

AVALIAÇÃO DE MÉTODOS NUMÉRICOS NA SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS DE MODELOS DE DIFUSÃO EM PARTÍCULAS DE ADSORVENTES

Gabriel Miglioranza*¹; Marcio Schwaab¹

¹Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia Química *gabriel.miglioranza@ufrgs.br

INTRODUÇÃO

Quando problemas envolvendo adsorção em partículas porosas são avaliados, a descrição fenomenológica destes sistemas de difusão/adsorção é caracterizada por uma equação diferencial parcial. A solução numérica desta equação envolve a utilização de um método numérico para a discretização da variável espacial e de uma rotina integradora para solução o sistema de equações diferenciais ordinárias ao longo do tempo. Neste trabalho foram comparados dois métodos para a discretização da variável espacial: o método das diferenças finitas e o método da colocação ortogonal. Este trabalho em especial compara a aproximação encontrada pelo método numérico com a solução analítica de um problema hipotético de difusão/adsorção, permitindo a comparação dos métodos, já que em problemas mais complexos a solução analítica não é possível.

METODOLOGIA

Para descrever uma partícula de adsorvente inserida em banho infinito (primeira hipótese necessária para que exista a solução analítica) devemos realizar um balanço material diferencial. Neste problema a isoterma de adsorção é considerada linear (segunda hipótese necessária para que exista a solução analítica). Abaixo encontra-se a equação diferencial parcial, na sua forma adimensional.

$$\frac{\partial C_p}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C_p}{\partial \eta^2} + \frac{2}{\eta} \frac{\partial C_p}{\partial \eta}$$

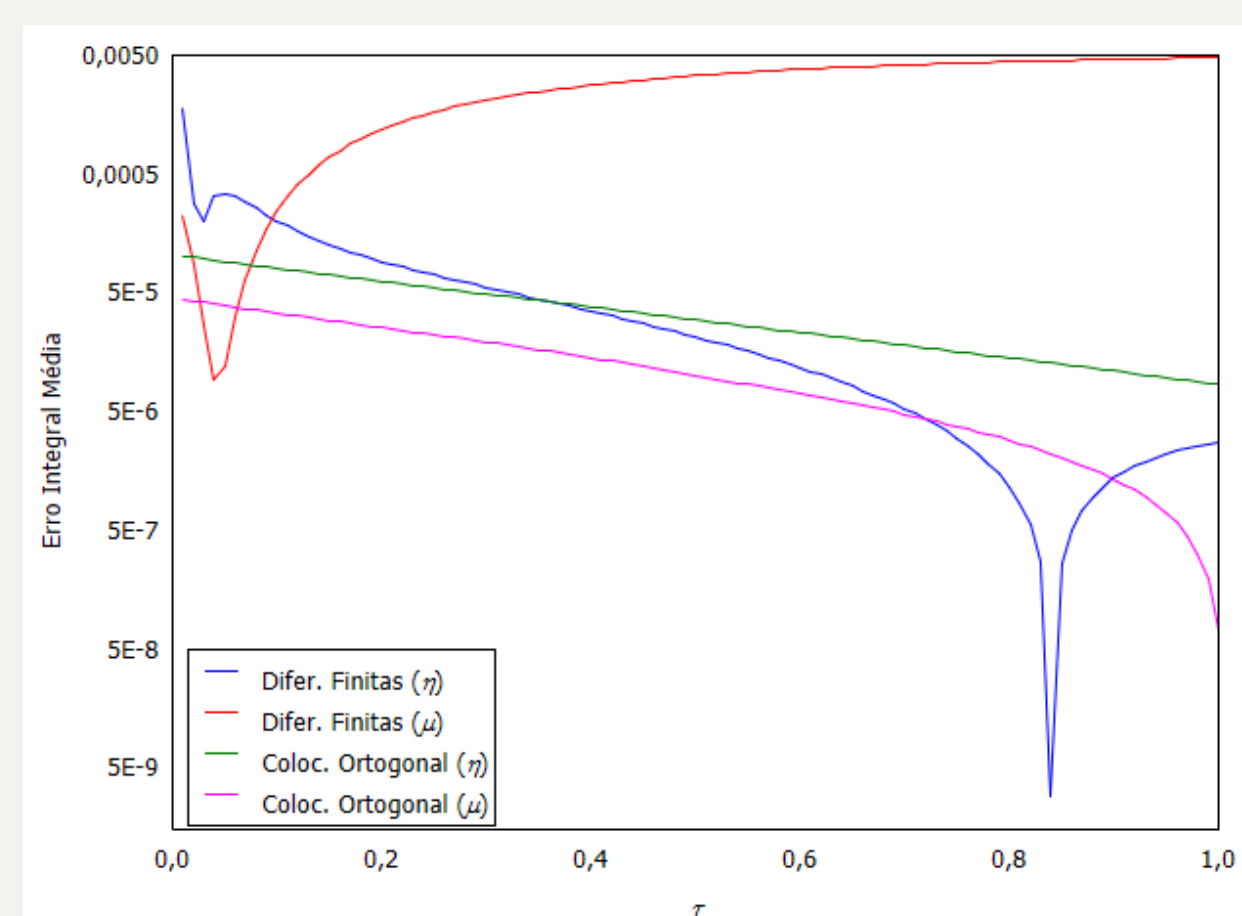
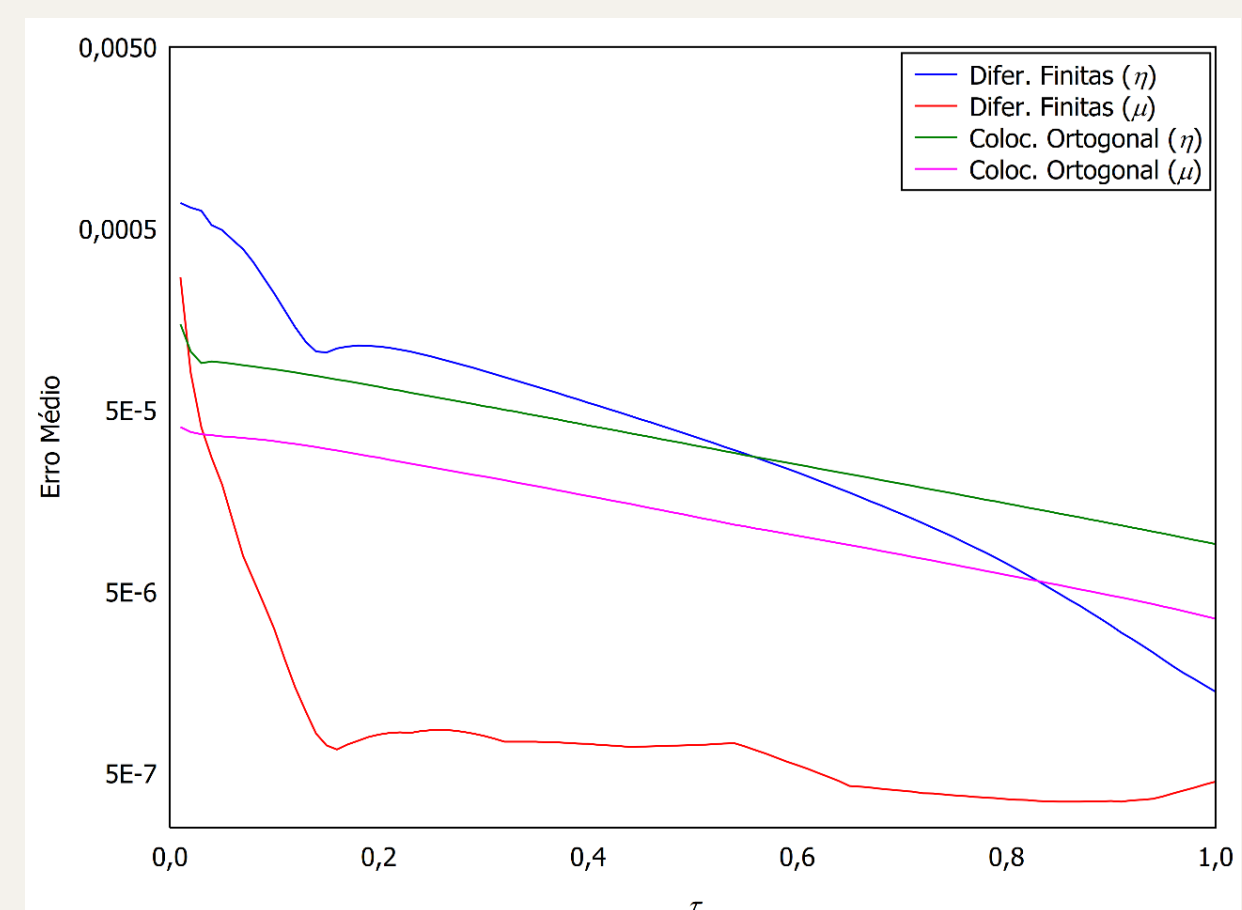
Nessa equação C_p representa a concentração de adsorbato dentro dos poros da partícula, η representa variável espacial adimensional limitada no domínio $[0,1]$ e τ representa o número adimensional de Fourier, comum em problemas difusivos. Neste trabalho foi utilizada uma transformação na variável espacial, na forma $\mu = \eta^2$. O objetivo desta mudança é aproveitar o fato da solução obrigatoriamente ser uma função par em relação a η . O uso desse tipo de transformação é comum na aplicação do método de colocação ortogonal, entretanto nesse trabalho também aplicamos às rotinas de diferenças finitas. Usando esta transformação a equação diferencial parcial é reescrita como segue.

$$\frac{\partial C_p}{\partial \tau} = 4\mu \frac{\partial^2 C_p}{\partial \mu^2} + 6 \frac{\partial C_p}{\partial \mu}$$

Estas duas equações são resolvidas, usando condição de contorno de simetria no centro da partícula e condição de convecção na superfície externa da partícula, e condição inicial de onde a concentração inicial no interior dos poros é zero. Os métodos numéricos foram aplicados nas duas equações, assim as equações diferenciais parciais tornam-se um conjunto de equações diferenciais ordinárias, estas são integradas utilizando a rotina integradora DASPK (*Backward Differentiation*). Foram realizados testes para avaliar o erro em cada ponto de discretização e o erro na concentração média no interior dos poros da partícula.

RESULTADOS

Nas figuras abaixo são apresentados de forma sumarizada os resultados obtidos nas simulações em diversas rotinas, mantendo semelhantes condições de simulação. A figura 1 representa o erro médio na partícula para rotinas distintas ao longo do tempo adimensional, já a figura 2 representa o erro no cálculo da integral que representa a concentração média dos poros no interior da partícula para cada instante de tempo.



CONCLUSÃO

Além dos resultados apresentados nas figuras, diversas simulações foram realizadas para avaliar qual método se aplica com maior fidelidade ao problema. Foi observado que quando se deseja qualidade nos valores absolutos da função, a melhor alternativa é utilizar o método das diferenças finitas, em termos de μ , entretanto o método da colocação ortogonal superou o método das diferenças finitas no cálculo das concentrações médias. Assim, a escolha do melhor método depende do objetivo de sua utilização, mas pode-se adiantar que para o cálculo em sistemas mais complexos onde a concentração média na partícula é de interesse, a utilização do método da colocação ortogonal deve ser considerada. Assim, em problemas com características mais próximas da realidade, onde deve ser considerado um banho finito (concentração externa á partícula variando ao longo do tempo) e isotermas não lineares, como Langmuir e Freundlich, a utilização dos métodos avaliados aqui pode ser facilmente aplicada, com a garantia de obtenção de resultados com qualidade.