ESTUDO NUMÉRICO DA INFLUÊNCIA DE DIFERENTES ARRANJOS BIDIMENSIONAIS ESPACIALMENTE PERIÓDICOS NO CÁLCULO DO COEFICIENTE DE DISPERSÃO TOTAL, OBTIDO ATRAVÉS DA APLICAÇÃO DO MÉTODO DA MÉDIA NO VOLUME EM UMA COLUNA DE ADSORÇÃO EM LEITO FIXO

C. da LUZ[1], A. D. da LUZ[3], A. A. ULSON DE SOUZA[2], S. M. A. GUELLI ULSON DE SOUZA[2], A. M. TISCHER[1] e J. V. MARTINHAGO[1]

[1] Universidade do Estado de Santa Catarina, Departamento de Eng. de Alimentos e Eng. Químicas
[2] Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Química e de Alimentos
[3] Universidade Federal da Fronteira Sul, Curso de Engenharia Ambiental
E-mail para contato: cleuzir@udesc.br, selene.souza@enq.ufsc.br

RESUMO – *A predição da dinâmica das colunas de adsorção de leito fixo, através da modelagem matemática aplicando o Método da Média no Volume (MMV) e a simulação numérica, são ferramentas fundamentais para a compreensão e análise dos processos nas indústrias. A dispersão em meios porosos é um fenômeno importante em sistemas naturais e artificiais e o MMV permite carregar, hierarquicamente, as informações físicas dos mecanismos de transferência de massa entre escalas de comprimento, chegando à uma expressão teórica para o coeficiente de dispersão total. Neste trabalho o coeficiente de dispersão total é obtido pela resolução numérica do chamado Problema de Fechamento e comparado com os dados experimentais da literatura para dois arranjos espacialmente periódicos, bidimensionais, que representam a estrutura do meio poroso.*

1. INTRODUÇÃO

Difusão e dispersão em meios porosos é um fenômeno importante em uma grande variedade de sistemas naturais e artificiais. Exemplos específicos são abundantes, e estes incluem uma ampla variedade de aplicações, tais como: transporte de contaminante, filtragem de água, transporte de espécies químicas em reatores, transferência de calor e reatores de enzimas imobilizadas (Wood, 2007). Em geral os trabalhos encontrados na literatura, como Plumb e Whitaker (1988a-b), Eidsath *et al.* (1983), Wood (2007), Valdés-Parada *et al.* (2011) e Quintard e Whitaker (1994) estudam processos mais simples de transporte convectivo, isto é, convecção e difusão passiva num meio poroso impermeável. A palavra passiva é utilizada para significar que não há adsorção ou reação na interface fluido-sólido, nem existe qualquer transferência de massa da fase fluida à fase sólida, uma vez que a fase sólida é impermeável. Poucos processos reais são passivos, sendo assim o modelo matemático mais completo considera a dispersão axial na direção do fluxo da alimentação, resistência

à difusão no filme líquido, resistência à difusão intrapartícula, a qual pode incluir difusão no poro e na superfície, e cinética de adsorção e biodegradação (dependendo do caso) na superfície do adsorvente ou biofilme (Chu, 2004; Sulaymon e Ahmed, 2008). Portanto uma modelagem matemática que considera a condição de salto na interface da partícula está mais próxima da real predição do fenômeno de adsorção. O Método da Média no Volume (MMV), descrito por Whitaker (1999), tem sido utilizado com sucesso para prever coeficiente de difusividade efetiva e o coeficiente de dispersão (Eidsath *et al*., 1983; Wood, 2007) a partir de arranjos espacialmente periódicos de meios porosos, porém arranjos basicamente simples. Em geral o estudo do coeficiente de difusividade efetiva é em função da porosidade e o coeficiente de dispersão total é em função do número de Peclet. De acordo com Wood *et al*. (2007) uma apropriada representação da estrutura geométrica, potencialmente complexa, é muito importante para a obtenção de previsões razoáveis do termo de dispersão hidrodinâmica. Considerando que a estrutura geométrica dos poros tem influência no cálculo dos tensores de transporte, um estudo de arranjos de malhas pode ser feito. Neste trabalho será realizada a modelagem matemática através da aplicação do MMV em uma coluna de leito fixo empacotada com partículas de adsorvente, conforme ilustrado na Figura 1 de Luz *et al.* (2012). Nesta modelagem matemática será obtido o chamado modelo de duas equações utilizando isoterma linear e condição de salto na interface da partícula. Todas as informações fenomenológicas da microescala para macroescala são carregadas, obtendo todos os tensores de transporte do sistema analiticamente, deixando-os na dependência da resolução dos chamados problemas de fechamento (problemas de valor de contorno com menor complexidade). Serão aplicados dois arranjos espacialmente periódicos, bidimensionais, que representam o meio poroso, a fim de determinar numericamente as componentes do tensor de dispersão total. É fundamental fazer uma análise do melhor arranjo ou tipo de malha que deve ser usada como domínio de cálculo dos problemas de fechamento. A importância de estudar arranjos mais complexos é facilmente justificável, pois um meio poroso de uma coluna de leito fixo tem seu arranjo com os mais variados tipos de empacotamentos.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática deste trabalho foi realizada em duas escalas de comprimento de um adsorvente empacotado em uma coluna de leito fixo, a partir de um volume de controle da microescala e macroescala, levando em conta a isoterma linear. Na Figura 1 de Luz *et al.* (2012) é ilustrado a estrutura hierárquica desta coluna. As equações de transporte governantes e condições de contorno interfaciais que representam o processo de adsorção no volume de controle $\mathscr{V}_\omega$ são:

$$\frac{\partial C_{i\gamma}}{\partial t} = \nabla.(\mathscr{D}_{i\gamma}\nabla C_{i\gamma}), \qquad \text{na fase } \gamma \qquad (01)$$

$$C.C.1 \; -\boldsymbol{n}_{\gamma\kappa}.\mathscr{D}_{i\gamma}\nabla C_{i\gamma} = \frac{\partial C_{Si}}{\partial t}, \qquad \text{em} \quad \mathscr{A}_{\gamma\kappa} \quad \text{e tal que} \quad C_{Si} = K_i C_{i\gamma} \qquad (02)$$

$$C.C.2 \; C_{i\gamma} = \mathscr{F}_{i\gamma}(t,r), \qquad \text{em } \mathscr{A}_{\gamma e} \qquad (03)$$

$$C.I. \; C_{i\gamma} = \mathscr{G}_{i\gamma}(r), \qquad \text{em t = 0.} \qquad (04)$$

Em que $C_{i\gamma}$ é a concentração pontual na fase γ do $\mathscr{V}_\omega$ das espécies *i*, $\mathscr{D}_{i\gamma}$ é a difusividade molecular da espécie *i*, $\boldsymbol{n}_{\gamma\kappa}$ é o vetor unitário normal à área $\mathscr{A}_{\gamma\kappa}$ e C_{Si} é a concentração de superfície da espécie *i*. Sendo um processo de adsorção, a *C.C.1* dada pela Equação 2, é baseada na isoterma linear, tal que K_i é o coeficiente de equilíbrio de adsorção. A *C.C.2* dada pela Equação 3 mostra a concentração pontual em $\mathscr{A}_{\gamma e}$ dada pela função $\mathscr{F}_{i\gamma}(t,r)$ e a *C.I* na Equação 4 dada pela função $\mathscr{G}_{i\gamma}(r)$. O objetivo é utilizar as informações da microescala para compor equações governantes na macroescala. Para isso é aplicado o MMV (Whitaker, 1999), que consiste em transformar a concentração pontual em uma concentração média para todo $\mathscr{V}_\omega$, em que $\mathscr{V}_\omega = \mathscr{V}_\gamma + \mathscr{V}_\kappa$, onde $\mathscr{V}_\gamma$ é o volume da fase γ e $\mathscr{V}_\kappa$ é o volume da fase κ. Este método utiliza a Concentração Média Volumétrica Superficial e a Concentração Média Intrínseca, Equações 5, respectivamente. Uma relação importante entre estas é dada por $\langle C_{i\gamma}\rangle = \varepsilon_\gamma \langle C_{i\gamma}\rangle^\gamma$, em que ε_γ é a porosidade da fase γ ($\varepsilon_\gamma = \mathscr{V}_\gamma / \mathscr{V}_\omega$).

$$\langle C_{i\gamma}\rangle = \frac{1}{\mathscr{V}_\omega}\int_{V_\gamma} C_{i\gamma}\, dV \quad \text{e} \quad \langle C_{i\gamma}\rangle^\gamma = \frac{1}{\mathscr{V}_\gamma}\int_{V_\gamma} C_{i\gamma}\, dV . \tag{05}$$

Análogo aos procedimentos matemáticos de Whitaker (1999) - Cap. 1, faz-se o processo de suavização espacial com a importante aplicação do Teorema da Média Espacial, mostrado no estudo de Howes e Whitaker (1985). A Aplicação deste Teorema ilustra um aspecto fundamental do processo de suavização espacial, onde a *C.C.1* é introduzida na equação governante através da integral do fluxo. Assim chega-se a Equação 6:

$$\varepsilon_\gamma \left(1 + \frac{a_v\big|_{\gamma\kappa} K_i}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{\partial \langle C_{i\gamma}\rangle^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\varepsilon_\gamma \boldsymbol{D}_{\mathbf{eff}\ i}\big|_{\gamma\kappa} . \nabla \langle C_{i\gamma}\rangle^\gamma\right), \tag{06}$$

em que $\boldsymbol{D}_{\mathbf{eff}\ i}\big|_{\gamma\kappa} = \mathscr{D}_{i\gamma}\left(\boldsymbol{I} + \frac{1}{\mathscr{V}_\gamma}\int_{\mathscr{A}_{\gamma\kappa}} \boldsymbol{n}_{\gamma\kappa}\boldsymbol{b}_{i\gamma}\, dA\right)$ é o tensor difusividade efetiva da espécie *i*. (07)

Em que $\boldsymbol{b}_{i\gamma}$ é a variável de fechamento e soluções do problema de fechamento, conforme Whitaker (1999) - Cap. 1. Na Figura 1 de Luz *et al*. (2012), $\mathscr{V}$ é volume de controle formado por macroporos da coluna de leito fixo contendo uma fase fluida (fase β) e de uma região sólida (fase σ). O raio do $\mathscr{V}$ é r_0 e os símbolos ℓ_β e ℓ_σ são usados para representar os comprimentos característicos das fases. O problema de difusão e adsorção é dado pelas equações diferenciais e condições de contorno:

$$\frac{\partial C_{i\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{v}_\beta C_{i\beta}) = \nabla \cdot (\mathscr{D}_{i\beta} \nabla C_{i\beta}) , \qquad \text{na fase } \beta \tag{08}$$

$$C.C.1 \quad -\boldsymbol{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathscr{D}_{i\beta} \nabla C_{i\beta} = +\boldsymbol{n}_{\sigma\beta} . \boldsymbol{D}_{\sigma i} . \nabla C_{i\sigma} , \qquad \text{em } \mathscr{A}_{\beta\sigma} \tag{09}$$

$$C.C.2 \quad -\boldsymbol{n}_{\sigma\beta} . \boldsymbol{D}_{\sigma i} . \nabla C_{i\sigma} = h(C_{i\sigma} - C_{i\beta}) , \qquad \text{em } \mathscr{A}_{\beta\sigma} \tag{10}$$

$$\varepsilon_\gamma \left(1 + K^*\right) \frac{\partial C_{i\sigma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_{i\sigma} . \nabla C_{i\sigma}) , \qquad \text{na região } \sigma \tag{11}$$

$$C.C.3 \ C_{i\beta} = \mathscr{F}_i(r,t) \quad \text{em } \mathscr{A}_{\beta e} \quad \text{e} \quad C.C.4 \ C_{i\sigma} = \mathscr{G}_i(r,t) , \quad \text{em } \mathscr{A}_{\sigma e} \tag{12}$$

C.I.1 $C_{i\beta} = \mathscr{H}_i(r)$ em t = 0 e *C.I.2* $C_{i\sigma} = \mathscr{I}_i(r)$, em t = 0. (13)

Em que $\boldsymbol{v}_\beta$ é o campo de velocidade, $K_i^* = \left(a_v\big|_{\gamma\kappa} K_i\right)\big/\varepsilon_\gamma$, $\boldsymbol{D}_{i\sigma} = \varepsilon_\gamma \boldsymbol{D}_{ef\ i}\big|_{\gamma\kappa}$ e h é o coeficiente de transferência de massa na macroescala, sendo que $\langle C_{i\gamma}\rangle^\gamma = C_{i\sigma}$ e na *C.C.2* é considerando condição de salto na interface da partícula. Conforme mostrado em Luz *et al*. (2012), aplica-se o Método da Média no Volume nas equações pontuais do campo de concentração para fase β e para região σ, chegando-se a um Problema de Fechamento, o qual pelo Princípio da Superposição têm as soluções:

$$\tilde{C}_{i\beta} = \boldsymbol{b}_{i\beta\beta}.\nabla\langle C_{i\beta}\rangle^\beta + \boldsymbol{b}_{i\beta\sigma}.\nabla\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma + t_{i\beta}\left(\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma - \langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right) + \varphi_{i\beta} \tag{14}$$

$$\tilde{C}_{i\sigma} = \boldsymbol{b}_{i\sigma\beta}.\nabla\langle C_{i\beta}\rangle^\beta + \boldsymbol{b}_{i\sigma\sigma}.\nabla\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma + t_{i\sigma}\left(\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma - \langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right) + \varphi_{i\sigma}\,. \tag{15}$$

Em que $\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}$, $\boldsymbol{b}_{i\beta\sigma}$, $\boldsymbol{b}_{i\sigma\sigma}$, $\boldsymbol{b}_{i\sigma\beta}$, $t_{i\beta}$, $t_{i\sigma}$, $\varphi_{i\beta}$ e $\varphi_{i\sigma}$ são denominadas variáveis de fechamento e são soluções de três problemas de valor de contorno (Luz *et al*., 2012). Neste trabalho o interesse está relacionado ao seguinte problema de fechamento:

$$\boldsymbol{v}_\beta.\nabla\boldsymbol{b}_{i\beta\beta} + \tilde{\boldsymbol{v}}_\beta = \nabla\cdot\mathscr{D}_{i\beta}\nabla\boldsymbol{b}_{i\beta\beta} + \frac{\mathscr{D}_{i\beta}}{\mathscr{V}_\beta}\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\beta\sigma}dA, \qquad \text{na fase } \beta \tag{16}$$

C.C.1 $\boldsymbol{n}_{\sigma\beta}.\nabla\boldsymbol{b}_{i\beta\beta} = -\boldsymbol{n}_{\beta\sigma}$, em $\mathscr{A}_{\beta\sigma}$ (17)

C.C.2 $\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}(\boldsymbol{r}+\ell_j) = \boldsymbol{b}_{i\beta\beta}(\boldsymbol{r})$, $j = 1,\ 2,\ 3$ (18)

Pois o Tensor de Dispersão Total é dado por:

$$\boldsymbol{D}^*_{i\beta\beta} = \mathscr{D}_{i\beta}\varepsilon_\beta\left(\boldsymbol{I} + \frac{1}{\mathscr{V}_\beta}\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\beta\sigma}\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}\,dA\right) - \langle\tilde{\boldsymbol{v}}_\beta\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}\rangle. \tag{19}$$

<u>Forma Fechada</u>: Com as soluções dos problemas de fechamento dadas pelas Equações 14 e 15, chega-se à forma fechada do modelo de duas equações para uma coluna de leito fixo:

$$\begin{aligned}\varepsilon_\beta\frac{\partial\langle C_{i\beta}\rangle^\beta}{\partial t} &= \nabla\cdot\left(\boldsymbol{D}^*_{i\beta\beta}.\nabla\langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right) + \nabla\cdot\left(\boldsymbol{D}^*_{i\beta\sigma}.\nabla\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma\right)\\ &+\nabla\cdot\left[\boldsymbol{u}_{i\beta}h\left(\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma - \langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right)\right] + a_v\big|_{\beta\sigma}h\left(\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma - \langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right) - \nabla.\left(\varepsilon_\beta\langle\boldsymbol{v}_\beta\rangle^\beta\langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right)\end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{D}^*_{i\beta\beta} = \mathscr{D}_{i\beta}\varepsilon_\beta\left(\boldsymbol{I} + \frac{1}{\mathscr{V}_\beta}\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\beta\sigma}\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}dA\right) - \langle\tilde{\boldsymbol{v}}_\beta\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}\rangle, \qquad \boldsymbol{D}^*_{i\beta\sigma} = \mathscr{D}_{i\beta}\varepsilon_\beta\left(\frac{1}{\mathscr{V}_\beta}\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\beta\sigma}\boldsymbol{b}_{i\beta\sigma}dA\right) - \langle\tilde{\boldsymbol{v}}_\beta\boldsymbol{b}_{i\beta\sigma}\rangle\\ &\boldsymbol{u}_{i\beta} = \frac{\mathscr{D}_{i\beta}\varepsilon_\beta}{h}\left(\frac{1}{\mathscr{V}_\beta}\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\beta\sigma}t_{i\beta}dA\right) - \frac{1}{h}\langle\tilde{\boldsymbol{v}}_\beta t_{i\beta}\rangle\end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_\sigma\varepsilon_\gamma(1+K_i^*)\frac{\partial\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma}{\partial t} &= \nabla\cdot\left(\boldsymbol{D}^*_{i\sigma\sigma}.\nabla\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma\right) + \nabla\cdot\left(\boldsymbol{D}^*_{i\sigma\beta}.\nabla\langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right) + \nabla\cdot\left[\boldsymbol{u}_{i\sigma}h\left(\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma - \langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right)\right]\\ &-a_v\big|_{\beta\sigma}h\left(\langle C_{i\sigma}\rangle^\sigma - \langle C_{i\beta}\rangle^\beta\right)\end{aligned} \tag{22}$$

$$\boldsymbol{D}^*_{i\sigma\sigma} = \varepsilon_\sigma\left(\boldsymbol{D}_{i\sigma} + \frac{\boldsymbol{D}_{i\sigma}}{\mathscr{V}_\beta}.\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\sigma\beta}\boldsymbol{b}_{i\sigma\sigma}\,dA\right),\ \boldsymbol{D}^*_{i\sigma\beta} = \varepsilon_\sigma\left(\frac{\boldsymbol{D}_{i\sigma}}{\mathscr{V}_\sigma}.\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\sigma\beta}\boldsymbol{b}_{i\sigma\beta}\,dA\right) \text{e } \boldsymbol{u}_{i\sigma} = \frac{\varepsilon_\sigma}{h}\left(\frac{\boldsymbol{D}_{i\sigma}}{\mathscr{V}_\sigma}.\int_{A_{\beta\sigma}} \boldsymbol{n}_{\sigma\beta}t_{i\sigma}\,dA\right) \tag{23}$$

Onde os tensores de transporte são tais como: tensor de difusividade efetiva da região σ, $\boldsymbol{D}^*_{i\sigma\sigma}$, tensor de dispersão total da fase β, $\boldsymbol{D}^*_{i\beta\beta}$, tensores cruzados $\boldsymbol{D}^*_{i\beta\sigma}$ e $\boldsymbol{D}^*_{i\sigma\beta}$ e coeficientes convectivos $\boldsymbol{u}_{i\sigma}$ e $\boldsymbol{u}_{i\beta}$.

2. METODOLOGIA NUMÉRICA

As malhas (domínio de cálculo) dos arranjos espacialmente periódicos, bidimensionais, foram construídas no software *Pointwise V17.3R4*. E para verificação da influência de cada arranjo, o problema de fechamento para obtenção do coeficiente de dispersão total foi resolvido pelo software livre *OpenFOAM ®, version 2.2.x*, usando o solver *simpleFOAM*. Neste solver, o escoamento foi resolvido usando o esquema de acoplamento *SIMPLE* (Ferziger e Peric, 1997), generalizado para a solução de escoamentos incompressíveis, turbulentos e estacionários, sendo a solução do escoamento laminar um caso particular da implementação. O Método de Volumes Finitos foi usado na discretização, este método de discretização foi escolhido uma vez que garante a conservação das variáveis envolvidas, tanto no nível elementar quanto no global. Nota-se na literatura que na resolução numérica dos problemas de fechamento não são explorados o uso do Método de Volumes Finitos e o software *OpenFOAM*.

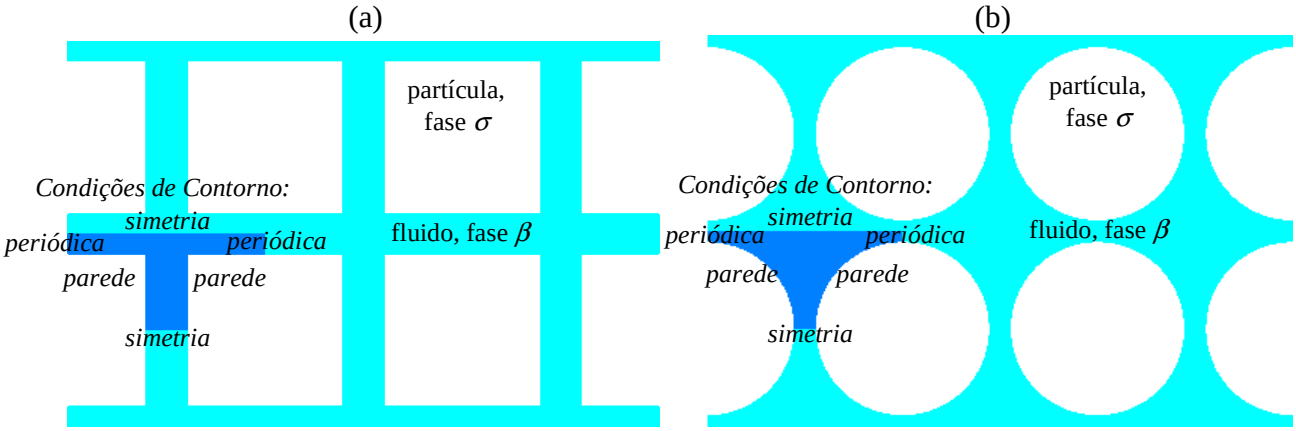

Figura 1 – Modelos de meio porosos espacialmente periódicos com condições de contorno, arranjos bidimensionais: (a) blocos em linha; (b) cilindros em linha.

O problema de fechamento, Equações 16 à 18, foi resolvido numericamente sobre dois dos modelos de meio porosos espacialmente periódicos do estudo de Eidsath *et al.* (1983): arranjos bidimensionais de blocos em linha e cilindros em linha, conforme mostram as Figuras 1a e 1b. O escoamento sobre os arranjos mostrados nas Figuras 1a e 1b, podem ser considerados simétricos axialmente. Desta forma, pode-se considerar como domínio de cálculo a metade da célula unitária (conforme mostra a geometria hachurada das Figuras 1a e 1b). Para encontrar uma solução para as variáveis de fechamento $\boldsymbol{b}_{i\beta\beta}$ deve-se conhecer o campo de velocidade $\boldsymbol{v}_\beta$. Isto é, primeiro resolve-se as equações de Navier-Stokes sobre estes arranjos. Obtendo o campo de velocidade, $\boldsymbol{v}_\beta$, pode-se calcular $\langle \boldsymbol{v}_\beta \rangle^\beta$, então obter $\tilde{\boldsymbol{v}}_\beta$, já que foi considerado $\boldsymbol{v}_\beta = \langle \boldsymbol{v}_\beta \rangle^\beta + \tilde{\boldsymbol{v}}_\beta$.

3. RESULTADOS

Os parâmetros utilizados para o cálculo do tensor de dispersão total são os mesmos usados por Eidsath *et al.* (1983): ε = 0,37, ρ = 1.000 kg/m^3, $\mu = 1{,}0\times10^{-3}\ m^2/s$, no intervalo dos números de Peclet da partícula $1\times10^{-4} \le Pe_p \le 1\times10^{6}$. Considerando que no trabalho de Eidsath *et al.* (1983) não é apresentado o valor do coeficiente de difusividade molecular do soluto, $\mathscr{D}_{i\beta}$, adotou-se o valor do trabalho de Wood (2007) ($\mathscr{D}_{i\beta} = 1\times10^{-9}\ \mathrm{m^2/s}$). O tensor de dispersão total foi resolvido tensorialmente, assim pode-se analisar separadamente o coeficiente de dispersão longitudinal da espécie química *i*, D_{ixx}, e o coeficiente de dispersão transversal da espécie química *i*, D_{iyy}. As condições de contorno usadas para resolução do campo de velocidade, $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$, e para resolução da variável de fechamento, $\mathbf{b}_{i\beta\beta}$, são dadas nas Figuras 1a e 1b. Nas Figuras 2a a 2f são mostrados o comportamento da velocidade na direção longitudinal, v_x, em arranjos bidimensionais de blocos em linha e cilindros em linha para baixo ($Re_p=0{,}1$), médio ($Re_p=6$) e alto ($Re_p=200$) números de Reynolds.

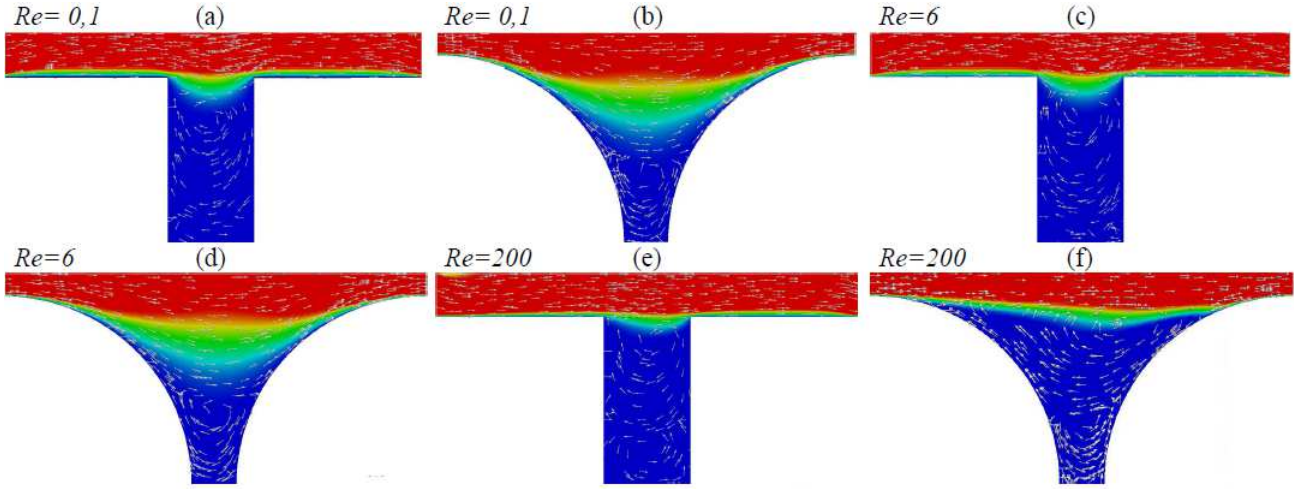

Figura 2 – Três campos de velocidade $\mathbf{v}_\beta$ para arranjos bidimensionais de blocos em linha e cilindros em linha: (a)-(b) *Re=0,1*; (c)-(d) *Re=6*; (e)-(f) *Re=200*, calculados para v_x.

Verifica-se, semelhantemente para ambos os arranjos, que para $Re_p=0{,}1$ e $Re_p=6$ (Figuras 2a a 2d) ocorre um escoamento laminar na maior parte do domínio, sendo que na parte onde as partículas (fase σ) estão mais próximas ocorre uma recirculação. Para Re_p =200 (Figuras 2e e 2f) nota-se que o campo de velocidade começa a mudar sua trajetória e formando duas recirculações e tem-se um regime laminar transiente. O comportamento do escoamento da fase β é condizente com os estudos de Eidsath *et al.* (1983), Wood (2007) e com a física do problema. Na Figura 3 é mostrado um gráfico do coeficiente de dispersão longitudinal normalizado ($D_{ixx}/\mathscr{D}_{i\beta}$) versus o número de Peclet da partícula e comparados com dados experimentais e teóricos da literatura. Os resultados deste trabalho para arranjos de blocos em linha e cilindros em linha, calculados com tolerância de 10^{-12}, apresentaram boa concordância com os dados experimentais e teóricos. Porém para números de Peclet maiores que 1×10^{5} observa-se uma divergência. O que pode estar causando esta divergência é

que, para números de Peclet altos, os efeitos de turbulência tornam-se importantes e não podem ser negligenciados na obtenção do campo de velocidade $\boldsymbol{v}_\beta$. Claramente notou-se diferença entre o coeficiente de dispersão longitudinal obtido sobre os arranjos de blocos em linha e cilindros em linha, sendo que o segundo parece estar mais próximo do fenômeno físico, já que a geométrica da fase σ em geral pode ser formada por partículas cilíndricas ou esféricas.

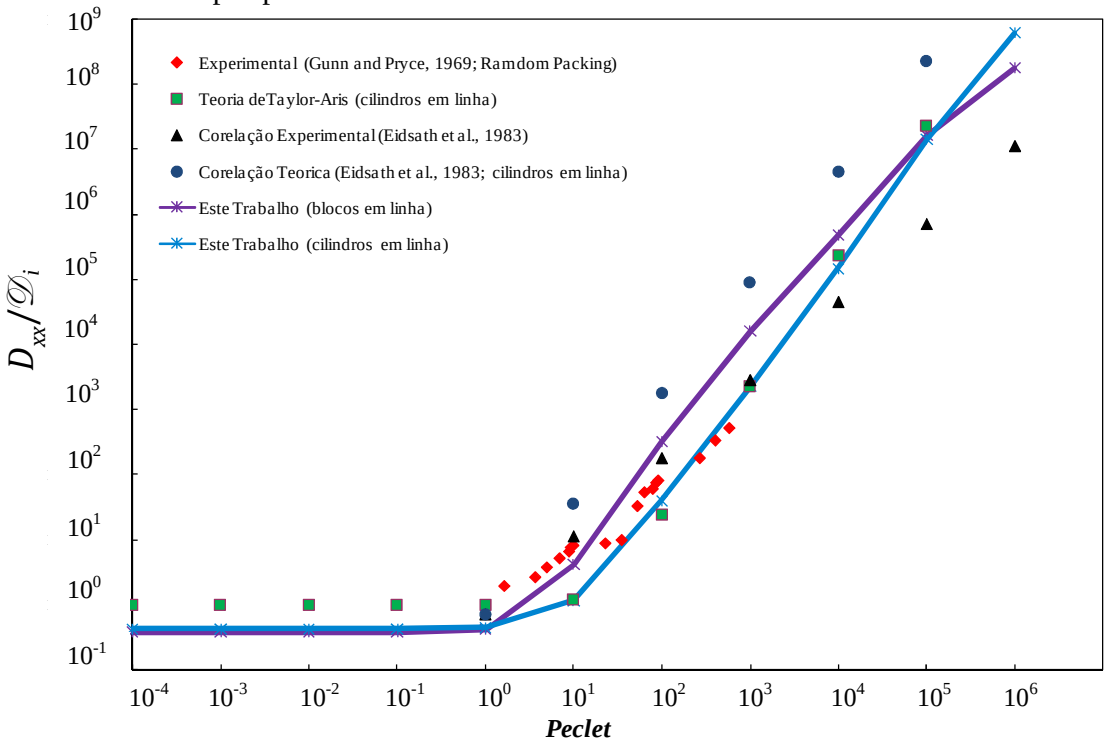

Figura 3 – Comparação dos resultados teóricos e experimentais da dispersão longitudinal com o número de Peclet para arranjos de blocos em linha e cilindros em linha.

4. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi obtido o modelo de duas equações utilizando isoterma linear e considerando condição de salto na interface da partícula, através da modelagem matemática em uma coluna de leito fixo empacotada com partículas de adsorvente, aplicando o Método da Média no Volume. Esta modelagem matemática permitiu carregar todas as informações fenomenológicas da microescala para macroescala, obtendo todos os tensores de transporte do sistema, analiticamente, deixando-os na dependência da resolução dos problemas de fechamento. O problema de fechamento foi resolvido numericamente através do software livre *OpenFOAM ®, version 2.2.x* usando o Método de Volumes Finitos na discretização e as malhas foram construídas no software *Pointwise V17.3R4*. O coeficiente de dispersão longitudinal foi obtido sobre os arranjos de blocos em linha e cilindros em linha no intervalo dos números de Peclet da partícula $1\times10^{-4} \le Pe_p \le 1\times10^{6}$, ambos os arranjos apresentaram boa concordância com os dados experimentais e teóricos da literatura. Porém para números de Peclet maiores que 1×10^{5} observa-se uma divergência que pode ser causada devido aos efeitos de

turbulência, isto é, estes efeitos tornam-se importantes e não podem ser negligenciados na obtenção do campo de velocidade $\boldsymbol{v}_\beta$. Claramente notou-se diferença entre o coeficiente de dispersão longitudinal obtido sobre os arranjos de blocos em linha e cilindros em linha, sendo que o segundo arranjo parece estar mais próximo do fenômeno físico, já que a geométrica da fase σ em geral pode ser formada por partículas cilíndricas ou esféricas. Um estudo com outros arranjos periódicos e o coeficiente de dispersão transversal da espécie química i, D_{iyy} é importante ser feito, já que neste trabalho o espaço impõe restrições para apresentar mais resultados.

6. REFERÊNCIAS

CHU, K. H. Improved Fixed Bed Models for Metal Biosorption. *Chemical Engineering Journal*, v. 97, p. 233-239, 2004.

EIDSATH, A.; CARBONELL, R.; WHITAKER, S.; HERRMANN, L. Dispersion in pulsed systems - III: Comparison between theory and experiments for packed beds. *Chemical Engineering Science*. v. 38, 1803 - 1816. doi:10.1016/0009-2509, 1983.

FERZIGER, J. H. and PERIC, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. *Springer, Germany*, 2nd edition, 1997.

HOWES, F. A.; WHITAKER, S. The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science*, v. 40, p. 1387-1392, 1985.

PLUMB, O.A. and WHITAKER, S. Dispersion in heterogeneous porous media I: Local volume averaging and large-scale averaging, *Water Resour. Res*., v. 24, p. 913-926, 1988a.

PLUMB, O.A. and WHITAKER, S., Dispersion in heterogeneous porous media II: Predictions for stratified and 2-D spatially periodic systems. *Water Resour. Res*., v. 24, p. 927-938, 1988b.

QUINTARD, M. and WHITAKER, S. Convection, dispersion, and interfacial transport of contaminants: Homogeneous porous media, *Advances in Water Resources*, v. 17, p. 221-239, 1994.

SULAYMON, A. H.; AHMED, K. W. Competitive Adsorption of Fulfural and Phenolic Compounds onto Activated Carbon in Fixed Bed Column. *Environmental Scie. & Tech.*, v. 42, p. 392-397, 2008.

WOOD, B.D., Inertial effects in dispersion in porous media. *Water Resources Research*, v. 43, W12S16. doi:10.1029/2006WR005790, 2007.

WHITAKER, S. Theory and applications of transport in porous media: the method of volume averaging. London: Kluwer Academic, 1999.

VALDÉS-PARADA, F.J.; AGUILAR-MADERA, C.G.; ÁLVAREZ-RAMÍREZ, J. On diffusion, dispersion and reaction in porous media. *Chemical Eng. Science*, v. 66, p. 2177-2190, 2011.

LUZ, C; LUZ, A. D.; ULSON DE SOUZA, A. A.; GUELLI ULSON DE SOUZA, S. M. A. Modelagem matemática de uma coluna de adsorção em leito fixo usando o Método da Média no Volume, *COBEQ2012 - XIX Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, v. 1, p. 1-10, 2012.