A FUNÇÃO DE GREEN APLICADA AO PROBLEMA DE DETERMINAÇÃO DO NÚCLEO MORTO EM CATALISADORES POROSOS

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

[1]Faenquil/DEQUI, emili.ana@pop.com.br
[2]Faenquil/DEQUI, wagnerluizpelegrini@yahoo.com.br
[3]Faenquil/DEQUI, queiroz@dequi.faenquil.br

Resumo- Este trabalho aborda a aplicação da função de Green ao problema de determinação do núcleo morto em uma partícula catalítica porosa. O núcleo morto é uma região da partícula catalítica onde a concentração de reagente é nula. A função de Green é uma ferramenta fundamental para se analisar a existência e unicidade da solução do problema de determinação do núcleo morto. Partindo de uma equação diferencial linear de segunda ordem e suas condições de contorno é possível por meio do método de variação de parâmetros determinar a Função de Green, que será utilizada para provar a existência da solução do problema de determinação do núcleo morto.

Palavras-chave: Função de Green, núcleo morto, catalisadores porosos, princípio do máximo.
Área do Conhecimento: III - Engenharias

Introdução

Núcleo Morto

O catalisador é uma substância química utilizada para acelerar a reação, ou seja, para produzir o mesmo produto, mas em um período de tempo menor.

Hoje, os benefícios das reações catalíticas são bem representados pelos dados de que perto de 85% de todos os produtos químicos são feitos com a utilização de catalisadores que possibilitam a produção em grande escala de numerosos produtos para uso diário. Estes incluem, por exemplo, gasolina e outras substâncias que são fontes de energia, fertilizadores, plásticos, detergentes, remédios e certos alimentos.

Se o catalisador pode ser usado em forma sólida, há vantagens adicionais para o processo químico, porque vários estágios de separação são eliminados, a corrosão do equipamento é minimizada e o prospecto de poluição do ambiente é menor. Também o catalisador sólido tem mais estabilidade termal que facilita temperaturas altas e permite mais freqüente regeneração, [1].

Quando não se utiliza toda a partícula catalisadora porosa, é definida uma região na partícula onde a concentração de reagente é nula. E essa região é denominada de núcleo morto, [2].

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, [3].

George Green

George Green (1793-1841) passou a maior parte da sua vida a trabalhar no moinho de seu pai em Notingham, e que só freqüentou dois anos do ensino elementar. Com 30 anos, Green tornou-se membro da Subscription Library, Notingham, instituição fundada em 1816 e que tinha como objetivo ser um ponto de reunião de não-acadêmicos para discutir os avanços da ciência.

Aos 35 anos publicou a primeira e mais importante obra sobre a aplicação da análise matemática à teoria da eletricidade e ao magnetismo. Esta obra, de tiragem bastante reduzida, foi financiada pelo autor e por alguns membros da Subscription Library. Foi a primeira pessoa a usar o termo potencial na teoria do campo e introduziu vários teoremas de análise vetorial que permitiram calcular o potencial eletrostático. Com 40 anos ingressou na Universidade de Cambridge como estudante de licenciatura. Seis anos depois, saiu de Cambridge e voltou a Notingham para tomar conta dos seus filhos e trabalhar no seu moinho.

Posteriormente William Thomson (Lord Kelvin), descobriu o trabalho de Green e conseguiu que fosse publicado num jornal importante (1850 e 1854). Nessa altura, outros cientistas, entre eles Gauss, e de forma independente, tinham chegado a alguns dos resultados obtidos por Green. O trabalho de Green teve grande influência em Thomson, Stokes e Maxwell, [4].

Materiais e Métodos

Seja a seguinte equação diferencial linear de 2° ordem e suas condições de contorno:

$$-\ y'' = f(x)$$

$$y(0) = 0 \text{ e } y(1) = 0.$$

A solução da equação diferencial acima é dada pela Equação (1):

$$y = y_h + y_p \qquad (1)$$

A solução da equação homogênea é dada pela Equação (2):

$$\begin{aligned}
&y'' = 0\\
&\frac{d^2y}{dx^2} = 0\\
&\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}\right) = 0\\
&\frac{dy}{dx} = c_1\\
&\int dy = c_1\int dx\\
&y_h = c_1x + c_2
\end{aligned} \qquad (2)$$

Para encontrar a solução particular de (1), é utilizado o método de variação de parâmetros, onde y_p é dado pela seguinte fórmula:

$$y_p = -y_1\int \frac{r\,y_2}{w}\,dx + \int \frac{r\,y_1}{w}\,dx$$

Seja: $y_1(s) = 1$ e $y_2(s) = s$, onde s é uma variável de integração muda.
Então temos que:

$$w = y_1(s).y'_2(s) - y'_1(s).y_2(s) = 1$$

Assim:

$$y_p = \int_0^x \frac{[y_1(s)x - y_2(s)].-f(s)}{1}\,ds$$

$$y_p - \int_0^x (x-s)\,f(s)ds$$

Então, a solução particular de (1) é dado por (3):

$$y_p = -\int_0^x (x-s)\,f(s)\,ds \qquad (3)$$

Substituindo (2) e (3) em (1), encontramos (4):

$$y = c_1x + c_2 - \int_0^x (x-s)\,f(s)\,ds \qquad (4)$$

Substituindo as condições de contorno em (4) determinamos as constantes c_1 e c_2. Assim a equação (4) se torna:

$$\begin{aligned}
y &= x\int_0^1 (1-s)\,f(s)\,ds - \int_0^x (x-s)\,f(s)\,ds\\
y &= x\left[\int_0^x (1-s)\,f(s)\,ds + \int_x^1 (1-s)\,f(s)\,ds\right] - \int_0^x (x-s)\,f(s)\,ds\\
y &= \int_0^x x(1-s)\,f(s)\,ds + \int_x^1 x(1-s)\,f(s)\,ds - \int_0^x (x-s)\,f(s)\,ds\\
y &= \int_0^x (x-xs)\,f(s)\,ds - \int_0^x (x-s)\,f(s)\,ds + \int_x^1 (x-xs)\,f(s)\,ds
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y &= \int_0^x (x-x-xs+s)\,f(s)\,ds + \int_x^1 (x-xs)\,f(s)\,ds\\
y &= \int_0^x (s-xs)\,f(s)\,ds + \int_x^1 (x-xs)\,f(s)\,ds\\
y &= \int_0^1 [s(1-x) + x(1-s)]\,f(s)\,ds
\end{aligned}$$

Isto é:

$$y = \int_0^1 G(x,s)\,f(s)\,ds$$

Onde:

$$G(x,s) = \begin{cases} s(1-x), & 0 \le s \le x\\ x(1-s), & x \le s \le 1 \end{cases}$$

É chamada função de Green, [5].

Aplicação da Função de Green no Modelo Matemático do Núcleo Morto

Definição do Princípio do Máximo: Se $\nabla u \ge 0 \text{ em } \Omega$ e u sendo contínua em $\overline{\Omega}$, então o valor máximo de u ocorre em $\partial\Omega$.

Para funções u contínuas em $\overline{\Omega}$, satisfazendo a desigualdade $\nabla u \le 0 \text{ em } \Omega$, é válido o Princípio do Mínimo, ou seja, o valor mínimo de u ocorre em $\partial\Omega$, [2] e [6].

Dado o seguinte modelo matemático do núcleo morto denominado de problema P.

$$P\begin{cases} \nabla u = \phi^2 f(u) & \text{em } \Omega\\ u = 1 & \text{em } \partial\Omega\\ u \ge 0 & \text{em } \overline{\Omega} \end{cases} \qquad (5)$$

Como o caso estudado é para reações isotérmicas de ordem zero, então f(u) = k (constante positiva). Então o problema P pode ser escrito da seguinte maneira, [2].

$$P\begin{cases}\nabla u=\phi^2 k & \text{em } \Omega\\ u=1 & \text{em } \partial\Omega\\ u\geq 0 & \text{em } \overline{\Omega}\end{cases} \tag{6}$$

Usaremos a definição do princípio do Máximo para provar a seguinte hipótese: desde que ϕ^2 seja suficientemente grande sempre será possível a existência do núcleo morto.

Prova por absurdo:

Supõe-se que o problema P nunca tenha núcleo morto.

Logo z = 1-u, satisfaz o problema P e tem-se:

$$P'\begin{cases}-\nabla z=\phi^2 k & \text{em } \Omega\\ z=0 & \text{em } \partial\Omega\\ z\geq 0 & \text{em } \overline{\Omega}\end{cases} \tag{7}$$

Como ϕ^2 k, sempre será positivo, temos que: $-\nabla z \leq 0$

Logo:

$$\nabla z \geq 0 .$$

Então pelo Princípio do Máximo temos que o mín z ocorre em $\partial\Omega$.

Assim mín w = 0.

Logo w > 0 em Ω.

Solucionando a seguinte equação diferencial:

$$-\nabla z = \phi^2 k .$$

Temos:

$$-\frac{d^2z}{dx^2}=\phi^2 k$$

$$\Rightarrow \; z=\phi^2 k\int_0^1 G(x,\xi)d\xi$$

$$\Rightarrow z=\phi^2 kM \tag{8}$$

Onde:

$$M=\int_0^1 G(x,\xi)d\xi \Rightarrow \text{Função de Green}$$

Se ϕ^2 k for suficientemente grande, pode ocorrer máx z > 1 em Ω.

Como:

u = 1 - z e z >1.

Temos que para algum $x\in\Omega$, podemos ter u(x) < 0.

Assim, não é válida a condição:

$$u(x)\geq 0 \text{ em } \Omega .$$

Podemos então concluir que para ϕ^2 k suficientemente grande, a única possibilidade para uma solução de P' seria aquela em que ocorre o núcleo morto.

Conclusões

O núcleo morto ocorre quando a partícula catalisadora porosa não é utilizada por completo, então se forma uma região onde a concentração de reagentes é nula.

A utilização da função de Green teve grande utilidade quando provamos a existência e a unicidade do problema do núcleo morto.

A função de Green pode ser utilizada também em diversas outras áreas do saber.

Agradecimentos

Projeto Bolsa Mestrado da Secretaria Estadual do Estado de São Paulo, Governo do Estado de São Paulo.

Referências Bibliográficas

[1] CBPF - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Catalisadores, Catálise Heterogênea, Aplicações a Tecnologias Químicas e de Petróleo, Rio de Janeiro, 2005, [citado 13 de março de 2005]. Disponível na Word Wide Web: <UTL: http://www.cbpf.br/~taft/LinhasPesq.html>

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

[3] 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.

[4] VILLATE, George Green, 1999, Editora MvGraw-Hill de Portugal, [citado 20 de maio de 2005]. Disponível na Word Wide Web: <UTL: http://paginas.fe.up.pt/~villate/electromagnetismo/pioneiros/green.html>.

[5] BUTKOV, Eugene - Fisica matematica. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978. 725p.

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