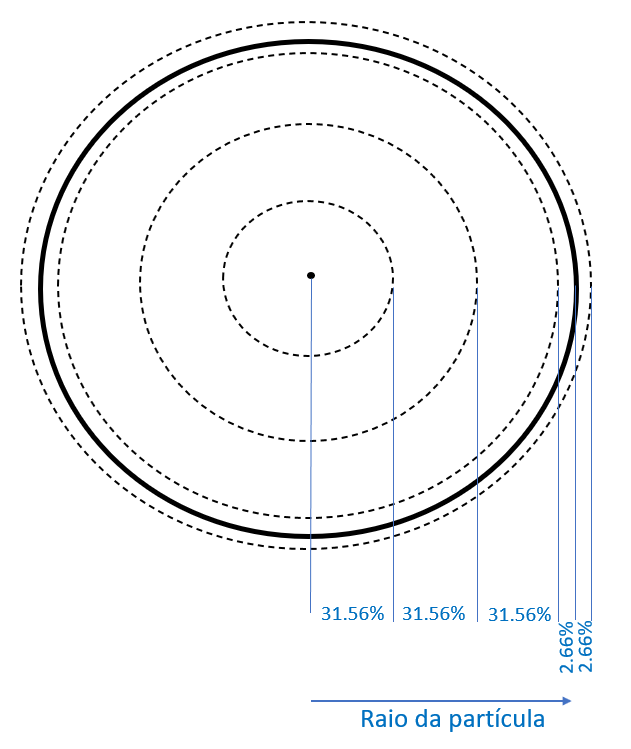
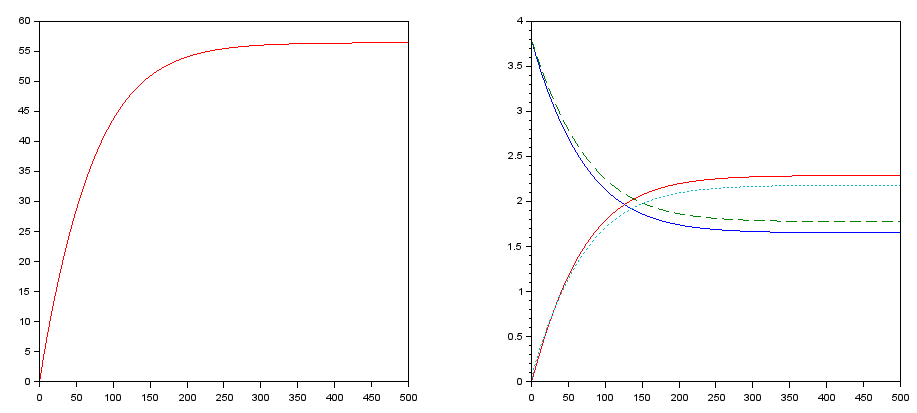
Modelo - Catálise Heterogênea

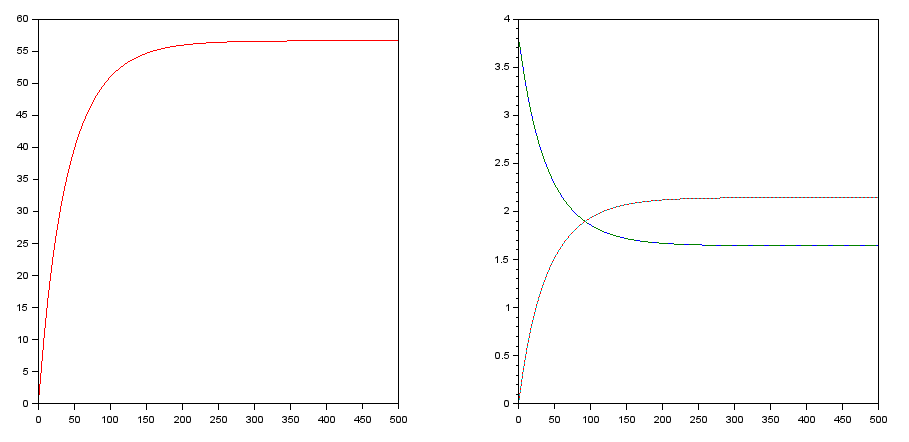
Discretização por diferenças finitas com refinamento adaptativo



Redução do tempo de simulação:

**De 30 min para 0.2 min**

****

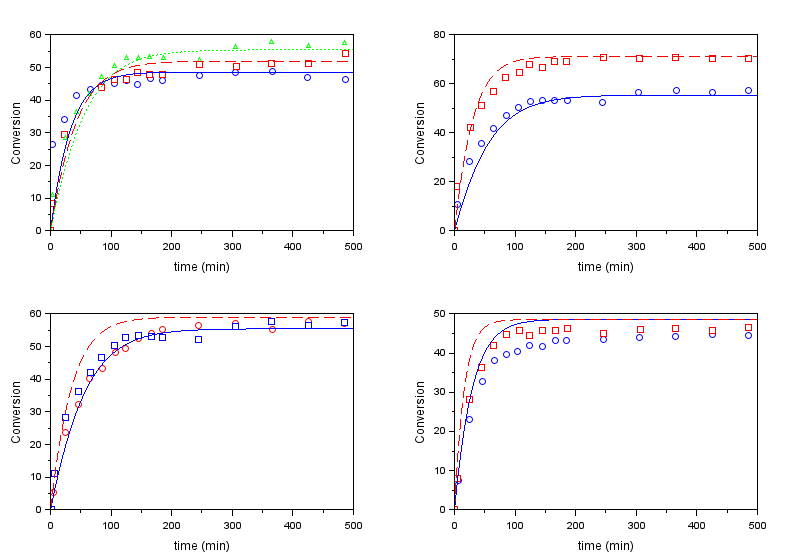
****

**Simulações com dados de Moreira et. al (2019)**

1. Considerando cálculo de atividades em todas os pontos de discretização

Tempo de simulação = 8.67 min

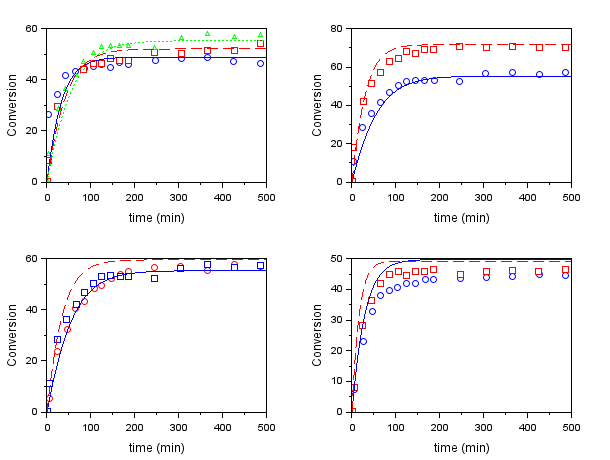
R2= 0.913



1. Considerando cálculo de atividades no ponto de equilíbrio

Tempo de simulação = 1.22 min

R2 = 0.899



Resultados

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Informações | Approach 1 | Approach 2 | Moreira et. al (2019) |
| UNIFAC | Modificado  Atividades nas camadas | Modificado  Atividades no equilíbrio | Original  Atividades nas camadas |
| Discretização | Diferenças finitas-RA | Diferenças finitas-RA | Colocação ortogonal |
| ΔHo (kJ/mol) | 26.06 | 26.06 | 20.10 |
| ΔSo (kJ/mol) | 95.00 | 95.00 | 72.04 |
| R2 | 0.913 | 0.899 | 0.961 |

Demais dados iguais aos do artigo de Moreira et. al (2019) – Modelo LHHW

A redução da espessura/número de pontos altera os resultados.

Como avaliar qual configuração de pontos é mais adequada na discretização?