



Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro

Universidade Federal do Triângulo Mineiro  
Departamento de Engenharia Química  
Modelagem e Simulação de Processos

# Desenvolvimento de modelo de sistemas a parâmetros distribuído

Prof.<sup>a</sup>: Nádia Guimarães Sousa

nadiagsousa@gmail.com

Uberaba

# Distribuído ou concentrado?

- ▶ A decisão se o modelo será concentrado ou distribuído faz parte da decisão do engenheiro que desenvolve o modelo e deve observar:
  - ▶ Objetivos do modelo (controle, otimização, procedimentos operacionais etc);
  - ▶ Precisão exigida do modelo;
  - ▶ Informação disponível para a validação do modelo.

Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro

# Modelagem de sistemas a parâmetros distribuídos

- ▶ Os modelos a parâmetros distribuídos incorporam a variação espacial dos estados dentro do volume de equilíbrio, ou seja, são função da posição;
- ▶ Isso significa que as equações de conservação geral levam a modelos que são representados por equações diferenciais parciais (EDP) para processos dinâmicos e por equações diferenciais ordinárias (EDO) para processos estáticos, ambos em uma, duas ou três dimensões.

- ▶ No caso de coordenadas, empregam-se três abordagens, que são normalmente ditadas pela geometria do sistema:

- ▶ Coordenadas retangulares: tipicamente coordenadas Cartesianas nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ ;
- ▶ Coordenadas cilíndricas: em que as principais dimensões são raio ( $r$ ), ângulo ( $\theta$ ) e comprimento ( $z$ );
- ▶ Coordenadas esféricas: em que são dados dois ângulos ( $\theta$  e  $\phi$ ) além do raio ( $r$ ).

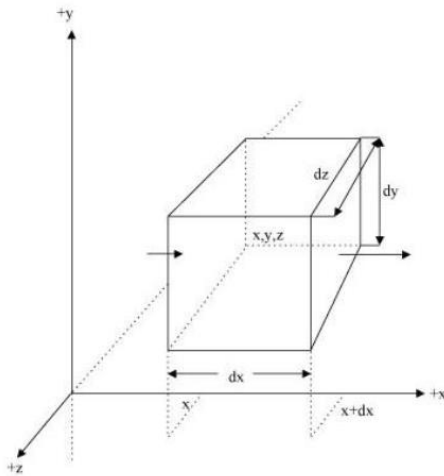
# Etapas para a modelagem de SPD

1. Fazer um esquema do sistema a ser estudado com avaliação qualitativa do problema;
2. Colocar junto todas as informações físico-químicas, equações constitutivas, taxas e hipóteses para o problema;
3. Selecione o volume de controle e escreva as equações de conservação apropriadas;
4. Escreva o modelo na forma diferencial;
5. Escreva as CCs e CI para o modelo desenvolvido;
6. Simule o processo;
7. Avalie a qualidade do modelo desenvolvido.

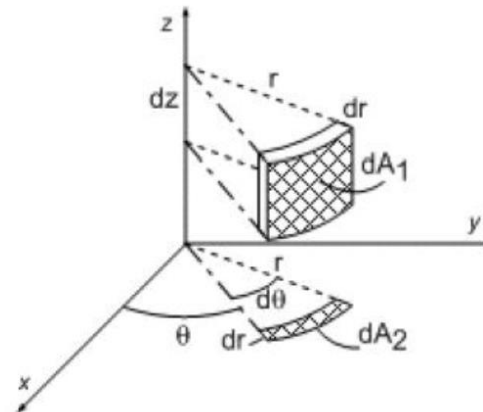
# Quando adicionar hipóteses?

- ▶ Uma hipótese deve ser adicionada quando:
  - ▶ A não adoção da mesma leva a um aumento substancial na complexidade computacional do modelo;
  - ▶ É necessária para caracterizar fenômenos que não são bem entendidos e/ou não podem ser facilmente quantificados.

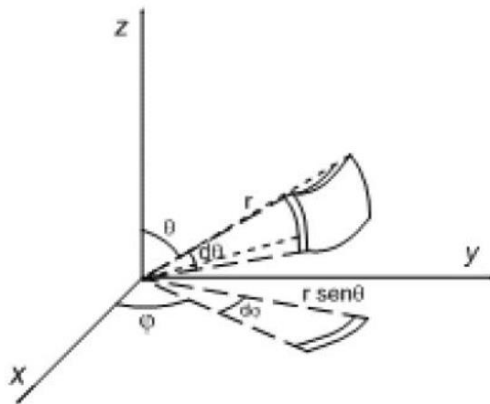
# O volume de controle



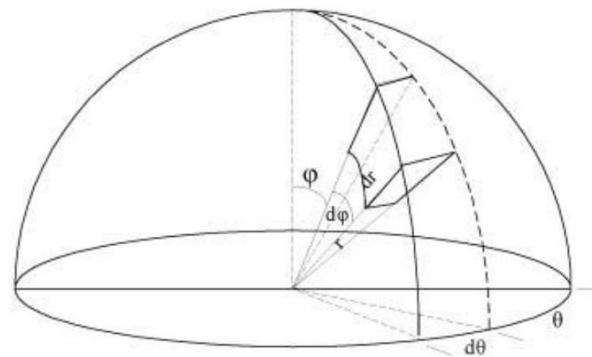
Coordenadas retangulares



Coordenadas cilíndricas



Coordenadas esféricas



# Condições iniciais

- ▶ Seleccionar:

- ▶  $t = 0$  - como hipóteses da modelagem.

- ▶ Exemplos:

- ▶  $T(x, 0) = f_1(x)$  - ( $f(x)$  é dado);

- ▶  $C_A(x, 0) = C_0$  - ( $c_0$  é dado).

Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro



# Condições de contorno

- ▶ Hipóteses relevantes
  - ▶ Condições nas fronteiras;
  - ▶ Forma do volume de controle (sistema de coordenadas);
  - ▶ Dimensão do volume de controle.
- ▶ Número de condições de contorno independentes:
  - ▶ Ao longo de uma direção coordenada;
  - ▶ Igual a ordem da derivada parcial.
- ▶ **Importante!**
  - ▶ Utilização correta das condições de contorno. Uma mudança sutil em uma condição de contorno pode afetar drasticamente o resultado do modelo.

# Tipos de condições de contorno

- **Condição do 1º tipo** (Dirichlet): valor especificado na fronteira.

$$c_A(0, t) = c^*$$

- **Condição do 2º tipo** (Neumann) : fluxo especificado na fronteira.

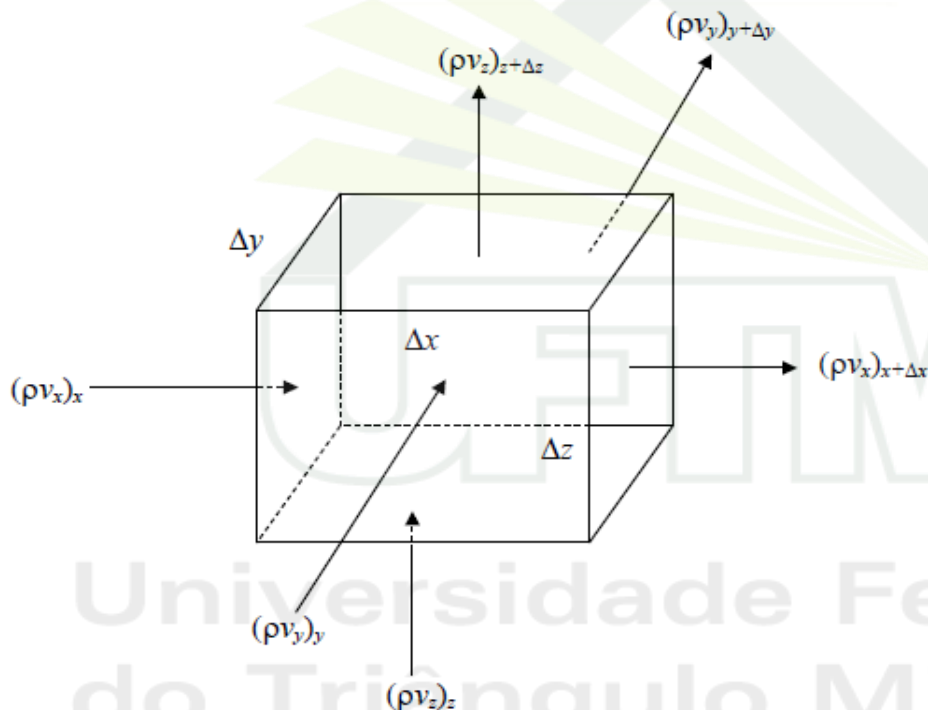
$$\frac{\partial c_A}{\partial x}(0, t) = 0$$

- **Condição do 3º tipo** (Robin): transferência convectiva.

$$\frac{\partial c_A}{\partial x}(x_M, t) = K(c^* - c_A(x_M, t))$$

- **Condições mistas**: condições de mais de um tipo em determinado modelo.

# Balanço de massa



Massa entra

$$x: (\rho v_x)|_x \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$y: (\rho v_y)|_y \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$z: (\rho v_z)|_z \Delta x \Delta y \Delta t$$

Massa sai

$$x+\Delta x: (\rho v_x)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$y+\Delta y: (\rho v_y)|_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$z+\Delta z: (\rho v_z)|_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y \Delta t$$

Acúmulo de Massa

$$(\rho)|_{t+\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z - (\rho)|_t \Delta x \Delta y \Delta z$$

$$(\rho|_{t+\Delta t} - \rho|_t) \Delta x \Delta y \Delta z = (\rho v_x|_x - \rho v_x|_{x+\Delta x}) \Delta y \Delta z \Delta t + (\rho v_y|_y - \rho v_y|_{y+\Delta y}) \Delta x \Delta z \Delta t \\ + (\rho v_z|_z - \rho v_z|_{z+\Delta z}) \Delta x \Delta y \Delta t$$

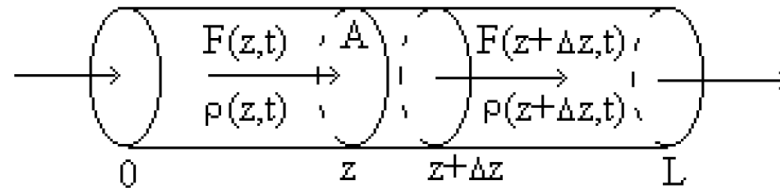
$$\div \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$\frac{\rho|_{t+\Delta t} - \rho|_t}{\Delta t} = \frac{\rho v_x|_x - \rho v_x|_{x+\Delta x}}{\Delta x} + \frac{\rho v_y|_y - \rho v_y|_{y+\Delta y}}{\Delta y} + \frac{\rho v_z|_z - \rho v_z|_{z+\Delta z}}{\Delta z}$$

$$\text{Aplicando limite: } \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho v_x}{\partial x} - \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} - \frac{\partial \rho v_z}{\partial z}$$

Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro

# Exemplo: Escoamento isotérmico em um tubo



- Neste caso, as variáveis e as propriedades mudam não só com o tempo, mas também com a posição espacial. Para equacionar o balanço de massa global deve-se levar em consideração a variação com a posição espacial. Considerando que a variável fundamental só varia em função do comprimento  $L$  e do tempo  $t$ , tem-se:

$$A\Delta z[\rho(z, t + \Delta t) - \rho(z, t)] = F(z, t)\rho(z, t)\Delta t - F(z + \Delta z, t)\rho(z + \Delta z, t)\Delta t$$

$$\begin{aligned} & \div \Delta t \\ & \div \Delta z \\ \frac{A[\rho(z, t + \Delta t) - \rho(z, t)]}{\Delta t} &= \frac{F(z, t)\rho(z, t) - F(z + \Delta z, t)\rho(z + \Delta z, t)}{\Delta z} \end{aligned}$$

Aplicando  $\lim_{\Delta t, \Delta z \rightarrow 0} F$ , tem-se:

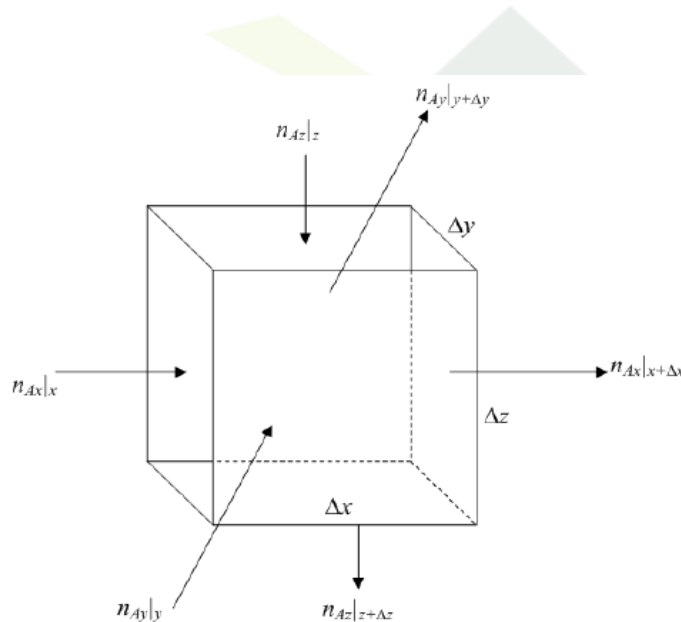
$$\frac{\partial(A\rho(z, t))}{\partial t} = - \frac{\partial(F(z, t)\rho(z, t))}{\partial z}$$

Considerando a relação de vazão e velocidade do fluido:  $F = vA$ . Substituindo e simplificando:

$$\frac{\partial(\rho(z, t))}{\partial t} = - \frac{\partial(v(z, t)\rho(z, t))}{\partial z}$$

Para que o modelo possa ser resolvido é necessário conhecer a condição inicial ( $t = 0$ ) e as condições de contorno ( $z = 0$  e  $z = L$ ).

# Balanço de massa por componente



Massa A entra

$$x: (n_{Ax} M_A)|_x \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$y: (n_{Ay} M_A)|_y \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$z: (n_{Az} M_A)|_z \Delta x \Delta y \Delta t$$

Massa A que sai

$$x+\Delta x: (n_{Ax} M_A)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$y+\Delta y: (n_{Ay} M_A)|_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$z+\Delta z: (n_{Az} M_A)|_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y \Delta t$$

$$m_A = n_A M_A$$

Acúmulo de Massa de A

$n_A$  = fluxo molar [=] mol/ (L<sup>2</sup> tempo)

$$M_A C_A|_{t+\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z - M_A C_A|_t \Delta x \Delta y \Delta z$$

Taxa de geração de massa de A

$$\alpha_A r M_A \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$\begin{aligned}
 (M_A C_A|_{t+\Delta t} - M_A C_A|_t) \Delta x \Delta y \Delta z = & (n_{Ax} M_A|_{x+\Delta x} - n_{Ax} M_A|_x) \Delta y \Delta z \Delta t + \\
 + & (n_{Ay} M_A|_{y+\Delta y} - n_{Ay} M_A|_y) \Delta x \Delta z \Delta t + (n_{Az} M_A|_{z+\Delta z} - n_{Az} M_A|_z) \Delta x \Delta y \Delta t + \\
 + & \alpha_A r M_A \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t
 \end{aligned}$$

Simplificando:

$$\begin{aligned}
 (C_A|_{t+\Delta t} - C_A|_t) / \Delta t = & (n_{Ax}|_{x+\Delta x} - n_{Ax}|_x) / \Delta x + \\
 + & (n_{Ay}|_{y+\Delta y} - n_{Ay}|_y) / \Delta y + (n_{Az}|_{z+\Delta z} - n_{Az}|_z) / \Delta z + \alpha_A r
 \end{aligned}$$

No limite:

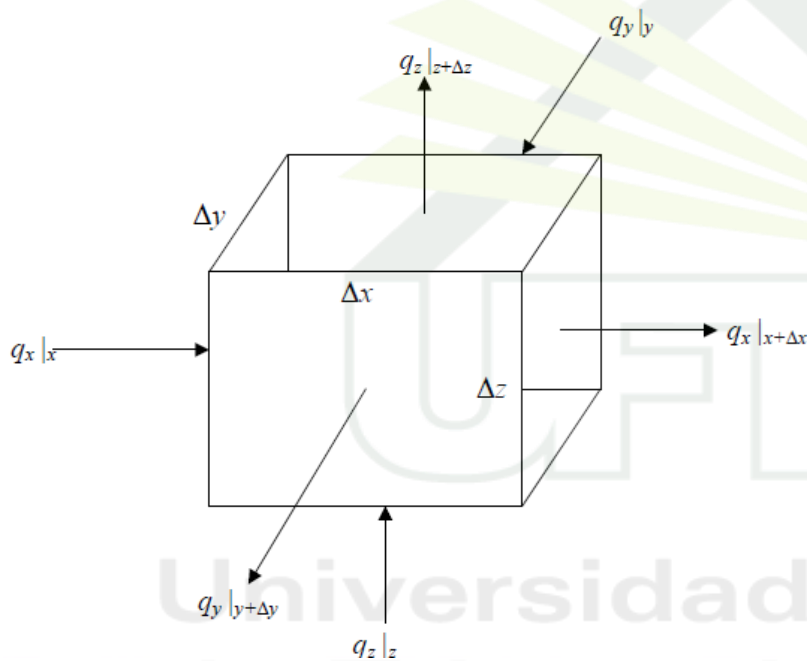
$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial n_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial n_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial n_{Az}}{\partial z} = \alpha_A r$$

Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro



# Balanço de energia

Energia: calor + energia do fluido



Energia entrando

$$x: (q_x + \rho C_p T v_x) \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$y: (q_y + \rho C_p T v_y) \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$z: (q_z + \rho C_p T v_z) \Delta x \Delta y \Delta t$$

Energia saindo

$$(q_x + \rho C_p T v_x)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$(q_y + \rho C_p T v_y)|_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$(q_z + \rho C_p T v_z)|_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y \Delta t$$

Acúmulo:

$$(\rho C_p T|_{t+\Delta t} - \rho C_p T|_t) \Delta x \Delta y \Delta z$$

$v_x, v_y$  e  $v_z$  - velocidade de escoamento nas direções x,y e z respectivamente [L/T]

Então:

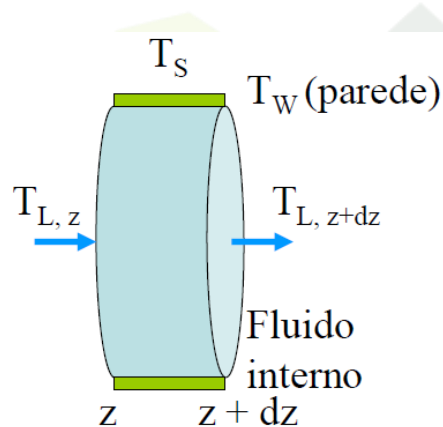
$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho C_p T v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho C_p T v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho C_p T v_z)}{\partial z} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = \Phi_H$$

$\Phi_H$  Taxa de energia gerada por reação, pressão, gravidade, fricção etc.

Então, se  $C_p$  constante:

$$\rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + C_p T \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} \right) + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = \Phi_H$$

# Exercício: Trocador de calor de tubo duplo



Conservação de energia do fluido - na direção  $z$

entra:  $(q_z + \rho C_p T_L v_z)|_z A \Delta t$

sai:  $(q_z + \rho C_p T_L v_z)|_{z+\Delta z} A \Delta t$

acúmulo:  $(\rho C_p T_L|_{t+\Delta t} - \rho C_p T_L|_t) A \Delta z$

# Resolvendo Equações Diferenciais Parciais

## ► Introdução

- Uma equação diferencial parcial linear de segunda ordem:

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + fu = g$$

Em que  $a, b, c, d, e, f, g$  são funções das variáveis independentes, é classificado como:

- Hiperbólica
  - Parabólica
  - Elíptica
- O procedimento para resolver cada um destes tipos de equações diferenciais parciais é diferente.

► Os métodos numéricos mais comumente usados são:

► Método das Linhas (MOL): discretiza-se as derivadas espaciais obtendo um sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo. Exemplo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Usando diferenças finitas resulta em:

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{D}{\Delta x^2} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}), i = 1, 2, \dots, N$$

- **Diferenças Finitas:** discretiza-se o operador diferencial via diferenças finitas. Para o exemplo anterior:

$$\frac{u_{i,n+1} - u_{i,n}}{h} = \frac{D}{\Delta x^2} (u_{i+1,n} - 2u_{i,n} + u_{i-1,n}),$$
$$i = 1, 2, \dots, N \text{ e } n = 0, 1, 2, \dots, M$$

- **Elementos finitos:** aproxima-se a variável dependente por um polinômio contínuo por partes:

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^m \alpha_i(t) \phi_i(x)$$

Em que  $\phi_i(x)$  são funções conhecidas (bases) continuamente diferenciáveis por partes e que satisfazem as condições de contorno e  $\alpha_i(t)$  são os coeficientes a determinar que variam com o tempo. A forma da determinação destes coeficientes é que caracteriza o método dos elementos finitos utilizado, tais como: método de Galerkin e o método da colocação.

# Método das diferenças finitas

- ▶ Aplicações:
  - ▶ Quase todos os problemas em engenharia podem ser reduzidos a uma equação diferencial.
    - ▶ EDO's e suas condições iniciais
    - ▶ EDP's e suas condições de contorno e iniciais
- ▶ No Método de Diferenças Finitas (MDF) o domínio do problema contínuo é substituído por uma série de pontos discretos, ou nós, nos quais são calculadas as incógnitas do problema;
- ▶ Essa substituição do contínuo pelo discreto denomina-se discretização.

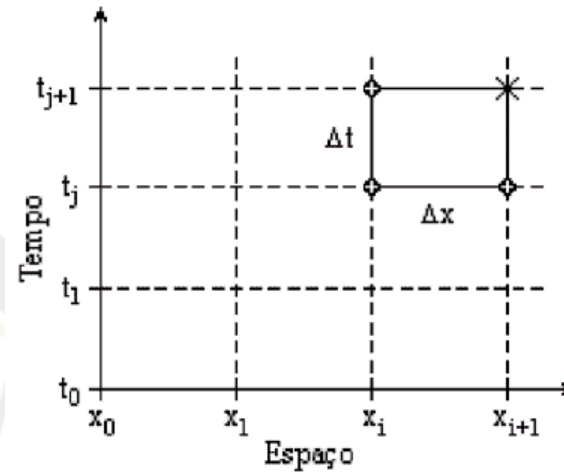
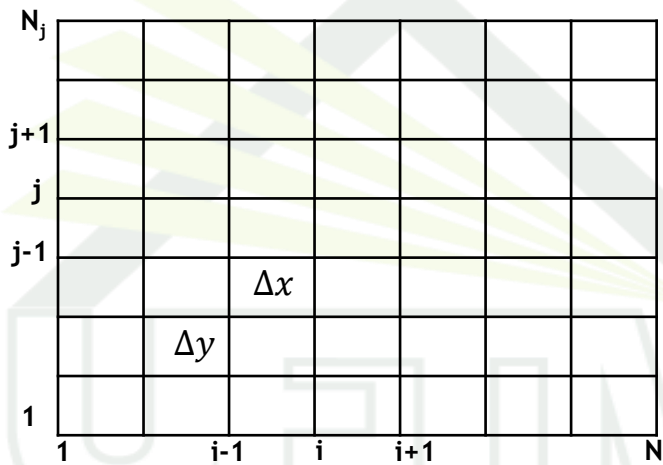


Figura 1. Plano espaço-tempo utilizado para ilustrar a solução das equações do modelo de ondas cinemáticas usando-se diferenças finitas

- As derivadas, que aparecem na equação original, são substituídas (ou aproximadas) por fórmulas discretas de diferenças;
- A aplicação dessas fórmulas aos pontos do domínio discretizado gera um sistema de equações algébricas, cuja solução fornece os valores das incógnitas do problema nesses pontos discretos.



- As derivadas são aproximadas por diferenças algébricas, obtidas a partir do truncamento das séries de Taylor:

- Aproximação de derivadas de primeira ordem:

(a) Fórmula das diferenças regressivas

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

(b) Fórmula das diferenças progressivas

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

(c) Fórmula das diferenças centradas

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2 \Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

- Aproximação para derivadas de segunda ordem:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Em que  $\Delta x$  é o tamanho do passo, quanto menor melhor a aproximação gerada, pois reduz o erro de truncamento.

- ▶ O método das diferenças finitas é bastante intuitivo, e consiste em substituir as derivadas na equação por aproximações numéricas de mesma ordem de aproximação.
- ▶ O método pode ser executado pelo procedimento a seguir:
  1. Utilize as aproximações das derivadas para obter equações algébricas;
  2. Escreva as equações para  $i=1,2,\dots,n-1$  utilizando as aproximações anteriores;
  3. Na equação de  $i=1$ , substitua  $x_0$  pela condição de contorno respectiva;
  4. Na equação de  $i=n-1$ , substitua  $x_n$  pela condição de contorno respectiva.
- ▶ O resultado será um sistema de  $n-1$  equações algébricas que pode ser representado matricialmente pela equação:  $A.T = B$

- Exemplo: Monte as equações algébricas para a equação diferencial

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + f(x) \cdot T(x) = g(x)$$

$$x = 0, T = T_{in}$$

$$x = L, T = T_L$$

Dividindo o intervalo  $[0, L]$  em  $n$  sub-intervalos, tem-se  $h=L/n$

1. Utilize as aproximações das derivadas para obter equações algébricas:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_i = \frac{T(x_{i+1}) - 2T(x_i) + T(x_{i-1}))}{h^2} + O(h^2)$$

2. Escreva as equações para  $i=1, 2, \dots, n-1$  utilizando a aproximação anterior:

$$\frac{T(x_{i+1}) - 2T(x_i) + T(x_{i-1}))}{h^2} + f(x_i)T(x_i) = g(x_i)$$

Rearranjando:

$$T(x_{i+1}) + [h^2 f(x_i) - 2]T(x_i) + T(x_{i-1})) = h^2 g(x_i) \\ \text{para } i = 2, \dots, n-2$$

3. Para  $i=1$ , substitua  $x_0$  pela condição de contorno respectiva:

$$T(x_2) + [h^2 f(x_1) - 2]T(x_1) + T(x_0) = h^2 g(x_1)$$

Substituindo:

$$T(x_2) + [h^2 f(x_1) - 2]T(x_1) = h^2 g(x_1) - T_{in}$$

4. Para  $i=n-1$ , substitua  $x_n$  pela condição de contorno respectiva:

$$T(x_n) + [h^2 f(x_{n-1}) - 2]T(x_{n-1}) + T(x_{n-2}) = h^2 g(x_{n-1})$$

Substituindo -  $x = L, T = T_L$  :

$$[h^2 f(x_{n-1}) - 2]T(x_{n-1}) + T(x_{n-2}) = h^2 g(x_{n-1}) - T_L$$

A representação matricial do sistema é:  $A.T = B$ , em que:

$$T = [T_1 \ T_2 \ \dots \ T_{n-2} \ T_{n-1}]^T$$

$$B = [h^2 g(x_1) - T_{in} \quad h^2 g(x_2) \ \dots \ h^2 g(x_{n-1}) - T_L]^T$$

A matriz A é dada por:

$$\begin{bmatrix} h^2 f(x_1) - 2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & h^2 f(x_2) - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & h^2 f(x_3) - 2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & h^2 f(x_{n-2}) - 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & h^2 f(x_{n-1}) - 2 \end{bmatrix}$$

Matrizes tridiagonais: todos os elementos não nulos estão na diagonal principal ou junto dela. A solução do sistema pode ser feita por qualquer método de inversão de matrizes. Para esse caso específico pode ser resolvido algebricamente por um sistema de equações.

# Método das linhas

- ▶ O método das linhas (MOL) é uma abordagem numérica e computacional utilizada para solucionar equações diferenciais parciais ao discretizar o problema original em todas as dimensões, exceto uma, geralmente o tempo.
- ▶ Trata-se de uma técnica baseada no método das diferenças finitas, na qual as derivadas são aproximadas por diferenças algébricas - visto anteriormente.

Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro

► Escolha do passo:  $\Delta x$

- Quanto menor o tamanho de passo, melhor a aproximação gerada, pois o termo de erro do truncamento é reduzido.
- Ao aplicar a técnica, o sistema de EDPs é transformado num sistema de EDOs que, então pode ser resolvido com relação à dimensão restante (não discretizada) por um integrador adequado.

Universidade Federal  
do Triângulo Mineiro

## Exemplo: PFR com dispersão axial - ignorando gradientes radiais

### ► Modelo matemático:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} + R \quad (1)$$

CC e CI

$$a1. v_z C_0(t) = v_z C(0, t) - D_L \frac{\partial C(0, t)}{\partial z}$$

$$b1. \frac{\partial C(L, t)}{\partial z} = 0$$

$$c1. C(z, 0) = C_{in}(z)$$

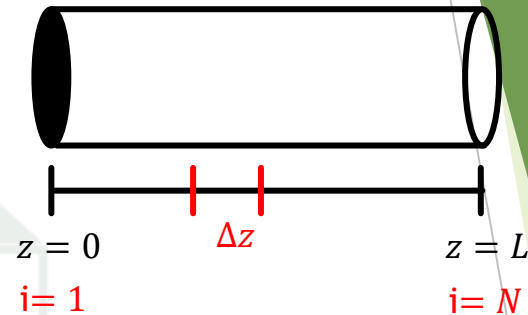
$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k_L \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \rho C_p v_z \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{2U}{R} (T_w - T) + \Delta H_R r_A \quad (2)$$

CC e CI

$$a2. v_z T_0(t) = v_z T(0, t) - \frac{k_L}{\rho C_p} \frac{\partial T(0, t)}{\partial z}$$

$$b2. \frac{\partial T(L, t)}{\partial z} = 0$$

$$c2. T(z, 0) = T_{in}(z)$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \end{aligned}$$

# Exercício: <sup>1</sup> Extrator de óleos essenciais por arraste de vapor

- Balanço de massa na fase vapor:

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \rho_s \frac{\partial q(z, t)}{\partial t}$$

- Balanço de massa da fase sólida

$$\frac{\partial q(z, t)}{\partial t} = -k_{TM}[q(z, t) - q(z, t)^*]$$

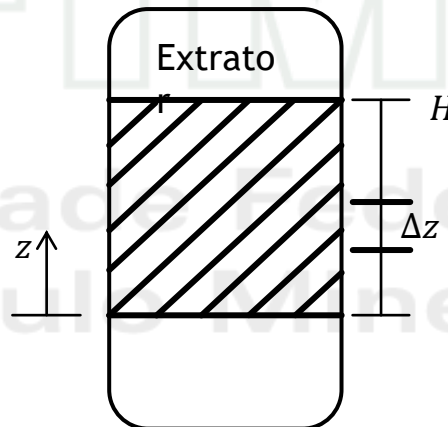
Em que:  $q(z, t)^* = kC(z, t)$

CC e CI

$$C(z, 0) = 0$$

$$q(z, 0) = q_0$$

$$C_0(0, t) = 0$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \end{aligned}$$

<sup>1</sup> Sartor, R.B. ,Modelagem, Simulação e Otimização de uma Unidade Industrial de Extração de Óleos Essenciais por Arraste de Vapor, Dissertação de mestrado, 2009