



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Avaliação do método das diferenças finitas na solução de equações diferenciais parciais de modelos de difusão em partículas de adsorventes
Autor	GABRIEL HENRIQUE DE OLIVEIRA MIGLIORANZA
Orientador	MARCIO SCHWAAB

SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA 2016

Avaliação do método das diferenças finitas na solução de equações diferenciais parciais de modelos de difusão em partículas de adsorventes.

Aluno: Gabriel Miglioranza
Orientador: Marcio Schwaab
Departamento de Engenharia Química
Escola de Engenharia
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Os processos de adsorção em batelada e em leito fixo são comumente utilizados em laboratórios para avaliação adsorventes e em processos industriais de separação ou purificação de gases, remoção de metais pesados de efluentes líquidos, entre outros. Nestes processos são utilizadas partículas de adsorvente, de forma que o processo de adsorção envolve uma série de etapas de transferência de massa, os quais são descritos por uma equação diferencial parcial.

A solução analítica desta equação diferencial parcial só é possível para isothermas lineares (lei de Henry). Para isothermas não-lineares, como as isothermas de Langmuir e Freundlich, a solução só é possível com o auxílio de métodos numéricos: um método numérico para discretizar a equação diferencial parcial ao longo da variável espacial e um método numérico de solução de equações diferenciais ordinárias, originadas com a discretização.

Assim, para avaliar a qualidade dos métodos numéricos, principalmente dos métodos de discretização espacial, será considerada o modelo de difusão intrapartícula, sem o termo de adsorção, conforme a Equação (01), onde C_P é a concentração, η é a variável espacial adimensional, τ o tempo adimensional (número de Fourier) e S uma constante de geometria, sendo igual a 0, 1 ou 2, respectivamente para partículas planas, cilíndricas ou esféricas.

$$\frac{\partial C_P}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C_P}{\partial \eta^2} + \frac{S}{\eta} \frac{\partial C_P}{\partial \eta} \quad (01)$$

Esta possui solução analítica utilizando o método da separação de variáveis, possibilitando assim a avaliação direta da qualidade dos métodos numéricos de discretização. Inicialmente foi escolhido o método das diferenças finitas, por este ser mais simples e de fácil implementação computacional. Este método consiste na individualização da variável espacial em N pontos internos discretos com subintervalos igualmente espaçados. As derivadas espaciais são reescritas com por série de Taylor para cada ponto. Para solução do sistema de equações diferenciais ordinárias foi usada a rotina integração DASSL, que usa o método de BDF (*backward differentiation formula*).

Foram realizadas diversas simulações, onde foram variados os parâmetros de transferência de massa e o número de pontos internos, N . Também foram consideradas derivadas com precisão da ordem de $o(h^2)$ e $o(h^4)$. Devido à condição de simetria no centro da partícula, também foi avaliada a mudança da variável independente de η para u , usando a relação $u = \eta^2$, já que a solução em termos de η é obrigatoriamente uma função par.

Foi observado uma grande diferença nos resultados entre as simulações em termos de u e η , onde as primeiras levaram a resultados mais próximos da solução analítica. O aumento do número de pontos de discretização de 10 para 100, melhora um pouco a precisão dos resultados, mas aumenta em muito o tempo computacional. Já o aumento da precisão das derivadas da ordem de $o(h^2)$ para $o(h^4)$, como esperado melhora a precisão dos resultados, sem elevar o tempo computacional significativamente.

Assim, foram escolhidas como condições de simulação o uso da variável independente modificada u , com 10 pontos internos de discretização e usando derivadas com precisão da ordem de $o(h^4)$, condições que levam a resultados satisfatórios com baixo custo computacional.