



Exemplo 1.1: (modelagem) tanque agitado com válvula na saída (Figura 1.1).

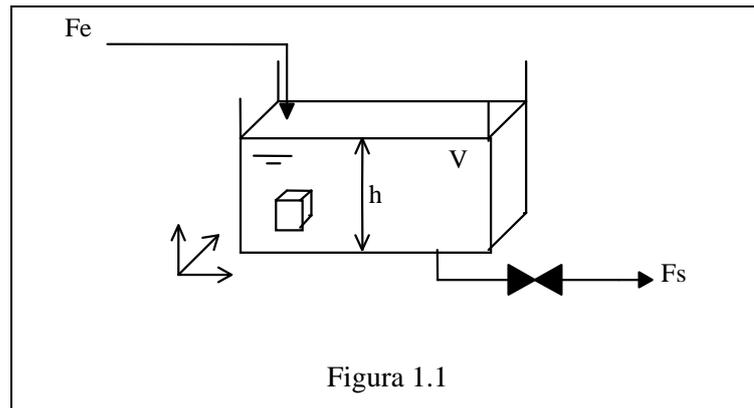


Figura 1.1

Descrição do processo: um líquido entra e sai de um tanque pela ação da gravidade.

Deseja-se analisar a variação de volume, altura e vazão do tanque (resposta do sistema) frente a variações na alimentação (perturbação no sistema).

Teoria: - conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho v)$$

- conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = \underbrace{-[\nabla \cdot \rho v v]}_{\text{advecção}} \quad \underbrace{-\nabla P}_{\text{força de pressão}} \quad \underbrace{-[\nabla \cdot \tau]}_{\text{transf. viscosa}} \quad \underbrace{+\rho g}_{\text{força gravitacional}}$$

- conservação de energia

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\hat{U} + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] = \underbrace{- \left(\nabla \cdot \rho v \left(\hat{U} + \frac{1}{2} v^2 \right) \right)}_{\text{advecção}} \quad \underbrace{-(\nabla \cdot q)}_{\text{condução}}$$

$$\underbrace{-\rho(v \cdot \nabla \hat{\phi})}_{\text{trab. forças gravit.}} \quad \underbrace{-(\nabla \cdot P v)}_{\text{trab. forças de pressão}} \quad \underbrace{-(\nabla \cdot [\tau \cdot v])}_{\text{trab. forças viscosas}}$$

onde $\nabla \hat{\phi} = -g$.

Considerações: - massa específica constante

- isotérmico
- mistura perfeita
- $F_s = K\sqrt{h}$

Equacionamento:

balanço material: $F_e - F_s = \rho \frac{dV}{dt}$

dimensão: $V = Ah$

hidrodinâmica: $F_s = K\sqrt{h}$

Consistência: - checar se o número de equações é igual ao número de variáveis a determinar (grau de liberdade zero).

variáveis: $F_e, F_s, \rho, V, A, h, K, t \Rightarrow 8$

equações: 3

constantes: $\rho, K, A \Rightarrow 3$

especificações: $t \Rightarrow 1$

forças motrizes: $F_e \Rightarrow 1$

variáveis a determinar: $V, h, F_s \Rightarrow 3$

graus de liberdade: 3 variáveis desconhecidas – 3 equações = 0

- checar a consistência das unidades de medida de todos os termos envolvidos nas equações.

F_e, F_s	(kg s ⁻¹)
ρ	(kg m ⁻³)
V	(m ³)
A	(m ²)
h	(m)
K	(kg m ^{-0,5} s ⁻¹)
t	(s)

NOTA: para facilitar a busca por novas equações ou novas especificações e/ou forças motrizes, procurar sempre relacionar – mesmo que indiretamente – cada variável desconhecida a uma equação, após eliminar da lista de variáveis todas os parâmetros (ou constantes), especificações e forças motrizes. No exemplo acima, após eliminar ρ, K, A, t e F_e da lista de

variáveis, associa-se V à equação de balanço de massa, F_s à equação hidrodinâmica e chega-se a conclusão que se deve incluir a equação de dimensão que relaciona V com h para que a variável a determinar h tenha uma equação para ser associada.

Solução desejada: dada uma condição inicial (h ou V), deseja-se analisar $h(V)$, $V(F_e)$, $F_s(h)$. Como $h = f(V)$ e $V = f(F_e) \Rightarrow h(F_e)$

$$F_s = f(h) \text{ e } h = f(F_e) \Rightarrow F_s(F_e)$$

logo pode-se analisar todas as variações em função de uma dada perturbação em F_e .

Matemática e computação:

$$F_e - F_s = \rho \frac{dV}{dt}$$

$$\begin{aligned} & \Downarrow \quad V = Ah \quad \text{e} \quad F_s = K\sqrt{h} \\ \text{E.Q.O} \quad & \left\{ \begin{array}{l} \frac{dh}{dt} = \frac{F_e - K\sqrt{h}}{\rho A} \\ h(t_0) = h_0 \end{array} \right. \Rightarrow h(t, F_e) \end{aligned}$$

$$V = Ah \quad \Rightarrow \quad V(t, F_e)$$

$$F_s = K\sqrt{h} \quad \Rightarrow \quad F_s(t, F_e)$$

Solução e validação: comparar os resultados com dados experimentais (Figura 1.2).

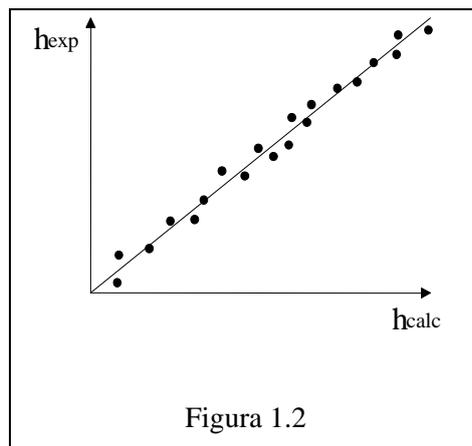


Figura 1.2

Exemplo 1.2: (escolha de um modelo matemático) reator tubular (Figura 1.3) em escoamento turbulento de um fluido Newtoniano, com ρ , μ , C_p constantes e escoamento da massa principal somente na direção axial ($A + B + \dots \rightarrow R + S + \dots$):

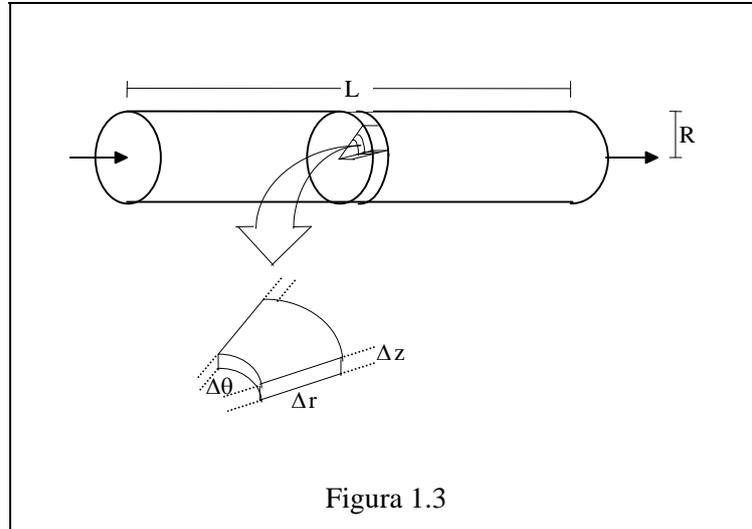


Figura 1.3

considerações: ρ , μ , C_p constantes
 simetria angular
 $v_\theta = v_r = 0$

modelo microscópico:

escoamento turbulento (Figura 1.4)

$$\begin{cases} v = \bar{v} + v' & ; \quad \bar{v}' = 0 \\ C_i = \bar{C}_i + C'_i & ; \quad \bar{C}'_i = 0 \\ T = \bar{T} + T' & ; \quad \bar{T}' = 0 \end{cases}$$

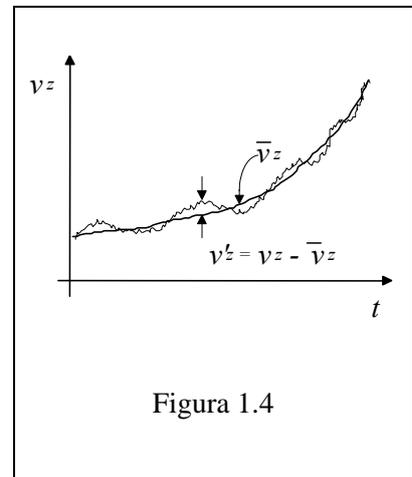


Figura 1.4

onde $\bar{w} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} w dt$ é a média temporal de w .

balanço material

$$\text{total: } \frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \mathbf{v}) \stackrel{\rho \text{ cte}}{\Rightarrow} (\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0, \quad (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}) + (\nabla \cdot \mathbf{v}') = 0$$

$$(\overline{\nabla \cdot \mathbf{v}'}) = 0, \quad (\overline{\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}}) = (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}) \Rightarrow (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}) = 0$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{v}_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{v}_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\bar{v}_z = \bar{v}_z(r, t)} \quad (1.1)$$

$$\text{componente: } \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -(\nabla \cdot \mathbf{n}_i) + r_i$$

$$\mathbf{n}_i = \rho_i \mathbf{v} - \rho \mathcal{D} \nabla \omega_i \stackrel{\rho \text{ cte}}{\Rightarrow} \mathbf{n}_i = \rho_i \mathbf{v} - \mathcal{D} \nabla \rho_i$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho_i \mathbf{v}) + (\nabla \cdot \mathcal{D} \nabla \rho_i) + r_i \quad (\div \bar{M}_i)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -(\nabla \cdot C_i \mathbf{v}) + (\nabla \cdot \mathcal{D} \nabla C_i) + \hat{R}_i$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = -(\nabla \cdot \bar{C}_i \bar{\mathbf{v}}) - (\nabla \cdot \overline{C_i \mathbf{v}'}) + (\nabla \cdot \mathcal{D}^{(l)} \nabla \bar{C}_i) + R_i$$

$$\text{com } \mathcal{D}^{(l)} = f(\bar{C}_i)$$

$$(\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = -(\bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla \bar{C}_i) - (\nabla \cdot \overline{C_i \mathbf{v}'}) + (\nabla \cdot \mathcal{D}^{(l)} \nabla \bar{C}_i) + R_i$$

$$\boxed{\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = -\bar{v}_z(r, t) \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial z} - (\nabla \cdot \overline{C_i \mathbf{v}'}) + (\nabla \cdot \mathcal{D}^{(l)} \nabla \bar{C}_i) + R_i} \quad (1.2)$$

balanço energético:

$$\frac{\partial(\rho \hat{U})}{\partial t} = \underbrace{-(\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \hat{U})}_{\text{advecção}} \underbrace{- (\nabla \cdot \mathbf{q})}_{\text{condução}} \underbrace{- P(\nabla \cdot \mathbf{v})}_{\text{compressão}} \underbrace{- (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v})}_{\text{dissipação viscosa}} + \underbrace{S_r}_{\text{reação}}$$

$$\rho \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = -\rho (\mathbf{v} \cdot \nabla \hat{U}) - \hat{U} \underbrace{\left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \mathbf{v}) \right]}_0 - (\nabla \cdot \mathbf{q}) - P(\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + S_r$$

$$\rho \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla \hat{U}) \right) = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) - P(\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + S_r$$

$$\rho \frac{D\hat{U}}{Dt} = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) - P(\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + S_r$$

$$d\hat{U} = \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial \bar{V}} \right)_T d\bar{V} + \left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial T} \right)_{\bar{V}} dT = \left[-P + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{V}} \right] d\bar{V} + \hat{C}_V dT$$

$$\rho \left[-P + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{V}} \right] \frac{D\bar{V}}{Dt} + \rho \hat{C}_V \frac{DT}{Dt} = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) - P(\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + S_r$$

$$\rho \frac{D\bar{V}}{Dt} = \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = (\nabla \cdot \mathbf{v})$$

$$\rho \hat{C}_V \frac{DT}{Dt} = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{V}} (\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + S_r$$

$$\rho \hat{C}_V \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho \hat{C}_V \underbrace{(\nabla \cdot \mathbf{v} T)}_{(\nabla \cdot \mathbf{v})=0} - (\nabla \cdot \mathbf{q}) - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{V}} (\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + S_r$$

fluido Newtoniano: $(\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) = -\mu \phi_v$, onde ϕ_v é a função dissipação.

P constante: $d\hat{H} = \hat{C}_p dT$ (fluido incompressível)

$$dU = dH - d(P\bar{V}) = \hat{C}_p dT - P d\bar{V}$$

$$dU = \left[-P + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{V}} \right] d\bar{V} + \hat{C}_V dT$$

$$\hat{C}_V dT = \hat{C}_p dT - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\bar{V}} d\bar{V}$$

$$\rho \hat{C}_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho \hat{C}_p (\nabla \cdot \mathbf{v} T) - (\nabla \cdot \mathbf{q}) - \mu \phi_v + S_r$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$

$$\rho \hat{C}_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = -\rho \hat{C}_p (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} \bar{T}) - \rho \hat{C}_p (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}' \bar{T}') - (\nabla \cdot \mathbf{k}^{(l)} \nabla \bar{T}) - \mu \phi_v^{(l)} - \mu \phi_v^{(t)} + \bar{S}_r$$

com $\mathbf{k}^{(l)} = f(\bar{T})$

$$(\nabla \cdot \bar{v}) = 0$$

↓

$$\rho \hat{C}_P \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = -\rho \hat{C}_P (\bar{v} \cdot \nabla \bar{T}) - \rho \hat{C}_P (\nabla \cdot \overline{v' T'}) - (\nabla \cdot k^{(t)} \nabla \bar{T}) - \mu (\phi_v^{(t)} + \phi_v^{(t)}) + \bar{S}_r$$

$$\boxed{\rho \hat{C}_P \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = -\rho \hat{C}_P \bar{v}_z(r, t) \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} - \rho \hat{C}_P (\nabla \cdot \overline{v' T'}) - (\nabla \cdot k^{(t)} \nabla \bar{T}) - \mu (\phi_v^{(t)} + \phi_v^{(t)}) + \bar{S}_r} \quad (1.3)$$

balanço de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = -[\nabla \cdot \rho v v] - \nabla P - [\nabla \cdot \tau] + \rho g$$

$$\rho \text{ constante: } \rho \frac{\partial v}{\partial t} = -\rho[\nabla \cdot v v] - \nabla P - [\nabla \cdot \tau] + \rho g$$

$$\rho \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\rho[\nabla \cdot \bar{v} \bar{v}] - \rho[\nabla \cdot \overline{v' v'}] - \nabla \bar{P} - [\nabla \cdot \tau^{(t)}] + \rho g$$

$$(\nabla \cdot \bar{v}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\rho \frac{D\bar{v}}{Dt} = -\rho[\nabla \cdot \overline{v' v'}] - \nabla \bar{P} - [\nabla \cdot \tau^{(t)}] + \rho g} \quad (1.4)$$

$$\text{modelos de turbulência: } \overline{v' c_i'} = J_i^{(t)} = -\mathcal{D}^{(t)} \nabla \bar{C}_i$$

$$\rho \hat{C}_P \overline{v' T'} = q^{(t)} = -k^{(t)} \nabla \bar{T}$$

$$\rho \overline{v' v'} = \tau^{(t)}$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = -\bar{v}_z(r, t) \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial z} - (\nabla \cdot \mathcal{D}^{(t)} \nabla \bar{C}_i) + (\nabla \cdot \mathcal{D}^{(t)} \nabla \bar{C}_i) + R_i$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = -\bar{v}_z(r, t) \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial z} - (\nabla \cdot (\mathcal{D}^{(t)} + \mathcal{D}^{(t)}) \nabla \bar{C}_i) + R_i$$

modelo de gradientes múltiplos:

$$\bar{\mathcal{D}} = \mathcal{D}^{(t)} + \mathcal{D}^{(t)} \rightarrow \text{coeficiente de difusão efetivo}$$

$$\boxed{\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = -\bar{v}_z(r, t) \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial z} - (\nabla \cdot \bar{\mathcal{D}} \nabla \bar{C}_i) + R_i} \quad (1.5)$$

da mesma forma para o balanço energético, desprezando a dissipação viscosa:

$$\boxed{\rho \hat{C}_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = -\rho \hat{C}_p \bar{v}_z(r,t) \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} - (\nabla \cdot \bar{k} \nabla \bar{T}) + \bar{S}_r} \quad (1.6)$$

onde $\bar{k} = k^{(t)} + k^{(l)}$

e para o balanço de quantidade de movimento:

$$\boxed{\rho \frac{D\bar{v}}{Dt} = -\nabla \bar{P} - [\nabla \cdot \bar{\tau}] + \rho g} \quad (1.7)$$

onde $\bar{\tau} = \tau^{(t)} + \tau^{(l)}$ e $\bar{\mu} = \mu^{(t)} + \mu^{(l)}$

$$(\nabla \cdot \bar{v}) = 0 \quad \Rightarrow \quad [\nabla \cdot \bar{\tau}] = -\bar{\mu} \nabla^2 \bar{v}$$

$$\boxed{\rho \frac{D\bar{v}}{Dt} = -\nabla \bar{P} + \bar{\mu} \nabla^2 \bar{v} + \rho g} \quad (\text{Navier-Stokes}) \quad (1.8)$$

Removendo a notação da média temporal e aplicando as condições de contorno, com as considerações adicionais:

$$D_z = D_z(r,t) \quad \text{e} \quad D_R = D_R(r,t)$$

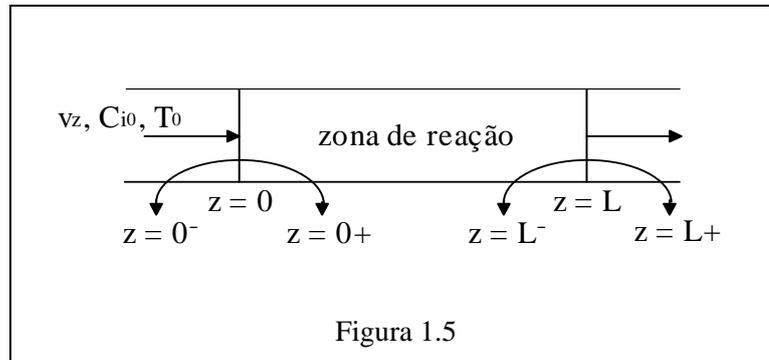
$v_r = 0$ (inclui os efeitos de $v_r \neq 0$)

$$k_z = k_z(r,t) \quad \text{e} \quad k_R = k_R(r,t)$$

balanço material:

$$\boxed{\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_z(r,t) \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_R(r,t) \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) - v_z(r,t) \frac{\partial C_i}{\partial z} + R_i} \quad (1.9)$$

condições de contorno (Figura 1.5):



$$1) C_i(0, r, t) = C_{i0}(t)$$

$$\text{ou } n_i|_{z=0^-} = n_i|_{z=0^+} \Rightarrow v_z(r, t)C_{i0}(t) - 0 = v_z(r, t)C_i(0, r, t) - D_z(r, t)\frac{\partial C_i(0, r, t)}{\partial z}$$

(sem difusão em $z < 0$)

difusão: geração de calor $\Rightarrow \nabla T$ e consumo de reagente $\Rightarrow \nabla C$

$$2) C_i|_{z=L^-} = C_i|_{z=L^+} \Rightarrow v_z(r, t)C_i(L^-, r, t) - D_z(r, t)\frac{\partial C_i}{\partial z}\Big|_{z=L^-} = v_z(r, t)C_i(L^+, r, t)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial z}(L, r, t) = 0 \text{ (sem reação)}$$

$$3) \frac{\partial C_i}{\partial r}(z, 0, t) = 0 \text{ (simetria)}$$

$$4) \frac{\partial C_i}{\partial r}(z, R, t) = 0 \text{ (parede impermeável)}$$

$$\text{condição inicial: } C_i(z, r, 0) = C_i(z, r)$$

balanço energético:

$$\rho \hat{C}_p \frac{\partial T}{\partial t} = k_z(r, t) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_R(r, t) \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \rho \hat{C}_p v_z(r, t) \frac{\partial T}{\partial z} + \Delta H_r R_A \quad (1.10)$$

$$\Delta H_r = \sum (\nu \bar{H})_{\text{prod}} - \sum (\nu \bar{H})_{\text{reag}} \quad (\text{por mol de A})$$

condições de contorno:

$$1) T(0, r, t) = T_0(t)$$

$$\text{ou } q|_{z=0^-} = q|_{z=0^+} \Rightarrow v_z(r, t)T_0(t) - 0 = v_z(r, t)T(0, r, t) - \frac{k_z(r, t)}{\rho \hat{C}_p} \frac{\partial T(0, r, t)}{\partial z}$$

(sem difusão em $z < 0$)

$$2) T|_{z=L^-} = T|_{z=L^+} \Rightarrow v_z(r, t)T(L^-, r, t) - \frac{k_z(r, t)}{\rho \hat{C}_p} \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=L^-} = v_z(r, t)T(L^+, r, t)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z}(L, r, t) = 0 \text{ (sem reação)}$$

$$3) \frac{\partial T}{\partial r}(z, 0, t) = 0 \text{ (simetria)}$$

$$4) q|_{r=R} = U[T_w - T(z, R, t)] = k_R(R, t) \frac{\partial T}{\partial r}(z, R, t) \text{ (transf. de calor pela parede)}$$

condição inicial: $T(z, r, 0) = T(z, r)$

balanço de quantidade de movimento:

$$\boxed{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right)} \quad (1.11)$$

condições de contorno:

$$1) \frac{\partial v_z}{\partial r}(0, t) = 0 \text{ (simetria)}$$

$$2) v_z(R, t) = 0 \text{ (parede imóvel)}$$

condição inicial: $v_z(r, 0) = v_z(r)$

Exercício 1.1: escrever os balanços material, energético e de quantidade de movimento da forma de modelo de gradientes múltiplos para a seguinte seqüência de considerações:

a) estado estacionário

$$b) \frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\Delta P}{L} = cte \Rightarrow v_z(r) = v_z(0) \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]; \quad v_z(0) = \frac{-\Delta P}{L} \frac{R^2}{4\mu}$$

c) coeficientes de difusão efetivos constantes

d) velocidade constante

Usando o modelo resultante do exercício 1:

$$v_z \frac{\partial C_i}{\partial z} = D_L \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) + R_i$$

$$v_z C_{io} = v_z C_i(0, r) - D_L \frac{\partial C_i(0, r)}{\partial z}$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial z}(L, r) = 0$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial r}(z, 0) = 0$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial r}(z, R) = 0$$

$$\rho \hat{C}_p v_z \frac{\partial T}{\partial z} = k_L \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{k_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A$$

$$v_z T_o = v_z T(0, r) - \frac{k_L}{\rho \hat{C}_p} \frac{\partial T(0, r)}{\partial z}$$

$$\frac{\partial T}{\partial z}(L, r) = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(z, 0) = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(z, R) = \frac{U}{k_R} [T_w - T(z, R)]$$

e ignorando os gradientes radiais, tem-se:

$$v_z \frac{dC_i}{dz} = D_L \frac{d^2 C_i}{dz^2} + R_i$$

$$v_z C_{io} = v_z C_i(0) - D_L \frac{dC_i(0)}{dz}$$

$$\frac{dC_i}{dz}(L) = 0$$

$$\rho \hat{C}_p v_z \frac{dT}{dz} = k_L \frac{d^2 T}{dz^2} + \Delta H_r R_A + U \frac{2}{R} (T_w - T)$$

$$v_z T_o = v_z T(0) - \frac{k_L}{\rho \hat{C}_p} \frac{dT(0)}{dz}$$

$$\frac{dT}{dz}(L) = 0$$

que é resultado da integração das equações dos balanços na direção radial, obtendo-se valores médios das variáveis nesta direção:

$$\bar{C}_i(z) = \frac{\int_0^R C_i(r, z) r dr}{\int_0^R r dr} \quad \text{e} \quad \bar{T}(z) = \frac{\int_0^R T(r, z) r dr}{\int_0^R r dr}$$

$$\bar{T}(z) = \frac{2}{R^2} \int_0^R T(z, r) r dr$$

$$\rho \hat{C}_P v_z \frac{\partial}{\partial z} \int_0^R T(z, r) r dr = k_L \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int_0^R T(z, r) r dr + k_R \int_0^R \partial \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A \int_0^R r dr$$

$$\rho \hat{C}_P v_z \frac{d\bar{T}}{dz} = k_L \frac{d^2 \bar{T}}{dz^2} + \frac{2}{R^2} k_R \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right)_0 + \Delta H_r R_A$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(z, 0) = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}(z, R) = \frac{U}{k_R} [T_w - T(z, R)]$$

NOTA: por simplicidade, neste modelo foi considerado $T(z, R) \approx \bar{T}(z)$.

modelo de gradientes máximos: desprezando todas dispersões.

$$v_z \frac{dC_i}{dz} = R_i \quad , \quad C_i(0) = C_{i0}$$

$$\rho \hat{C}_P v_z \frac{dT}{dz} = \Delta H_r R_A + U \frac{2}{R} (T_w - T) \quad , \quad T(0) = T_0$$

modelo macroscópico: supondo conversão conhecida.

$$C_{iL} v_z S - C_{i0} v_z S = \bar{R}_i V \quad (\text{área da seção transversal: } S, \text{ volume do reator: } V)$$

$$\rho \hat{C}_p v_z T_L S - \rho \hat{C}_p v_z T_0 S = U A_t \overline{(T_w - T)} + \Delta H_r \bar{R}_A V$$

(área de troca térmica: A_t)

Alguns números adimensionais:

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k_L} = \frac{\nu}{\alpha} \equiv \frac{\text{mec. molec. de transf. q. m.}}{\text{mec. molec. de transf. de calor}} \quad (\text{Prandtl})$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_L} = \frac{\nu}{D_L} \equiv \frac{\text{mec. molec. de transf. q. m.}}{\text{mec. molec. de transf. de massa}} \quad (\text{Schmidt})$$

$$Re = \frac{Lv\rho}{\mu} = \frac{Lv}{\gamma} \equiv \frac{\text{força inercial}}{\text{força viscosa}} \quad (\text{Reynolds})$$

$$Pe = Re Pr = \frac{\mu C_p \nu (T_0 - T_L)}{k_L \frac{(T_0 - T_L)}{L}} \equiv \frac{\text{transf. calor advecção}}{\text{transf. calor difusão}} \quad (\text{Peclet energia})$$

$$Pe_m = Re Sc = \frac{\nu (C_0 - C_L)}{D_L \frac{(C_0 - C_L)}{L}} \equiv \frac{\text{transf. massa advecção}}{\text{transf. massa difusão}} \quad (\text{Peclet massa})$$

$$Sh = \frac{k_c L}{D_L} \equiv \frac{T.M. convecção}{T.M. difusão} \quad (\text{Sherwood})$$