

SALÃO DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
**XXIX SIC**  
  
**UFRGS**  
PROPESQ



múltipla   
**UNIVERSIDADE**  
inovadora  inspiradora

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2017
<b>Local</b>	Campus do Vale
<b>Título</b>	Avaliação de métodos numéricos 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 de métodos numéricos 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

O estudo e avaliação de adsorventes é feita utilizando diversos modelos matemáticos, que muitas vezes são aproximações de um estudo mais rigoroso envolvendo diversas etapas de transferência de massa. O estudo de adsorventes é de grande interesse devido a sua aplicação em diversas áreas, como para separação e purificação de gases, remoção de metais pesados em efluentes líquidos entre outros. O estudo mais rigoroso em partículas de adsorventes envolve a solução da equação da continuidade, apresentada na equação (1), classificada como uma equação diferencial parcial, onde  $C_P$  é a concentração no interior da partícula de adsorvente,  $\eta$  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.

$$\frac{\partial C_P}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C_P}{\partial \eta^2} + \frac{S}{\eta} \frac{\partial C_P}{\partial \eta} \quad (1)$$

Neste trabalho foram avaliados dois métodos numéricos para discretização da variável espacial, o método das diferenças finitas e o método da colocação ortogonal, sendo o sistema de equações diferenciais ordinárias obtido com a discretização resolvido através de um método de integração numérica. Para avaliação e comparação dos métodos de discretização foi considerado que a concentração externa à partícula de adsorvente permanece constante (hipótese de banho infinito), de forma que a equação (1) em conjunto com condições de contorno típicas tivesse solução analítica. Ainda foi avaliada uma mudança da variável espacial independente  $\eta$  para  $\mu = \eta^2$ , já que a solução é uma função par em relação à variável espacial. No método de diferenças finitas ainda foram consideradas diferenças centrais com 3 e 5 pontos, de forma a ter um erro esperado da ordem de  $O(h^2)$  e  $O(h^4)$ , respectivamente, sendo  $h$  o intervalo de discretização.

Os resultados obtidos mostraram que reescrever as equações em termos da variável  $\mu$ , foi benéfico para as simulações para os dois métodos sem acarretar em aumento no tempo computacional. A utilização desta mudança de variável,  $\mu = \eta^2$ , apesar de ser comum para simulações utilizando colocação ortogonal, não é comumente utilizada quando o método das diferenças finitas é utilizado. Também foi avaliado o efeito do número de pontos de discretização utilizados para as rotinas e como era esperado o erro de simulação cai com o aumento do número de pontos, porém o tempo de simulação também aumenta. Foi possível perceber também que o método das diferenças finitas consegue aproximar com mais qualidade o valor em cada ponto discreto do domínio espacial, enquanto a colocação ortogonal, consegue calcular o valor médio de concentração intrapartícula,  $C_P$ , com exatidão elevada, mesmo utilizando poucos pontos de discretização. Essa característica do método da colocação ortogonal é interessante pois possibilita o uso do valor médio de  $C_P$  para calcular a quantidade de soluto adsorvido no adsorvente que foi removida da fase bulk com boa exatidão. Por fim, os métodos serão avaliados na simulação da adsorção em um banho finito, situação mais próxima da realidade, sendo os principais resultados obtidos utilizados para a redação de um artigo.