

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Comparativo entre as soluções analítica e numérica de um modelo de mistura de soluções salinas

Mairlane Silva de Alencar¹

Pedro Thiago Vilela de Mendonça²

Matheus da Silva Menezes³

Ivan Mezzomo⁴

Nayara Trindade de Oliveira⁵

Centro de Ciências Exatas e Naturais, UFERSA, Mossoró, RN

A modelagem matemática busca prever o comportamento de certos fenômenos, e é empregada nas mais diversas áreas, na física, química, engenharias, dentre outros [3]. Uma das aplicações na engenharia é na resolução de problemas envolvendo misturas químicas. As misturas são constituídas por duas ou mais substâncias, sendo estas simples ou compostas, onde suas propriedades vão variar de acordo com a proporção de seus componentes e essas proporções podem ser alteradas por processos químicos [2]. Em problemas envolvendo misturas químicas é bastante comum encontrarmos equações diferenciais lineares de primeira ordem. O presente estudo busca ilustrar uma situação analítica e sua respectiva solução numérica.

Para resolver essa problemática, os métodos numéricos se apresentam como uma alternativa válida para encontrar uma solução aproximada. No presente trabalho foi utilizado o cálculo analítico, e comparado o desempenho dos métodos numéricos de Euler e Range-Kutta de quarta ordem, onde ambos são classificados como método de passo único. Segundo CHAPRA [1], métodos de passo único trabalham com base apenas na informação de um único ponto, e calculam uma predição futura. Os problemas envolvendo misturas químicas trabalham com problema de valor inicial, portanto esse primeiro ponto é sempre conhecido.

De uma forma geral, os métodos de passo único trabalham na seguinte forma:

$$f(t_{i+1}) = f(t_i) + h * \varphi \quad (1)$$

para $i = 0, 1, \dots, (n - 1)$, φ é uma função que depende de x_i , y_i e h , chamada de função incremento e h é o tamanho de passo.

No método de Euler, a função incremento se refere à inclinação no ponto inicial de cada intervalo $f(x_i)$, ou seja, $\varphi(x_i, y_i, h) = f(x_i, y_i)$. Já no método de Runge-Kutta de quarta

¹mairlanealencar@hotmail.com

²pvthiago@hotmail.com

³matheus@ufersa.edu.br

⁴imezzomo@ufersa.edu.br

⁵nayara_trindade@live.com

ordem, temos que a função incremento é dada por $\varphi(x_i, y_i, h) = f(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$, onde os parâmetros k_1, k_2, k_3, k_4 utilizados no presente trabalho são dados pelas seguintes expressões:

$$k_1 = f(x_i, y_i); \quad k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1); \quad k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2); \quad k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3) \quad \forall i = 0, 1, \dots, (n-1) \quad (2)$$

Para testar a funcionalidade dos métodos numéricos, efetuou-se a implementação no SciLab 5.5.2 em um computador Intel Core i5, 4GB de RAM e Ubuntu 14.02., para a resolução de um problema envolvendo mistura química [3]. Considere um tanque contendo inicialmente 300 galões de salmoura, com taxa de entrada da salmoura $3\text{gal}/\text{min}$, concentração de $2\text{lb}/\text{gal}$, e taxa de saída de $2\text{gal}/\text{min}$. Com essas informações nota-se que o líquido acumulará no tanque a uma taxa de $1\text{gal}/\text{min}$, logo em um tempo t teremos um volume de $(300 + t)$ galões e uma taxa de entrada do sal igual a $(3\text{gal}/\text{min}) * (2\text{lb}/\text{gal}) = 6\text{lb}/\text{min}$. A concentração no fluxo de saída é $A(t)/(300 + t)$, onde $A(t)$ é a quantidade de sal no interior do tanque e a quantidade fluxo de saída de sal é $A(t)/(300 + t) * (2\text{lb}/\text{gal})$.

Descrevendo a variação da quantidade de sal A em função do tempo t , temos:

$$\frac{dA}{dt} = 6 - \frac{2A}{300 + t} \quad (3)$$

Inicialmente sabemos que a quantidade de sal dissolvida no tanque é 50lb , portanto $A(0) = 50$. As soluções encontradas para o problema são:

Tabela 1: Resultado das simulações realizadas

t	$A(t)$ Analítico	$A(t)$ Euler	$A(t)$ Runge-Kutta	Erro Euler	Erro RK
50	295.91837	333.33333	295.90730	12.64368	0.00374
100	490.62500	538.09524	490.61252	9.67546	0.00254
150	655.55556	703.57143	655.54404	7.32446	0.00176
200	802.00000	847.22222	801.98992	5.63868	0.00126
250	936.36364	977.77778	936.35493	4.42287	0.00093
300	1062.50000	1100.00000	1062.49249	3.52941	0.00071
350	1182.84024	1216.66667	1182.83373	2.85976	0.00055
400	1298.97959	1329.48718	1298.97392	2.34858	0.00044

Constatamos que o método de Runge-Kutta de quarta ordem apresentou um menor erro em relação ao método de Euler, sendo mais apropriado para resolução desse tipo de problema. Deste modo comprovamos a eficiência da utilização deste método numérico na resolução desse recorrente problema no ramo da engenharia química.

Referências

- [1] Chapra. S. *Métodos Numéricos Aplicados com MATLAB para Engenheiros e Cientistas*. 3 ed., Bookman, Porto Alegre, 2013.
- [2] T. Brown, H.E. Lemay, B.E. Bursten *Química: a ciência central*. 9 ed., Prentice Hall, São Paulo, 2005.
- [3] D.G. Zill. *Equações Diferenciais com aplicações em modelagem*. 9 ed., Cengage Learning, São Paulo, 2011.