



Universidade Federal do Rio de Janeiro
COPPE – Programa de Engenharia Química

COQ 790 – ANÁLISE DE SISTEMAS DA ENGENHARIA QUÍMICA

AULA 4:

*Ferramentas de análise (continuação): discretização
de EDPs e dimensionamento*

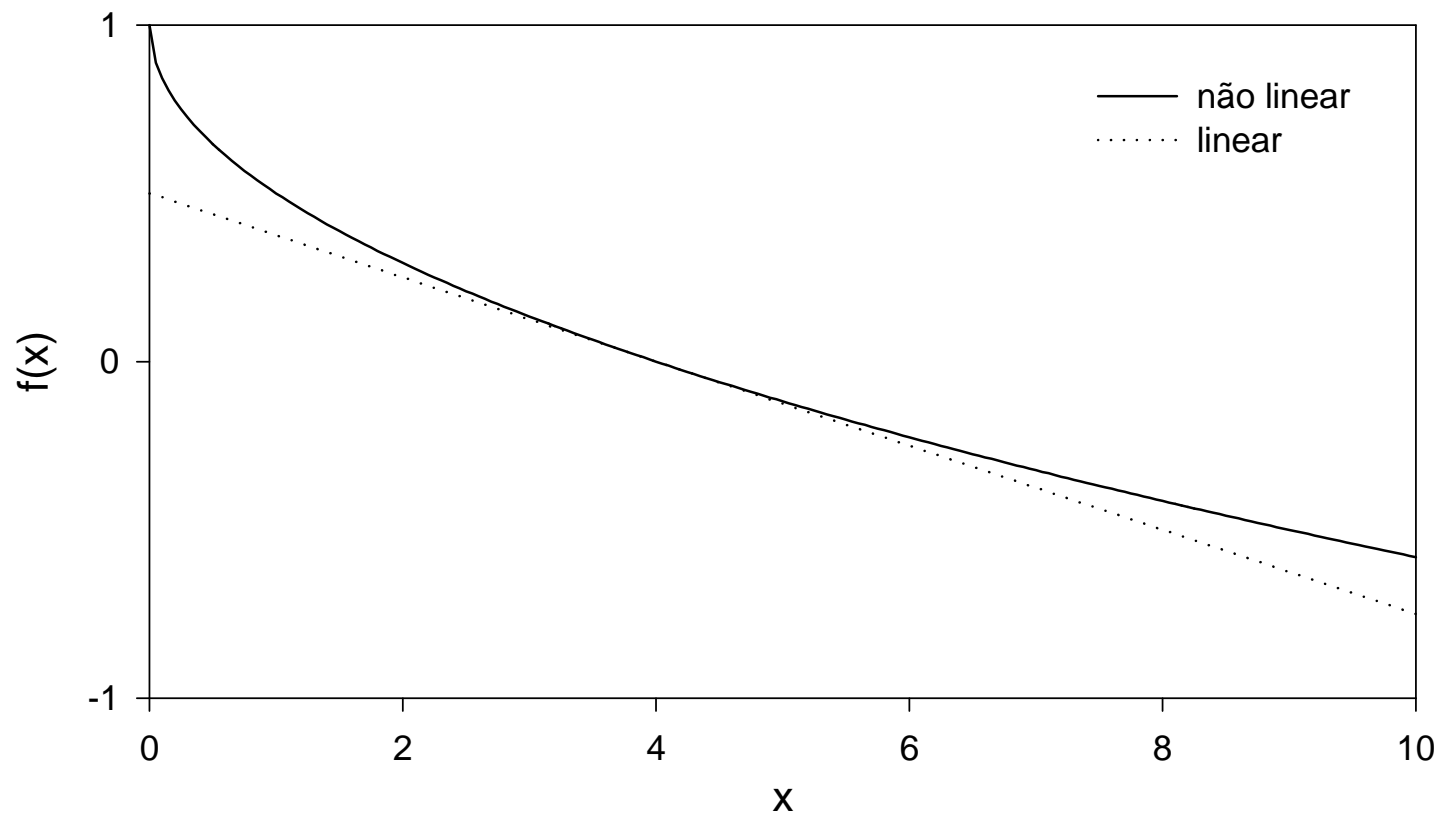
Ferramentas de Análise

Na aula passada...

1) Notação vetorial

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{C}) \quad \text{com } \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0$$

2) Linearização de Funções



O caso multidimensional, isto é, $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

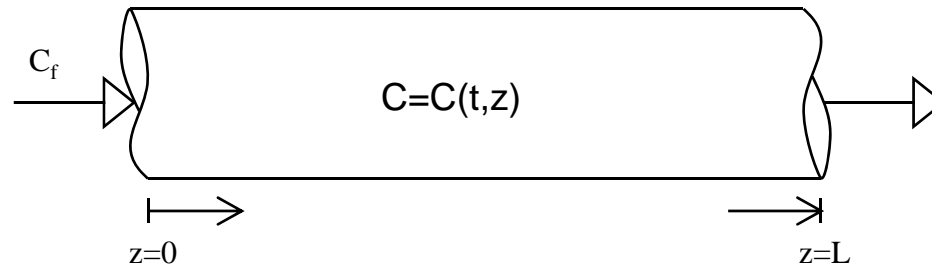
$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \cancel{\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)} + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + \cancel{\text{T.O.S.}}$$

onde:

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \text{matriz jacobiana do sistema}$$

3) Discretização de EDPs

Consideremos o modelo do PFR com dispersão axial:



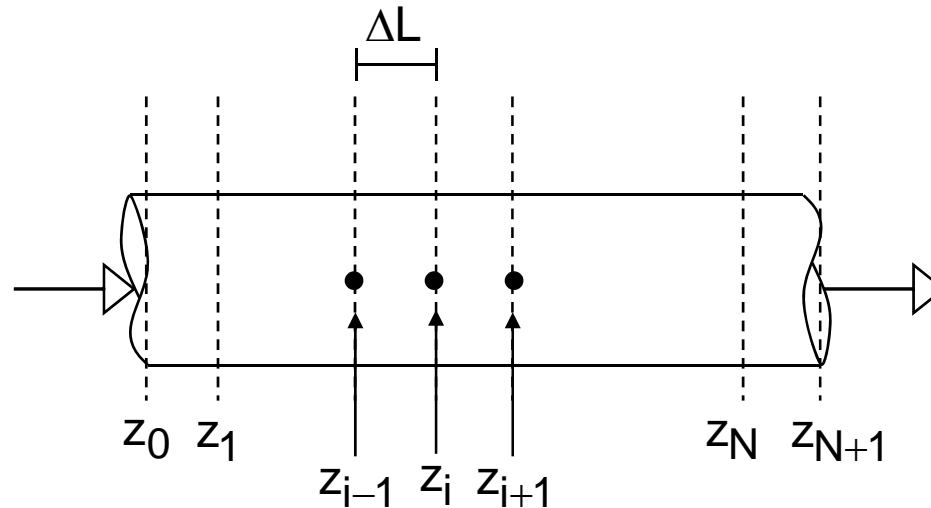
$$\frac{\partial C(t,z)}{\partial t} + v_z \frac{\partial C(t,z)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial z^2} - r(t,z) = 0$$

$$C(0,z) = C_{\text{inicial}}(z)$$

$$C(t,0) - \frac{D}{v_z} \left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=0} = C_f(t)$$

$$\frac{D}{v_z} \left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=L} = 0$$

Para $r(t,z)$ não-linear, a EDP pode não apresentar solução analítica. Assim, um método numérico pode ser necessário para a resolução da mesma. Como possível abordagem, o domínio z , *contínuo*, pode ser *discretizado*:



Em vez de resolvermos:

$$\frac{\partial C(t,z)}{\partial t} + v_z \frac{\partial C(t,z)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial z^2} - r(t,z)$$

com $0 < z < L$

Podemos resolver:

$$\left. \frac{\partial C(t,z)}{\partial t} \right|_{z=z_i} + v_z \left. \frac{\partial C(t,z)}{\partial z} \right|_{z=z_i} - D \left. \frac{\partial^2 C(t,z)}{\partial z^2} \right|_{z=z_i} - r(t,z) \Big|_{z=z_i}$$

para $i=1, \dots, N$

Em cada ponto $z=z_i$, as derivadas podem ser aproximadas, por ex.:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{z=z_i} \approx \frac{dC_i}{dt}$$

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=z_i} \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta L}$$

$$\left. \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right|_{z=z_i} \approx \frac{\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=z_i+\Delta L/2} - \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=z_i-\Delta L/2}}{\Delta L} \approx \frac{\frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta L} - \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta L}}{\Delta L} = \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta L^2}$$

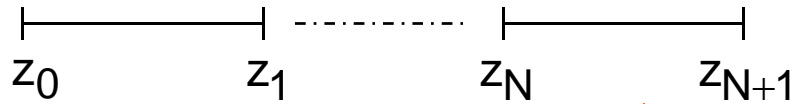
Assim, a EDP é transformada em um sistema de EDOs:

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{D}{\Delta L^2} (C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}) - \frac{v_z}{2\Delta L} (C_{i+1} - C_{i-1}) + r_i$$

para $i=1, \dots, N$

Equações válidas apenas para o interior do reator!

Agora, a discretização das condições de contorno (usando 1ª ordem para simplificar):



$$\left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=0} \approx \frac{C_1 - C_0}{\Delta L}$$

$$\left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=L} \approx \frac{C_{N+1} - C_N}{\Delta L}$$



$$C(t,0) - \frac{D}{v_z} \left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=0} = C_f(t)$$

$$\frac{D}{v_z} \frac{C_{N+1} - C_N}{\Delta L} = 0$$

$$C_0 - \frac{D}{v_z} \frac{C_1 - C_0}{\Delta L} = C_f$$

$$\therefore C_{N+1} = C_N$$

$$\therefore C_0 = \left(1 + \frac{D}{v_z \Delta L} \right)^{-1} \left(\frac{D}{v_z \Delta L} C_1 + C_f \right)$$

Se usássemos aproximação de 2ª ordem:

$$\left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=0} \approx \frac{-3C_0 + 4C_1 - C_2}{2\Delta L}$$

$$\left. \frac{dC(t,z)}{dz} \right|_{z=L} \approx \frac{3C_{N+1} - 4C_N - C_{N-1}}{2\Delta L}$$

Portanto, na forma discretizada final, temos:

$$\frac{dC_1(t)}{dt} = \frac{D}{\Delta L^2}(C_2 - 2C_1 + C_0) - \frac{v_z}{2\Delta L}(C_2 - C_0) + r_1$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{D}{\Delta L^2}(C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}) - \frac{v_z}{2\Delta L}(C_{i+1} - C_{i-1}) + r_i \quad \text{para } i=2, \dots, N-1$$

$$\frac{dC_N(t)}{dt} = \frac{D}{\Delta L^2}(C_{N+1} - 2C_N + C_{N-1}) - \frac{v_z}{2\Delta L}(C_{N+1} - C_{N-1}) + r_N$$

com:
$$C_0 = \left(1 + \frac{D}{v_z \Delta L}\right)^{-1} \left(\frac{D}{v_z \Delta L} C_1 + C_f\right)$$

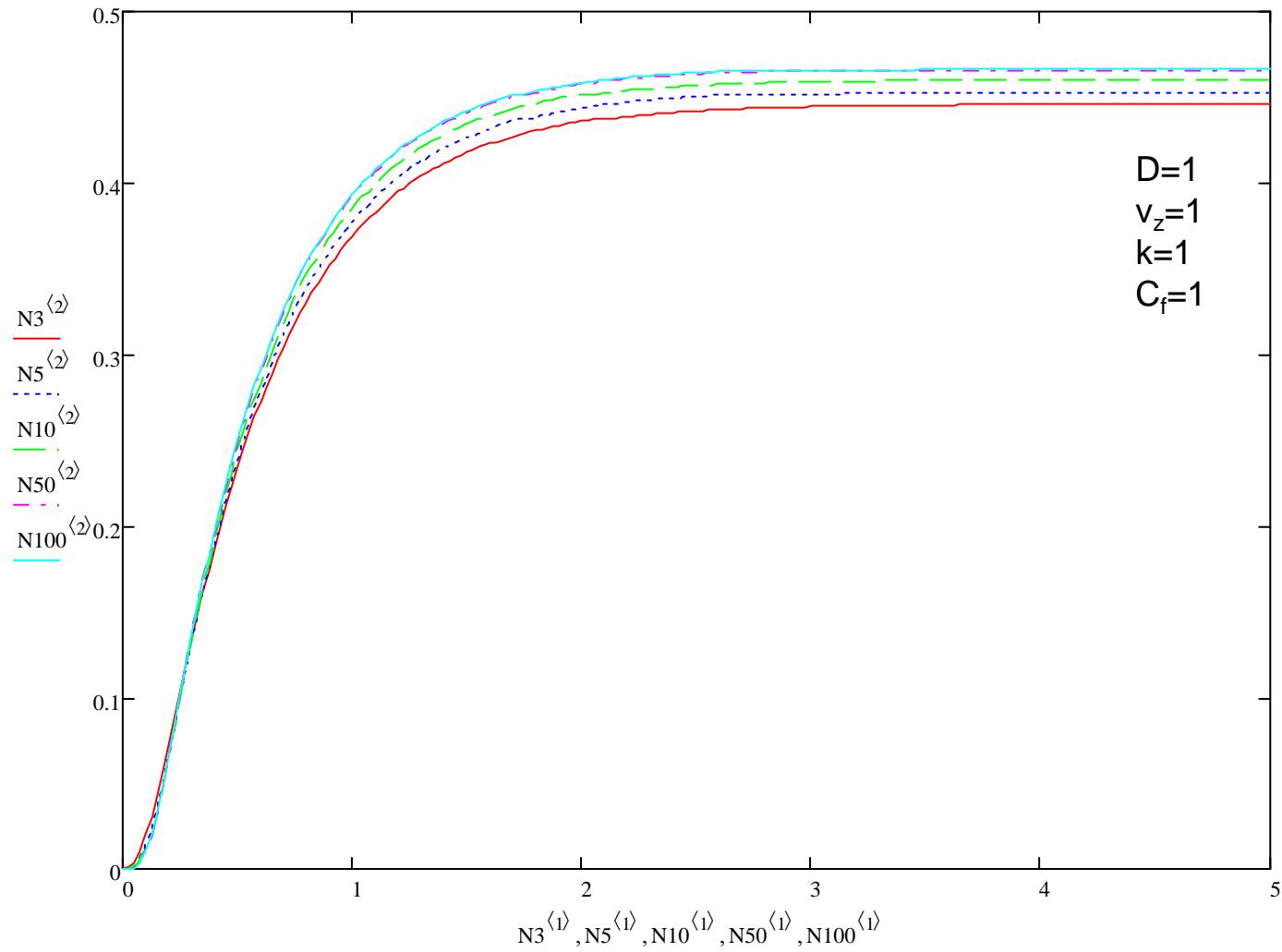
$$C_{N+1} = C_N$$

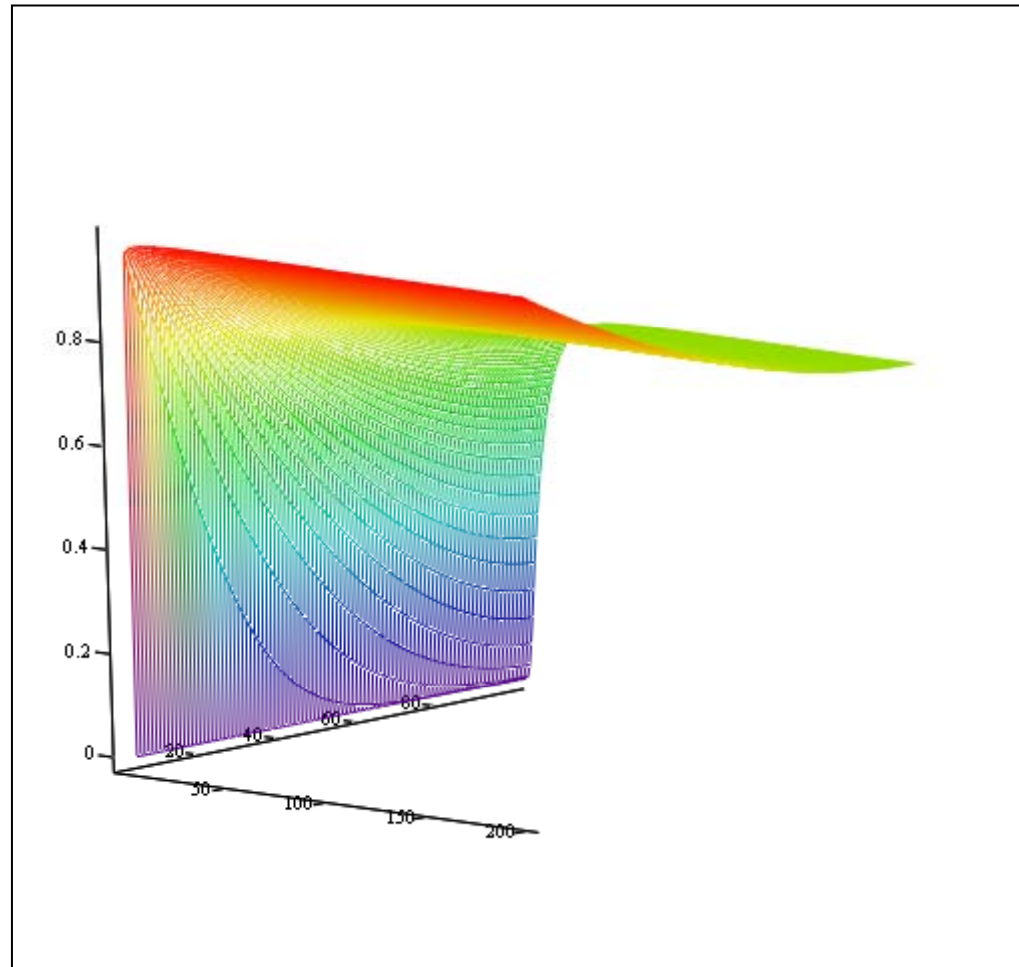
$$C_i(0) = C_{i0} \quad \text{para } i=1, \dots, N$$

Observe, agora, que, mesmo para o caso distribuído, podemos representar o sistema dinâmico por:

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{C}) \quad \text{com } \mathbf{C}(0) = \mathbf{C}_0$$

Exemplo: Reação de primeira ordem ($r=kC$)





M_1

4) Adimensionamento de Equações

O adimensionamento de variáveis e equações de modelos de processos tem os seguintes objetivos básicos:

- Simplificar a notação;
- Dar um significado às variáveis que não seja atrelado a um determinado sistema de unidades;
- Introduzir grupamentos adimensionais relevantes;
- Facilitar, em alguns casos, a implementação de métodos numéricos para a resolução das equações.

Deseja-se que o adimensionamento do modelo facilite sua análise e não o contrário, e que os *grupos adimensionais* possam dar uma ideia mais clara de *ordens de grandeza* entre os termos presentes em uma dada equação ou entre equações.

Exemplo: O modelo do CSTR não-isotérmico

$$V \frac{dC}{dt} = qC_f - qC - Vk(T)C \quad (1)$$

$$VC_p \frac{dT}{dt} = qC_p(T_f - T) + (-\Delta H) Vk(T)C - Ah(T - T_{cf}) \quad (2)$$

com:

$$k(T) = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$$

Observe que este modelo apresenta:

2 variáveis de estado (C e T),

4 variáveis de entrada *potenciais* (q, C_f, T_f, T_{cf}),

8 parâmetros (V, k₀, C_p, E, R, ΔH, h, A).

Sejam C* e T* a concentração e temperatura de referência, respectivamente, usadas para adimensionar a concentração e temperatura no modelo do reator.

Tabela 1. Unidades das variáveis e parâmetros no SI.

Variável/Parâmetro	Unidade no SI
C, C_f	mol/m^3
T, T_f, T_{cf}	K
t	S
V	m^3
Q	m^3/s
k, k_0	$1/\text{s}$
C_p	$\text{J}/(\text{m}^3 \text{K})$
ΔH	J/mol
h	$\text{J}/(\text{m}^3 \text{K s})$
A	m^2
E	J/mol
R	$\text{J}/(\text{mol K})$

O primeiro passo é dividir a Equação (1) por qC^* e a Equação (2) por qC_pT^* , isto é:

$$\frac{V}{q} \frac{d}{dt} \left(\frac{C}{C^*} \right) = \left(\frac{C_f}{C^*} - \frac{C}{C^*} \right) - \frac{V}{q} k(T^*) \frac{k(T)}{k(T^*)} \frac{C}{C^*}$$

$$\frac{V}{q} \frac{d}{dt} \left(\frac{T}{T^*} \right) = \left(\frac{T_f}{T^*} - \frac{T}{T^*} \right) + \frac{(-\Delta H)C^*}{C_p T^*} \frac{V}{q} k(T^*) \frac{k(T)}{k(T^*)} \frac{C}{C^*} - \frac{hA}{qC_p} \left(\frac{T}{T^*} - \frac{T_{cf}}{T^*} \right)$$

Observe também que:

$$\frac{k(T)}{k(T^*)} = \frac{k_0 e^{-\frac{E}{RT}}}{k_0 e^{-\frac{E}{RT^*}}} = e^{-\frac{E}{RT^*} \left(\frac{T^*}{T} - 1 \right)}$$

Podemos, agora, definir novas variáveis e parâmetros adimensionais para o problema:

$$u = \frac{C}{C^*} \quad v = \frac{T}{T^*} \quad \theta = \frac{V}{q} \quad \tau = \frac{t}{\theta} \quad v_f = \frac{T_f}{T^*} \quad v_{cf} = \frac{T_{cf}}{T^*}$$

$$B = \frac{(-\Delta H)C^*}{C_p T^*} \quad D_a = \theta k(T^*) \quad \beta = \frac{hA}{qC_p} \quad \gamma = \frac{E}{RT^*}$$

Assim, o sistema de equações do modelo fica:

$$\frac{du}{d\tau} = (u_f - u) - D_a u e^{\gamma \left(1 - \frac{1}{v}\right)}$$
$$\frac{dv}{d\tau} = (v_f - v) + B D_a u e^{\gamma \left(1 - \frac{1}{v}\right)} - \beta (v - v_{cf})$$

Observe, agora, que modelo o adimensional apresenta:

2 variáveis de estado (u, v),
3 variáveis de entrada (u_f, v_f, v_{cf}),
4 parâmetros (D_a, B, γ, β).

Modelo original:

2 variáveis de estado (C e T),
4 variáveis de entrada (q, C_f, T_f, T_{cf}),
8 parâmetros ($V, k_0, C_p, E, R, \Delta H, h, A$).

Além disso, com uma escolha conveniente dos valores de referência, C^* e T^* , por exemplo, $C^*=C_f$ e $T^*=T_f$, teríamos $u_f=1$ e $v_f=1$, o sistema apresentaria:

2 variáveis de estado (u, v),
1 variável de entrada (v_{cf}),
4 parâmetros (Da, B, γ, β).