

TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM UM REATOR FOTOCATALÍTICO DE PELÍCULA EM REGIME PERMANENTE COM DIFUSÃO AXIAL: SOLUÇÃO VIA TRANSFORMADA INTEGRAL GENERALIZADA (GITT)

Fernando Fernandes Vieira (*)

Carlos Antonio Pereira de Lima (*)

Geralda Gilvania Cavalcante de Lima (*)

Carlos Antonio Cabral dos Santos ()**

Romberg Rodrigues Gondim ()**

(*) Universidade Estadual da Paraíba, Departamento de Química, CCT
Rua Acre, 545 – Liberdade Campina Grande – PB - CEP 58.105-523 – Tel: (83) 341-3443
fernando@uepb.rpp.br

(**) Universidade Federal da Paraíba, Laboratório de Energia Solar, CT/CPGEM - DTM
Caixa Postal – 5115, CEP 58.051-970, João Pessoa - PB

Resumo. A descontaminação ambiental usando fotocatálise heterogênea tem recebido atenção especial por parte da comunidade científica, pois ela é considerada uma tecnologia "limpa", podendo ser aplicada principalmente na eliminação de poluentes orgânicos recalcitrantes e metais pesados. A fotocatálise heterogênea é um processo oxidativo avançado, onde um semicondutor absorve fôtons, cuja energia é superior ao seu “bandgap” e atua como um catalisador na produção dos radicais hidroxilas, os quais podem oxidar e mineralizar completamente compostos orgânicos. A proposta deste trabalho é estabelecer os perfis de concentração no interior de um reator fotocatalítico do tipo película inclinada. As etapas desenvolvidas na realização deste trabalho foram as seguintes: Desenvolvimento dos modelos matemáticos, a partir dos balanços materiais, que permitam a simular a influencia de certos parâmetros operacionais sobre a eficiência da degradação dos poluentes orgânicos dentro do reator fotocatalítico. Uma vez estabelecidos os modelos foi utilizada a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) para obter a solução dos modelos de concentração bidirecional estacionária com difusão axial, usando um modelo cinético de primeira ordem para a degradação dos poluentes.

Palavras chave: fotocatálise, reator, contaminação, transformada integral

1. INTRODUÇÃO

As crescentes exigências da sociedade moderna em termos de qualidade de vida e meio ambiente tem levado a controles mais rigorosos no descarte de efluentes como também novas normas e legislações cada vez mais rígidas tem sido adotadas afim de minimizar o impacto ambiental. Portanto, surge a necessidade de desenvolvimento de novos tipos de tratamento que realmente garantam bons resultados. As técnicas já existentes para tratamento de efluentes minimizam o problema em grande parte, no entanto quando se trata de efluentes de difícil degradação, com substâncias tóxicas e recalcitrantes, em baixas ou altas concentrações é necessário a utilização de técnicas mais eficientes.

Uma alternativa tecnológica em crescente desenvolvimento para destruição de produtos orgânicos de difícil degradação e em baixas concentrações são os Processos Oxidativos Avançados

(POA). Estes processos são considerados como sendo tecnologias limpas e de refinamentos, visto que não produzem subprodutos (lodo), como também não há transferência de fase dos poluentes (como adsorção em carvão ativado) e os produtos finais da reação são CO₂ e H₂O. Dentre os Processos Oxidativos Avançados, a fotocatálise heterogênea tem sido amplamente estudada e revisada por diversos autores nas três últimas décadas.

1.1. Fotocatálise Heterogênea

A destruição de compostos poluentes por fotocatálise é um assunto bastante discutido na literatura. A degradação fotocatalítica é conseguida com auxílio de um fotocatalisador e uma fonte de radiação ultravioleta. Alguns semicondutores possuem a capacidade de transformar luz em outro tipo de energia, e neste caso a energia da luz absorvida pelo semicondutor resulta na promoção de um elétron a um nível de energia mais elevado produzindo radicais altamente reativos. Estes radicais são do tipo hidroxila ($\bullet\text{OH}$) e podem oxidar e mineralizar compostos orgânicos. As moléculas orgânicas são decompostas e transformadas em água, dióxido de carbono e ácidos minerais (Dezotti, 1998).

A possibilidade de aplicação da fotocatálise heterogênea à descontaminação foi reconhecida pela primeira vez em dois trabalhos de Pruden e Ollis (1983) onde foi demonstrada a total mineralização de clorofórmio e tricloroetileno para íons inorgânicos durante iluminação de suspensão de TiO₂. Desde então, a fotocatálise heterogênea vem atraindo grande interesse de diversos grupos de pesquisa de todo o mundo. Devido à sua potencialidade de aplicação como método de destruição de poluentes, uma média de 200 publicações por ano tem sido atingida. Dentre estas, uma série de revisões abordam a aplicação do método à descontaminação ambiental (Serpone & Pelizzetti, 1989; Matthews, 1991; Ollis, 1991; Fox, 1992; Mills et al., 1993; Fox & Dulay, 1993; Herrmann et al., 1993; Pichat, 1994; Hoffmann et al., 1995).

A taxa de degradação fotocatalítica depende de vários fatores, tais como a intensidade de iluminação, o tipo de catalisador, a concentração de oxigênio, o pH, a presença de íons inorgânicos e a concentração de reagente orgânico. O conhecimento de como estas taxas de reação são influenciadas por estes diferentes parâmetros operacionais é de fundamental importância para o projeto e otimização de sistemas fotocatalíticos em escala industrial. (Turchi & Ollis, 1988).

1.1.1. Aplicações

Uma grande variedade de compostos orgânicos e inorgânicos, em fase gasosa ou líquida, podem ser degradados através da fotocatálise heterogênea. Além disto ela pode ser utilizada na desinfecção de águas contaminadas com microorganismos patogênicos. A fotocatálise heterogênea, pode ser utilizada no tratamento de efluentes domésticos e industriais, no entanto a maioria das pesquisas na área, tem sido direcionada no sentido de consolidar a tecnologia fotocatalítica, como uma alternativa técnica e economicamente viável para o tratamento de efluentes industriais, os quais normalmente contém substâncias tóxicas, não-biodegradáveis e em pequenas concentrações, o que muitas vezes inviabiliza o tratamento pelas técnicas convencionais.

Após quase duas décadas de pesquisas, inúmeros trabalhos tem sido publicados na área da fotocatálise heterogênea, a maioria destes trabalhos mostram que uma das características primárias do método é a capacidade de tratar várias classes de compostos orgânicos, e que a mineralização completa pode ser alcançada na maior parte dos casos. Jardim & Nogueira (1998), apontam para um grande problema na implantação de processos fotocatalíticos para tratamento de efluentes em escala industrial, uma vez que a interface com a engenharia faz-se necessário e ainda encontra-se pouco desenvolvida. Sclafani et al. (1993) já apontava para um número limitado de investigações que tratam do fenômeno de transferência de massa que acontece dentro do reator. O desenvolvimento e a validação de modelos matemáticos que permitam simular os fotoreatores multifásicos será uma importante contribuição no projeto de novos reatores em escala industrial. (Yue, 1992)

As principais tendências atuais são a substituição das fontes de radiação ultravioleta artificiais pela luz solar, tendo em vista que a maior parcela dos custos do tratamento photocatalítico é a geração de fótons com energia superior ao bandgap do semicondutor e a utilização de semicondutores que sejam ativados com luz visível. No caso do Brasil, devido a nossa posição geográfica, temos altas taxas de insolação, o que incentiva as pesquisas no sentido de se aproveitar cada vez mais o potencial da energia solar.

1.2. Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT)

A Técnica de Transformação Integral Generalizada é um método de solução de equações diferenciais parciais de evolução relativamente recente, e tem se mostrado uma alternativa aos métodos puramente discretos. Seu caráter híbrido numérico-analítico permite o controle automático de erro durante a solução das equações, o que evita a necessidade de diversas execuções do código computacional para avaliação da convergência, dispensa a geração de malha e possibilita uma fácil extensão a um maior número de dimensões envolvidas no problema. (Cotta, 1993)

Na GITT se alivia a necessidade de se encontrar uma transformação integral exata do problema. Para isso, escolhe-se um problema de autovalor auxiliar o mais representativo possível do problema original. Os potenciais originais são representados por um somatório infinito de produtos entre as autofunções obtidas a partir do problema auxiliar e os potenciais transformados. Ao aplicar-se a transformação, obtém-se um sistema diferencial ordinário acoplado infinito, que é truncado até uma ordem suficiente para a obtenção da solução dentro da precisão desejada.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

O sistema a ser analisado é um reator do tipo filme fino e leito fixo, conforme pode ser observado na Fig. 1.

A convecção-difusão de um fluido Newtoniano dentro do qual existe uma reação química irreversível de primeira ordem é governada pela equação da conservação das espécies, submetidas às condições apropriadas. Na entrada do reator, o perfil de velocidade é assumido completamente desenvolvido, enquanto que a concentração da espécie A é mantida constante e B não está presente. Vamos assumir que as propriedades físicas da solução sejam constantes.

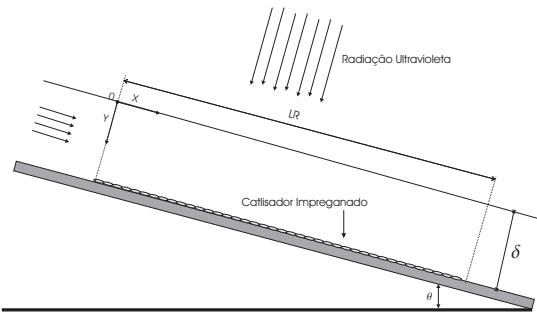


Figura 1. Diagrama esquemático de um reator do tipo filme fino e leito fixo

Considerando-se as hipóteses anteriores, a equação da conservação da massa (adimensionalizada) para o componente A e as condições de contorno são dadas por:

$$u(y) \cdot \frac{\partial C_{PC}(x, y)}{\partial x} = \frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 C_{PC}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{PC}(x, y)}{\partial y^2} - K_H C_{PC}(x, y) \quad (1)$$

$$C_{PC}(0, y) = 1 \quad (2)$$

$$C_{PC}(L, y) = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_{PC}(x,0)}{\partial y} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_{PC}(x,1)}{\partial y} + K_s C_{PC}(x,1) = 0 \quad (5)$$

Para resolver a equação (1) utiliza-se a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT), propondo-se o seguinte problema auxiliar na direção transversal ao escoamento:

$$\frac{d^2\Omega(y)}{dy^2} + \beta^2\Omega(y) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{d\Omega(0)}{dy} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{d\Omega(1)}{dy} + K_s\Omega(1) = 0 \quad (8)$$

Este problema auxiliar é do tipo de Sturm-Liouville (MIKHAILOV & ÖZISIK, 1984), o qual possui a seguinte solução analítica e explícita

$$\Omega_i(y) = \text{Cos}(\beta_i y) \quad (9)$$

onde os autovalores são obtidos a partir da solução da seguinte equação transcendental:

$$\beta_i \text{Sen}(\beta_i) = K_s \text{Cos}(\beta_i) \quad (10)$$

Escrevendo-se o potencial $C_{PS}(x,y)$ como sendo uma expansão que tem como base as autofunções originadas do problema auxiliar associado ao problema original.

$$C_{PC}(x,y) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\Omega}_i(y) \bar{C}_{PC_i}(x) \quad (11)$$

onde $\bar{C}_{PC_i}(x)$ é uma função desconhecida que depende de x .

Multiplicando-se a equação (11) pela autofunção normalizada, $\tilde{\Psi}_i(y)$, integrando-se em todo o domínio da variável y e considerando-se a propriedade da ortogonalidade, obtém-se o seguinte par transformada-inversa

$$\bar{C}_{PC_i}(x) = \int_0^1 \tilde{\Omega}_i(y) C_{PC}(x,y) dy \quad (12)$$

$$C_{PC}(x,y) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\Omega}_i(y) \bar{C}_{PC_i}(x) \quad (13)$$

Multiplicando-se cada termo da equação pela autofunção normalizada, $\tilde{\Omega}_i(y)$, e integrando-se em todo o domínio da variável transversal, y , e usando-se as condições de contorno na direção transversal, y , obtém-se a equação transformada

$$\frac{d^2\bar{C}_{PC_i}(x)}{dx^2} = Pe^2 \sum_{j=1}^{\infty} A2_{ij} \frac{d\bar{C}_{PC_j}(x)}{dx} + Pe^2 [\beta_i^2 + K_H] \bar{C}_{PC_i}(x) \quad (14)$$

onde a matriz $A2_{ij}$ é definida da seguinte forma:

$$A2_{ij} = \int_0^1 u(y) \tilde{\Omega}_i(y) \tilde{\Omega}_j(y) dy \quad (15)$$

Multiplicando-se as condições de contorno, que são definidas pelas Equações (2) e (3) pela autofunção normalizada $\tilde{\Omega}_i(y)$ e integrando-se em todo o domínio da variável transversal, e usando-se a definição da transformada, obtém-se

$$\bar{C}_{PC_i}(0) = \bar{f}_{z_i} = \int_0^1 \tilde{\Omega}_i(y) dy \quad (16)$$

$$\bar{C}_{PC_i}(L) = 0 \quad (17)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foi desenvolvido um código computacional em linguagem FORTRAN 90, utilizando como plataforma computacional um PC Athlon XP 2400+ com 512 MB de memória RAM.

As Tabelas (1) e (2) mostram a análise da convergência em relação ao número de autovalores usados no cálculo da concentração média e do número de Sherwood locais.

Para as combinações entre os valores das constantes da taxa de reação homogênea e heterogênea, analisadas pode-se constatar que são necessários em torno de 20 autovalores para que se obtenha uma convergência de quatro casas decimais, nos valores da concentração média local. Para o cálculo do número de Sherwood o número de termos é de aproximadamente 60. Foram analisados os números de Peclet iguais a 1.00 10.00 100.00 e 1000.00, para analisar a influência da presença do termo de difusão axial nos perfis de concentração média, bem como no desenvolvimento do número de Sherwood.

Tabela 1 – Análise da convergência da concentração média local, para o caso de $K_H = 1.00$ e $K_S = 10.00$, para o reator permanente com difusão axial

	x/D_H	Número de Autovalores				
		5	10	15	20	100
Pe = 1000	0.5000	0.9331	0.9245	0.9247	0.9248	0.9248
	1.0000	0.9012	0.8945	0.8947	0.8947	0.8947
	5.0000	0.7416	0.7384	0.7385	0.7385	0.7385
	10.0000	0.6056	0.6033	0.6034	0.6034	0.6034
	50.0000	0.1323	0.1319	0.1319	0.1319	0.1319
	100.0000	0.0199	0.0198	0.0198	0.0198	0.0198
	200.0000	0.0004	0.0004	0.0004	0.0004	0.0004
	300.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Pe = 100	Número de Autovalores					
	x/D_H	5	10	15	20	100
	0.1000	0.9089	0.9069	0.9069	0.9069	0.9069
	0.5000	0.7468	0.7458	0.7458	0.7458	0.7458
	1.0000	0.6096	0.6090	0.6090	0.6090	0.6090

	5.0000	0.1337	0.1336	0.1336	0.1336	0.1336
	10.0000	0.0202	0.0202	0.0202	0.0202	0.0202
	20.0000	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005
	30.0000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
	40.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Pe = 10	x/D_H	Número de Autovalores				
		5	10	15	20	100
	0.0100	0.9661	0.9655	0.9655	0.9655	0.9655
	0.0500	0.8403	0.8402	0.8402	0.8402	0.8402
	0.1000	0.7116	0.7115	0.7115	0.7115	0.7115
	0.5000	0.2051	0.2050	0.2050	0.2050	0.2050
	1.0000	0.0443	0.0443	0.0442	0.0443	0.0443
	2.0000	0.0021	0.0021	0.0021	0.0021	0.0021
	3.0000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
	4.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela 2 – Análise da convergência do número de Sherwood local, para o caso de $K_H = 1.00$ e $K_S = 10.00$, para o reator permanente com difusão axial

Pe = 1000	x/D_H	Número de Termos				
		10	20	40	60	100
	0.5000	11.5507	11.5563	11.5562	11.5561	11.5561
	1.0000	10.4465	10.4505	10.4504	10.4504	10.4504
	5.0000	8.0641	8.0645	8.0644	8.0644	8.0644
	10.0000	7.4598	7.4596	7.4595	7.4595	7.4595
	50.0000	7.2313	7.2308	7.2308	7.2308	7.2308
	100.0000	7.2312	7.2308	7.2308	7.2308	7.2308
	200.0000	7.2314	7.2310	7.2310	7.2310	7.2310
Pe = 100	x/D_H	Número de Termos				
		10	20	40	60	100
	0.1000	11.2663	11.2624	11.2619	11.2619	11.2619
	0.5000	8.1924	8.1915	8.1914	8.1914	8.1914
	1.0000	7.5007	7.5002	7.5001	7.5001	7.5001
	5.0000	7.2344	7.2340	7.2339	7.2339	7.2339
	10.0000	7.2344	7.2340	7.2339	7.2339	7.2339
	20.0000	7.2344	7.2340	7.2339	7.2339	7.2339
	30.0000	7.2342	7.2328	7.2337	7.2337	7.2337
Pe = 10	x/D_H	Número de Termos				
		10	20	40	60	100
	0.0100	51.4415	54.5168	54.8400	54.8468	54.8468
	0.0500	16.0733	16.0654	16.0646	16.0646	16.0646
	0.1000	10.7733	10.7726	10.7724	10.7724	10.7724
	0.5000	7.4810	7.4830	7.4830	7.4830	7.4830
	1.0000	7.4445	7.4441	7.4440	7.4440	7.4440
	2.0000	7.4443	7.4439	7.4439	7.4438	7.4438
	3.0000	7.4443	7.4439	7.4439	7.4438	7.4438
	4.0000	7.4450	7.4439	7.4438	7.4438	7.4438

Analisou-se a variação das constantes de taxa de reação, dentro do seguinte intervalo 0.01 até 100.00. A escolha deste intervalo se deve ao fato de que na maioria dos casos encontrados na literatura, a constante da taxa de reação homogênea em processos fotocatalíticos se encontra dentro desta faixa (GOSWAMI et al., 1993a; NOGUEIRA, 1995).

As Figuras 2 e 3, mostram a influência da variação da constante da taxa de reação homogênea, sobre os perfis da concentração média e o do número de Sherwood locais, quando mantem-se fixa a constante da taxa de reação heterogênea.

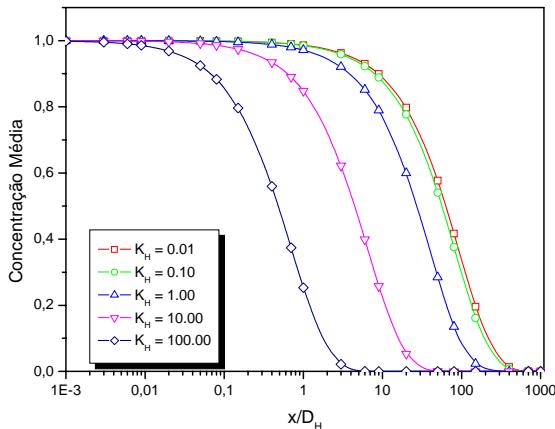


Figura 2 – Perfil de concentração média, em função da distância axial, para $K_S = 1.00$

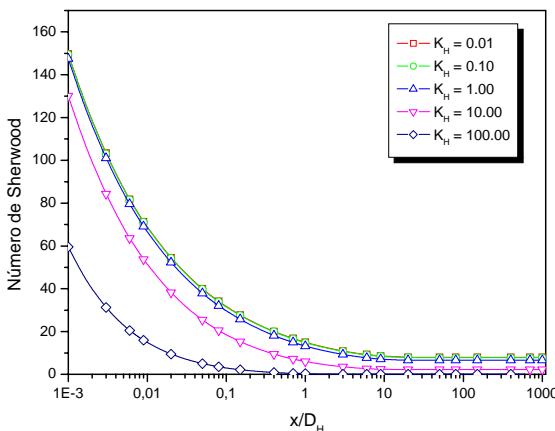


Figura 3 – Número de Sherwood local, em função da distância axial, para $K_S = 1.00$

As Figuras 2 e 3, mostram a influência da variação da constante da taxa de reação heterogênea, sobre os perfis da concentração média e o do número de Sherwood locais, quando mantem-se fixa a constante da taxa de reação homogênea.

Através da análise dos resultados das simulações computacionais pode-se observar que a variação da constante da taxa de reação homogênea, K_H , para valores menores do que 0.10, tem efeito pouco significante sobre a concentração média (Figura 2). Para valores da constante homogênea, acima de 1.00, a concentração média diminui rapidamente com o aumento do valor de K_H (Figura 2 e 3)).

Nas Figuras (4) e (5) podemos aumentar no valor da constante da taxa de reação heterogênea, K_S , produz um efeito significativo próximo da parede do reator. Isto pode ser visto pela rápida diminuição da concentração na parede a medida em que a solução flui dentro do reator.

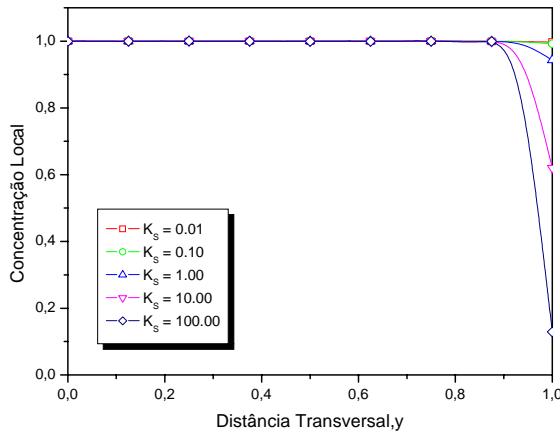


Figura 4 – Perfis de concentração local, em função da distancia transversal, em $x/(D_H Pe) = 1.00 \times 10^{-5}$, para $K_H = 1.00$

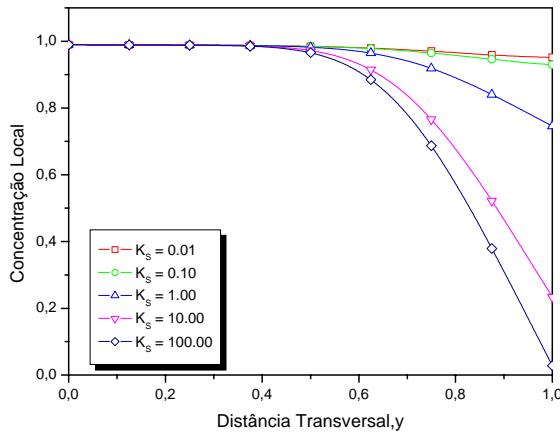


Figura 5 – Perfis de concentração local, em função da distancia transversal, em $x/(D_H Pe) = 1.00 \times 10^{-3}$, para $K_H = 1.00$

Para valores de K_S menores do que 0.10 praticamente não influenciam a forma do perfil de concentração local, Figura (4) e (5). Para valores de K_S acima de 10.00 as curvas da concentração local tendem a se aproximar, Figuras (4) e (5)

4. CONCLUSÕES

O entendimento do fenômeno de transferência de massa em reatores photocatalíticos ainda é um assunto pouco abordado na literatura, neste sentido este trabalho, apresenta uma solução híbrida numérico-analítica que pode ser usada no projeto e análise de reatores photocatalíticos com convecção-difusão de fluidos newtonianos com reações químicas heterogêneas e heterogêneas dentro do reator. As soluções obtidas apresentaram excelente convergência e estabilidade numérica, podendo serem utilizadas para investigar os efeitos de importantes parâmetros operacionais (p. ex.: variações nas constantes cinéticas e no tempo de residência no reator), que afetam a transferência de massa no sistema, além do que este estudo pode servir de base na criação de uma metodologia para o projeto de reatores photocatalíticos, desde que sejam conhecidas as constantes cinéticas de degradação das espécies químicas presentes no processo.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- COTTA, R. M., (1993), "Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow", CRC Press, Boca Raton, FL
- DEZOTTI, M. AND RUSSO, C., (1998), **Técnicas de controle ambiental em efluentes líquidos**. Escola Piloto de Engenharia Química, COPPE, Rio de Janeiro.
- FOX, M. A. E DULAY, M. T. (1993). Heterogeneous photocatalysis. **Chemical Reviews**. V. 93, p. 341-357.
- GOSWAMI, D. Y., KLAUSNER, J., MATHUR, D. G., MARTIN, A., SCHANZE, K., WYNNESS, P., TURCHI, C., AND MARCHAND, E., (1993), Solar photocatalytic treatment of groundwater at Tyndall AFB: Field test results, **Proceedings of the 1993 Annual Conference American solar Energy Society**, Washington, D.C. April, p. 235-239.
- HERMANN, J. M. GUILLARD, C. E PICHAT, P. (1993). Heterogeneous photocatalysis: an emerging technology for water treatment. **Catalysis Today**. v. 17, p. 7-20.
- HOFFMANN, M. R., MARTIN, S. T., CHOI, W. E BAHNEMANN, D. W. (1995). Environmental applications of semiconductor photocatalysis. **Chemical Reviews**., v. 95 p. 69-96.
- JARDIM, W. F, AND NOGUEIRA, R. F. P., (1998), "A fotocatálise heterogênea e sua aplicação ambiental", Química Nova, vol. 21, n. 1, pp. 69-72
- MATTHEWS, R. W. (1991). Environment: photochemical and photocatalytic processes. degradation of organic compounds. *in Photochemistry Conversion and Storage of Solar Energy*, E. Pelizzetti e M. Schiavello (Eds.): p. 427-449.
- MILLS, A., DAVIES, R. H. AND WORSLEY, D. (1993). Water purification by semiconductor photocatalysis. **Chemical Society Reviews**. v. 22, p. 417-425.
- OLLIS, D. F. (1991). Solar-assisted photocatalysis for water purification: issus, data, questions *in Photochemistry Conversion and Storage of Solar Energy*, E. Pelizzetti e M. Schiavello (Eds.): p. 593-622.
- PICHAT, P. (1994). Partial or complete heterogeneous photocatalytic oxidation of organic compounds in liquid organic or aqueous phases. **Catalysis Today**, v. 19, p. 313-334.
- PRUDEN, A. L. E OLLIS, D. F. (1983). Degradation of chloroform by photoassisted heterogeneous catalysis in dilute aqueous suspensions of titanium dioxide. **Environmental Science Technology**, v. 17, p. 628-631.
- SCLAFANI, A., BRUCATO, A. AND RIZZUTI, L., (1992), "Mass transfer limitations in a packed bed photoreactor used for phenol removal", Proceedings of the 1st International Conference on TiO₂ Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air, November 8-13, London, vol.. 3, pp 495-510.
- SERPONE, N. E PELIZZETTI, E. (1989). **Photocatalysis, Fundamentals and Applications**. Serpone, N. e Pelizzetti, E., Eds.; John Wiley & Sons, Inc.: New York.
- TURCHI, C. S. AND OLLIS, D. F., (1988), Photocatalytic reactor design: An example of

mass-transfer limitations with immobilized catalyst. **Journal of Physical Chemistry**, v. 92, p. 6852-6853.

MASS TRANSFER IN A THINK-FILM PHOTOCATALYTIC REACTOR IN STEADY STATE WITH AXIAL DIFUSION: SOLUTION BY THE GENERALIZED INTEGRAL TRANSFORM TECHNIQUE (GITT)

Fernando Fernandes Vieira (*)
Carlos Antonio Pereira de Lima (*)
Geralda Gilvania Cavalcante de Lima (*)
Carlos Antonio Cabral dos Santos ()**
Romberg Rodrigues Gondim ()**
Zaqueu Ernesto da Silva ()**

- (*) Universidade Estadual da Paraíba, Departamento de Química, CCT
Rua Acre, 545 – Liberdade Campina Grande – PB - CEP 58.105-523 – Tel: (83) 341-3443
fernando@uepb.rpp.br
- (**) Universidade Federal da Paraíba, Laboratório de Energia Solar, CT/CPGEM - DTM
Caixa Postal – 5115, CEP 58.051-970, João Pessoa - PB

Abstract. The environmental decontamination using photocatalysis heterogeneous has been receiving special attention on the part of the scientific community, because is considered a "clean" technology, could be applied mainly in the elimination of pollutant organic recalcitrant and heavy metals. The photocatalysis heterogeneous is a process oxidative advanced, where a semiconductor absorbs photons, whose energy is superior to his "bandgap" and it acts as a catalyst in the production of the radicals hidroxyl, which can rust and to mineralize completely composed organic. The proposal of this work is to establish the concentration profiles inside a photocatalytic reactor of the type think-films. The stages developed in the accomplishment of this work were the following ones: Development of the mathematical models, starting from the material balances that they allow to simulate influences it of certain operational parameters on the efficiency of the degradation of the pollutant ones organic inside of the photocatalytic reactor. Once established the models the Technique of the Transformed Integral Generalized (GITT) was used to obtain the solution of the models of stationary bi-directional concentration with axial diffusion, using a kinetic model of first order for the degradation of the pollutant ones.

Keywords: photocatalytic, reactor, contamination, integral transform