

Exemplos Ilustrativos de EDO com Problemas de Valores no Contorno

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:

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

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:

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

E os balanços no reator assumem a forma:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Para resolver este sistema deve-se *buscar* os valores de y_{saida} e θ_{saida} que levem em $z=0$ às condições de entrada [CC1]: $x_2(z)|_{z=0} = y_f$ e $x_4(z)|_{z=0} = \theta_f$. Devido à natureza assintótica do perfil de concentração é mais difícil a busca do valor de y_{saida} do que o de busca de $\theta_{r,saida}$, desse modo recorre-se à equação de balanço global de energia para calcular, para cada par de valores de θ_{saida} e $\theta_{r,saida}$, o valor de y_{saida} , de acordo com:

$$y_{saida} = y_f - \frac{1}{\beta} \left[\frac{\lambda}{\lambda_r} (\theta_{r,saida} - \theta_{r,f}) + (\theta_{saida} - \theta_f) \right]$$

Além disso, as seguintes condições devem ser respeitadas ao longo do processo iterativo:

- (i) $\theta_f < \theta_{saida} < \theta_f + \beta \cdot y_f$ [limite superior expressa o valor máximo da temperatura de saída do reator na condição de operação adiabática];
(ii) $0 < y_{saida} < y_f$ [pois y é a concentração adimensional do reagente], impondo esta última desigualdade à expressão de y_{saida} , deve-se ter:

$$\theta_{r,f} < \theta_{r,saida} < \theta_{r,f} + \frac{\lambda_r}{\lambda} [\beta \cdot y_f - (\theta_{saida} - \theta_f)].$$

Dessa forma, no procedimento iterativo de busca adotam-se:

$$\theta_{saida} = \theta_f + [\beta \cdot y_f] \cdot p \quad \text{e} \quad \theta_{r,saida} = \theta_{r,f} + \left\{ \frac{\lambda_r}{\lambda} \cdot (1-p) \cdot \beta \cdot y_f \right\} q = \theta_{r,f} + \frac{\lambda_r}{\lambda} \cdot \hat{q} \cdot \beta \cdot y_f, \quad \text{em}$$

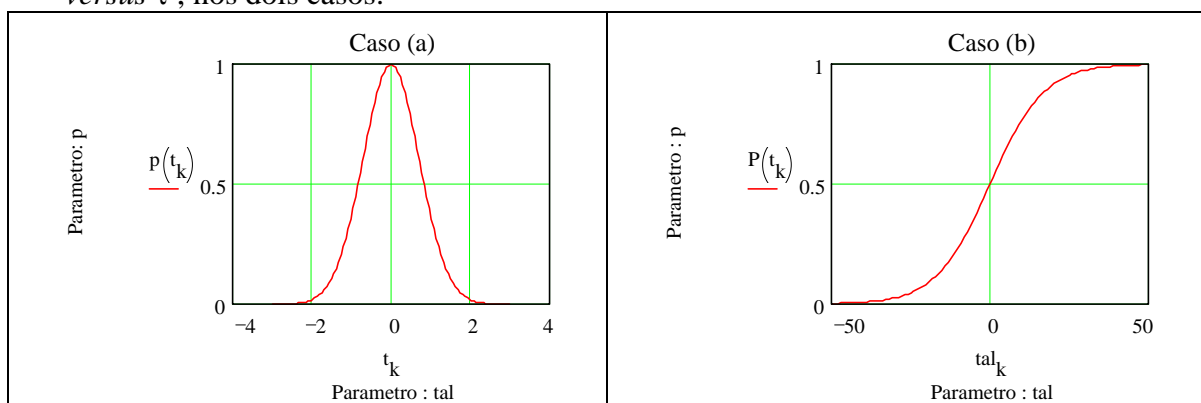
que p e \hat{q} são dois parâmetros que satisfazem a: $0 < p < 1$ e $0 < \hat{q} < 1$, o que assegura a satisfação das restrições físicas do problema.

A permanência dos parâmetros p e \hat{q} dentro do intervalo (0,1) pode ser obtida expressando-os em uma das duas formas:

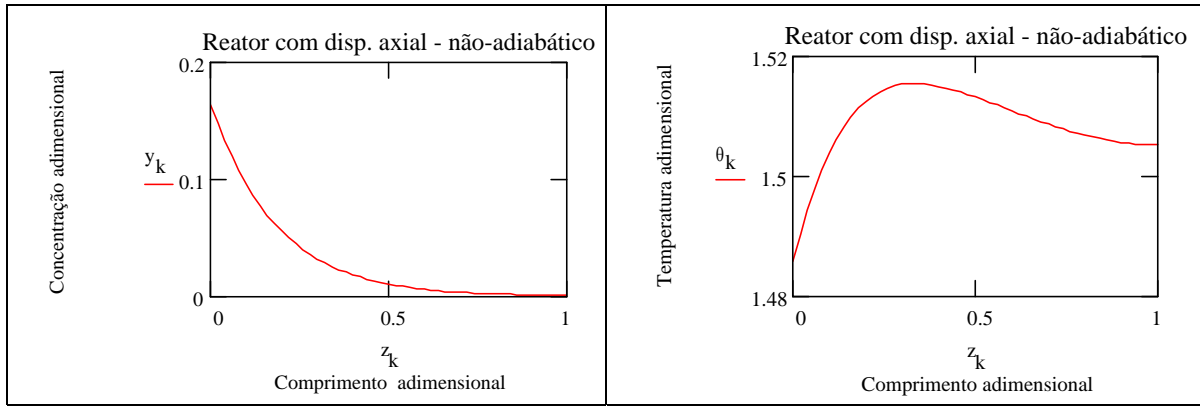
(a) $p = \exp[-\tau^2]$ e $\hat{q} = \exp[-\eta^2]$;

(b) $p = \frac{1}{1 + \exp(-2 \cdot \tau)}$ e $\hat{q} = \frac{1}{1 + \exp(-2 \cdot \eta)}$.

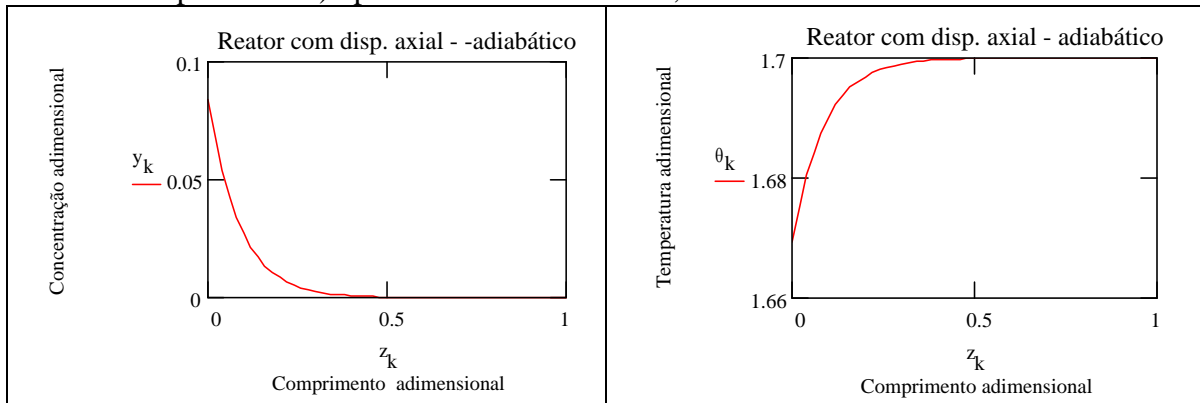
Não se impondo restrição alguma aos novos parâmetros: τ e η (além de ambos serem reais!). Para ilustrar este procedimento mostram-se abaixo os gráficos de p versus τ , nos dois casos.



Este procedimento de busca foi aplicado na determinação dos perfis abaixo:



O efeito da refrigeração pode ser visualizado traçando os perfis do reator (com os mesmos parâmetros) operando adiabaticamente, mostrados abaixo:



Note que as escalas verticais das figuras são distintas!.

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