UERJ - IPRJ - DMC

Métodos Numéricos para Equações Diferenciais – 2024/1 Trabalhos 1 e 2

Este texto apresenta as propostas dos Trabalhos 1 e 2 para a Disciplina de Métodos Numéricos para Equações Diferenciais. Mais informações úteis (como, por exemplo, questões sobre estabilidade numérica), assim como explicações mais detalhadas, ocorrerão em aula até a entrega dos trabalhos. A organização dos trabalhos será avaliada.

Elabore testes envolvendo refinamento de malha no espaço (aumento progressivo no número de nós, n_x , na malha computacional). Avalie a solução para diferentes tempos finais de simulação (utilizar discussão em sala de aula) e para a variação de propriedades dos modelos e parâmetros numéricos. Cada equipe terá o seu conjunto padrão de dados (utilizar discussão em sala de aula). Apresente os resultados usando gráficos e/ou tabelas em um arquivo .pdf (enviado para o email gsouza@iprj.uerj.br), com as listagens dos códigos desenvolvidos.

1 Trabalho 1

O funcionamento de um reator pode ser descrito pelo seguinte sistema de equações

$$\frac{dC}{dt} = -\exp\left(-\frac{10}{T + 273}\right)C\tag{1}$$

$$\frac{dT}{dt} = 1000 \exp\left(-\frac{10}{T + 273}\right) C - 10 (T - 20) \tag{2}$$

onde C indica a concentração do reagente e T é a temperatura do reator. Inicialmente o reator está a uma temperatura T_{ini} em graus Celsius e tem uma concentração de reagente C_{init} em gmol/l. Determine a concentração e a temperatura do reator em função do tempo, utilizando o método de Runge-Kutta clássico de quarta ordem.

2 Trabalho 2

Em um determinado fenômeno físico, tem-se a validade do seguinte modelo:

$$D\frac{d^2C}{dx^2} - k_a C = 0, \qquad 0 \ge x < L, \tag{3}$$

$$D\frac{d^2C}{dx^2} - k_bC = 0, \qquad L \ge x < L + L_f, \tag{4}$$

onde D é o coeficiente de difusão e C indica a concentração. k_a e k_b são parâmetros dependentes da posição, sendo $L + L_f$ o comprimento total do domínio. Determine o perfil de C em função de x utilizando o método de diferenças finitas e considerando as seguintes condições de contorno

$$C(x=0) = C_E$$
 e $\left(\frac{dC}{dx}\right)_{x=L+L_f} = 0.$ (5)