

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia Química

*gabriel.miglioranza@ufrgs.br

Introdução

Neste trabalho foi realizado um estudo do uso do método das diferenças finitas para a solução de uma equação diferencial, típica em problemas de adsorção/difusão em partículas porosas. Os resultados obtidos foram comparados com a solução analítica, a fim de buscar as melhores condições de simulação e garantir que o método foi implementado corretamente.

Metodologia

Na equação abaixo esta apresentada a equação diferencial parcial utilizada neste trabalho, assim como as condições de contorno e inicial:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_p}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C_p}{\partial \eta^2} + \frac{S}{\eta} \frac{\partial C_p}{\partial \eta} \\ C_p|_{\tau=0} = 0 \\ \frac{\partial C_p}{\partial \eta}|_{\eta=0} = 0 \\ \frac{\partial C_p}{\partial \eta}|_{\eta=1} = -Bi_m (C_p|_{\eta=1} - C_B) \end{cases}$$

Onde C_p é a concentração intrapartícula, Bi_m o número adimensional de Biot, η a variável adimensional espacial, de domínio entre 0 e 1, e τ representa o número adimensional de Fourier. Esta equação também foi reescrita considerando a mudança de variáveis espaciais $\mu = \eta^2$. A partir destas escrevemos aproximações para as derivadas através da série de Taylor, com a precisão de $O(h^2)$ e $O(h^4)$, h representa o tamanho do intervalo na malha de simulação sendo este $h = 1/(N+1)$, sendo N o número de pontos internos utilizados na simulação. Assim foi construído um sistema de equação algébrico-diferenciais e posteriormente resolvidos em uma rotina de integração na linguagem FORTRAN.

Diversas simulações foram realizadas variando parâmetros que poderiam influenciar nos resultados obtidos, tais como o número de pontos internos, número de Biot e a precisão das derivadas. O erro foi computado como uma diferença entre o valor analítico e o valor da solução numérica, o erro médio representa a média aritmética dos pontos discretizados.

Conclusões

Para este trabalho foram realizadas diversas simulações, utilizando o método numérico de discretização por diferenças finitas. Com este buscávamos adapta-lo da melhor maneira possível ao nosso problema, a partir dos resultados podemos inferir que utilizando a rotina em termos de μ com dez pontos internos de discretização, com derivadas de precisão da ordem $O(h^4)$ encontramos os melhores resultados com baixo custo computacional. Foi aferido também que com o aumento do número de pontos internos, uma malha mais estreita, o resultado convergia, um bom indicativo de que a implementação do método foi bem sucedida. Esperamos que será possível adaptar o conhecimento aqui adquirido para a resolução de situações mais complexas e com maior aplicabilidade.

Referências

- PETZOLD, Linda et al. **Solução de sistema de equações algébrico-diferenciais implícitas de índice < 2**. Disponível em: <<http://www.enq.ufrgs.br/enqlib/numeric/numeric.html>>. Acesso em: 26 jul. 2015.
- PINTO, José Carlos; LAGE, Paulo Laranjeira C.. **Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química**. Rio de Janeiro: E-papers Serviços Editoriais, 2001.
- RUTHVEN, Douglas M.. Kinetics of Sorption in Batch Systems: Isothermal Single-Component Sorption: Macropore Diffusion Control. In: RUTHVEN, Douglas M. Principles of Adsorption and Adsorptions Processes. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1984. p. 173-175.

Resultados e Discussões

Através dos dados coletados foi possível contruir as Figuras 1 e 2, que relacionam o erro médio com o tempo adimensional, com estes artifícios visual podemos inferir sobre a qualidade das aproximações.

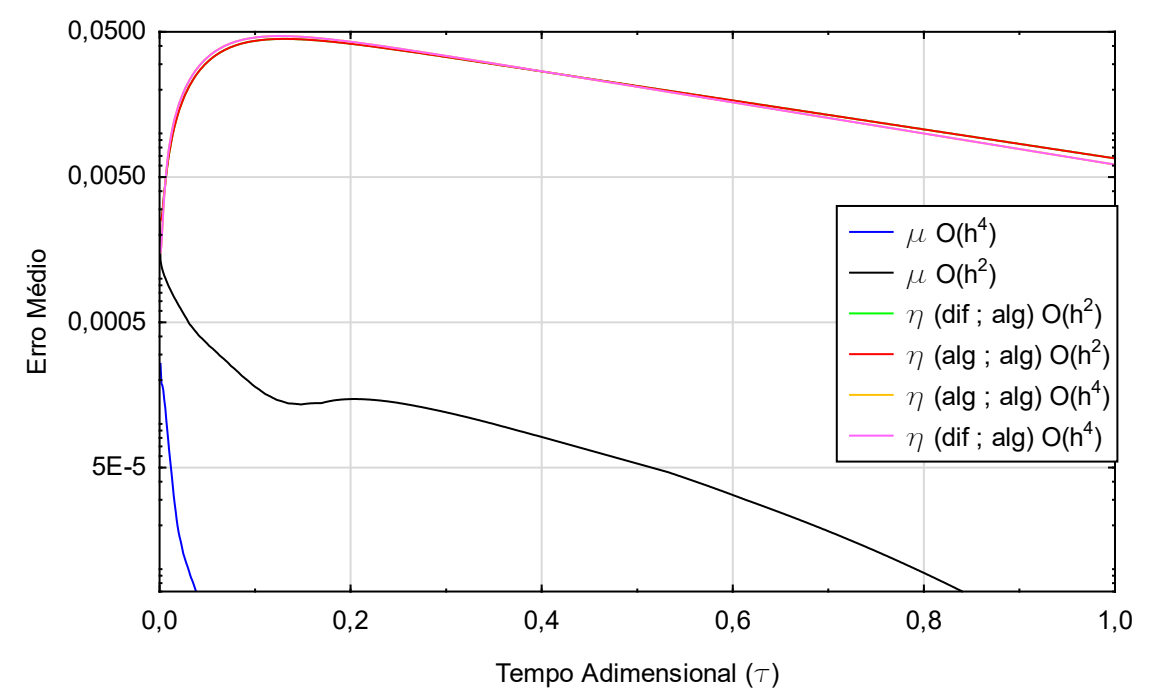


Figura 1 - Gráfico em escala logarítmica, relacionando tempo adimensional ao erro médio, simulações realizadas com $Bi=1$

A partir da Figura 1 podemos concluir que a mudança de variável trouxe resultados melhores, e sempre decrescentes a partir do tempo zero. Para as rotinas escritas em termos de η , não houve diferença ao utilizarmos derivadas com maior precisão, como ocorrido com as outras rotinas.

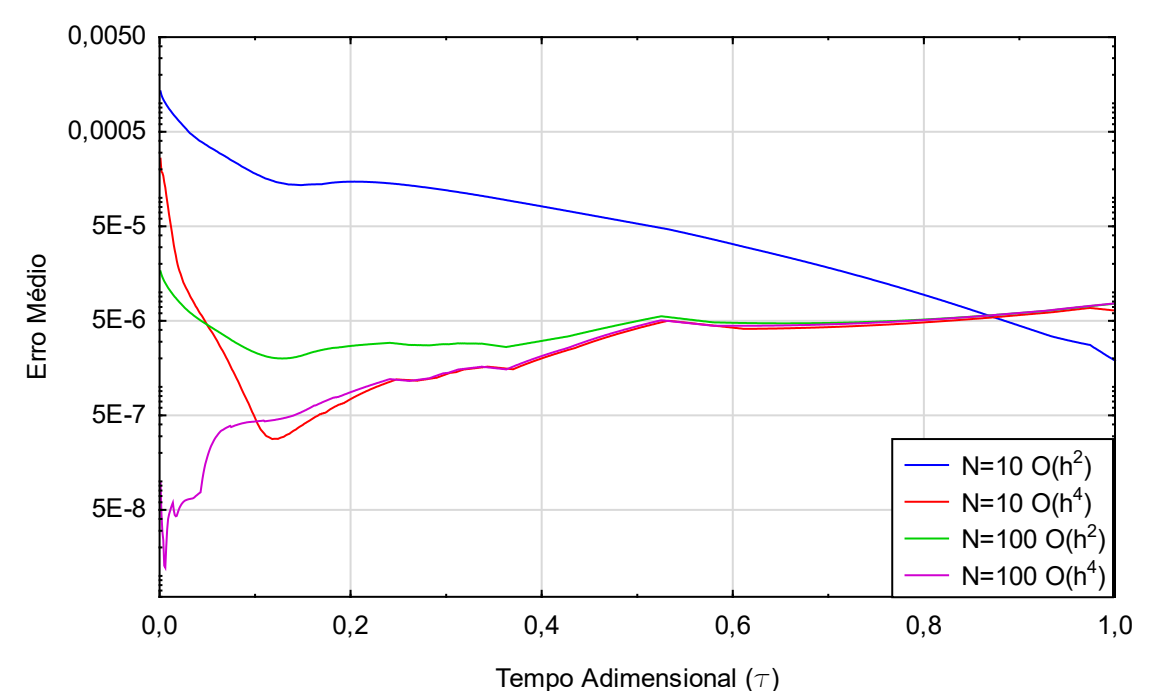


Figura 2 - Gráfico relacionando tempo adimensional com erro médio para rotina em termos de μ , com $Bi=1$

Com a Figura 2 mostra-se que com o aumento do número de pontos internos o resultado ficou mais preciso, entretanto é importante observar que utilizando derivadas mais precisas temos erros menores do que quando utilizamos derivadas da $O(h^2)$, com $N=100$. Este aspecto é positivo, pois conseguimos grande acurácia com baixo custo operacional

Agradecimentos

