Métodos Numéricos I

Análise da Resposta Transitória em Sistemas de Reatores Interconectados

Lorenzo Jordani Bertozzi Luz
lorenzobertozzi847@gmail.com

Departamento de Computação
CEFET-MG
Leopoldina

CEFET-MG

Introdução

Contexto

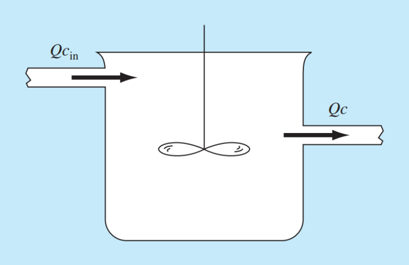


Figura: Um único reator com uma entrada e uma saída.

- Reatores químicos são sistemas dinâmicos essenciais em processos industriais.
- A análise da resposta transitória permite entender como a concentração de reagentes evolui ao longo do tempo.

Introdução

Objetivo

- Modelar e resolver equações diferenciais que descrevem a dinâmica de concentração em reatores interconectados.
- Comparar métodos numéricos (Euler e Runge-Kutta) com a solução analítica.
- Determinar o tempo de resposta a 90% (t90) para cada reator.

Modelagem Matemática

Modelagem Matemática

Equação de Balanço de Massa
Para um único reator:

$$V * \frac{dc}{dc} = Q_{cin} - Q_{c} \tag{1}$$

Onde:

- V : Volume do reator.
- Q : Vazão volumétrica.
- Cin : Concentração de entrada.
- C : Concentração no reator.

Modelagem Matemática

Sistema de Reatores Interconectado
Para N reatores:

$$V_i * \frac{dc_i}{dt} = Q_{ci-1} - Q_{ci} (i = 1, 2, 3, ..., N) \quad (2)$$

Onde:

- Vi : Volume do reator i.
- ci : Concentração no reator i.
- ci-1 : Concentração no reator anterior.

Solução Analítica

Solução Analítica

A solução analítica dessa EDO, considerando a condição inicial C(0) = c_0, :

$$c(t) = c_{in}(1e^{-\frac{Q}{V}t}) + c_0 e^{-\frac{Q}{V}t} \tag{3}$$

- c0 : Concentração inicial.
- A solução mostra uma convergência exponencial para o estado estacionário.

Métodos Numéricos

Método de Euler Explícito:

- Fórmula:
$$c_{n+1} = c_n + h * f(t_n, C_n). \tag{4}$$
- Simples, mas pode ser impreciso para passos grandes.

Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem:

- Mais preciso, utiliza quatro avaliações da função por passo.
- Fórmula:

$$c_{n+1} = c_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{5}$$

Implementação e Resultados

Código Utilizado:

```
def euler_explicito(f, u0, t0, tf, n):
    h = (tf - t0) / n
    t = np.zeros(n+1)
    u = np.zeros(n+1)
    t[0] = t0
    u[0] = u0
    for i in range(n):
        t[i+1] = t[i] + h
        u[i+1] = u[i] + h*f(t[i], u[i])
    return t, u
```

Figura: Implementação do método de Euler em Python.

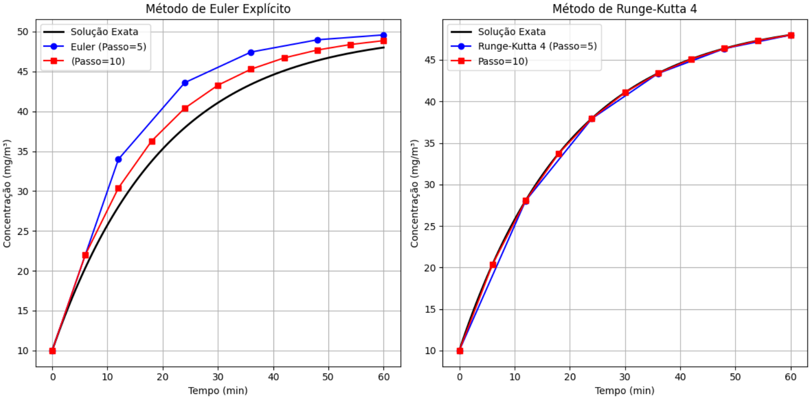
Implementação e Resultados

Código Utilizado:

```
def runge_kutta_4(f, u0, t0, tf, n):
    h = (tf - t0) / n
    t = np.zeros(n+1)
    u = np.zeros(n+1)
    t[0] = t0
    u[0] = u0
    for i in range(n):
        k1 = h*f(t[i], u[i])
        k2 = h*f(t[i] + h/2, u[i] + k1/2)
        k3 = h*f(t[i] + h/2, u[i] + k2/2)
        k4 = h*f(t[i] + h,   u[i] + k3)
        u[i+1] = u[i] + (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4)/6
        t[i+1] = t[i] + h
    return t, u
```

Figura: Implementação do método de Runge-Kutta em Python

Resultados Numéricos:

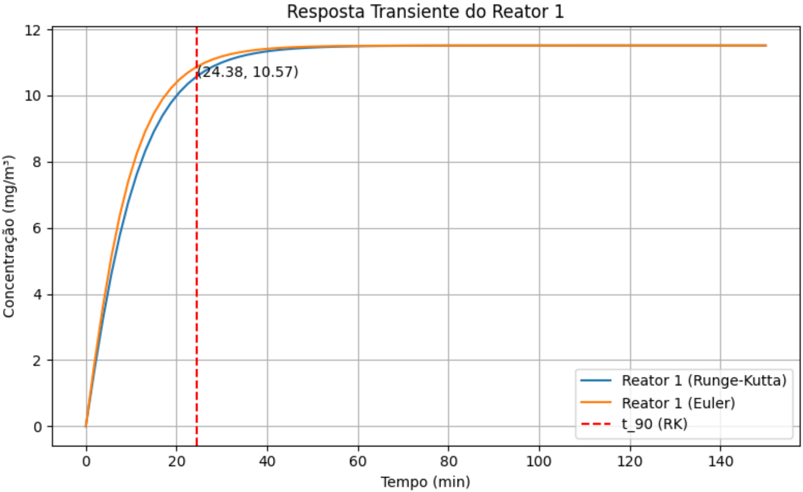


- Erro máximo do método de Euler: 2.5427863896239.
- Erro máximo do método de Runge-Kutta: 0.0258459235119.

Resposta Transitória

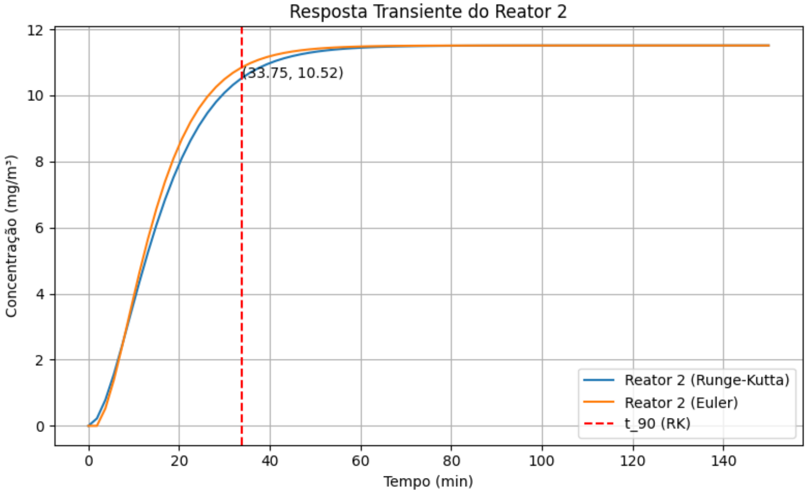
Resposta Transitória

Gráficos de Concentração vs. Tempo:



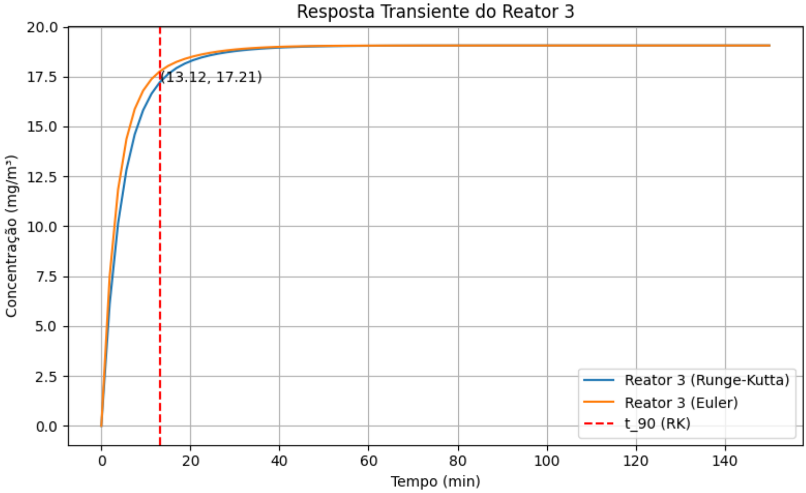
Resposta Transitória

Gráficos de Concentração vs. Tempo:



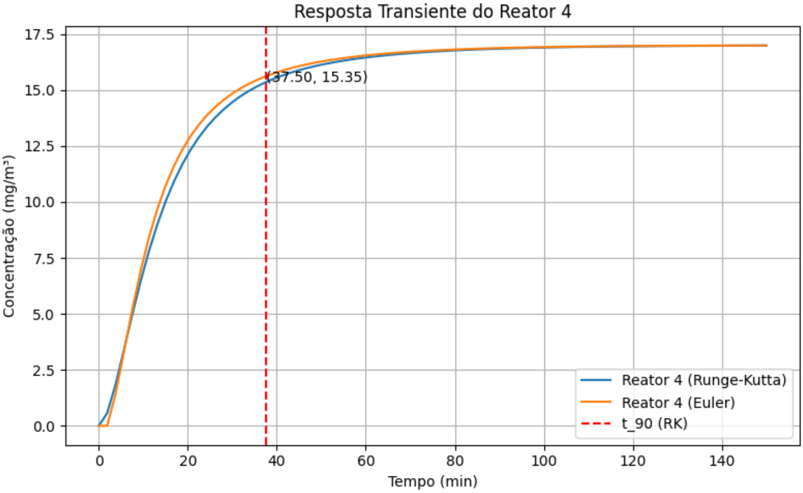
Resposta Transitória

Gráficos de Concentração vs. Tempo:



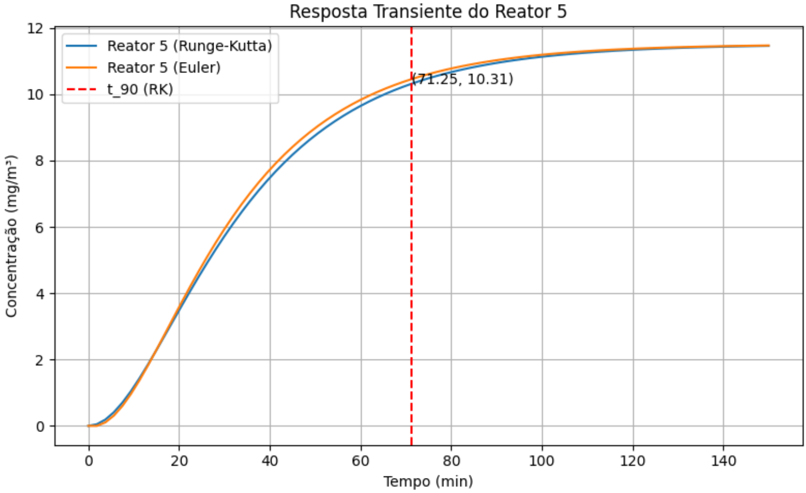
Resposta Transitória

Gráficos de Concentração vs. Tempo:



Resposta Transitória

Gráficos de Concentração vs. Tempo:



Resposta Transitória

Tempo de Resposta a 90% (t 90):

- Tempo necessário para atingir 90% da concentração de estado estacionário.
- Valores de t 90 para cada reator:

  - **Euler Explícito**
  - Reator 1: 20.625
  - Reator 2: 30.000
  - Reator 3: 11.250
  - Reator 4: 35.625
  - Reator 5: 69.375

  - **Runge-Kutta 4**
  - Reator 1: 24.375
  - Reator 2: 33.750
  - Reator 3: 13.125
  - Reator 4: 37.500
  - Reator 5: 671.250

Análise dos Resultados

Análise dos Resultados

Conclusões:

- O método de Runge-Kutta é mais preciso que o método de Euler.
- O tempo de resposta t90 aumenta para reatores subsequentes, refletindo o atraso na propagação da concentração.

Análise dos Resultados

Limitações:

- O método de Euler pode ser instável para passos grandes.
- A precisão dos resultados depende da escolha do tamanho do passo h.

Dúvidas???