EXISTÊNCIA E UNICIDADE DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE DETERMINAÇÃO DO NÚCLEO MORTO EM CATALISADORES POROSOS

***Emiliana Bastos de Amorim* [1], *Wagner Luiz Pelegrini* [2], *Luiz Carlos de Queiroz* [3]**

[1]Mestranda em Engenharia Química, E-mail: emili.ana@pop.com.br
[2]Aluno Especial do Programa de Mestrado em Engenharia Química, E-mail: wagner@maxioncr.com.br
[3]Professor Orientador, DEQUI – Departamento de Engenharia Química, FAENQUIL - Faculdade de Engenharia Química de Lorena
Rodovia Itajubá-Lorena, km 74,5 – Caixa Postal 116 – CEP 12600-970 – Lorena – SP – Brasil
E-mail: queiroz@dequi.faenquil.br

Palavras-chave: Núcleo morto, principio do máximo, existência e unicidade de solução
Área do Conhecimento: Engenharias

Resumo - Este trabalho trata de uma abordagem sobre o conceito de núcleo morto em uma partícula catalítica porosa, ou seja, a região onde a concentração de reagente é nula, suas principais características, bem como discute quando ocorre e define os principais fatores que afetam a existência do núcleo morto. É feita uma análise da existência e unicidade da solução do problema de determinação do núcleo morto, pois ao se resolver o problema é interessante saber se ele possui uma solução e se esta é única a partir de definições e teoremas.

Nomenclatura

ϕ – módulo de Thiele
α – fator geométrico
a – dimensão característica da partícula
Ω_0 – núcleo morto
Ω – fronteira do núcleo morto
p – maior raio da maior esfera inscrita em Ω
Ψ – super solução
χ – sub solução
u – concentração adimensional
dist – distância entre
f(u) – taxa de reação
Δu – laplaciano de u
Ω – conjunto aberto (domínio)
$\overline{\Omega}$ – fecho de Ω ($\overline{\Omega} = \Omega \cap \Omega$)
EDPs – equações diferenciais parciais

Introdução

Quando se resolve algum problema proveniente de situações reais, é de se esperar que este possua uma solução e que esta seja única.

No problema de determinação do núcleo morto em catalisadores porosos para uma reação irreversível e em regime estacionário e isotérmico, espera-se que no interior da partícula catalítica se estabeleça uma distribuição de concentração do reagente, determinada de forma única pelo módulo de Thiele (ϕ) e pela taxa de reação (f(u)) que descrevem as características físicas e químicas do processo [1].

Núcleo Morto

Em alguns casos da catálise heterogênea, devido à relação entre a taxa de reação, a taxa de transferência do reagente e o tamanho da partícula catalítica, o sistema pode entrar em equilíbrio sem que todo o catalisador seja utilizado.

O catalisador é utilizado para acelerar a reação, ou seja, ele produz o mesmo produto, mas em um período de tempo menor. Na Figura 1 é mostrado o resultado do uso de um catalisador em uma reação.

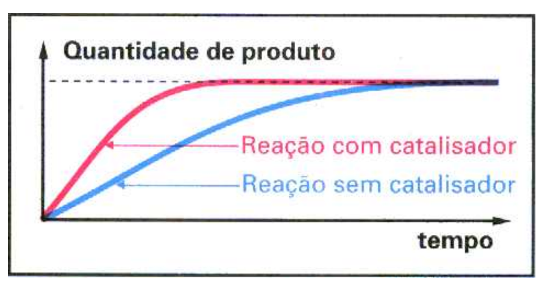

Figura 1: Ação do catalisador em uma reação.

Quando não se utiliza o catalisador todo, é definida uma região na partícula onde a concentração de reagente é nula. E essa região é denominada de núcleo morto, [1], conforme ilustra a Figura 2:

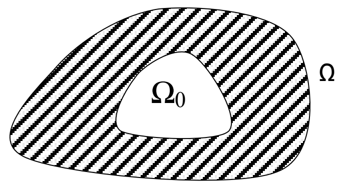

Figura 2: O núcleo morto Ω_0.

O núcleo morto pode ocorrer quando a taxa de reação permanecer alta, enquanto a concentração do reagente diminuir. Desse modo, pode ser que através da difusão não seja possível trazer reagente do exterior da partícula catalítica de modo suficientemente rápido para que atinja a parte central do catalisador, [2].

No problema de uma reação irreversível, em regime estacionário e isotérmico, espera-se que no interior da partícula catalítica se estabeleça uma distribuição da concentração do reagente.

Um modelo matemático do fenômeno de reação-difusão para análise do núcleo morto em catalisadores porosos para uma reação química, irreversível e em regime permanente é dado pelas equações (1), (2), (3) e (4). Para uma partícula isotérmica de qualquer geometria, e uma reação química de ordem *n* tem-se a equação diferencial ordinária e fluxos unidimensionais:

$$X^{1-\alpha}\frac{d}{dX}\left(X^{1-\alpha}\frac{du}{dX}\right)=\Phi^2 u^n \qquad (1)$$

Assumindo a existência do núcleo morto, o problema pode ser apresentado na forma da Equação (1), com as seguintes condições de contorno:

X=1 ⇒ u = 1 (2)

X = a ⇒ du / dX = 0 (3)

e a condição de existência do núcleo morto:

X = a ⇒ u = 0 (4)

onde a representa a posição do núcleo morto, com $0 \leq a \leq 1$.

Em alguns casos, é aconselhável, evitar o aparecimento do núcleo morto. É interessante, então, ter resultados que garantam quando o núcleo morto não ocorre.

Denotando Ω como um conjunto aberto de ∇^n, onde estarão definidas as EDPs que descreverão os fenômenos estudados. A fronteira desse conjunto, ou seja, pontos que estão na sua “borda”, será denotado por Ω. O fecho de Ω é um conjunto fechado que representa a união de Ω com a sua fronteira, Ω, e é denotado por: $\overline{\Omega}$ = Ω ∩ Ω

Tem-se, então, o seguinte teorema:

Teorema 1: Se Ω é um domínio convexo e x_m um ponto onde ocorre o mínimo de u, então:

$$\mathbf{dist}[\mathbf{x_m};\ \partial\Omega] \geq \frac{\mathbf{I}\ (0^+)}{\sqrt{2}\ \phi} \qquad (5)$$

E um núcleo morto não pode ocorrer quando:

$$\phi < \frac{\mathbf{I}\ (0^+)}{\sqrt{2}\ \mathbf{p}} \qquad (6)$$

onde p é o maior raio da maior esfera inscrita em Ω e pelo Princípio do Mínimo, o mínimo de u está em Ω, [1].

Para se entender o Princípio do Mínimo é necessário compreender a definição do Princípio do Máximo.

Definição 1: Dada uma função u(x) contínua num intervalo fechado [a, b] tendo o seu máximo em um ponto deste intervalo. Se u(x) tem a sua derivada segunda contínua e se u tem um máximo relativo em algum ponto c entre a e b, então temos do cálculo elementar:

u’ (x) = 0 e u’’(x)   0 (7)

Supondo que em um intervalo aberto (a, b) u é conhecida para satisfazer a inequação diferencial na forma:

L[x] □ u’’ + g(x) u’ >0 (8)

Onde g(x) é qualquer função limitada. Está claro que a relação (7) não é válida para qualquer ponto c em (a, b). Assim quando se tem u o máximo de u no intervalo não pode ser qualquer ponto, exceto os pontos extremos a e b, [3].

Para se obter o Princípio do Mínimo é preciso aplicar o Princípio do Máximo para a função (-u).

O Princípio do Máximo é utilizado para provar a unicidade da solução de algumas Equações Diferenciais Parciais.

Existência e Unicidade de Solução

A distribuição de concentração no interior da partícula será dada pelo seguinte modelo matemático e chamado de problema (P):

$$(P) \quad \begin{cases} \Delta u = \Phi^2 f(u) \\ u = 1 \\ u \quad 0 \end{cases} \qquad (9)$$

Para se provar a existência e unicidade de soluções do problema (P) é preciso basear-se em algumas definições. São elas:

Definição 2: Ψé uma super solução do problema (P), se:

$$\begin{cases} \Delta \ \Psi \quad \Phi^2 \ f(\Psi) \quad \text{em } \Omega \\ \quad \Psi \ 1 \quad \text{em } \Omega \end{cases} \qquad (10)$$

Definição 3: χé uma sub solução do problema (P), se:

$$\begin{cases} \Delta \ \chi \quad \Phi^2 f(\chi) \quad \text{em } \Omega \\ \chi \ \ 1 \quad \text{em } \Omega \end{cases} \qquad (11)$$

Com base nestas definições podemos escrever os seguintes teoremas:

Teorema 2: Se existir uma super solução Ψ e uma sub solução χ do problema (P) com $\chi \quad \Psi$ em Ω, então (P) tem uma solução u(x) que satisfaz:

$$\chi(x) \quad u(x) \quad \Psi(x) \qquad (12)$$

Teorema 3: O problema (P) tem uma única solução u se satisfaz:

$$0 \ \ u(x) \ \ 1 \qquad (13)$$

Estes teoremas garantem que se pode procurar uma solução de (P) através de qualquer processo válido sem correr o risco de estar procurando a solução no vazio ou uma gama muito grande de soluções possíveis, [1].

Resultados e Discussão

Dado o problema P_1 com:

$$\begin{cases} \Delta \ u \quad \Phi_1^2 \ f(u) \ \text{ em } \Omega \text{ e} \\ \Psi=1 \quad \text{em } \Omega. \end{cases} \qquad (14)$$

A função $\Psi = 1$ é uma super solução, pois:

$0 = \Delta \ \Psi \ \ \Phi_1^2 \ f_1(1)$ em Ω e
Ψ=1 em Ω.

Considerando u_2 uma outra solução do problema P_1, temos que:

$\Delta u = \Phi_2^2 f_2(u)$ em Ω
u = 1 em Ω.

Assim:

$\Delta u_2 = \Phi_2^2 f_2(u_2) \quad \Phi_1^2 f_1(u_1)$ em Ω.

Sendo assim u_2 é uma sub solução do problema P_1.

Segundo o Teorema 3, u_2 (x) 1 em Ω então u_2 (x) Ψ (x) em Ω.

Pelo Teorema 2 tem-se que:

$u_1(x)$ de P_1 é tal que $u_2(x) \ \ u_1(x)$ em Ω, [1].

Conclusões

O núcleo morto ocorre quando o catalisador não é utilizado por completo, então se forma uma região onde a concentração de reagentes é nula.

Pelo módulo de Thiele é possível determinar a existência de núcleo morto, num meio isotérmico.

Através da utilização do Princípio do Máximo e de teoremas, é possível provar a existência e unicidade de solução de um problema de determinação do núcleo morto.

Referências

[1] PENEREIRO, J. B. *Reações catalíticas heterogêneas – existência do núcleo morto.* São Carlos. 1994. 120p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos.

[2] GRANATO, M. A., QUEIROZ, L. C. *O Núcleo Morto para uma reação química de ordem zero em uma partícula catalítica na forma de uma lâmina infinita.* Jornada 2002 - FEG - Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Guaratinguetá, SP, 2002.

[3] PROTTER, M. H.; WEINBERGER, H. F. Maximum principles in differential equations. Englewood Cliffs, N. Y.: Prentice-Hall, 1967. 261p.