



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Avaliação do método das diferenças finitas na solução de equações diferenciais parciais de modelos de difusão em partículas de adsorventes
<b>Autor</b>	GABRIEL HENRIQUE DE OLIVEIRA MIGLIORANZA
<b>Orientador</b>	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 isotermas lineares (lei de Henry). Para isotermas não-lineares, como as isotermas 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,  $\eta$  é a variável espacial adimensional,  $\tau$  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  $\eta$  para  $u$ , usando a relação  $u = \eta^2$ , já que a solução em termos de  $\eta$  é obrigatoriamente uma função par.

Foi observado uma grande diferença nos resultados entre as simulações em termos de  $u$  e  $\eta$ , 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.