SEXTO TESTE - 14 DE JULHO DE 2010 - A

Considere o modelo cinético de reação: $A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B \xrightarrow{k_3} C$ conduzida em batelada em um reator de mistura, iniciando-se com o componente A puro. A variação da concentração de A e de B com o tempo é descrito (em forma adimensional) pelo sistema de EDO's:

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = -\frac{k_1}{k_2}\cdot x_1(t) + x_2(t) \quad \text{com } x_1(t)\big|_{t=0} = 1 \text{ e}$$

$$\frac{dx_2(t)}{d\tau} = \frac{k_1}{k_2}\cdot x_1(t) - \left(1+\frac{k_3}{k_2}\right)\cdot x_2(t) \quad \text{com } x_2(t)\big|_{t=0} = 0$$

Em que k_1/k_2=1000 e k_3/k_2 = 2.

> O método do ponto médio aplicado à equação diferencial padrão:
> $$\frac{dy(t)}{dt} = f\left[t, y(t)\right], \text{ para } t_{i-1} < t \le t_i$$
> sujeita à condição inicial: $y(t_{i-1})=u_{i-1}$, dá origem à equação recursiva:
> $$u_i = u_{i-1} + h\cdot f\left[t_{i-1}+\frac{h}{2}, \frac{u_{i-1}+u_i}{2}\right]$$

Tal sistema de EDO é resolvido numericamente pelo método do ponto médio resultando nos seguintes valores:

	tempo	0	0,001	0,002	0,003	0,004	0,005
Passo	x_1	1,000000	0,333555	0,111702	0,037849	0,013263	0,005077
h=0,0010	x_2	0,000000	0,665779	0,886080	0,958089	0,980737	0,986955
Passo	x_1	1,000000	0,360256	0,130193	0,047457	0,017703	0,007001
h=0,0005	x_2	0,000000	0,639025	0,867553	0,948462	0,976288	0,985026

(a) Mostre o procedimento recursivo resultante da aplicação do método do ponto médio ao sistema de EDO do problema;

(b) Sabendo-se que o método do ponto médio é um método de segunda ordem apresente valores refinados de x_1 e x_2 fundamentados nos valores tabelados.

SEXTO TESTE - 14 DE JULHO DE 2010 - B

Considere o modelo cinético de reação: $A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B \xrightarrow{k_3} C$ conduzida em batelada em um reator de mistura, iniciando-se com o componente A puro. A variação da concentração de A e de B com o tempo é descrito (em forma adimensional) pelo sistema de EDO's:

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = -\frac{k_1}{k_2}\cdot x_1(t) + x_2(t) \quad \text{com } x_1(t)\big|_{t=0} = 1 \text{ e}$$

$$\frac{dx_2(t)}{d\tau} = \frac{k_1}{k_2}\cdot x_1(t) - \left(1+\frac{k_3}{k_2}\right)\cdot x_2(t) \quad \text{com } x_2(t)\big|_{t=0} = 0$$

Em que k_1/k_2=1200 e k_3/k_2 = 3.

> O método do ponto médio aplicado à equação diferencial padrão:
> $$\frac{dy(t)}{dt} = f\left[t, y(t)\right], \text{ para } t_{i-1} < t \le t_i$$
> sujeita à condição inicial: $y(t_{i-1})=u_{i-1}$, dá origem à equação recursiva:
> $$u_i = u_{i-1} + h\cdot f\left[t_{i-1}+\frac{h}{2}, \frac{u_{i-1}+u_i}{2}\right]$$

Tal sistema de EDO é resolvido numericamente pelo método do ponto médio resultando nos seguintes valores:

	tempo	0,0000	0,0005	0,0010	0,0015	0,0020	0,0025
Passo	x_1	1,000000	0,538550	0,290214	0,156567	0,084642	0,045934
h=0,00050	x_2	0,000000	0,461104	0,708563	0,841048	0,911658	0,948970
Passo	x_1	1,000000	0,546412	0,298738	0,163498	0,089653	0,049330
h=0,00025	x_2	0,000000	0,453222	0,700018	0,834099	0,906635	0,945567

(a) Mostre o procedimento recursivo resultante da aplicação do método do ponto médio ao sistema de EDO do problema;
(b) Sabendo-se que o método do ponto médio é um método de segunda ordem apresente valores refinados de x_1 e x_2 fundamentados nos valores tabelados.

Questão) A simulação da partida de um reator químico pode ser obtida através da resolução de equação diferencial ordinária (em forma adimensional):

$$\frac{dx(t)}{dt} = 1 - x(t) - \frac{5 \cdot x(t)}{12 + 4 \cdot x(t)} \quad \text{com } x(0) = 0 \,.$$

Esta equação diferencial ordinária é resolvida através do método de Euler explícito com passo de integração fixo. Os valores numéricos de $x(t)$ em t= 1, 2, 3 e 4, com dois diferentes valores do passo de integração, são apresentados na tabela abaixo:

tempo	$x(t)$ com h=0,02	$x(t)$ com h=0,01
1	0,5493	0,5475
2	0,6948	0,6939
3	0,7347	0,7344
4	0,7458	0,7456

(a) Mostre a equação de diferenças resultante da aplicação do método de Euler explícito à equação diferencial original;
(b) Qual o valor máximo admissível do passo de integração?
(c) Baseado nos valores tabelados, obtenha melhores estimativas de $x(t)$ e estime os erros de integração para cada um dos valores de t.

QUESTÃO: Em um biorreator contínuo de tanque agitado, a volume constante V = 10 m^3, e temperatura fixa de 35 °C, com alimentação de substrato a uma concentração de x_{2f} = 4,0 kg/m^3 e taxa F = 3 m^3/h, ocorre uma reação de fermentação descrita pelo seguinte modelo:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{\mu_{\max}\, x_1\, x_2}{k_m + x_2} - \left(\frac{F}{V} + k_d\right) x_1 \qquad \text{com } x_1(0) = 1{,}65$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{F}{V}\left(x_{2f} - x_2\right) - \frac{1}{Y}\left(\frac{\mu_{\max}\, x_1\, x_2}{k_m + x_2}\right) \qquad \text{com } x_2(0) = 0{,}2$$

onde x_1 é a concentração de células (biomassa), x_2 é a concentração de substrato, ambas em kg/m^3, $\mu_{\max}$ = 0,53 h^{-1} é a taxa máxima de crescimento específico, k_d = 0,01 h^{-1} é a constante da taxa de morte celular, e k_m = 0,12 kg/m^3 é a constante de saturação da taxa de crescimento celular e Y = 0,4 é o fator de rendimento da fermentação. **(a)** Sabendo-se que no estado estacionário do sistema a concentração de células é de 1,4829 kg/m^3 e a concentração de substrato é de 0,1691 kg/m^3, mostrar se o método de integração explícita é adequado para resolver a dinâmica do sistema. **(b)** Qual o maior tamanho de passo possível para o método de Euler explícito para que a solução seja estável e não-oscilatória? **(c)** Qual o valor final de t necessário para acompanhar a dinâmica do reator e o menor número de passos de Euler explícito necessários para alacançar este tempo? (**d**) Mostre o resultado de dois passos do método de Euler.