ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Método das Linhas

Ardson dos S. Vianna Jr.
Departamento de Eng. Química
Escola Politécnica - USP
ardson@usp.br

Sumário

- Introdução
- Contornos fictícios
- Método das linhas
- Conclusão
- Correção da formula de Crank-Nicolson

1. Diferenças finitas - EDO

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \phi^2 .y = 0 \qquad 1C.C.\ x = 0 \quad \frac{dy}{dx} = 0$$

$$2C.C. \quad x = 1 \quad y = 1$$

Balanço de massa para pellet retangular

1. EDO – C.C.

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \phi^2 . y = 0$$

$$1\,C.C.\; x = 0 \quad \frac{dy}{dx} = 0$$

$$2\,C.C.\quad x = 1 \quad y = 1$$

Balanço de massa para pellet retangular

1. EDO – C.C.

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - \phi^2 . y = 0$$

$$u``_i \cong \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - \phi^2 . u_i = 0$$

$$x = 0 \quad \frac{u_1 - u_0}{h} = 0$$

$$x = 1 \quad u_n = 1$$

Derivada de 1ª ordem- dif fin

Fórmula centrada, somando

$$u_{i+1} = u_i + h.u'_i \qquad u_i = u_{i-1} + h.u'_i$$

$$u'_i \cong \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2.h}$$

ganho?

2. Contorno fictício

Fórmula implícita, mais estável

$u_i = u_{i-1} + h.u'_i$

- Aplicando para o contorno, i=0

$$u'_o = \frac{u_0 - u_{-1}}{h}$$

- u_{-1}? e u_0?

2. Contorno fictício

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \varphi^2 . y = 0$$

$$u``_i \cong \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - \varphi^2 . u_i = 0$$

$$\frac{u_1 - 2u_0 + u_{-1}}{h^2} - \varphi^2 . u_0 = 0$$

$$x = 0 \quad \frac{u_1 - u_0}{h} = 0$$

$$x = 1 \quad u_n = 1$$

$$x = 0 \quad \frac{u_0 - u_{-1}}{h} = 0$$

$$x = 1 \quad u_n = 1$$

2. Contorno fictício

- Substituir uma equação na outra

$$\frac{u_1 - 2u_0 + u_0}{h^2} - \varphi^2 . u_0 = 0$$

- Ao invés de usar $x = 0$ $\quad \frac{u_1 - u_0}{h} = 0$
- Usar $\quad \frac{u_1 - u_0}{h^2} - \varphi^2 . u_0 = 0$

3. MOL e EDP

- Problema – equação da difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

$$1C.C.\ u(0,t) = 0$$

$$2C.C.\quad u(L,t) = 0$$

$$C.I.\ u(x,0) = 50sen(\frac{\pi\ x}{L^2})$$

3. MOL e EDP

- Problema – equação da difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

$$1\,C.C.\; u(0,t) = 0$$

$$2\,C.C.\quad u(L,t) = 0$$

$$C.I.\; u(x,0) = 50sen(\frac{\pi\, x}{L^2})$$

EDO-PVI

3. MOL e EDP

- Problema – equação da difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

$$1C.C.\; u(0,t) = 0$$

$$2C.C.\quad u(L,t) = 0$$

$$C.I.\; u(x,0) = 50sen(\frac{\pi\, x}{L^2})$$

EDO-PCC

3. MOL e EDP

- Compor a solução

EDO - PVI	EDO-PCC	EDP
dif. fin	dif fin	dif fin
RK	dif fin	MOL
RK	MWR	Ele Fin
vol fin	vol fin	Vol fin

3. MOL - método

- A solução da EDP é uma função tanto do espaço quanto do tempo u(x,t)
- O espaço é discretizado via diferenças finitas $x_i = x_0$ + i .h
- sistemas de EDOs, que é resolvido por Runge-Kutta - u_i(t)
- A solução é um conjunto de linhas no tempo para cada posição u_i.

3. MOL – estudo de caso

- Difusão transiente de calor

$$\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

- Condição inicial em t=0; $T(x,0)=T_{inicial}$
- 1ª C.C. em x=0 $\frac{\partial T}{\partial x}=0$
- 2ª C.C. em x=1 $T(1,t)=T_b$

3. MOL – estudo de caso

- Discretizando o espaço: $h = \frac{1-0}{5} = 0{,}2$
- $x_i = x_0 + i \, .0{,}2$ Ti ao longo do x
- $\frac{d^2\,T_i}{dx^2} = \frac{T_{i+1} - 2\,T_i + T_{i-1}}{h^2}$
- operador de segunda ordem para o espaço

3. MOL – estudo de caso

- Ti ao longo do x que variam com t, linhas

- $\alpha \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} = \alpha \frac{T_{i+1} - 2\,T_i + T_{i-1}}{0{,}02^2} = \frac{\partial T_i}{\partial t}$

3. MOL – estudo de caso

- Pontos internos
- i=1 $$\frac{d\,T_1}{dt} = \alpha\frac{T_2 - 2\,T_1 + T_0}{0{,}02^2}$$
- i=2 $$\frac{d\,T_2}{dt} = \alpha\frac{T_3 - 2\,T_2 + T_1}{0{,}02^2}$$
- i=3 $$\frac{d\,T_3}{dt} = \alpha\frac{T_4 - 2\,T_3 + T_2}{0{,}02^2}$$
- i=4 $$\frac{d\,T_4}{dt} = \alpha\frac{T_5 - 2T_4 + T_3}{0{,}02^2}$$

3. MOL – estudo de caso

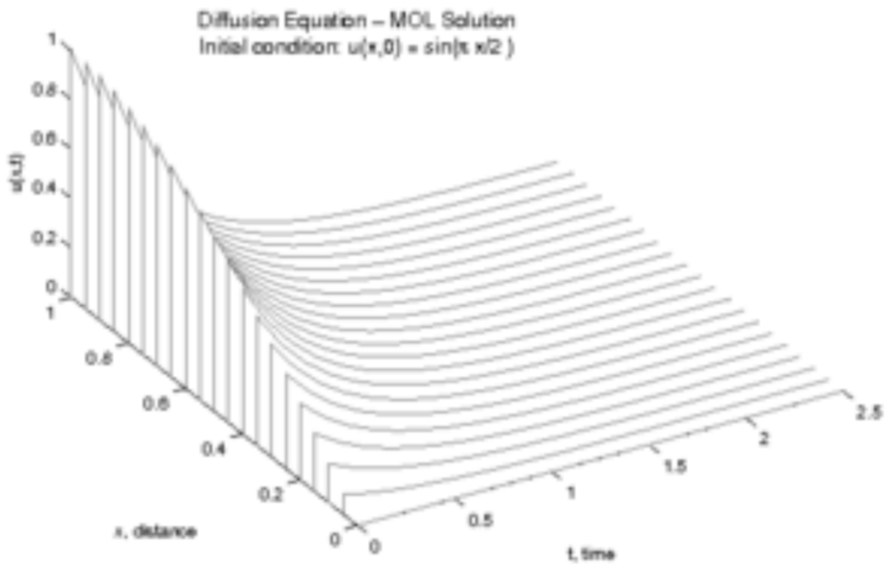
- Balanço de informações:
  - 4 pontos internos, as 4 equações anteriores
  - 1ª C.C. em x=0 $T_1 - T_0 = 0$
  - 2ª C.C. em x=1 $T_5 = T_b$

3. MOL – estudo de caso

- Mas, eh um problema de valor inicial!
- Condição inicial em $t=0$; $T(x,0)=T_{inicial}$

3. MOL – estudo de caso

- Figura ilustrativa



Conclusão

- Melhorar a estimativa da condição de contorno
- EDP como EDO-PVI + EDO-PCC
- MOL: discretizar o espaço e resolver sistema de EDO-PVI

Bibliografia

- M.E. Davis, Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers, John Wiley & Sons, (1984).
- O.T Hanna, O.C. Sandall,Computational methods in Chemical Engineering, Prentice Hall, (1995).

4. EDP parabólica

- Crank-Nicolson

$$\frac{u_i^{j+1}-u_i^j}{2h_1/2}=\frac{\alpha}{2}\left(\frac{u_{i+1}^{j+1}-2u_i^{j+1}+u_{i-1}^{j+1}}{h_2^2}+\frac{u_{i+1}^{j}-2u_i^{j}+u_{i-1}^{j}}{h_2^2}\right)$$

$$-\frac{\alpha}{2.h_1^2}u_{i+1}^{j+1}+\left(\frac{1}{h_1}+\frac{\alpha}{h_2^2}\right)u_i^{j+1}-\frac{\alpha}{2.h_2^2}u_{i-1}^{j+1}=\frac{\alpha}{2.h_2^2}u_{i+1}^{j}+\left(\frac{1}{h_1}-\frac{\alpha}{h_2^2}\right)u_i^{j}+\frac{\alpha}{2.h_2^2}u_{i-1}^{j}$$