EXEMPLO MOTIVADOR II

Método da Aproximação Polinomial Aplicado a Problemas Unidirecionais sem Simetria

1. Equações Diferenciais Ordinárias – Problemas de Valores no Contorno

Estrutura Geral do Problema:

$$\frac{dy(x)}{dx} = \lambda \cdot \frac{d^2y(x)}{dx^2} - f[x, y(x)] \tag{1}$$

no domínio : $0 \le x < 1$, λ : constante não negativa.

Sujeita às condições de contorno:

$$\text{CC1: } -\lambda \cdot \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0} + y(x)\big|_{x=0} = 1 \tag{2-a}$$

$$\text{CC2: } \lambda \cdot \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=1} = 0 \tag{2-b}$$

Propondo-se a aproximação polinomial de grau n+1 em x para y(x):

$$y(x) \cong y^{(n+1)}(x) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot y_j$$

onde: $\ell_j(x)$:polinômio em x de grau n+1, tal que: (3)

$\ell_j(x_i) = \delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{para } i = j \\ 0 & \text{para } i \neq j \end{cases}$ [função δ de Krönecker];

$y_j = y^{(n)}(x_j)$ e $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots x_n < x_{n+1} \equiv 1$

Esta aproximação, satisfazendo a CC2 com $\lambda \neq 0$, pode também ser representada na forma:

$$y(x) \cong y^{(n+1)}(x) = c_0 + (1-x)^2 \sum_{j=1}^{n} c_j \cdot x^{j-1} \Rightarrow y(0) \cong y^{(n+1)}(0) = c_0 + c_1 \quad \text{e}$$

$$\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{u=1} \cong \left.\frac{dy^{(n+1)}(x)}{dx}\right|_{x=0} = c_2 - 2 \cdot c_1$$

obrigando esta aproximação satisfazer a CC1, isto é: $-\lambda \cdot \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0} + y(x)\big|_{x=0} = 1$,

resulta: $-\lambda \cdot (c_2 - 2 \cdot c_1) + (c_0 + c_1) = 1 \Rightarrow c_0 = 1 - (1 + 2 \cdot \lambda) \cdot c_1 + \lambda \cdot c_2$, que substituído na expressão de $y^{(n+1)}(x)$, resulta em:

$$y^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) = 1 + \left[(1-x)^2 - (1+2\lambda)\right]\cdot c_1 + \left[(1-x)^2 \cdot x + \lambda\right]\cdot c_2 + $$
$$+ (1-x)^2 \cdot \sum_{j=3}^{n} c_j \cdot x^{j-1} \tag{4}$$

$$\text{onde: } \mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \in \Re^n$$

Note que nesta forma, a aproximação polinomial $y^{(n+1)}(x)$ satisfaz às duas condições de contorno associadas ao problema!

A substituição da aproximação polinomial $y^{(n+1)}(x)$ na equação diferencial (1) dá origem à expressão do *Resíduo* da aproximação, definido por:

$$\boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) = \frac{dy^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{dx} - \lambda \cdot \frac{d^2 y^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{dx^2} + f\left[x, y^{(n+1)}(x,\mathbf{c})\right] \tag{5}$$

Este resíduo mede a qualidade da aproximação ponto a ponto do intervalo: $0 < x < 1$, para quantificá-lo globalmente, associa-se a seguinte forma integral:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} \omega_j(x) \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) \cdot dx \equiv 0 \tag{6}$$

para j = 1, 2, ..., n

$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(\mathbf{c})$ é chamado de j'ésimo *Resíduo Ponderado* da aproximação, onde $\omega_j(x)$ é o j'ésimo peso do resíduo e é o que caracteriza o tipo do método dentro da classe geral de métodos denominados como ***Métodos dos Resíduos Ponderados***. Assim, $\omega_j(x)$ associa-se aos dois ***Métodos dos Resíduos Ponderados***:

$\omega_j(x)$	***Método dos Resíduos Ponderados***	
x^{j-1}	***Método dos Momentos***	(7-a)
$\dfrac{\partial y^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{\partial c_j} = \begin{cases} (1-x)^2 - (1+2\lambda) \text{ para } j=1 \\ (1-x)^2 \cdot x + \lambda \text{ para } j=2 \\ (1-x)^2 \cdot x^{j-1} \text{ para } j=3,\cdots,n \end{cases}$	***Método de Galerkin***	(7-b)

O valor do ***Valor Médio do Quadrado do Resíduo*** será considerado na avaliação do desempenho do método, sendo este valor dado por:

$$\overline{\boldsymbol{R}}_{quad}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} \left[\boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c})\right]^2 \cdot dx \qquad (8)$$

1-) ***<u>Método dos Momentos</u>***

Neste caso:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} x^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) \cdot dx \equiv 0 \qquad (9)$$

para j = 1, 2, ..., n

Quando a função: $f[x,y(u)] = f[y(x)] = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot y(x)$, sendo α_0 e α_1 constantes, o resíduo $\boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c})$ será uma função polinomial em <u>x</u> com o mesmo grau <u>n+1</u> de $y^{(n+1)}(x,\mathbf{c})$. Desta forma, o integrando de (9) $x^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c})$ será um polinômio em <u>x</u> de grau <u>n+j</u> como <u>j</u> varia de <u>1</u> a <u>n</u>, o maior grau assumido por este termo é: <u>2n</u>. Desta forma a integral em (9) pode, no caso linear, ser avaliada **exatamente** por quadratura de Gauss-Lobatto, resultando na expressão:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(\mathbf{c}) \cong \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}_i \equiv 0 \qquad (10)$$

para j = 1, 2, ..., n, onde $\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i, \mathbf{c})$

Onde: $0 < x_1 < x_2 < \cdots x_n < 1$ são as <u>n</u> raízes de $P_n^{(1,1)}(x)$, x_0=0 , x_{n+1}=1 e verificando-se a igualdade caso: $f[x, y(u)] = f[y(x)] = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot y(x)$, sendo α_0 e α_1 constantes.

As Eq. (10) dão origem a um sistema linear de <u>n</u> equações e <u>n+2</u> incógnitas: $\boldsymbol{R}_0, \boldsymbol{R}_1, \cdots, \boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{R}_{n+1}$. Resolvendo este sistema em $\boldsymbol{R}_1, \cdots, \boldsymbol{R}_n$, expressando-os em termos de $\boldsymbol{R}_0$ e $\boldsymbol{R}_{n+1}$, tem-se:

$$\boldsymbol{R}_i = \mathbf{V}_{i,0} \cdot \boldsymbol{R}_0 + \mathbf{V}_{i,1} \cdot \boldsymbol{R}_{n+1} \text{ para i =1, 2, ...,n} \tag{11}$$

$$\text{onde: } \mathbf{V} = \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{P} \quad \text{sendo: } \mathbf{G}_{i,j} = H_j \cdot x_j^{i-1}, \ \mathbf{P} = -\begin{bmatrix} H_0 & H_{n+1} \\ 0 & H_{n+1} \\ \vdots & \vdots \\ 0 & H_{n+1} \end{bmatrix}$$

Se a Equação (11) for satisfeita, pode-se assegurar que <u>todos</u> os resíduos ponderados, $\boldsymbol{R}_j^{(n)}(\mathbf{c})$, são *aproximadamente* nulos, sendo estes *exatamente* nulos se $f[u, y(u)] = f[y(u)] = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot y(u)$, onde α_0 e α_1 são constantes.

Substituindo em (11), as expressões dos resíduos, m vista de:

$y^{(n+1)}(x_i) = y_i$; $\left.\dfrac{dy^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{dx}\right|_{x_i} = \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{i,j} \cdot y_j$ e $\left.\dfrac{d^2y^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{dx^2}\right|_{x_i} = \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{B}_{i,j} \cdot y_j$, tem-se: $\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i, \mathbf{c}) = \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{C}_{i,j} \cdot y_j + f[x_i, y_i]$, onde: $\mathbf{C}_{i,j} = \mathbf{A}_{i,j} - \lambda \cdot \mathbf{B}_{i,j}$,

e, rearranjando a expressão resultante, resulta:

$$\sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{C}^*_{i,j} \cdot y_j + f[x_i, y_i] - \mathbf{V}_{i,0} \cdot f[x_0, y_0] - \mathbf{V}_{i,1} \cdot f[x_{n+1}, y_{n+1}] = 0 \ \text{ para } i = 1, 2, \cdot\cdot \tag{12}$$

$$\text{onde: } \mathbf{C}^*_{i,j} = \mathbf{C}_{i,j} - \mathbf{V}_{i,0} \cdot \mathbf{C}_{i,0} - \mathbf{V}_{i,1} \cdot \mathbf{C}_{i,n+1}$$

Além destas equações, tem-se, em vista de: $y(0) \cong y^{(n+1)}(x_0) = y_0$

$y(1) \cong y^{(n+1)}(x_{n+1}) = y_{n+1}$; $\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0} \cong \left.\frac{dy^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{dx}\right|_{x_0=0} = \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{0,j} \cdot y_j$ e

$\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=1} \cong \left.\frac{dy^{(n+1)}(x,\mathbf{c})}{dx}\right|_{x_{n+1}=1} = \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{n+1,j} \cdot y_j$ que substituídas em (2-a) e (2-b) dá origem a: $-\lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{0,j} \cdot y_j + y_{n+1} = 1$ e $\lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{n+1,j} \cdot y_j = 0$ resulta no sistema algébrico não linear de <u>n+2</u> equações e <u>n+2</u> incógnitas [y_0, y_1 , y_2 , ..., y_n , y_{n+1}] :

$$\begin{cases} -\lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{0,j} \cdot y_j + y_0 = 1 \\ \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{C}^*_{i,j} \cdot y_j + f[y_i] - \mathbf{V}_{i,0} \cdot f[y_0] - \mathbf{V}_{i,1} \cdot f[y_{n+1}] = 0 \text{ para } i = 1, 2, \cdots, n \\ \lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{n+1,j} \cdot y_j = 0 \end{cases} \tag{13}$$

que pode ser resolvido pelo método de Newton-Raphson.

2-) ***<u>Método de Galerkin</u>***

Neste caso:

$$\boldsymbol{R}_1^{(n+1)}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} \left[(1-x)^2 - (1+2\lambda)\right] \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) \cdot dx \equiv 0$$

$$\boldsymbol{R}_2^{(n+1)}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} \left[(1-x)^2 \cdot x + \lambda\right] \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) \cdot dx \equiv 0 \tag{14}$$

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} (1-x)^2 \cdot x^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) \cdot dx \equiv 0$$

para j = 3, ..., n

Quando a função: $f[x, y(u)] = f[y(x)] = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot y(x)$, sendo α_0 e α_1 constantes, o resíduo $\boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c})$ será uma função polinomial em <u>x</u> com o mesmo grau <u>n+1</u> de $y^{(n+1)}(x,\mathbf{c})$. Desta forma, o integrando de (9) $(1-x)^2 \cdot x^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c})$, para n>2, será um polinômio em $\underline{x}$ de grau $\underline{n+j+2}$ como $\underline{j}$ varia de $\underline{3}$ a $\underline{n}$, o maior grau assumido por este termo é: $\underline{2n+2}$. Desta forma a integral em (14) pode, no caso linear, ser avaliada **exatamente** por quadratura de Gauss-Lobatto, até $\underline{j}$ igual a $\underline{n-1}$, resultando na expressão:

$$\boldsymbol{R}_1^{(n+1)}(\mathbf{c}) \cong \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot \left[(1-x_i)^2 - (1+2\lambda)\right] \cdot \boldsymbol{R}_i \equiv 0$$

$$\boldsymbol{R}_2^{(n+1)}(\mathbf{c}) \cong \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot \left[(1-x_i)^2 \cdot x_i + \lambda\right] \cdot \boldsymbol{R}_i \equiv 0 \tag{15}$$

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(\mathbf{c}) \cong \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot (1-x_i)^2 \cdot x_i^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}_i \equiv 0 \quad \text{para } j = 3, \ldots, n-1,$$

$$\text{onde } \boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i, \mathbf{c})$$

O último resíduo ponderado não pode ser computado pela aplicação direta do método de quadratura de Gauss-Lobatto, pois o integrando é, neste caso, $(1-x)^2 \cdot x^{n-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x, \mathbf{c})$, um polinômio em $\underline{x}$ de grau $\underline{2n+2}$ cujo coeficiente de x^{2n+2} é: $\sum_{j=0}^{n+1} \frac{\boldsymbol{R}_j}{\alpha_j}$, onde: $\alpha_j = \left.\frac{dp_{nodal}(x)}{dx}\right|_{x_j}$ para $j = 0, 1, \cdots, n, (n+1)$ e

$$p_{nodal}(x) = (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdots (x - x_n) \cdot (x - x_{n+1}) = x \cdot (x-1) \cdot p_n^{(1,1)}(x)$$

sendo: $0 < x_1 < x_2 < \cdots x_n < 1$ as $\underline{n}$ raízes de $P_n^{(1,1)}(x)$, $x_0=0$, $x_{n+1}=1$.

Assim: $(1-x)^2 \cdot x^{n-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x, \mathbf{c}) = \left(\sum_{j=0}^{n+1} \frac{\boldsymbol{R}_j}{\alpha_j}\right) \cdot x^{2\cdot n+2} + \cdots$

e $\frac{1}{(2n+2)!} \cdot \frac{d^{2n+2}\left[(1-x)^2 \cdot x^{n-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x, \mathbf{c})\right]}{dx^{2n+2}} = \left(\sum_{j=0}^{n+1} \frac{\boldsymbol{R}_j}{\alpha_j}\right)$.

mas da expressão geral da quadratura de Gauss-Lobatto:

$$\int_{x=0}^{x=1} f(x) \cdot dx = \sum_{j=0}^{n+1} H_j \cdot f(x_j) + \frac{1}{(2n+2)!} \cdot \left.\frac{d^{2n+2} f(t)}{dt^{2n+2}}\right|_{t=\bar{\xi}} \cdot \int_{x=0}^{x=1} x \cdot (x-1) \cdot \left[p_n^{(1,1)}(x)\right]^2 \cdot dx \text{, assim:}$$

$$\boldsymbol{R}_n^{(n+1)}(\mathbf{c}) = \int_{x=0}^{x=1} (1-x)^2 \cdot x^{n-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{c}) \cdot dx = \sum_{j=0}^{n+1} H_j \cdot (1-x_j)^2 \cdot x_j^{n-1} \cdot \boldsymbol{R}_j + \\ + \left(\sum_{j=0}^{n+1} \frac{\boldsymbol{R}_j}{\alpha_j} \right) \cdot \int_{x=0}^{x=1} x \cdot (x-1) \cdot \left[p_n^{(1,1)}(x) \right]^2 \cdot dx$$

Identificando:

$$(1-x_0)^2 \cdot x_0^{n-1} = 0 \; ; (1-x_{n+1})^2 \cdot x_{n+1}^{n-1} = 0 \quad \text{e}$$

$$\int_{x=0}^{x=1} x \cdot (1-x) \cdot \left[p_n^{(1,1)}(x) \right]^2 \cdot dx = \boldsymbol{C}_n^{(1,1)} = \frac{n! \cdot [(n+1)!]^2 \cdot (n+2)!}{(2 \cdot n+2)! \cdot (2 \cdot n+3)!},$$

tem-se:

$$\boldsymbol{R}_n^{(n+1)}(\mathbf{c}) = -\frac{\boldsymbol{C}_n^{(1,1)}}{\alpha_0} \cdot \boldsymbol{R}_0 + \sum_{j=1}^{n} \left[H_j \cdot (1-x_j)^2 \cdot x_j^{n-1} - \frac{\boldsymbol{C}_n^{(1,1)}}{\alpha_j} \right] \cdot \boldsymbol{R}_j - \frac{\boldsymbol{C}_n^{(1,1)}}{\alpha_{n+1}} \cdot \boldsymbol{R}_{n+1} = 0$$

Deste modo, é possível representar os dois métodos na forma geral:

$$\boldsymbol{R}_i^{(n+1)}(\mathbf{c}) \cong \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{G}_{i,j} \cdot \boldsymbol{R}_j \equiv 0 \quad \text{para } i = 1, ..., n \tag{16}$$

$$\text{onde } \boldsymbol{R}_j = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_j, \mathbf{c})$$

Os elementos da matriz **G** são:

- ***Método dos Momentos***

  $$\mathbf{G}_{i,j} = H_j \cdot x_j^{i-1} \quad \text{para i= 1, 2,..., n}$$

- ***Método de Galerkin***

  $$\mathbf{G}_{1,j} = H_j \cdot \left[(1-x_j)^2 - (1+2\lambda) \right]$$

  $$\mathbf{G}_{2,j} = H_j \cdot \left[(1-x_j)^2 \cdot x_j + \lambda \right]$$

  $$\mathbf{G}_{i,j} = H_j \cdot (1-x_j)^2 \cdot x_j^{i-1} \quad \text{para i = 3, 4, ..., n-1}$$

  $$\mathbf{G}_{n,j} = H_j \cdot (1-x_j)^2 \cdot x_j^{n-1} - \frac{\boldsymbol{C}_n^{(1,1)}}{\alpha_j}$$

O sistema linear (16) pode ser resolvido em : $\boldsymbol{R}_1, \ \boldsymbol{R}_2, \cdots \boldsymbol{R}_n$, resultando em:

$$\boldsymbol{R}_i = \mathbf{V}_{i,0} \cdot \boldsymbol{R}_0 + \mathbf{V}_{i,1} \cdot \boldsymbol{R}_{n+1} \text{ para i =1, 2, ...,n} \tag{17}$$

$$\text{onde: } \mathbf{V} = \mathbf{Q}^{-1} \cdot \mathbf{P}$$

$$\text{sendo: } \mathbf{Q}_{i,j} = \mathbf{G}_{i,j} \text{ para i, j} = 1, \cdots, n \text{ e } \mathbf{P} = -\begin{bmatrix} \mathbf{G}_{1,0} & \mathbf{G}_{1,n+1} \\ \mathbf{G}_{2,0} & \mathbf{G}_{2,n+1} \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{G}_{n,0} & \mathbf{G}_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

Resultando no sistema algébrico não linear de <u>n+2</u> equações e <u>n+2</u> incógnitas [y_0, y_1 , y_2 , ..., y_n , y_{n+1}] :

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{C}^*_{i,j} \cdot y_j = f[x_i, y_i] - \mathbf{V}_{i,0} \cdot f[x_0, y_0] - \mathbf{V}_{i,1} \cdot f[x_{n+1}, y_{n+1}] \text{ para i} = 1, 2, \cdots, n \\ -\lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{0,j} \cdot y_j + y_0 = 1 \\ \lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{n+1,j} \cdot y_j = 0 \end{cases} \tag{18}$$

Onde: $\mathbf{C}^*_{i,j} = \mathbf{C}_{i,j} - \mathbf{V}_{i,0} \cdot \mathbf{C}_{i,0} - \mathbf{V}_{i,1} \cdot \mathbf{C}_{i,n+1}$

que pode ser resolvido pelo método de Newton-Raphson.

2. <u>Equações Diferenciais Parciais Parabólicas – o **Método das Linhas**</u>

Estrutura Geral do Problema:

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial y(x,t)}{\partial x} = \lambda \cdot \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} - f[x, y(x,t)] \tag{1}$$

no domínio : 0 < x < 1 e t >0.

Sujeita às condições :

$$\text{Condições de contorno: } \begin{cases} \text{CC1: } -\lambda \cdot \left.\frac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} + \left. y(x,t)\right|_{x=0} = y_f(t) & \text{(2-a)} \\ \text{CC2: } \lambda \cdot \left.\frac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1} = 0 & \text{(2-b)} \end{cases}$$

para t>0

Condição Inicial: $y(x,t)\big|_{t=0} = y_{inic}(x)$ para $0 \le x < 1$ (2-c)

A aplicação do método da aproximação polinomial é no caso transiente análoga à do caso estacionário, isto é: aplica-se a aproximação polinomial à variável y(x,t) na variável x e a equação diferencial parcial original se transforma em um sistema de n equações diferenciais ordinárias em t acoplado a duas equações algébricas relativas às condições de contorno 1 e 2. Então a aproximação polinomial de grau n+1 em x de y(x,t) será:

$$y(x,t) \cong y^{(n+1)}(x,t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot y_j(t) \quad (3)$$

Assim, identifica-se a expressão do resíduo por:

$$\boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,\mathbf{y}) = \frac{\partial y^{(n+1)}(x,\mathbf{y})}{\partial t} + \frac{\partial y^{(n+1)}(x,\mathbf{y})}{\partial x} - \lambda \cdot \frac{\partial^2 y^{(n+1)}(x,\mathbf{y})}{\partial x^2} + f\left[x, y^{(n+1)}(x,\mathbf{y})\right] \quad (4)$$

e de (3), tem-se: $\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i,\mathbf{y}) = \dfrac{dy_i(t)}{dt} + \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{C}_{i,j} \cdot y_j(t) + f[x_i, y_i(t)]$

onde: $\mathbf{C}_{i,j} = \mathbf{A}_{i,j} - \lambda \cdot \mathbf{B}_{i,j}$.

A aplicação do método do resíduo ponderado aplicado à aproximação polinomial (3), dá origem ao sistema de equações algébrico diferenciais:

$$\begin{cases} \dfrac{dy_i(t)}{dt} - \mathbf{V}_{i,0} \cdot \dfrac{dy_0(t)}{dt} - \mathbf{V}_{i,1} \cdot \dfrac{dy_{n+1}(t)}{dt} + \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{C}^*_{i,j} \cdot y_j(t) = \\ = f[x_i, y_i(t)] - \mathbf{V}_{i,0} \cdot f[x_0, y_0(t)] - \mathbf{V}_{i,1} \cdot f[x_{n+1}, y_{n+1}(t)] \quad \text{para } i = 1, 2, \cdots, n \\ -\lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{0,j} \cdot y_j(t) + y_0(t) = 1 \\ \lambda \cdot \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{n+1,j} \cdot y_j(t) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

sujeito às condições iniciais: $y_i(0) = y_{inic}(x_i)$ para $i = 0, 1, \cdots, n, n+1$

Onde: $\mathbf{C}^*_{i,j} = \mathbf{C}_{i,j} - \mathbf{V}_{i,0} \cdot \mathbf{C}_{i,0} - \mathbf{V}_{i,1} \cdot \mathbf{C}_{i,n+1}$ e as demais matrizes envolvidas expressas e/ou calculadas de formas análogas às apresentadas no caso estacionário.

EXERCÍCIO DE TREINAMENTO

Resolver o problema (simulação da partida de um reator com dispersão axial e isotérmico):

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial y(x,t)}{\partial x} = \lambda \cdot \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} - f\left[x, y(x,t)\right] \qquad (1)$$

no domínio : $0 < x < 1$ e $t > 0$.

Sujeita às condições :

$$\text{Condições de contorno: } \begin{cases} CC1: -\lambda \cdot \left.\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} + \left. y(x,t)\right|_{x=0} = 1 & (2\text{-a}) \\ CC2: \lambda \cdot \left.\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1} = 0 & (2\text{-b}) \end{cases} \quad \text{para } t>0$$

$$\text{Condição Inicial: } \left. y(x,t)\right|_{t=0} = 0 \text{ para } 0 \le x < 1 \qquad (2\text{-c})$$

Resolva seu problema por aproximação polinomial **global**, para diferentes valores do parâmetro λ (analise também os casos extremos: $\lambda=0$ e $\lambda\to\infty$).

Considere as duas formas de f(x,y):

$$f\left[x, y(x,t)\right] = \begin{cases} Da \cdot y(x,t) & \text{(caso linear!)} \\ Da \cdot \left[y(x,t)\right]^m & \text{(reação irreversível de ordem } m > 0\text{)} \end{cases}$$

e diferentes valores de Da (número de Damköhler: parâmetro positivo!) e m (ordem da reação).

Verifique em que casos as oscilações nos perfis de concentração , advindos da aproximação polinomial, são significativas.