

Exemplos Ilustrativos de EDO com Problemas de Valores no Contorno

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:

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

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

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

Resolução:

Caso Linear: $g[y(z)] = y(z)$ os valores característicos do problema são as raízes de:

$$P_2(\lambda) = \lambda^2 - Pe_m \cdot \lambda - Da \cdot Pe_m = 0 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = \frac{Pe_m}{2} \left(1 - \sqrt{1 + 4 \cdot \frac{Da}{Pe_m}} \right) \\ \lambda_2 = Pe_m - \lambda_1 \end{cases}$$

$$\text{Assim: } y(z) = c_1 \cdot e^{\lambda_1 \cdot z} + c_2 \cdot e^{\lambda_2 \cdot z} \text{ sendo: } \begin{pmatrix} 1 - \frac{\lambda_1}{Pe_m} & 1 - \frac{\lambda_2}{Pe_m} \\ \lambda_1 \cdot e^{\lambda_1} & \lambda_2 \cdot e^{\lambda_2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_f \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para resolver numericamente as equações diferenciais desse exemplo, definem-se as seguintes *variáveis de estado*: $x_1(z) = y(z)$ e $x_2(z) = y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz}$, resultando

$$\text{em: } \begin{cases} \frac{dx_1(z)}{dz} = \frac{dy(z)}{dz} = Pe_m \cdot [x_1(z) - x_2(z)] \\ \frac{dx_2(z)}{dz} = \frac{d}{dz} \left[y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \right] = -Da \cdot g[x_1(z)] \end{cases}$$

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

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: x_2(0) = y_f;$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: x_1(1) = x_2(1)$$

O problema é resolvido arbitrando: $x_1(1) = x_2(1) = y_{saída}$ e integrando-se numericamente a equação de $z=1$ a $z=0$. O valor de x_2 em $z=0$ é então y_f .

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:

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

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

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

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

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

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

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

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: $\theta(1) = \theta_f + \beta \cdot [y_f - y(1)]$.

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:

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

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 $x_3(1) = \theta_f + \beta \cdot [y_f - x_1(1)]$

3-) Modelo estacionário do reator com dispersão axial não adiabático.

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:

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

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

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

$$\text{CC2: na saída do reator: } z = 1: \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=1} = 0 \\ \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz} \Big|_{z=1} = 0 \\ \theta_r(1) = \theta_{r,f} \end{array} \right.$$

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 última 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:

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

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

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

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

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

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:

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

E os balanços no reator assumem a forma:

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

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

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

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

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

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

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

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

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: $z = 1$: $x_1(1) = x_2(1) = y_{saída}$ e $x_3(1) = x_4(1) = \theta_{saída}$

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

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

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

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

A solução analítica do problema é: $y(t) = [u(t), u'(t), u''(t)]$, em que:

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

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

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

$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \cdot \frac{dy(x)}{dx} = -\delta \cdot e^{y(x)}$, definida no domínio: $0 < x < 1$ e sujeita às condições de

contorno: CC1: $x=0$: $\left. \frac{dy(x)}{dx} \right|_{x=0} = 0$ e CC2: $x=1$: $y(1) = 0$.

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

$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{s}{x} \cdot \frac{dy(x)}{dx} = \phi^2 \cdot y(x) \cdot \exp \left[\frac{\gamma \cdot \beta \cdot [1 - y(x)]}{1 + \beta \cdot [1 - y(x)]} \right]$, no domínio: $0 \leq x < 1$ e sujeita às

condições de contorno: CC1: $x=0$: $\left. \frac{dy(x)}{dx} \right|_{x=0} = 0$ e CC2: $x=1$: $y(1) = 1$. Sendo s (fator

de forma) = $\begin{cases} 0 \\ 1 \\ 2 \end{cases}$