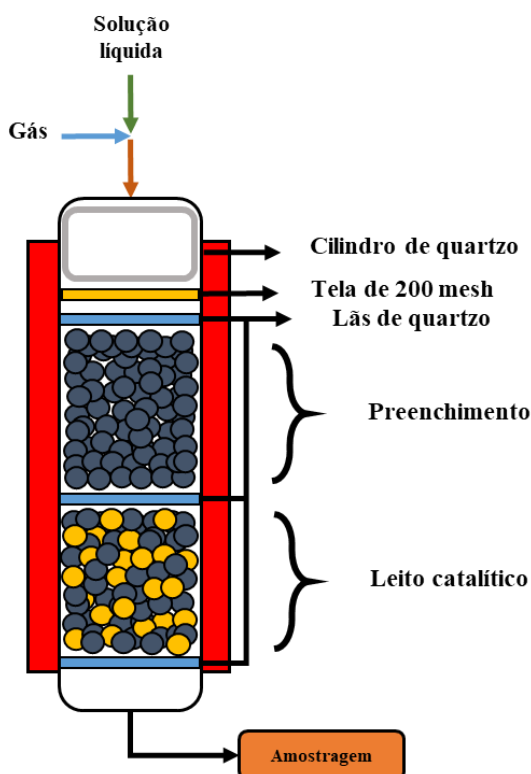


Seção suporte  
para  
**Estudo preliminar da otimização de um reator de leito fixo para oxidação  
seletiva de 5-hidroximetilfurfural**

**Seção S1: Unidades de testes catalíticos**

A primeira etapa do procedimento consistia na montagem do leito catalítico. Para isso, o reator era carregado com uma mistura física do catalisador 3RuAl de carbetto de silício (SiC), na granulometria de 60-100 mesh. Além disso, o restante do reator também foi preenchido com SiC na mesma granulometria.

No preenchimento do leito foi utilizado lã de quartzo nas extremidades visando impedir possíveis entupimentos pela passagem de sólidos. Além disso, empregou-se uma camada de lã separando o leito catalítico do preenchimento do SiC usado. O reator era composto por um cilindro de quartzo na parte superior, que prendia uma pequena tela de 200 mesh, para impedir a passagem de sólidos para a tubulação da unidade.



**Figura S1** – Esquema de montagem para a unidade de testes catalíticos (elaboração própria)

## Seção S2: Cálculo das limitações de transferência de massa

Os cálculos das limitações de transferência de massa foram determinados pelos critérios de Mears ( $CM$ ) e Weisz-Prater ( $CW$ ) para difusão extra e intrapartícula, respectivamente:

$$CM = \frac{(-r_{obs}) \rho_c d_p n}{k_c C_{ab}} < 0,15 \quad (S1)$$

$$CW = \frac{(-r_{obs}) p_c d_p^2}{D_e C_{as}} < 1,0 \quad (S2)$$

onde:

$(-r_{obs})$ : taxa de reação observada para consumo do HMF ( $\text{kmol kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ );

$\rho_c$ : densidade do catalisador ( $\text{kg m}^{-3}$ );

$d_p$ : diâmetro de partícula (m);

$n$ : ordem de reação HMF;

$k_c$ : coeficiente de transferência de massa ( $\text{m s}^{-1}$ );

$C_{ab}$ : concentração no seio do fluido ( $\text{mol L}^{-1}$ );

$D_e$ : difusividade efetiva ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ );

$C_{as}$ : concentração na superfície do catalisador ( $\text{mol L}^{-1}$ ).

Os cálculos do coeficientes de transferência de massa  $k_c$  foram determinados pelas correlações nas equações (S3) até (S7):

$$k_c = \frac{D_{AB} Sh}{d_p} \quad (S3)$$

$$Sh = 2 + 0.6(Re)_p^{1/2} Sc^{1/3} \quad (S4)$$

$$Re_p = \frac{d_p u \rho_f}{\mu} \quad (S5)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho_f D_{AB}} \quad (S6)$$

$$D_{HMF} = (2.704 \times 10^{-15})(\mu)^{-1.0034} T \quad (S7)$$

onde:

$Sh$ : número de Sherwood;

$Sc$ : número de Schmidt;

$(Re)_p$ : número de Reynolds da partícula;

$\mu$ : viscosidade do fluido ( $\text{Pa s}$ );

$\rho_f$ : densidade do fluido ( $\text{kg m}^{-3}$ );

$D_{AB}$ : difusividade da substância sobre o fluido ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ );

$T$ : temperatura (K).

## Parâmetros de cálculo

$$n = 1;$$

$$\text{porosidade } (\varepsilon) = 0.59;$$

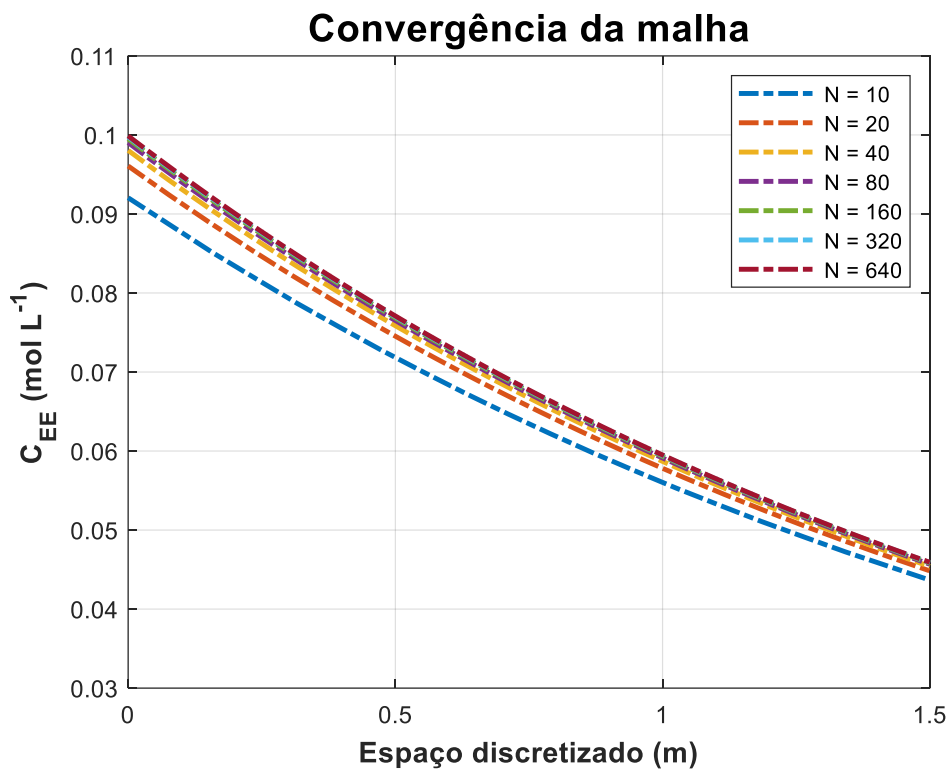
$$p_c = 2.22 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3};$$

$$C_{HMFs} \approx C_{HMFb} = 0.1 \text{ mol L}^{-1};$$

$$\text{tortuosidade } (\tau) = 2.4;$$

$$D_{eHMF} = \frac{D_{HMF} \varepsilon}{\tau}$$

## Seção S3: Convergência da malha



**Figura S2.** Convergência da malha para simulação dinâmica

O número de pontos escolhido ( $N = 300$ ) para discretização da malha foi determinado seguindo o critério estabelecido (erro absoluto) para convergência das malhas com tolerância  $10^{-1}$ . O detalhamento do código pode ser encontrado nos anexos do projeto.

## Referências Bibliográficas

- (1) FERREIRA, A. S. F.; MELLO, M. D.; SILVA, M. A. P. Catalytic Oxidation of 5-Hydroxymethylfurfural to 2,5-Furandicarboxylic acid over Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in a Trickle-Bed Reactor. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 58, n. 1, p. 128–137, 2019.