Exemplos Ilustrativos de EDO com Problemas de Valores no Contorno

1-) Modelo estacionário do reator com dispersão isotérmico.

Neste caso o modelo é constituído por uma equação diferencial ordinária de segunda ordem que descreve a variação com z da concentração do reagente:

$\frac{dy(z)}{dz} = \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{d^2 y(z)}{dz^2} - Da \cdot g\left[y(z)\right]$, definida no domínio: $0<z<1$ e sujeita às condições de contorno:

CC1: na entrada do reator: z =0: $-\frac{1}{Pe_m} \cdot \left.\frac{dy(z)}{dz}\right|_{z=0} + \left.y(z)\right|_{z=0} = y_f$

CC2: na saída do reator: z = 1: $\frac{1}{Pe_m} \cdot \left.\frac{dy(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0$.

2-) Modelo estacionário do reator com dispersão axial adiabático.

Neste caso o modelo é constituído por duas equações diferenciais ordinárias, em z, de segunda ordem que descrevem os balanços estacionários de massa do reagente e de energia no interior do reator, assim:

$$\begin{cases} \frac{dy(z)}{dz} = \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{d^2 y(z)}{dz^2} - Da \cdot g\left[y(z)\right] \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z)}\right)\right] \\ \frac{d\theta(z)}{dz} = \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d^2 \theta(z)}{dz^2} + \beta \cdot Da \cdot g\left[y(z)\right] \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z)}\right)\right] \end{cases}$$

Definidas no domínio: $0 < z < 1$ e sujeitas às condições de contorno:

CC1: na entrada do reator: z =0: $\begin{cases} -\frac{1}{Pe_m} \cdot \left.\frac{dy(z)}{dz}\right|_{z=0} + \left.y(z)\right|_{z=0} = y_f \\ -\frac{1}{Pe_h} \cdot \left.\frac{d\theta(z)}{dz}\right|_{z=0} + \left.\theta(z)\right|_{z=0} = \theta_f \end{cases}$

CC2: na saída do reator: z = 1: $\begin{cases} \frac{1}{Pe_m} \cdot \left.\frac{dy(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0 \\ \frac{1}{Pe_h} \cdot \left.\frac{d\theta(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0 \end{cases}$

Multiplicando a equação de balanço do reagente por β e adicionando a equação resultante à equação de balanço de energia, tem-se:

$\frac{d\theta(z)}{dz} + \beta \cdot \frac{dy(z)}{dz} = \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d^2\theta(z)}{dz^2} + \beta \cdot \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{d^2 y(z)}{dz^2}$, ou seja:

$$\frac{d}{dz}\left[\theta(z) + \beta \cdot y(z) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz} - \frac{\beta}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz}\right] = 0$$

Integrando essa equação em z e aplicando as duas condições de contorno, obtém-se:

$$\theta(z) + \beta \cdot y(z) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz} - \beta \cdot \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} = \theta_f + \beta \cdot y_f = \theta(1) + \beta \cdot y(1)$$

O que permite determinar $\theta(z)$ pela equação diferencial de primeira ordem:

$$\frac{d\theta(z)}{dz} = Pe_h \cdot \left[\theta(z) - \theta_f + \beta \cdot \left(y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} - y_f \right) \right]$$

Associando a essa equação a condição de contorno: $\theta(1) = \theta_f + \beta \cdot \left[y_f - y(1) \right]$.

Para resolver essas equações diferenciais são definidas as seguintes *variáveis de estado*: $x_1(z) = y(z)$; $x_2(z) = y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz}$ e $x_3(z) = \theta(z)$, resultando em:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1(z)}{dz} = \dfrac{dy(z)}{dz} = Pe_m \cdot \left[x_1(z) - x_2(z) \right] \\ \dfrac{dx_2(z)}{dz} = \dfrac{d}{dz}\left[y(z) - \dfrac{1}{Pe_m} \cdot \dfrac{dy(z)}{dz} \right] = -Da \cdot g\left[x_1(z) \right] \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \dfrac{1}{x_3(z)} \right) \right] \\ \dfrac{dx_3(z)}{dz} = Pe_h \cdot \left\{ x_3(z) - \theta_f + \beta \cdot \left[x_2(z) - y_f \right] \right\} \end{cases}$$

Que é um sistema de EDO's de primeira ordem de dimensão três, definido no domínio 0 <z <1, sujeito às condições de contorno:

CC1: na entrada do reator: z =0: $x_2(0) = y_f$;

CC2: na saída do reator: z = 1: $x_1(1) = x_2(1)$ e $x_3(1) = \theta_f + \beta \cdot \left[y_f - x_1(1) \right]$

3-)<u>Modelo estacionário do reator com dispersão axial não adiabático</u>.

Neste caso o modelo é constituído por três equações diferenciais ordinárias, em z, as duas primeiras de segunda ordem e a última de primeira ordem, que descrevem respectivamente os balanços estacionários de massa do reagente e de energia no interior do reator e o balanço de energia no casco de refrigeração, assim:

$$\begin{cases} \dfrac{dy(z)}{dz} = \dfrac{1}{Pe_m} \cdot \dfrac{d^2 y(z)}{dz^2} - Da \cdot g\left[y(z) \right] \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \dfrac{1}{\theta(z)} \right) \right] \\ \dfrac{d\theta(z)}{dz} = \dfrac{1}{Pe_h} \cdot \dfrac{d^2\theta(z)}{dz^2} + \beta \cdot Da \cdot g\left[y(z) \right] \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \dfrac{1}{\theta(z)} \right) \right] - \lambda \cdot \left[\theta(z) - \theta_r(z) \right] \\ -\dfrac{d\theta_r(z)}{dz} = \lambda_r \cdot \left[\theta(z) - \theta_r(z) \right] \quad \text{(contra-corrente)} \end{cases}$$

O sistema acima é definido no domínio: 0 < z < 1 e está associado às condições de contorno:

CC1: na entrada do reator: z =0: $\begin{cases} -\dfrac{1}{Pe_m} \cdot \left.\dfrac{dy(z)}{dz}\right|_{z=0} + \left. y(z) \right|_{z=0} = y_f \\ -\dfrac{1}{Pe_h} \cdot \left.\dfrac{d\theta(z)}{dz}\right|_{z=0} + \left. \theta(z) \right|_{z=0} = \theta_f \end{cases}$

CC2: na saída do reatorr: $z = 1$: $\begin{cases} \dfrac{1}{Pe_m}\cdot\left.\dfrac{dy(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0 \\ \dfrac{1}{Pe_h}\cdot\left.\dfrac{d\theta(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0 \\ \theta_r(1) = \theta_{r,f} \end{cases}$

A temperatura do refrigerante pode ser expressa em função da temperatura e da concentração no tubo e de suas respectivas derivadas adicionando a primeira equação multiplicada por β e a segunda equação à ultima equação multiplicada por λ/λ_r , de acordo com:

$$\frac{d}{dz}\left[\beta\cdot\left(y(z)-\frac{1}{Pe_m}\cdot\frac{dy(z)}{dz}\right)+\left(\theta(z)-\frac{1}{Pe_h}\cdot\frac{d\theta(z)}{dz}\right)-\frac{\lambda}{\lambda_r}\cdot\theta_r(z)\right]=0$$

Integrando essa equação de z (genérico) a z=1 e utilizando a CC2, resulta:

$$\beta\cdot\left(y(z)-\frac{1}{Pe_m}\cdot\frac{dy(z)}{dz}\right)+\left(\theta(z)-\frac{1}{Pe_h}\cdot\frac{d\theta(z)}{dz}\right)-\frac{\lambda}{\lambda_r}\cdot\theta_r(z)=\beta\cdot y_{saida}+\theta_{saida}-\frac{\lambda}{\lambda_r}\theta_{r,f}$$

Em que: $y_{saida}=y(1)$ e $\theta_{saida}=\theta(1)$. Essa última equação permite expressar:

$$\theta_r(z)=\theta_{r,f}+\frac{\lambda_r}{\lambda}\left[\beta\cdot\left(y(z)-\frac{1}{Pe_m}\cdot\frac{dy(z)}{dz}-y_{saida}\right)+\left(\theta(z)-\frac{1}{Pe_h}\cdot\frac{d\theta(z)}{dz}-\theta_{saida}\right)\right]$$

Aplicando essa expressão em z=0, utilizando CC1 e identificando: $\theta_r(0)=\theta_{r,saida}$ resulta:

$$\theta_{r,saida}=\theta_{r,f}+\frac{\lambda_r}{\lambda}\left[\beta\cdot\left(y_f-y_{saida}\right)-\left(\theta_{saida}-\theta_f\right)\right]$$

Essa equação traduz o *balanço global de energia* do sistema (reator+casco de refrigeração). O termo de troca entre o tubo e o casco de refrigeração pode então ser expresso na forma:

$$\lambda\cdot\left[\theta(z)-\theta_r(z)\right]=\lambda\cdot\left[\theta(z)-\theta_{r,f}\right]+\lambda_r\cdot\left[\beta\cdot\left(y(z)-\frac{1}{Pe_m}\cdot\frac{dy(z)}{dz}-y_{saida}\right)+\left(\theta(z)-\frac{1}{Pe_h}\cdot\frac{d\theta(z)}{dz}-\theta_{saida}\right)\right]$$

E os balanços no reator assumem a forma:

$$\begin{cases} \dfrac{dy(z)}{dz}=\dfrac{1}{Pe_m}\cdot\dfrac{d^2y(z)}{dz^2}-Da\cdot g\left[y(z)\right]\cdot\exp\left[\gamma\cdot\left(1-\dfrac{1}{\theta(z)}\right)\right] \\ \dfrac{d\theta(z)}{dz}=\dfrac{1}{Pe_h}\cdot\dfrac{d^2\theta(z)}{dz^2}+\beta\cdot Da\cdot g\left[y(z)\right]\cdot\exp\left[\gamma\cdot\left(1-\dfrac{1}{\theta(z)}\right)\right]-\lambda\cdot\left[\theta(z)-\theta_{r,f}\right]+ \\ \quad -\lambda_r\left[\beta\cdot\left(y(z)-\dfrac{1}{Pe_m}\cdot\dfrac{dy(z)}{dz}-y_{saida}\right)+\left(\theta(z)-\dfrac{1}{Pe_h}\cdot\dfrac{d\theta(z)}{dz}-\theta_{saida}\right)\right] \end{cases}$$

Definidas no domínio: $0 < z < 1$. A esse sistema associam-se as condições de contorno:

CC1: na entrada do reator: z =0: $\begin{cases} -\dfrac{1}{Pe_m}\cdot\left.\dfrac{dy(z)}{dz}\right|_{z=0}+\left.y(z)\right|_{z=0}=y_f \\ -\dfrac{1}{Pe_h}\cdot\left.\dfrac{d\theta(z)}{dz}\right|_{z=0}+\left.\theta(z)\right|_{z=0}=\theta_f \end{cases}$

CC2: na saída do reator: z = 1: $\begin{cases} \left.\dfrac{1}{Pe_m}\cdot\dfrac{dy(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0 \\ \left.\dfrac{1}{Pe_h}\cdot\dfrac{d\theta(z)}{dz}\right|_{z=1} = 0 \end{cases}$

e o balanço global de energia: $\theta_{r,saida} = \theta_{r,f} + \dfrac{\lambda_r}{\lambda}\left[\beta\cdot\left(y_f - y_{saida}\right) - \left(\theta_{saida} - \theta_f\right)\right]$

Para resolver esse sistema de equações diferenciais de segunda ordem, definem-se as seguintes *variáveis de estado*:

$x_1(z) = y(z)$; $x_2(z) = y(z) - \dfrac{1}{Pe_m}\cdot\dfrac{dy(z)}{dz}$; $x_3(z) = \theta(z)$ e $x_4(z) = \theta(z) - \dfrac{1}{Pe_h}\cdot\dfrac{d\theta(z)}{dz}$

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1(z)}{dz} = Pe_m\cdot\left[x_1(z) - x_2(z)\right] \\ \dfrac{dx_2(z)}{dz} = -Da\cdot g\left[x_1(z)\right]\cdot\exp\left[\gamma\cdot\left(1 - \dfrac{1}{x_3(z)}\right)\right] \\ \dfrac{dx_3(z)}{dz} = Pe_h\cdot\left[x_3(z) - x_4(z)\right] \\ \dfrac{dx_4(z)}{dz} = \beta\cdot Da\cdot g\left[x_1(z)\right]\cdot\exp\left[\gamma\cdot\left(1 - \dfrac{1}{x_3(z)}\right)\right] - \lambda\left[x_3(z) - \theta_{r,f}\right] + \\ \quad -\lambda_r\left[\beta\cdot\left(x_2(z) - y_{saida}\right) + \left(x_4(z) - \theta_{saida}\right)\right] \end{cases}$$

Sistema definido no domínio $0 < z < 1$ e sujeito às condições de contorno:

CC1: na entrada do reator: z =0: $x_2(0) = y_f$ e $x_4(0) = \theta_f$

CC2: na saída do reator: z = 1: $x_1(1) = x_2(1) = y_{saida}$ e $x_3(1) = x_4(1) = \theta_{saida}$

e o balanço global de energia: $\theta_{r,saida} = \theta_{r,f} + \dfrac{\lambda_r}{\lambda}\cdot\left[\beta\cdot\left(y_f - y_{saida}\right) - \left(\theta_{saida} - \theta_f\right)\right]$.

4-) Exemplo 7.2 da página 179 do livro de Ascher & Petzold .

$$\frac{d\boldsymbol{y}(t)}{dt} = \boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{y}(t) + \boldsymbol{q}(t)$$

Sendo: $\boldsymbol{A}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -2\cdot\lambda^3 & \lambda^2 & 2\cdot\lambda \end{pmatrix}$, com $y_1(0) = b_1$, $y_1(1) = b_2$ e $y_2(1) = b_3$.

A solução analítica do problema é: $\boldsymbol{y}(t) = \left[u(t), u'(t), u''(t)\right]$, em que:

$$u(t) = \frac{e^{\lambda\cdot(t-1)} + e^{2\cdot\lambda\cdot(t-1)} + e^{-\lambda\cdot t}}{2 + e^{-\lambda}} + \cos(\pi\cdot t).$$

Considerando o problema para os valores $\lambda = 1$ e $\lambda = 10$.

5-) Exemplo 2.2 da página 36 do livro de Kubiccek & Hlavacek.

$\dfrac{d^2y(x)}{dx^2}+\dfrac{1}{x}\cdot\dfrac{dy(x)}{dx}=-\delta\cdot e^{y(x)}$, definida no domínio: 0<*x*<1 e sujeita às condições de contorno: CC1: *x* =0: $\left.\dfrac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0}=0$ e CC2: *x* = 1: $y(1)=0$.

6-) <u>Exemplo 2.3 da página 36 do livro de Kubiccek & Hlavacek – Modelo Estacionário de uma Partícula de Catalisador Não-Isotérmica</u>.

$\dfrac{d^2y(x)}{dx^2}+\dfrac{s}{x}\cdot\dfrac{dy(x)}{dx}=\phi^2\cdot y(x)\cdot\exp\left[\dfrac{\gamma\cdot\beta\cdot\left[1-y(x)\right]}{1+\beta\cdot\left[1-y(x)\right]}\right]$, no domínio: $0\leq x<1$ e sujeita às condições de contorno: CC1: *x* =0: $\left.\dfrac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0}=0$ e CC2: *x* = 1: $y(1)=1$. Sendo *s* (fator de forma) = $\begin{cases}0\\1\\2\end{cases}$