rho_{sl} \cdot V_{sl}) \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{II.2.18})$$

$$\dot{m}_g = \int_0^R (\varepsilon_g \cdot \rho_g \cdot V_g) \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{II.2.19})$$

As Equações II.2.1 e II.2.2 podem ser substituídas pelas Equações II.2.18 e II.2.19, mas a análise do grau de liberdade não se altera.

O número de variáveis dependentes desconhecidas nesse modelo é sete (queda de pressão, frações volumétricas, velocidades radiais e velocidade axiais das fases), de tal forma que as Equações II.2.3 até II.2.9, juntamente com as condições de contorno, deveriam ser suficientes para a determinação dos perfis dessas variáveis em todos os pontos do escoamento dentro do reator. Porém, isso não ocorre, pois as Equações II.2.7 e II.2.8 são linearmente dependentes, ou seja, tem-se um grau de liberdade a menos no sistema de equações. Faz-se necessário utilizar uma equação adicional. No caso, emprega-se uma correlação (usualmente empírica) para a fração volumétrica gasosa:

$$\varepsilon_g = \varepsilon_g(r) \quad (\text{II.2.20})$$

Dessa forma, têm-se as equações necessárias para a resolução do problema e, portanto, determina-se em $0 \leq z \leq H$ e $0 \leq r \leq R$ os valores para sete variáveis dependentes desconhecidas do modelo.

II.3 – MODELO BIDIMENSIONAL

No modelo bidimensional as três regiões da fluidodinâmica dentro do reator são descritas, porém considera-se uma geometria cilíndrica para todas as regiões. Considera-se a alimentação das fases realizada na base do cilindro do reator e os produtos retirados pelo topo. O efeito do distribuidor na alimentação é considerado pelos perfis de frações volumétricas e de velocidade de entrada para todas as fases. Neste modelo, as equações dos balanços que representam a fluidodinâmica para $0 \leq z \leq L$ e $0 \leq r \leq R$ são dadas por:

Equação da continuidade

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot v_{sl}) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot V_{sl}) = 0 \quad (\text{II.3.1})$$

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot v_g) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot V_g) = 0 \quad (\text{II.3.2})$$

Equação do momento

$$\begin{aligned} \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot v_{sl} \cdot \frac{\partial v_{sl}}{\partial r} + \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot V_{sl} \cdot \frac{\partial v_{sl}}{\partial z} = -\varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial P}{\partial r} - C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (v_{sl} - v_g) \\ + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{\partial v_{sl}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \left(\frac{\partial V_{sl}}{\partial r} + \frac{\partial v_{sl}}{\partial z} \right) \right] - \frac{2}{r^2} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot v_{sl} \end{aligned} \quad (\text{II.3.3})$$

$$\begin{aligned} \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot v_{sl} \cdot \frac{\partial V_{sl}}{\partial r} + \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot V_{sl} \cdot \frac{\partial V_{sl}}{\partial z} = -\varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial P}{\partial z} - \varepsilon_{sl} \cdot \rho_{sl} \cdot g - C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V_{sl} - V_g) \\ + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[r \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \left(\frac{\partial V_{sl}}{\partial r} + \frac{\partial v_{sl}}{\partial z} \right) \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{\partial V_{sl}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.3.4})$$

$$\begin{aligned} \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot v_g \cdot \frac{\partial v_g}{\partial r} + \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot V_g \cdot \frac{\partial v_g}{\partial z} = -\varepsilon_g \cdot \frac{\partial P}{\partial r} - C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (v_g - v_{sl}) \\ + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \varepsilon_g \cdot \mu_g^{eff} \cdot \frac{\partial v_g}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon_g \cdot \mu_g^{eff} \cdot \left(\frac{\partial V_g}{\partial r} + \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \right] - \frac{2}{r^2} \cdot \varepsilon_g \cdot \mu_g^{eff} \cdot v_g \end{aligned} \quad (II.3.5)$$

$$\begin{aligned} \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot v_g \cdot \frac{\partial V_g}{\partial r} + \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot V_g \cdot \frac{\partial V_g}{\partial z} = -\varepsilon_g \cdot \frac{\partial P}{\partial z} - \varepsilon_g \cdot \rho_g \cdot g - C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V_g - V_{sl}) \\ + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[r \cdot \varepsilon_g \cdot \mu_g^{eff} \cdot \left(\frac{\partial V_g}{\partial r} + \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g \cdot \mu_g^{eff} \cdot \frac{\partial V_g}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (II.3.6)$$

As densidades, as viscosidades e a constante da força interfacial de arraste entre as fases que aparecem no modelo são também conhecidas. A análise da estratégia de cálculo também é semelhante ao caso onde estas são obtidas por expressões ou equações empíricas.

Pode-se escrever para o modelo bidimensional ($0 \leq z \leq L$ e $0 \leq r \leq R$):

Balço das fases

$$\varepsilon_{sl} + \varepsilon_g = 0 \quad (II.3.7)$$

Condições de contorno ($0 \leq z \leq L$)

$$v_{sl} \Big|_{r=R} = 0 \quad (II.3.8)$$

$$v_g \Big|_{r=R} = 0 \quad (II.3.9)$$

$$V_{sl}|_{r=R} = 0 \quad (\text{II.3.10})$$

$$V_g|_{r=R} = 0 \quad (\text{II.3.11})$$

$$v_{sl}|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.3.12})$$

$$v_g|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.3.13})$$

$$\left. \frac{\partial V_{sl}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.3.14})$$

$$\left. \frac{\partial V_g}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.3.15})$$

Existem ainda as condições de contorno dadas pelos balanços de massa na entrada:

$$\dot{m}_{sl} = \int_0^R (\varepsilon_{sl} \cdot \rho_{sl} \cdot V_{sl}) \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{II.3.16})$$

$$\dot{m}_g = \int_0^R (\varepsilon_g \cdot \rho_g \cdot V_g) \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{II.3.17})$$

As Equações II.3.1 e II.3.2 podem ser substituídas pelas Equações II.3.16 e II.3.17, mas a análise do grau de liberdade não se altera.

Observe-se que as Equações II.3.8 até II.3.15, II.3.16 e II.3.17 são idênticas às Equações II.2.10 até II.2.17, II.2.18 e II.2.19, exceto no ponto $z = H$ e $z = L$. Podem ser

necessárias ainda mais algumas condições de contorno para a derivada das velocidades em relação à coordenada axial na saída do reator e para os perfis de velocidade e fração volumétrica das fases na entrada.

O número de variáveis dependentes desconhecidas neste modelo é sete (queda de pressão, frações volumétricas das fases, velocidades axiais e radiais das fases), de tal forma que as Equações II.3.1 até II.3.7, juntamente com as Equações II.3.8 até II.3.15, são suficientes para a determinação dos perfis dessas variáveis em todos os pontos da fluidodinâmica dentro do reator. Nesse caso, *não* se faz necessária nenhuma outra equação adicional ou correlação empírica para a variável fração volumétrica de gás.

Outros modelos bidimensionais mais completos podem ser usados, inclusive com termos de dispersão para a fração volumétrica das fases nas equações de continuidade, Equações II.3.1 e II.3.2 (MATOS, 2001; HILLMER et al., 1994). Entretanto, isso não altera o fato de que no modelo bidimensional é possível calcular o valor para a fração volumétrica das fases sem fazer o uso de correlações.

Observação

Conforme já mencionado no capítulo anterior, no caso de modelo pseudo-bifásico, a pseudo-fase líquida é a fase lama. No interior do reator, as propriedades das variáveis (velocidade, fração volumétrica, densidade, viscosidade) da pseudo-fase líquida são dadas pelas propriedades da lama. As propriedades da lama são obtidas por correlações empíricas dadas a partir das propriedades individuais das fases líquida e sólida. No caso da alimentação, faz-se necessário distinguir duas situações diferentes: leito de arraste e leito confinado. Na primeira situação, as propriedades internas são mantidas constantes desde a alimentação até a saída, o que não é verdade na segunda situação. Assim, no leito confinado algumas condições de contorno mudam.

II.4 – EQUAÇÃO LIMITE

Uma pergunta surge naturalmente quando se comparam os modelos bidimensional e unidimensional: por que no modelo unidimensional se faz necessário uma correlação para a variável fração volumétrica de gás e no modelo bidimensional isto não é necessário? Essa pergunta caracteriza a motivação para o desenvolvimento do presente trabalho.

Analisando os perfis de velocidades resultantes no modelo bidimensional, verifica-se que a fluidodinâmica realmente nunca atinge o regime perfeitamente desenvolvido (MATOS, 2001). Próximo à região central do reator, na direção axial, verifica-se que os perfis apresentam o seguinte comportamento:

$$v_{sl}(r, z) = v_{sl}(r) + d_{sl}(r) \cdot z \quad (\text{II.4.1})$$

$$v_g(r, z) = v_g(r) + d_g(r) \cdot z \quad (\text{II.4.2})$$

$$V_{sl}(r, z) = V_{sl}(r) + e_{sl}(r) \cdot z \quad (\text{II.4.3})$$

$$V_g(r, z) = V_g(r) + e_g(r) \cdot z \quad (\text{II.4.4})$$

$$\varepsilon_{sl}(r, z) = \varepsilon_{sl}(r) + \delta_{sl}(r) \cdot z \quad (\text{II.4.5})$$

$$\varepsilon_g(r, z) = \varepsilon_g(r) + \delta_g(r) \cdot z \quad (\text{II.4.6})$$

$$P(r, z) = -K \cdot z + P(r) + q(r) \cdot z \quad (\text{II.4.7})$$

Para um reator suficientemente comprido, pode-se fazer a aproximação de escoamento perfeitamente desenvolvido desprezando-se os termos com z na região principal do reator, pois as funções d , e , δ e q são pequenas. Porém, para se deduzir uma equação que permita calcular a fração volumétrica de gás esses termos não podem ser desprezados. A equação que permite calcular essa fração e eliminar o uso de uma correlação empírica é chamada de equação limite nessa tese.

A dedução da equação limite é complicada. Uma forma de se obter a fração volumétrica é considerar que as Equações II.4.1 até II.4.7 valem de forma aproximada para toda a fluidodinâmica no interior do reator usar então o método dos Momentos ou de Galerkin e integrar na coordenada axial, obtendo-se um sistema com quatorze equações algébrico-diferencial na coordenada radial. Esse procedimento é válido, pois as simulações numéricas mostram que a variação em z é realmente muito menor que em r (MATOS, 2001; HILLMER et al., 1994). Porém, a resolução desse sistema não é simples, de tal forma que esse procedimento não é adotado nesse trabalho. A necessidade de um método mais simples para se encontrar a equação limite conduziu-nos ao estudo do cálculo das variações.

II.5 – CÁLCULO DAS VARIAÇÕES

Os métodos variacionais têm a vantagem de serem formulados em princípios físicos (YANG, 1994), de tal forma que a sua generalização é mais imediata. Porém, somente isto não é uma prova matemática para a validação do método. Assim, faz-se inicialmente uma demonstração matemática rigorosa de que as equações do modelo unidimensional são equivalentes a um princípio variacional. Em seguida, utiliza-se esse princípio para fazer a hipótese de que o mesmo possa ser estendido para a dedução da equação limite da fração volumétrica.

O primeiro passo consiste em aplicar um procedimento semelhante ao utilizado por SCHECHTER (1967) para a dedução de um princípio variacional equivalente às Equações II.2.5 e II.2.6 com relação às variáveis de velocidade V_{sl} e V_g . Para esse caso, a formulação variacional equivalente é dada por:

$$I = \int_0^R \left\{ \frac{dP}{dz} (\varepsilon_g V_g + \varepsilon_{sl} V_{sl}) + g (\rho_g \varepsilon_g V_g + \rho_{sl} \varepsilon_{sl} V_{sl}) + \frac{1}{2} C_w \varepsilon_g \varepsilon_{sl} (V_{sl} - V_g)^2 + \frac{1}{2} \varepsilon_g \mu_g^{eff} \left(\frac{dV_g}{dr} \right)^2 + \frac{1}{2} \varepsilon_{sl} \mu_{sl}^{eff} \left(\frac{dV_{sl}}{dr} \right)^2 \right\} 2\pi r dr \quad (\text{II.5.1})$$

onde I deve ter a primeira variação nula (mínimo, máximo, ponto de sela) com relação às variáveis de velocidade V_{sl} e V_g . Para completar o cálculo, após a aplicação da primeira variação, adiciona-se as Equações II.2.9, II.2.18 e II.2.20 para calcular as frações volumétricas das fases e o gradiente de pressão. Um perfil das velocidades axiais pode então ser calculado pelo método de Ritz (SCHECHTER, 1967), com maior grau de precisão quanto maior for o número de termos na série. Entretanto, com um pequeno número de termos já se consegue uma boa precisão, o que constitui a principal vantagem do método de Ritz.

O fato que a primeira variação é nula deve-se apenas a uma parte do procedimento matemático para a aplicação do cálculo das variações. Pode-se demonstrar que nesse caso em particular o valor de I deve ser um mínimo. O valor de I corresponde à energia total dentro do reator por unidade de comprimento. Isto pode ser demonstrado integrando a equação de energia em todo o volume, como o integrando não varia com z , então I multiplicado pela variação de entalpia ΔH fornece o valor da energia total. Assim, podem-se interpretar os perfis de velocidade como uma tendência natural do sistema a se ajustar a um estado de mínima energia.

A extensão do princípio de mínima energia para o cálculo das frações volumétricas pode então ser feita como a seguinte hipótese: as frações volumétricas das fases dentro do reator se distribuem de tal forma que o sistema atinja um mínimo de energia. Assim, a equação adicional para o cálculo das frações volumétricas é obtida fazendo-se I um mínimo também em relação aos perfis das frações volumétricas.

A aplicação do método de Ritz para o cálculo da variável fração volumétrica é feita utilizando-se uma função dependente (equação tentativa) para o perfil dessa variável, da mesma forma que no caso dos perfis de velocidade.

Capítulo III

REATOR COLUNA de LAMA

Revisão da literatura

Os estudos para a utilização dos reatores de leito fluidizado trifásico *SLG* nas indústrias químicas e bioquímicas recebem bastante atenção e muitos experimentos são realizados, mas ainda requerem mais estudos, principalmente nos casos onde o escoamento apresenta o comportamento de fluido não-newtoniano (CHEN e LEV; 2001; MACCHI et al., 2001; Di FELICE, 2000; SHAH et al., 1982).

O reator de leito fluidizado trifásico *SLG* operando no modo coluna de lama (líquido+sólido em suspensão) e com agitação dado pelo fluxo do gás tem uma estrutura física e operacional relativamente simples. Não há partes mecânicas móveis neste reator e o fluido tem alta homogeneidade térmica, garantida pelos elevados coeficientes de transferência (massa, calor e movimento). Isto confere ao reator um alto desempenho. (DECKWER, 1992; REILLY et al., 1990; UEYAMA et al., 1980; KAST, 1962).

Relativamente, o reator do tipo coluna de lama tem um baixo custo operacional. O tempo de residência da fase líquida ou lama pode ser manipulado com facilidade (SHAH et al., 1982). Isto lhe confere competitividade frente aos tradicionais reatores tubulares de leito fixo (PARKINSON, 1997).

Apesar da ausência de agitação mecânica, a distribuição das partículas sólidas e o grau de mistura entre as fases são garantidos pelo movimento do fluxo do gás, na forma de bolhas, através da pseudo-fase lama (DECKWER, 1992). A ausência do agitador torna a modelagem para a fluidodinâmica menos complexa. O modelo matemático é fortemente influenciado pela presença do agitador, pois este afeta os vários parâmetros do processo, tal como os coeficientes de transferência e a distribuição das fases no interior do reator. Isto se deve ao fato de que os parâmetros são extremamente sensíveis em relação à variável fração volumétrica, tornando difícil prever correlações. Entretanto, mesmo com a ausência do agitador mecânico, a fluidodinâmica é bastante complexa (MITRA-MAJUNDAR et al., 1998; RANADE, 1997; HILLMER, 1994; GASCHE et al., 1990). Outro fator responsável pelo grau de mistura é o refluxo interno ("*back-mixing*"), que é uma característica padrão da fluidodinâmica neste reator (PAVLOV, 1965; YOSHITOME, 1967; YAMAGOSHI, 1969).

Vários autores (BAUER e EIGENBERGER, 2001; BORCHERS et al., 1999; PFLEGER et al., 1999; PARKINSON, 1997) investigam as características fluidodinâmicas do reator do tipo coluna de lama, pois o comportamento das fases é caótico, ou seja, não-uniforme (BECKER et al., 1999). Esta desordem é justificada pela alta turbulência do movimento das bolhas e das interações entre as fases, resultando na formação de uma complexa estrutura de fluxo variável no tempo e espaço.

Os coeficientes de transferência são favorecidos pela intensidade da turbulência no fluido. O nível da turbulência é provocado pelo fluxo do gás, ou seja, quanto maior for o fluxo do gás em relação ao fluxo da lama maior é a área interfacial entre as várias fases. Os fenômenos de transferências são diretamente proporcionais à área interfacial. Entretanto, um aumento muito acentuado no fluxo do gás possibilita a coalescência das bolhas e, conseqüentemente, a diminuição do tempo de residência do gás dentro do reator. Este fato constitui a principal desvantagem do reator do tipo coluna de lama quando operado com o fluxo ascendente e concorrente em todas as fases. No caso da presença das reações exotérmicas, a coalescência torna a operação do reator bastante perigosa. A coalescência pode ser minimizada se adotado o sentido de escoamento do fluxo do gás do topo para a base do reator e mantido o fluxo ascendente da lama.

Outro fator responsável pelos elevados coeficientes de transferência é o refluxo interno da pseudo-fase lama e das pequenas bolhas de gás próximo à parede interna do reator, isto aumenta a agitação interna. O refluxo interno é conhecido também como recirculação interna e é explicado pela teoria de vórtices e pelo momento angular de um elemento de fluido (LAMB, 1962).

A operação do reator de leito fluidizado *SLG*, operando no modo coluna de lama, constitui em colocar uma corrente de fluxo formado por um ou mais gases juntamente com uma corrente de fluxo formado por um ou mais líquidos com partículas sólidas em suspensão. Ambos os fluxos são ascendentes. Quando as correntes atingem o interior do reator o gás se dissolve no líquido e em presença do catalisador a reação se processa.

As partículas sólidas no reator do tipo coluna de lama atuam de três formas distintas: i) como catalisador (SHERWIN e FRANK, 1976; van DRIESEN e STEWART, 1964); ii) como reagente (SITTIG et al., 1978; ROSENBERG, 1978; SHERWIN e FRANK, 1976; VOLPOLICELLI e MASSIMILLA, 1970); ou iii) como produto (RIEMENSHNEIDER, 1978; SMITH e GREENSHIELDS, 1974; ALBRIGHT, 1967). O comportamento e a distribuição das partículas sólidas no interior do reator é mostrado em FAN (1989).

A forma estrutural mais simples do reator de leito fluidizado *SLG* do tipo coluna de lama é dada por um cilindro (tubulação) vertical onde os fluxos do gás e lama são alimentados na base (fundo) e os produtos de reação, as partículas sólidas e os gases e líquidos não reagidos são retirados no topo, conforme mostra a Figura III.1.

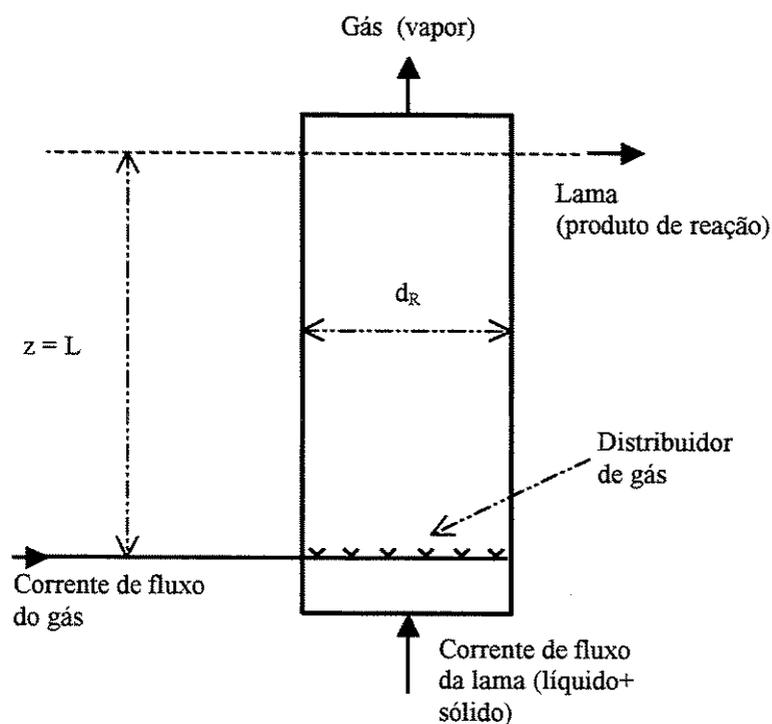


Figura III.1: Esquema simplificado do reator do tipo coluna de lama.

A forma de operação mais comum para o reator de leito fluidizado trifásico *SLG* encontrado na prática considera os fluxos concorrente e ascendente, conforme a Figura III.1. O fluxo interno padrão da pseudo-fase lama é mostrado na Figura III.2.

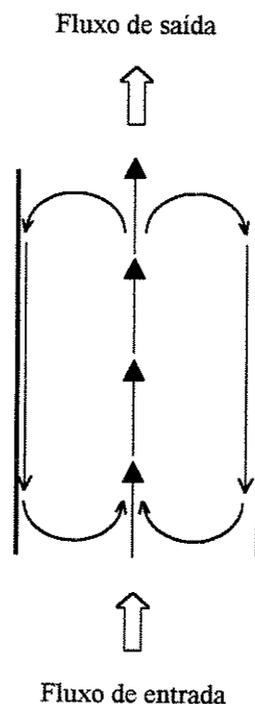


Figura III.2: Fluxo interno padrão em reator do tipo coluna de lama sem agitador.

Os fluxos do gás e lama na alimentação, somado à recirculação interna, são maiores na porção do escoamento localizado próximo ao eixo axial do reator. Nesta região em particular também gravitam as maiores bolhas, gerando os perfis das variáveis frações volumétricas e, conseqüentemente, os perfis de velocidades axiais. O fluxo da fase lama próximo à parede do reator é descendente e transporta as pequenas bolhas de gás por uma certa distância (DECKWER, 1992).

Conforme mencionado na introdução, o reator de leito fluidizado *SLG* operando no modo coluna de lama é utilizado em inúmeros processos químicos. Inclui-se na lista das suas aplicações os processos de oxidação, alquilação, cloração, limpeza de gases químicos, intermediários orgânicos, tratamento de efluentes, produção de proteína de células simples (“*single-cell protein*” - *SCP*), cultura de célula animal, fermentação de antibióticos e síntese de Fisher-Tropsch. FAN (1989) apresenta uma lista com outras inúmeras aplicações e KRISHNA et al. (1997) ressaltam que este reator é cada vez mais utilizado. SCHUGERL (1997) mostra uma revisão bibliográfica da utilização deste reator em biotecnologia e algumas das suas vantagens. Verifica-se que inúmeras reações químicas são estudadas em reator do tipo coluna, conforme é mostrado pelo número de artigos científicos publicados (REILLY et al., 1990). Os estudos do reator em questão são relativamente recentes. Segundo DELNOIJ et al. (1997) o conhecimento sobre o comportamento fluidodinâmico das fases no interior deste reator necessita de mais investigações.

III.1 – PROBLEMAS GERAIS DE PROJETO E ANÁLISE

Os problemas de projeto e análise dos reatores de leito fluidizado trifásico *SLG* são resultados de uma interação complexa entre os fenômenos físico-químicos, os quais podem ser dificultados quando existem as reações químicas. A relação existente entre os fatores fluidodinâmicos, as dimensões geométricas, o distribuidor de gás, as condições de operação e as propriedades físicas impedem as análises de dados e que a sua evolução para a escala industrial (“*scale-up*”) seja facilitada (HILLMER, 1994; RANADE, 1997).

III.2 – CONSIDERAÇÕES SOBRE O MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático é o ponto de partida para qualquer análise dos dados de reação e do projeto de processo. Um modelo deve prever uma descrição prática do que acontece e deve estar fundamentado sobre experiências, leis físicas e químicas, além dos resultados experimentais. As leis de conservação formam a base de todos os modelos usados no campo de tecnologia de reatores, excetuando os reatores nucleares.

As experiências mostram que uma aproximação usual para o modelo matemático da fluidodinâmica dentro do reator em estudo pode sugerir a hipótese de que a fase lama está completamente misturada, ou seja, homogênea, e que um fluxo empistonado está presente na fase gás. Entretanto, como uma regra geral, nenhuma mistura completa ou condições de fluxo ideal podem ser garantidas. Então, os modelos descritos por parâmetros distribuídos podem ser usados para a fluidodinâmica (DECKWER, 1992).

Um modelo matemático satisfatório pode ser utilizado para projetar um reator em escala industrial (“*scale-up*”) desde que associe os fatores geométricos, os reacionais e os fluidodinâmicos, bem como as suas inter-relações. Devido à complexidade do reator, a associação destes fatores é extremamente difícil. As características mais importantes que devem ser incorporadas na modelagem fenomenológica do reator de leito fluidizado *SLG* estão sumarizadas na Figura III.2.1.

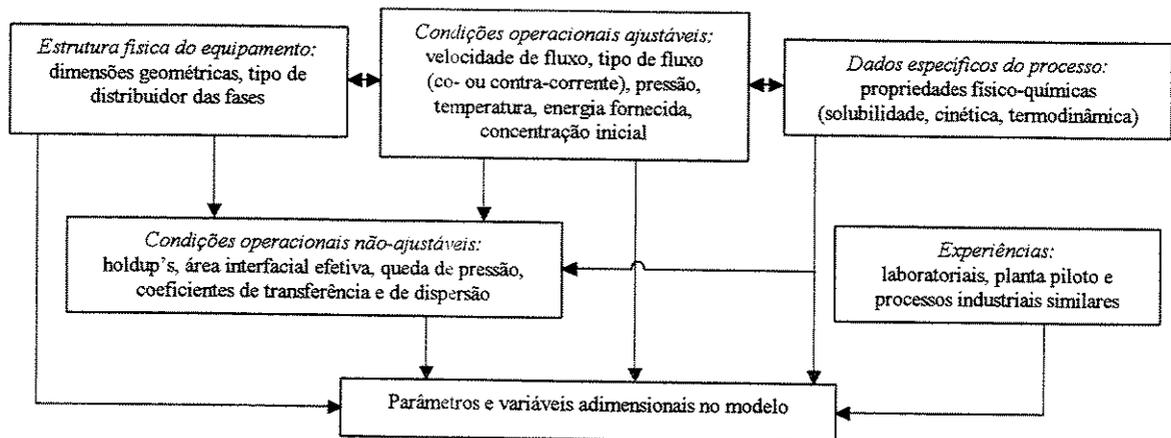


Figura III.2.1: Aspecto característico de um modelo matemático satisfatório.

Uma abordagem importante para a modelagem do reator em estudo é realizada por TORVIK e SVENDSEN (1990). Na prática, quando adotado um modelo com as equações diferenciais, na sua forma mais simples, as correlações empíricas para os parâmetros fluidodinâmicos ainda são essenciais para os projetos dos reatores e para a interpretação dos dados das reações. Na formulação integral, ou seja, com aplicação do método do princípio variacional, a dependência das correlações empíricas podem ser evitadas.

III.3 – ASPECTOS DA FLUIDODINÂMICA

Nas últimas décadas têm sido publicados os detalhes e as características dos modelos e relações matemáticas que descrevem o processo do reator em estudo. Na fluidodinâmica, as bolhas de gás ascendem arrastando a fase lama. Então, através da continuidade, o fluxo da lama produz uma recirculação interna, na qual no centro do reator o fluxo da lama se move para cima e próximo a parede se move para baixo. O modelo de recirculação interna de UHEYAMA e MIYAUCHI (1979), após o balanço de forças em um elemento de volume circular e com simetria axial, fornece o perfil de velocidade axial da fase líquida indicado na Figura III.3.1, confirmando a existência de célula de recirculação.

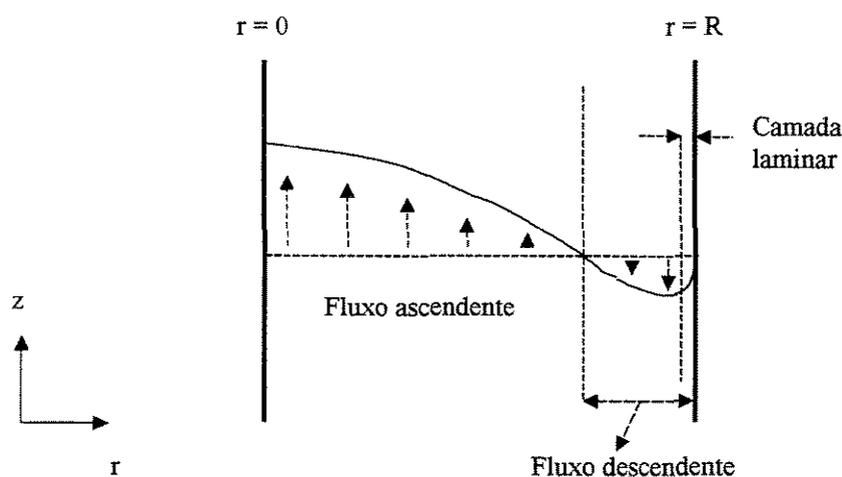


Figura III.3.1: Perfil padrão de velocidade axial local do fluxo do líquido.

A recirculação interna e o escoamento padrão do fluxo da lama é uma função do fluxo do gás, do diâmetro do reator, da geometria da secção transversal, da fração volumétrica do gás, do diâmetro e da velocidade de ascensão das bolhas e da viscosidade da lama. Na formulação das leis de conservação de um modelo matemático para qualquer processo é essencial o conhecimento do fluxo padrão das fases. Vários experimentos confirmam o escoamento padrão da Figura III.2 e a recirculação interna da Figura III.3.1 (DUDUKOVIC e DEVANATHAN, 1993). Os experimentos também são confirmados por HILLMER et al. (1994) e por TORVIK e SVENDSEN (1990) para os processos sem reação química. Do contrário, com reações existem alterações (HILLMER et al., 1994).

O uso da condição de contorno dada pelo efeito de parede se faz necessário para melhor descrever a fluidodinâmica e as frações volumétricas das fases na região próxima à parede interna do reator (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 2001). Pelo fato de ser nesta região onde se encontra uma elevada área interfacial, a sua descrição de forma satisfatória é indispensável para um bom simulador computacional. Cita-se que as reações químicas se processam mais intensamente na região próxima à parede (DECKWER, 1992).

III.4 – MODELO MATEMÁTICO NA FORMA DIFERENCIAL

O reator em estudo é modelado matematicamente por meio das equações na forma unidimensional da quantidade de movimento e do balanço de massa para a fase gás e para a pseudo-fase lama. A explicação para o tipo de modelo utilizado se deve ao fato de não ter sido encontrado na literatura aberta a aplicação do método variacional no reator. Assim, faz-se necessário adotar um modelo bastante simples e eficiente para avaliar o uso do método variacional. Entretanto, o modelo usado é satisfatório, pois descreve bem o escoamento padrão descrito por LAMB (1962), como mostrado por CHEN et al. (1995) e GASCHE et al. (1990). A ocorrência das reações químicas é ou não consideradas.

O sistema referencial usado para o modelo matemático obedece ao sistema de coordenadas Euleriano. O escoamento fluido das várias fases é ascendente. As partículas sólidas (catalisador) estão uniformemente distribuídas na lama. Basicamente, o modelo é constituído pela lei de conservação da massa e quantidade de momento médio no tempo, onde a dispersão da pseudo-fase lama é descrita por um modelo turbulento de ordem zero.

As equações da continuidade e do movimento formam a base do modelo matemático para o reator de leito fluidizado trifásico *SLG* operando no modo coluna de lama (GASCHE et al., 1990). As equações constitutivas empregadas para o fechamento do modelo são: i) a força de interação entre a fase gás e a pseudo-fase lama; ii) as frações volumétricas; e iii) as propriedades médias para a pseudo-fase lama e para o leito do reator.

Hipóteses adotadas no modelo

O modelo diferencial utilizado nas investigações para a elaboração do modelo variacional é originalmente proposto na dissertação de CARBONELL (1996) e publicado por CARBONELL e GUIRARDELLO (1997) e as hipóteses e considerações são:

- i) Todas as correntes de fluxo são concorrentes e ascendentes;
- ii) As equações são descritas no espaço Euleriano;
- iii) A fase gás escoia em forma de bolhas e com uma distribuição radial;
- iv) A fase líquida e sólida forma uma única fase pseudo-homogênea (lama);
- v) As partículas do sólido estão uniformemente distribuídas no líquido;
- vi) As equações fenomenológicas utilizadas na descrição do modelo são as equações da continuidade e momento médio no tempo, onde é utilizado um modelo turbulento de ordem zero para descrever a dispersão do líquido;
- vii) São utilizadas correlações para os “*holdups*” das fases presentes e para a força de interação entre o gás e a lama;
- viii) São usadas as propriedades médias para a lama e gás no leito;
- ix) Existe flutuação entre as velocidades dos fluxos da lama e gás (“*buoyancy*”);
- x) Fluido é isotrópico, newtoniano, viscoso e incompressível;

Modelagem da pseudo-fase lama – lei da conservação do momento

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left(\varepsilon_{sl} \cdot r \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{dV_{sl}}{dr} \right) - \varepsilon_{sl} \cdot \frac{dP}{dz} - \rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot g - \rho_{sl} \cdot \varepsilon_g \cdot g + F = 0 \quad (\text{III.4.1})$$

Modelagem da fase gás – lei da conservação do momento

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left(\varepsilon_g \cdot r \cdot \mu_g^{eff} \cdot \frac{dV_g}{dr} \right) - \varepsilon_g \cdot \frac{dP}{dz} - \rho_g \cdot \varepsilon_g \cdot g + \rho_{sl} \cdot \varepsilon_g \cdot g - F = 0 \quad (\text{III.4.2})$$

Modelagem – lei da conservação de massa

Para a fase gás e a pseudo-fase lama assume-se que:

$$U_k \cdot \rho_k \cdot A = \rho_k \cdot \int_0^R \varepsilon_k \cdot V_k \cdot dA \quad (\text{III.4.3})$$

onde U é a velocidade superficial da fase k na entrada do reator e é dado pela razão entre a vazão volumétrica da fase k e a área da secção transversal A do reator.

Modelagem – força de interação entre as fases

$$F = \varepsilon_g \cdot (\varepsilon_l + \varepsilon_s) \cdot (V_g - V_{sl}) \cdot C_w \quad (\text{III.4.4})$$

onde C_w é uma constante igual a $5,0 \times 10^{-04}$ (TORVIK e SVENDSEN, 1990) ou, como é proposto por GRIENBERGER e HOFMANN (1992), uma função do raio do reator.

Modelagem – equação constitutiva (lei de conservação das fases)

A variável fração volumétrica é extremamente sensível a propriedades físico-químicas do fluido, a distribuidor de gás, a fatores geométricos e a condições operacionais. A equação desta variável deve ser especificada para cada caso e, indiferentemente, é sempre limitada na sua aplicação, ou seja:

$$\varepsilon_g + \varepsilon_{sl} = 1 \quad (\text{III.4.5})$$

sendo que, normalmente, o perfil da variável fração volumétrica de gás é assumido na forma de equação parabólica dado por:

$$\varepsilon_g = \varepsilon_g|_{r=0} \times \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (\text{III.4.6})$$

Segundo CHEN et al. (1995) a variável fração volumétrica do gás e a velocidade de ascensão das bolhas do gás são parâmetros de fundamental importância para o cálculo dos coeficientes de transferência e outras variáveis num reator de leito fluidizado *SLG*. Estes autores propõem correlações para o cálculo do parâmetro $\varepsilon_g|_{r=0}$ da Equação III.4.6. O uso desta equação não é uma imposição forte para a fluidodinâmica dentro de uma tubulação somente quando o regime de escoamento é similar ao laminar.

Modelagem – propriedades médias

A fase líquida e sólida são fases distintas antes de serem alimentadas no reator. Após a alimentação, estas fases formam a pseudo-fase lama, e as propriedades médias da lama e do leito fluido são obtidas a partir das propriedades individuais do líquido e do sólido e são dados por (HILLMER et al., 1994):

$$\rho_{sl} = \frac{\varepsilon_{lm} \cdot \rho_l + \varepsilon_{sm} \cdot \rho_s}{\varepsilon_{lm} + \varepsilon_{sm}} \quad (\text{III.4.7})$$

$$\mu_{sl} = \mu_l \cdot \left(1 + \varepsilon_{sm} \cdot \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_s} \right) \cdot (1 - \varepsilon_{sm})^{-2.59} \quad (\text{III.4.8})$$

$$\rho_m = \varepsilon_{lm} \cdot \rho_l + \varepsilon_{sm} \cdot \rho_s + \varepsilon_{gm} \cdot \rho_g \quad (\text{III.4.9})$$

Estas propiedades permanecem constantes dentro do reator.

Modelagem – condições de contorno

A primeira condição de contorno (c.c.1) para cada fase é dado por:

$$r=0 \quad \rightarrow \quad \frac{dV}{dr} = 0 \quad (\text{III.4.10})$$

e a outra condição (c.c.2) para cada fase é dado por:

$$r=R \quad \rightarrow \quad V=0 \quad (\text{III.4.11})$$

Modelagem – outras considerações

As viscosidades efetivas que aparecem nas Equações III.4.1 e III.4.2 são dados pelo somatório das viscosidade laminar e turbulenta. Uma equação para a viscosidade turbulenta do líquido é dada por MENZEL (1990). A aplicação desta equação em leito fluidizado é feita por CHEN et al. (1995). GRIENBERGER e HOFMANN (1992) propõem uma correlação entre a viscosidade turbulenta do líquido e do gás.

Modelagem – dispersão de fluxo

O termo de dispersão do fluxo, primeira parcela das Equações III.4.1 e III.4.2, é um processo de transferência estocástico através do qual os coeficientes das quantidades intensivas (p.ex.: temperatura e concentração) estão sujeitos à descontinuidade. Este fenômeno tem como o principal efeito reduzir a taxa de conversão, uma vez que a taxa da reação química diminui em consequência da redução da concentração das espécies. Para compensar esta desvantagem é necessário, com frequência, aumentar o volume reacional para obter a conversão desejada.

A dispersão da fase líquida no reator em estudo é causada principalmente por ascensão de bolhas de gás no líquido. A diferença nas velocidades das fases é responsável pelo fluxo radial no reator e, como as bolhas ascendem, os elementos de fluido são forçados para o lado. Segundo KAST (1962) isto é responsável pelo elevado nível dos coeficientes de transferência entre as fases.

No sistema em que as bolhas ascendem uniformemente e não coalescem, o fenômeno da dispersão na fase líquida não é verificado. Entretanto, como sempre existe a distribuição do tamanho das bolhas, as velocidades de ascensão são diferentes e geram os fenômenos da dispersão e coalescência. Este efeito produz a distribuição do tempo de residência na fase gás, na qual pode ser bem maior do que a encontrada na fase líquida. Com frequência, as pequenas bolhas próximas à parede do reator podem ser transportadas para baixo com o líquido, aumentando o efeito da dispersão. (DECKWER, 1992)

Como regra geral, a medida do coeficiente de dispersão das fases do fluido é feita em duas partes, mecanismo de fluxo molecular e convectivo. Num modelo fluidodinâmico, o mecanismo convectivo pode ser formulado em teoria somente para as condições de fluxo simples, tal como no fluxo laminar. O processo de dispersão no reator em estudo apresenta, invariavelmente, a dispersão convectiva com ordem de grandeza maior que a molecular.

Muitas investigações são conduzidas considerando o fenômeno de dispersão nos modelos matemáticos para o reator do tipo coluna de lama e estão sumarizados em SHAH et al. (1978). Estes autores comentam que na literatura deste tipo de reator não existem trabalhos envolvendo experimentos com fluidos altamente viscosos ou não-newtonianos.

Modelagem – propriedades das bolhas da fase gás

A performance do reator operando no modo coluna de lama é determinada pelas propriedades das bolhas da fase gás. O perfil da variável fração volumétrica e diâmetro das bolhas são fatores essenciais para a determinação dos coeficientes de transferência.

Modelagem – coeficientes de transferência

A principal vantagem no uso do reator operando no modo coluna de lama está associado aos excelentes coeficientes de transferência. A alta transferência de calor, especialmente a alta capacidade calorífica da fase líquida, é particularmente calculada quando a seletividade da reação é estritamente uma função da temperatura, ou quando a desativação do catalisador pode ocorrer numa temperatura limite. Em geral, a seletividade de um complexo sistema de reação química é determinada pela distribuição do tempo de residência das fases, do tipo de processo de concentração e, particularmente, pela temperatura na qual a reação é sensível ao calor.

Os reatores de leito fluidizado trifásico *SLG* são especialmente recomendados para processos que envolvem oxidação, na qual uma temperatura limite é imposto ou então que o processo seja fortemente exotérmico. Isto pode ser explicado pelo fato que os coeficientes de temperatura são quebrados nestes reatores como resultado da alta capacidade calorífica na fase líquida e da elevada difusão efetiva (dispersão) de calor nas direções axial e radial.

Modelagem – resolução numérica

O modelo diferencial formado pelas Equações III.4.1, III.4.2 e III.4.3 é resolvido por meio do método dos volumes finitos com solução iterativa dado pela técnica linha por linha com o algoritmo da matriz tri-diagonal ("*tri-diagonal matrix algorithm*" – *TDMA*) (CARBONELL e GUIRARDELLO, 1997; CARBONELL, 1996). Nestes trabalhos podem ser encontradas outras correlações necessárias para a simulação do modelo formado e que não são especificadas neste trabalho.

III.5 – ANÁLISE DO EFEITO DE PAREDE NA FLUIDODINÂMICA

Numa modelagem matemática a descrição do comportamento fluidodinâmico da fase contínua líquida ou pseudo-fase contínua lama dentro de uma tubulação utiliza-se, usualmente, a condição de contorno de parede que diz que a velocidade da fase contínua é *zero* na posição radial igual ao raio da tubulação, ou seja, $r = R \rightarrow V = 0$. Isto quer dizer que a velocidade da fase contínua numa superfície sólida e fixa é igual a *zero* (condição de não-deslizamento). Na prática esta condição não ocorre, ou seja, a distribuição do fluxo no escoamento não satisfaz a condição de contorno usual e, conseqüentemente, não quantifica de forma satisfatória o perfil de velocidade da fase contínua na região próximo à superfície interna do reator, razão esta que nos conduz a utilização da condição de contorno dado pela correlação de Prandtl.

A correlação de Prandtl na fluidodinâmica permite quantificar um valor de velocidade para a fase contínua na região próximo à parede interna do reator e, portanto, descrever de forma satisfatória o comportamento do perfil de velocidade desta fase. Essa condição permite calcular um valor de velocidade (V_{Pr}) para a fase contínua num ponto (r^*) tão próximo à parede quanto se queira, ou seja, $r = r^* \leq R \rightarrow V = | V_{Pr} |$. Para obter a informação sobre o comportamento na vizinhança da parede recorre-se à aproximação da teoria da camada limite. O desenvolvimento e a apresentação da correlação de Prandtl é encontrado em livros de fenômenos de transporte, tal como BIRD (1960).

Numa secção transversal da tubulação onde o fluxo é ascendente e completamente desenvolvido, existem três regiões de escoamento do fluido. A Figura III.5.1 mostra que estas regiões são caracterizadas de acordo com o tipo de mecanismo de fluxo.

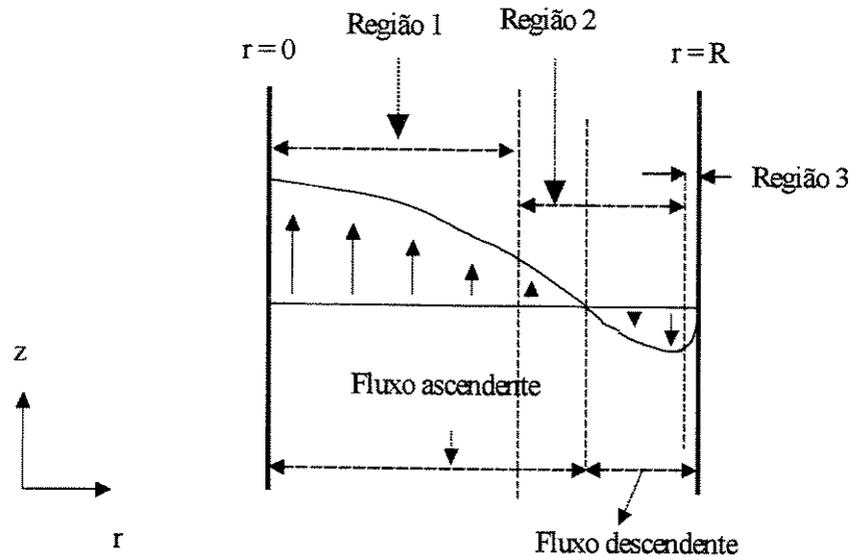


Figura III.5.1: Perfil padrão de escoamento do fluxo ascendente e desenvolvido.

A distinção entre as regiões mostradas na Figura III.5.1 está associado ao tipo de mecanismo de velocidade que predomina em cada região, mecanismo de fluxo convectivo ou difusivo. A Região 1 apresenta fluxo turbulento completamente desenvolvido, onde predomina o mecanismo convectivo, e não há interferência dos efeitos laminares. A Região 2 tem um fluxo de transição, onde ambos os mecanismos são importantes, ou seja, os efeitos laminares e turbulentos são adicionais. A Região 3 apresenta o fluxo laminar, descrito pela Lei da Viscosidade de Newton, onde predomina o mecanismo difusivo, sem a interferência do efeito turbulento.

Para a determinação da velocidade axial num ponto próximo à parede interna do reator utiliza-se a expressão semi-empírica para a tensão de Reynold. A tensão de Reynold é o nome usual para os componentes ou termos do fluxo de momento turbulento. As relações semi-empíricas amplamente empregadas para descrever estes componentes são: viscosidade turbilhonar de Boussinesq, comprimento de mistura de Prandtl, hipótese de similaridade de Von Kármán e fórmula empírica de Deissler.

Avalia-se aqui somente a relação do comprimento de mistura de Prandtl dada por:

$$\overline{\tau}_{yx}^{(t)} = -\rho \cdot l^2 \cdot \left| \frac{dV_x}{dy} \right| \cdot \frac{dV_x}{dy} \quad (\text{III.5.1})$$

sendo l o comprimento de mistura descrito em função de y , onde y assume o sentido oposto à orientação de r na Figura III.5.1. Para uma superfície sólida temos $l = K_l \cdot y$. A Equação III.5.1 também é obtida por Taylor através da teoria de transporte em vórtice e, com dados experimentais, Deissler estabelece o limite de validade para esta equação.

Com a condição de contorno no centro do reator ($r = 0$), que diz que a tensão é nula, e restrito a um fluido newtoniano incompressível, com tensão laminar desprezível em relação à turbulenta, Prandtl faz uma simplificação matemática na Equação III.5.1, fisicamente indiferente, e obtém a seguinte relação:

$$\frac{d\overline{V}_z}{dy} = \pm \frac{1}{k_1} \cdot V_* \cdot \frac{1}{y} \quad (\text{III.5.2})$$

sendo V_* a raiz quadrada da razão entre a tensão de cisalhamento τ_0 na parede ($y = 0$) e a densidade da fase líquida ou lama, e y um limite interno em relação à parede ($r = R$). Em forma adimensional, a igualdade da Equação III.5.2 é dado por:

$$V^+ - V_1^+ = \frac{1}{k_1} \cdot \ln \left(\frac{y^+}{y_1^+} \right) \quad (\text{III.5.3})$$

onde $y^+ = (y \cdot V_* \cdot \rho) / \mu \geq y_1^+$ e $V^+ = V_z / V_*$. Por meio de dados experimentais, Deissler determina para a distribuição de velocidade que $K_l = 0,36$ e $y_1^+ = 26$, o que corresponde a $V_1^+ = 12,85$. Com estes valores, a Equação III.5.3 assume a forma:

$$V^+ = \frac{1}{0,36} \cdot \ln(y^+) + 3,8 \quad (\text{III.5.4})$$

e seu limite de aplicação é válido para $y^+ \geq 26$, ou seja, num ponto distante da parede representado pela Região 1 da Figura III.5.1.

Na região próxima à parede, tanto a equação de Prandtl quanto a de Von Kármán são inadequadas. Assim, o que melhor se ajusta nesta região é a correlação de Deissler:

$$\bar{\tau}_{yx}^{(t)} = -\rho \cdot n^2 \cdot \bar{V}_x \cdot y \cdot \left\{ 1 - \exp\left[\frac{-n^2 \cdot \bar{V}_x \cdot y}{\nu} \right] \right\} \cdot \frac{d\bar{V}_x}{dy} \quad (\text{III.5.5})$$

onde n é uma constante empírica adimensional determinada por Deissler e igual a 0,124 para as tubulações longas e com superfície interna polida.

Contudo, a correlação de Deissler é adicionada à Lei de Viscosidade de Newton para a análise quando $y^+ \leq 26$. Assim, somam-se as correlações de Deissler e de Newton e procede-se com a integração entre $y^+ = 0$ ($r=R$) até $y = y^+ \leq 26$ e obtém-se:

$$V^+ = \int \frac{dy^+}{1 + n^2 \cdot V^+ \cdot y^+ \cdot \left\{ 1 - \exp[-n^2 \cdot V^+ \cdot y^+] \right\}} \quad (\text{III.5.6})$$

para $0 \leq y^+ \leq 5$ a Equação III.5.6 resume-se para $V^+ = y^+$, que é o mesmo resultado obtido integrando a Lei de Viscosidade de Newton na sub-camada laminar.

Mais tarde, Prandtl propõe uma correlação para prever a velocidade axial local quando $5 \leq y^+ \leq 26$, região em que a Equação III.5.1 não é aplicada. Esta correlação é a tão conhecida correlação de Prandtl para efeito de parede e dado por:

$$|V_{sl}|_{r=r^*} = \frac{(\tau_{w,sl}/\rho_{sl})^{0,5}}{0,4} \cdot \ln \left[E \cdot \frac{(\tau_{w,sl}/\rho_{sl})^{0,5}}{\mu_{sl}/\rho_{sl}} \cdot y \right] \quad (\text{III.5.7})$$

onde τ_w é a tensão de cisalhamento num ponto próximo à parede, ρ é a densidade, μ é a viscosidade, E é um fator de rugosidade ($E = 8$), y é a distância entre o ponto $y = 0$ ($r=R$) e o ponto interior considerado, onde se deseja adotar como condição de contorno, para estabelecer a velocidade neste ponto, $r=r^*$. O fator E é mostrado em BIRD (1960).

A aplicação da correlação de Prandtl é equivalente à equação de Deissler adicionada à Lei de Viscosidade de Newton, Equação III.5.6, quando o valor y^+ está situado entre os limites $5 \leq y^+ \leq 26$. Assim, a única variável de manipulação da correlação de Prandtl para que seja observado o valor de y^+ é dado pela distância entre a parede e o ponto considerado, ou seja, o valor da variável y . Devido ao processo em análise, o valor da Equação III.5.7 deve ser adotado como sendo negativo, sem o módulo.

Caracterização do escoamento do fluido

Para caracterizar a região de escoamento do fluxo é necessário estabelecer a razão entre as viscosidades laminar e turbulenta. Assim, o fluxo laminar é dado quando a viscosidade laminar tem uma ordem de grandeza maior que a ordem da viscosidade turbulenta, caso contrário, o fluxo é turbulento. No fluxo de transição as viscosidades laminar e turbulenta têm a mesma ordem de grandeza. A derivação de uma relação para verificar a região de escoamento ocorre a partir da definição da viscosidade turbulenta e, no caso unidimensional, é dado por:

$$\bar{\tau}_{rz} = -\mu \cdot \frac{d\bar{V}_z}{dr} - \mu^{(t)} \cdot \frac{d\bar{V}_z}{dr} \quad (.5.8)$$

isolando-se a razão $\mu / \mu^{(t)}$ e fazendo-se $y^+ = y \cdot V_* \cdot \rho / \mu$ obtém-se:

$$\frac{\mu^{(t)}}{\mu} = \frac{1 - (y/R)}{dV^+ / dy^+} - 1 \quad (\text{III.5.9})$$

A derivada de V^+ em relação a y^+ é obtida da Equação III.5.4:

$$\frac{dV^+}{dy^+} = \frac{1}{K_1} \cdot \frac{1}{y^+} \quad (\text{III.5.10})$$

Correlação para a fluidodinâmica

Numa região próxima à parede, UHEYAMA e MIYAUCHI (1979) mostram que:

$$|V| \propto \sqrt{\frac{\tau_{w,sl}}{\rho_{sl}}} \quad (\text{III.5.11})$$

sendo que a constante de proporcionalidade igual a 11,63.

III.6 – REAÇÕES QUÍMICAS

CARBONELL e GUIRARDELLO (1999) verificam que a inclusão do termo de dispersão no modelo fluidodinâmico para o reator em estudo conduz a um perfil radial de concentração quase plano. Assim, propõem-se um perfil bidimensional de concentração descrito por uma série polinomial com três termos e dado por:

$$C_i(r, z) = a_i(z) + b_i(z) \cdot r^2 + c_i(z) \cdot r^4 \quad (\text{III.6.1})$$

A Equação III.6.1 é analisada considerando uma malha reacional para um reator de hidroconversão de óleos pesados e uma constante da taxa de reação.

Malha reacional

A Figura III.6.1 mostra a malha das reações químicas para a conversão de resíduos que é proposta por MOSBY et al. (1986). Todas as reações são irreversíveis e de primeira ordem. Na malha reacional existem sete componentes ($i=7$):

Componente 1:	resíduo pesado (“ <i>hard</i> ”)
Componente 2:	resíduo leve (“ <i>easy</i> ”)
Componente 3:	gasóleo alimentação
Componente 4:	gasóleo intermediário
Componente 5:	Destilado
Componente 6:	Nafta
Componente 7:	Gases

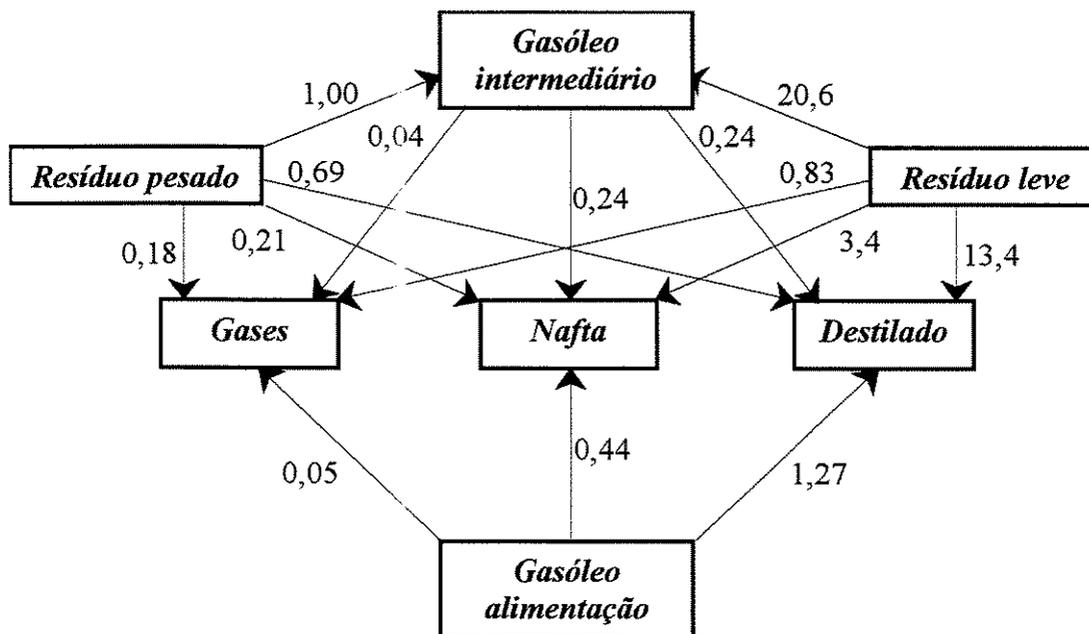


Figura III.6.1: Malha reacional proposta por MOSBY et al. (1986).

Os números que aparecem na Figura III.6.1 são as constantes da taxa de primeira ordem relativas ao craqueamento do resíduo pesado para o gasóleo intermediário, representado nesta pela constante 1,00. Estas constantes são sintetizadas na Tabela III.6.1 e representam o valor global para a conversão de cada componente.

Tabela III.6.1: Constante global da taxa ω_{ij} para cada componente da malha.

Índice <i>i</i>	Índice <i>j</i>			
	1	2	3	4
1	-2,08	0,00	0,00	0,00
2	0,00	-38,23	0,00	0,00
3	0,00	0,00	-1,76	0,00
4	1,00	20,60	0,00	-0,52
5	0,69	13,40	1,27	0,24
6	0,21	3,40	0,44	0,24
7	0,18	0,83	0,05	0,04

Constante da taxa de reação

Para um reator de hidroconversão de óleos pesados, ABREU (1995) propõe a constante da taxa de reação dado por:

$$k = 9,0907 \times 10^{13} \times \exp\left[-\frac{2,4282 \times 10^5}{8,314 \times T}\right] \quad [\text{l.s}^{-1}] \quad (\text{III.6.2})$$

III.7 – DADOS EXPERIMENTAIS

O modelo matemático em estudo para a fluidodinâmica dentro do reator operando no modo coluna de lama é validado por meio dos dados fornecidos por CHEN et al. (1995). Os dados são produzidos a partir do comportamento fluidodinâmico das fases dentro de uma tubulação cilíndrica na posição vertical. As fases são constituídas por água, ar e esferas de vidro e sem reações químicas. A água e as esferas de vidro são consideradas uma pseudo-fase homogênea com os sólidos em suspensão. As dimensões da tubulação são 4,1 [m] e 0,285 [m], respectivamente, altura e diâmetro. A instrumentação para a leitura dos parâmetros que possibilitam gerar os dados para as velocidades axiais locais da fase gás e pseudo-fase lama é instalada na metade da altura da tubulação, ou seja, 2,05 [m].

A operação do equipamento experimental constitui em alimentar na base da tubulação vertical uma corrente com a fase gás e uma corrente com a pseudo-fase homogênea água e esferas de vidro. Não há retenção de nenhuma das fases no interior da tubulação, ou seja, todas as fases são retiradas pelo topo. A leitura dos parâmetros acontece quando a fluidodinâmica alcança a condição de estado estacionário.

Para gerar os dados das velocidades, CHEN et al. (1995) consideram que o perfil da variável fração volumétrica obedece a Equação III.4.6 e propõem uma correlação para $\varepsilon_g \Big|_{r=0}$. Esta correlação considera a velocidade, frequência e diâmetro de Sauter das bolhas na posição central, tanto radial quanto axial, da tubulação. Os valores para as velocidades são representados em gráficos. Então, por meio da leitura visual com o auxílio de uma régua graduada, coleta-se os dados com um desvio absoluto máximo de $\pm 0,005$, ou seja, a metade da menor graduação da régua. A Tabela III.7.1 mostra os dados lidos.

Tabela III.7.1: Dados extraídos do trabalho de CHEN et al. (1995).

r/R	<i>Lama-1</i>	<i>Lama-2</i>
0,0	0,244	0,387
0,237	0,187	0,319
0,496	0,112	0,233
0,741	0,040	-0,053
0,911	-0,097	-0,158

r/R	<i>Gás-1</i>	<i>Gás-2</i>
0,0	0,775	1,013
0,253	0,696	0,911
0,509	0,661	0,893
0,749	0,564	0,757
0,914	0,437	0,626

Os dados da Tabela III.7.1 são simétricos em relação ao eixo axial da tubulação e estão expostos na forma adimensional. Os dados de velocidade axial locais são gerados para quatro condições operacionais distintas, duas para a fase gás (*Gás-1* e *Gás-2*) e duas para a pseudo-fase homogênea (*Lama-1* e *Lama-2*). Os dados das colunas *Lama-1* e *Gás-1* correspondem ao regime de escoamento em estado de transição e os dados das colunas *Lama-2* e *Gás-2* correspondem ao estado turbulento (heterogêneo). As condições operacionais e outros parâmetros necessários para a obtenção dos dados são mostrados na Tabela VI.1. As unidades para as velocidades são dados no sistema métrico internacional, metros por segundos [m/s].

Capítulo IV

MÉTODOS NUMÉRICOS

O método do cálculo das variações é utilizado para modelar e simular a fluidodinâmica dentro do reator em estudo. Entretanto, outros métodos numéricos são usados como instrumentos auxiliares durante a aplicação do cálculo variacional, a saber: programação não-linear, quadratura de Gauss, análise estatística de funções matemáticas e formas matemáticas usadas para ajustar os perfis das variáveis de processo.

i) *Pontos principais do cálculo das variações*

Para um primeiro contato com o método do cálculo das variações, mostra-se neste capítulo somente a essência do método; as condições necessárias e suficientes para a sua aplicação como método matemático na resolução de equação diferencial. Maiores detalhes do formalismo matemático encontram-se no Anexo-A.

ii) *Quadratura de Gauss*

No cálculo das variações a formulação matemática envolve equações integrais. A técnica de integração escolhida é a quadratura Gaussiana.

iii) *Programação não-linear (otimização)*

O método do cálculo das variações é uma técnica implícita de otimização. Portanto, faz-se necessário uma introdução a programação não-linear.

iv) *Funções matemáticas dependentes*

Apresenta-se as funções dependentes utilizadas no estudo do método variacional e algumas das características particulares destas funções são devidamente exploradas.

v) *Análise estatística de funções*

A verificação de um modelo matemático representativo para um conjunto de dados experimentais é analisado mediante tratamento estatístico dos dados.

IV.1 – PONTOS PRINCIPAIS DO CÁLCULO DAS VARIAÇÕES

Um modelo matemático diferencial pode ser resolvido por meio de vários métodos tradicionais existentes na literatura, como por exemplo: colocação ortogonal e volumes finitos. Cada um destes métodos apresentam as suas particularidades, com vantagens e desvantagens. O cálculo das variações é um método alternativo e complementar aos métodos tradicionais; a sua principal vantagem é evitar o uso de correlação empírica e a sua principal desvantagem é a carência de um princípio variacional geral. O método variacional é um método de otimização, isto possibilita propor uma correlação empírica por meio de uma função dependente com coeficientes a determinar. Estes coeficientes são determinados de acordo com as condições operacionais do processo. Ressalta-se que por meio dos métodos tradicionais uma função dependente somente é determinada quando acoplado a algum método otimização.

A teoria do método do cálculo das variações apresentada no Anexo-A constitui um bom material para se iniciar a avaliação da sua aplicação em processos descritos por equações diferenciais. Para uma equação diferencial com dimensão ou ordem superior a um, as equações do Anexo-A apresentam pequenas modificações e a inclusão de alguns termos são necessários. Entretanto, as análises matemáticas são similares e, basicamente, a única diferença reside na extensão da manipulação algébrica da equação integral.

O primeiro passo para a aplicação do cálculo das variações consiste em escrever um modelo matemático diferencial na forma de um modelo matemático integral. Para obter a equação integral recorre-se ao teorema de Euler-Lagrange que é dado por:

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial y / \partial x)} \right) = 0 \quad (\text{IV.1.1})$$

onde y é a função dependente dado por $y = y(C, x)$, x é a variável independente e f é o modelo integral proposto. Este modelo proposto é tal que, após aplicar a Equação IV.1.1 neste modelo obtém-se o modelo diferencial. Ressalta-se que o modelo diferencial e o integral são numericamente equivalentes.

O modelo matemático integral proposto é representado na forma de um problema de programação não-linear e assume a posição da função objetivo. Então, este problema é simulado de forma que os coeficientes da função dependente torna o modelo integral uma equação estacionária com relação a estes coeficientes. Entretanto, deve-se ainda determinar se o ponto estacionário é de mínimo, máximo ou inflexão. Para a caracterização completa do problema de otimização recorre-se aos teoremas de Jacobi, Legendre e Weierstrass.

Legendre garante que o modelo integral é um problema regular, ou seja:

$$f_{y'y'} \neq 0 \quad (\text{IV.1.2})$$

A Equação IV.1.2 tem valor negativo para ponto de máximo e para o ponto de mínimo o valor é positivo. Caso existir mais de uma função dependente, este teorema informa se estas funções são linearmente independentes.

Jacobi garante que o modelo integral não apresenta ponto de inflexão ou ponto conjugado. A análise deste teorema é efetuada apenas sobre a função dependente, ou seja:

$$\frac{\partial y(C_i, x)}{\partial C_i} = 0 \quad (\text{IV.1.3})$$

Para apresentar o ponto conjugado, a Equação IV.1.3 deve ser verificada de forma simultânea no limite inferior da integral e num ponto intermediário qualquer. O limite superior não é analisado.

Weierstrass garante que o ponto de extremo é forte ou não e é dado por:

$$f(x, y, p') - f(x, y, y') - (p' - y') \times \frac{\partial f(x, y, y')}{\partial y'} \neq 0 \quad (\text{IV.1.4})$$

onde p' é um número real qualquer e tem valor diferente de y' .

Ressalta-se que todos os teoremas têm caráter qualitativo, exceto Jacobi.

IV.2 – QUADRATURA DE GAUSS

O cálculo numérico de uma integral definida num dado intervalo constitui um problema clássico da matemática e é representado na sua forma padrão por:

$$I = \int_a^b f(x) \cdot dx \quad (\text{IV.2.1})$$

Para alguns integrandos simples a integral anterior pode ser obtida explicitamente através de expressões polinomiais ou através de funções transcendentais em x dado por:

$$\int_a^b f(x) \cdot dx = F(b) - F(a) \quad (\text{IV.2.2})$$

As integrais definidas que não podem usufruir desta relação são calculadas, em geral, por meio dos métodos de discretização, ou seja, uma aproximação é dado por meio de uma soma finita de sub-intervalos do intervalo de integração. Estes métodos são denominados de integral ou quadratura numérica.

Os métodos clássicos de integração numérica são: Fórmula de Newton-Cotes, Regra de Simpson, Regra do Trapézio, Método Monte-Carlo, Integração de Romberg (integração por extrapolação), Quadratura Gaussiana (quadratura Gauss-Legendre) e Quadratura Adaptativa (ATKINSON, 1988; ABRAMOWITZ, 1968).

Os métodos de integração mais utilizados são Regra de Simpson e Regra do Trapézio. Entretanto, estes métodos estão baseados numa aproximação polinomial de baixa ordem para o integrando e os sub-intervalos decrescem de tamanho, isto faz necessário um grande número de intervalos para se obter resultados precisos e exatos na integração. Do contrário, a classe dos métodos cujos sub-intervalos aumentam de tamanho os resultados são acurados na maioria das vezes, como na quadratura Gauss (ATKINSON, 1988).

STOER e BULIRSCH (1980) comparam os vários métodos de integração e concluem que; para um mesmo esforço computacional a quadratura Gaussiana fornece os resultados mais precisos e exatos, demonstrando claramente a sua superioridade com relação aos demais métodos. ATKINSON (1988) observa também que as fórmulas de quadratura Gaussiana fornecem resultados rápidos.

A integração numérica definida de uma função real num dado intervalo finito utilizando a quadratura Gaussiana é calculada através de raízes básicas, não igualmente espaçadas, e determinados por meio de propriedades dos polinômios ortogonais (CARNAHAN, 1969), ou seja:

$$\int_a^b f(x) \cdot dx \cong \sum_{k=0}^n \omega_k \cdot f(x_k) \quad (\text{IV.2.3})$$

onde ω_k é um número real sempre positivo (≥ 0) e denominado de peso da integral (ou peso da quadratura, ou peso da função), sendo x_k definido como o nó da integral (ou nó da quadratura) e $n+1$ é o número de raízes desejadas para o polinômio integrante.

Para a aplicação do método de quadratura Gaussiana na reso na resol .U IV.2.1 ajusta-se os valores base das raízes, uma vez que este método é somente definido para o intervalo de integração $[-1; +1]$. Assim, a equação de ajuste da raiz no intervalo desejado é dado por:

$$x = \frac{z \cdot (b - a) + (b + a)}{2} \quad (\text{IV.2.4})$$

onde a e b são os limites da integral, x é o novo valor base da raiz a ser utilizada nos cálculos e z é o valor base da raiz do nó da integral ou quadratura mostrado na Tabela IV.2.1. Conseqüentemente, o diferencial dx também é ajustado para dz , ou seja:

$$dx = \frac{(b-a)}{2} dz \quad (\text{IV.2.5})$$

Substituindo as Equações IV.2.4 e IV.2.5 na Equação IV.2.1 obtém-se:

$$I = \int_a^b f(x) \cdot dx = \frac{(b-a)}{2} \cdot \int_{-1}^1 f\left(\frac{z \cdot (b-a) + (b+a)}{2}\right) \cdot dz \quad (\text{IV.2.6})$$

A discretização da Equação IV.2.6 para a aplicação do método de quadratura Gaussiana fornece a seguinte relação de recorrência:

$$\int_a^b f(x) \cdot dx \cong \frac{(b-a)}{2} \cdot \sum_{k=0}^n \omega_k \cdot f\left(\frac{z_k \cdot (b-a) + (b+a)}{2}\right) \quad (\text{IV.2.7})$$

Determinado o número de raízes $n+1$ desejadas e seus respectivos pesos ω_k , procede-se a integração numérica propriamente dita. Alguns valores base de raiz z_k e de peso ω_k são mostrados na Tabela IV.2.1 (CARNAHAN, 1969).

Tabela IV.2.1: Valores base das raízes e dos pesos para a quadratura Gaussiana.

Número de raízes ($n+1$)	Valor base da raiz (z_k)	Valor do peso (w_k)
10	± 0.148874	0.295524
	± 0.433395	0.269267
	± 0.679410	0.219086
	± 0.865063	0.149451
	± 0.973907	0.066671
20	± 0.076527	0.152753
	± 0.227786	0.149173
	± 0.373706	0.142096
	± 0.510867	0.131689
	± 0.636054	0.118195
	± 0.746332	0.101930
	± 0.839117	0.083277
	± 0.912234	0.062672
	± 0.963972	0.040601
± 0.993129	0.017614	
40	± 0.038772	0.077506
	± 0.116084	0.077040
	± 0.192698	0.076110
	± 0.268152	0.074723
	± 0.341994	0.072887
	± 0.413779	0.070612
	± 0.483076	0.067912
	± 0.549467	0.064804
	± 0.612554	0.061306
	± 0.671957	0.057440
	± 0.727318	0.053228
	± 0.778306	0.048696
	± 0.824612	0.043871
	± 0.865960	0.038782
	± 0.902099	0.033460
	± 0.932813	0.027937
	± 0.957917	0.022246
	± 0.977260	0.016421
	± 0.990726	0.010498
± 0.998238	0.004521	

IV.3 – PROGRAMAÇÃO NÃO-LINEAR (OTIMIZAÇÃO)

A formulação em otimização consiste em resolver o problema dado por:

$$\begin{aligned}
 \text{Min ou Max} \quad & I[y_j(x_i)] \\
 \text{Restrito à} \quad & g_p(x_i) = 0 \\
 & h_q(x_i) \leq 0 \\
 & lb_i \leq x_i \leq ub_i \\
 & x_i \in U
 \end{aligned} \tag{IV.3.1}$$

onde I , g_p e h_q são funções definidas sobre Ψ , U é um sub-conjunto de Ψ e x_i é um vetor de n componentes. O problema dado pela Equação IV.3.1 deve ser resolvido para os valores das variáveis x_i que satisfazem as restrições, minimizando ou maximizando a função I .

A função I é usualmente chamada de função objetivo. Cada uma das restrições $h_q(x_i) \leq 0$ são chamadas de restrições de desigualdade e cada uma das restrições $g_p(x_i) = 0$ são chamadas de restrições de igualdade. Um conjunto U típico inclui os limites inferiores lb (“*lower-bound*”) e os superiores ub (“*upper-bound*”) para todas as variáveis, os quais constituem outras equações restritivas. Um vetor $x_i \in U$ satisfazendo todas as restrições é chamado de solução factível para o problema. O conjunto de todas as soluções factíveis formam a região factível. Então, o problema de programação não-linear para a minimização (maximização) é encontrar um ponto factível \bar{x}_i na qual $I[y_j(x_i)] \geq (\leq) I[y_j(\bar{x}_i)]$ para todo ponto factível x_i . O ponto \bar{x}_i é chamado de solução ótima para o problema. Existindo mais que um ponto ótimo, estes são referidos como soluções alternativas ótimas do problema.

Os detalhes do formalismo matemático e as condições necessárias e suficientes para que o vetor \bar{x}_i seja um ponto de extremo para o problema dado pela Equação IV.3.1 podem ser extraídas de vários livros de otimização, tal como BAZARRA (1993).

IV.4 – FUNÇÕES MATEMÁTICAS DEPENDENTES

Conforme mencionado no Tópico A.6 do Anexo-A, dado pelo item *Método de Rayleigh-Ritz*, o ajuste da função dependente y ocorre através da escolha de funções arbitrárias $\Theta_l(x_i)$ na forma de combinações lineares. Estas combinações podem ser apresentadas por exemplo na forma de série polinomial. A utilização de série pode ser justificada pelo fato que, matematicamente, quando o número de termos na série tende ao infinito o resultado numérico é exato. A teoria exposta a seguir pode ser obtida em detalhes em GERALD (1989) e ABRAMOWITZ (1968).

O estudo das funções dependentes y_j é realizado considerando três diferentes tipos de série polinomial, a saber: série Ritz-Rayleigh ou simplesmente Ritz (polinômio comum) – Equação IV.4.1, série Tchebyshev (polinômio trigonométrico) – Equação IV.4.2, e série trigonométrica do tipo secante hiperbólica – Equação IV.4.3.

$$y_j = \sum_{l=0}^{\infty} C_{j,l} \cdot (x_i)^{2,l} \quad (\text{IV.4.1})$$

$$y_j = \sum_{l=0}^{\infty} C_{j,l} \cdot \{\cos[2.l.a \cos(x_i)]\} \quad (\text{IV.4.2})$$

$$y_j = \text{sech} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} C_{j,l} \cdot (x_i)^{2,l} \right\} \quad (\text{IV.4.3})$$

onde $C_{j,l}$ são as constantes que serão determinadas durante a simulação numérica.

A Equação IV.4.2 pode também ser escrita através uma série de potência – Equação IV.4.4 – e a prova de sua equivalência com a série trigonométrica é obtida através de algumas identidades trigonométricas. Assim:

$$y_j = \sum_{l=0}^{\infty} C_{j,l} \cdot T_l(x_j)^2 \quad (\text{IV.4.4})$$

A função T_l (polinômio de Tchebyshev) é dado pela relação de recorrência:

$$T_{k+1}(x_i)^2 = 2 \cdot (x_i) \cdot T_k - T_{k-1} \quad (k=1, \dots, \infty)$$

onde as condições iniciais são: $T_0 = 1$ e $T_1 = x_i$.

Os resultados numéricos obtidos são os mesmos para qualquer tipo de série polinomial utilizado. Assim, surge a seguinte pergunta; por que não usar apenas um tipo de série ? Acontece que pode aparecer oscilações numéricas devido à técnica matemática empregado para resolver o sistema das equações formado pelas Equações A.6.2 ou A.7.1.2. Assim, estas séries têm características específicas que devem ser devidamente exploradas.

A série trigonométrica descrito na Equação IV.4.2 tem uma sucessão de máximos e mínimos com sinais alternados e magnitude igual um, resultando numa convergência mais rápida, pois, usualmente, os coeficientes dos termos decrescem mais rapidamente quando comparados com outras séries o que, conseqüentemente, resulta numa economia de tempo computacional. A série trigonométrica apresenta uma função com um erro mínimo, pois a expansão desta série é muito mais eficiente e os erros podem ser considerados como sendo distribuídos de forma mais ou menos uniformemente através do intervalo.

Na Equação IV.4.3 os valores fornecidos para y_j estão sempre no intervalo $[0,1]$. Portanto, essa equação pode ser explorada adequadamente para minimizar o uso de restrições no problema dado pela Equação IV.3.1.

Para um valor exato da solução, as séries mostradas nas Equações IV.4.1 até IV.4.4 devem ter infinitos termos. Assim, matematicamente, requer-se um truncamento na série para a resolução numérica, o que resulta num valor aproximado.

FINLAYSON (1972) comenta que para a resolução numérica de um sistema complexo, a nível molecular ou atômico, por meio do cálculo das variações requer séries de aproximadamente 100 termos.

IV.5 – ANÁLISE ESTATÍSTICA DE FUNÇÕES

O tratamento estatístico de dados experimentais é uma ferramenta matemática interessante quando deseja-se validar um determinado modelo matemático. Normalmente, um conjunto de dados (x,y) é pontual, portanto, um tratamento estatístico é importante para verificar se a função dependente que é proposto para uma determinada variável é capaz de reproduzir estes dados. A validação de uma função em sua forma genérica é obtida através da seguinte técnica recursiva (GERALD, 1989):

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y.f(x).dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^{n+1}}{(n+2)!} \times [y_i.f^{(n)}(x_i) + y_{i+1}.(-1)^n.f^{(n)}(x_{i+1})] \quad (\text{IV.5.1})$$

De acordo com o valor de n , ou seja, da ordem da derivada de $f(x)$, tem-se uma regressão linear, quadrática, cúbica e etc., respectivamente, para $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ e etc.

Capítulo V

**DESENVOLVIMENTO e
MODELAGEM
VARIACIONAL**

O método do cálculo das variações permite o ajuste de correlação para variável de processo por meio de função dependente. Assim, avalia-se o uso de função dependente para as variáveis perfis radiais das velocidades axiais da pseudo-fase lama V_{sl} e da fase gás V_g e também para a variável perfil radial da fração volumétrica do gás ε_g . Na primeira etapa ajustam-se as funções para os perfis das velocidades e mostra-se a equivalência entre a modelagem diferencial e a modelagem variacional (integral). Na segunda etapa adiciona-se à primeira etapa o ajuste da função para o perfil da fração.

Comparativamente à Equação A.1.2.1 e à formulação diferencial unidimensional em estudo, a formulação variacional para o ajuste dos perfis das velocidades é dada na forma genérica por:

$$I[y_j(r)] = \min \text{ ou } \max \int_0^R f[r, V_{sl}(r), V_g(r), V'_{sl}(r), V'_g(r)] 2 \cdot \pi r \cdot dr \quad (\text{V.1})$$

onde $j = 1$ indica $y_1 = V_{sl}$ e $j = 2$ indica $y_2 = V_g$. Para a segunda etapa tem-se que:

$$I[y_j(r)] = \min \text{ ou } \max \int_0^R f[r, V_{sl}(r), V_g(r), \varepsilon_g(r), V'_{sl}(r), V'_g(r), \varepsilon'_g(r)] 2 \cdot \pi r \cdot dr \quad (\text{V.2})$$

onde $j = 3$ indica $y_3 = \varepsilon_g$. Observa-se que as formulações são unidimensionais, $x_i = x_j$ ou simplesmente x . As formas para as funções dependentes $y_j(r)$ ($j=1,2,3$) são apresentadas pelas Equações IV.4.1, IV.4.2 e IV.4.3 e a variável x assume a forma adimensional (r/R).

O modelo variacional é aplicado no modelo diferencial, proposto por CARBONELL (1996), para um reator de leito fluidizado trifásico operando no modo coluna de lama. Antes de obter-se o modelo variacional é necessário definir previamente as condições de contorno e nenhuma outra definição se faz necessária.

V.1 – SEM EFEITO DE PAREDE

Usando-se as condições de contorno dadas pelas Equações III.4.10 e III.4.11, ou seja, a fluidodinâmica não é influenciada pelo efeito de parede, o modelo variacional obtido é apresentado por SANTOS Jr. e GUIRARDELLO (1999) e mostrado no Anexo-B. Conforme a Equação V.1, o modelo ajusta funções dependentes para as variáveis perfis radiais de velocidades axiais e, na forma explícita, o modelo desta equação é dado por:

$$I = \int_0^R \left\{ \frac{dP}{dz} (\psi_{sl} + \psi_g) + g (\rho_{sl} \psi_{sl} + \rho_g \psi_g) + \rho_{sl} \varepsilon_g g \psi_{sl-g} + \frac{C_w}{2} \varepsilon_g \varepsilon_{sl} \psi_{sl-g}^2 + \frac{I}{2} (\Omega_{sl} + \Omega_g) \right\} 2\pi r dr \quad (V.1.1)$$

onde $\psi_{sl} = \varepsilon_{sl} \cdot V_{sl}$; $\psi_g = \varepsilon_g \cdot V_g$; $\psi_{sl-g} = V_{sl} - V_g$; $\Omega_{sl} = \mu_{sl}^{eff} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V_{sl}')^2$ e $\Omega_g = \mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g \cdot (V_g')^2$.

V.2 – COM EFEITO DE PAREDE

A análise da influência do efeito de parede no comportamento fluidodinâmico no interior do reator possibilita descrever de forma mais satisfatório os dados próximo à parede interna do reator. Entretanto, isto requer uma manipulação algébrica mais detalhada, uma vez que somente para a fase contínua pode-se aplicar o efeito de parede. Diferentemente do Tópico V.1, esta manipulação conduz a um procedimento de cálculo algébrico em duas etapas. Na primeira etapa é ajustada a variável perfil radial de velocidade axial da pseudo-fase lama e, na subsequente, ajusta-se a da fase gás.

O acoplamento da condição de contorno dada pelo efeito de parede ou correlação de Prandtl diz que: a Equação III.5.7 é válida na posição radial $r = r^*$. Assim, este acoplamento faz surgir uma nova incógnita no modelo variacional que é dada pela variável tensão de cisalhamento da pseudo-fase lama $\tau_{w,sl}$ próximo à parede interna do reator.

Nos modelos variacionais, *sem* e *com* o uso da correlação do efeito de parede, têm-se que a condição de contorno dada pela Equação III.4.10 não se altera. Entretanto, com a análise do efeito de parede, a condição de contorno dada pela Equação III.4.11 é substituída pela equação:

$$r = r^* \quad \rightarrow \quad V = |V_{sl}| \quad (\text{V.2.1})$$

onde a variável $|V_{sl}|$ é dada pela Equação III.5.7. Esta condição não tem valor numérico fixo, pois depende do valor da variável tensão de parede. Portanto, necessita-se obter uma função para esta variável.

A incorporação no modelo variacional da Equação V.2.1 é apresentada por SANTOS Jr. e GUIRARDELLO (2001) e mostrada no Anexo-B. Conforme a Equação V.1, o modelo ajusta funções dependentes para as variáveis perfis radiais das velocidades axiais e, na forma explícita, o modelo é mostrado nos próximos parágrafos deste tópico.

Inicialmente, faz-se necessário obter uma equação adicional para a variável tensão de parede. Esta equação é obtida somando-se as Equações III.4.1 e III.4.2 e a resultante é integrada no limite $[0, R]$. Na seqüência, aplica-se à condição que diz que a variável fração volumétrica da fase gás é igual a zero e da pseudo-fase lama é igual a um em $r = R$ e obtém-se a equação dada por:

$$\tau_{w,sl} = \frac{2}{R} \left[\mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{dV_{sl}}{dr} \right]_{r=R} = \frac{dP}{dz} + g \cdot (\rho_{sl} \cdot \bar{\varepsilon}_{sl} + \rho_g \cdot \bar{\varepsilon}_g) \quad (\text{V.2.2})$$

que corresponde à fórmula manométrica onde a queda de pressão é balanceada com o peso do leito e a tensão de cisalhamento na parede.

O procedimento de cálculo algébrico em duas etapas para o modelo variacional com a condição de contorno dada pela Equação V.2.1 surge de forma natural. Para obter-se o modelo variacional com a influência do efeito de parede, faz-se necessário a seguinte análise: a Equação III.5.7 é válida somente em $r = r^*$ e para a aplicação do efeito de parede e das condições de contorno deve-se resolver a equação resultante do somatório entre as Equações III.4.1 e III.4.2 somente no limite $[0, r^*]$. Neste intervalo, o termo de força viscosa do gás é desprezível, ou seja, é importante apenas próximo à parede $[r^*, R]$. Assim, pode-se desprezar o termo da força viscosa do gás nesta primeira etapa da resolução numérica do modelo variacional, o que resulta numa equação dependente apenas do perfil radial de velocidade axial da pseudo-fase de lama, válida no limite $[0, r^*]$. Após esta análise, a equação diferencial obtida é dada por:

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left(\varepsilon_{sl} \cdot r \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{dV_{sl}}{dr} \right) - \frac{dP}{dz} - g \cdot (\rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} + \rho_g \cdot \varepsilon_g) = 0 \quad (V.2.3)$$

Por meio da Equação A.1.3.1, a equação integral equivalente à Equação V.2.3 é dada por:

$$I = \int_0^{r^*} \left\{ \left[\frac{1}{2} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \left(\frac{dV_{sl}}{dr} \right)^2 \right] + V_{sl} \cdot \frac{dP}{dz} + g \cdot (\rho_{sl} \cdot \varepsilon_{sl} + \rho_g \cdot \varepsilon_g) \cdot V_{sl} \right\} \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (V.2.4)$$

Na segunda etapa, o modelo variacional para o perfil radial de velocidade axial do gás é obtido apenas a partir da equação diferencial do balanço de momento do gás, Equação III.4.2. Assim, aplica-se sobre esta equação a Equação A.1.3.1 e obtém-se a formulação variacional dada por:

$$I = \int_0^R \left\{ \left[\varepsilon_g \frac{dP}{dz} + g \cdot \rho_g \cdot \varepsilon_g - (\rho_{sl} - \rho_g) \cdot \varepsilon_g \cdot g \right] V_g + \frac{C_w \cdot \varepsilon_g \cdot \varepsilon_{sl}}{2} (V_{sl} - V_g)^2 + \frac{\mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g}{2} \left(\frac{dV_g}{dr} \right)^2 \right\} \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (V.2.5)$$

Observa-se que a Equação V.2.5 é uma função apenas do perfil radial de velocidade axial da fase gás. As demais incógnitas são determinadas na primeira etapa. Chama-se a atenção para: diferentemente da formulação variacional da primeira etapa, Equação V.2.4, o limite superior da Equação V.2.5 não é r^* e sim o próprio raio da coluna R , ou seja, deve-se integrar a equação da segunda etapa no intervalo $[0, R]$.

V.3 – COM REAÇÃO QUÍMICA

O modelo variacional com reação química tem por objetivo determinar os perfis das concentrações dos vários componentes presentes num processo de hidroconversão de óleos pesados. A região do reator considerada para análise apresenta a fluidodinâmica perfeitamente desenvolvida e os efeitos associados às regiões de entrada e saída de fluxo são considerados. Os perfis das concentrações são considerados na forma bidimensional $C_i(r, z)$ e os perfis radiais de velocidade são previamente conhecidos. A consideração do perfil de velocidade é válida, uma vez que a reação pouco afeta a fluidodinâmica; do contrário, a resolução dos perfis das concentrações e velocidades tem que ser simultânea.

Inicialmente, realiza-se um desenvolvimento do modelo matemático para o comportamento fluidodinâmico das fases na sua forma genérica, sem simplificações ou aproximações. Somente quando necessário serão introduzidas as aproximações, de forma que torna o modelo o mais próximo possível da situação física real.

Equação para o balanço de massa

A equação diferencial parcial, em coordenadas cilíndricas, que descreve o balanço de massa total da pseudo-fase lama no regime permanente é escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial z}(v_z \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \rho_{sl}) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r}(r \cdot v_r \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \rho_{sl}) = 0 \quad (\text{V.3.1})$$

onde considera-se que a massa específica da lama não varia dentro do reator. V_z e V_r são as velocidades axial e radial para a pseudo-fase lama, respectivamente. O balanço de massa individual é dado por:

$$v_z \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial C_i^{sl}}{\partial z} + v_r \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot C_i^{sl}) = \varepsilon_{sl} \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot k \cdot C_j^{sl} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{eff,z} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial C_i^{sl}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot D_{eff,r} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot \frac{\partial C_i^{sl}}{\partial r} \right) \quad (V.3.2)$$

onde C_i^{sl} é a concentração do componente i da pseudo-fase lama por unidade de volume e o índice j compreende todos os componentes. Como a concentração é expressa em termos de unidades de volume de líquido (óleo) e não de lama, utiliza-se a seguinte equação:

$$\varepsilon_{sl} \cdot C_i^{sl} = \varepsilon_l \cdot C_i \quad (V.3.3)$$

Como o modelo considera a lama como única fase e homogênea, tem-se que:

$$f_s = \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_s + \varepsilon_l} \quad (V.3.4)$$

onde o valor de f é o mesmo (pois é homogênea) em todo o reator. Desta forma, a Equação V.3.2 torna-se:

$$v_z \cdot \varepsilon_l \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} + v_r \cdot \varepsilon_l \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot C_i) = \varepsilon_l \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot k \cdot C_j + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{eff,z} \cdot \varepsilon_l \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot D_{eff,r} \cdot \varepsilon_l \cdot \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) \quad (V.3.5)$$

onde V_z e V_r são as velocidades axial e radial da fase líquida (que neste modelo são consideradas iguais às velocidades da pseudo-fase lama), ε_l é a fração volumétrica da fase líquida e C_i é a concentração em massa do componente i na fase líquida (massa/volume).

Para a utilização da fração mássica na fase líquida é necessário multiplicar este termo pela massa específica da fase líquida.

Perfil de concentração

De forma geral, o perfil bidimensional de concentração pode ser escrito na forma de uma série polinomial dada por:

$$C_i(r, z) = \sum_n a_{n,i}(z) \cdot r^n \quad (\text{V.3.6})$$

sendo uma das condições de contorno dada por:

$$\left. \frac{\partial C_i}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (\text{V.3.7})$$

Essa condição de contorno, juntamente com as Equações V.3.5 e V.3.6, faz com que todos os termos de n ímpar sejam iguais a zero. Desta forma, o perfil de concentração da Equação V.3.6 pode ser escrito como:

$$C_i(r, z) = \sum_n b_{n,i}(z) \cdot r^{2n} \quad (\text{V.3.8})$$

Uma outra condição de contorno para o problema é dada por:

$$\left. \frac{\partial C_i}{\partial r} \right|_{r=R} = 0 \quad (\text{V.3.9})$$

pois não há transferência de massa através da parede do reator.

Caso o perfil de concentração tenha uma variação radial muito grande, a Equação V.3.8 deve ser usada com muitos termos na série polinomial. Porém, se a variação for pequena, poucos termos são suficientes. Considerando-se três termos na Equação V.3.8 tem-se a Equação III.6.1 e utilizando-se a Equação V.3.9 procede-se com um rearranjo algébrico e obtém-se:

$$C_i(r, z) = a_i(z) + b_i(z) \cdot R^2 \cdot \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right] \quad (\text{V.3.10})$$

Na determinação do perfil de concentração $C_i(r, z)$ se faz necessário determinar as condições de contorno para os perfis axiais $a_i(z)$ e $b_i(z)$, respectivamente iguais a $b_{0,i}$ e $b_{1,i}$ da Equação V.3.8; por conseqüência, encontra-se as equações destes perfis axiais.

Modelo matemático do reator

Para a determinação das equações diferenciais e condições de contorno para a_i e b_i o reator é dividido em três secções: região de entrada, região de escoamento perfeitamente desenvolvido e região de saída.

Região de escoamento perfeitamente desenvolvido

Nesta região temos que $V_r = 0$, $V_z = V_z(r)$ e $\varepsilon_l = \varepsilon_l(r)$. O perfil de velocidade é considerado como sendo conhecido. Na determinação das equações diferenciais para a_i e b_i utiliza-se o método dos momentos:

$$\int_0^r 2\pi r [EDP] r^{2n} dr = 0$$

onde EDP é a Equação V.3.5. Como existem somente duas incógnitas a_i e b_i nesta equação usa-se $m = 0$ (balanço de massa global na secção transversal) e $m = 1$. A integração da Equação V.3.5 com $m=0$ obtém-se:

$$\frac{d}{dz} \left[\int_0^R v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot C_j \cdot 2\pi r \cdot dr \right] = \sum_j \omega_{ij} \cdot k_j \cdot \left[\int_0^R \varepsilon_1 \cdot C_j \cdot 2\pi r \cdot dr \right] + \frac{d^2}{dz^2} \left[\int_0^R (D_{\text{eff},z} \cdot \varepsilon_1 \cdot C_j \cdot 2\pi r \cdot dr) \right] \quad (\text{V.3.12})$$

onde o termo de dispersão radial é igual a zero. Isto ocorre após a aplicação das condições de contorno das Equações V.3.7 e V.3.9.

O segundo termo do lado direito da Equação V.3.12 é bem menor que os outros termos devido à velocidade de escoamento no regime turbulento e à taxa de reação. Assim, neste modelo é feita a aproximação de que esse termo pode ser desprezado. Observa-se que desprezar esta integral não é o mesmo que dizer que o termo de dispersão axial é desprezível em todos os pontos. Por exemplo, quando a velocidade axial V_z for igual a zero, o termo de dispersão axial é localmente não desprezível. Entretanto, o que se despreza é a integral deste termo sobre todo o intervalo. Portanto, este modelo é mais genérico do que simplesmente desprezar o termo de dispersão axial na Equação V.3.5.

A integração da Equação V.3.5 com $m=1$ resultam termos com dispersão radial dada por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left[\int_0^R v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot C_j \cdot 2\pi r^3 \cdot dr \right] &= \sum_j \omega_{ij} \cdot k_j \cdot \left[\int_0^R \varepsilon_1 \cdot C_j \cdot 2\pi r^3 \cdot dr \right] + \\ &\frac{d^2}{dz^2} \left[\int_0^R D_{\text{eff},z} \cdot \varepsilon_1 \cdot C_j \cdot 2\pi r^3 \cdot dr \right] - \int_0^R D_{\text{eff},r} \cdot \varepsilon_1 \cdot \left(\frac{\partial C_j}{\partial r} \right) \cdot 4\pi r^2 \cdot dr \end{aligned} \quad (\text{V.3.13})$$

O segundo termo do lado direito tem um coeficiente $D_{eff,z}$ que em princípio pode ser de mesma ordem de magnitude que $D_{eff,r}$. Entretanto, o comprimento do reator é bem maior que o diâmetro, de forma que o segundo termo como um todo pode ser menor que o terceiro termo. Neste modelo, o segundo termo do lado direito da Equação V.3.13 é desprezado, embora esta hipótese ainda precisa ser examinada melhor.

Substituindo-se a Equação V.3.10 nas Equações V.3.12 e V.3.13 chega-se ao sistema matemático dado por:

$$\alpha_{11} \cdot \frac{da_i}{dz} + \alpha_{12} \cdot \frac{db_i}{dz} = \sum_j \omega_{ij} \cdot k \cdot [\beta_{11} \cdot a_j + \beta_{12} \cdot b_j] \quad (V.3.14)$$

$$\alpha_{21} \cdot \frac{da_i}{dz} + \alpha_{22} \cdot \frac{db_i}{dz} = \sum_j \omega_{ij} \cdot k \cdot [\beta_{21} \cdot a_j + \beta_{22} \cdot b_j] - \gamma \cdot b_i \quad (V.3.15)$$

onde:

$$\alpha_{11} = \int_0^R v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \quad (V.3.16)$$

$$\alpha_{12} = \int_0^R v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot R^2 \cdot \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right] \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \quad (V.3.17)$$

$$\alpha_{21} = \int_0^R v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot 2 \cdot \pi \cdot r^3 \cdot dr \quad (V.3.18)$$

$$\alpha_{22} = \int_0^R v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot R^2 \cdot \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right] \cdot 2 \cdot \pi \cdot r^3 \cdot dr \quad (V.3.19)$$

$$\beta_{11} = \int_0^R \varepsilon_1 \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{V.3.20})$$

$$\beta_{12} = \int_0^R \varepsilon_1 \cdot R^2 \cdot \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right] \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{V.3.21})$$

$$\beta_{21} = \int_0^R \varepsilon_1 \cdot 2\pi \cdot r^3 \cdot dr \quad (\text{V.3.22})$$

$$\beta_{22} = \int_0^R \varepsilon_1 \cdot R^2 \cdot \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right] \cdot 2\pi \cdot r^3 \cdot dr \quad (\text{V.3.23})$$

$$\gamma = \int_0^R D_{\text{eff},r} \cdot \varepsilon_1 \cdot 2R \cdot \left[\left(\frac{r}{R} \right) - \left(\frac{r}{R} \right)^3 \right] \cdot 4\pi \cdot r^2 \cdot dr \quad (\text{V.3.24})$$

Reorganizando-se as Equações V.3.14 e V.3.15 obtém-se:

$$\frac{da_i}{dz} = \left(\frac{\beta_{11} \cdot \alpha_{22} - \beta_{21} \cdot \alpha_{12}}{\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21}} \right) \cdot k \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot a_j + \left(\frac{\beta_{12} \cdot \alpha_{22} - \beta_{22} \cdot \alpha_{12}}{\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21}} \right) \cdot k \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot b_j + \frac{\gamma \cdot \alpha_{12}}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} \cdot b_i \quad (\text{V.3.25})$$

$$\frac{db_i}{dz} = \left(\frac{\beta_{21} \cdot \alpha_{11} - \beta_{11} \cdot \alpha_{21}}{\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21}} \right) \cdot k \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot a_j + \left(\frac{\beta_{22} \cdot \alpha_{11} - \beta_{12} \cdot \alpha_{21}}{\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21}} \right) \cdot k \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot b_j - \frac{\gamma \cdot \alpha_{11}}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} \cdot b_i \quad (\text{V.3.26})$$

Região de entrada

Na região de entrada existem intensos gradientes de velocidade, $V_z=V_z(r,z)$ e $V_r=V_r(r,z)$. Integrando-se a Equação V.3.5 sobre todo o volume da região de entrada (utilizando-se a equação do balanço de massa da pseudo-fase lama e aplicando-se o teorema da divergência) e aplicando-se as Equações V.3.3 e V.3.4 obtém-se:

$$Q.C_i^e = \int_0^R 2.\pi.r \left[v_z.\varepsilon_l.C_i - D_{eff,z}.\varepsilon_l.\frac{\partial C_i}{\partial z} \right]_{z=0} .dr - \int_V \varepsilon_l.\sum_j \omega_{ij}.k.C_j .dV \quad (V.3.27)$$

Considera-se agora que o volume da região de entrada é pequeno quando comparado com o volume de todo o reator. Desta forma, o segundo termo do lado direito da Equação V.3.27 é desprezado. Nesta equação, $z = 0$ é o início da região de escoamento perfeitamente desenvolvido e C_i^e é um dado do problema. Portanto:

$$Q = \int_0^R 2.\pi.r.v_z.\varepsilon_l.dr \quad (V.3.28)$$

Observe-se que a Equação V.3.28 é igual à Equação V.3.16.

Da mesma forma, como feito antes para a região de escoamento perfeitamente desenvolvido, a integral do termo de dispersão axial é desprezada. Novamente, isso não é o mesmo que desprezar a dispersão axial em todos os pontos. Portanto:

$$Q.C_i^e = \int_0^R (v_z.\varepsilon_l.C_i)_{z=0} .2.\pi.r.dr \quad (V.3.29)$$

Observe-se que nenhuma outra hipótese é considerada sobre a região de entrada, por exemplo, o fluido não tem mistura perfeita.

Aplica-se a Equação V.3.10 sobre a Equação V.3.29 e obtém-se:

$$Q.a_i(0) + \alpha_{12}.b_i(0) = Q.C_i^e \quad (\text{V.3.30})$$

Esta equação é uma das condições de contorno para as equações diferenciais, Equações V.3.25 e V.3.26.

Região de saída

Assim como na região de entrada, nesta região também existem intensos gradientes de velocidade. Considera-se que o volume da região de saída é pequeno quando comparado com o volume de todo o reator. Desta forma, integrando-se a Equação V.3.5 sobre todo o volume da região de saída, e desprezando-se os termos de reação e aplicando-se o teorema da divergência, obtém-se:

$$Q.C_i^s = \int_0^R 2\pi.r \left[v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot C_i - D_{\text{eff},z} \cdot \varepsilon_1 \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} \right]_{z=H} .dr \quad (\text{V.3.31})$$

onde $z = H$ é o fim da região de escoamento perfeitamente desenvolvido. Entretanto, C_i^s não é conhecido. A Equação V.3.31 serve para calcular a concentração média de saída.

Da mesma forma, como feito antes na região de escoamento perfeitamente desenvolvido, a integral do termo de dispersão axial é desprezada. Novamente, isso não é o mesmo que desprezar a dispersão axial em todos os pontos. Portanto:

$$Q.C_i^s = \int_0^R (v_z \cdot \varepsilon_1 \cdot C_i)_{z=H} \cdot 2\pi.r .dr \quad (\text{V.3.32})$$

Observa-se que nenhuma outra hipótese é feita sobre a região de saída, por exemplo, não se considera mistura perfeita.

Aplica-se a Equação V.3.10 sobre a Equação V.3.32 e obtém-se:

$$Q.C_i^s = Q.a_i(H) + \alpha_{12}.b_i(H) \quad (V.3.33)$$

A Equação V.3.33 serve apenas para calcular a concentração de saída e não é utilizada como uma condição de contorno para o problema.

Todo o reator

A mesma análise feita para a região de entrada e estendida para a região de saída também é estendida para todo o reator. Integrando-se a Equação V.3.5 sobre todo o volume do reator (utilizando-se a equação do balanço de massa da fase lama e aplicando-se o teorema da divergência) e aplicando-se as Equações V.3.3 e V.3.4 obtém-se:

$$Q.C_i^e = Q.C_i^s - \int_V \varepsilon_j \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot k \cdot C_j \cdot dV \quad (V.3.34)$$

onde os termos envolvendo dispersão são identicamente nulos devido às condições de contorno da fluidodinâmica. Assim, a Equação V.3.34 é exata, ou seja, nenhuma aproximação é considerada. Além disso, V indica o volume de todo o reator.

Considerando-se que os volumes das regiões de entrada e de saída são bem menores que o volume da região de escoamento perfeitamente desenvolvido, a Equação V.3.34 simplifica-se para:

$$Q.C_i^e = Q.C_i^s - \int_0^H \int_0^R \varepsilon_j \cdot \sum_j \omega_{ij} \cdot k \cdot C_j \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \cdot dz \quad (V.3.35)$$

Aplicando-se o perfil de concentração da Equação V.3.10 sobre a Equação V.3.35 e utilizando-se a Equação V.3.33 obtém-se:

$$Q.C_i^e = [Q.a_i(H) + \alpha_{12}.b_i(H)] - k. \sum_j \omega_{ij} \left[\beta_{11} \cdot \int_0^H a_j \cdot dz + \beta_{12} \cdot \int_0^H b_j \cdot dz \right] \quad (V.3.36)$$

Essa equação não pode ser utilizada como uma das condições de contorno para as Equações V.3.25 e V.3.26, pois se constitui numa equação linearmente dependente, válida para a solução geral do sistema de equações. Então, como na saída do reator a concentração tem um perfil constante, a partir da Equação V.3.10 conclui-se que:

$$b_i \Big|_{z=H} = 0 \quad (V.3.37)$$

que é utilizada como condição de contorno em substituição à Equação V.3.36.

Obtendo as equações algébricas para $a_i(z)$ e $b_i(z)$

As equações algébricas para a_i e b_i são obtidas a partir do sistema matemático formado pelas Equações V.2.25 e V.2.26 e restrito às Equações V.3.30 e V.3.37. Os dados para simular numericamente este sistema são propostos por MOSBY et al. (1986). Eles propõem uma malha reacional com sete componentes ($i=7$) para o reator de hidroconversão. Inspeccionando-se o sistema matemático formado com os dados utilizados conclui-se que: o procedimento de resolução numérica pode ser conduzido de forma tanto analítica quanto numérica. Entretanto, analisando-se a matriz de incidência das variáveis, opta-se por técnica analítica, pois se mostra interessante, uma vez que o sistema formado pode ser desmembrado em três sistemas de menor dimensão.

Devido ao desmembramento do sistema matemático, as equações algébricas para a_i e b_i são obtidas em três etapas distintas. Na primeira etapa obtêm-se as equações analíticas para os três primeiros componentes da malha reacional, pois são independentes

dos demais. Na segunda obtém-se a equação analítica do quarto componente, este depende apenas das equações dos três componentes determinados na primeira etapa. Na última etapa obtêm-se as equações para os últimos três componentes da malha.

As técnicas de resolução das equações diferenciais que são apresentadas a seguir podem ser obtidas em BOYCE e DIPRIMA (1986) com todo o formalismo que requerem.

Primeira etapa: resolução analítica para $i = 1, 2$ e 3

Sobrepondo-se os dados da Tabela III.6.1 nas Equações V.3.25 e V.3.26 obtêm-se as seguintes equações diferenciais:

$$\frac{da_i}{dz} = \sigma_{11} \cdot a_i + \sigma_{12} \cdot b_i \quad (\text{V.3.38})$$

$$\frac{db_i}{dz} = \sigma_{21} \cdot a_i + \sigma_{22} \cdot b_i \quad (\text{V.3.39})$$

onde:

$$\sigma_{11} = \omega_{ij} \cdot k \cdot \frac{(\beta_{11} \cdot \alpha_{22} - \beta_{21} \cdot \alpha_{12})}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} \quad (\text{V.3.40})$$

$$\sigma_{12} = \omega_{ij} \cdot k \cdot \frac{(\beta_{12} \cdot \alpha_{22} - \beta_{22} \cdot \alpha_{12})}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} + \frac{\gamma \cdot \alpha_{12}}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} \quad (\text{V.3.41})$$

$$\sigma_{21} = \omega_{ij} \cdot k \cdot \frac{(\beta_{21} \cdot \alpha_{11} - \beta_{11} \cdot \alpha_{21})}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} \quad (\text{V.3.42})$$

$$\sigma_{22} = \omega_{ij} \cdot k \cdot \frac{(\beta_{22} \cdot \alpha_{11} - \beta_{12} \cdot \alpha_{21})}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} - \frac{\gamma \cdot \alpha_{11}}{(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})} \quad (\text{V.3.43})$$

Utilizando-se de métodos analíticos para um sistema com duas equações diferenciais ordinárias lineares com coeficientes constantes obtêm-se:

$$a_i = A_i \cdot \exp(\lambda_{1,i} \cdot z) + B_i \cdot \exp(\lambda_{2,i} \cdot z) \quad (\text{V.3.44})$$

$$b_i = A_i \cdot \frac{(\lambda_{1,i} - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} \cdot \exp(\lambda_{1,i} \cdot z) + B_i \cdot \frac{(\lambda_{2,i} - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} \cdot \exp(\lambda_{2,i} \cdot z) \quad (\text{V.3.45})$$

onde:

$$\lambda_{1,i} = \frac{1}{2} \left[(\sigma_{12} + \sigma_{22}) - \sqrt{(\sigma_{12} + \sigma_{22})^2 + 4 \cdot \sigma_{12} \cdot \sigma_{21}} \right] \quad (\text{V.3.46})$$

$$\lambda_{2,i} = \frac{1}{2} \left[(\sigma_{12} + \sigma_{22}) + \sqrt{(\sigma_{12} + \sigma_{22})^2 + 4 \cdot \sigma_{12} \cdot \sigma_{21}} \right] \quad (\text{V.3.47})$$

Os valores das constantes A_i e B_i são obtidos por meio do sistema de equações algébricas formado após a aplicação das condições de contorno. Assim, em $z = 0$, acopla-se a Equação V.3.44 na Equação V.3.30 e obtêm-se a Equação V.3.48. Em $z = H$, acopla-se a Equação V.3.45 na Equação V.3.37 e obtêm-se a Equação V.3.49.

$$Q \cdot (A_i + B_i) + \alpha_{12} \cdot \left[A_i \cdot \frac{(\lambda_{1,i} - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} + B_i \cdot \frac{(\lambda_{2,i} - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} \right] = Q \cdot C_i^e \quad (\text{V.3.48})$$

$$A_i \cdot \frac{(\lambda_{1,i} - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} \cdot \exp(\lambda_{1,i} \cdot H) + B_i \cdot \frac{(\lambda_{2,i} - \sigma_{11})}{\sigma_{12}} \cdot \exp(\lambda_{2,i} \cdot H) = 0 \quad (\text{V.3.49})$$

As integrais de a_i e b_i ($i=1,2,3$) são calculadas analiticamente a partir das Equações V.3.44 e V.3.45.

Segunda etapa: resolução analítica para $i = 4$

A derivação das equações analíticas $a_4(z)$ e $b_4(z)$ requer bastante esforço algébrico. Reescrevendo-se as Equações V.3.25 e V.3.26 para $i = 4$ obtêm-se:

$$\frac{da_4}{dz} = \text{Const1.} \sum_{j=1, \dots, 7} \omega_{4j} \cdot a_j + \text{Const2.} \sum_{j=1, \dots, 7} \omega_{4j} \cdot b_j + \text{Const3.} b_4 \quad (\text{V.3.50})$$

$$\frac{db_4}{dz} = \text{Const4.} \sum_{j=1, \dots, 7} \omega_{4j} \cdot a_j + \text{Const5.} \sum_{j=1, \dots, 7} \omega_{4j} \cdot b_j - \text{Const6.} b_4 \quad (\text{V.3.51})$$

Substituindo-se nas Equações V.3.50 e V.3.51 os dados da Tabela III.6.1 e as equações analíticas obtidas na primeira etapa para a_1, a_2, a_3, b_1, b_2 e b_3 , obtêm-se um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem não-homogêneo e com coeficientes constantes. A forma mais elementar de resolução deste sistema é por meio do processo direto de eliminação. A eliminação é uma metodologia bastante eficiente para sistema com duas ou três equações diferenciais. Portanto, a presente metodologia é aplicada para resolver o sistema das Equações V.3.50 e V.3.51.

A equação resultante da aplicação da metodologia de eliminação é uma equação diferencial ordinária de segunda ordem não-homogênea com coeficientes constantes. Para este tipo de equação a solução existe e é única, sendo que a solução analítica é obtida em duas etapas. Na primeira obtém-se a solução complementar (ou reduzida, ou homogênea) $y_{compl}(z)$ que é equivalente em assumir a equação como sendo homogênea. Após obter a solução complementar, na segunda obtém-se a solução particular $y_{part}(z)$ por um método geral. A solução analítica é dada pela soma aritmética simples entre a solução complementar e a particular, $y(z) = y_{compl}(z) + y_{part}(z)$. A solução particular pode ser obtida

através de três métodos: o método dos coeficientes indeterminados, o método da variação de parâmetros e o método da superposição. Opta-se por este último método.

Após a aplicação de toda a manipulação matemática descrita nos dois últimos parágrafos, obtêm-se as Equações V.3.52 e V.3.53 nas suas formas genéricas.

$$a_4 = \Phi(z) + \sum_{i=1}^3 [P_{0,i} \cdot \exp(\lambda_{1,i} \cdot z) + P_{1,i} \cdot \exp(\lambda_{2,i} \cdot z)] \quad (\text{V.3.52})$$

$$b_4 = \theta_0 \cdot \frac{d\Phi(z)}{dz} + \theta_1 \cdot \Phi(z) + \sum_{i=1}^3 [P_{2,i} \cdot \exp(\lambda_{1,i} \cdot z) + P_{3,i} \cdot \exp(\lambda_{2,i} \cdot z)] \quad (\text{V.3.53})$$

onde $P_{0,i}$, $P_{1,i}$, $P_{2,i}$, $P_{3,i}$, θ_0 e θ_1 são constantes obtidas após o agrupamento dos parâmetros que assumem valores fixos e a função $\Phi(z)$ é a parcela da solução analítica relativo à solução complementar do problema. A forma desta função varia de acordo com os coeficientes k_1 e k_2 da equação diferencial de segunda ordem em análise, ou seja, dada esta equação na sua forma geral:

$$\zeta'' + k_1 \cdot \zeta' + k_2 \cdot \zeta = 0$$

aplica-se o teorema de Báskara dado pela relação $(k_1)^2 - 4 \cdot k_1 \cdot k_2$. A função $\Phi(z)$ assume, de acordo com o valor desta correlação, uma das seguintes formas:

$$\Phi(z) = A_4 \cdot \exp(r_0 \cdot z) + B_4 \cdot \exp(r_1 \cdot z) \quad (\text{V.3.54})$$

$$\Phi(z) = A_4 \cdot \exp(r_2 \cdot z) + B_4 \cdot z \cdot \exp(r_2 \cdot z) \quad (\text{V.3.55})$$

$$\phi(z) = A_4 \cdot \exp(\theta_0 \cdot z) \cdot \cos(\theta_1 \cdot z) + B_4 \cdot \exp(\theta_0 \cdot z) \cdot \text{sen}(\theta_1 \cdot z) \quad (\text{V.3.56})$$

para os valores da relação de Báskara maior que, igual a e menor que zero, respectivamente. Os outros parâmetros das Equações V.3.54 até V.3.56 são dados por:

$$r_0 = \frac{-k_1 + \sqrt{(k_1)^2 - 4 \cdot 1 \cdot k_2}}{2} \quad ; \quad r_1 = \frac{-k_1 - \sqrt{(k_1)^2 - 4 \cdot 1 \cdot k_2}}{2}$$

$$r_2 = -\frac{k_1}{2} = -\frac{k_2}{2} \quad ; \quad \theta_0 = -\frac{k_1}{2} \quad ; \quad \theta_1 = \frac{\sqrt{|(k_1)^2 - 4 \cdot 1 \cdot k_2|}}{2}$$

e as constantes A_4 e B_4 são obtidas a partir da solução do sistema de equações algébricas formado pelas condições de contorno, Equações V.3.30 e V.3.37, e pela Equações V.3.52 e V.3.53. Portanto, as formas algébricas para a_4 e b_4 são obtidas analiticamente.

Terceira etapa: resolução analítica para $i = 5, 6$ e 7

Nesta última etapa, as equações diferenciais são obtidas após a substituição dos dados da Tabela III.6.1 e das formas analíticas a_i e b_i ($i=1,2,3,4$) nas Equações V.3.25 e V.3.26. Portanto:

$$\frac{da_i}{dz} = \Psi_1(z) + \text{Const}3 \cdot b_i \quad (\text{V.3.57})$$

$$\frac{db_i}{dz} = \Psi_2(z) - \text{Const}6 \cdot b_i \quad (\text{V.3.58})$$

sendo as funções Ψ_1 e Ψ_2 dependentes unicamente das formas analíticas a_i e b_i ($i=1,2,3,4$).

O sistema de equações diferenciais formado é então resolvido separadamente, ou seja, primeiro resolve-se a Equação V.3.58 para obter-se b_i . Então, substitui-se b_i na Equação V.3.57 para obter-se a_i . A Equação V.3.58 constitui uma equação diferencial ordinária linear de primeira ordem não-homogênea com coeficientes constantes, sendo resolvida por meio da aplicação do fator de integração. A forma genérica para obter-se b_i é dada por:

$$b_i = \Lambda_0(z) \Big|_{z=H} + \Lambda_1(z) + \sum_{l=1}^3 [P_{4,l} \cdot \exp(\lambda_{1,l} \cdot z) + P_{5,l} \cdot \exp(\lambda_{2,l} \cdot z)] \quad (\text{V.3.59})$$

onde a forma da função $\Lambda_l(z)$ é igual a função $\Phi(z)$, Equações V.3.54 até V.3.56, mas diferem-se apenas nos fatores pré-exponenciais. A função Λ_0 é uma constante que depende de Λ_l e da parcela representada pelo somatório da própria Equação V.3.59 quando aplicada em $z = H$. As constantes $P_{4,i}$ e $P_{5,i}$ possuem também parâmetros oriundos de $i = 4$.

A forma analítica para a_i é obtida após resolver a equação diferencial gerada da substituição da Equação V.3.59 na Equação V.3.57. A função a_i é dada por:

$$a_i = \text{Constante} - \text{Const}3 \cdot \Lambda_0 \cdot z + \sum_{l=1}^3 [P_{6,l} \cdot \exp(\lambda_{1,l} \cdot z) + P_{7,l} \cdot \exp(\lambda_{2,l} \cdot z)] \quad (\text{V.3.60})$$

onde o parâmetro *Constante* é soma entre o valor numérico da integração da Equação V.3.57 em $z = 0$ e restrito à Equação V.3.30, com o valor numérico da Equação V.3.59 em $z = 0$. A função Λ_0 é análoga à Equação V.3.59, mas difere-se novamente nos fatores pré-exponenciais. As constantes $P_{6,i}$ e $P_{7,i}$ possuem também parâmetros oriundos de $i = 4$.

As condições de contorno são consideradas ao longo do desenvolvimento das Equações V.3.59 e V.3.60. Portanto, as formas algébricas para a_i e b_i ($i=5,6,7$) são obtidas analiticamente.

V.4 – EQUIVALÊNCIA ENTRE O MODELO DIFERENCIAL E O INTEGRAL

A Equação V.1.1 é estacionária em relação à variável perfil radial de velocidade axial, V_{sl} e V_g . Isto gera duas formas para a equação de Euler-Lagrange e dadas por:

$$\frac{\partial I}{\partial V_{sl}(r)} - \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial I}{\partial V'_{sl}(r)} \right) = 0 \quad (\text{V.4.1})$$

$$\frac{\partial I}{\partial V_g(r)} - \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial I}{\partial V'_g(r)} \right) = 0 \quad (\text{V.4.2})$$

que, após aplicadas na Equação V.1.1, fornecem as formas diferenciais dadas pelas Equações III.4.1 e III.4.2, respectivamente. Isto mostra que existe uma formulação variacional; por conseqüência, prova-se a sua equivalência com o modelo diferencial.

V.5 – EQUIVALÊNCIA ENTRE O MODELO INTEGRAL E A OTIMIZAÇÃO

A Equação V.1.1 é definida como a função objetiva na programação não-linear. Então, resolve-se esta equação na forma do problema de otimização da Equação IV.3.1, considerando-se a Equação III.4.3 como equação de restrição $g_k(x)$. Isto requer o uso de multiplicadores de Lagrange λ_k e conduz a equação de Euler-Lagrange para a forma dada pela Equação A.1.3.1. Para isto, deve-se mostrar que a integral é um problema de mínimo (ou máximo) e não apenas estacionária.

As variáveis calculadas na otimização incluem, além das variáveis perfis radiais de velocidades axiais, as variáveis λ_k . Isto requer uma modificação do funcional dado pela Equação V.1.1, pois o termo que contém a variável queda de pressão é retirado do funcional, já que este corresponde aos multiplicadores de Lagrange. Após esta modificação do funcional obtém-se:

$$I = \int_0^R \left\{ g(\rho_{sl} \cdot \psi_{sl} + \rho_g \cdot \psi_g) + \rho_{sl} \varepsilon_g g \psi_{sl-g} + \frac{C_w}{2} \varepsilon_g \varepsilon_{sl} \psi_{sl-g}^2 + \frac{1}{2} (\Omega_{sl} + \Omega_g) \right\} 2\pi r dr \quad (V.5.1)$$

mostrado por SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2000). Entretanto, quando comparadas as equações obtidas após a aplicação da Equação A.1.3.1 na Equação V.5.1, mostra-se a existência de uma interdependência entre os multiplicadores de Lagrange.

Interdependência dos multiplicadores de Lagrange

A inter-relação é obtida com a aplicação da Equação A.1.3.1 na Equação V.5.1 e por comparação com as Equações III.4.1 e III.4.2. Assim, verifica-se que:

$$\frac{dP}{dz} = \lambda_{sl} \cdot \rho_{sl} \quad (V.5.2)$$

$$\frac{dP}{dz} = \lambda_g \cdot \rho_g \quad (V.5.3)$$

Este problema é resolvido após considerar um parâmetro como sendo ajustado externamente ao processo de otimização. Por exemplo, sendo a variável fração volumétrica do gás no centro do reator $\varepsilon_g|_{r=0}$, dada pela Equação III.4.6, como o parâmetro a ser ajustado, de forma iterativa ajusta-se este parâmetro e calcula-se os multiplicadores por otimização até que as Equações V.5.2 e V.5.3 forneçam resultados numéricos iguais.

V.6 – OBTENDO UMA EXPRESSÃO ANALÍTICA PARA A QUEDA DE PRESSÃO

A obtenção de uma expressão algébrica para a variável queda de pressão, a partir das Equações III.4.1 e III.4.2, mostra-se interessante para efeito comparativo com o resultado a ser obtido por meio das Equações V.5.2 e V.5.3.

As equações das leis de conservação do momento, Equações III.4.1. e III.4.2, quando somadas e integradas em r no intervalo $[0,R]$ e sobre as condições de contorno $\varepsilon_g|_{r=R} = 0$ e $\varepsilon_{sl}|_{r=R} = 1$, fornecem a seguinte expressão para a variável queda de pressão:

$$-\frac{dP}{dz} = g \cdot (\rho_{sl} \bar{\varepsilon}_{sl} + \rho_g \bar{\varepsilon}_g) - \frac{2}{R} \left[\mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{dV_{sl}}{dr} \right]_{r=R} \quad (V.6.1)$$

mostrada por SANTOS JR. e GUIARDELLO (2000). Observe-se que a Equação V.6.1 é igual a Equação V.2.2 dada para a variável tensão de parede. O resultado numérico obtido para a variável queda de pressão nas Equações V.5.2, V.5.3 e V.6.1 devem ser iguais.

V.7 – AJUSTE DOS PERFIS RADIAIS DE VELOCIDADE AXIAL

Devido ao grau de liberdade do modelo matemático é impossível obter o fechamento dos balanços de massa das fases lama e gás de forma simultânea, salvo se procedido com algum ajuste externo ou se aplicado algum método de otimização.

Na modelagem variacional assume-se que a variável fração volumétrica do gás no centro radial do reator é obtida por correlação empírica dada por CHEN et al. (1995), pois os estudos comparativos serão realizados com os dados obtidos por estes autores.

Assim, propõe-se ajustar externamente a variável fração volumétrica do gás de forma que os balanços sejam verificados.

V.8 – OTIMIZAÇÃO DO PERFIL RADIAL DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA

Explorando o aspecto implícito de otimização do cálculo das variações, ajusta-se a variável perfil radial de fração volumétrica de gás juntamente com os perfis radiais de velocidade axial, como na Equação V.2. Isto gera uma condição semelhante quando usado a Equação V.1, ou seja, o funcional é também minimizado em relação a variável ε_g .

Neste ponto verifica-se uma diferença entre a simulação de um sistema diferencial e de um sistema integral. No sistema diferencial faz-se necessário usar um programa de otimização acoplado à técnica de resolução diferencial para ajustar o perfil radial de fração volumétrica de gás juntamente aos perfis radiais velocidade axial, o que não é necessário no sistema integral.

Seguindo a descrição adotada no Tópico V.5, propõe-se o perfil radial de fração volumétrica de gás descrito na forma das Equações IV.4.1 e IV.4.3 e para os perfis radiais de velocidade axial são propostos na forma das Equações IV.4.1 e IV.4.2.

V.9 – CARACTERIZAÇÃO DO PONTO DE EXTREMO

As formulações variacionais dadas pelas Equações V.1.1, V.2.4 e V.2.5 devem estar completamente caracterizadas quanto aos pontos de extremo para a correta exploração dos aspectos de otimização associados ao cálculo das variações. A caracterização constitui na aplicação dos teoremas fundamentais de Euler-Lagrange, Legendre, Jacobi e Weierstrass, bem como da aplicação das derivações destes teoremas. Estes teoremas são rigorosamente expostos no Anexo-A – Tópico A.5. Para o modelo matemático unidimensional proposto, os teoremas assumem as seguintes formas:

$$\frac{df}{dV_k} - \frac{d}{dx} \left[\frac{df}{dV'_k} \right] = 0 \quad (\text{V.9.1})$$

$$\begin{vmatrix} f_{V'_i V'_i} & f_{V'_i V'_g} \\ f_{V'_g V'_i} & f_{V'_g V'_g} \end{vmatrix} \geq 0 \quad (\text{V.9.2})$$

$$\frac{\partial V_k(x, C_{k,l})}{\partial C_{k,l}} = 0 \quad \text{para } x = x_0 \text{ e em } \forall x \in (x_0, x_f) \quad (\text{V.9.3})$$

$$E(x, V_k, V'_k, p'_k) \geq 0 \quad (\text{V.9.4})$$

V.10 – ANÁLISE ESTATÍSTICA

O modelo variacional utilizado é validado com os dados de CHEN et al. (1995). Estes autores assumem um perfil radial parabólico, com apenas uma constante de ajuste, para a variável fração volumétrica de gás, como mostrado na Equação III.4.6. Assim, faz-se necessário verificar se esta forma de perfil é satisfatório na descrição dos dados para esta variável. Tal verificação dá-se por meio de análise estatística entre os dados obtidos e a equação de balanço de massa das fases. Portanto, utiliza-se a ferramenta estatística dada pela Equação IV.5.1. Na regressão desta equação com $n = 1$ e $f(x) = x$ obtém-se:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y \cdot x \cdot dx = \frac{h}{2} \times \left[y_i \cdot x_i + y_{i+1} \cdot x_{i+1} + \frac{h}{3} \cdot (y_i - y_{i+1}) \right] \quad (\text{V.10.1})$$

A manipulação da Equação IV.5.1 para $n = 2$ e $n = 3$ é similar ao linear, $n = 1$. Portanto, não serão demonstradas as suas formas como a Equação V.10.1. A aplicação da Equação V.10.1 é feita sobre as equações dos balanços de massa. Assim, reescrevendo-se a Equação III.4.3 com o perfil radial de fração parabólico obtém-se:

$$\frac{U_{sl} \cdot A}{2 \cdot \pi} = \int_0^R V_{sl} \cdot r \cdot dr - \int_0^R V_{sl} \cdot \varepsilon_g \Big|_{r=0} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] r \cdot dr \quad (\text{V.10.2})$$

para a fase lama e obtém-se:

$$\frac{U_g \cdot A}{2\pi} = \int_0^R V_g \cdot \varepsilon_g \Big|_{r=0} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] r \cdot dr \quad (\text{V.10.3})$$

para a fase gás. Por análise comparativa das Equações V.10.2 e V.10.3 com a Equação V.10.1, justifica-se a utilização de $f(x) = x$ na correlação de regressão estatística.

Capítulo VI

RESULTADOS

Para um melhor entendimento, os resultados obtidos com as simulações numéricas são expostos na seqüência mostrada pelos seguintes itens:

- i) Comparação entre as soluções numérica e analítica para o modelo variacional;
Tem-se por objetivo analisar a precisão e exatidão da quadratura de Gauss como técnica de integração numérica para resolver o modelo variacional. Estuda-se também as possíveis alterações que podem ocorrer com os resultados numéricos quando utilizados diferentes tipos de funções dependentes para uma mesma variável de processo em análise.
- ii) Comparação numérica entre os modelos diferencial e variacional;
Mostra-se a equivalência numérica entre estes dois diferentes modelos. Tal comparação é mostrada por SANTOS JR. e GUIRARDELLO (1999).
- iii) Comparação numérica entre o modelo variacional e a otimização;
Mostrar-se também a equivalência numérica entre estes dois diferentes modelos. Tal comparação é mostrada por SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2000). Avalia-se a interdependência entre os multiplicadores de Lagrange quando utilizadas as equações de balanço de massa da fase gás e da pseudo-fase lama.
- iv) Aplicação do efeito de parede na fluidodinâmica usando o modelo variacional;
Valida-se o modelo variacional quando utilizada a condição de contorno dada pela correlação de Prandtl. Tal comparação é mostrada por SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2001).

- v) Estudo de uma malha de reações químicas acoplada ao modelo variacional;
Obtêm-se os perfis de concentração para os vários componentes de uma malha reacional quando usado o modelo variacional.
- vi) Estudos matemáticos para:
- Ajustar os perfis radiais das variáveis velocidade axial;
 - Otimizar o perfil radial da variável fração volumétrica de gás;
 - Comparar os dados experimentais com os obtidos do modelo variacional;
 - Avaliar a influência da densidade do líquido no perfil da variável velocidade;
 - Checar os dados experimentais por meio de uma análise estatística;
 - Caracterizar o ponto de extremo do modelo variacional;
 - Avaliar problema de instabilidade numérica da função dependente;
 - Avaliar a sensibilidade do modelo variacional;
 - Obter algumas relações para a fluidodinâmica no reator em questão;

Ressalta-se que os itens iv) e v) são estudados somente do ponto de vista do modelo variacional. Entretanto, pode-se também usar o ponto de vista da otimização, pois estes pontos de vista são equivalentes numericamente.

Para efeito comparativo, os resultados numéricos são avaliados em cinco condições operacionais distintas: quatro situações, *Caso-1* ao *Caso-4*, são iguais as adotadas por CHEN et al. (1995) e uma situação, *Caso-5*, é igual a adotada por CARBONELL e GUIRARDELLO (1999). Os quatro primeiros casos consideram um sistema constituído por água, esferas de vidro e ar; portanto, um reator sem reação onde avalia-se apenas os perfis radiais das variáveis velocidades axiais. Para o *Caso-5* é considerado um reator de hidroconversão, constituído pelas fases óleo, catalisador e gás, e envolve, além das análises das variáveis velocidades, também as concentrações químicas.

Os dados *Lama-1*, *Lama-2*, *Gás-1* e *Gás-2* na Tabela III.7.1 são obtidos a partir das condições operacionais *Caso-1*, *Caso-2*, *Caso-3* e *Caso-4* na Tabela VI.1, respectivamente. Os dados para verificar o resultado da simulação do *Caso-5* são extraídos da simulação numérica mostrada por CARBONELL e GUIRARDELLO (1999).

Tabela VI.1: Dados operacionais e algumas propriedades físicas dos fluidos.

<i>Parâmetro</i>	<i>Caso-1</i>	<i>Caso-2</i>	<i>Caso-3</i>	<i>Caso-4</i>	<i>Caso-5</i>
U_l	0,0348	0,0044	0,0348	0,0348	0,002
U_g	0,0283	0,0708	0,0531	0,12	0,02
ρ_l	1000,0	1000,0	1000,0	1000,0	641,03
ρ_g	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
ρ_s	2292,4	2361,8	2292,4	2292,4	2340,0
$\bar{\varepsilon}_s$	0,0667	0,0502	0,0667	0,0667	0,15
μ_l	9,0e-4	9,0e-4	9,0e-4	9,0e-4	3,18e-4
μ_g	2,0e-5	2,0e-5	2,0e-5	2,0e-5	2,0e-5
ϕ_p	5,3e-4	6,7e-4	5,3e-4	5,3e-4	1,0e-4
ϕ_r	0,285	0,285	0,285	0,285	0,057

Na primeira etapa dada pela Equação V.1, apenas os perfis radiais das variáveis velocidade são ajustados com polinômio comum usando o método de Ritz-Rayleigh. Assim, devido ao problema de instabilidade numérica, existe a necessidade de optar por um polinômio descrito em função de arcos trigonométricos, como o polinômio Tchebyshev.

Na segunda etapa dada pela Equação V.2, para avaliar também o perfil radial da variável fração volumétrica, a série é ajustada por meio de um polinômio comum. Entretanto, durante o processo de otimização do perfil desta variável, observa-se que, dependendo da estimativa inicial, pode obter o valor da variável fração volumétrica fora do intervalo dado pelos limites $[0,1]$, o que fisicamente é impossível. Afim de não impor mais restrições ao problema, o que aumenta a sua dimensão, opta-se em descrever a série do perfil radial da variável fração volumétrica em função de uma secante hiperbólica, pois, de forma natural, esta função mantém o valor numérico entre os limites supracitados.

VI.1 – COMPARAÇÃO ENTRE AS SOLUÇÕES ANALÍTICA E NUMÉRICA

Com o propósito de verificar a precisão e a exatidão da técnica de integração numérica, dada pela quadratura de Gauss, para quantificar o modelo variacional, mostra-se uma comparação entre o resultado numérico e analítico obtido a partir do modelo fluidodinâmico. Adicionalmente, compara-se as várias soluções numéricas obtidas para este modelo quando utilizadas diferentes funções dependentes para uma mesma variável dependente, conforme o Tópico A.6 do Anexo-A.

VI.1.1 – Precisão e exatidão da quadratura de Gauss

A metodologia consiste em substituir as variáveis V_{sl} e V_g da Equação V.1.1 pelo perfil da Equação IV.4.1, resultando num modelo variacional descrito apenas os parâmetros desconhecidos $C_{j,l}$. A variável queda de pressão neste modelo é também considerada como um parâmetro à determinar, juntamente com $C_{j,l}$. Aplicando-se a Equação A.6.2 neste modelo obtém-se um sistema com $2*(l-1)$ equações algébricas e $2*(l-1)+1$ variáveis. Os parâmetros $C_{sl,o}$ e $C_{g,o}$ são obtidos da condição de contorno da Equação III.4.11, ou seja,

$C_{j,o} = -\sum_{l=1}^{\infty} C_{j,l}$. Para fechar o grau de liberdade das variáveis do sistema, utiliza-se a

Equação III.4.3 com $k = sl$, ou seja, usa-se apenas o balanço de massa da fase lama. A utilização apenas deste balanço é justificado pela sua maior importância no reator em análise e também por constituir a fase contínua; enquanto que, a utilização do balanço de massa da fase gás gera um perfil fisicamente inconsistentes. Essa justificada é mostrada por SANTOS JR. e GUIARDELLO (1999). O uso da equação de balanço de massa da fase lama é também justificado por CARBONELL e GUIARDELLO (1997).

As simulações numéricas deste tópico referem-se ao *Caso-1* da Tabela VI.1. Nestas simulações o parâmetro $\varepsilon_g|_{r=0}$ da Equação III.4.6 é considerado igual a 0,10814434, pois utilizando-se este valor o balanço de massa de fase gás é também verificado de forma indireta. A forma de obter este valor numérico é mostrado no Tópico VI.6.1. Adicionalmente, este valor é também usado por SANTOS JR. e GUIARDELLO (2000).

Devido à extensão algébrica da manipulação do modelo variacional e do tempo gasto na verificação dos resultados analíticos, aplica-se um perfil da Equação IV.4.1 com cinco termos no somatório ($l = 0, \dots, 4$). O perfil com menos de três termos no somatório não são capazes de representar o refluxo interno da fase lama e o perfil com mais de quatro termos já apresentam resultados satisfatórios.

Na Tabela VI.1.1 é listado os valores numéricos e analíticos de $C_{j,l}$, obtidos para os perfis radiais das variáveis velocidades axiais das fases envolvidas, quando empregado a Equação IV.4.1. Observa-se a boa concordância entre as soluções numérica e analítica.

Tabela VI.1.1: Constantes $C_{j,l}$ da Equação IV.4.1 para os perfis de velocidades.

Parâmetro	Perfil radial de V_{sl} ($j=sl$)		Perfil radial de V_g ($j=g$)	
	Numérico	Analítico	Numérico	Analítico
$C_{j,0}$	2,1901e-1	2,1901e-1	6,5492e-1	6,5493e-1
$C_{j,1}$	-7,9633e-1	-7,9634e-1	-5,3223e-2	-5,3225e-2
$C_{j,2}$	1,5867	1,5868	-3,1704	-3,1704
$C_{j,3}$	-2,1770	-2,1770	7,3003	7,3004
$C_{j,4}$	1,1676	1,1676	-4,7316	-4,7317

Os valores da variável queda de pressão nas simulações analítica e numérica são idênticos e iguais a -10047,5. A Figura VI.1.1 mostra as curvas obtidas a partir dos perfis com os valores da Tabela VI.1.1.

Num outro estudo comparativo entre as soluções numérica e analítica, observa-se que a diferença absoluta entre um mesmo valor da Tabela VI.1.1 apresenta a ordem de grandeza -16 , ou seja, o desvio numérico tem a menor ordem possível quando utilizado a dupla precisão (16 dígitos significativos) do compilador FORTRAN PowerStation 4.0 da Microsoft Developer Studio 1994-95. Quando comparado esta ordem com os valores desta tabela, a diferença relativa é praticamente zero, indicando-se que os perfis se sobrepõem completamente. Isto mostra o quão satisfatório é a técnica de integração numérica utilizada.

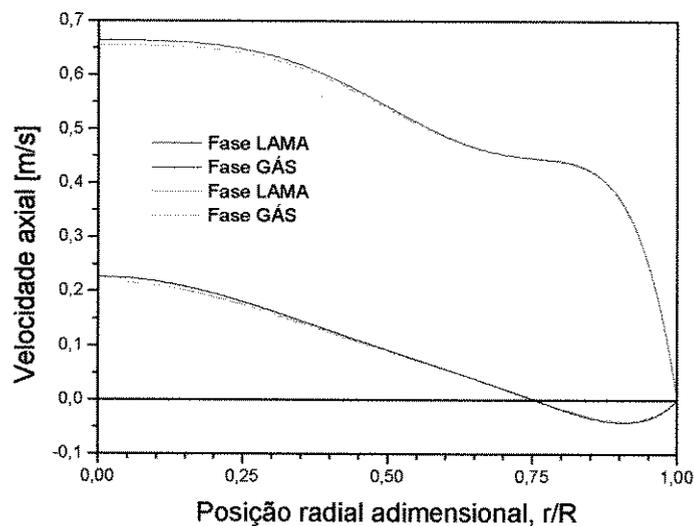


Figura VI.1.1: Comparação dos perfis da Tabela VI.1.1.

Na Figura VI.1.1 as linhas contínuas representam os perfis obtidos por integração numérica e as linhas pontilhadas representam os perfis obtidos por solução analítica. Os pequenos desvios observados nesta figura tem origem da precisão requerida e dos erros de arredondamento na solução numérica.

VI.1.2 – Precisão dos resultados para diferentes funções dependentes

Com o objetivo de explorar as características matemáticas de diferentes tipos de funções dependentes y_j para uma mesma variável em análise no cálculo das variações, deve-se previamente provar a equivalência numérica dos resultados obtidos para cada tipo de função proposta. Assim, os resultados obtidos no Tópico VI.1.1 com a Equação IV.4.1 são agora comparados com os resultados obtidos quando utilizado a Equação IV.4.2. Para diferentes funções y_j , os resultados numéricos são idênticos quando estas funções são expressadas por meio de séries matemáticas, como comenta o Anexo-A no Tópico A.6 (*Método de Rayleigh-Ritz*). Então, usando-se agora a Equação IV.4.2, a solução numérica fornece para as constantes $C_{j,l}$ os valores mostrados na Tabela VI.1.2.

Tabela VI.1.2: Constantes $C_{j,l}$ da Equação IV.4.2 para os perfis de velocidades.

Parâmetro	Perfil de V_{sl}	Perfil de V_g
$C_{j,0}$	5,4822e-2	4,2696e-1
$C_{j,1}$	-1,1445e-1	-2,5987e-1
$C_{j,2}$	4,5562e-2	-6,2535e-2
$C_{j,3}$	4,9417e-3	-6,7593e-2
$C_{j,4}$	9,1216e-3	-3,6966e-2

O valor da variável queda de pressão é novamente igual a -10047,5. Entretanto, a diferença observada entre os valores $C_{j,l}$ para um mesmo perfil nas Tabelas VI.1.1 e VI.1.2 é justificada pela diferença entre as formas das funções dependentes. Conforme a Figura VI.1.2, as soluções numéricas dos perfis se sobrepõem quando usado a função dependente da Equação IV.4.1 (linhas contínuas) ou da Equação IV.4.2 (linhas pontilhadas).

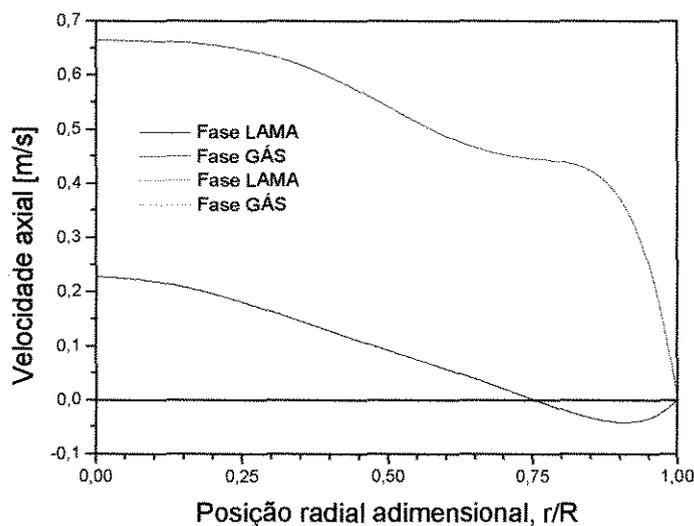


Figura VI.1.2: Comparação dos perfis das Tabelas VI.1.1 e VI.1.2.

Ressalta-se que não se utiliza a Equação IV.4.3 para descrever os perfis radiais das variáveis velocidades, pois este perfil não é capaz de representar a recirculação interna do fluxo da fase lama. Matematicamente, esta equação fornece somente valores no limite $[0,1]$, o que torna impossível prever os valores negativos para a variável velocidade.

VI.2 – COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS DIFERENCIAL E VARIACIONAL

O objetivo deste tópico é provar a equivalência numérica entre os modelos diferencial e variacional que são mostrados nos Tópicos III.4 e V.1, respectivamente. Assim, mostra-se a seguir os resultados numéricos obtidos das simulações deste modelos. Verifica-se que estes modelos fornecem resultados numéricos bastante próximos, e que inclusive são mostrados por SANTOS JR. e GUIRARDELLO (1999). Usando-se da Equação IV.4.1, a Figura VI.2.1 resulta da simulação do *Caso-2* da Tabela VI.1 e segundo CHEN et al. (1995) este caso representa um escoamento turbulento (heterogêneo). Nas Figuras VI.2.1 e VI.2.2 o modelo diferencial é indicado pela linha pontilhada e o modelo variacional é indicado pela linha contínua.

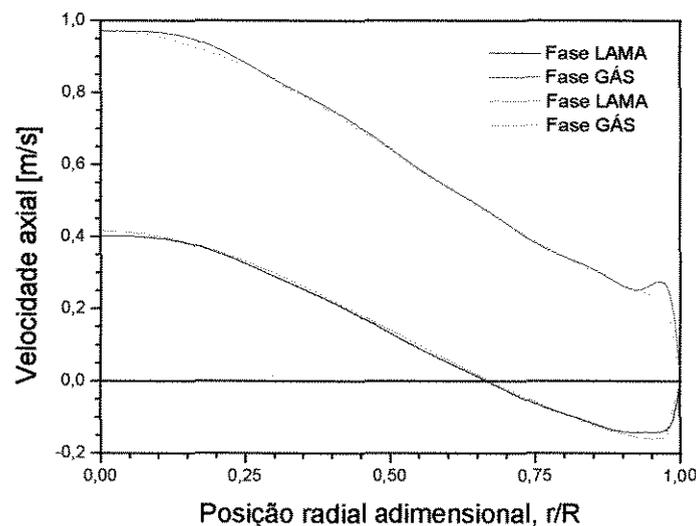


Figura VI.2.1: Equivalência entre os modelos diferencial e variacional – *Caso-2*.

Na Figura VI.2.1, a Equação IV.4.1 tem doze termos na série ($l = 0, \dots, 11$) e a quadratura de Gauss utiliza quarenta raízes para integrar o modelo variacional.

Usando-se da Equação IV.4.2, a Figura VI.2.2 resulta da simulação do *Caso-3* da Tabela VI.1 e segundo CHEN et al. (1995) este caso tem escoamento de transição.

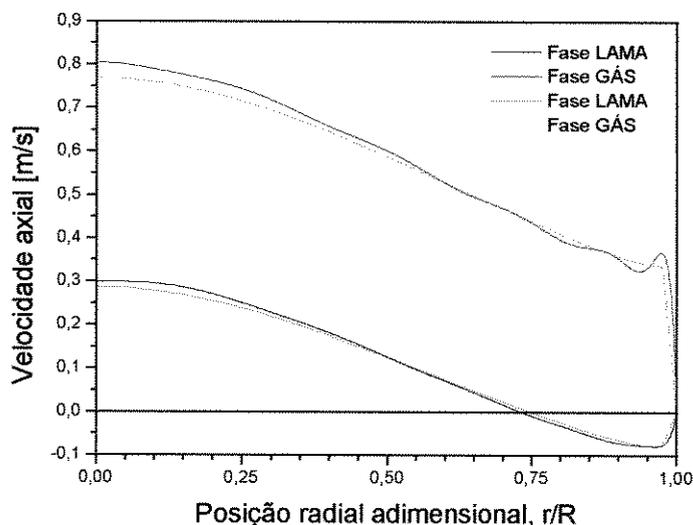


Figura VI.2.2: Equivalência entre os modelos diferencial e variacional – *Caso-3*.

Na Figura VI.2.2, a Equação IV.4.2 tem doze termos na série ($l = 0, \dots, 11$) e a quadratura de Gauss utiliza quarenta raízes para integrar o modelo variacional.

Observa-se para o *Caso-1* da Tabela VI.1 que as simulações com uma vazão superficial de gás (U_g) aproximadamente oito vezes ou mais maior que a vazão superficial do líquido (U_l), o modelo diferencial não converge. Entretanto, o modelo variacional converge sempre para os casos em que o modelo diferencial não apresenta convergência.

Apesar de não ser mostrado, os resultados numéricos obtidos para os perfis radiais de viscosidade da fase lama são quantitativamente iguais aos mostrados por CARBONELL (1996) e qualitativamente iguais aos mostrados por MENZEL et al. (1990).

Os perfis radiais da variável velocidade axial da fase gás mostrados nas Figuras VI.2.1 e VI.2.2 apresentam uma ligeira oscilação na região próxima à parede. Este fato se deve essencialmente a problema numérico.

Ressalta-se que as diferenças numéricas observadas nos perfis radiais das Figuras VI.2.1 e VI.2.2 são exclusivamente devido às precisões adotadas entre os modelos diferencial e variacional. Os perfis radiais são todos idênticos quando assumido precisões elevadas do ponto de vista da engenharia.

VI.3 – COMPARAÇÃO ENTRE O MODELO VARIACIONAL E A OTIMIZAÇÃO

Prova-se a seguir a equivalência numérica da solução do modelo variacional da Equação V.1.1 quando resolvido por dois caminhos distintos: Método de Rayleigh-Ritz (linha contínua) e otimização (linha pontilhada). O primeiro caminho é igual ao procedimento dos Tópicos VI.1 e VI.2. O segundo consiste em resolver o modelo variacional como o problema de otimização da Equação IV.3.1, sendo que esta equação é a função objetivo e a Equação III.4.3, dada apenas para $k=sl$, é a equação de restrição. As Figuras VI.3.1 e VI.3.2 mostram os resultados das simulações destes dois caminhos.

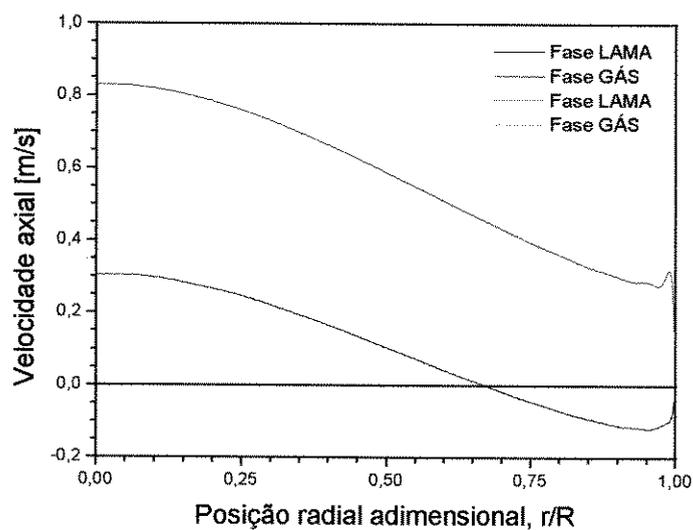


Figura VI.3.1: Equivalência numérica para a simulação do *Caso-2*.

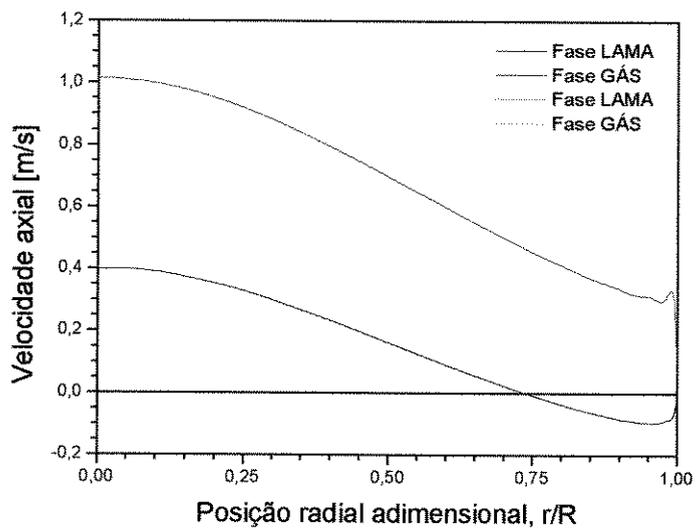


Figura VI.3.2: Equivalência numérica para a simulação do *Caso-4*.

Os resultados das Figuras VI.3.1 e VI.3.2 são apresentados por SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2000). Nestas figuras a Equação IV.4.2 usa vinte termos na série e a quadratura de Gauss utiliza oitenta raízes para a integração do modelo variacional. Para que o fechamento do balanço de massa da fase gás também seja verificado, assume-se que o valor de $\varepsilon_s|_{r=0}$ da Equação III.4.6 é igual a 0,25388576 e 0,36351692, respectivamente.

A precisão e a exatidão dos resultados entre os dois diferentes caminhos é tal que as curvas sobrepõem-se completamente. Por tratar-se de técnicas numéricas, a simulação possui erros de arredondamento e, dependendo da precisão requerida, os perfis podem variar um pouco, mas mesmo assim ainda mantêm a boa concordância entre os resultados. Estas variações são maiores quando as equações analíticas para as derivadas da Equação V.1.1 em relação aos parâmetros $C_{j,l}$ das funções dependentes não são informados. Os resultados mantêm a concordância mesmo quando as derivadas numéricas são geradas pelo próprio programa de otimização utilizado.

VI.3.1 – Inter-relação dos multiplicadores de Lagrange

Embora os perfis radiais das variáveis velocidades axiais sejam iguais entre o método variacional e a otimização, os valores obtidos para a variável queda de pressão não são iguais, o que conduz à formulação do Tópico V.5. Nas Tabelas VI.3.1.1 até VI.3.1.4 estão reportados, para *Caso-01* ao *Caso-04*, os resultados da resolução numérica da Equação V.1.1 por meio do método variacional e da otimização com e sem a exploração da inter-relação dos multiplicadores de Lagrange. Nestas simulações consideram-se os balanços de massa das fases e assumem-se o valor da variável queda de pressão dado pela Equação V.6.1. Estes dados provam a inter-relação dos multiplicadores.

Tabela VI.3.1.1: Caracterização da inter-relação para o *Caso-01*.

Variável analisada	Formulação Variacional	Método de otimização	
		Equação V.1.1	Equação V.5.1
$\bar{\varepsilon}_g$	5,2397e-2	5,2397e-2	5,2397e-2
(dP/dz)	-10.099,8	-22,93	-10.099,8
$(dP/dz) - Eq. V.6.1$	-10.135,9	-10.135,9	-10.135,9
Função objetivo	-----	25,9167	25,9647

Tabela VI.3.1.2: Caracterização da inter-relação para o *Caso-02*.

Variável analisada	Formulação Variacional	Método de otimização	
		Equação V.1.1	Equação V.5.1
$\bar{\varepsilon}_g$	1,2527e-1	1,2527e-1	1,2527e-1
(dP/dz)	-9.126,8	-42,40	-9.126,8
$(dP/dz) - Eq. V.6.1$	-9.244,8	-9.244,8	-9.244,8
Função objetivo	-----	3,4009	3,5030

Tabela VI.3.1.3: Caracterização da inter-relação para o *Caso-03*.

Variável analisada	Formulação Variacional	Método de otimização	
		Equação V.1.1	Equação V.5.1
$\bar{\varepsilon}_g$	9,0530e-2	9,0530e-2	9,0530e-2
(dP/dz)	-9.690,9	-38,79	-9.690,9
$(dP/dz) - Eq. V.6.1$	-9.760,9	-9.760,9	-9.760,9
Função objetivo	-----	26,3614	26,4735

Tabela VI.3.1.4: Caracterização da inter-relação para o *Caso-04*.

Variável analisada	Formulação Variacional	Método de otimização	
		Equação V.1.1	Equação V.5.1
$\bar{\varepsilon}_g$	1,7850e-1	1,7850e-1	1,7850e-1
(dP/dz)	-8.753,9	-123,19	-8.753,9
$(dP/dz) - Eq. V.6.1$	-8.898,8	-8.898,8	-8.898,8
Função objetivo	-----	24,5244	25,1448

Na linha das tabelas anteriores dada pela variável queda de pressão obtida pela Equação V.6.1, observa-se a igualdade em todas as colunas, o que prova a igualdade entre o perfil radial da variável velocidade da fase lama, já que esta variável aparece explicitamente nesta equação; por consequência, a igualdade do perfil do gás é também provada. As pequenas variações no valor da função objetivo, para um mesmo caso, não ocasionam alterações destes perfis.

O desvio relativo percentual obtido entre os valores da variável queda de pressão nas Tabelas VI.3.1.1 até VI.3.1.4, quando utilizado as Equações V.5.1 e V.6.1, são iguais a 0,36%, 1,28%, 0,72% e 1,63%, respectivamente. Estes desvios fornecem a idéia de que os resultados simulados são satisfatórios. Adotando-se um perfil radial com elevado número de termos na série, os desvios apresentados tendem para zero; entretanto, ocasiona-se um maior esforço e tempo computacional, sem ganho para os resultados.

VI.4 – ANÁLISE DO EFEITO DE PAREDE

A análise do efeito de parede tem como principal objetivo descrever de forma mais satisfatória dos dados dos perfis radiais de velocidade na região próxima à parede interna do reator. A metodologia de resolução da formulação variacional com análise do efeito de parede é análoga ao apresentado no Tópico VI.1. Entretanto, neste tópico utiliza-se quinze termos ($l = 14$) na série polinomial da função dependente e a quadratura de Gauss utiliza sessenta e quatro raízes para a integração do modelo variacional.

No estudo numérico do modelo variacional assume-se que a variável fração volumétrica da fase gás é uma equação parabólica, Equação III.4.6, e que o parâmetro $\varepsilon_g|_{r=0}$ é calculado. Justifica-se este fato para evitar possíveis problemas de convergência.

Como mostrado no primeiro nível do Tópico V.2, o sistema de equações a ser resolvido constitui-se em aplicar a condição de estado estacionário na Equação V.2.4 com relação a todas as constantes $C_{sl,l}$ da série do perfil radial de velocidade, ou seja, a primeira derivada em relação a estas constantes são todas nulas. Adicionalmente, necessita-se utilizar a equação de balanço de massa da fase lama para o fechamento do grau de liberdade das variáveis, pois adota-se a variável queda de pressão como sendo uma variável a ser determinada, o que resulta no problema não-linear dado pela Equação VI.4.1 que se segue.

$$\frac{dI}{dC_1^{Vsl}} = 0$$

(VI.4.1)

$$U_{sl} \cdot \rho_{sl} \cdot A = \rho_{sl} \cdot \int_0^{r=R} \varepsilon_{sl} \cdot V_{sl} \cdot dA$$

Resumidamente, para se obter os valores das variáveis C_1^{Vsl} , dP/dz e $\tau_{w,sl}$, este primeiro nível é resolvido pelo seguinte algoritmo:

- i) Escolha o ponto y (Equação III.5.7), ou seja, determinar o valor de r^* ($r^* = R - y$);
- ii) Estime um valor para a tensão na parede $\tau_{w,sl}$;
- iii) Resolver a equação não-linear VI.4.1 para determinar C_1^{Vsl} e dP/dz ;
- iv) Conhecido $\tau_{w,sl}$ e dP/dz , avalia-se a igualdade da Equação V.2.2;
- v) Caso a igualdade da Equação V.2.2 seja obtida, determina-se o perfil de V_{sl} e fim; no contrário, retornar ao item ii), sucessivamente.

Como mostrado no segundo nível do Tópico V.2, o sistema de equações a ser resolvido constitui-se da aplicação na Equação V.2.5 apenas a condição de estado estacionário com relação à todas as constantes, ou seja, a derivada desta equação é nula em relação à C_1^{Vg} , resultando no seguinte problema:

$$\frac{dI}{dC_1^{Vg}} = 0$$

(VI.4.2)

Ressalta-se que a obtenção dos termos das matrizes dos problemas das Equações VI.4.1 e VI.4.2 são dados através de funções integrais, que são resolvidas por quadratura de Gauss. Finalizando, resolvido os prdo os prs destas equações, determinam-se em dois níveis

os perfis radiais de velocidade de escoamento das fases lama e gás, respectivamente, C_l^{vs} e C_l^{vg} , e determinam-se as variáveis $\tau_{w,sl}$ e dP/dz .

A seguir, nas Figuras VI.4.1 até VI.4.4, são mostrados os resultados numéricos obtidos com a condição de contorno da Equação V.2.1 quando simulado o *Caso-1* e *Caso-2* da Tabela VI.1. Como na correlação de Prandtl a variável y^+ pode assumir qualquer valor entre 5 e 26, opta-se por ajustar r^* de forma que $y^+ = 5$, o que possibilita obter o perfil radial de velocidade da fase lama próximo à parede por meio da Lei da Viscosidade de Newton para a camada laminar. As Figuras VI.4.1 e VI.4.3 são mostradas em SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2001) e os seus respectivos perfis radiais de velocidade da fase gás são mostrados nas Figuras VI.4.2 e VI.4.4.

Para o efeito comparativo, nas Figuras VI.4.1 até VI.4.4 são sobrepostos as simulações *com* (linha contínua) e *sem* (linha pontilhada) a análise do efeito de parede, sendo a função dependente dada pela Equação IV.4.2. Como esta análise objetiva-se descrever melhor os dados de velocidade da fase lama, faz-se necessário antecipar as comparações com os dados das colunas *Lama-1* e *Lama-2* da Tabela III.7.1. A comparação com os dados das colunas *Gás-1* e *Gás-2* desta tabela e os comentários sobre as comparações com os dados experimentais estão no Tópico VI.6.3.

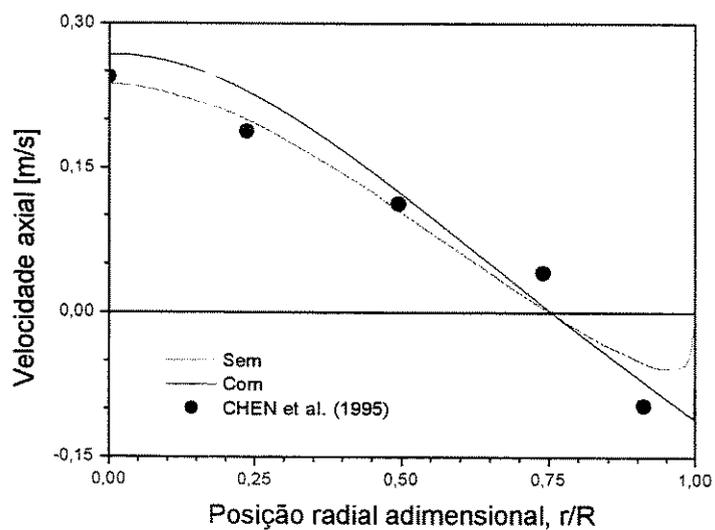


Figura VI.4.1: Perfil radial de velocidade da fase lama – *Caso-1*.

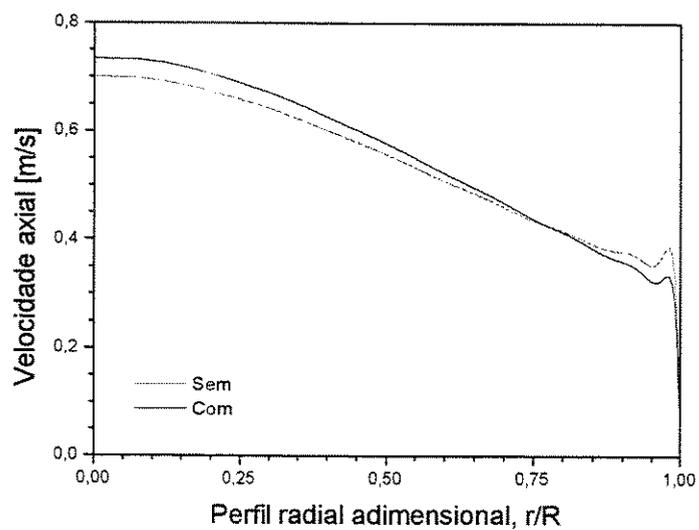


Figura VI.4.2: Perfil radial de velocidade da fase gás – *Caso-1*.

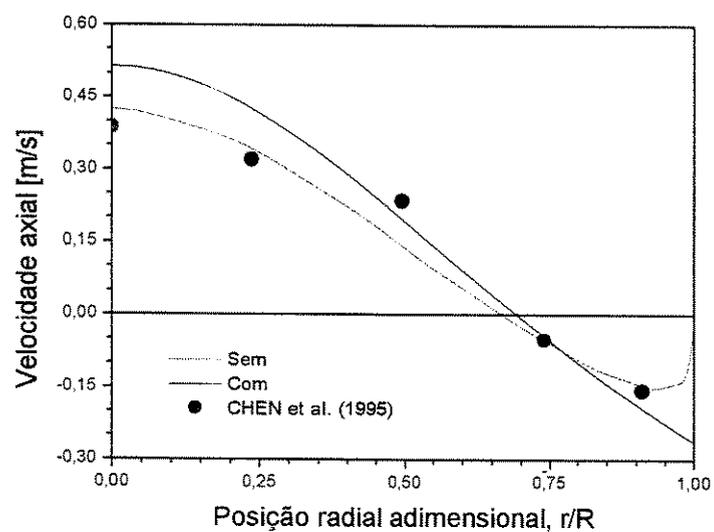


Figura VI.4.3: Perfil radial de velocidade da fase lama – *Caso-2*.

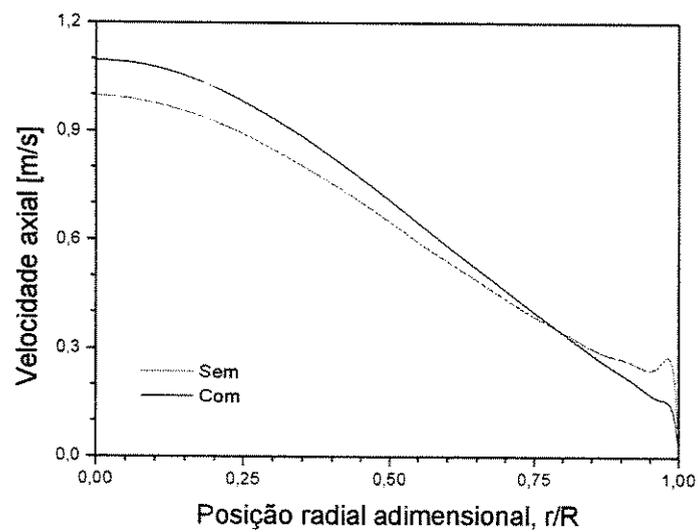


Figura VI.4.4: Perfil radial de velocidade da fase gás – *Caso-2*.

A simulação do *Caso-3* e *Caso-4* mostra o mesmo comportamento qualitativo dos perfis radiais das Figuras VI.4.1 até VI.4.4. Como a análise de Prandtl é válida apenas para a fase lama, opta-se por não mostrar neste tópico os resultados para estes casos. Entretanto, os quatro casos são analisados a seguir no Tópico IX.4.1.

A avaliação do efeito de parede é estudado apenas sobre o modelo variacional, sem o uso da otimização. Isto é necessário para evitar e avaliar possíveis efeitos de instabilidade numérica e de reprodutibilidade dos resultados que possam ocorrer.

VI.4.1 – Verificação da aplicação da correlação de Prandtl

No uso da correlação de Prandtl como condição de contorno faz-se necessário definir a qual distância da parede interna do reator a mesma é aplicada, ou seja, define-se o valor de y na Equação III.5.7 de forma que $y^+ \in [5, 26]$. Como nesta tese é adotado $y^+ = 5$, o valor definido para y é naturalmente válido. Isto torna o procedimento de convergência numérica mais difícil e, como é mostrado no Tópico VI.6.11, os resultados compensam. Assim, ao invés de se verificar a validade do valor de y , faz-se a prova real que $y^+ = 5$.

O *Caso-1* ao *Caso-4* da Tabela VI.1 são simulados e os resultados numéricos obtidos são mostrados na Tabela VI.4.1.1. Ressalta-se que, de acordo com o número de termos da série polinomial para a função dependente e do número de pontos usados na quadratura de Gauss para a integração, os dados desta tabela diferem ligeiramente, mas sem prejuízo da análise que se segue.

Tabela VI.4.1.1: Alguns resultados da simulação com efeito de parede.

<i>Variável</i>	<i>Caso-1</i>	<i>Caso-2</i>	<i>Caso-3</i>	<i>Caso-4</i>
$\tau_{w,sl}$	0,15439	0,87781	0,30617	0,37258
$ V_{pr} $	0,10969	0,26268	0,15423	0,16933
ρ_{sl}	1091,3	1082,0	1094,7	1105,2
μ_{sl}	1,1167e-3	1,0582e-3	1,1167e-3	1,1167e-3

Tem-se que a variável $\tau_{w,sl}$ é a tensão na parede, $|V_{pr}|$ é dado pela Equação III.5.7, ρ_{sl} é a densidade da lama e μ_{sl} é a viscosidade da lama. Assim, a partir da Tabela VI.4.1.1 obtém-se a Tabela VI.4.1.2.

Tabela VI.4.1.2: Verificação da validade da correlação de Prandtl.

<i>Caso</i>	$y^+ = y \cdot V_* \cdot \rho_{sl} / \mu_{sl}$
<i>Caso-1</i>	5,0000
<i>Caso-2</i>	5,0000
<i>Caso-3</i>	5,0000
<i>Caso-4</i>	5,0000

Adicionalmente, para caracterizar a região de escoamento do fluxo aplica-se a Equação III.5.9 e, associada aos dados das Tabela VI.4.1.1 e VI.4.1.2, tem-se que:

Tabela VI.4.1.3: Caracterização do escoamento do fluxo.

<i>Caso</i>	$\mu^{(0)} / \mu$
<i>Caso-1</i>	0,79457
<i>Caso-2</i>	0,79783
<i>Caso-3</i>	0,79615
<i>Caso-4</i>	0,79652

Os dados na Tabela VI.4.1.3 servem apenas para confirmar em qual região está aplicado a correlação de Prandtl. Portanto, não serve para validar a sua aplicação, que é dada apenas por y^+ . Os resultados aproximados desta tabela é devido à fixação de y^+ .

Por meio das Tabelas VI.4.1.2 e VI.4.1.3, confirma-se que a correlação de Prandtl está aplicada na região com fluxo de transição e próximo à parede, ou seja, dentro da região

de validade. Portanto, os dados das Figuras VI.4.1 até VI.4.4 são confiáveis e concordam com a literatura descrita para escoamento em tubos verticais.

VI.5 – ANÁLISE DOS PERFIS DE CONCENTRAÇÃO

Antes de se obter as variáveis perfis de concentração das espécies presentes no leito reacional, deve-se considerar que as variáveis perfis radiais das velocidades das fases sejam previamente conhecidos. Isto implica em considerar que as variáveis das velocidades não alteram na presença de reação química, ou seja, a densidade do leito catalítico mantém constante. Conforme mostra-se no Tópico VI.6.4, isto é uma consideração razoável.

As variáveis perfis das velocidades são obtidas a partir do modelo variacionais da Equação V.1.1 (sem efeito de parede) ou das Equações V.2.4 e V.2.5 (com efeito de parede), sendo que a variável perfil radial de fração volumétrica da fase gás é dada pela Equação III.4.6. Para obter-se os perfis axiais a_i e b_i da Equação V.3.10, faz-se necessário resolver, em seqüência, os sistemas de equações diferenciais dados por: i) Equações V.3.38 e V.3.39; ii) Equações V.3.50 e V.3.51; iii) Equações V.3.57 e V.3.58.

As simulações deste tópico são obtidas com o *Caso-5* da Tabela VI.1 e, para um reator de hidroconversão, o parâmetro $\varepsilon_g|_{r=0}$ da Equação III.4.6 é dado pela correlação empírica de TARMY et al. (1984). As Figuras VI.5.1 até VI.5.4 mostram os resultados dos perfis de concentração obtidos para os componentes $i = 1$ (reagente) e $i = 5$ (produto) nas regiões de entrada ($z=0$) e saída ($z=H=3,0[m]$) do reator. As curvas nestas figuras são obtidas considerando-se ou não o efeito de parede, respectivamente estas são dadas pelas linhas contínua e pontilhada. Os demais perfis de concentração são análogos.

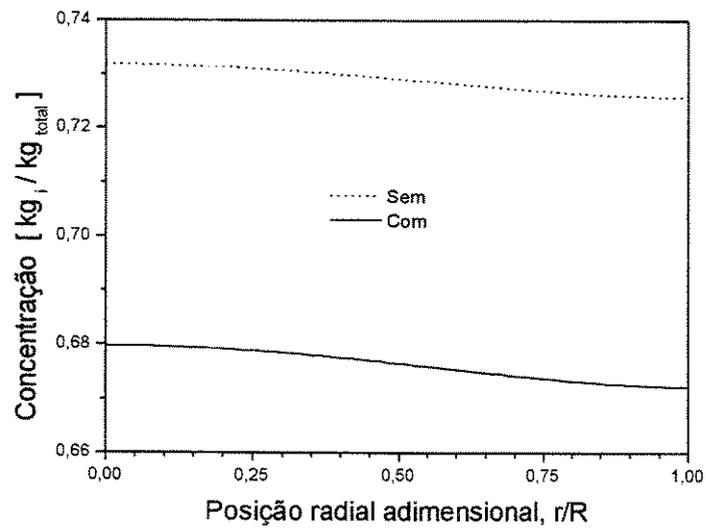


Figura VI.5.1: Perfil de concentração de $i = 1$ em $z = 0$.

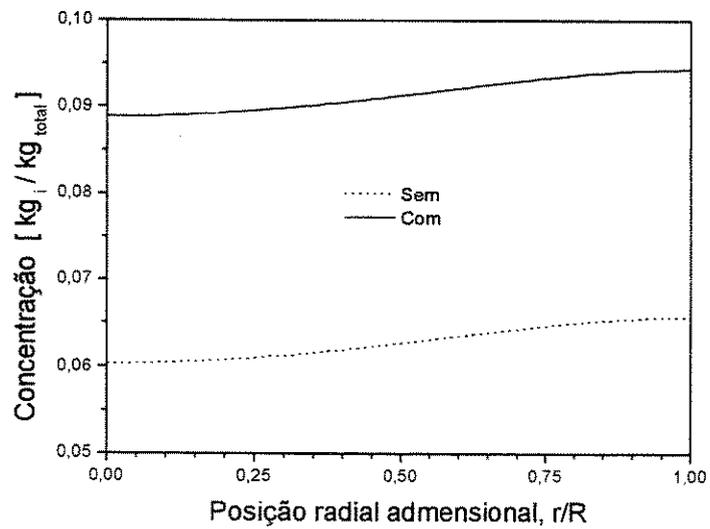


Figura VI.5.2: Perfil de concentração de $i = 5$ em $z = 0$.

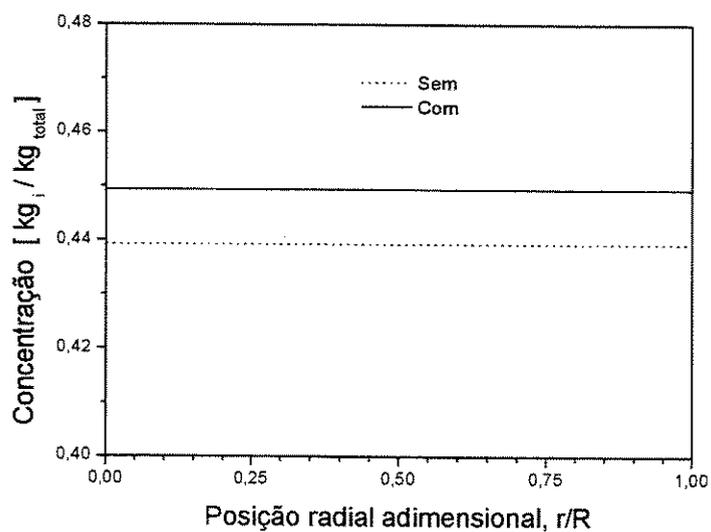


Figura VI.5.3: Perfil de concentração de $i = 1$ em $z = H$.

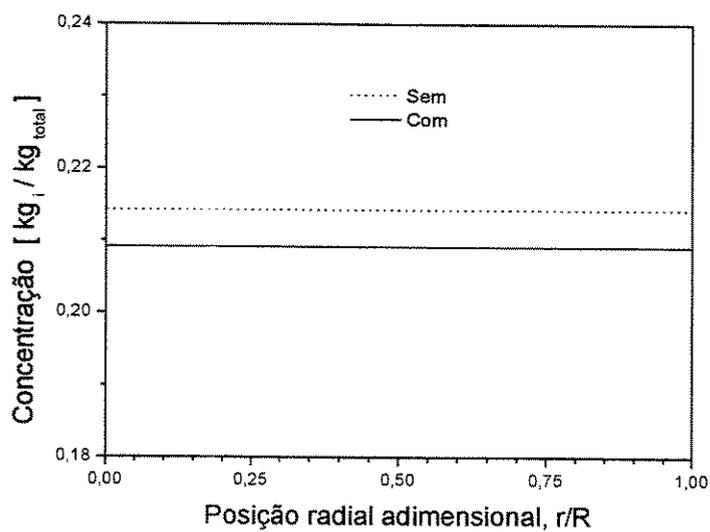


Figura VI.5.4: Perfil de concentração de $i = 5$ em $z = H$.

Para uma mesma posição radial, observa-se que nas Figuras VI.5.1 até VI.5.4 o desvio relativo percentual máximo entre as curvas contínua e pontilhada é igual a 7,96 , 47,21 , 2,30 e 2,44 , respectivamente. Para o caso sem o fecho de parede (linha pontilhada), as Figuras VI.5.3 e VI.5.4 concordam com os perfis mostrados por CARBONELL e GUIRARDELLO (1999), sendo os desvios relativos iguais a 2,1 e 7,3 %, respectivamente.

Para o componente $i = 3$ não existem os perfis de concentração, pois a sua concentração inicial é zero e esta espécie não é produto de reação. Todos os demais perfis de concentrações que não são mostrados neste tópico concordam com o resultado esperado, ou seja, o perfil de um reagente decresce do centro do reator para a parede, enquanto que, no perfil de um produto ocorre o contrário. Justifica-se este fato pela presença de uma maior área interfacial entre as fases na região próxima à parede interna do reator.

VI.6 – OUTRAS INVESTIGAÇÕES NUMÉRICAS

Neste tópico são mostrados várias análises que complementam os estudos da aplicação do método variacional no estudo da fluidodinâmica do reator em questão.

VI.6.1 – Ajuste simultâneo dos perfis radiais de velocidade

Segue-se o procedimento de resolução numérica apresentado no Tópico VI.1. Entretanto, agora assume-se que a variável $\varepsilon_g|_{r=0}$ é obtida por ajuste externo. A condição de parada deste ajuste é dado quando verifica-se o fechamento das equações dos balanços de massa das fases lama e gás. Este procedimento de ajuste é mostrado em SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2000).

Simula-se o *Caso-1* até *Caso-4* da Tabela VI.1. Na Tabela VI.6.1.1 são apresentados os valores da variável $\varepsilon_g|_{r=0}$ quando empregado a correlação de CHEN et al. (1995) e quando estes são ajustados externamente para fechar as equações dos balanços mássicos. Apresenta-se também os desvios relativos percentuais destas equações.

Tabela VI.6.1.1: Verificação do valor da variável $\varepsilon_g|_{r=0}$.

Casos	Fração de gás em $r = 0$		Desvio relativo percentual no balanço de massa			
	Correlação	Ajustado	Correlação		Ajustado	
			Lama	Gás	Lama	Gás
<i>Caso-1</i>	0,1125	0,1067	~ 0,0	6,22	~ 0,0	~ 0,0
<i>Caso-2</i>	0,3318	0,2557	~ 0,0	42,19	~ 0,0	~ 0,0
<i>Caso-3</i>	0,1803	0,1852	~ 0,0	3,18	~ 0,0	~ 0,0
<i>Caso-4</i>	0,3610	0,3655	~ 0,0	1,73	~ 0,0	~ 0,0

Como os valores obtidos por correlação e por ajuste externo para a variável $\varepsilon_g|_{r=0}$ são quase sempre próximos, os balanços são satisfeitos mesmo sem o ajuste externo, ou seja, mesmo usando-se apenas a equação do balanço de massa da fase lama, o outro é satisfeito indiretamente. Isto mostra que a correlação proposta por CHEN et al. (1995) é bastante satisfatória nestes casos, e que um perfil parabólico para esta variável é razoável na descrição dos dados.

Devido a verificação implícita do fechamento da equação do balanço de massa da fase gás, os perfis radiais de velocidade praticamente não alteram quando efetuado o ajuste externo, mesmo para o *Caso-2* da Tabela VI.6.1.1 que apresenta um maior desvio. Entretanto, se o balanço de gás não for satisfeito de maneira indireta, o ajuste externo causa um “achatamento” dos perfis radiais de velocidade, como é mostrado em SANTOS JR. e GUIARDELLO (2000) para o *Caso-5*.

VI.6.2 – Otimização do perfil radial de fração volumétrica

Em todas as simulações numéricas o perfil radial de fração volumétrica da fase gás é considerado do tipo parabólico, ou seja, com apenas um parâmetro a ajustar e, para este caso, o modelo variacional é dado pela Equação V.1. O objetivo deste tópico é estender a possibilidade de ajustar este perfil da mesma forma que o ajuste dos perfis radiais de velocidade, sendo que agora o modelo variacional é dado pela Equação V.2.

Para a formulação da Equação V.2, o ajuste simultâneo dos perfis radiais de velocidade e fração volumétrica gera um sistema matemático com elevada dimensão e não-linearidade. A matriz da segunda derivada (matriz *hessiana*) deste sistema é obtida a partir

da Equação V.1.1 quando se deseja ajustar uma série polinomial para o perfil radial de fração volumétrica. Esta matriz apresenta coeficientes variáveis, ou seja, estes são dados pelo produto entre duas variáveis $C_{j,l}$ das funções dependentes. Isto caracteriza coeficientes não-lineares e dificulta o processo de otimização. Devido à não-linearidade, os problemas matemáticos verificados são iguais aos observados na resolução dos sistemas de equações não-lineares, tais como: multiplicidade de soluções e o problema de estimativa inicial.

Na tentativa de obter um perfil radial de fração volumétrica com mais de um parâmetro de ajuste, nas várias simulações realizadas para os casos da Tabela VI.1, os resultados na otimização são sempre satisfeitos matematicamente, mas nem sempre são fisicamente possíveis. Matematicamente, as condições de otimização (BAZARRA et al., 1993) e as hipótese assumidas no modelo variacional são sempre válidas. Fisicamente, os perfis radiais obtidos nem sempre correspondem ao esperado, ou seja, o perfil de velocidade da fase lama difere ao da Figura III.3.1, o perfil de velocidade da fase gás difere da forma “empistonado” (DECKWER, 1992) e o perfil da fração volumétrica é inválido.

A inconsistência física pode ocorrer em um ou mais perfis radiais e a solução varia de acordo com a estimativa inicial. Em algumas simulações os resultados destes perfis são matematicamente e fisicamente possíveis e concordam com o esperado. Adotando-se características iguais em diversas simulações, diferindo apenas na estimativa inicial, os resultados variam entre resultados satisfatórios até insatisfatórios. Portanto, verifica-se que o problema se deve a estimativa inicial da solução, ou seja, os pacotes de programação não-linear em uso para otimizar os perfis V_{sl} , V_g e ε_g da Equação V.2 não são robustos e carecem de melhorias no seu procedimento numérico de otimização.

O uso da Equação IV.4.3 para o perfil radial de fração volumétrica é justificado por forçar o valor desta variável para o intervalo $[0,1]$, evitando-se assim o uso de restrições adicionais e, conseqüentemente, um aumento na dimensão do problema. Mesmo com o uso desta equação, o problema de estimativa inicial não é solucionado.

Na tentativa de solucionar o problema de estimativa inicial são aplicados vários critérios de parada, tanto de ordem matemática quanto de ordem física, tais como: verificação das condições de otimização de Kuhn-Tucker, fluxos mássicos consistentes e valores sempre positivo para a função objetivo e para as frações volumétricas.

Devido à falta de reprodutibilidade dos dados numéricos e a ausência de dados experimentais para a variável perfil radial de fração volumétrica, opta-se por não mostrar nenhum resultado nesta tese para a simulação da Equação V.2. A não reprodutibilidade dos resultados é observado apenas quando desejado a otimização deste perfil na forma desta equação. Esta é a principal dificuldade desta tese.

Conclui-se que as rotinas numéricas de otimização empregados não são satisfatórias para resolver o problema com a dimensão requerida, apesar de estarem baseadas em técnica de programação quadrática sucessiva *SQP*, tais como: GILL (1986) e das várias rotinas numéricas indexadas ao programa FORTRAN PowerStation 4.0. Como a capacidade da rotina de otimização em resolver o problema de estimativa inicial não faz parte do enfoque desta tese, as atividades deste tópico ficam limitas na verificação da existência de uma rotina de otimização que seja capaz de resolver o problema matemático dado pela Equação V.2.

A aquisição de um pacote de programação não-linear robusto é justificado pelo fato de que em algumas simulações os resultados são consistentes e soluciona o problema de estimativa inicial para a solução da Equação V.2. Além disto, o problema de oscilação numérica do perfil radial de velocidade da fase gás próximo à parede interna do reator é solucionado e os dados obtidos para este perfil são mais realistas, ou seja, o perfil assume a forma empistonado e não a forma parabólica da Equação III.4.6.

VI.6.3 – Comparação com dados experimentais

Nas Figuras VI.4.1 e VI.4.3 e nas Figuras VI.6.3.3 e VI.6.3.4 expõem-se os resultados numéricos da formulação variacional e os dados experimentais para os casos da Tabela VI.1, exceto para o *Caso-5*. Ampliando-se as Figuras VI.4.1 e VI.4.3 próximo à parede, as Figuras VI.6.3.1 e VI.6.3.2 mostram as diferenças dos resultados numéricos obtidos quando aplicado (linha contínua) ou não (linha pontilhada) o efeito de parede. A Figura VI.6.3.1 é mostrada em SANTOS JR. e GUIRARDELLO (2001).

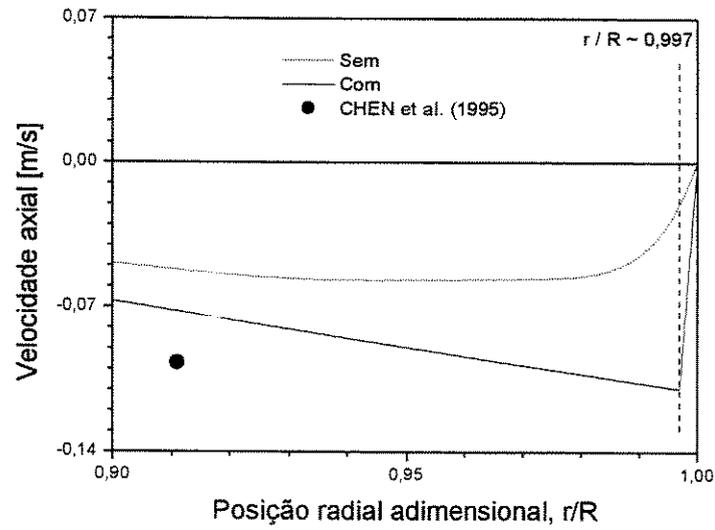


Figura VI.6.3.1: Ampliação do comportamento do perfil próximo à parede – *Caso-1*.

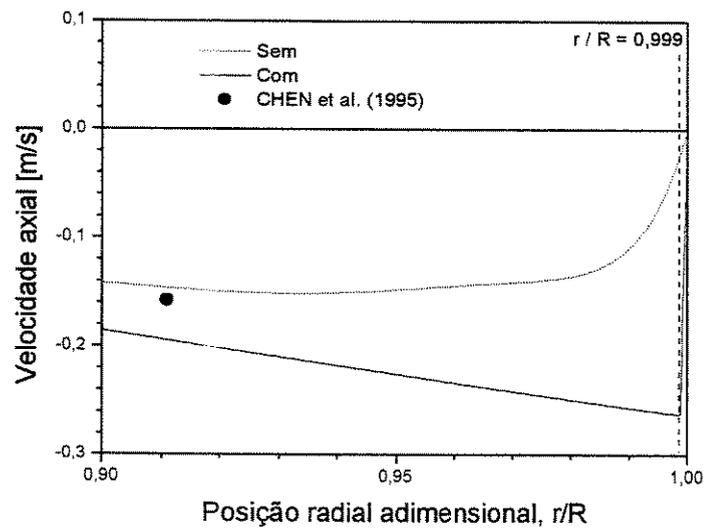


Figura VI.6.3.2: Ampliação do comportamento do perfil próximo à parede – *Caso-2*.

A aplicação da correlação de Prandtl mostrada na Figura VI.6.3.2 mostra um resultado menos satisfatório. Entretanto, como mostrado na Figura VI.4.3, a aplicação desta correlação apresenta, em geral, um resultado mais satisfatório próximo à parede.

A metodologia de resolução da formulação variacional das Figuras VI.6.3.3 e VI.6.3.4 é análoga à apresentada no Tópico VI.1, porém utiliza-se quinze termos ($l=14$) na série polinomial da função dependente e a quadratura de Gauss utiliza sessenta e quatro raízes para integrar o modelo variacional. Na Figura VI.6.3.3 emprega-se a função proposta da Equação IV.4.2 e na Figura VI.6.3.4 emprega-se a função da Equação IV.4.1.

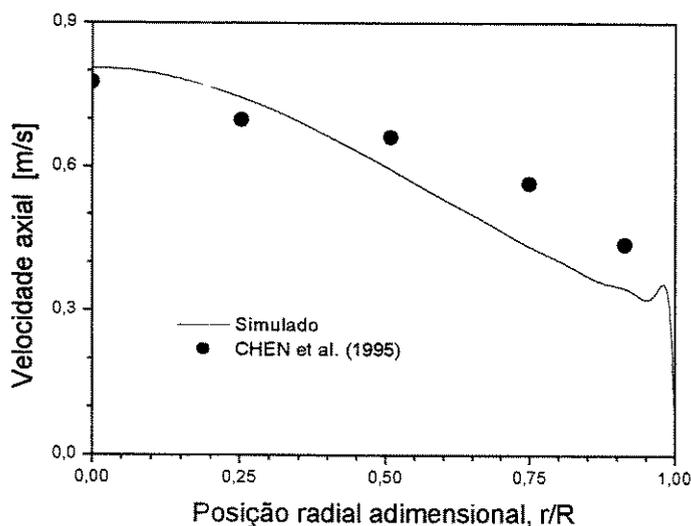


Figura VI.6.3.3: Perfil de escoamento da fase gás – *Caso-3*.

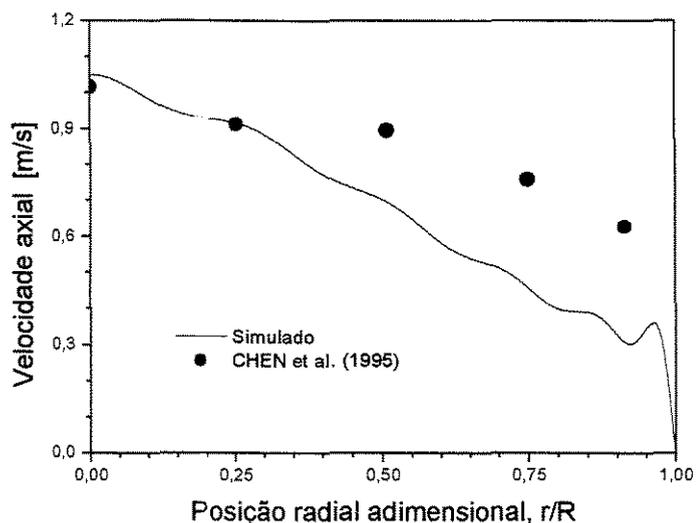


Figura VI.6.3.4: Perfil de escoamento da fase gás – *Caso-4*.

Conforme se observa nas Figuras VI.4.1, VI.4.3, VI.6.3.3 e VI.6.3.4, os perfis radiais de velocidade da fase lama apresentam uma melhor concordância com os dados experimentais, enquanto os perfis para a fase gás mostram maiores desvios.

CARBONELL e GUIRARDELLO (1997) comentam que a expressão parabólica da variável ε_g , dada pela Equação III.4.6, não é adequada quando adotado o seu modelo diferencial. Justificam-se também no fato de que a fase gás está presente em menor quantidade, tornando-a mais sensível às pequenas variações nesta variável.

A instabilidade observada nos perfis das figuras que utilizam a Equação IV.4.1 é justificada pelo determinante da matriz formada a partir do sistema de equações geradas após a aplicação da Equação A.6.2 na Equação V.1.1. Devido às características matemáticas da Equação IV.4.2 tal instabilidade não existe. Matematicamente, a instabilidade ocorre em consequência dos erros de arredondamento, pois o determinante é próximo a zero e indica uma matriz mal-condicionada, o que causa grandes variações nos resultados obtidos. Os valores obtidos para os determinantes são da ordem de 10^{-157} , 10^{-145} , 10^{+78} e 10^{+73} para as Figuras VI.4.1, VI.6.3.4, VI.4.3 e VI.6.3.3, respectivamente.

Observa-se que o valor, em módulo, do expoente das ordens dos determinantes crescem com o aumento do número de termos l empregados na série da função proposta. Em outras palavras, a escolha do valor l é inversamente proporcional a proximidade com o determinante igual a zero, quando empregado a Equação IV.4.1, e diretamente proporcional quando se usa a Equação IV.4.2.

Os dados experimentais obtidos na literatura são apresentados para diferentes condições de operação, o que impossibilita a comparação simultânea dos perfis radiais de velocidade das fases lama e gás para uma mesma simulação.

VI.6.4 – Influência da densidade nos perfis radiais de velocidade

No estudo do Tópico VI.5, considera-se que o perfil radial de velocidade não se altera com a presença de reação química. Entretanto, mostra-se aqui que este perfil sofre uma pequena influência em relação à reação, mas a hipótese de perfil invariável é válida nos estudos desta tese.

Simulando-se o *Caso-1* da Tabela VI.1, observa-se nas Figuras VI.6.4.1 até VI.6.4.3 a influência da reação química nos perfis radiais de velocidade. Para isto assume-se variações na densidade do líquido num limite de $\pm 20\%$. Neste caso a densidade é 1000,0 ; então, os limites são 800,0 e 1200,0.

Perfil radial de velocidade da fase lama

Seguindo-se o procedimento descrito no Tópico VI.1, as simulações, que resultam nos perfis da Figura VI.6.4.1, são obtidas considerando-se apenas a equação do balanço de massa da fase lama (BML). Para a Figura VI.6.4.2 considera-se as fases lama e gás (BMLG). Para a Figura VI.6.4.3 aplica-se o efeito de parede no comportamento dos perfis da Figura VI.6.4.1. Os perfis destas figuras têm quinze termos ($l = 14$) na série e a quadratura de Gauss utiliza quarenta e oito raízes para a integração do modelo variacional.

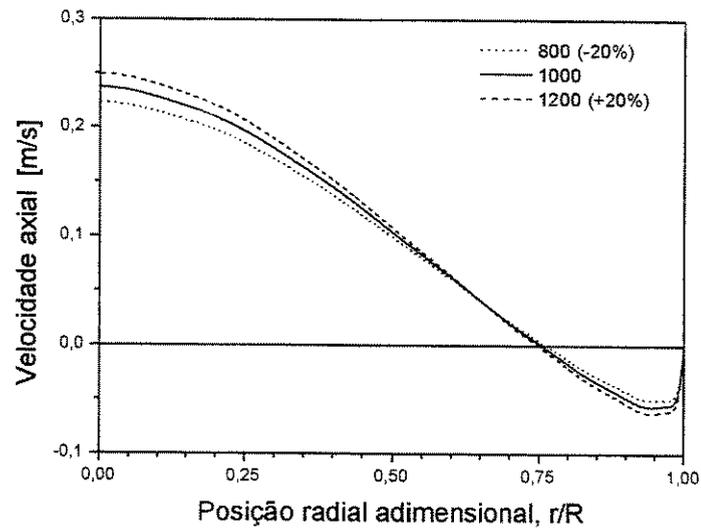


Figura VI.6.4.1: Influência da densidade no perfil da fase lama (BML).

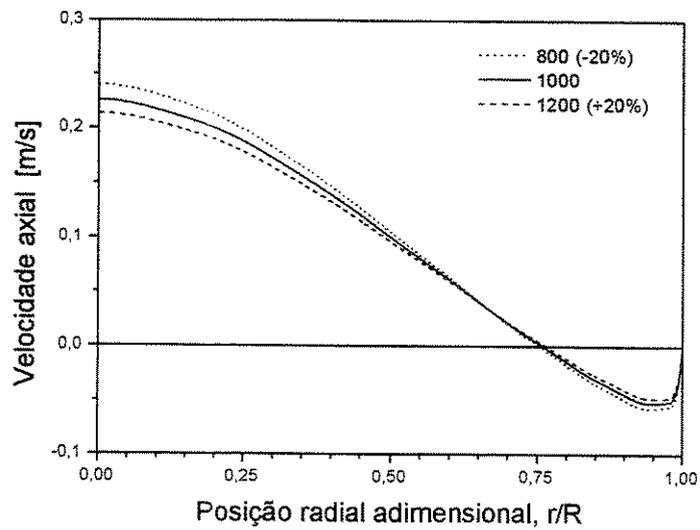


Figura VI.6.4.2: Influência da densidade no perfil da fase lama (BMLG).

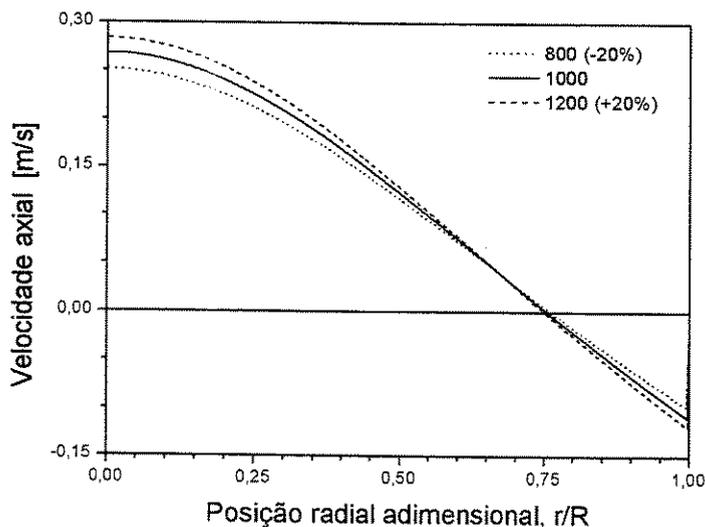


Figura VI.6.4.3: Influência da densidade no perfil da fase lama (BML).

Nas Figuras VI.6.4.1 até VI.6.4.3, observa-se que, na posição central do reator, o desvio relativo máximo entre os perfis 800 e 1200 é 13 %. Isto indica que, na presença de reação química, a hipótese de um perfil radial de velocidade constante é satisfatória.

A pequena variação observada entre os mesmos perfis das Figuras VI.6.4.1 e VI.6.4.2 se deve a correlação de CHEN e outros (1995) usada para o cálculo do parâmetro $\varepsilon_g|_{r=0}$. Esta correlação é satisfatória, pois utilizando apenas a equação do balanço de massa da fase líquida ou, de forma simultânea, os balanços para a fase líquida e gás, os perfis praticamente mantêm-se constantes.

Perfil radial de velocidade da fase gás

Os perfis radiais de velocidade da fase gás, correspondentes aos perfis das Figuras VI.6.4.1 até VI.6.4.3, são mostrados nas Figuras VI.6.4.4 até VI.6.4.6, respectivamente.

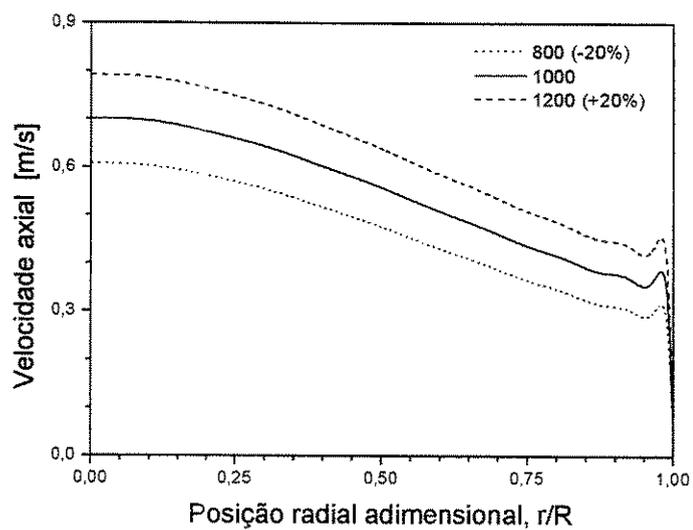


Figura VI.6.4.4: Influência da densidade no perfil do gás.

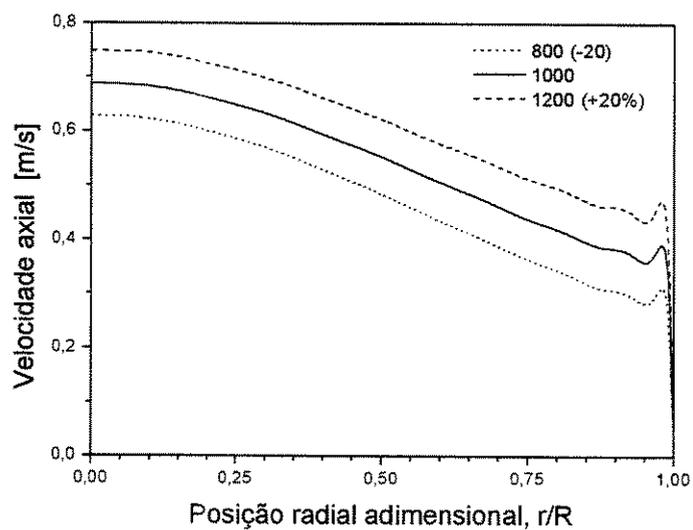


Figura VI.6.4.5: Influência da densidade no perfil do gás.

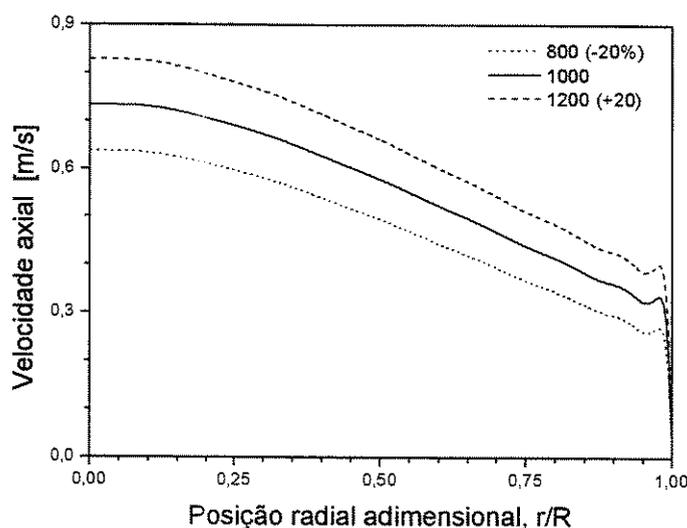


Figura VI.6.4.6: Influência da densidade no perfil do gás.

Nas Figuras VI.6.4.4 até VI.6.4.6, observa-se que, na posição central do reator, o desvio relativo máximo entre os perfis 800 e 1200 é 31 %. A reação química ocorre na fase líquida e os efeitos dos perfis destas figuras já estão incorporados nos perfis das Figuras VI.6.4.1 até VI.6.4.3, respectivamente. Este desvio elevado entre os perfis radiais de velocidade da fase gás, para uma mesma figura, não tem importância significativa na hipótese que assume que o perfil radial de velocidade é constante com a presença de reação química. Ressalta-se que para a Figura VI.6.4.5 o desvio é 19 %.

A utilização de um perfil radial de velocidade que não varia com a densidade é satisfatória, conforme observado também por CARBONELL e GUIRARDELLO (1999).

VI.6.5 – Análise estatística dos dados experimentais

O objetivo da análise estatística é verificar o quão satisfatório é o perfil parabólico da variável fração volumétrica, dado pela Equação III.4.6, em descrever os dados da Tabela III.7.1. Portanto, esta análise é efetuada em quatro conjuntos de dados: dois para o perfil

radial de velocidade da fase lama e dois para a fase gás. Deve-se adicionar a esta tabela uma linha que corresponda a velocidade da fase próxima à parede, $r/R \cong 1 \rightarrow V \cong 0$.

Numa análise prévia das Equações V.10.2 e V.10.3, observa-se que as únicas variáveis destas equações são V_k e $\varepsilon_g|_{r=0}$. Como o valor da variável velocidade V_k é conhecido e está mostrado na Tabela III.7.1, propõe-se uma função para a variável perfil radial da fração volumétrica com apenas uma constante de ajuste, como na Equação III.4.6. Então, esta função é substituída nas Equações V.10.2 e V.10.3, o que possibilita o cálculo da variável $\varepsilon_g|_{r=0}$. O uso de uma função com apenas uma constante de ajuste deve-se ao grau de liberdade, pois se tem apenas uma equação.

O procedimento estatístico consiste em aplicar a Equação V.10.1 nas Equações V.10.2, para cada conjunto de dados da Tabela III.7.1 relativo à fase lama, e V.10.3, para cada conjunto de dados da fase gás. Após estas manipulações algébricas, o termo destas equações situado na esquerda é constante e os termos da direita requerem um ajuste.

Seguindo-se a disposição dos dados da Tabela III.7.1, as regressões estatísticas são realizadas na seguinte forma:

- i) No termo **sem** r^2 , Equação V.10.2, forma-se uma tabela $r \times V_{si}$
- ii) No termo **com** r^2 , Equações V.10.2 e V.10.3, formam-se duas tabelas $1-(r/R)^2 \times V_{ki}$

Para um ajuste estatístico linear ($n=1$), os resultados obtidos das regressões são apresentados na Tabela VI.6.5.1.

Tabela VI.6.5.1: Valor da fração volumétrica de gás no centro do reator $\varepsilon_g|_{r=0}$.

<i>Caso</i>	<i>Regressão</i>	<i>Correlação</i> ⁽¹⁾	<i>Ajustado</i> ⁽²⁾
<i>Caso-1</i>	0,2031	0,1125	0,1076
<i>Caso-2</i>	0,6391	0,3318	0,2599
<i>Caso-3</i>	0,1703	0,1803	0,1874
<i>Caso-4</i>	0,2874	0,3610	0,3700

⁽¹⁾ Valor obtido por CHEN et al. (1995);

⁽²⁾ Valor na qual o resultado da modelagem variacional satisfaz ambos os balanços de massa;

A partir da Tabela VI.6.5.1, compara-se os resultados mostrados entre as colunas *Regressão* e *Correlação* (ou *Ajustado*). Então, observa-se que o perfil radial de fração volumétrica com apenas uma constante de ajuste não é satisfatório.

Para verificar se o ajuste linear ($n=1$) da Tabela VI.6.5.1 é satisfatório, efetua-se também os ajustes quadrático ($n=2$) e cúbico ($n=3$). Na Tabela VI.6.5.2 é mostrado apenas os resultados obtidos a partir do ajuste cúbico, uma vez que os três tipos de ajustes estatísticos fornecem resultados bastante aproximados.

Tabela VI.6.5.2: Valor da fração volumétrica de gás no centro do reator $\varepsilon_g|_{r=0}$.

<i>Casos</i>	<i>Regressão</i>
<i>Caso-1</i>	0,2043
<i>Caso-2</i>	0,6425
<i>Caso-3</i>	0,1715
<i>Caso-4</i>	0,2894

Não é possível utilizar um perfil radial de fração volumétrica com duas constantes de ajuste, pois os dados da Tabela III.7.1 são obtidos a partir de condições operacionais diferentes, impossibilitando obter um sistema com duas equações e duas variáveis de ajuste.

Observe-se que a integração da Equação III.4.6 fornece que o valor da variável fração volumétrica no centro do escoamento é o dobro do valor médio, $\varepsilon_g|_{r=0} = 2 \times \bar{\varepsilon}_g$.

VI.6.6 – Caracterização do ponto de extremo

Comenta-se no Tópico IV.1 ou A.5 que é obrigatório a utilização de quatro teoremas para a completa caracterização do ponto de extremo de um modelo matemático por meio do método do cálculo das variações, pois somente assim é possível simular corretamente uma modelagem variacional do ponto de vista do problema de otimização da Equação IV.3.1. Entretanto, apenas o teorema de Euler-Lagrange é usado e o problema de otimização é assumido como um problema de minimização. A hipótese que assume que o modelo variacional da Equação V.1.1 é equivalente a um problema de minimização não é totalmente demonstrada ou provada matematicamente, exceto da aplicação da Equação V.9.1 para a obtenção da modelagem integral. Portanto, seguem-se neste tópico as demais demonstrações matemáticas para a comprovação desta hipótese. Do ponto de vista da programação não-linear da Equação IV.3.1, as demonstrações matemáticas para todas as condições necessárias e suficientes para o modelo variacional da Equação V.1.1, restrito à Equação III.4.3, são dadas por:

- i) Teorema de Euler-Lagrange – Equação V.9.1

Este teorema é a única prova matemática demonstrada até o momento e implica em afirmar que a função dependente y_j faz com que a Equação V.1.1 seja estacionária.

- ii) Teorema de Legendre – Equação V.9.2

Observa-se que, com a aplicação do determinante de Wronskian na Equação V.1.1, somente os elementos da diagonal principal são diferentes de zero, ou seja, $f_{v_{si}v_{si}} \cdot f_{v_g v_g} \geq 0$. Portanto:

$$\left[\int_0^R \mu_{sl}^{eff} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \right] \cdot \left[\int_0^R \mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \right] \geq 0$$

A relação anterior sempre é verdadeira, pois todos os parâmetros são positivos. Isto implica numa equação de desigualdade.

iii) Teorema de Jacobi – Equação V.9.3

A função dependente V_k forma uma família com l parâmetros constantes, pois $V_k = V_k(x, C_{k,1}, \dots, C_{k,l})$. Então, aplica-se a Equação V.9.3 na Equação IV.4.1 e obtém-se:

$$\frac{dV_k}{dC_{k,l}} = (x)^{2,l}$$

onde, a exceção de $x = 0$, o resultado é sempre diferente de zero. Além disto, nenhum ponto intermediário torna esta derivada nula, portanto a condição de Jacobi é sempre satisfeita.

Aplicando-se também a Equação V.9.3 na Equação IV.4.2 obtém-se:

$$\frac{dV_k}{dC_{k,l}} = \cos[2,l,a \cos(x)]$$

onde o resultado obtido é sempre diferente de zero, para qualquer l . Apesar da existência de derivada nula em algum ponto intermediário, o mesmo não se verifica no limite inferior, portanto a condição de Jacobi também é satisfeita para a Equação IV.4.2.

Matematicamente, a derivada do polinômio trigonométrico em $x = 0$ assume valores alternados entre -1 e $+1$, respectivamente, para os valores ímpares e pares do parâmetro l .

iv) Teorema de Weierstrass – Equação V.9.4

Aplica-se a Equação V.9.4 na Equação V.1.1 e todos os termos que não são funções de V_k' desaparecem. A partir da equação resultante desta manipulação, faz-se necessário subtrair os dois primeiros termos após o sinal de igualdade e obtém-se:

$$\begin{aligned}
E\langle x, V_k, V'_k, p'_k \rangle = & \int_0^R \left[\frac{1}{2} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V'_{sl})^2 + \frac{1}{2} \cdot \mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g \cdot (V'_g)^2 \right] \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr - \\
& \int_0^R \left[\frac{1}{2} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (p'_{sl})^2 + \frac{1}{2} \cdot \mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g \cdot (p'_g)^2 \right] \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr - \\
& \left\{ (V'_{sl} - p'_{sl}) \int_0^R \mu_{sl}^{eff} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot p'_{sl} \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr + (V'_g - p'_g) \int_0^R \mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g \cdot p'_g \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \right\}
\end{aligned}$$

que reorganizado tem-se:

$$E\langle x, V_k, V'_k, p'_k \rangle = \int_0^R \left[\mu_{sl}^{eff} \cdot \varepsilon_{sl} \cdot (V'_{sl} - p'_{sl})^2 + \mu_g^{eff} \cdot \varepsilon_g \cdot (V'_g - p'_g)^2 \right] \cdot \pi \cdot r \cdot dr \geq 0$$

onde esta equação é válida para quaisquer valores reais p'_{sl} ou p'_g .

As mesmas análises deste tópico são realizadas também para as Equações V.2.4, V.2.5 e V.5.1. Os resultados são análogos aos da Equação V.1.1. Todos os pontos de extremo são caracterizados como ponto de mínimo forte.

VI.6.7 – Instabilidade numérica da função dependente

Para a descrição de uma função dependente num modelo variacional, a escolha de uma determinada forma de série polinomial pode ocasionar problema de instabilidade numérica. Este problema é observado mais claramente na Figura VI.6.3.4. Isto mostra-nos a importância de explorar adequadamente as características matemáticas implícitas em cada forma de função para $\Theta_l(x_i)$ da Equação A.6.1.

Na resolução do modelo variacional usa-se como função dependente o perfil dado pela Equação IV.4.1. Entretanto, observa-se que esta equação gera perfis instáveis. Para solucionar este problema usa-se a Equação IV.4.2 e seus resultados numéricos confirmam a sua estabilidade. Observe que estas equações seguem a forma do perfil apresentado pela Equação A.6.1, ou seja, muda-se somente a forma da função arbitrária $\Theta_l(x_i)$.

Para estudar o motivo da instabilidade provocada pelo uso da Equação IV.4.1 faz-se necessário avaliar os valores dos coeficientes $C_{j,l}$ e para o determinante do sistema de equações formado a partir da Equação A.6.2 ou A.7.1.2. Na Tabela VI.6.7.1 é mostrado todos os coeficientes $C_{j,l}$ dos perfis radiais de velocidade das Figuras VI.4.1, VI.4.3, VI.6.3.3 e VI.6.3.4. Os dados das duas figuras referem-se aos perfis sem efeito de parede.

Tabela VI.6.7.1: Coeficientes dos perfis radiais de velocidade axial.

Coeficiente	Figuras			
	VI.4.1	VI.4.3	VI.6.3.3	VI.6.3.4
$C_{j,0}$	2,3406e-1	5,9134e-2	4,9383e-1	1,0493
$C_{j,1}$	-8,3653e-1	-2,5572e-1	-2,7124e-1	-8,7569
$C_{j,2}$	4,9868	1,0302e-1	1,9029e-2	2,6018e+2
$C_{j,3}$	-1,2173e+1	1,2216e-2	-3,4287e-2	-4,0010e+3
$C_{j,4}$	-6,7484e+2	2,0715e-2	-2,8373e-2	3,2909e+4
$C_{j,5}$	9,9706e+3	1,2654e-2	-3,0195e-2	-1,5947e+5
$C_{j,6}$	-6,8736e+4	1,1029e-2	-2,8710e-2	4,7590e+5
$C_{j,7}$	2,8591e+5	8,1918e-3	-2,6718e-2	-8,7166e+5
$C_{j,8}$	-7,8042e+5	7,2727e-3	-2,4003e-2	9,0001e+5
$C_{j,9}$	1,4469e+6	5,3536e-3	-2,0773e-2	-3,2578e+5
$C_{j,10}$	-1,8366e+6	5,0446e-3	-1,7214e-2	-2,8069e+5
$C_{j,11}$	1,5722e+6	3,3895e-3	-1,3423e-2	2,8586e+5
$C_{j,12}$	-8,6766e+5	3,5277e-3	-9,5631e-3	2,7494e+4
$C_{j,13}$	2,7866e+5	1,7451e-3	-5,8915e-3	-1,1943e+5
$C_{j,14}$	-3,9545e+4	2,4290e-3	-2,4605e-3	3,8608e+4

Matematicamente, os coeficientes das séries polinomiais que apresentam valores numéricos, em módulo, aproximadamente decrescentes do primeiro ($l=0$) para o último ($l=n$), constituem séries estáveis (GERALD, 1989). Outro fator que contribui para a instabilidade é a alternância dos sinais de $C_{j,l}$, ou seja, ora negativo ora positivo. A Figura VI.6.7.1 mostra que a instabilidade poder ainda ser mais acentuada quando comparadas às figuras cujos dados estão expostos na Tabela VI.6.7.1.

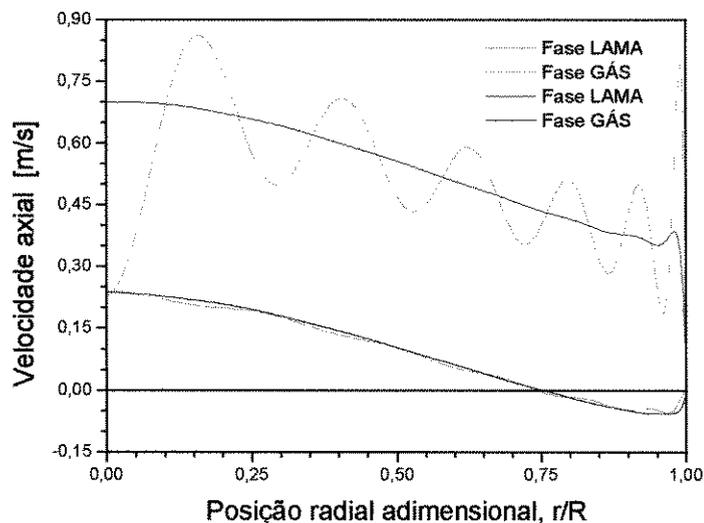


Figura VI.6.7.1: Instabilidade numérica ocasionada pela escolha da função $\Theta_l(x_i)$.

Os resultados mostrados na Figura VI.6.7.1 são obtidos a partir do *Caso-1* da Tabela VI.1. Nesta simulação considera-se uma série polinomial com quinze termos e com sessenta e quatro raízes para a quadratura de Gauss. Os determinantes calculados são da ordem de 10^{-161} e 10^{+66} quando se usa, respectivamente, as Equações IV.4.1 (linha pontilhada) ou IV.4.2 (linha contínua) no modelo variacional da Equação V.1.1. Observa-se que os valores dos coeficientes dos perfis nesta figura sofrem variações semelhantes aos valores mostrados na Tabela VI.6.7.1. A diferença básica entre as Equações IV.4.1 e IV.4.2 encontra-se nos valores calculados para as constantes dos perfis. Na primeira equação, estes valores são relativamente grandes e qualquer arredondamento ocasiona uma grande oscilação nos valores das funções; por conseqüência, gera a instabilidade dos perfis. Isto não é verificado na segunda equação, uma vez que os valores dos coeficientes são relativamente pequenos.

IX.6.8 – Sensibilidade da modelagem variacional

A correlação para o cálculo da variável $\bar{\varepsilon}_g$ é um parâmetro extremamente importante para obter convergência nas simulações numéricas de um reator do tipo coluna. Conforme o Tópico VI.6.7, quando o perfil radial de velocidade é instável, a estabilidade é obtida por substituição da forma da função arbitrária $\Theta_i(x_i)$. Entretanto, quando esta substituição não é suficiente, faz-se necessário substituir a correlação de $\bar{\varepsilon}_g$.

Nas Figuras VI.6.8.1 e VI.6.8.2 são mostrados os perfis radiais obtidos por meio de duas diferentes correlações para a variável fração volumétrica média de gás. Na primeira, emprega-se a correlação de TARMY et al. (1995) e na outra a correlação de CHEN et al. (1984). Avaliam-se também os perfis das Equações IV.4.1 (linha pontilhada) e IV.4.2 (linha contínua).

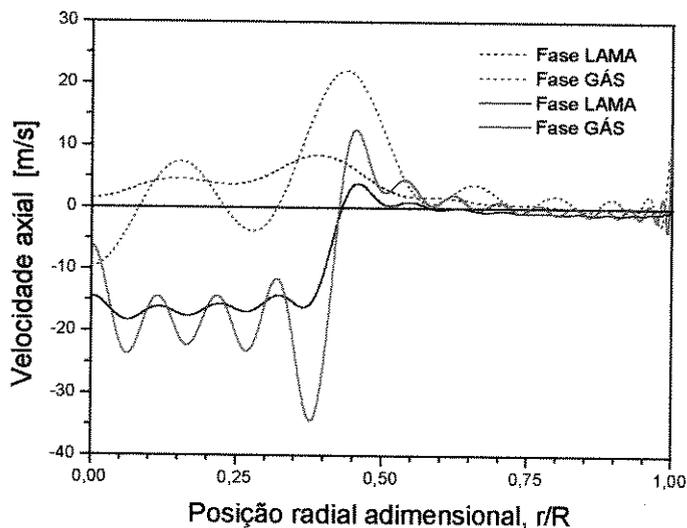


Figura VI.6.8.1: Instabilidade gerada pela correlação de TARMY et al. (1984).

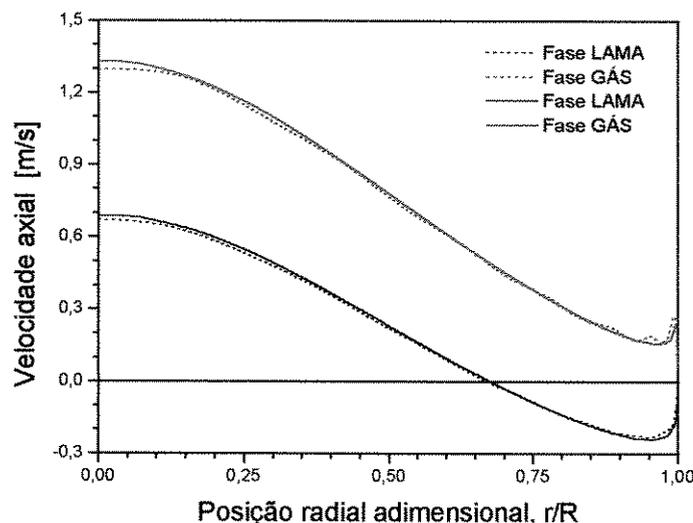


Figura VI.6.8.2: Instabilidade gerada pela correlação de CHEN et al. (1995).

As simulações mostradas nas Figuras VI.6.8.1 e VI.6.8.2 são obtidas com o *Caso-1* da Tabela VI.1, diferindo apenas nos valores das velocidades superficiais, $U_{\text{liquido}} = 6,9\text{e-}3$ e $U_{\text{gás}} = 9,8\text{e-}2$. As séries dos perfis são avaliados com trinta termos e usa-se noventa e seis pontos na quadratura de Gauss.

Na Figura VI.6.8.1, a Equação IV.4.2 mostra os coeficientes dos perfis com ordem de magnitude superior a um e bastante alternância entre um valor negativo e um positivo, fato este que também caracteriza a instabilidade da Equação IV.4.1.

VI.6.9 – Influência do diâmetro do reator

Com o objetivo de avaliar o quanto satisfatório é o perfil de concentração da Equação V.3.10, nas Figuras VI.6.9.1 até VI.6.9.4 são simuladas as situações descritas nas Figuras VI.5.1 até VI.5.4, porém agora considere o diâmetro do reator igual a 0,40 [m]. Nas figuras deste tópico são mostrados os perfis radiais para o componente $i = 1$ (reagente) e $i = 5$ (produto) nas regiões de entrada ($z=0$) e de saída ($z=H=3,0[m]$) do reator. Os demais perfis de concentração são análogos.

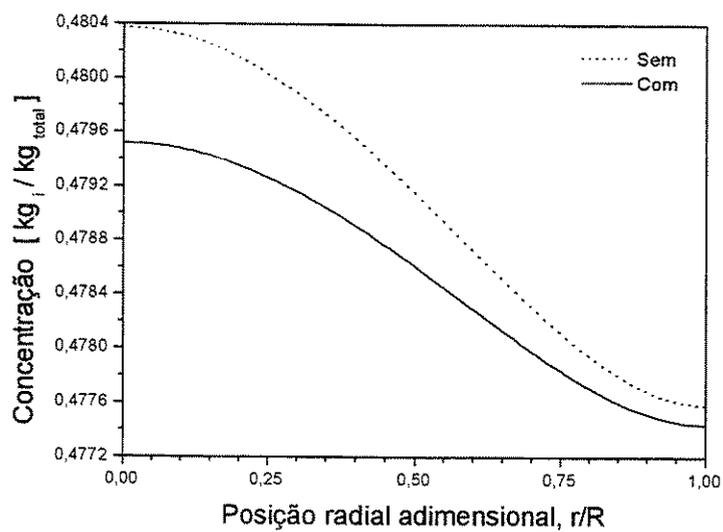


Figura VI.6.9.1: Perfil de concentração de $i = 1$ em $z = 0$.

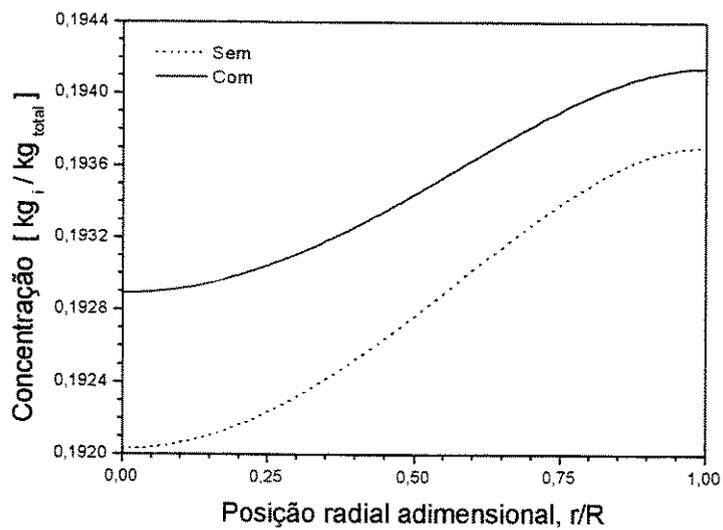
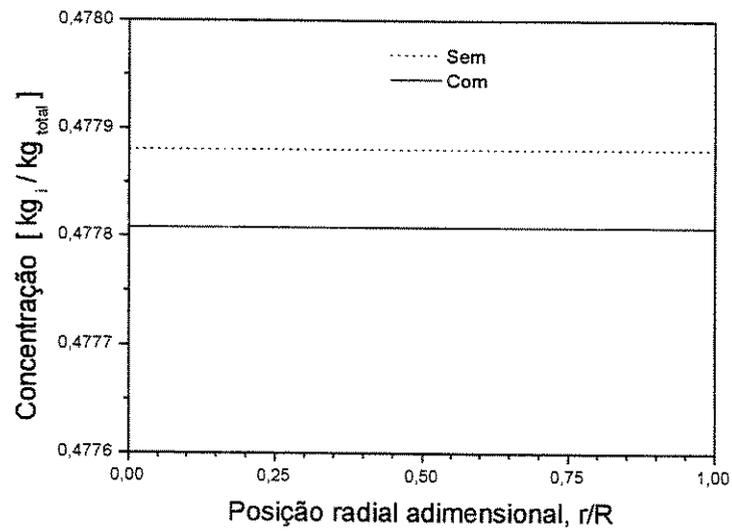
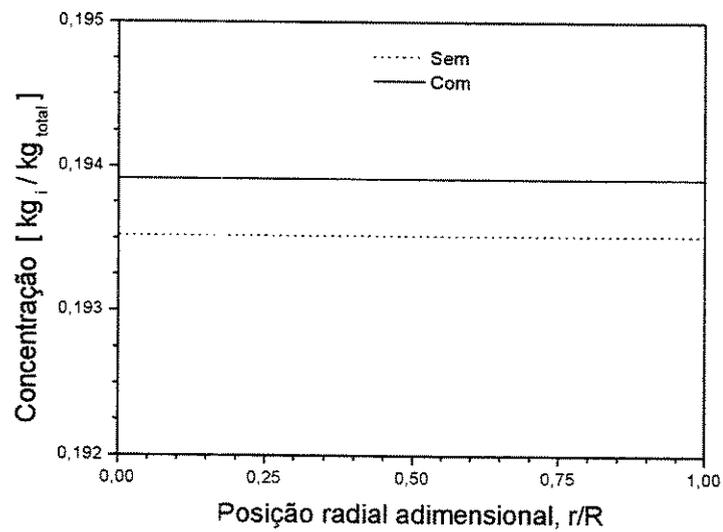


Figura VI.6.9.2: Perfil de concentração de $i = 5$ em $z = 0$.

Figura VI.6.9.3: Perfil de concentração de $i = 1$ em $z = H$.Figura VI.6.9.4: Perfil de concentração de $i = 5$ em $z = H$.

Considerando-se a posição radial central, os desvios relativos percentuais entre as curvas *com* (linha contínua) e *sem* (linha pontilhada) a aplicação da correlação de Prandtl nas Figuras VI.6.9.1 até VI.6.9.4 são 0,18 , 0,45 , 0,02 e 0,02 , respectivamente. Observa-se por estes valores que um aumento do raio do reator torna o uso da correlação desnecessário.

Quando o diâmetro do reator é superior a quatorze centímetros, verifica-se a presença do refluxo da fase gás próximo à parede interna do reator. Entretanto, a descrição quantitativa não é satisfatória devido à utilização do perfil radial de fração volumétrica com apenas um parâmetro de ajuste. Assumindo-se a correlação de efeito de parede, o diâmetro no qual verifica-se o refluxo da fase gás é igual a doze centímetros.

VI.6.10 – Influência do termo de dispersão

Assim como no tópico anterior, o objetivo aqui é avaliar o quanto satisfatório é o perfil de concentração da Equação V.3.10. Nas Figuras VI.6.10.1 até VI.6.10.4 são simuladas as situações descritas nas Figuras VI.5.1 até VI.5.4, porém agora considere o termo de dispersão reduzido em noventa percentual (90%), ou seja, multiplique este termo por 0,10. Novamente, nas figuras deste tópico são mostrados os perfis radiais obtidos para o componente $i = 1$ (reagente) e $i = 5$ (produto) nas regiões de entrada ($z=0$) e de saída ($z=H=3,0[m]$) do reator. Os demais perfis de concentração são análogos.

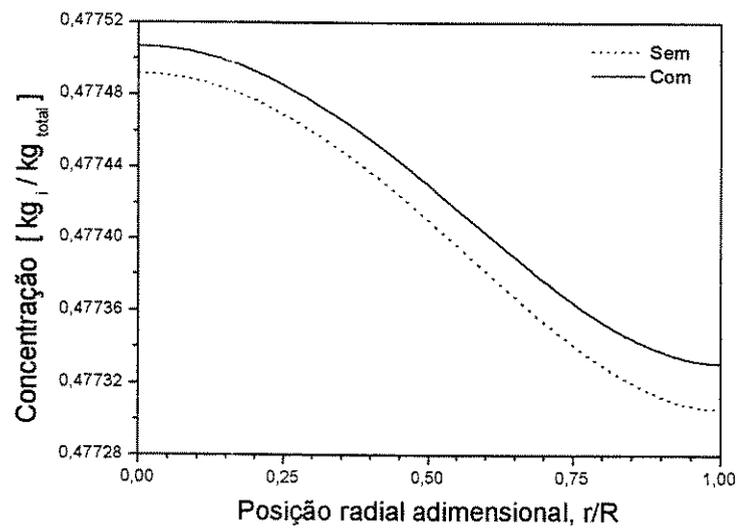


Figura VI.6.10.1: Perfil de concentração do reagente $i = 1$ em $z = 0$.

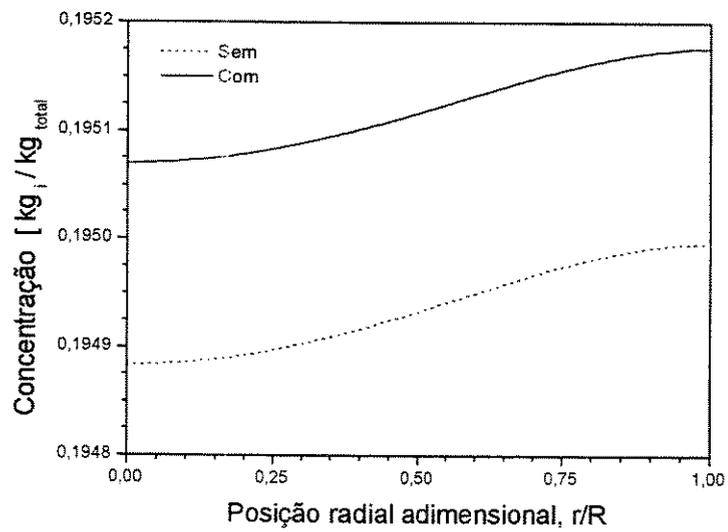


Figura VI.6.10.2: Perfil de concentração do produto $i = 5$ em $z = 0$.

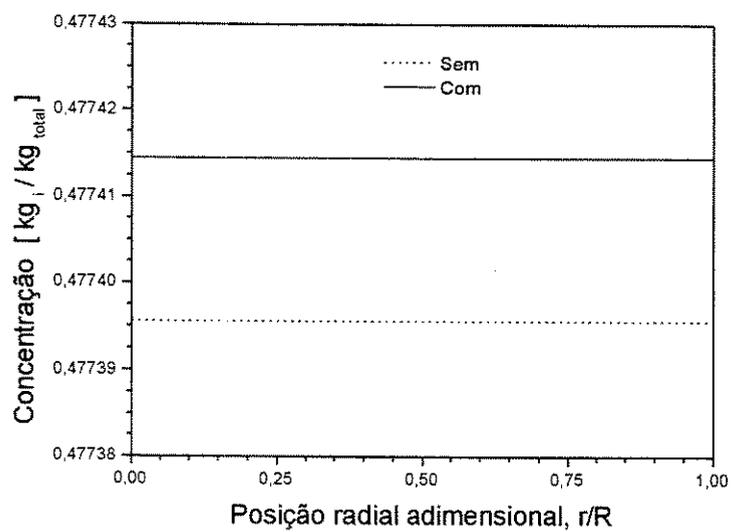


Figura VI.6.10.3: Perfil de concentração do reagente $i = 1$ em $z = H$.

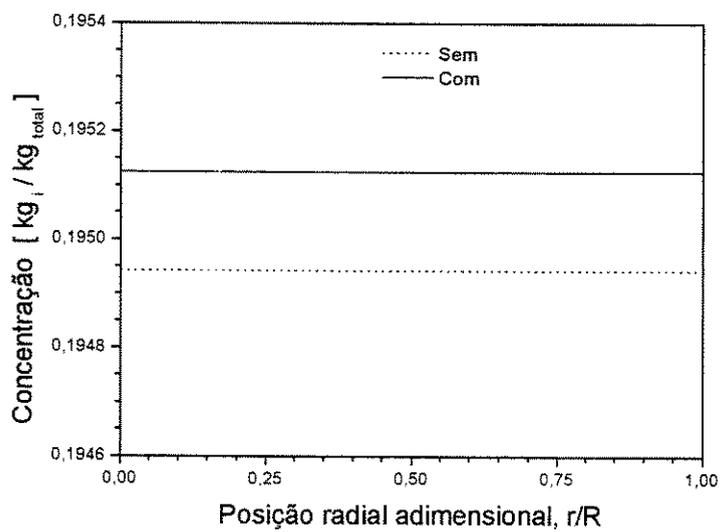


Figura VI.6.10.4: Perfil de concentração do produto $i = 5$ em $z = H$.

Considerando-se a posição radial central, os desvios relativos percentuais entre as curvas *com* (linha contínua) e *sem* (linha pontilhada) a aplicação da correlação de Prandtl nas Figuras VI.6.10.1 até VI.6.10.4 são inferiores a 0,01. Observa-se por este valor que uma redução do termo de dispersão torna o uso da correlação desnecessário. Devido à fluidodinâmica no interior do reator, o termo de dispersão não teve muita influência no comportamento dos perfis de concentração.

A presença do refluxo da fase gás no interior do reator é verificado nas simulações deste tópico e a mesma explicação das simulações mostradas no Tópico VI.6.9 é válida também aqui.

VI.6.11 – Derivando relações para a fluidodinâmica

Na região do escoamento próxima à parede interna do reator é válida a Equação III.5.11. Substituindo-se nesta equação os resultados numéricos apresentados numa mesma coluna da Tabela VI.4.1.1, obtém-se a seguinte relação matemática:

$$|V_{Pr}| = 9,2222 \times \sqrt{\frac{\tau_{w,sl}}{\rho_{sl}}} \quad (\text{VI.6.11.1})$$

A constante de proporcionalidade da Equação VI.6.11.1 é sempre igual para qualquer um dos casos simulados na Tabela VI.4.1.1. Este fato ocorre devido a fixação do valor da variável y^+ . Nesta tabela os resultados são obtidos para $y^+ = 5$. O intervalo de validade desta variável é $5 \leq y^+ \leq 26$. Assim, na Figura VI.6.11.1 é mostrado o valor da constante de proporcionalidade para todo o intervalo de validade da variável y^+ .

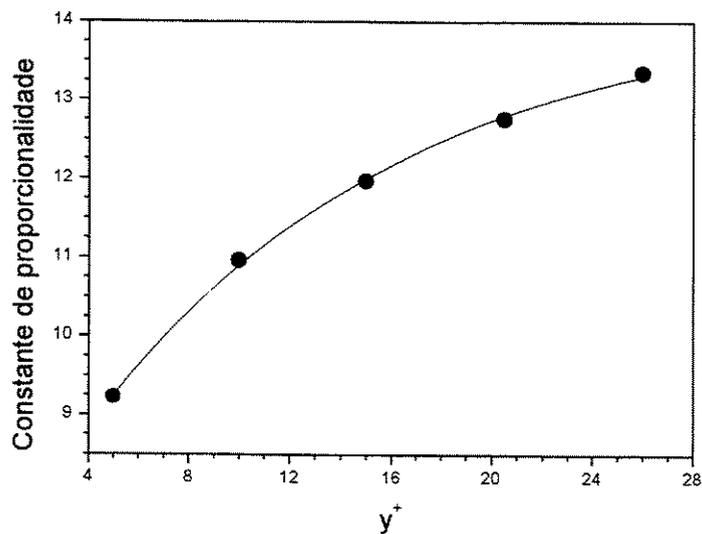


Figura VI.6.11.1: Relação entre $y^+ \times constante$.

O valor médio calculado para a constante de proporcionalidade nos cinco pontos mostrados na Figura VI.6.11.1 é 11,6479. Este valor apresenta um desvio relativo de 0,15% em relação ao valor mostrado na literatura e dado na Equação III.5.11. Na Figura VI.6.11.2 mostra-se a relação entre y^+ e $\mu^{(i)}/\mu$ obtidas com a Equação III.5.9.

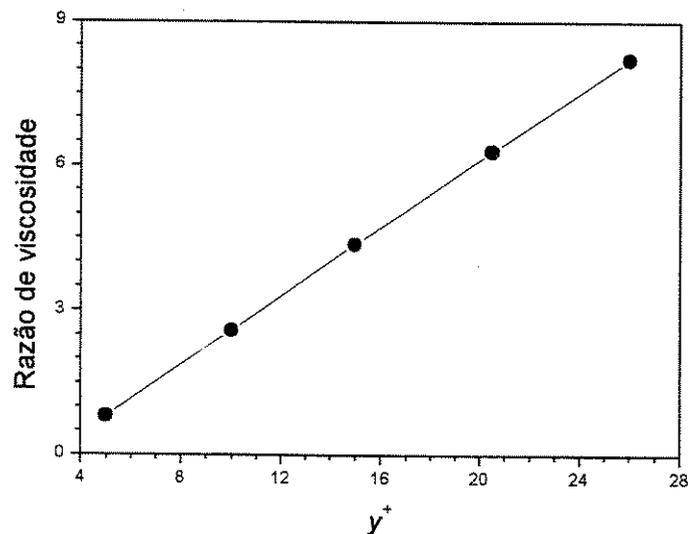


Figura VI.6.11.2: Relação entre $y^+ \times \mu^{(v)} / \mu$.

As Figuras VI.6.11.1 e VI.6.11.2 são obtidas a partir dos resultados das simulações do *Caso-1* até *Caso-5* da Tabela VI.1. Cada um dos pontos apresentados nestas figuras são obtidos por médias aritméticas simples entre os resultados obtidos para cada um dos casos simulados. O desvio relativo máximo do valor obtido para cada caso em relação ao valor médio é 0,00% e 0,95% para as Figuras VI.6.11.1 e VI.6.11.2, respectivamente. Os valores destas figuras mostram-se em concordância com várias outras simulações, onde são variadas, individualmente ou coletivamente, as velocidades superficiais de escoamento, a fração média de sólidos e o diâmetro do reator.

Capítulo VII

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste capítulo são apresentadas as discussões, as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.

VII.1 – DISCUSSÕES

Apresentam-se a seguir algumas discussões importantes sobre a utilização do método do cálculo das variações.

Vantagens e desvantagens do método

A principal vantagem do método do cálculo das variações está associada à sua flexibilidade, ou seja, um perfil proposto para uma dada variável dependente é auto-ajustável de acordo com as condições de contorno e as condições operacionais do processo. Esta característica permite descrever as regiões críticas de uma fluidodinâmica complexa. Outra vantagem está associada ao fato de que este método proporciona um melhor entendimento físico dos fenômenos envolvidos, já que a sua teoria matemática encontra-se fundamentada em formulações termodinâmicas (p.ex.: mínima energia e máxima entropia).

A principal desvantagem do método variacional é o tedioso esforço algébrico envolvido na manipulação das equações, mas isto é compensado por uma resolução numérica bastante rápida, robusta e simples, fornecendo valores bastante satisfatórios, principalmente naquelas regiões da fluidodinâmica onde a modelagem diferencial não apresenta bons resultados.

Outra desvantagem é que não é possível resolver toda equação diferencial por métodos variacionais, ou seja, não é genérico.

Formulação diferencial e variacional

Os resultados numéricos das simulações computacionais obtidos por meio de formulação diferencial para variáveis perfis radiais de velocidade são reproduzidos pela formulação variacional, mas o contrário nem sempre é verdade. Existem casos onde o modelo diferencial não converge, e para esta mesma situação o modelo variacional converge de forma satisfatória.

Oscilações numéricas nos perfis radiais de velocidade

Observam-se nas figuras para variável perfil radial de velocidade da fase gás que existe uma pequena oscilação deste perfil próxima à parede interna do reator, enquanto que na fase líquida isto praticamente não ocorre. Esta oscilação some quando se usa a correlação de Prandtl, ou seja, está associado à condição de contorno na parede.

Devido ao grau de liberdade do modelo matemático, o resultado da simulação computacional, utilizando-se apenas a equação do balanço de massa da fase gás, fornece um perfil radial de velocidade instável e, conseqüentemente, os perfis são fisicamente inconsistentes. Do contrário, utilizando-se apenas a equação do balanço de massa da fase lama, não existem oscilações. A consideração apenas da equação do balanço da fase lama é também justificada pela sua importância neste processo, por ser a única fase contínua, e por estar presente em maior quantidade (SANTOS JR e GUIRARDELLO, 1999).

Usando-se apenas a equação do balanço de massa da lama e ajustando um valor para a variável fração volumétrica, de forma que seja verificado indiretamente o balanço de massa da fase gás, não se verifica o problema de oscilação, mesmo com grandes variações nos valores dos coeficientes da função dependente. Quando ocorrem pequenas oscilações nos perfis, este problema é solucionado propondo-se uma outra forma para esta função. Entretanto, quando existem grandes oscilações, nem mesmo a escolha de outras formas de funções dependentes são capazes de solucionar a instabilidade, e isto somente é resolvido quando realizado um ajuste externo para encontrar um valor adequado para a variável fração volumétrica.

Quão satisfatória é a modelagem variacional

Apesar da simplicidade do modelo variacional empregado para a fluidodinâmica no interior do reator, os resultados obtidos para variáveis perfis radiais de velocidade são coerentes e satisfatórios. O modelo descreve o fluxo de escoamento padrão e os dados experimentais avaliados, indicando que o método pode ser aplicado ao reator em questão.

Otimização da variável perfil radial de fração volumétrica

A variável perfil radial de fração volumétrica com apenas uma constante de ajuste (perfil parabólico) não é capaz de descrever muito bem o comportamento das fases, principalmente para a fase gás. Comprova-se através de uma regressão estatística que este tipo de ajuste não é insatisfatório. Este fato conduz aos estudos de otimização para obter, de forma simultânea, um perfil polinomial para esta variável e para variáveis perfis radiais de velocidade. O modelo a ser otimizado é altamente não-linear.

Embora não tenha sido demonstrada de forma rigorosa a validade de estender o princípio variacional da Equação V.1 para a Equação V.2 para obter-se a variável fração volumétrica, essa hipótese mostra-se interessante o suficiente para ser investigada. Além disso, o método do cálculo das variações é equivalente a outros métodos numéricos, possui embasamento em princípios físicos, além de ser muito simples de se aplicar e fornecer bons resultados, mesmo com poucos termos na série da função dependente (método de Ritz). Desta forma, este método pode ser justificado como um caminho alternativo para modelar e simular a fluidodinâmica no interior do reator em estudo.

Explorando a otimização do princípio variacional

A exploração dos aspectos implícitos de otimização associada ao método dos cálculos das variações num problema matemático com alta não-linearidade e dimensão leva o resultado da simulação para múltiplas soluções, ou seja, a solução varia de acordo com a estimativa inicial fornecida. Justifica-se isto pela falta de capacidade dos programas de otimização em resolver este tipo de problema, mesmo nos casos onde todas as equações são expostas de forma analítica. Este problema ainda é agravado pela inter-relação dos multiplicadores de Lagrange das restrições do problema.

Para um modelo matemático simples, os resultados numéricos da otimização e do cálculo das variações podem diferir ligeiramente. Isto ocorre quando os gradientes dos coeficientes das funções dependentes não são explicitados. Entretanto, estes desvios não são significativos. Para os modelos mais elaborados, como na regressão simultânea das variáveis perfis de velocidade e fração volumétrica, os desvios são significativos.

Utilização da condição de contorno do efeito de parede

A literatura mostra que o uso da condição de contorno do efeito de parede é verificado empiricamente, razão esta pela qual esta condição é considerada no modelo variacional. Com esta consideração, os dados obtidos por meio das simulações numéricas melhor descrevem os dados experimentais próximo à parede interna do reator (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 2001). Para evitar problemas numéricos, na análise deste efeito assume-se que a equação para a variável fração volumétrica é dada na forma parabólica.

Para representar satisfatoriamente as variáveis perfis radiais de velocidade no modelo variacional *sem* o efeito de parede, necessariamente as funções dependentes para estas variáveis são ajustadas com muitos termos nas séries polinomiais. Justifica-se este fato pela condição de contorno e pelo elevado gradiente de velocidade próximo à parede interna do reator, o que dificulta o cálculo numérico.

O uso da correlação do efeito de parede leva a função dependente da variável perfil de velocidade a ser descrita com um menor número de termos na série polinomial, o que constitui uma grande vantagem para um processo de otimização. A redução do número de termos é superior a 50%, o que torna um fator de motivação para descrever o sistema *com* o efeito de parede do ponto de vista de um problema de otimização, uma vez que os problemas *com* o efeito de parede são descritos apenas do ponto de vista da abordagem variacional.

Sistema com reações químicas

Os perfis das concentrações concordam com os dados de CARBONELL e GUIRARDELLO (1999) e mostram também que um perfil com três parâmetros de ajuste descreve bem o comportamento desta variável, pois a sua variação radial não é muito acentuada, mesmo quando se faz uma análise puramente numérica por meio da redução do valor do termo de dispersão radial ou do aumento do diâmetro do reator. Para evitar problemas numéricos, na análise do sistema com reação química assume-se a variável fração volumétrica de gás na forma parabólica.

Importância do perfil radial do líquido num sistema reacional

Para o modelo matemático estudado, os perfis radiais de velocidade e viscosidade da fase líquida sofrem pequena influência com a variação da densidade do líquido, razão pela qual este perfil é considerado constante no estudo com reação química. Apesar do perfil radial da fase gás ser influenciado, este não é considerado, ou melhor, a sua influência é incorporada ao perfil do líquido durante a simulação numérica. Esta hipótese é também assumida por CARBONELL e GUIRARDELLO (1999).

Influência do raio do reator e do termo de dispersão nos perfis

O refluxo da fase gás é verificado quando se aumenta o diâmetro do reator ou quando se diminui a taxa de dispersão das fases. Entretanto, a representatividade quantitativa deste refluxo é prejudicada pela utilização de um perfil de fração volumétrica com apenas um parâmetro de ajuste.

Para um reator com diâmetro pequeno (ordem de centímetros) e com elevada taxa de dispersão, o perfil de concentração é influenciado significativamente pela consideração da condição de contorno dada pelo efeito de parede. Tal influência é maior na região de entrada e seu efeito se reduz gradualmente até a região de saída.

Os componentes presentes numa baixa concentração sofrem uma influência mais acentuada. Isto justifica a necessidade de consideração da correlação de Prandtl nos estudos que envolvem reações químicas. A correção do modelo com a utilização de efeito de parede não é necessária quando o diâmetro assume a ordem de alguns decímetros, ou quando a taxa de dispersão é reduzida.

Invariabilidade dos perfis quanto ao tipo de função dependente proposta

Para diferentes tipos de séries polinomiais empregadas na regressão de um perfil de variável dependente, os resultados obtidos para estes são numericamente idênticos, mas não nas suas constantes. Portanto, conclui-se que se o princípio variacional está bem aplicado, a escolha do tipo de série não afeta os resultados obtidos.

Instabilidade de perfis

Os problemas de instabilidade numérica são justificados pela escolha inadequada de uma função dependente ou pela utilização de correlação empírica não satisfatória às condições operacionais simuladas.

Caracterização do ponto de extremo

Após a aplicação de quatro condições necessárias e suficientes para a análise do ponto de extremo num modelo variacional, a equação integral em estudo é caracterizada como um ponto de mínimo forte. Portanto, a formulação variacional, do ponto de vista de uma técnica de otimização, constitui no caso de um problema de minimização.

Não existe o ponto conjugado para o polinômio do tipo Ritz-Rayleigh ou Tchebyshev. A derivada do polinômio é zero ou para o ponto inferior ou para algum ponto intermediário, nunca para os dois pontos juntos. Isto torna estes polinômios interessantes, pois a condição de Jacobi não precisa ser verificada quando adotado estes polinômios.

Estudo de correlação para a fluidodinâmica

A literatura mostra que o valor da constante de proporcionalidade da Equação III.5.11 vale 11,63. Entretanto, mostra-se aqui que este valor pode variar de forma não-linear entre os extremos 9,2222 e 13,3438, sendo o valor médio calculado em 11,6479. Os desvios relativos calculados para estes valores são proporcionais aos erros adotados na implementação computacional do sistema de equações. Para os valores aqui mostrados, estes permanecem invariáveis em nove algarismos significativos.

Método variacional e outros métodos

Apesar dos problemas verificados, os resultados justificam o uso do cálculo das variações como uma técnica adicional aos tradicionais métodos diferenciais (p.ex.: volumes finitos e colocação ortogonal) e, além disto, este é naturalmente uma técnica de otimização que se baseia em princípios físicos consistentes.

A utilização do método variacional dispensa a utilização de etapas adicionais de otimização, o que não se verifica quando empregado os métodos diferenciais.

Finalizando as discussões

Sendo este trabalho bastante completo no que tange ao estudo do cálculo das variações, estamos cientes da nossa preciosa contribuição para a literatura, e que os propósitos deste podem ser perfeitamente explorados em outros processos de interesse.

VII.2 – CONCLUSÕES

O desenvolvimento desta tese obteve êxito em seu principal objetivo: demonstrar que o método variacional pode ser aplicado para modelar e simular matematicamente a fluidodinâmica no interior do reator em estudo (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 1999). Adicionalmente, demonstrou-se que:

- i) Os resultados numéricos da abordagem variacional e da abordagem diferencial são iguais para os casos em que se utilizam as correlações da literatura (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 1999);
- ii) A abordagem variacional é um método de otimização (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 2000);

Para complementar os estudos, conclui-se ainda que o método variacional:

- i) Pode também utilizar o efeito de parede para modelar e simular o escoamento do fluido (SANTOS JR. e GUIRARDELLO, 2001);
- ii) Pode ser aplicado num sistema com a presença de reações químicas;

- iii) Para o modelo analisado, o ponto de extremo é caracterizado como um ponto de mínimo forte quando associado à otimização;
- iv) Pode apresentar problemas de instabilidade e convergência numérica;
- v) Quando associado com a otimização da variável perfil radial de fração volumétrica, ainda precisa ser desenvolvido melhor (isto é objeto de sugestões para trabalhos futuros).

VII.3 – SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para a complementação do trabalho desenvolvido sugere-se em trabalhos futuros:

- i) Seja melhor desenvolvido os estudos de otimização para a obtenção de forma simultânea dos perfis de velocidade e fração volumétrica;
- ii) Explorar o modelo variacional com efeito de parede do ponto de vista de um problema de otimização e, conseqüentemente, a busca pela obtenção do perfil de fração volumétrica juntamente aos perfis de velocidade;

Conforme mostram as simulações com efeito de parede, o número de termos necessários para descrever os perfis são bem menores quando comparado ao modelo sem este efeito, o que favorece a otimização e talvez reduza o problema de multiplicidade de soluções ou de convergência.

- iii) Encontrar na literatura dados para os perfis de velocidade das fases lama e gás para uma mesma condição operacional. Isto possibilita que através da análise estatística seja proposto um perfil de fração volumétrica com duas constantes de ajuste.

Ressalta-se que os perfis de frações volumétricas com duas ou mais constantes de ajuste têm fornecidos resultados mais satisfatórios e com maior grau de realismo.

- iv) Testar outros programas de otimização (“*softwares*”) mais robustos para tentar solucionar o problema de multiplicidade de soluções ou estimativa inicial.
- v) Implementar as variáveis de processo como uma função da temperatura e pressão;
- vi) Aplicar o método do cálculo das variações em outros processos de interesse, especialmente naqueles onde uma técnica de otimização se faz necessária.

**REFERÊNCIAS
BIBLIOGRÁFICAS**

- ABRAMOWITZ, M. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*. New York: Dover, 1968.
- ABREU, J. C. N. *Modelagem e simulação de reator de leito expandido aplicado ao hidroprocessamento de óleos pesados e resíduos de destilação*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química (F.E.Q.), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) – Brasil, 1995. Dissertação (mestrado)
- ARAGON, F.F. *Cálculo variacional e aplicações*. Campinas: Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação (I.M.E.C.C.), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) – Brasil, 1980. Dissertação (mestrado)
- ATKINSON, K. E. *Elementary numerical analysis*. New York: John Wiley & Sons, 1988.
- BARBOSA, J. L. M. Geometria diferencial e cálculo das variações. *Proceedings...* 10^o. Colóquio Brasileiro de Matemática – Poços de Caldas – Brasil, 1975.
- BAUER, M., EIGENBERGER, G. Multiscale modeling of hydrodynamics, mass transfer and reaction in bubble column reactors. *Chem. Engng. Sci.*, v.56, p.1067-1074, 2001.
- BAZARRA, M. S., SHERALI, H. D., SHETTY, C. M. *Nonlinear programming – theory and algorithms*. New York: John Wiley & Sons Inc., 2th. ed., 1993.
- BECKER, E., HILLER, W. J., KOWALEWSKI, T. A. Nonlinear dynamic of viscous droplets. *J. Fluid Mech.*, v.258, p.191–216, 1994.
- BECKER, S., De Bie, H., SWEENEY, J. Dynamic flow behaviour in bubble columns. *Chem. Engng. Sci.*, v.54, p.4929-4935, 1999.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Transport phenomena*. New York: John Wiley, 1960.
- BLISS, G. A. *Lectures on the calculus of variations*. Chicago: the University of Chicago Press, Phoenix Science Press, 1963.
- BOLZA, O. *lectures on the calculus of variations*. New York: Dover Publ. Inc., 1961.

BORCHERS, O., BUSCH, C., SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G. Applicability of the standard κ - ε turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns – Part II: Comparison of detailed experiments and flow simulations. *Chem. Engng. Sci.*, v.54, p.5927, 1999.

BOYCE, W. E., DIPRIMA, R. C. *Elementary differential equations and boundary value problems*. New York: John Wiley, 1986.

CARBONELL, M. M. *Modelagem e simulação de reator fluidizado trifásico aplicado ao processo de hidroconversão de óleos pesados*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química (F.E.Q.), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) – Brasil, 1996. Dissertação (mestrado)

CARBONELL, M. M., GUIRARDELLO, R. Modelling of a slurry bubble column reactor applied to the hydroconversion of heavy oils. *Chem. Engng. Sci.*, v.50, n.21/22, p.4179-4185, 1997.

CARBONELL, M. M., GUIRARDELLO, R. Hydrotreatment and hydrocracking of oil fractions. In *STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS*, 1999, Antwerpen. *Proceedings... 2nd Int. Symposium / 7th European Workshop*, 1999. v. 127, p.289-296.

CARNAHAN, R. *Applied numerical methods*. New York: John Wiley, 1969.

CHEN, Z., ZHENG, C., FENG, Y., HOFMANN, H. Modelling of three-phase fluidized beds based on local bubble characteristics measurements. *Chem. Engng. Sci.*, v.50, n.2, p.231-236, 1995.

CHEN, C.-M., LEV, L.-P. A highly elevated mass transfer rate process for three-phase, liquid-continuous fluidized beds. *Chem. Engng. Sci.*, v.81, p.223-230, 2001.

CLARKE, F. H., ZEIDAN, V. Sufficiency and the Jacobi condition in the calculus of variations. *Can. J. Math.*, v.38, n.5, p.1199-1209, 1986.

COURANT, R. *Calculus of variations*. New York: Courant Institute Publ., 1945-1946.

COURANT, R., HILBERT, D. *Methods of mathematical physics*. New York: John Wiley & Sons, v.1, 1953.

COURANT, R. *Differential and integral calculus*. N. Y.: Interscience Publ. Inc., v.2, 1959.

- DECKWER, W.-D. On the mechanism of heat transfer in bubble column reactors. *Chem. Eng. Sci.*, v.35, p.1341-1346, 1980.
- DECKWER, W.-D. *Bubble column reactors*. New-York: John Wiley, 1992.
- DELNOIJ, E., KUIPERS, J. A. M., van SWAAIJ, W. P. M. Dynamic simulation of gas-liquid two-phase flow: effect of column aspect ratio on the flow structure. *Chem. Engng. Sci.*, v.52, n.21/22, p.3759-3772, 1997.
- Di FELICE, R. The pseudo-fluid model applied to three-phase fluidisation. *Chem. Engng. Sci.*, v.55, p.3899-3906, 2000.
- DORAISWANY, L. K., SHARMA, M. M. *Heterogeneous reactions – analysis, examples, and reactor design*. New York: John Wiley & Sons, v.2, 1984.
- DUDUKOVIC, M. P., DEVANATHAN, N. Bubble column reactors; some recent developments. In LASA, H. I., DOGU, G., RAVELLA, A., 1993, Netherlands. *Proceedings... Chemical Reactor Technology for Environmentally Safe Reactors and Products*, 1993. Kluwer Academic Publishers, p.353-377.
- ECER, A., ROUT, R. K. Investigation of solution of Navier–Stokes equations using a variational formulation. *Int. J. for Num. Meth. in Fluids*, v.3, n.1, p.23–31, 1983.
- FAN, L.-S. *Gas-liquid-solid fluidization engineering*. Boston: Butterworth Publishers, 1989, 762 p.
- FINLAYSON, B. A. *The method of weighted residuals and variational principles*. New York: Academic Press, 1972.
- FORSYTH, A. R. *Calculus of variations*. Cambridge: Cambridge University Press, 1927.
- FOX, C. *An introduction to the calculus of variations*. London: Oxford Univ. Press, 1954.
- FRASER, C. G. Isoperimetric problems in the variational calculus of Euler and Lagrange. *Historia Mathematica*, v.19, p.4-23, 1992.
- GAL–OR, B., WEIHS, D. Variational analysis of high mass transfer rates from spherical particles boundary-layer. *Int. J. Mass Heat Transfer*, v.15, p.2027–2044, 1972.
- GASCHE, H.-E., EDINGER, C., KÖMPEL, H., HOFMANN, H. A fluid-dynamically based model of bubble column reactors. *Chem. Eng. Technol.*, v.13, p.341-349, 1990.

GELFAND, I. M., FOMIN, S. V. *Calculus of variations*. New Jersey: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1963.

GERALD, C. *Applied numerical analysis*. Massachusster: Addison-Wesley, 1989.

GHARAT, S. D., JOSHI, J. B. Transport phenomena in bubble column reactors. *Chem. Eng. J.*, v.48, p.141-151, 1992.

GILL, P. E., MURRAY, W., SAUNDERS, M. A., WRIGHT, M. H. *User's guide for NPSOL (v. 4.0) – A Fortran package for nonlinear programming*. California: Stanford University, Department of Operations Research, Technical Report SOL 86-2, 1986.

GORLA, R. S. R., MADDEN, P. E. A variational approach to non-steady non-newtonian flow in a circular pipe. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, v.16, p.251–265, 1984.

GRIENBERGER, J., HOFMANN, H. Investigations and modeling bubble columns. *Chem. Eng. Process*, v.47, n.9/11, p.2215-2220, 1992.

HAN, S., ZHOU, J., JIN, Y., LOH, K. C., WANG, Z. Liquid dispersion in gas-liquid-solid circulating fluidized beds. *Chem. Eng. J.*, v.70, p.9-14, 1998.

HARIKI, S. *Sobre curvas generalizadas*. Campinas: Instituto de Matemática e Estatística (I.M.E.), Universidade de São Paulo (U.S.P.) – Brasil, 1973. Dissertação (mestrado)

HIKITA, H., ASAI, S., TANIGAWA, K., SEGAWA, K., KITAO, M. The volumetric liquid-phase mass transfer coefficient in bubble columns. *Chem. Eng. J.*, v.22, p.61, 1981.

HILLMER, G., WEISMANTEL, L., HOFMANN, H. Investigations and modelling of slurry bubble column. *Chem. Engng. Sci.*, v.49, n.6, p.837-843, 1994.

IRVING, J., MULLINEUX, N. *Mathematics in physics engineering*. London: Academic Press Inc., 1959.

JARZEBSKI, A. B., MALINOWSKI, J.J. Drag and mass transfer in a creeping flow of a carreau fluid over drops or bubbles. *Can. J. Chem. Engng.*, v.65, August 1987.

JARZEBSKI, A. B., MALINOWSKI, J.J. Drag and mass transfer in multiple drop slow motion in a power law fluid. *Chem. Engng. Sci.*, v.41, n.10, p.2569–2573, 1986-a.

JARZEBSKI, A. B., MALINOWSKI, J.J. Transient mass and heat transfer from drops or bubbles in slow non-newtonian flows. *Chem. Engng. Sci.*, v.41, n.10, p.2575–2578, 1986-b.

- KAST, W. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v.5, p.329, 1962.
- KRISHNA, R., de SWART, J. W. A., ELLENBERGER, J., MARTINA, G. B., MARETTO, C. Gas holdup in slurry bubble columns: effect of column diameter and slurry concentrations. *A.I.Ch.E. J.*, v.43, n.2, p.311-319, February 1997.
- LAMB, H. *Hydrodynamics*. London: Cambridge University Press, 6th. ed., 1962.
- LANCZOS, C. *The variational principles of mechanics*. New York: Dover Publications Inc., 4th. ed., 1970.
- LEGER, D., GOMES, S., WAGNER, H. G., GILBERT, N. Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns – fundamental studies of Eulerian-Eulerian modeling approach. *Chem. Engng. Sci.*, v.54, p.5091, 1999.
- LEITMANN, G. *The calculus of variations and optimal control: an introduction*. New York: Plenum Press, 1986.
- MACCHI, A., GRACE, J. R., Bi, H. T. Use of ultrasound for phase holdup measurements in multiphase systems. *Can. J. Chem. Eng.*, v.79, n.4, p.570-578, 2001.
- MATOS, E. M. *Modelagem e simulação de um reator trifásico, fluidizado aplicado ao processamento das frações pesadas do petróleo*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química (F.E.Q.), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) – Brasil, 2001. Dissertação (doutorado)
- MENZEL, T., in der WEIDE, T., STAUDACHER, O., WEIN, O., ONKEN, U. Reynolds shear stress for modelling of bubble column reactors. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.29, p988-994, 1990.
- MITRA-MAJUNDAR, D., FAROUK, B., SHAH, Y. T., MACKEN, N., OH, Y. K. Two- and three-phase flows in bubble columns: numerical predictions and measurements. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.37, p.2284-2292, 1998.
- MORSE, M. *Variational analysis: critical extremals and sturmian extensions*. New York: John Wiley & Sons, 1973.
- MOSBY, J. F., BUTTKE, R. D., COX, J. A., NIKOLAIDES, C. Process characterization of expanded-bed reactors in series. *Chem. Engng. Sci.*, n.4, p.989-995, 1986.
- PARKINSON, G. Fischer-Tropsch comes back. *Chem. Engng.*, v.104, p.39-41, 1997.

PAVLOV, V. P. Tsirkulyatsiya zhidkosti v barbotazhnom apparate periodicheskogo deistviya. *Khim. Prom.*, n.9, p.698, 1965.

RAMACHANDRAN, P. A., CHAUDHRI, R. V. *Three-phase catalytic reactors*. Philadelphia: Gordon and Breach Science Publishers, 1992.

RANADE, V. V. Modelling of turbulent flow in a bubble column reactor. *Trans. I. Chem. E.*, v.75, Part A, January 1997.

REILLY, I. G., SCOTT, D. S., de BRUIJN, T. J. W., MacINTYRE, D., PISKORZ, J. Axial solids concentrations in three-phase bubble columns. *Chem. Engng. Sci.*, v.45, n.8, p.2293-2299, 1990.

RETI, Z., RETI, P. Variational inequalities as models of chemical reactors. *Hung. J. Ind. Chem.*, v.10, n.3, p.243-250, 1982.

RIEMENSHNEIDER, W. *Chem. Ing. Tech.*, v.50, p.55, 1978.

ROSENBERG, H. S. How good is flue gas desulfurization. *Hydrocarbon Process*, v.57, n.5, p.132, May, 1978.

SAGAN, H. *Introduction to the calculus of variations*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1969.

SANTOS JR., I., GUIRARDELLO, R. Modelling and simulation of a multiphase fluidized bed reactor by variational principles. *Comp. & Chem. Eng. (suppl.)*, S411-414, 1999.

SANTOS JR., I., GUIRARDELLO, R. Explorando as características implícitas de otimização associadas ao método dos princípios variacionais. *Proceedings... XIII COBEQ Congress / XIX Interamerican Congress of Chemical Engineering / I Brazilian Congress of Phase equilibrium and Fluid Properties for Chemical Process Design – Águas de São Pedro – Brasil, Sep 24-27 2000.*

SANTOS JR., I., GUIRARDELLO, R. Wall effect influence in the velocity profiles in slurry bubble column reactor. *Proceedings... VI World Congress of Chemical Engineering – Melbourne – Australia, Sep 2001.*

SCHECHTER, R. S. *The variational method in engineering*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1967.

- SCHUGERL, K. Three-phase-biofluidization – Application of three-phase-fluidization in the biotechnology – A review. *Chem. Engng. Sci.*, v.52, p.3661-3668, 1997.
- SHAH, Y. T., STIEGER, G. J., SHARMA, M. M. Back-mixing in liquid and gas-liquid reactors. *A.I.Ch.E. J.*, v.24, n.3, p.369, May 1978.
- SHAH, Y. T., KELKAR, B. G., GODBOLE, S. P., DECKWER, W.-D. Design parameters estimations for bubble column reactors. *A.I.Ch.E.*, v.28, p.353-378, 1982.
- SHERWIN, M. B., FRANK, M. E. *Hydrocarbon Process*, v.122, November 1976.
- SITTIG, W., FAUST, U., PRÄVE, P., SCHLODERER, J. *Chem. Ind.*, v.30, p.713, 1978.
- SMITH, E. L., GREENSHIELDS, R. N. *Chem. Engng.*, v.81, p.28, 1974.
- STOER, J., BULIRSCH, R. *Introduction to numerical analysis*. New York: Springer, 1980.
- TARMY, B. L., CHANG, M., COULALOGLOU, C. A., PONZI, P. R. The three-phase hydrodynamics characteristics of the *EDS* coal liquefaction reactors: their development and use in reactor scale-up. *Proceedings... 8th International Symposium on Chemical Reaction Engng.* – Edinburg, n.87, September 10-11 1984.
- TORVIK, R., SVENDSEN, H. F. Modelling of slurry reactors – a fundamental approach. *Chem. Engng. Sci.*, v.45, n.8, p.2325-2332, 1990.
- TRUESDELL, C., TOUPIN, R. A. *Handbuch der Physik*. (S. Flügge, ed.). Berlin: Springer-Verlag, 1960. Vol. III/1: The classical field theories.
- UEYAMA, K., MIYAUCHI, T. Properties of recirculating turbulent two phase flow in gas bubble columns. *A.I.Ch.E. J.*, v.25, n.2, p.258, 1979.
- UEYAMA, K., MOROOKA, S., KOLDE, K., KAJI, H., MIYAUCHI, T. Behavior of gas bubbles in bubble columns. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v.19, p.592-599, 1980.
- van DRIESEN, R. P., STEWART, N. C. *Oil Gas J.*, v.18, p.100, May 1964.
- VILJOEN, H. J., GATICA, J. E., HLAVACEK, V. Bifurcation analysis of chemically driven convection. *Chem. Engng. Sci.*, v.45, n.2, p.503-517, 1990.
- VOLPOLICELLI, G., MASSIMILLA, L. *Chem. Engng. Sci.*, v.25, p.1361, 1970.
- WEINSTOCK, R. *Calculus of variations: with applications to physics and engineering*. New York: McGraw-Hill Book Company Inc., 1952.

WEINSTOCK, R. *Calculus of variations: with applications to physics and engineering*. New York: Dover Publications Inc., 1974.

WESTERTERP, K. R., van SWAAIJ, W. P. M., BEENACKERS, S. A. C. N. *Chemical reactor design and operation*. New York: John Wiley & Sons, 1984.

YAMAGOSHI, T. B. S. Tokyo: Dept. of Chem. Eng., Univ. Tokyo, 1969. Dissertation (thesis)

YANG, C. T. Variational theories in hydrodynamics and hydraulics. *J. Hydraulic Engng.*, v.120, n.6, June 1994.

YOSHITOME, H. Tokyo: Inst. Technol., 1967. Dissertation (thesis)

ZHU, J. Drag and mass transfer for flow of a carreau fluid past a swarm of Newtonian drops. *Int. J. Multiphase Flow*, v.21, n.5, p.935-940, 1995.

Anexo - A

CÁLCULO das VARIACÕES

Formalismo matemático

Apresenta-se a seguir uma revisão teórica para o emprego do método do cálculo das variações como uma ferramenta matemática de modelagem e simulação numérica.

A.1 – INTRODUÇÃO

O método do cálculo das variações tem a sua origem na generalização da teoria elementar de máximos e mínimos do cálculo diferencial e integral. Entretanto, este método se refere às funções cujo domínio constitui num conjunto de curvas características (ou funções características) com múltiplas variáveis e a sua abordagem matemática não pode ser tratada pela teoria elementar dos extremos. (BARBOSA, 1975; BLISS, 1963; BOLZA, 1961; COURANT e HILBERT, 1953; COURANT, 1945-1946)

Segundo FOX (1954) a literatura do cálculo das variações é ampla e de natureza bastante especializada, o que ocasiona pequenas variações conceituais, mas sem perda do rigor matemático ou interpretação; conseqüentemente, a sua análise é objetiva e única.

O formalismo matemático da teoria de espaço linear *normado*, descrito em álgebra linear, possibilita generalizar algumas idéias expostas na teoria do cálculo das variações; evitando-se assim as possíveis variações conceituais. Introduce-se este formalismo para apresentar algumas definições, tais como os conceitos de vizinhança e de extremo relativo, já que estes dependem do conceito de *norma* adotado. (SAGAN, 1969)

Além dos detalhes do rigor matemático da teoria do cálculo das variações que serão mostrados a seguir, outros detalhes podem ser encontrados de forma bastante interessante nos livros textos de SAGAN (1969), GELFAND e FOMIN (1963), BOLZA (1961), FOX (1954), COURANT e HILBERT (1953) e FORSYTH (1927).

A.1.1 – Filosofia do método variacional

Na sua forma paramétrica, o problema fundamental do cálculo das variações para um mínimo (máximo) local é formulado por: assume-se um conjunto ϕ_j de funções admissíveis y_j (variáveis dependentes) e um dado integrando paramétrico f , seguido pela determinação de uma função $y_{j,o} \in \phi_j$ que minimize (maximize) o funcional I num dado domínio fechado N_w^δ (fronteiras da hiper-superfície de raio δ) com respeito a todos os

pontos deste domínio, ou seja, $I[y_0] \leq (\geq) I[y_j]$ para qualquer $y_j \in \phi_j$ (HARIKI, 1973; SAGAN, 1969; COURANT e HILBERT, 1953). Geometricamente, esta formulação é representado na Figura A.1.1.1 e mostra os limites das variáveis e funções (SAGAN, 1969).

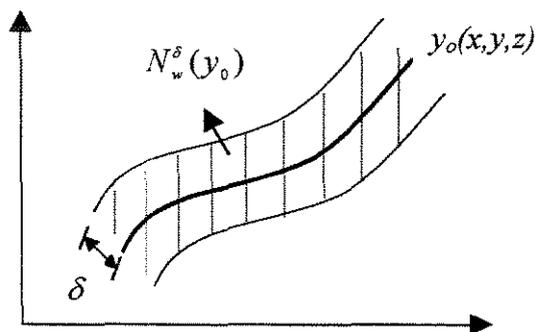


Figura A.1.1.1: Hiper-superfície dos limites da formulação variacional.

De forma literal, a formulação do problema é também dado por: “supõe-se uma totalidade de funções especificadas y_j e que a integral $I[y_j]$ assume um valor numérico simples bem determinado – quantidade escalar ou número real. Estas funções são chamadas de funções admissíveis. O problema do cálculo das variações, associado com tais funções admissíveis e tal integral, constitui então em encontrar, na classe de funções admissíveis que unem dois extremos fixos ou não, aquele na qual a integral tenha o menor ou maior valor possível num dado domínio”. O valor do extremo pode mudar de acordo com a classe de curvas assumida. (BLISS, 1963; BOLZA, 1961)

Conclui-se que a integral $I[y_j]$ assume uma condição de estado estacionário, máximo ou mínimo, em relação à função dependente y_j , podendo ou não estar restrita à algumas condições da formulação (FINLAYSON, 1972; SCHECHTER, 1967; BOLZA, 1961; COURANT e HILBERT, 1953). O funcional analítico I fornece um melhor e mais detalhado entendimento do conceito fundamental do espaço de variações admissíveis e os conceitos de extremo relativo forte e fraco (SAGAN, 1969).

A.1.2 – Formulação do problema variacional

O cálculo das variações é relacionado com a mudança na funcionalidade $I[y_j]$. A denominação de uma funcionalidade é dada pelo espaço de funções admissíveis ou competitivas, na qual pode estar restrito às funções que satisfazem certas condições de continuidade ou contorno. Uma funcionalidade é uma correspondência entre as funções y_j e o conjunto de números reais x_i . Formalmente, uma definição escalar e básica, portanto mais simples e de uso freqüente, para o extremo de uma integral múltipla definida, com derivadas de primeira ordem, é dado pela seguinte representação (LEITMANN, 1986; FINLAYSON, 1972; SAGAN, 1969; SCHECHTER, 1967; GELFAND e FOMIN, 1963; FOX, 1954; COURANT e HILBERT, 1953):

$$I[y_j(x_i)] = \min \text{ ou } \max \int_1^n \int f(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m, \nabla y_1, \dots, \nabla y_m) dx_1 \dots dx_n \quad (\text{A.1.2.1})$$

$$\sum_j = \{y_j | y_j \in C^1[a, b] \rightarrow \mathfrak{R}^n, y_j(a_i) = A_i, y_j(b_i) = B_i\}$$

onde x_i é o vetor das variáveis independentes, y_j é o espaço das funções competitivas (variáveis dependentes) que satisfazem os pontos finais fixos $[a, b]_i$ e ∇y_j é a primeira derivada destas funções. A integral I fornece um valor único e bem definido (WEINSTOCK, 1952). O integrando f é da classe C^2 e é definido, por simplicidade, em todo o $\mathfrak{R}^{2.m+n}$. Os símbolos I e f são adotados por conveniência (FOX, 1954).

O integrando é uma função conhecida que pode estar implícito ou não em relação às variáveis independente, mas depende das funções dependentes e suas derivadas. As funções dependentes, conhecidas também por funções propostas ou tentativas ou de ajuste, e as variáveis independentes são especificadas. Assim, o funcional pode ser calculado e é uma quantidade escalar, pois sendo a integral uma linha ao longo de algum caminho que liga os pontos finais, conhecidos e fixos, o resultado é meramente um número (YANG, 1994; FINLAYSON, 1972; FOX, 1954).

Assume-se $y_j + \varepsilon_j \cdot \phi_j$ sendo o espaço de variação admissível para y_j . Assim, a primeira variação da integral da Equação A.1.2.1, com ε_j suficientemente pequeno, é dado por (WEINSTOCK, 1974; FOX, 1954; WEINSTOCK, 1952):

$$\delta I = \sum_j \frac{d}{d\varepsilon_j} \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_i}^{b_i} f \left[x_i, y_j + \varepsilon_j \cdot \phi_j, \frac{dy_j}{dx_i} + \varepsilon_j \cdot \frac{d\phi_j}{dx_i} \right]_{\varepsilon_j} \cdot dx_1 \dots dx_n = 0 \quad (\text{A.1.2.2})$$

$$h_j = \left\{ \phi_j \mid \phi_j \in C^1[a, b] \rightarrow \mathfrak{R}^n, \phi_j(a_i) = 0, \phi_j(b_i) = 0 \right.$$

Caso existam as variações limitadas e convenientes para ϕ_j e y_j , onde ϕ_j descreve uma função arbitrária contínua e diferenciável em x_i e o parâmetro variável ε_j tende para zero (SCHECHTER, 1967), por uma série de operações matemáticas (aplicação da regra da cadeia, integração por partes e permutação de sinais da derivação e da integração) obtém-se (ARAGON, 1980; WEINSTOCK, 1974; FOX, 1954; WEINSTOCK, 1952):

$$\delta I = \sum_j \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_i}^{b_i} \phi_j \cdot \left[\frac{\partial f}{\partial y_j} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial f}{\partial (y_j / \partial x_i)} \right) \right] \cdot dx_1 \dots dx_n \quad (\text{A.1.2.3})$$

A Equação A.1.2.3 foi estudada por vários matemáticos. Entretanto, devido à sua complexidade quando mais de uma função dependente está presente, o seu resultado é mostrado sem o rigor matemático. (FOX, 1954)

Para um dado funcional I , dentro do espaço de funções admissíveis, é obrigatório que as funções sejam contínuas e que tenham a primeira e segunda derivadas contínuas no intervalo $[a, b]$; em relação aos argumentos x_i , y_j e y'_j nas classes C^0 , C^1 e C^2 (SAGAN, 1969; BOLZA, 1961; FOX, 1954). O integrando f precisa ser diferenciável com relação a qualquer combinação das variáveis independentes (WEINSTOCK, 1952). As derivadas do funcional I são também denominadas de variações de Gâteaux (SAGAN, 1969;

COURANT, 1959). Caso as derivadas não sejam contínuas, imponham-se às derivadas as restrições aplicadas para y_j .

Ponto regular

De certa forma, o problema da Equação A.1.2.1 pode ser considerado regular se apresentar as derivadas de primeira e segunda ordem contínuas por partes no intervalo $[a, b]_i$ em relação aos parâmetros x_i , y_j e y_j' , e o resultado fornecer um valor numérico simples e bem definido (BLISS, 1963; COURANT, 1945-1946).

A.1.3 – Extremando o funcional I

No problema do cálculo variacional tem-se que o ponto estacionário para as variações fracas representa uma condição necessária e suficiente para a função y_j ser o ponto de extremo da integral $I[y_j]$. Este ponto é obtido, em geral, por meio de uma equação diferencial de segunda ordem; usualmente conhecida por equação de Euler-Lagrange ou equação característica. Esta equação constitui na equação fundamental do moderno cálculo das variações (ARAGON, 1980; WEINSTOCK, 1974; FINLAYSON, 1972; LANCZOS, 1970; SAGAN, 1969; BLISS, 1963; BOLZA, 1961; FOX, 1954) e é dado por:

$$\frac{\partial f}{\partial y_j} - \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial y_j / \partial x_i)} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.1.3.1})$$

onde x_i é a variável independente e y_j é a variável dependente. A Equação A.1.3.1 é também obtida por meio do teorema de Stokes (denominada de equação de Euler-Ostrogradski do problema) ou pela generalização do teorema de Green para n -dimensões (WEINSTOCK, 1952). Para a integral ser estacionária com as condições de contorno $y_j(a_i) = A_j$ e $y_j(b_i) = B_j$, a Equação A.1.3.1 precisa ser obrigatoriamente satisfeita (LANCZOS, 1970) para todo x_i entre a_i e b_i (FOX, 1954).

Em geral, o sistema de equações dado pela Equação A.1.3.1 tem definido uma família de curvas integrais no espaço (x_i, y_j) dependentes de $2.i.j$ parâmetros. Tal família é denominada de família de extremos do funcional I .

A Equação A.1.3.1, na qual constitui a forma completa da Equação A.1.2.3, é escrita de forma mais detalhada como (FINLAYSON, 1972; SAGAN, 1969; FOX, 1954; WEINSTOCK, 1952):

$$\left\{ f_{y_j} - f_{y_j y_j} \cdot y_j' - f_{y_j y_j} \cdot y_j'' - \sum_{i=1}^n f_{y_j x_i} - \sum_{k=1}^m [f_{y_j y_k} \cdot y_k' + f_{y_j y_k} \cdot y_k'']_{k \neq j} \right\}_j = 0 \quad (\text{A.1.3.2})$$

onde $i=1, \dots, n$, $j=1, \dots, m$ e $k=1, \dots, m$. Simplificando, para apenas uma única função dependente y_j e uma única variável independente x_j , obtém-se:

$$y_j'' \cdot f_{y_j y_j} + y_j' \cdot f_{y_j y_j} + f_{y_j x} - f_{y_j} = 0 \quad (\text{A.1.3.3})$$

que é chamada de derivada variacional de f com relação a y_j . A solução da Equação A.1.3.2 ou A.1.3.3. envolve, em geral, duas constantes que são determinadas pelas condições de contorno. Conclui-se que o problema variacional não pode ser empregado em problemas que envolvem apenas uma condição de contorno.

Num dado problema variacional existem tantas equações de Euler-Lagrange quantas são as variáveis dependentes y_j , o que gera um sistema de equações, pois a formulação interal $I[y_j]$ deve ter, de forma independente, um extremo em relação a cada função y_j (COURANT, 1945-1946). Uma função y_j é dita estacionária em I , ou I é dita como tendo um valor estacionário, se a primeira variação de I é igual a zero para todas as variações admissíveis para ϕ_j e y_j , tal que $\phi_j(a_i) = \phi_j(b_i) = 0$ (FOX, 1954).

Conforme mencionado, uma condição necessária da teoria variacional requer que a função y_j seja o ponto de extremo relativo da integral $I[y_j]$, ou seja, a função fornece um valor estacionário para a integral. Esta condição corresponde ao ponto crítico no estudo das funções com variáveis reais da teoria elementar dos extremos. Entretanto, não há nenhum paralelo ou coincidência entre estas teorias devido à própria natureza do problema.

A distinção entre variações fracas e fortes é de grande importância no cálculo as variações, pois a integral I pode admitir um máximo ou mínimo para uma variação fraca, mas não para uma variação forte (FOX, 1954).

A.1.4 – Importância da equação de Euler-Lagrange

A equação de Euler-Lagrange é a ferramenta matemática que possibilita transformar um problema variacional para um problema de cálculo diferencial e vice-versa (COURANT e HILBERT, 1953). Adicionalmente, um sistema de equações diferenciais parciais pode ser reduzido para um sistema de equações diferenciais ordinárias ou, então, um sistema de equações diferenciais ordinárias pode ser reduzido para um sistema de equações algébricas por aplicação da aproximação variacional, simplificando o modelo matemático (FINLAYSON, 1972).

A.1.5 – Características implícitas do método

A formulação de um problema variacional requer que alguns importantes pontos sejam bem explicitados (BOLZA, 1961; COURANT e HILBERT, 1953):

- i) Algumas restrições quanto a natureza da função y_j são consideradas, tais como: a continuidade e a existência das derivadas de ordem pelo menos igual a dois;
- ii) As curvas são funções de valor simples das variáveis independentes;
- iii) A integral definida representa a hiper-superfície em questão somente quando o valor das curvas durante todo o intervalo de integração é maior ou igual a zero;
- iv) De forma indireta, o problema considera que existe uma curva a qual fornece um valor de extremo para a hiper-superfície.

A.1.6 – Escolha da função dependente

Antes da variação na funcionalidade ser calculada, faz-se necessário especificar a classe da função y_j , pois o funcional $I[y_j]$ é dependente desta escolha (LEITMANN, 1986; SCHECHTER, 1967). A classe admissível da função y_j é definida em $C^1(a, b)_i$ e satisfaz as condições de fronteiras $y_j(a_j)=A_j$ e $y_j(b_j)=B_j$, ou seja, a classe não é completamente arbitrária. Os limites de y_j não precisam ser sempre satisfeitas, mas é conveniente distinguir quais condições são essenciais e quais são naturais (COURANT, 1945-1946).

O funcional I é fortemente influenciado quanto a escolha da função y_j em análise (JARZEBSKI e MALINOWSKI, 1987b). Entretanto, LEITMANN (1986) e BOLZA (1961) comentam um teorema afirmando que: se, e somente se, a equação de Euler-Lagrange é satisfeita, o valor obtido para o funcional é independente da escolha de y_j .

A.1.7 – Cálculo das variações e a otimização

Diferentemente dos métodos de otimização (programação não-linear) comumente conhecidos, onde o objetivo é determinar o ponto de extremo de uma função de variáveis, no cálculo das variações o objetivo é encontrar o ponto de extremo de uma função dependente descrita não somente com variáveis, mas também com funções de variáveis, ou seja, o ponto de extremo é obtido em relação à função e não em relação às variáveis isoladas. Assim, não existe nenhum paralelo entre as técnicas usuais de otimização e o cálculo das variações. (FINLAYSON, 1972; BLISS, 1963)

A.1.8 – Casos variacionais não abordados

Existem mais dois casos variacionais que não são comentados nesta tese:

- i) A função y_j da Equação A.1.2.1 não é especificada, conduzindo o problema a um caso mais genérico, dado na forma de quantidade vetorial. Portanto, f é uma função de Carathéorody;

- ii) Quando pelo menos um ponto de extremo não é fixado, então o funcional I é dependente de algum modo sobre o caminho de integração.

Um formalismo matemático mais detalhado para estes casos pode ser visto em BLISS (1963), FOX (1954), COURANT e HILBERT (1953) e FORSYTH (1927).

A.2 – HISTÓRICO

O problema isoperimétrico é o mais antigo no cálculo das variações, sendo que foi proposto e resolvido intuitivamente na Grécia Antiga (FORSYTH, 1927; COURANT, 1945-1946). Conta-se que a primeira pessoa a resolver este problema foi a Rainha Dido, de Cartago, em 850 A.C., que intuitivamente resolveu o problema que consistiu em determinar a curva fechada de perímetro dado e que encerrasse a região de maior área possível (SAGAN, 1969; ARAGON, 1980).

Na sua forma moderna, o principal desenvolvimento do cálculo das variações ocorreu no século XVIII (FRASER, 1992). Entretanto, começou a ser desenvolvido por volta de 1696 por Bernoulli, mas com rigor matemático em 1744 por Euler (Leonhard Euler, matemático suíço, 1707-1783), considerado o criador do cálculo variacional, com a publicação da equação característica e a formulação matemática do problema isoperimétrico (SAGAN, 1969).

A equação característica foi publicada primeiramente por Euler que, sem o formalismo matemático, obteve a equação por meio de um método heurístico substituindo a curva que conduziu ao ponto de mínimo por um polinômio, considerando as variações das ordenadas dos vértices ao longo do tempo. Mais tarde, de forma independente, Lagrange (Joseph Louis de Lagrange, matemático francês, 1736-1813) comprovou a relação com todo o formalismo matemático (LANCZOS, 1970). Usualmente, a equação característica é denominada apenas por equação de Euler e sua demonstração também pode ser encontrada em SAGAN (1969), SCHECHTER (1967) e COURANT e HILBERT (1953).

Contribuições importantes ao cálculo das variações são dadas por Legendre (A. M. Legendre, matemático francês, 1752-1833), Jacobi (Carl Gustav Jacob Jacobi, matemático alemão, 1804-1851) e Weierstrass (Karl Weierstrass, matemático alemão, 1815-1879) (BLISS, 1963; BOLSA, 1961; FORSYTH, 1927). Estes são os pioneiros, juntamente a Euler e Lagrange, do cálculo das variações (MORSE, 1973)

A.3 – EXEMPLOS DE APLICAÇÃO DO MÉTODO VARIACIONAL

Em princípio, a técnica do cálculo das variações é aplicável para todo o sistema contínuo, pois o seu sistema de equação é independente da escolha do tipo do sistema de coordenada adotado, o que facilita na sua aplicação (SCHECHTER, 1967). O método variacional é aplicado a muitos problemas de engenharia e de física-matemática (FINLAYSON, 1972; BOLZA, 1961; COURANT e HILBERT, 1953).

Apesar da existência das equações variacionais com variação no tempo, SCHECHTER (1967) disse que não existe formulação variacional para um estado dinâmico. FOX (1954) mostra uma aplicação do método em problema dinâmico e o resultado é a equação da trajetória parabólica da teoria dinâmica elementar, ou seja, a teoria que descreve o movimento de uma partícula com massa pela ação gravitacional.

O problema variacional é ilustrado por alguns exemplos simples: curvas geodésicas (FOX, 1954); geometria óptica – raio de luz (ou problema “*brachistochrone*”, ou princípio de Fermat, ou lei de refração, ou “*Snell*”) (SAGAN, 1969; FOX, 1954; WEINSTOCK, 1952); mínima superfície de revolução (SAGAN, 1969); problemas isoperimétricos (COURANT e HILBERT, 1953); e a dinâmica de partículas e eletrostática (SCHECHTER, 1967).

O cálculo das variações tem um papel significativo no desenvolvimento da mecânica (dinâmica) das partículas (SCHECHTER, 1967; FOX, 1954), estabelecendo os estados de mínima energia cinética e potencial (WEINSTOCK, 1952).

Os problemas de equilíbrio de estado são governados pelo princípio variacional de mínima energia potencial e as leis de movimento são, de maneira mais simples, formuladas em termos do princípio variacional de Hamilton. Por estes dois princípios derivam-se algumas das equações fundamentais da física-matemática (COURANT e HILBERT, 1953).

O sistema que requer a maximização da entropia ou a minimização da taxa de energia dissipada é também descrito pela aproximação variacional (YANG, 1994). Historicamente, a resolução da equação de Schrödinger por meio do cálculo das variações representa a origem da teoria da mecânica quântica (WEINSTOCK, 1952). A Equação A.1.2.2 deve ter variações fracas, ou seja, ε_j deve ser pequeno, por isto o princípio variacional não é aplicado para todas as operações físicas (IRVING e MULLINEUX, 1959).

A.3.1 – Generalizando a aplicação do método

No cálculo das variações é muito comum o problema deixar de ter solução por não ser possível ou conveniente restringir o funcional a um dado domínio de funções que seja compacto. Esta é a principal dificuldade deste método e uma prova de que a existência da solução do problema, ou classe de problemas, deve ser especificada em cada caso. (FINLAYSON, 1972)

Para todo o método do cálculo variacional existe um método de Galerkin equivalente (FINLAYSON, 1972). Então, se existe um método do cálculo das variações que descreve satisfatoriamente a modelagem e a simulação de um processo, faz-se necessário descobrir qual o método de Galerkin é equivalente. Assim pode-se generalizar o uso do cálculo das variações baseando-se nas classes de problemas em que o respectivo método de Galerkin equivalente é aplicável.

A.4 – TEOREMAS E DEFINIÇÕES BÁSICAS

Conforme mencionado, existem pequenas variações conceituais no método variacional. Para evitar isto é mostrado a seguir a definição para o espaço linear normado empregado nesta tese. Também é mostrado a definição de extremo de um funcional.

A.4.1 – Espaço linear normado

De acordo com SAGAN (1969) e detalhado por BOLZA (1961), o espaço linear é fracamente ou fortemente normado, o que conduz ao conceito de vizinhança fraca ou forte. Assim, por sua objetividade e clareza, segue-se aqui a teoria apresentada no livro de SAGAN (1969).

Nesta tese assume o integrando f definido para qualquer função dependente e contínua $y(x)$ e que pertença a alguma classe específica de funções Σ . O integrando ainda deve satisfazer as condições de contorno, apresentar as derivadas de primeira ordem contínuas e formar um espaço linear normado sobre o campo dos números reais \mathcal{R} . Conseqüentemente, a formulação variacional é restringida em $I[y] \in \mathcal{R}$. Assim, entende-se que o integrando é um sub-conjunto do conjunto de todas as funções admissíveis Σ dentro de um sub-conjunto de \mathcal{R} . Portanto, segue-se a definição de norma adotada:

Definição A.4.1.1: Conforme a teoria da álgebra linear, assume-se que Σ é um espaço linear sobre o campo dos reais \mathcal{R} . Uma funcionalidade $\|f\|$, definida sobre Σ , é chamada de uma norma de $f \in \mathcal{R}$ se apresentar as seguintes propriedades:

- i) $\|f\| > 0$ para todo $f \neq 0$ e $f \in \Sigma$;
- ii) $\|f\| = 0$ se, e somente se, $f = 0$ e $f \in \Sigma$;
- iii) $\|\alpha \cdot f\| = |\alpha| \cdot \|f\|$ para todo $f \in \Sigma$ e $\alpha \in \mathcal{R}$;
- iv) $\|f + h\| \leq \|f\| + \|h\|$

por conseqüência, Σ é um espaço linear normado sobre \mathcal{R} .

A classe específica das funções contínuas Σ , ou espaço das funções competitivas, para um problema variacional com limites fixos, pode ser descrito matematicamente como:

$$\Sigma = \{y(x) \mid y(x) \in C^1[a, b] \rightarrow \mathfrak{R}, y(a) = y_a, y(b) = y_b\} \quad (\text{A.4.1.1})$$

e o espaço das variações admissíveis ou gradientes das funções competitivas, com condições limites naturais, é definido como:

$$h = \{\phi(x) \mid \phi(x) \in C^1[a, b] \rightarrow \mathfrak{R}, \phi(a) = 0, \phi(b) = 0\} \quad (\text{A.4.1.2})$$

O espaço de funções $C^0[a, b]$ caracteriza o espaço na qual a norma é definida, ou seja, todas as funções reais contínuas são definidas no intervalo $[a, b] \in \mathfrak{R}$, inclusive por partes. A função definida em $C^0[a, b]$ pela expressão:

$$\|f\|_w = \max_{a \leq x \leq b} |f(y)| \quad (\text{A.4.1.3})$$

é chamada de norma fraca (w) e denotada por espaço linear fracamente normado de f .

O espaço das funções $C^1[a, b]$, sub-espaço de $C^0[a, b]$, constitui nas funções com derivadas de primeira ordem contínua. Existem duas alternativas para transformar $C^1[a, b]$ num espaço normado. Primeiro, como $C^1[a, b] \subset C^0[a, b]$, então este é naturalmente um sub-espaço normado com a norma $\|\cdot\|$. Por outro lado, pode-se definir em $C^1[a, b]$ a norma:

$$\|f\| = \max_{a \leq x \leq b} |f(y)| + \max_{a \leq x \leq b} |\nabla f(y)| \quad (\text{A.4.1.4})$$

que é chamada de norma forte e denotada por espaço linear fortemente normado de f . A norma como está definida pela Equação A.4.1.3 ou A.4.1.4 é usualmente referida como uma norma máxima ou norma Tchebychev (SAGAN, 1969).

Literalmente, prova-se a Equação A.4.1.4 como: seja $C^1[a,b]$ o sub-espço de $C^0[a,b]$ com funções contínuas, pode-se dividir o intervalo $[a,b]$ em um número finito de sub-intervalos e $C^1[a,b]$ é uma função continuamente diferenciável.

Note-se que uma função g é definida sobre o intervalo $[a,b]$, então se $x_0 \in [a,b]$, $g(x_0)$ existe e $g(x_0+\Delta x)$ também existe para Δx suficientemente pequeno. Entretanto, uma funcional $f(y+h)$ existe se, e somente se, $y+h \in \Sigma$ com $y \in \Sigma$ e $h \in \Sigma$. Por esta razão se faz necessário o conceito de espaço linear normado e a sua definição é dado a seguir:

Definição A.4.1.2: Assume-se que $\Psi \subset \Sigma$. Ψ é chamado de um sub-conjunto aberto do espaço linear normado Σ se para todo $f \in \Psi$ existe um $\delta > 0$, tal que $f+h \in \Psi$ para todo $h \in \Sigma$ e qualquer $\|h\| < \delta$.

Para explicar e mostrar a importância da Definição A.4.1.2 é necessário introduzir o conceito de “elemento linear”. Supõe-se que $y \in C^1[a,b]$ e define-se o conjunto dos elementos do funcional I , ou seja, $(x_0, y(x_0), y'(x_0))$ com $x_0 \in [a,b]$, como um elemento linear de $y=y(x)$. Assim, assume-se que $y_0 \in C^1[a,b]$ é tal que todos os seus elementos lineares estão em \mathcal{R} . Então, com $h \in C^1[a,b]$, todos os elementos lineares de y_0+h também estão em \mathcal{R} provando que $\|h\| < \delta$ para qualquer $\delta > 0$. Portanto, pode-se dizer que o funcional $I[y]$ é definido sobre o sub-conjunto aberto Ψ de $C^1[a,b]$ se definido Ψ , tal que y está em Ψ e se todos os seus elementos lineares estão em \mathcal{R} .

Para concluir, as definições que seguem apresentam os conceitos de função contínua e de vizinhança, segundo o conceito de norma introduzido.

Definição A.4.1.3: Uma função $f(x)$, definida em $[a,b]$ com $x \in [a,b]$, é contínua se, e somente se:

$$f(x-0) = f(x+0)$$

for verdadeiro para todo o intervalo $[a,b]$. Matematicamente, $f \in C^0[a,b]$. Sendo a derivada de $f(x)$ também contínua, obtém-se que $f \in C^1[a,b]$.

Definição A.4.1.4: Dado a vizinhança δ de $f_o \in \Sigma$, $N^\delta(f_o)$ denota o sub-conjunto aberto em Σ que consiste todos os $f \in \Sigma$ para qualquer

$$\|f - f_o\| < \delta$$

ou, como pode ser exposto, consiste de todos os elementos f_o+h , $h \in \Sigma$ e para qualquer $\|h\| < \delta$.

Conhecido então o conceito de norma é estabelecido a noção genérica da distância entre dois pontos e com o conceito de espaço linear a noção genérica do “espaço” dos números reais. Com isto, introduz-se alguns conceitos da topologia dos espaços métricos, tais como das funções contínuas e vizinhança. Isto possibilita formular de maneira satisfatória as definições do ponto de extremo local de um funcional.

As Equações A.4.1.1 até A.4.1.4 podem ser generalizadas para funcionais com múltiplas variáveis independentes e com múltiplas funções dependentes. Se existem múltiplas funções, o lado direito da igualdade das Equações A.4.1.3 e A.4.1.4 constitui num somatório, enquanto que as Equações A.4.1.1 e A.4.1.2 podem continuar sendo analisadas de forma individual. (SAGAN, 1969)

A definição de espaço linear normado quando generalizada no espaço \mathcal{H}^n , ou melhor, quando a função dependente apresenta mais de uma variável independente, o espaço é denominado de espaço Euclidiano. Se o sistema possui apenas uma variável independente, com uma ou mais funções propostas, o sistema continua sendo definido como espaço linear normado. (SAGAN, 1969)

Ressalta-se que os comentários deste tópico são os que comumente aparecem, explicitamente ou não, na maioria da literatura do cálculo das variações.

A.4.2 – Extremo de um funcional

Por definição matemática, um funcional $I[y_j]$ é uma função cujo domínio é um espaço normado (WEINSTOCK, 1952). Conseqüentemente, a existência dos extremos para as funções definidas num domínio do espaço euclidiano \mathfrak{R}^n é, geralmente, garantida pelo teorema fundamental de topologia de Weierstrass que diz: “num sub-conjunto compacto, uma função contínua sempre possui os pontos de máximo e mínimo” (COURANT e HILBERT, 1953). Este teorema é válido para a teoria dos extremos ordinários, podendo ser estendido para o cálculo das variações.

Seja $I : U \subset \Psi \rightarrow \mathfrak{R}^n$ um funcional definido num aberto U de um espaço normado Ψ contido em \mathfrak{R}^n , com $y_j \in U$ sendo um ponto de mínimo local de I . Então, por definição, existe um $\varepsilon_j > 0$, tal que $I[y_j] \geq I[\bar{y}_j]$ para todo $y_j \in U$, na qual satisfaz a relação $\|y_j - \bar{y}_j\| < \varepsilon_j$. Se $h_j = y_j - \bar{y}_j$, a definição anterior pode ser apresentada como $I[\bar{y}_j + h_j] - I[\bar{y}_j] \geq 0$ sempre que $\|h_j\| < \varepsilon_j$. Para o máximo local a definição é análoga.

Considera-se uma função $I[t] = I[\bar{y} + t.h]$ com $|t| \leq 1$. Esta função apresenta um mínimo quando $t = 0$. Se $I[t]$ é duas vezes continuamente diferenciável para todo h , então, $I'[t] = 0$ e $I''[t] \geq 0$ são as condições necessárias para que \bar{y} seja um ponto de mínimo de I .

Definição A.4.2.1: Define-se como primeira e segunda variação do funcional I no ponto y as funções:

$$\delta I_y[h] = \left. \frac{dI[y + t.h]}{dt} \right|_{t=0} \quad \text{e} \quad \delta^2 I_y[h] = \left. \frac{d^2 I[y + t.h]}{dt^2} \right|_{t=0}$$

sempre que definir as mesmas em todo $h \in \Psi$.

Por simplificação, supõe-se que o funcional I é duas vezes diferenciável. Para h suficientemente pequeno a expansão de Taylor fornece:

$$I[y+h] - I[y] = \delta I_y[h] + \frac{1}{2} \delta^2 I_y[h] + r[h] \cdot \|h\|^2 \quad (\text{A.4.2.1})$$

onde $\lim_{h \rightarrow 0} r[h] = 0$. Portanto, pelo teorema de topologia, enuncia-se o seguinte teorema.

Teorema A.4.2.1: Seja $I : U \subset \mathcal{Y} \rightarrow \mathfrak{R}^n$ um funcional duas vezes diferenciável. Para que o funcional I tenha um ponto de mínimo em $y_j \in U$ são necessárias as condições:

$$\delta I_{y_j}[h] = 0 \quad \text{e} \quad \delta^2 I_{y_j}[h] \geq 0$$

para todo $h_j \in \mathcal{Y}$. No caso em que \mathcal{Y} é um \mathfrak{R}^n , essas condições tornam-se suficientes para garantir que y_j seja um ponto de mínimo. Para o ponto de máximo este é análogo.

Na maioria dos casos de interesse, embora o funcional I é definido num aberto U de um espaço normado \mathcal{Y} contido em \mathfrak{R}^n , a questão proposta é determinar um mínimo (ou máximo) local para I restrito a um certo sub-conjunto $S \subset \mathcal{Y}$.

A.5 – CONDIÇÕES NECESSÁRIAS E SUFICIENTES

A comprovação das condições necessárias e suficientes do ponto de extremo no cálculo das variações envolvem uma extensa manipulação algébrica, requerendo a demonstração de quatro teoremas fundamentais que, se satisfeitos em conjunto, garantem a condição do ponto de extremo. Os teoremas são dados por Euler-Lagrange, Legendre, acobi e Weierstrass (BOLZA, 1961; FOX, 1954; COURANT e HILBERT, 1953).

Os teoremas apresentados a seguir são baseados na definição de espaço linear normado exposto anteriormente.

A.5.1 – Teorema de Euler-Lagrange

Este teorema garante o caráter estacionário do funcional I em relação à função y_j e possibilita determinar a equivalência matemática entre a formulação diferencial e sua respectiva forma variacional. (SAGAN, 1969; FOX, 1954; COURANT e HILBERT, 1953)

Teorema fundamental A.5.1.1: Dado o funcional I com os pontos de extremos fixos, tem-se para cada função y_j que extremar o funcional (Equação A.1.2.1), obrigatoriamente, a equação diferencial de Euler-Lagrange (Equação A.1.3.1) deve ser satisfeita no ponto estacionário para as variações fracas (SAGAN, 1969; FOX, 1954).

Um importante corolário do Teorema A.5.1.1 diz que toda a solução do problema variacional que apresenta primeira derivada contínua deve, obrigatoriamente, satisfazer a equação de Euler-Lagrange (LANCZOS, 1970).

O teorema de Euler-Lagrange é uma das condições necessárias e suficientes para a comprovação da existência do ponto de extremo do funcional (SAGAN, 1969). Adicionalmente, o teorema garante que o valor da integral $I[y_j]$ é independente do caminho de integração assumido, ou seja, independe da escolha da função y_j (BOLZA, 1961).

A.5.2 – Teorema de Legendre

Este teorema é responsável pela demonstração de que a solução obtida para o problema variacional apresenta o determinante de Wronskian diferente de zero ($D(x) \neq 0$) (BOLZA, 1961), ou seja, o problema é regular (SAGAN, 1969). Como corolário importante, caso existam várias soluções, o determinante também informa se as mesmas são linearmente independentes.

Inicialmente, Legendre tenta provar que um ponto de extremo é dado por $f_{y_j y_j} \neq 0$ (≤ 0 para máximo fraco, < 0 para máximo forte, ≥ 0 para mínimo fraco, > 0 para mínimo forte), mas não obtém sucesso, pois esta relação é uma condição pontual ou local e não é uma condição suficiente (ARAGON, 1980; COURANT, 1945-1946).

A condição de Legendre é apenas uma das condições necessárias para o ponto de extremo fraco (LEITMANN, 1986; COURANT, 1945-1946), sendo que o sinal da função $f_{y_j y_j}$ deve ser mantido em todo o intervalo $[a, b]_i$ suficientemente pequeno (FOX, 1954). Este teorema pode ser provado por aplicação do teorema de Taylor (COURANT e HILBERT, 1953).

Teorema fundamental A.5.2.1: Para um ponto de extremo é necessário observar a seguinte relação para o determinante de Wronskian

$$D(x) = \left| f_{y_j y_j}(x_i, y_j, y_j') \right| \neq 0$$

em um intervalo aberto $(a, b)_i$. Para $D(x) < 0$ o extremo é de máximo, do contrário, é de mínimo. Se $y'(x_i)$ é descontínuo em um ponto x_i qualquer, a condição é então aplicada para os pontos $x_i(-0)$ e $x_i(+0)$. (FOX, 1954)

No caso da existência de m funções y_j , ou seja, com $j = 1, \dots, m$, a condição de Legendre correspondente é a forma quadrática do qual a matriz de coeficientes é dado por (LANCZOS, 1970; BLISS, 1963; FOX, 1954; COURANT e HILBERT, 1953):

$$D(x_i) = \begin{vmatrix} f_{y_1' y_1'} & \dots & f_{y_1' y_m'} \\ \dots & \dots & \dots \\ f_{y_m' y_1'} & \dots & f_{y_m' y_m'} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (\text{A.5.2.1})$$

Para $D(x_i) = 0$ o integrando f é singular e a referida matriz é degenerada (SAGAN, 1969; WEINSTOCK, 1952). FOX (1954) e FORSYTH (1927) comentam que todos os coeficientes (elementos) da diagonal principal da matriz assumem, obrigatoriamente, o mesmo sinal e nenhum elemento pode desaparecer ao longo do intervalo de integração.

Caso existam duas soluções $y_1(x)$ e $y_2(x)$ e uma única variável independente, para que as soluções sejam linearmente independentes o determinante $D(x)$, para um ponto de mínimo, é dado por (SAGAN, 1969; BOLZA, 1961):

$$D(x) = \begin{vmatrix} f_{y_1 y_1} & f_{y_1 y_2} \\ f_{y_2 y_1} & f_{y_2 y_2} \end{vmatrix} \geq 0 \quad (\text{A.5.2.2})$$

onde $D(x)$, obrigatoriamente, não assume nenhum valor negativo, ou seja, a matriz é definida positivamente (COURANT e HILBERT, 1953) e a equação de Euler-Lagrange é do tipo elíptica (WEINSTOCK, 1952).

O teste de Legendre pode ser verificado de várias formas. Entretanto, a forma que parece mais simples para a sua inspeção é a que requer que todas as desigualdades:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y'_{j,x_i}{}^2} \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial y'_{j,x_i}{}^2} > \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y'_{j,x_i} \partial y'_{j,x_i}} \right)^2 \quad (\text{A.5.2.3})$$

sejam satisfeitas para todas as combinações possíveis das variáveis independentes x_i e x_t da função dependente y_j . Caso exista um sinal contrário na diagonal principal da Equação A.5.2.2, em algum instante a parcela da esquerda da desigualdade dado pela Equação A.5.2.3 é negativo; conseqüentemente, a relação não é verdadeira e o teste de Legendre não é verificado. (FORSYTH, 1927)

O teorema de Legendre, mostrado em 1786 e provado também por Weierstrass em 1879 (CLARKE e ZEIDAN, 1986; BLISS, 1963), é uma das condições necessárias. Para que seja uma das condições suficientes, o sinal de igualdade deve desaparecer na comprovação do ponto de extremo, ou seja, deve ser estritamente diferente de zero.

A.5.3 – Teorema de Jacobi

Este teorema ou teorema do ponto conjugado - "kinetic foci", datado de 1837 (BLISS, 1963; BOLZA, 1961), é a comprovação que o funcional I é um problema fracamente regular, $f_{y_j y_j} \neq 0$ para todo (x_i, y_j, y'_j) . Desta forma não existe o ponto conjugado ou ponto de inflexão entre os limites analisados (LEITMANN, 1986; SAGAN, 1969).

Sendo o problema definido como singular, $f_{y_j y_j} = 0$, deve-se encontrar o ponto de descontinuidade pelo teorema de Weierstrass-Erdmann. Este teorema garante a não existência de descontinuidade na derivada do funcional em relação à derivada da função y_j , $\partial I / \partial y'_j$, na solução do problema variacional (LEITMANN, 1986; BOLZA, 1961).

O Teorema A.5.3.1 tem a sua origem na equação diferencial de Jacobi (J.D.E.), também datada de 1837 (FOX, 1954), e não é aqui demonstrado por não ser necessário na análise do ponto de extremo, pois apenas auxilia na formação do referido teorema. Os detalhes da J.D.E. são encontrados em SAGAN (1969) e FOX (1954).

Teorema fundamental A.5.3.1: A segunda variação do problema variacional, dado pela Equação A.1.2.1, é uma integral regular; portanto, se J.D.E. possui duas soluções $y_1(x_i)$ e $y_2(x_i)$, particulares e linearmente independentes, e duas constantes arbitrárias β_1 e β_2 , J.D.E. tem como solução a função $y(x_i)$ dado por:

$$y(x_i) = \beta_1 \cdot y_1(x_i) + \beta_2 \cdot y_2(x_i) \neq 0$$

para todos os valores do vetor x no intervalo aberto (a,b) ; (SAGAN, 1969; FOX, 1954).

O teorema de Jacobi é apenas uma das condições necessárias, mas não uma das suficientes para a comprovação do extremo do funcional. Este teorema tem um lema que diz que o ponto conjugado é independente da escolha particular da solução da equação de Jacobi (LEITMANN, 1986).

Para um melhor entendimento do teorema de Jacobi assume-se que $y_j = y_j(x_i, C_j)$ é uma solução do problema variacional e que obedece a equação de Euler-Lagrange. Então, se a derivada é dada por:

$$\frac{\partial y_j(x_i, C_{j,l})}{\partial C_{j,l}} = 0 \tag{A.5.3.1}$$

sendo verdadeira em $x_i = a_i$ e para um outro ponto qualquer de x_i pertencente ao intervalo aberto $(a, b)_i$ com $C_{j,l}$ constantes, o problema tem ponto conjugado. Em outras palavras, a derivada desaparece no extremo inferior do intervalo de integração e em pelo menos um ponto intermediário qualquer (LANCZOS, 1970).

Segundo FORSYTH (1927) a desigualdade ou teorema de Schwartz, na qual assegura a determinação de uma mínima superfície, é estendida para obter uma expressão analítica para o teste de Jacobi. Este não é aqui mostrado.

Ponto conjugado

Para encontrar o ponto conjugado é necessário encontrar os zeros da solução da J.D.E., ou seja, $y_j(a_i) = 0$ (FOX, 1954). Assim, a partir do Teorema A.5.3.1, obtém-se:

$$\frac{y_1(a_i)}{y_2(a_i)} = (-) \cdot \frac{\beta_2}{\beta_1} \quad (\text{A.5.3.2})$$

e se x_i é a abscissa de qualquer ponto conjugado, então:

$$\frac{y_1(x_i)}{y_2(x_i)} = (-) \cdot \frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{y_1(a_i)}{y_2(a_i)} \quad (\text{A.5.3.3})$$

representa a equação para as abscissas de todos os pontos conjugados ao ponto inicial, $x_i = a_i$. Assim, a razão $y_1(x_i)/y_2(x_i)$ é a mesma para todos os pontos conjugados. (SAGAN, 1969; FOX, 1954)

De forma analítica, para os problemas complexos onde o ponto conjugado não é encontrado facilmente, o Teorema A.5.3.1 diz que se a função admissível $y(x_i, C_l)$, com l constantes C , é uma solução geral da equação de Euler-Lagrange e se as derivadas da função y em relação às constantes C_i são linearmente independentes, existem pontos conjugados se, e somente se, para qualquer razão $(\partial y / \partial C_i) / (\partial y / \partial C_j)$, com $i \neq j$ ($i, j = 1, \dots, l$),

apresentar os mesmos valores no extremo inferior do intervalo de integração e num ponto interno qualquer x_i do intervalo aberto $(a, b)_i$ (FOX, 1954). Matematicamente, as derivadas $\partial y/\partial C_i$ e $\partial y/\partial C_j$ são funções e pela teoria são soluções da equação de Jacobi associada ao problema. As soluções para a equação de Jacobi são também chamadas de campo de Jacobi (BARBOSA, 1975). Ressalta-se que o teste do ponto conjugado não é avaliado para o limite superior b_i (LANCZOS, 1970; FOX, 1954). Assim, o teste é somente aplicado para o limite inferior, sendo chamado de ponto conjugado do ponto inicial (LEITMANN, 1986).

A.5.4 – Teorema de Weierstrass

Este teorema, datado de 1879, é definido por uma função excesso E e marca um momento decisivo na história do cálculo das variações. A função E fornece uma variação total da integral $I[y_j]$ em termos de um excesso sobre um mínimo ou de uma deficiência sobre um máximo. (CLARKE e ZEIDAN, 1986; BLISS, 1963; BOLZA, 1961; COURANT, 1945-1946; FORSYTH, 1927)

Segundo FORSYTH (1927) existe um mínimo quando a função E é sempre positiva, ou seja, um excesso sempre crescente. Do contrário, existe um máximo quando E é sempre negativo, ou seja, uma deficiência sempre crescente.

O Teorema de Weierstrass é definido por:

Teorema fundamental A.5.4.1: Sendo a função excesso de Weierstrass E definida por:

$$E\langle x_i, y_j, y'_j, p'_j \rangle = f(x_i, y_j, p'_j) - f(x_i, y_j, y'_j) - \sum_{k=1}^j [(p'_k - y'_k) \cdot f_{y'_k}(x_k, y_k, y'_k)]$$

satisfaz a seguinte relação para ser um ponto de mínimo

$$E\langle x_i, y_j, y'_j, p'_j \rangle \geq 0$$

ao longo da curva e para qualquer valor finito de $p'_j \neq y'_j$, com $p'_j \in \mathcal{R}^1$ e $x_i \in [a, b]_i$. Se p'_j é descontínuo num ponto x_i qualquer, então, a condição é aplicada em $y_j(x_i-0)$ e $y_j(x_i+0)$. (CLARKE e ZEIDAN, 1986; SAGAN, 1969; BLISS, 1963; FOX, 1954)

A partir do Teorema A.5.4.1 e com as definições de espaço linear normado ou teorema de Jacobi, obtém-se a seguinte definição:

Definição A.5.4.1: Um elemento linear (x_i, y_j, y'_j) com $y_j = y_{j,0} \in C^1[a, b]_i$ é chamado de mínimo relativo fortemente regular se:

$$E(x_i, y_j, y'_j, p'_j) \geq 0$$

para todo $p'_j \in \mathcal{R}$ e $y'_j \in \mathcal{R}$, com $p'_j \neq y'_j$, e de mínimo relativo fracamente regular se:

$$f_{y_j y'_j}(x_{i,0}, y_{j,0}, y'_{j,0}) \geq 0$$

para todo $(x_i, y_j) \in N_w^\delta(y_{j,0})$ no intervalo $[a, b]_i$ e o problema não contém ponto conjugado.

Por analogia, tem-se a definição para um máximo relativo regular. (SAGAN, 1969)

O Teorema A.5.4.1 conduz a uma importante conclusão; se os extremos de um arco, dados pelos pontos a_i e b_i , não contém ponto conjugado em relação ao ponto a_i , e se $f_{y_j y'_j}(x_i, y_j, p'_j) > 0$ para todo o ponto (x_i, y_j) de uma certa vizinhança deste arco para qualquer valor finito de p'_j , então, de fato, o arco minimiza a integral dada pela Equação A.1.2.1. Para um problema regular é suficiente que o arco entre os pontos a_i e b_i não apresente ponto conjugado. (BOLZA, 1961; COURANT e HILBERT, 1953)

Aplicando-se a fórmula de Taylor para $f(x_i, y_j, p'_j) - f(x_i, y_j, y'_j)$, obtém-se uma importante relação entre a função excesso E e a função $f_{y_j y'_j}$ que é dado por (SAGAN, 1969; BOLZA, 1961):

$$E(x_i, y_j, y'_j, p'_j) = \sum_j \left[\frac{(p'_j - y'_j)^2}{2} \cdot f_{y_j y'_j}(x_i, y_j, p_j^*) \right] \quad (\text{A.5.4.1})$$

onde $p_j^* = y_j + \theta_j \cdot (p'_j - y'_j)$ com $0 < \theta_j < 1$ e a função excesso E tem que conservar o sinal no intervalo $[a, b]_i$ para qualquer valor de p'_j .

O teorema de Weierstrass é uma das condições necessárias e suficientes para a comprovação da existência do extremo do funcional. Adicionalmente, a condição de Weierstrass (Teorema A.5.4.1) tem como um corolário importante a conhecida condição de Legendre (Teorema A.5.2.1). Este corolário é obtido a partir da demonstração da condição de Weierstrass quando restringido a função y_j como pertencente a uma vizinhança de ordem um de y_j (LEITMANN, 1986).

O Teorema A.5.4.1 é o único que garante que o ponto de extremo em análise é um ponto de extremo forte (BOLZA, 1961; FORSYTH, 1927). A sua essência pode ser melhor entendida por meio de um simples exemplo na qual é obtida a distância mínima entre dois pontos (FOX, 1954).

Segundo FOX (1954), devido ao caráter geométrico do teorema de Weierstrass e as definições de espaço linear normado, pode-se concluir que o valor da funcional $I[y_j]$ nunca será negativo.

A.5.5 – Resumo dos teoremas

Dado o problema variacional unidimensional com $y = y_0(x) \in C^1[a, b]$ tem-se:

$$I[y] = \min \text{ ou } \max \int_a^b f(x, y, y'_x) dx$$

Com a equação de Euler-Lagrange (existência de extremo e do ponto estacionário):

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial f}{\partial y'_x} \right] = 0 \quad (\text{A.5.5.1})$$

Com a condição de Legendre para mínimo (ou máximo) fraco:

$$f_{y'y'}(x, y, y'_x) \geq 0 \quad (\leq 0) \quad \text{com} \quad x \in [a, b] \quad (\text{A.5.5.2})$$

Com a condição de Jacobi onde x não é o ponto conjugado do ponto inicial a :

$$a \leq x \quad \text{com} \quad x \in (a, b) \quad (\text{A.5.5.3})$$

E com a condição de Weierstrass para mínimo (ou máximo).

$$E(x, y, y', p') \geq 0 \quad (\leq 0) \quad \text{com} \quad -\infty < p' < +\infty \quad \text{e} \quad x \in [a, b] \quad (\text{A.5.5.4})$$

A análise para o extremo regular que se efetua na funcional $I[y]$ é a seguinte (SAGAN, 1969; BOLZA, 1961):

- | | | |
|-------------------------|------------------------|--|
| i) <u>Mínimo fraco</u> | Condições necessárias: | A.5.5.1; A.5.5.2 ^(*) ; A.5.5.3 |
| | Condições suficientes: | A.5.5.1; A.5.5.2 ^(*) ; A.5.5.3 ⁽¹⁾ |
| ii) <u>Mínimo forte</u> | Condições necessárias: | A.5.5.1; A.5.5.2 ^(*) ; A.5.5.3; A.5.5.4 |
| | Condições suficientes: | A.5.5.1; A.5.5.3 ⁽¹⁾ ; A.5.5.4 ⁽²⁾ |

onde o expoente ⁽¹⁾ indica um limite superior aberto em b , o expoente ⁽²⁾ indica que $(x, y) \in N_w^{\delta}(y_0)$ com $-\infty < y' < +\infty$ e o expoente ^(*) indica a omissão do sinal de igualdade na respectiva equação (SAGAN, 1969; BOLZA, 1961; COURANT e HILBERT, 1953), ou seja, ^(*) indica a denominada condição reforçada (SAGAN, 1969). Analogamente, obtém-se a análise para o extremo de máximo. De forma resumida, sem demonstrações matemáticas, CLARKE e ZEIDAN (1986) apresentam as condições necessárias e suficientes.

Observa-se que os teoremas de Euler-Lagrange e de Jacobi são válidos tanto para as análises das características do ponto de mínimo quanto para a do ponto de máximo, sem nenhuma distinção. Entretanto, para os outros dois teoremas, Legendre e Weierstrass, são necessários a inversão dos sinais das relações de desigualdade. Para a análise do extremo forte desconsidera-se os sinais de igualdade. A exceção do teorema de Jacobi, os demais teoremas apresentam caráter qualitativo em seus caracteres (FORSYTH, 1927).

Segundo FINLAYSON (1972), freqüentemente, a integral variacional é assumida apenas como sendo estacionária, ou seja, apenas aplica-se o teorema de Euler-Lagrange. Este fato é justificado pela dificuldade e pela complexidade das análises envolvidas na demonstração dos demais teoremas.

A.6 – MÉTODO DE RAYLEIGH-RITZ

Diferente ao comentado no Tópico A.1.1, o propósito deste método é substituir o problema de encontrar o extremo da integral $I[y_j]$ em relação à variável dependente y_j , por um problema de encontrar o extremo em relação à variável independente x_i , similarmente ao processo ordinário de otimização do cálculo diferencial e integral (FOX, 1954). Desta forma, representa-se a função dependente y_j em termos de uma função conhecida em x_i , expressando-a na forma de combinação linear que satisfaz as condições de contorno e que é válida na região de interesse, ou seja:

$$y_j = \sum_{l=1}^{\infty} C_{j,l} \cdot \Theta_l(x_i) \quad (\text{A.6.1})$$

onde as funções $\Theta_l(x_i)$ são escolhidas arbitrariamente e os parâmetros $C_{j,l}$ são, inicialmente, desconhecidos. Algumas vezes estes parâmetros têm sido chamados de coeficientes de Fourier (COURANT, 1945-1946). Substituindo-se y_j em $I[y_j]$ obtém-se uma expressão descrita somente em função dos parâmetros $C_{j,l}$. Na otimização, a formulação variacional é estacionária se, e somente se, os parâmetros são escolhidos de forma que seja verificado o sistema com $j \cdot l$ equações dado pela Equação A.6.2 (FOX, 1954; LANCZOS, 1970).

$$\frac{\partial I[y_j(x_i, C_{j,l})]}{\partial C_{j,l}} = 0 \quad (\text{A.6.2})$$

Observa-se que a Equação A.6.2 não é igual a Equação A.5.3.1.

Conhecido os parâmetros obtêm-se a forma da Equação A.6.1. Este procedimento também é válido para a Equação A.7.1.2 (com restrição). (LANCZOS, 1970)

O resultado numérico obtido pode ser uma resposta exata ($l \rightarrow \infty$), mas em muitos casos é apenas uma aproximação. O desvio entre a resposta exata e a aproximada depende fortemente da escolha inicial para as funções Θ_l , podendo ser testada por substituição da Equação A.6.1 na equação diferencial de Euler-lagrange. Se o lado esquerdo da equação de Euler-Lagrange é igual à zero o resultado é exato; caso contrário, a resposta é somente uma aproximação. Em alguns casos a distância entre o resultado obtido e o valor zero é usado como uma medida do grau de aproximação (FOX, 1954). Frequentemente, para obter uma solução satisfatória e próxima da solução exata faz-se necessário assumir um pequeno número de termos na série da Equação A.6.1 (SCHECHTER, 1967).

Conforme já mencionado, o funcional I depende da escolha da função Θ_l usada no ajuste. Entretanto, para funções descritas por série, como no método de Rayleigh-Ritz, isto não é verdade. Este método mostra ser simples nas suas aplicações e é, com frequência, extremamente efetivo. (SCHECHTER, 1967)

Se existir um princípio variacional para um dado caso, o método de Galerkin e o método de Ritz produzem resultados numéricos idênticos; por conseguinte, estes métodos estão próximos um do outro. (SCHECHTER, 1967)

A.7 – GENERALIZAÇÕES

Com o objetivo de fornecer um maior embasamento teórico do cálculo das variações, algumas outras anotações que complementam os estudos são apresentadas.

A.7.1 – Multiplicadores de Lagrange

As variações podem ser submetidas as restrições g_p por meio de utilização dos multiplicadores de Lagrange λ_p . A equação de Euler-Lagrange, Equação A.1.3.1, para um sistema com restrições é dada por (FINLAYSON, 1972; LANCZOS, 1970; FOX, 1954):

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[I + \sum_p \lambda_p \cdot g_p \right] - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial \left[I + \sum_p \lambda_p \cdot g_p \right]}{\partial [\partial y_j / \partial x_i]} \right] = 0 \quad (\text{A.7.1.1})$$

Este problema com restrição é resolvido seguindo o tratamento de COURANT e HILBERT (1953). De maneira similar ao problema sem restrição, a formulação variacional com restrição tem uma integral I estacionária restrita às funções g_p quando os valores para as constantes arbitrárias C_i das funções y_j são soluções com l equações (LANCZOS, 1970):

$$\frac{\partial I}{\partial C_{j,l}} + \sum_p \lambda_p \cdot \frac{\partial g_p}{\partial C_{j,l}} = 0 \quad (\text{A.7.1.2})$$

Todas as demais definições matemáticas para uma funcional I sem restrições são também válidas para o caso do problema com restrição.

A.7.2 – Teorema de Weierstrass-Erdmann (angulosidade)

Um aspecto importante a ser observado na equação de Euler-Lagrange é o fato de f_{y_j} ser contínua quando y_j é um extremo. Entretanto, a derivada primeira, ou de ordem superior, da função y_j pode ser descontínua. Assim, o teorema de Weierstrass-Erdmann garante a não existência de pontos de inflexão ou descontinuidade na solução do problema

variacional quando alguma derivada de y_j é descontínua. Este teorema é definido por (BARBOSA, 1975; BLISS, 1963; BOLZA, 1961; FOX, 1954):

$$\frac{\partial I[x_i, y_j(x_i), y'_j(x_{i+})]}{\partial y'_j} = \frac{\partial I[x_i, y_j(x_i), y'_j(x_{i-})]}{\partial y'_j} \quad (\text{A.7.2.1})$$

onde o limite esquerdo e o direito tem o mesmo valor numérico.

Assim, garante-se a não existência do ponto de inflexão próximo à todos os parâmetros do funcional $I[y_j]$ por meio do determinante da matriz:

$$\begin{vmatrix} f_{y'_1 y'_1} & \dots & f_{y'_1 y'_m} \\ \dots & \dots & \dots \\ f_{y'_m y'_1} & \dots & f_{y'_m y'_m} \end{vmatrix} \quad (\text{A.7.2.2})$$

que obrigatoriamente é diferente de zero. Este teorema também é conhecido por condição de diferenciabilidade de Hilbert. (BLISS, 1963)

A.7.3 – Condição de contorno natural e essencial

As funções dependentes y_j são escolhidas de modo que satisfazem as condições de contorno do problema, $y_j(a_j) = A_j$ e $y_j(b_j) = B_j$. Então, este tipo de problema é conhecido por ter as condições de contorno do tipo essencial. Caso contrário, se o valor da função y_j não é fixado em pelo menos num extremo, ou seja, o seu valor não é definido – valor em aberto, o problema tem as condições de contorno do tipo natural, com o seu valor no extremo em aberto sendo obtido naturalmente durante o processo de simulação numérica, de modo que o valor da integral variacional assume um valor de extremo. (SAGAN, 1969; COURANT, 1945-1946)

Para a formulação variacional da Equação A.1.2.1, a condição de contorno natural, após ser verificada a condição de Euler-Lagrange, é dada por (Sagan, 1969; COURANT, 1945-1946):

$$f_{y_j'}(x_{i,a_i}, y_j(x_{i,a_i}), y_j'(x_{i,a_i})) = f_{y_j'}(x_{i,b_i}, y_j(x_{i,b_i}), y_j'(x_{i,b_i})) = 0 \quad (\text{A.7.3.1})$$

Esta relação surge naturalmente no problema na qual, desde o princípio, em pelo menos num dos extremos não é considerado o valor da função proposta y_j (SAGAN, 1969; COURANT, 1945-1946).

A.7.4 – Métodos de aproximação

No cálculo das variações existem os métodos de aproximação diretos e indiretos.

Os métodos diretos são simples e eficientes, como o método de Rayleigh-Ritz, sendo usados para desenvolver soluções aproximadas quando as equações de Euler-Lagrange são complexas, forçando-a para uma solução próxima da solução exata (SCHECHTER, 1967; COURANT, 1945-1946).

Outros métodos diretos são: integração parcial (para equações diferenciais parciais esta técnica é de fácil aplicação e freqüentemente conduz para uma aproximação mais exata que o método de Rayleigh-Ritz), auto-valores e auto-vetores (COURANT, 1945-1946; SCHECHTER, 1967).

Segundo FOX (1954) a distinção entre os métodos de aproximação é imprecisa.

A.7.5 – Condição de Young

Esta condição corresponde as equações de Euler-Lagrange e Weierstrass de forma agrupada. A sua finalidade é verificar a convexidade das funções propostas y_j , por consequência, a existência de extremo para o funcional $I[y_j]$. Entretanto, a existência do ponto de extremo é garantida se o funcional é contínuo, o que conduz ao teorema fundamental de topologia de Weierstrass.

A.7.6 – Problemas específicos ou degenerados

De acordo com a ausência explícita de alguns dos termos da formulação variacional dado pela Equação A.1.2.1, existem três casos específicos ou degenerados para o funcional $I[y_j]$ e para a equação de Euler-Lagrange: *i)* não há termos em x_i ; *ii)* não há termos em y_j ; *iii)* não há termos em y'_{j,x_i} . Geralmente, para o caso *iii)* não existe solução para o problema variacional, uma vez que na equação integral não existem constantes arbitrárias o suficiente para que as condições de contorno sejam satisfeitas. (SAGAN, 1969; FOX, 1954; WEINSTOCK, 1952; COURANT, 1945-1946; FORSYTH, 1927)

O problema de Plateau e a integral de Dirichlet são casos particulares da equação de Euler-Lagrange quando dependem somente das derivadas das funções y_j em relação às variáveis independentes (COURANT, 1945-1946; WEINSTOCK, 1952).

Num problema degenerado onde existem apenas as derivadas de primeira ordem, a formulação variacional e a equação de Euler-Lagrange para cada um dos casos supracitados são dados por (FORSYTH, 1927):

- i) Não há termos do vetor das variáveis independentes x_i :

$$I[y_j(x_i)] = \min \text{ ou } \max \int_1^n \dots \int f(y_1, \dots, y_m, \nabla y_1, \dots, \nabla y_m) dx_1 \dots dx_n \quad (\text{A.7.6.1})$$

Se existe solução para este problema, obrigatoriamente, a função y_j satisfaz a seguinte equação diferencial obtida através da equação de Euler-Lagrange:

$$\sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial y_j}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial (\partial y_j / \partial x_i)} - f \right) \right] = 0 \quad (\text{A.7.6.2})$$

Se existe apenas uma variável a relação também pode ser dado por:

$$\frac{\partial y_j}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial (\partial y_j / \partial x)} - f = \text{Constante} \quad (\text{A.7.6.3})$$

Este tipo de problema pode ser encontrado no caso da superfície mínima de revolução e no problema “brachistochrone” (do grego: “brachistos” = menor, “chronos” = tempo) (SCHECHTER, 1967).

ii) Não há termos do vetor de funções tentativas y :

$$I[y_j(x_i)] = \min \text{ ou } \max \int_1^n \dots \int_n f(x_1, \dots, x_n, \nabla y_1, \dots, \nabla y_m) dx_1 \dots dx_n \quad (\text{A.7.6.4})$$

Se existe a solução, obrigatoriamente, satisfaz a relação de Euler-Lagrange:

$$\sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial y_j / \partial x_i)} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.7.6.5})$$

Se existe apenas uma variável independente a relação também pode ser dado por:

$$\frac{\partial f}{\partial (\partial y_j / \partial x)} = \text{Constante} \quad (\text{A.7.6.6})$$

com a derivada sendo igual a uma constante arbitrária.

iii) Não há termos do vetor das funções derivadas y_j' :

$$I[y_j(x_i)] = \min \text{ ou } \max \int_1^n \dots \int_n f(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m) dx_1 \dots dx_n \quad (\text{A.7.6.7})$$

A equação de Euler-Lagrange é:

$$\frac{\partial f}{\partial y_j} = 0 \quad (\text{A.7.6.8})$$

A.7.7 – Instabilidade numérica

A função dependente y_j pode gerar um sistema de equações instáveis, ou seja, a matriz numérica do sistema gerado pela aplicação da Equação A.6.2 (sem restrição) ou Equação A.7.1.2 (com restrição) apresenta um valor para o determinante próximo à zero, indicando uma matriz mal-condicionada. Esta situação aparece devido aos erros de arredondamentos durante os cálculos computacionais que, matematicamente, são ocasionados devido à grande variação numérica na ordem de magnitude dos coeficientes da matriz, ou seja, pela variação da magnitude das constantes $C_{j,l}$ da função y_j . Os problemas aqui são iguais aos verificados em sistemas descritos por equações algébricas não-lineares.

A.7.8 – Funcional de ordem dois ou superior

Considera-se agora que a formulação apresentada pela Equação A.1.2.1 seja descrita com derivadas da função y_j com ordem $k > 1$, ou seja:

$$I[y_j(x_i)] = \min \text{ ou } \max \int_1^n \dots \int_n f(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m, y_1', \dots, y_m', \dots, y_1^k, \dots, y_m^k) dx_1 \dots dx_n \quad (\text{A.7.8.1})$$

com $f \in C^{k+2}[a, b]_i$ em relação a todas as variáveis x_i e com $2.k.j$ condições de contorno:

$$\begin{aligned} y_j(a_i) = y_{j,0} & \quad ; \quad y'_j(a_i) = y'_{j,0} & \quad ; \quad \dots & \quad ; \quad y_j^{k-1}(a_i) = y_{j,0}^{k-1} \\ y_j(b_i) = y_{j,1} & \quad ; \quad y'_j(b_i) = y'_{j,1} & \quad ; \quad \dots & \quad ; \quad y_j^{k-1}(b_i) = y_{j,1}^{k-1} \end{aligned}$$

Neste caso, a equação de Euler-Lagrange pode assumir a forma dado por:

$$\frac{\partial f}{\partial y_j} + \sum_k \sum_i \left[(-1)^k \cdot \frac{\partial^k}{\partial x_i^k} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial^k y_j / \partial x_i^k)} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.7.8.2})$$

conhecida também como equação de Euler-Poisson (ARAGON, 1980). As soluções desta equação são os extremos do funcional dado pela Equação A.7.8.1.

Analogamente ao problema com restrição dado no Tópico A.7.1 pode-se escrever:

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left(f + \sum_p \lambda_p \cdot g_p \right) + \sum_k \sum_i \left\{ (-1)^k \cdot \frac{\partial^k}{\partial x_i^k} \left[\frac{\partial \left(f + \sum_p \lambda_p \cdot g_p \right)}{\partial (\partial^k y_j / \partial x_i^k)} \right] \right\} = 0 \quad (\text{A.7.8.3})$$

A relação das Equações A.6.2 ou A.7.1.2 e todas as demais relações mostradas no caso $k = 1$ são válidas também aqui. As demonstrações matemáticas das Equações A.7.8.1 até A.7.8.3 não são aqui mostradas, pois são análogas ao caso quando aparecem apenas as derivadas de ordem um. O formalismo destas equações pode ser obtido em ARAGON (1980), BARBOSA (1975); IRVING e MULLINEUX (1959), FOX (1954), COURANT e HILBERT (1953), WEINSTOCK (1952) e FORSYTH (1927).

A.7.9 – Problemas geométricos

Os problemas geométricos são problemas variacionais por natureza. Para melhor entender o método e ter uma indicação dos problemas que podem ser tratados aqui, apresenta-se alguns exemplos de problemas de natureza geométrica: i) menor distância entre dois pontos (problema mais simples); ii) superfície mínima de revolução (caso particular do problema de Plateau mostrado pelo cálculo diferencial e integral); iii) problema isoperimétrico. (BARBOSA, 1975)

A demonstração matemática da menor distância entre dois pontos e a mínima superfície de revolução pode ser vista em COURANT (1945-1946) ou SCHECHTER (1967) com todo o seu formalismo.

O problema isoperimétrico não é de fácil dedução (COURANT, 1945-1946). Para uma curva fechada, com um perímetro de tamanho fixo e sem auto-intersecção, o limite da região de área máxima é dado pela circunferência; esta demonstração pode ser vista em ARAGON (1980). Este problema é resolvido por meio do uso de multiplicadores de Lagrange, pois enquanto busca-se a maximização da área tem-se o valor do perímetro como sendo fixo, ou seja, uma restrição do problema variacional.

Segundo FORSYTH (1927) o teorema da função excesso de Weierstrass E é satisfeito para todas as geodésicas.

A.7.10 – Problemas isoperimétricos

Estes problemas extremam a integral I restrito a algum tipo de condição dada por uma função dependente y . Esta condição pode ser dada na forma de equação algébrica, diferencial ou integral. A incorporação desta condição na formulação variacional é feita por meio de multiplicador de Lagrange. (COURANT, 1945-1946; WEINSTOCK, 1952)

De maneira geral, os problemas isoperimétricos propõem extremar uma integral enquanto outras têm os seus valores ou parâmetros fixados, tal como o comprimento do perímetro ou curva (FOX, 1954). Estes problemas podem ser ilustrados através de dois exemplos e dados por (FOX, 1954):

- i) Dado o perímetro (L) de uma curva plana fechada, encontrar a sua forma quando a área (A) assume um valor máximo. Matematicamente:

$$\max \int dA \quad \text{restrito à} \quad \int dS = L \quad (\text{A.7.10.1})$$

- ii) Encontrar o comprimento mínimo do arco L contido numa superfície $S(x_i)$ que une dois pontos fixos também contidos nesta superfície. Matematicamente:

$$\min \int dL \quad \text{restrito à} \quad S(x_i) = 0 \quad (\text{A.7.10.2})$$

A.7.11 – Problemas variacionais em fluidodinâmica

Muitas tentativas têm sido feitas para obter a equação de momento na forma de um princípio variacional, a exemplo depois do princípio de Hamilton que é um poderoso e usual princípio em mecânica de partículas. Entretanto, as tentativas não são bem sucedidas, exceto no caso de fluidos perfeitos (FOX, 1954).

TRUESDELL e TOUPIN (1960) observam que as idéias na qual tem sido conduzido o entendimento variacional para sistemas de fluidos podem ser aplicadas em mecânica contínua também, mas raramente os resultados são usuais.

FINLAYSON (1972) mostra que não existe um princípio variacional para a equação de Navier-Stokes em estado estacionário, caso particular da equação de Cauchy. Entretanto, um princípio variacional é apresentado para o número de Reynolds, na qual alguma solução da equação de Navier-Stokes é estável.

Muitos problemas de estabilidade fluidodinâmica são governados por princípios variacionais, tais como o estudo do fluxo de gases rarefeitos ou perfeitos (FINLAYSON, 1972).

Anexo - B

ARTIGOS CIENTÍFICOS

Os artigos científicos são:

SANTOS JR., I., GUIRARDELLO, R. Modelling and simulation of a multiphase fluidized bed reactor by variational principles. *Comp. & Chem. Eng. (suppl.)*, S411-414, 1999.

SANTOS JR., I., GUIRARDELLO, R. Explorando as características implícitas de otimização associadas ao método dos princípios variacionais. *Proceedings... XIII COBEQ Congress / XIX Interamerican Congress of Chemical Engineering / I Brazilian Congress of Phase equilibrium and Fluid Properties for Chemical Process Design – Águas de São Pedro – Brasil, Sep 24-27 2000.*

SANTOS JR., I., GUIRARDELLO, R. Wall effect influence in the velocity profiles in slurry bubble column reactor. *Proceedings... VI World Congress of Chemical Engineering – Melbourne – Australia, Sep 2001.*

Modelling and Simulation of a Multiphase Fluidized Bed Reactor by Variational Principles

Iraí Santos Júnior and Reginaldo Guirardello *

Department of Chemical Engineering, State University of Campinas (UNICAMP), Brazil

Abstract

This paper shows the study of a computational fluid dynamics approach through the investigation and evaluation of the intrinsic characteristics of the optimization associated with the variational principle method when applied to a multiphase fluidized bed reactor modelling and simulation operating in a slurry bubble column mode. The optimization criterion associated in the method is based on the minimization of the amount of energy. The variational method has advantages in modelling and fitting parameters (constants) of equations in the critical regions of the flow, where other methods may not give good results, and regions under the influence of the equipment wall or other disturbances. The disadvantage of this method is that there is no general method applicable in all processes, just for particular cases. The type of reactor evaluated is employed in hydroconversion and hydrotreatment processes. There are few experimental results available in the literature for real situations. The simulated computational results are compared with the experimental results from the literature of an fluidized system formed by water-air-glass spheres. Also, computational results are compared with the result obtained for a hydroconversion reactor solved by means of the finite volume method. The results obtained show that the variational method is capable of simulating a multiphase fluidized bed reactor as well as other methods. This show that it is possible to explore the optimization characteristics of the variational principles.

Keywords: Variational principle; optimization; computational fluid dynamics; fluidized bed reactor; slurry bubble column; hydroconversion reactor.

* Correspondence address: Cidade Universitária, UNICAMP, CP 6066, 13083-970, Campinas, SP, Brazil; Tel.: +55-19-788-3955; Fax: +55-19-289-4717; E-mail's: guira@feq.unicamp.br or jrsantos@feq.unicamp.br.

Introduction

The objective of this work is to show that the variational principle method is applicable for the fluidized bed reactor modelling and simulation. The main importance of this method is to associate the intrinsic characteristics of optimization that make it possible to fit unknown parameters and to simulate the process simultaneously, based on the criterion of energy minimization (Yang,1994). Therefore, for the process analysis, the modelling have to be carried through an integral formulation and not through a differential formulation.

The variational method is a technic of numeric resolution that make it possible to obtain an approximate or accurate solution in terms of a trial function (estimative), with unknowns parameters or functions. These parameters or functions are determined in accord with the limits or restrictions of the initial problem. In order to exist a trial function it is necessary that the first variation of the integral formulation is zero, in other words, that the integral is stationary (Finlayson,1972).

Thus, in order to test the method, the case study process is a multiphase fluidized bed reactor operating in a slurry bubble column mode. This reactor is employed, for example, in biotechnology processes and in hydroconversion processes of heavy oils and petroleum resids. The fluid dynamic behaviour in the reactor is extremely complex, and when associated to the fact that there is no general variational principle applicable to all fluidynamic processes (Finlayson, 1972), make this work to be complicated and require large mathematical effort. Due to mathematical complexity of the reactor model and of the variational method, in this study the method is analysed for a pseudo-homogeneous reactor model, without chemical reaction.

A model in integral form is solved for the reactor, and simulation results are compared with the experimental results obtained for an fluidized system, constituted by water-air-glass spheres (Chen et al.,1995). The same model in differential form is solved by means of the finite volumes method, where the algebraic equations obtained are solved with the tri-diagonal matrix algorithm (TDMA) (Carbonell and Guirardello,1997).The results obtained are satisfactory and indicate the possibility of the application of the variational principle method for the fluidized bed reactor modelling and simulation.

Variational Principle Method

The variational method consists in transforming a differential equation into an integral equation, mathematically equivalent, through the Euler-Lagrange equation (Gal-Or and Weihs,1972). This make it possible to convert the differential formulation in an integral formulation,which can be tested. The main difficulty of this method is to know if it exist or not an equivalent formulation for a given problem.

The justificative for testing the application of the variational method is based on three facts: a) differential equations have some difficulties to model and to simulate various situations of practical interest (Reti and Reti,1982; Ecer and Rout,1983; Becker et al.,1994; Zhu,1995), b) the variational method allow the resolution of systems described by a complex geometry and boundary conditions and c) the results obtained

through the variational formulation are easier to apply and make it possible practical applications (Gorla and Madden, 1984).

The variational method is similar to the method of weighted residuals (MWR). The solution is expanded in terms of one trial function with parameters (constants) or unknown functions that are determined in accord with the geometry and boundary conditions of the system. The variational integral is stationary and this makes it possible to obtain the maximum or minimum with respect to the parameters (constants) or unknown functions with a physical viewpoint. The results are identical with that obtained by the Galerkin method.

The variational calculus is associated with changes in the functional y . The functional is the domain of the space of admissible functions which satisfy restrictions of continuity or boundary conditions. The simplest form and important problem in the variational calculus is given by:

$$\Phi(y) = \int_a^b f(x, y(x), y_x(x)) dx \quad (I)$$

where x is independent term, y is a function dependent of x and $y_x(x)$ is derivative of y in relation to x . The integral $\Phi(y)$ can be calculated and is a real number. The function $y(x)$ is stationary in $\Phi(y)$, or $\Phi(y)$ has a stationary value, if the first variation of $\Phi(y)$ is zero for all admissible variations of $y(x)$, provided that $\Phi(y(a)) = \Phi(y(b)) = 0$. The necessary condition of $\Phi(y)$ is given on its stationary value. This is equivalent to:

$$\delta\Phi(0) = \int_a^b \eta(x) \left[f_y - \frac{d}{dx} (f_{y_x}) \right] dx = 0 \quad (III)$$

where f_y is derivative of f in relation to y and f_{y_x} is the derivative of f in relation to y_x . The relation $f_y - d(f_{y_x})/dx = 0$ is called Euler-Lagrange equation and can be extended to two and three-dimensional systems.

Through the variational method it is not easy to assure if the given system has one minimum or maximum point. The sufficient condition for $\Phi(y)$ to be minimum point is that there exists one positive number K satisfying:

$$\delta(\delta\Phi(y_x, \eta)) \geq K \|\eta\|$$

for all η in any normalized space. This is why it is not easy to prove if it is a minimum or a maximum.

Fluid Dynamic Mathematical Model

The phenomenological equations of fluid flow in the reactor are based on the continuity and momentum balances time-averaged equations using an Eulerian approach and written in cylindrical coordinates. A two-fluid dynamic model constituted by a gas phase and a pseudo-homogeneous phase called slurry is studied for the purpose of this paper. The slurry phase is formed by liquid phase and solid particles uniformly distributed.

The mathematical model used for the reactor is one-dimensional (Carbonell and Guirardello, 1997). The radial velocity is considered to be zero and variations of axial velocity are considered only in radial direction. One-dimensional models have been applied in the simulation of bubble column reactor (Gasche et al., 1990; Carbonell and Guirardello, 1997) and multiphase fluidized bed reactor (Chen et al., 1995).

The system operate in stationary state and gas and slurry phases flow upward. In this study no chemical reaction is considered. A zero-order turbulence model is assumed to describe the liquid dispersion and the fluid is considered newtonian.

The fluid dynamic in the reactor shows through the experimental results the formation of the internal recirculation with the liquid flowing upward at the column center and downward near the wall (Dudukovic and Devanathan, 1993).

Differential formulation

The slurry phase model is given by:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\varepsilon_{sl} r \mu_{sl}^{eff} \frac{dV_{sl}}{dr} \right) - \varepsilon_{sl} \frac{dP}{dz} - \rho_{sl} g (\varepsilon_{sl} + \varepsilon_g) + F = 0 \quad (IV)$$

The gas phase model is:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\varepsilon_g r \mu_g^{eff} \frac{dV_g}{dr} \right) - \varepsilon_g \frac{dP}{dz} - \varepsilon_g g (\rho_g - \rho_{sl}) - F = 0 \quad (V)$$

The boundary conditions are:

$$V_{sl} = V_g = 0 \quad \text{at} \quad r = R_c \quad (a)$$

$$\frac{dV_{sl}}{dr} = \frac{dV_g}{dr} = 0 \quad \text{at} \quad r = 0 \quad (b)$$

The model equations show the terms of viscous forces (dispersion), drop pressure, weight, buoyancy and interfacial drag force. The effective viscosity (μ^{eff}) is given by the sum of the laminar and turbulent viscosities (Reichardt,1951; Menzel et al.,1990; Grienberger and Holmann,1992; Chen et al.,1995). The average gas hold-up (ε_g) for gas-oil-catalyst systems (hydroconversion) is calculated using the correlation by Tarmy et al. (1984) and for water-air-glass spheres systems is determined by Chen et al. (1995). The gas hold-up show a parabolic radial distribution (Chen et al.,1995). The interfacial drag force F resulting from phase interactions is calculated by the expression used by Torvik and Svendsen (1990).

Integral formulation

The equations (IV) and (V) are represented in the variational form by:

$$\begin{aligned} \Phi = & \int_0^{R_c} \frac{dP}{dz} (\varepsilon_{sl} V_{sl} + \varepsilon_g V_g) 2\pi r dr + \int_0^{R_c} g (\rho_{sl} \varepsilon_{sl} V_{sl} + \rho_g \varepsilon_g V_g) 2\pi r dr + \\ & \int_0^{R_c} \left[\rho_{sl} \varepsilon_g g (V_{sl} - V_g) + \frac{C_w}{2} \varepsilon_g \varepsilon_{sl} (V_{sl} - V_g)^2 \right] 2\pi r dr + \\ & \int_0^{R_c} \frac{1}{2} \left[\mu_{sl} \varepsilon_{sl} \left(\frac{dV_{sl}}{dr} \right)^2 + \mu_g \varepsilon_g \left(\frac{dV_g}{dr} \right)^2 \right] 2\pi r dr \end{aligned} \quad (VI)$$

Applying the Euler-Lagrangre equation on the equation (VI) results in equations (IV) e (V). The variable C_w is the constant of interfacial drag force (Schwarz and Turner,1988). The trial function for radial profile of the axial velocity (V_{sl} , V_g) is given by:

$$V = \sum_{i=0}^N C_i \left(\frac{r}{R_c} \right)^{2,i}$$

Applying the boundary conditions (a) and (b) results in:

$$V = \sum_{i=1}^N C_i \left[\left(\frac{r}{R_c} \right)^{2,i} - 1 \right] \quad (VII)$$

where N is the number of desired terms in the series. For larger N the solution is more accurate and require more computational time. The parameters (constants) C_i are determined simultaneously in the integration of the equation (VI) so that the integral is a minimum.

To solve equation (VI) it is necessary to apply equation (VII) minimizing with respect to the parameters C_i . The integration is obtained by Gauss-Legendre Quadrature method.

Results

In order to evaluate the variational model described by equation (VI), four examples were simulated for fluidized system formed by water-air-glass spheres, two situations for slurry phase and two for gas phase. Additionally, the results are compared with the results obtained by finite volume method (Carbonel and Girardello, 1997) and with the experimental results (Chen et al., 1995).

Table-I: Physical properties of the systems simulated.

Physical property	Slurry phase		Gas phase	
	Case-1	Case-2	Case-1	Case-2
d reactor	0.285			
d particle	530.0	670.0	530.0	530.0
U liquid	0.0348	0.0044	0.0348	0.0348
U gas	0.0283	0.0708	0.0531	0.1200
ε_s average	0.0667	0.0502	0.0667	0.0667
ρ liquid	1000.0			
ρ solid	2292.4	2361.8	2292.4	2292.4
ρ gas	1.2			
μ liquid	9.0×10^{-4}			
μ gas	2.0×10^{-5}			
d particle is multiplied by 10^6				

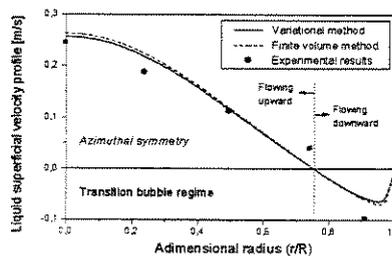


Figure-I: Simulation Case-1 for the slurry phase.

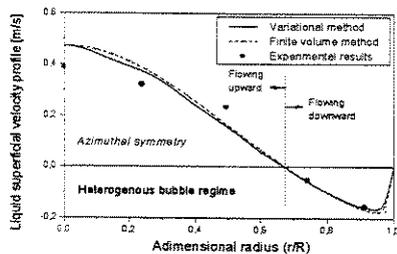


Figure-II: Simulation Case-2 for the slurry phase.

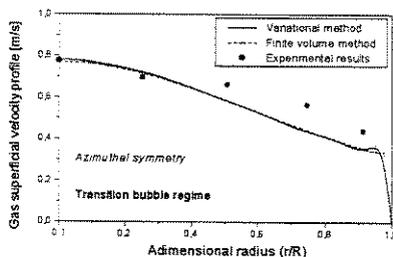


Figure-III: Simulation Case-1 for the gas phase.

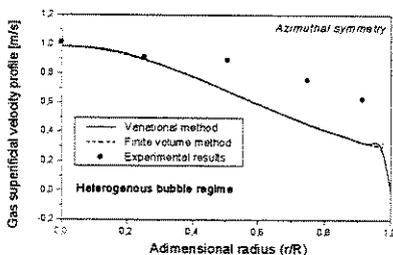


Figure-IV: Simulation Case-2 for the gas phase.

Figure-V shows one simulation for a hydroconversion reactor without chemical reaction through of the variational and finite volume methods. The objective is to show what the variational method is a technic capable of modelling and simulating very well other systems.

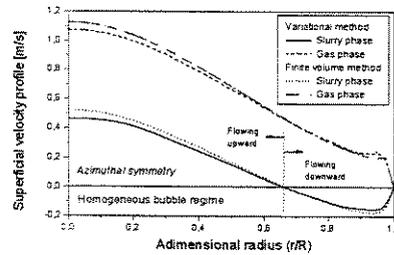


Figure-V: Simulation of a hydroconversion reactor.

Conclusions

Computational simulation results show that the variational principle method is applicable in multiphase fluidized bed reactors and that the optimization characteristics can be explored.

The fluidized bed reactor modelling and simulation is very well represented by variational principles. This indicates the possibility of applying the variational method on other chemical engineering systems and also in other areas.

The result of the gas phase is not very good for two reasons. The first is that it is necessary to use better correlations for the gas hold-up. The second is that the mass balance was applied only for the slurry phase because this phase is more important for the process modelling.

Acknowledgements

The authors acknowledge the financial support of *FAPESP* - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (process 97/05505-9), Brazil.

Notation

- a integral lower limit
- b integral upper limit
- C constant of velocity profile, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
- C_w constant of interfacial drag force, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
- d diameter, m
- F interfacial drag force, $\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$ reactor
- g gravitational acceleration, $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$
- K positive number

N	positive number
P	drop pressure, Pa
r	radius, m
R	reactor radius, m
U	superficial velocity, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
V	axial velocity, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
x	independent variable
y	dependent trial function of x

Greek letters

Φ	integral formulation domination
η	normalized space domination
ε	hold-up, $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$
μ	viscosity, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
ρ	density, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
π	3.14159 ...

Subscripts and superscripts

c	column
eff	effective
g	gas phase
i	lump i
sl	slurry phase
x	derivate of function in relation x

Symbol

$\ \ $	normalization
---------	---------------

References

- Carbonell, M. M.,(1996), *Modelagem e simulação de reator fluidizado trifásico aplicado ao processo de hidroconversão de óleos pesados*. M.Sc. dissertation, UNICAMP, Brazil.
- Carbonell, M. M. and Guirardello, R.,(1997), Modelling of a slurry bubble column reactor applied to the hydroconversion of heavy oils. *Chemical Engineering Science* **52**, 4179-4185.
- Chen, Z., Zheng, C. and Feng, Y.,(1995), Modeling of three-phase fluidized beds based on local bubble characteristics measurements. *Chemical Engineering Science* **50**, 231-236.
- Dudukovic, M. P. and Devanathan, N.,(1993), Bubble column reactors: some recent developments. In: *Chemical Reactor Technology for Environmentally Safe Reactors and Products*, eds. H. I. Lasa, G. Dogu and A. Ravella, pp. 353-377. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Ecer, A. and Rout, R. K.,(1983), Investigation of solution of Navier-Stokes equations using a variational formulation. *Int. J. for Num. Meth. in Fluids* **3**, 23-31.
- Zhu, J.,(1995), Drag and mass transfer for flow of a Carreau fluid past a swarm of newtonian drops. *Int. J. Multiphase Flow* **21**, 935-940.
- Finlayson, B. A.,(1972), *The method of weighted residuals and variational principles*. McGraw-Hill Inc., New York.
- Gal-Or, B. and Weihs, D.,(1972), Variational analysis of high mass transfer rates from spherical particles boundary-layer. *Int. J. Mass Heat Transfer* **15**, 2027-2044.
- Gasche, H. E., Edinger, C., Kompel, H. and Hofmann, H.,(1990), A fluid dynamically based model of bubble column reactors. *Chem. Engng. Technol.* **13**, 341-349.
- Gorla, R. S. R. and Madden, P. E. (1984) A variational approach to non-steady non-newtonian flow in a circular pipe. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **16**, 251-265.
- Grienberger, J. and Holmann, H.,(1992), Investigations and modelling of bubble columns. *Chem. Engng. Sci.* **47**, 2215-2220.
- Menzel, T., Weide, T., Staudacher, O., Wein, O. and Onken, U.,(1990), Reynolds shear stress for modeling of bubble column reactors. *Ind. Engng. Chem. Res.* **29**, 988-994.
- Reti, Z. and Reti, P.,(1982), Variational inequalities as models of chemical reactors. *Hung. J. Ind. Chem.* **10**, 243-250.
- Reichardt, H.,(1951), *Z. Angew. Math. Mech.* **31**, 208.
- Schwarz, M. P. and Turner, W. J.,(1988), Applicability of the k - ϵ turbulence model to gas-stirred baths. *Appl. Math. Modelling* **12**, 273-279.

Tarmy, B. L., Chang, M., Coualoglou, C. A. and Ponzi, P. R.,(1984), *The Three Phase Hydrodynamic Characteristics of the EDS Coal Liquefaction Reactors: Their Development and Use in Reactor Scaleup*. Institution of Chemical Engineers Symposium on Chemical Reaction Engineering, Edinburg, 10-13, September.

Torvik, R. and Svendsen, H. F.,(1990), Modelling of slurry reactors. A fundamental approach. *Chem. Engng. Sci.* **45**, 2325-2332.

Yang, C. T.,(1994), Variational theories in hydrodynamics and hydraulics. *J. Hydraulic Engng.* **120**, june.

EXPLORANDO AS CARACTERÍSTICAS IMPLÍCITAS DE OTIMIZAÇÃO ASSOCIADAS AO MÉTODO DOS PRINCÍPIOS VARIACIONAIS

Iraí Santos Júnior , Reginaldo Guirardello

Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP

CP 6066, 13083-970, Campinas - SP, Brasil

Resumo. Este trabalho mostra que a modelagem e simulação computacional de um processo químico através do método dos princípios variacionais pode ser explorado quando associado às suas características implícitas de otimização. A principal vantagem deste método está associado à não utilização de correlações empíricas, escassas em literatura aberta, e sua principal desvantagem está na árdua e difícil manipulação algébrica do problema. O desenvolvimento de um simulador computacional robusto e eficiente para um processo químico complexo está condicionado sobretudo à existência de correlações empíricas que sejam aplicáveis para as condições operacionais desejadas. Portanto, este fato torna o método dos princípios variacionais bastante oportuno, pois podem ser propostas funções tentativas, de acordo com as restrições ou limites do problema, com coeficientes (constantes) a determinar em substituição destas correlações. Estes coeficientes serão determinados de maneira que o problema assume um valor ótimo, ou seja, os coeficientes são auto-ajustáveis para que a função objetivo tenha um valor de mínimo ou máximo. Os estudos iniciais foram realizados para a hidrodinâmica de um reator trifásico do tipo coluna de lama borbulhante e os resultados computacionais obtidos são bastante satisfatórios e estão em concordância com resultados experimentais. Adicionalmente, o presente método mostra outras vantagens, que por meio da abordagem tradicional, via equações diferenciais, somente são obtidas quando submetidas à etapa de otimização.

Palavras-chave: Princípios variacionais, Reator trifásico, Hidrodinâmica, Otimização

1. INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é propor a aplicação de um método matemático, conhecido por princípios variacionais, para a modelagem e simulação de processos químicos visando a não utilização de correlações empíricas, e a justificativa está no fato que para o desenvolvimento de bons simuladores computacionais é necessário que existam correlações aplicáveis ao sistema em análise. As correlações empíricas tem dois problemas: i) são escassas na literatura para o sistema específico e ii) sua extrapolação poderá conduzir a resultados errôneos.

O método dos princípios variacionais possibilita que ao invés de impor uma correlação empírica conhecida para descrever o comportamento de uma determinada variável, esta seja descrito por uma função tentativa com coeficientes que serão determinados durante a etapa de simulação do problema. A função tentativa deverá obrigatoriamente obedecer os limites e as condições de contorno do problema e seus coeficientes são determinados de forma que a função objetivo do problema assume um valor ótimo, de mínimo ou de máximo, dependendo da natureza do processo. Portanto, os coeficientes da função tentativa são auto-ajustados de forma que a equação integral do modelo seja estacionário em relação a estes coeficientes, ou seja, obedecem a primeira condição necessária de otimização.

Na abordagem variacional, a modelagem fenomenológica de um processo é realizada por meio de uma formulação integral, equivalente à formulação diferencial (Gal-Or e Weihs, 1972), e suas variáveis são determinadas de forma que o valor desta integral seja um valor estacionário. Este fato torna o método muito interessante, principalmente na descrição de regiões críticas do processo, tais como aquelas sobre efeito de parede do equipamento.

O fundamento teórico do método variacional está baseado em postulados termodinâmicos. A aproximação variacional é um escalar baseado sobre a maximização de entropia, minimização de energia ou a minimização da taxa de energia dissipada. Ressalta-se que existem várias teorias variacionais, entretanto, uma comparação entre estas indicam que são todas consistentes entre si, desde que devidamente aplicadas (Yang, 1994). Este fato torna o método dos princípios variacionais uma técnica de otimização por natureza.

Segundo Finlayson (1972) muitos problemas em engenharia podem ser caracterizados pelos princípios variacionais e que a maior dificuldade na sua aplicação está no fato de não

existir um método geral aplicável para todos os casos de interesse. Entretanto, a sua aplicação para a hidrodinâmica de reatores multifásicos já foi demonstrado por Santos Jr. e Guirardello (1999) sem a exploração das características implícitas de otimização associadas ao método dos princípios variacionais. Portanto, neste trabalho tais características serão exploradas.

A equação integral resultante da formulação variacional é resolvida por meio da técnica de quadratura. Os resultados obtidos com as simulações computacionais mostram que o método é bastante eficiente, pois apresentam resultados satisfatórios e em concordância com os resultados experimentais obtidos por Chen et al. (1995).

2. ASPECTOS GERAIS

Neste tópico é apresentado uma breve abordagem sobre o método dos princípios variacionais e alguns aspectos básicos em otimização.

2.1 Método dos princípios variacionais

A aplicação do método dos princípios variacionais pode ser justificado por: i) evitar o uso de correlações empíricas, substituindo por um princípio físico (mínima energia, por exemplo), ii) representa muito bem várias situações de interesse prático (Gorla e Madden, 1984) que não são representados pelo uso de equações diferenciais (Zhu, 1995) e iii) descreve satisfatoriamente processos complexos (Santos Jr. e Guirardello, 1999).

A técnica do método variacional constitui em obter a função ψ (integrando) que seja equivalente ao modelo matemático diferencial, e que posteriormente será integrada por técnicas apropriadas de integração numérica. Assim, o método consiste em transformar a equação diferencial do modelo em equação integral através da equação de Euler-Lagrange (Schechter, 1967; Finlayson, 1972). Desta forma, o problema será equivalente a um problema de maximização ou minimização de uma funcional I com relação a uma função tentativa w (Yang, 1994). Ressalta-se que o método dos princípios variacionais pode ser aplicado sobre todo o modelo matemático diferencial ou em apenas sobre uma parte deste (Finlayson, 1972). A otimização da funcional I com relação às constantes c_n da função tentativa w_j consiste em resolver a equação:

$$\text{Max ou min } I(w_j(x, y, z)) = \iiint_V \psi \left(x, y, z, w_j(x, y, z), \frac{\partial w_j(x, y, z)}{\partial i} \right) dx dy dz \quad (01)$$

onde o índice i representa cada uma das variáveis independentes x , y e z , e o índice j representa as equações sobre as quais é aplicado o método variacional. A equação de Euler-Lagrange para este caso é dada por:

$$\frac{\partial \psi}{\partial w_j} - \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial (\partial w_j / \partial i)} \right) \right] = 0 \quad (02)$$

A aplicação do método dos princípios variacionais somente é possível quando as funções w_j tornarem a funcional I ("Eq.(01)") estacionária, ou seja, com derivada nula em relação a todas as constantes c_n da função tentativa w_j . Portanto, obedecem a primeira condição necessária de otimização dada por:

$$\frac{\partial I(w_j(x, y, z))}{\partial c_n} = 0 \quad (03)$$

Na aplicação deste método no campo da otimização, o acoplamento entre a equação "Eq.(01)", denominada de função objetivo, e as equações restritivas G (igualdade) e H (desigualdade) são realizadas por meio dos multiplicadores de Lagrange. Assim, a equação "Eq.(02)" assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial w_j} \left[\psi + \sum_k \lambda_k \cdot G_k + \sum_l \lambda_l \cdot H_l \right] - \sum_i \left\{ \frac{\partial}{\partial i} \left[\frac{\partial}{\partial (\partial w_j / \partial i)} \left(\psi + \sum_k \lambda_k \cdot G_k + \sum_l \lambda_l \cdot H_l \right) \right] \right\} = 0 \quad (04)$$

e a equação "Eq.(03)" assume a forma:

$$\frac{\partial}{\partial c_n} \left[I(w_j(x, y, z)) + \sum_k \lambda_k \cdot G_k + \sum_l \lambda_l \cdot H_l \right] = 0 \quad (05)$$

A descrição detalhada do formalismo matemático pode ser visto em Finlayson (1972).

2.2 Otimização

A otimização é um problema matemático com muitas aplicações nos mais diversos campos do conhecimento humano. A finalidade da otimização é encontrar os pontos de mínimo ou de máximo de uma função F de múltiplas variáveis x , com valores dentro de uma determinada região do espaço multi-variável, delimitado pelas restrições G e H .

A notação para a formulação matemática de um problema de otimização é:

$$\begin{aligned} \text{Min:} & \quad F(x) \\ \text{s.t.:} & \quad G(x) = 0 \\ & \quad H(x) \leq 0 \\ & \quad l \leq x \leq u \end{aligned} \quad (\text{Problema 1})$$

onde x é um vetor de n variáveis (x_1, x_2, \dots, x_n) limitadas pelo intervalo $[l_n, u_n]$, $G(x)$ é um vetor de restrições de igualdade de dimensão m_0 e $H(x)$ é um vetor de restrições de desigualdade de dimensão m_1 .

Não é do mérito deste trabalho testar o uso e a eficiência de pacotes de otimização. O interesse aqui é verificar a aplicabilidade do método dos princípios variacionais, mostrando que este é equivalente a uma técnica de otimização. Assim, com a formulação variacional concluída, pode-se utilizar qualquer pacote de otimização capaz de resolver o sistema em análise. Entretanto, o pacote de otimização utilizado foi apresentado por Gill et al. (1984b).

3. MODELAGEM DO REATOR

A equação matemática para a modelagem variacional de um reator do tipo coluna de lama borbulhante pseudo-bifásico foi apresentado por Santos Jr. e Guirardello (1999):

$$I = \int_0^R \left\{ \frac{dP}{dz} (\varepsilon_{sl} V_{sl} + \varepsilon_g V_g) + g (\rho_{sl} \varepsilon_{sl} V_{sl} + \rho_g \varepsilon_g V_g) + \rho_{sl} \varepsilon_g g (V_{sl} - V_g) \right\} 2\pi r dr + \int_0^R \left\{ \frac{C_w}{2} \varepsilon_g \varepsilon_{sl} (V_{sl} - V_g)^2 + \frac{1}{2} \left[\mu_{sl}^{eff} \varepsilon_{sl} \left(\frac{dV_{sl}}{dr} \right)^2 + \mu_g^{eff} \varepsilon_g \left(\frac{dV_g}{dr} \right)^2 \right] \right\} 2\pi r dr \quad (06)$$

A equação "Eq.(06)" representa as leis de conservação do momento para as fases de lama e de gás descritas na forma de uma equação variacional. A fase lama é pseudo-homogêneo, constituída pelas fases de líquido e partículas sólidas uniformemente distribuídas.

As leis de conservação de massa para as fases é dado por:

$$U_f \rho_f A = \int_0^R \rho_f \varepsilon_f V_f dA \quad (07)$$

onde o índice f representa as fases de lama e de gás.

Observe-se que a queda de pressão corresponde ao multiplicador de Lagrange para as restrições de balanço de massa, com a condição de que sejam iguais para as duas fases.

As condições de contorno assumidas para os estudos foram:

$$r = 0 \rightarrow \frac{dV}{dr} = 0 \quad (\text{C.C.1}) \quad (08)$$

$$r = R \rightarrow V = 0 \quad (\text{C.C.2}) \quad (09)$$

A função tentativa avaliada foi para o perfil de velocidade V ("Eq.(06)") e é dado por uma classe especial de função conhecida por polinômio de Tchebyshev, que pode ser visto com mais detalhes em Gerald (1989). A função tentativa é dada por:

$$V_f = \sum_{i=0}^{\infty} C_i \cdot T_i \left[\left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (10)$$

onde C_i são as constantes (coeficientes) da função tentativa e T_i é o polinômio de Tchebyshev de ordem i . Observa-se que a condição de contorno C.C.1 é automaticamente verificada da forma expressa na equação "Eq.(10)", e a condição C.C.2 é ajustada pelo método durante a etapa de simulação.

4. RESULTADOS

Nesta etapa inicial de avaliação dos resultados estudou-se o caso da simulação para um reator de hidroconversão, sem reação química, mostrado por Santos Jr. e Guirardello (1999), que por ocasião, sem explorar os aspectos de otimização associado ao método dos princípios variacionais, apresentou uma figura (Figura-V de Santos Jr. e Guirardello (1999)) simulada com a "Eq.(06)" e a restrição dada apenas pelo balanço de massa da fase lama ("Eq.(07)"), fato este justificado pelo grau de liberdade das variáveis do modelo e também pela importância da fase lama em relação à fase gás.

A figura "Fig.(01)" mostra os perfis de velocidade axial local no reator de hidroconversão simulado por Santos Jr. e Guirardello (1999) e o mesmo reator simulado com as restrições de fechamento de balanço de massa das fases de lama e de gás.

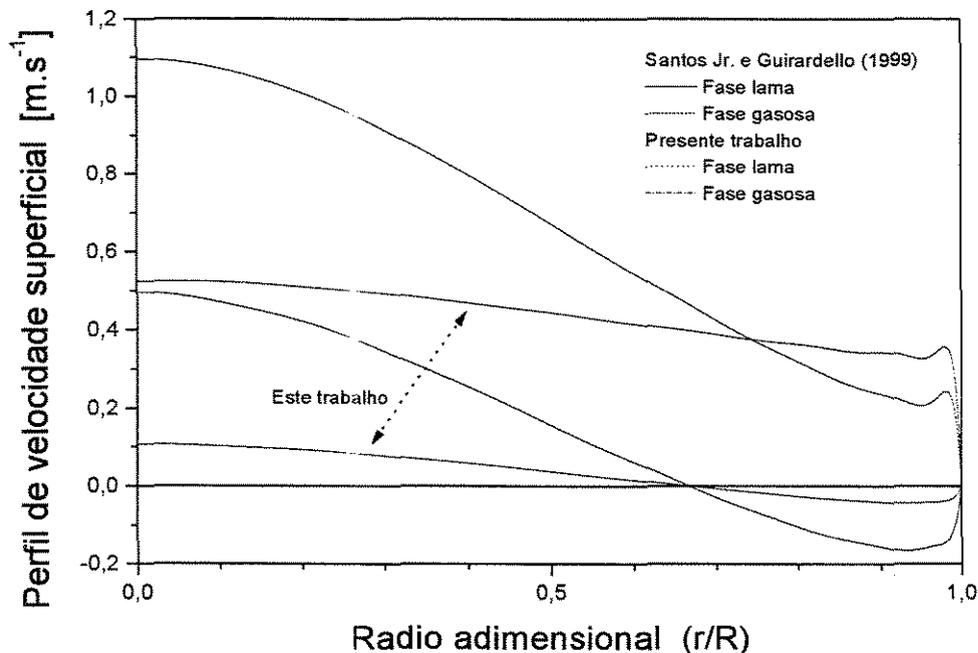


Figura 01. Perfil radial de velocidade superficial axial.

Para a simulação do reator restrito às equações de fechamento de balanço de massa para as duas fases foi necessário não aplicar a correlação empírica para a estimativa da variável de fração volumétrica média de gás (“hold-up”) no leito, dada por Tarmy et al. (1984), conforme usada por Santos Jr. e Guirardello (1999), pois esta correlação não foi capaz de estimar a variável satisfatoriamente, e conseqüentemente não permitiu o fechamento do balanço de massa da fase do gás. Assim, foi realizado um ajustamento para o valor desta variável afim de que pudesse ser verificados os fechamento de balanço. Os resultados computacionais obtidos para a “Fig.(01)” estão explicitados na tabela seguinte:

Tabela 01. Dados comparativos entre as duas simulações mostradas na figura “Fig(01)”.

Equação para o Cálculo de ε_g médio	ε_g médio	Queda de pressão (dP/dz)			Fechamento B.M. (%)	
		Algébrica	Numérica	Desv. (%)	Líquido	Gás
Tarmy et al. (1984)	0,202336	- 8106,61	- 7859,50	3,05	$1,57 \cdot 10^{-11}$	410,09
Valor ajustado	0,057908	- 9069,19	- 9006,09	0,70	$1,21 \cdot 10^{-12}$	$1,67 \cdot 10^{-13}$

Conforme pode ser observado na tabela “Tab.(01)” o fechamento de balanço de massa para o gás quando usado a equação de Tarmy et al. (1984) tem um desvio percentual relativo muito elevado (410,09%), enquanto que, para a fase líquida o desvio é praticamente nulo. Entretanto, quando o valor da fração volumétrica média do gás é ajustado, os desvios nos fechamento de balanços são praticamente nulos. Verificou-se também a redução no desvio relativo entre a queda de pressão numérica e algébrica. Ressalta-se que, devido ao uso de 15 termos no perfil de velocidade dado pela equação “Eq.(10)”, o desvio relativo entre as queda de pressão foi de 0,70%, valor que poderia tender para zero caso fossem empregado um número infinito de termos, entretanto, os perfis praticamente não sofreriam alterações numéricas que justificassem um maior esforço e tempo computacional. Exemplificando, numa simulação para o mesmo caso, porém com 30 termos na equação “Eq.(10)”, observou-se que o tempo computacional foi 4 vezes maior e o ganho no desvio entre as queda de pressão algébrica e numérica foi de apenas 0,08 pontos percentuais, ou seja, caiu para 0,62%.

O comportamento dos perfis observados na figura “Fig.(01)” estão de acordo com o esperado, ou seja, com a verificação das equações de fechamento de balanço os perfis sofrem um “achatamento”, fato comprovado pelo dados listados na tabela “Tab.(01)”. Adicionalmente, este resultado esta mais coerentes com a baixa vazão superficial de entrada.

Nas simulações mostradas na figura “Fig.(01)” foi empregado apenas o método dos princípios variacionais. Entretanto, quando usado um pacote de otimização para resolver a função objetivo dado pela equação “Eq.(06)” e as restrições de igualdade dado pela equação “Eq.(07)”, aplicadas para as fases de lama e de gás, os perfis de velocidade foram todos inconsistentes fisicamente, ou seja, não apresentaram o perfil padrão que caracteriza a recirculação interna apresentado pela fase lama (Lamb, 1962; Ueyama e Miyauchi, 1979). Na tabela “Tab.(02)” é mostrado os resultados obtidos destas simulações:

Tabela 02. Dados das simulações obtidos através do pacote de Gill et al. (1984b).

<i>Equação para o Cálculo de ε_g médio</i>	ε_g médio	<i>Queda de pressão (dP/dz)</i>			<i>Fechamento B.M. (%)</i>	
		<i>Algébrica</i>	<i>Numérica</i>	<i>Desv. (%)</i>	<i>Líquido</i>	<i>Gás</i>
Tarmy et al. (1984)	0,202336	- 8108,95	- 50,39	99,38	$8,34 \cdot 10^{-14}$	132,94
Valor ajustado	0,057908	- 9069,85	- 12,42	99,86	$1,42 \cdot 10^{-12}$	50,94

Entretanto, por comparação entre os valores obtidos para a queda de pressão algébrica nas tabelas “Tab.(01)” e “Tab.(02)” observou-se que as soluções foram praticamente idênticas, com desvios relativos de 0,0289 % e 0,0073 %, respectivamente. Este fato ocorreu devido à formação de um ponto de sela da funcional I para o termo de queda de pressão. Assim, repetindo as simulações listadas na tabela “Tab.(02)” com o termo de queda de pressão numérico fixado em -7859,50 e -9005,09, respectivamente, conforme a tabela “Tab.(01)”, teremos os seguintes resultados quando utilizado o pacote de Gill et al. (1984b):

Tabela 03. Dados das simulações obtidos sem o ponto de sela dado pela queda de pressão.

<i>Equação para o Cálculo de ε_g médio</i>	ε_g médio	<i>Queda de pressão (dP/dz)</i>			<i>Fechamento B.M. (%)</i>	
		<i>Algébrica</i>	<i>Numérica</i>	<i>Desv. (%)</i>	<i>Líquido</i>	<i>Gás</i>
Tarmy et al. (1984)	0,202336	- 8106,61	- 7859,50	3,05	$9,80 \cdot 10^{-13}$	410,09
Valor ajustado	0,057908	- 9069,19	- 9006,09	0,70	$1,84 \cdot 10^{-12}$	$2,79 \cdot 10^{-08}$

Por observação das tabelas “Tab.(01)” e “Tab.(03)” pode-se concluir que os resultados foram praticamente idênticos, portanto, a figura “Fig.(01)” também representa os mesmos perfis de velocidade quando utilizado um pacote de otimização para resolver a equação “Eq.(06)”, mostrando assim que o método dos princípios variacionais é equivalente a uma técnica de otimização (Problema 1), ou seja, o método é uma técnica de otimização implícita.

4.1 Unicidade do ε_g médio ótimo

Para o cálculo da variável da fração volumétrica média de gás no leito existem várias correlações em literatura aberta. Entretanto, para que o balanço de massa das duas fases sejam simultaneamente verificados somente existe um único valor possível para esta variável, e conseqüentemente, este valor também possibilita que a queda de pressão entre as duas fases sejam iguais. Assim, para demonstrar essa afirmação foram avaliados os resultados computacionais que reproduziram os dados experimentais de Chen et al. (1995) mostrado por Santos Jr. e Guirardello (1999):

Tabela 04. Avaliação dos perfis de velocidade obtidos com ε_g em correlação.

Fase	Caso	ε_g (Tarmy, et al., 1984)	Desvio dP/dz (%)	Fechamento B.M. (%)	
				Líquido	Gás
Lama	01	0,056242	0,51	$1,53 \cdot 10^{-14}$	7,95
	02	0,165909	2,28	$3,94 \cdot 10^{-13}$	45,19
Gás	01	0,090165	0,92	$4,60 \cdot 10^{-13}$	1,23
	02	0,180517	2,07	$2,30 \cdot 10^{-13}$	0,70

Tabela 05. Avaliação dos perfis de velocidade obtidos com ε_g ajustado (ótimo).

Fase	Caso	ε_g ajustado (ótimo)	Desvio dP/dz (%)	Fechamento B.M. (%)	
				Líquido	Gás
Lama	01	0,052616	0,47	$3,37 \cdot 10^{-13}$	$4,34 \cdot 10^{-13}$
	02	0,126296	1,63	$5,79 \cdot 10^{-12}$	$2,89 \cdot 10^{-13}$
Gás	01	0,091076	0,93	$1,84 \cdot 10^{-13}$	$< 10^{-16}$ (≈ 0)
	02	0,179637	2,06	$7,06 \cdot 10^{-13}$	$4,81 \cdot 10^{-13}$

Apesar do pequeno desvio relativo percentual obtido entre os termos de queda de pressão numérica e algébrica, conforme as tabelas “Tab.(04)” e “Tab.(05)”, os desvios relativos percentuais obtidos com o fechamento dos balanços foram significativos, apresentando maior desvio o fechamento de balanço de massa da fase gás onde o cálculo da fração volumétrica média de gás foi obtido por Tarmy et al. (1984).

As figuras “Fig.(02)” à “Fig.(05)” mostram os perfis do desvio relativo percentual entre as queda de pressão algébrica e numérica em função da fração volumétrica média de gás, o que comprova a unicidade do ε_g médio ótimo:

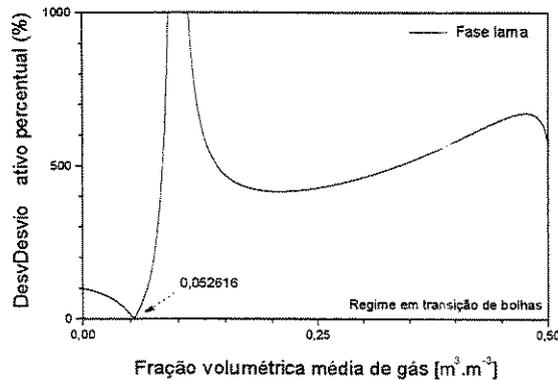


Figura 02. Perfil do desvio relativo em função da fração média de gás num regime em Transição de bolhas (Fase lama, Caso 01).

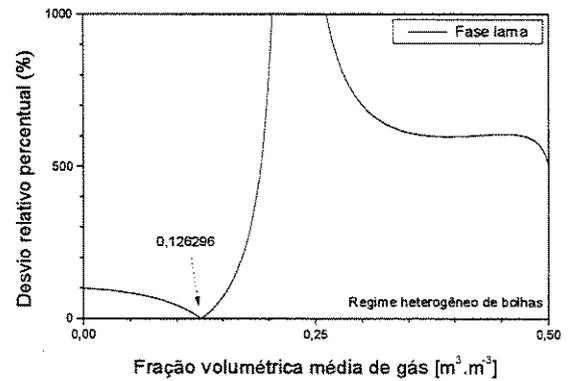


Figura 03. Perfil do desvio relativo em função da fração média de gás num regime heterogêneo de bolhas (Fase lama, Caso 02).

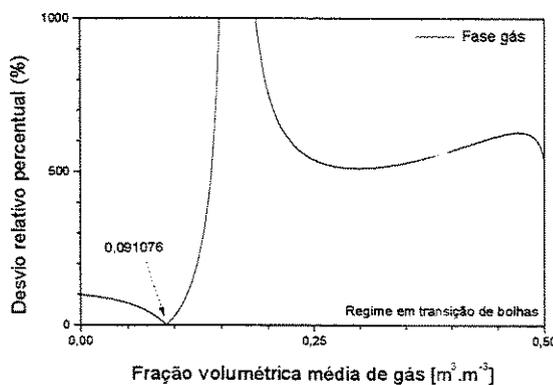


Figura 04. Perfil do desvio relativo em função da fração média de gás num regime em transição de bolhas (Fase gás, Caso 01).

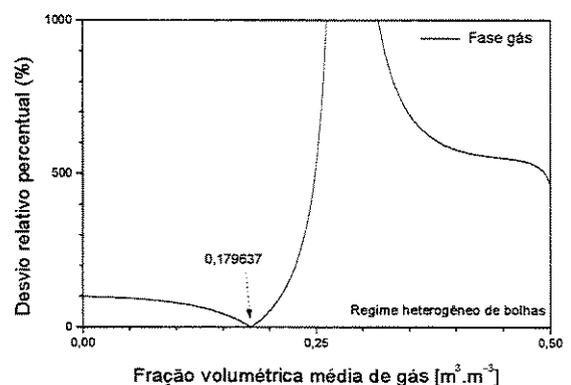


Figura 05. Perfil do desvio relativo em função da fração média de gás num regime heterogêneo de bolhas (Fase gás, Caso 02).

4.2 Validação do método

A exploração das características implícitas de otimização associadas ao método dos princípios variacionais é validado por comparação com os resultados experimentais de Chen et al. (1995).

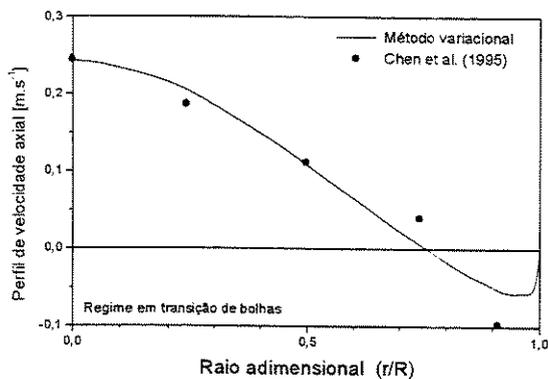


Figura 06. Perfil de velocidade de lama comparado com dados experimentais.

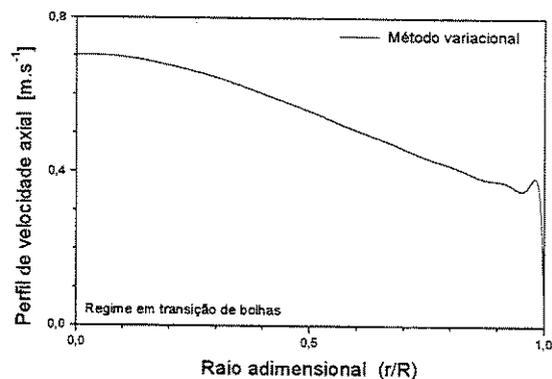


Figura 07. Perfil de velocidade de gás obtido a partir da figura "Fig.(06)".

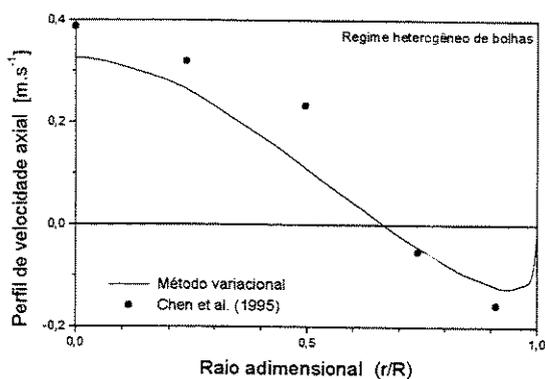


Figura 08. Perfil de velocidade de lama comparado com dados experimentais.

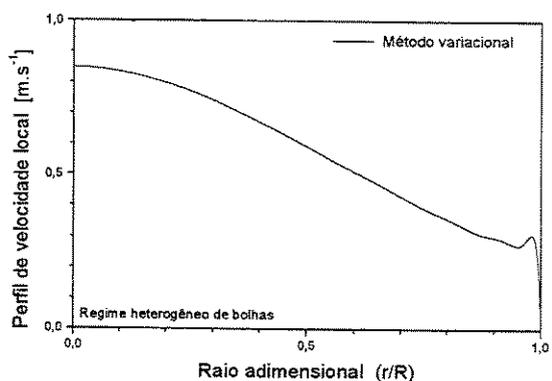


Figura 09. Perfil de velocidade de gás Obtido a partir da figura "Fig.(08)".

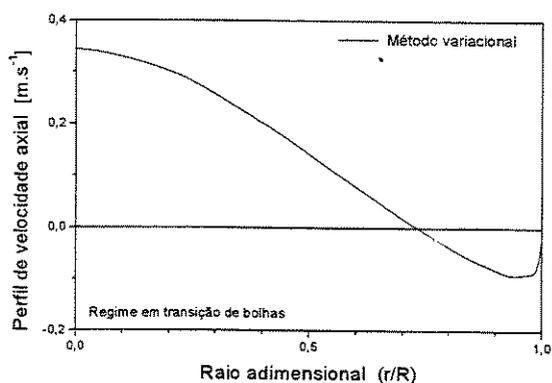


Figura 10. Perfil de velocidade de lama obtido a partir da figura "Fig.(11)".

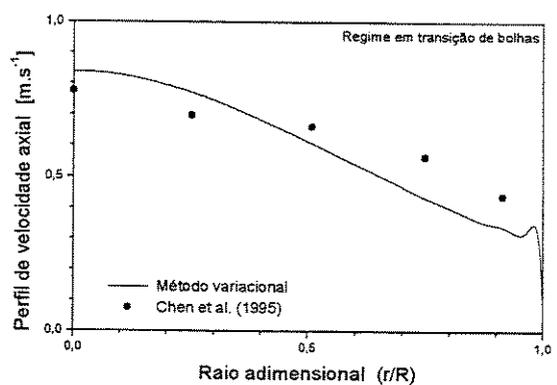


Figura 11. Perfil de velocidade de gás comparado com dados experimentais.

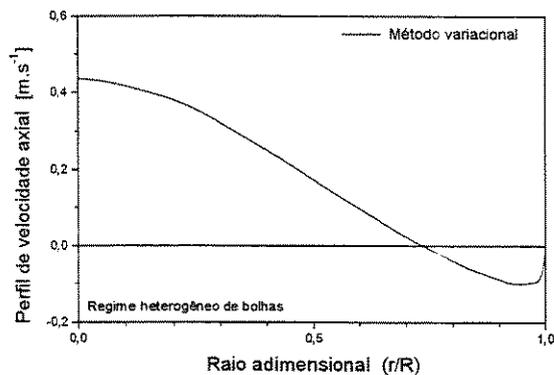


Figura 12. Perfil de velocidade de lama obtido a partir da figura "Fig.(13)".

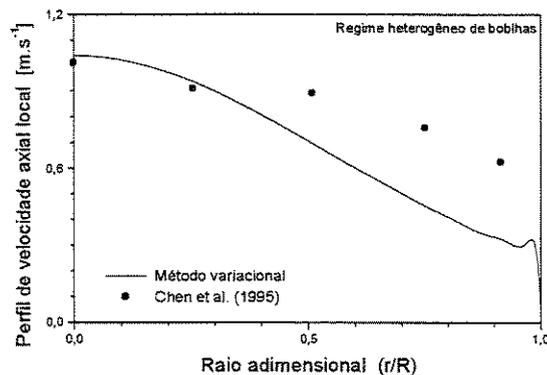


Figura 13. Perfil de velocidade de gás comparado com dados experimentais.

5. CONCLUSÕES

Os resultados numéricos obtidos nas simulações foram bastante satisfatórios e descrevem bem os dados experimentais.

O método dos princípios variacionais é uma técnica de otimização por natureza, ou seja, é equivalente a qualquer técnica de otimização, com uma vantagem, está baseado em postulados termodinâmicos, o que garante a consistência física do problema.

O fechamento do balanço de massa para cada uma das fases está diretamente associado a igualdade entre os valores de queda de pressão para cada fase, e estão diretamente ligados ao cálculo da variável de fração volumétrica média de gás no leito.

A fração volumétrica média de gás é uma variável extremamente importante para o cálculo dos perfis de velocidade no leito, e conseqüentemente, para a estimativa de inúmeras outras variáveis do processo avaliado, tais como os coeficientes de transferência.

Simbologia

- A Seção transversal do leito [m^2];
- C_w Constante interfacial igual à $5,0 \cdot 10^4$;
- dP/dz Queda de pressão [Pa];
- g Aceleração gravitacional [$m \cdot s^{-2}$];

R	Raio [m];
U	Velocidade superficial [m.s ⁻¹];
V	Velocidade axial [m.s ⁻¹];

Índices e letras gregas

eff	Indica propriedade efetiva;
g	Fase gás;
sl	Fase lama;
ε	Fração volumétrica [m ³ .m ⁻³];
μ	Viscosidade [kg.m ⁻¹ .s ⁻¹];
ρ	Densidade [kg.m ⁻³];

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao suporte financeiro da FAPESP – Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (processo 97/05505-9), Brasil.

REFERÊNCIAS

- Chen, Z., Zheng, C. e Feng, Y. (1995), “Modeling of three-phase fluidized beds based on local bubble characteristics measurements”, *Chem. Engng. Sci.*, v.50, n.2, 231-236.
- Finlayson, B. A. (1972), *The method of weighted residuals and variational principles*, McGraw-Hill Inc. NY.
- Gal-Or, B. e Weihs, D. (1972), “Variational analysis of high mass transfer rates from spherical particles boundary-layer”, *Int. J. Mass Heat Transfer*, v.15, 2027-2044.
- Gerald, C. (1989), *Applied numerical analysis*, Addison-Wesley.

Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. A. e Wright, M.H. (1984b), *User's guide for QPSOL (Version 3.2): a Fortran package for quadratic programming*, Report SOL 84-6, Department of Operations Research, Stanford University, California.

Gorla, R. S. R. e Madden, P. E. (1984), "A variational approach to non-steady non-newtonian flow in a circular pipe", *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, v.16, 251-265.

Lamb, H. (1962), *Hydrodynamics*, 6th edn. Cambridge University, London.

Santos Jr, I. e Guirardello, R. (1999), "Modelling and simulation of a multiphase fluidized bed reactor by variational principles", *Computer & Chemical Engng. – suppl.*, v. 23, n.1, june, S411-S414.

Schechter, R. S. (1967), *The variational method in engineering*, McGraw-Hill.

Tarmy, B. L., Chang, M., Coualoglou, C. A. e Ponzi, P.R. (1984), "The three-phase hydrodynamic characteristics of the EDS coal liquefaction reactors: their development and use in reactor scaleup", *I. Chem. E.*, Symposium Series No 87. 8th International Symposium on Chemical Reaction Engng., Edinburg, september, 10-11.

Ueyama, K. e Miyauchi, T. (1979), "Properties of recirculating turbulent two phase flow in gas bubble columns", *AIChE J.*, v.25, n.2, 258.

Yang, C. T. (1994), "Variational theories in hydrodynamics and hydraulics", *J. Hydraulic Engng.*, v.120, n.6, 737-756, june.

Zhu, J. (1995), "Drag and mass transfer for flow of a carreau fluid past a swarm of newtonian drops", *Int. J. Multiphase Flow*, v.21, 935-940.

EXPLORING THE IMPLICIT CHARACTERISTICS OF OPTIMIZATION ASSOCIATED WITH THE VARIATIONAL PRINCIPLE METHOD

Santos Jr., I. and Guirardello, R.

Dept. of Chemical Engineering, University of Campinas – UNICAMP CP 6066, 13083,
Campinas – SP, Brasil

Abstract. This work shows that computational modelling and simulation of chemical process by means of variational principles methods can be explored when associated to the implicit optimization characteristics. The main advantage of this method is due to the non utilization of empirical correlations, escarse in literature, and the main desadvantage is the complicated and difficult algebraic manipulation of the problem. The development of robust, reliable and efficient computational simulators for complex chemical process is conditioned to the existence of empirical correlations that can be applicable to the operational conditions desired. Therefore, this fact makes the variational principle method very oportune. A tentative function needs to be attempted in accordance to the restrictions or limits of the problem, with coefficients that are determined in place of the correlations. The coefficients are determined such that the problem has an optimal value, in other words, the coefficients are adjusted so that the objective function has one minimum or maximum value. The initial study is for hydrodynamic of a three-phase reactor, operating in a slurry bubble column mode, and computational results are satisfactory enough and they are in accordance with experimental results. This method shows other advantages, which by means of traditional formulation, with differential equations, only are obtained when submitted to the optimization stage.

Keywords: Variational principles, Three-phase reactor, Hydrodynamic, Optimization

Wall Effect Influence in the Velocity Profiles in Slurry Bubble Column Reactor

I. Santos Jr.⁽¹⁾ and R. Guirardello⁽²⁾

College of Chemical Engineering
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Campinas, Sp CP 6066 CEP 13083-970 Brasil
irsantos@feq.unicamp.br⁽¹⁾ or guira@feq.unicamp.br⁽²⁾

ABSTRACT

In a previous work an integral mathematical model based on the calculus of variations was proposed to describe the one dimensional hydrodynamic behaviour in a slurry bubble column reactor; however, the phase profiles showed a numerical discrepancy next to the wall. This fact can be associate either to the non consideration of the wall effect phenomena or the turbulence model used. Quantitative numerical results for the velocity and hold-up phase profiles are very important, because the transport phenomena are associated directly with the amount of phase present at each point. The need of a good mathematical description next to the wall is justified by fact that in this region it is verified high gradients for the gas and slurry velocities and hold-up profiles. In this work, it is incorporated the influence of the wall effect on the integral mathematical model proposed. Numerical results obtained are satisfactory and they indicate that the incorporation of the wall effect was necessary for the efficient description of the phase profiles.

INTRODUCTION

Sometimes, mathematical models in chemical engineering are presented without hydrodynamical aspects because of the difficulties in the algebraic manipulation and numerical simulation. Commonly, these models consider mass and heat transfers alone. However, for an efficient modelling it is necessary to describe in a satisfactory way the flow and hold-up profiles for all the phases involved, which demands the use of a hydrodynamic modelling. The quantification of these profiles are indispensable for a reliable numerical analysis of the chemical process.

Santos Jr. and Guirardello [1] proposed a variational approach for one dimensional modelling in a slurry bubble column reactor without considering external agitation or chemical reaction; it was only considered the hydrodynamical aspect and the mass balance. The high turbulence ensures the thermal

homogeneity. Due to the complexity of the flow in this chemical process, the hydrodynamic analysis is important for a complete investigation of the transfer phenomena and the satisfactory quantification for the transfer phenomena [2].

Deckwer [2] commented that for a good numerical analysis of the process flow involved in this reactor it is indispensable a efficient mathematical model capable of describing well the region next to the wall, since the transfer gradients (mass, heat, momentum) are accentuated in this region. In the central region the transfer gradients are much less accentuated.

If a rigorous mathematical model is proposed and applied in this process, the boundary conditions must be chosen adequately. Inadequate conditions can generate unsatisfactory results. Usually, one of the boundary conditions adopted is in relation to the flow velocity in the reactor surface given by:

$$V = 0 \quad \text{in} \quad r = R \quad (01)$$

The equation (01) was adopted by [1]. Also, the turbulence model used should adequately represent the behaviour next to the wall. However, it was observed that numerical results obtained by [1] did not describe satisfactorily the experimental data in this region. In order to get more reliable results, empirical correlations are used in a point next to the wall [3]. Mathematically, the information regarding the behaviour of the velocity in this point is obtained by approximation of the boundary layer theory or the Newton's viscosity law. Usually, a numerical value for the velocity in a point next to the wall is obtained by Prandtl's correlation:

$$|V_k| = \frac{(\tau_{w,k}/\rho_k)^{0,5}}{0,4} \cdot \ln \left[E \times \frac{(\tau_{w,k}/\rho_k)^{0,5}}{\mu_k/\rho_k} \times y \right] \quad \text{in} \quad r = r^* \quad (02)$$

where E is roughness factor (E=8), and y is the distance between the wall and the point considered (y=R-r*) in the analysis for the calculation of the velocity at that specific point. Equation (2) is equivalent to Deissler's equation added to Newton's viscosity law [3].

The variable y can be arbitrarily chosen, but it needs to be in the interval given by:

$$5 \leq y^+ \leq 26 \quad (03)$$

where $y^+ = (y \cdot \sqrt{\rho_k \cdot \tau_{w,k}}) / \mu_k$, since equation (02) was empirically fitted for this region.

The turbulence model adopted by [1] did not describe satisfactorily the experimental data next to the wall due do the high gradients of velocity. Therefore, in the present paper it was used Prandtl's correlation for the velocity profile next to the wall. The numerical results obtained were satisfactory and they indicate the necessity of application of this correlation in the wall region.

MATHEMATICAL METHOD

Initially, it is necessary to obtain an analytic expression to calculate the variable for the wall stress τ_w . This expression was obtained from the differential mathematical modelling of the slurry bubble column reactor proposed in [4]. Adding the two differential momentum equations of the slurry and gas phases [4] and applying the condition in the wall given by:

$$\varepsilon_{sl} = 1 \quad \text{and} \quad \varepsilon_g = 0 \quad \text{in} \quad r = R \quad (04)$$

it is obtained the expression for the wall stress for the slurry phase:

$$\tau_{w,sl} = \left[\varepsilon_{sl} \cdot \mu_{sl}^{eff} \cdot \frac{dV_{sl}}{dr} \right]_{r=R} = \frac{dP}{dz} + g \cdot (\rho_{sl} \cdot \bar{\varepsilon}_{sl} + \rho_g \cdot \bar{\varepsilon}_g) \quad (05)$$

where it is observed that the stress variable can be related either to the slurry viscosity in the wall (left hand side) or the manometric pressure added to the bed weight (right hand side).

In order to solve the integral modelling [1] with the boundary conditions given by Prandtl expression (Equation 02), first the differential equation for gas and slurry phases [4] are added. Since in the region $0 \leq r \leq r^*$ the term due to gas viscosity is negligible compared to the others, the resulting differential equation only have the slurry velocity. Therefore, the variational principle can be formulated as:

$$\Psi = \int_0^{r^*} \left[\frac{1}{2} \varepsilon_{sl} \mu_{sl}^{eff} \left(\frac{dV_{sl}}{dr} \right)^2 + V_{sl} \frac{dP}{dz} + g (\rho_{sl} \varepsilon_{sl} + \rho_g \varepsilon_g) V_{sl} \right] 2\pi r dr \quad (06)$$

which is stationary with respect to V_{sl} . The next step consists to obtain the variational formulation to calculate the gas profile considering that V_{sl} is known. The gas profile is obtained from the differential momentum equation for the gas phase [4], and the variational principle can be formulated as:

$$I = \int_0^R \left\{ \left[\varepsilon_g \frac{dP}{dz} - (\rho_{sl} - \rho_g) g \varepsilon_g \right] V_g + \frac{C_w \varepsilon_g \varepsilon_{sl}}{2} (V_{sl} - V_g)^2 + \frac{\mu_g^{eff} \varepsilon_g}{2} \left(\frac{dV_g}{dr} \right)^2 \right\} 2\pi r dr \quad (07)$$

which is stationary with respect to V_g , considering V_{sl} given. The information for V_{sl} in $r^* \leq r \leq R$ is obtained from the equation (01) and (02) by interpolation.

Equation (02) is applied for continuous phases. Therefore, the Prandtl's correlation only is applied for the slurry phase because the gas fraction next to the wall can be considered negligible.

RESULTS

A trial function for the velocity profiles with unknown parameters $C_i^{V_{sl,g}}$ was proposed by [1]. This profile is substituted in equation (06), and then the resulting equation is made stationary with respect to those unknown parameters $C_i^{V_{sl,g}}$. The resulting equations are added to the slurry mass balance equation [1], and equations (02) and (05). This system is then solved for $C_i^{V_{sl,g}}$, $-dP/dz$ and $\tau_{w,sl}$. To begin the calculations it is necessary to adopt one value for variable y as close to the wall as

possible, satisfying equation (03). Thus it was adopted $y = 0,005 \times R$ or $r^* = 0,995 \times R$ (0,5% of radius) and the values calculated y^+ were 7.43 and 15.71 for figures (01) and (02), respectively.

In the figures (01) and (02) the numerical simulations were done for two sets of experimental data for slurry phase obtained by [5] whose data were already compared with numerical data showed by [1] without the wall effect.

When it is applied the wall effect the flow of slurry profile only is valid in the interval $[0, r^*]$. The figure (03) show for the case simulated in the figure (01) that the behaviour for this profile next the wall $[r^*, R]$ was not calculated. However, in this region the slurry profile was approximate by straight line. An exact result in this region can be obtained by Newton's viscosity law. The same consideration is valid for the figure (02) in the region next to the wall.

The first step of the numerical procedure constitute a interactive non-linear mathematical process for the system of equations given by equations (05) and (06), where it is obtained dP/dz . The second step is a linear procedure obtained only by the stationary condition. Numerical results for the slurry phase were satisfactory.

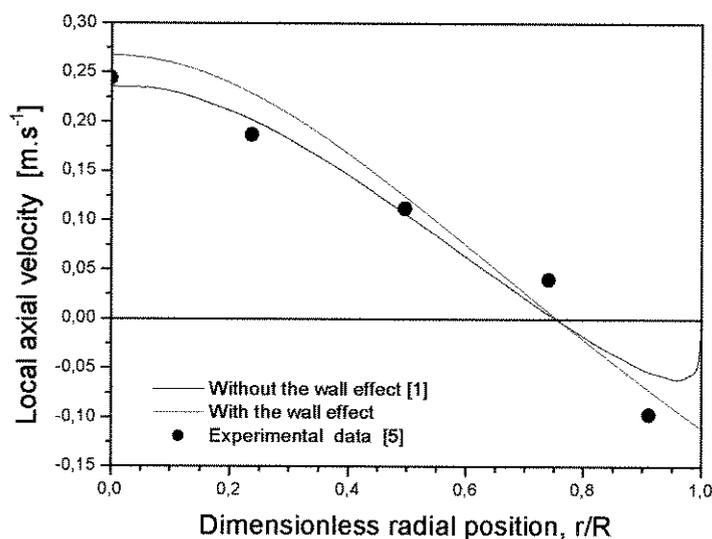


Figure 01 : Slurry phase flow simulated for the case study - 01.

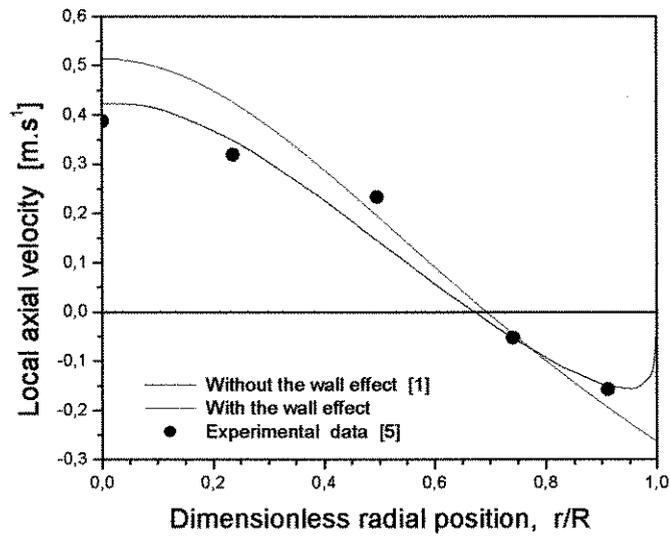


Figure 02 : Slurry phase flow simulated for the case study - 02.

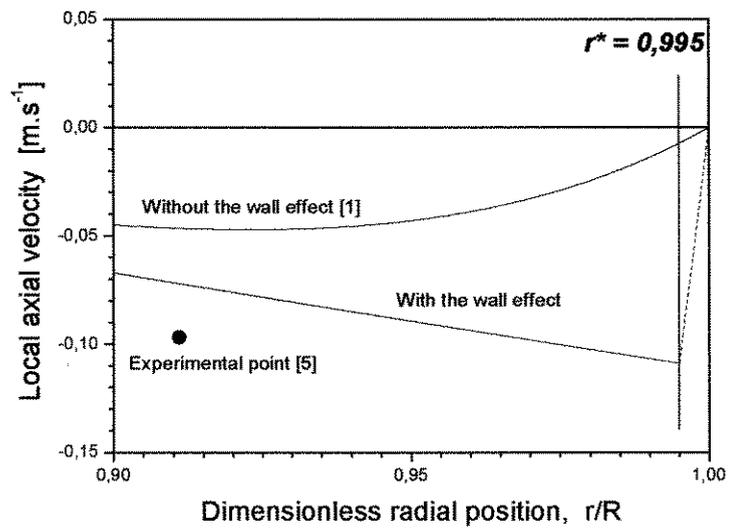


Figure 03 : Flow approximate for the slurry phase next in the wall (case study - 01).

DISCUSSION

In this work it was analysed the mathematical modelling proposed by [1], where the use of Prandtl's correlation for the velocity profile next to the wall resulted in a better agreement between calculated and experimental value for the slurry velocity. Since equation (02) provides the value for the velocity in absolute value, its sign is determined by the direction of the slurry flow. In the process studied, the velocity takes the negative value, since next to the wall the slurry goes downward. Otherwise, the numerical results would be unrealistic if the positive value were used.

In the proposed approach, based on the calculus of variations, special care should be considered in the integration, since the slurry velocity equation and the gas velocity equation use different points, resulting in different limits of integration.

CONCLUDING REMARKS

High gradients of velocity are observed next to the wall region of the slurry reactor. Turbulence models that do not take this into account are not able to describe with precision the experimental data for the slurry velocity in this region. The use of Prandtl's logarithmic law for velocities close to the wall resulted in better numerical results compared with the experimental data. The application to the variational formulation was easily done, although it required an iterative procedure due to the non-linearity in the model.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors acknowledge the financial support of São Paulo State Research Sponsoring Agency (*FAPESP*) – process 97/05505-9, Brasil.

NOMENCLATURE

- C constant of velocity profiles
- C_w constant of interfacial drag force
- eff effective
- g gravitational acceleration
- r^* Prandtl's radius

R	radius of the tube
μ	viscosity
ρ	density
ε	volumetric fraction
sl	slurry phase
g	gas phase

References

- 1 Santos Jr., I. & Guirardello, R. (1999) 'Modelling and Simulation of a Multiphase Fluidized bed Reactor by Variational Principles', *Computers and Chemical Engineering Suppl.*, (23), pp S411-S414.
- 2 Deckwer, W.-D. (1992) *Bubble Column Reactors*. John Wiley and Sons, New York.
- 3 Bird, R. B., Stewart, W. E. & Lightfoot, E. N. (1960) *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, New York.
- 4 Carbonell, M. M. & Guirardello, R. (1997) 'Modelling of a Slurry Bubble Column Reactor Applied to Hydroconversion of Heavy Oils', *Chemical Engineering Science*, (52), pp 4179-4185.
- 5 Chen, Z., Zheng, C. & Feng, Y. (1995) 'Modeling of Three-Phase Fluidized Beds Based on Local Bubble Characteristics Measurements', *Chemical Engineering Science*, (50), pp 231-236.