

Exemplos Ilustrativos de EDO com Problemas de Valores no Contorno

1-) Modelo estacionário do reator com dispersão isotérmico.

Como o objetivo deste estudo de caso é ilustrar o novo procedimento e avaliar o seu desempenho, consideraremos um exemplo que apresenta solução analítica. Assim, o modelo é constituído por uma equação diferencial ordinária de segunda ordem que descreve a variação com z da concentração do reagente:

$\frac{dy(z)}{dz} = \frac{1}{Pe} \cdot \frac{d^2y(z)}{dz^2} - Da \cdot y(z)$, definida no domínio: $0 < z < 1$ e sujeita às condições de contorno:

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: -\frac{1}{Pe} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=0} + y(z) \Big|_{z=0} = 1$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: \frac{1}{Pe} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=1} = 0.$$

Os valores característicos do problema são as raízes de:

$$P_2(\lambda) = \lambda^2 - Pe \cdot \lambda - Da \cdot Pe = 0 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = \frac{-2 \cdot Da}{1 + \sqrt{1 + 4 \cdot \frac{Da}{Pe}}} \\ \lambda_2 = \frac{-2 \cdot Da}{1 - \sqrt{1 + 4 \cdot \frac{Da}{Pe}}} \end{cases}.$$

$$\text{Assim: } y(z) = c_1 \cdot e^{\lambda_1 z} + c_2 \cdot e^{\lambda_2 z} \text{ sendo: } \begin{pmatrix} 1 - \frac{\lambda_1}{Pe} & 1 - \frac{\lambda_2}{Pe} \\ \lambda_1 \cdot e^{\lambda_1} & \lambda_2 \cdot e^{\lambda_2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ quando}$$

$$Pe \rightarrow \infty: y(z) = e^{-Da \cdot z}.$$

Para resolver numericamente as equações diferenciais desse exemplo, definem-se as seguintes *variáveis de estado*: $y(z)$ e $u(z) = y(z) - \frac{1}{Pe} \cdot \frac{dy(z)}{dz}$, resultando em:

$$\begin{cases} \frac{dy(z)}{dz} = Pe \cdot [y(z) - u(z)] \\ \frac{du(z)}{dz} = -Da \cdot y(z) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y(z) - \frac{1}{Pe} \frac{dy(z)}{dz} = u(z) \\ \frac{du(z)}{dz} = -Da \cdot y(z) \end{cases}$$

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: u(0) = 1$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: y(1) = u(1)$$

Resolução por aproximação polinomial global+ método dos momentos

Considerando a aproximação polinomial de grau $n+1$ de $y(z)$:

$$y(z) \cong y^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j. \text{ Satisfazendo as condições de contorno originais:}$$

$$\text{CC1: } z=0 \rightarrow -\frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j + y_0 = 1 \text{ e CC2: } z=1 \rightarrow -\frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j = 0.$$

A substituição da aproximação $y^{(n+1)}(z)$ na equação diferencial original dá origem à expressão do resíduo:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} \left(\frac{B_{j,k}}{Pe} - A_{j,k} \right) \cdot y_k - Da \cdot y_j \right] \text{ que é também uma função}$$

polinomial de grau $n+1$ de z . Aplicando o método dos momentos e computando as integrais correspondentes por quadratura de Lobatto, obtém-se:

$$\sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot x_j^{i-1} \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} \left(\frac{B_{j,k}}{Pe} - A_{j,k} \right) \cdot y_k - Da \cdot y_j \right] = 0 \text{ para } i = 1, 2, \dots, n.$$

Dando origem ao sistema algébrico linear de dimensão $n+2$:

$$\begin{cases} -\frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j + y_0 = 1 \\ \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot x_j^{i-1} \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} \left(\frac{B_{j,k}}{Pe} - A_{j,k} \right) \cdot y_k - Da \cdot y_j \right] = 0 \text{ para } i = 1, 2, \dots, n. \\ \frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j = 0 \end{cases}$$

Quando $Pe \rightarrow \infty$ a última linha da matriz característica do sistema algébrico acima é nula tornando assim a matriz singular e o sistema não apresenta solução.

Resolução por aproximação polinomial global aplicada às variáveis de estado+ método dos momentos

Considerando a aproximação polinomial de grau $n+1$ de $u(z)$:

$$u(z) \cong u^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot u_j, \text{ com } u_0 = 1.$$

Substituindo essa aproximação na equação: $y^{(n+1)}(z) - \frac{1}{Pe} \frac{dy^{(n+1)}(z)}{dz} = u^{(n+1)}(z).$

Essa última equação apresenta a solução analítica: $y^{(n+1)}(z) = a \cdot e^{Pe \cdot z} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot v_j,$ em

que os valores de v_j são calculados através da resolução do sistema algébrico linear:

$$v_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe} \cdot v_k = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1.$$

Além disso, como: $y(1) = u(1) \Rightarrow a \cdot e^{Pe} + v_{n+1} = u_{n+1} \rightarrow a = (u_{n+1} - v_{n+1}) \cdot e^{-Pe},$ resultando

em: $y^{(n+1)}(z) = (u_{n+1} - v_{n+1}) \cdot e^{-Pe(1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot v_j.$

Quando $Pe \rightarrow \infty,$ obtêm-se $v_i = u_i$ para $i = 0, 1, \dots, n+1$ e, em consequência:

$$y^{(n+1)}(z) = u^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j \text{ e } y_0 = u_0 = 1.$$

As substituições das expressões de $u^{(n+1)}(z)$ e $y^{(n+1)}(z)$ em $\frac{du(z)}{dz} = -Da \cdot y(z)$ dão

origem a expressão do resíduo:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} A_{j,k} \cdot u_k + Da \cdot v_j \right] + Da \cdot (u_{n+1} - v_{n+1}) \cdot e^{-Pe(1-z)}$$

Considerando o momento de ordem k do resíduo: $\mathbb{R}_k = \int_{z=0}^{z=1} z^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z) \cdot dz$ que pode ser

computado por quadratura de Gauss-Lobatto na forma: $\mathbb{R}_k \cong \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z_j)$.

Anulando os n primeiros momentos, obtém-se o sistema algébrico:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe} \cdot v_k = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \\ \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} A_{j,k} \cdot u_k + Da \cdot v_j \right] + Da \cdot (u_{n+1} - v_{n+1}) \cdot I_k = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n \end{array} \right.$$

Em que: $u_0 = 1$ e $I_k = \int_0^1 z^k e^{-Pe(1-z)} \cdot dz \Rightarrow I_0 = \int_0^1 e^{-Pe(1-z)} \cdot dz = \frac{1-e^{-Pe}}{Pe}$ e $I_k = \frac{1-k \cdot I_{k-1}}{Pe}$.

Que é um sistema algébrico linear de dimensão $2 \cdot n + 3$ cujas incógnitas são:

v_i para $i = 0, 1, \dots, n+1$ e u_i para $i = 1, \dots, n+1$.

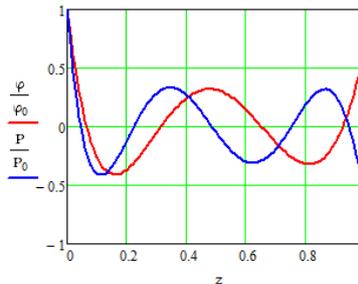
Quando $Pe \rightarrow \infty$ obtém-se: $\mathfrak{R}^{(n+1)}(z_j) = \sum_{k=0}^{n+1} A_{j,k} \cdot u_k + Da \cdot v_j$, resultando no

sistema algébrico linear:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_i = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \\ \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} A_{j,k} \cdot u_k + Da \cdot v_j \right] = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n, \text{ com } u_0 = 1. \end{array} \right.$$

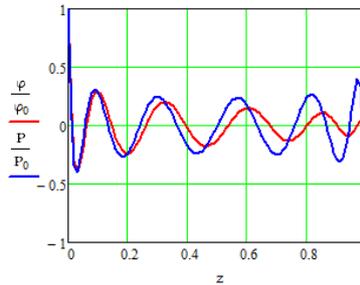
Que é um sistema algébrico linear de dimensão $2 \cdot n + 3$ não singular!

i-) Exemplo numérico 1. $Pe = 10$ e $Da = 5$. Com $n = 4$ a aproximação dos perfis de concentração é bastante boa, entretanto a integral do erro quadrático do método dos momentos convencional é igual a $5,14 \cdot 10^{-7}$ e o do método dos momentos aplicado às aproximações polinomiais das variáveis de estado é igual a $1,28 \cdot 10^{-7}$. Outra vantagem desse último método é a anulação dos resíduos em cinco pontos no lugar dos quatro pontos do primeiro método, tais resíduos são apresentados na figura a seguir.



ii-) Exemplo numérico 2. $Pe = 10^6$ e $Da = 20$. Com $n = 10$ a aproximação dos perfis de concentração é bastante boa, entretanto a integral do erro quadrático do método dos

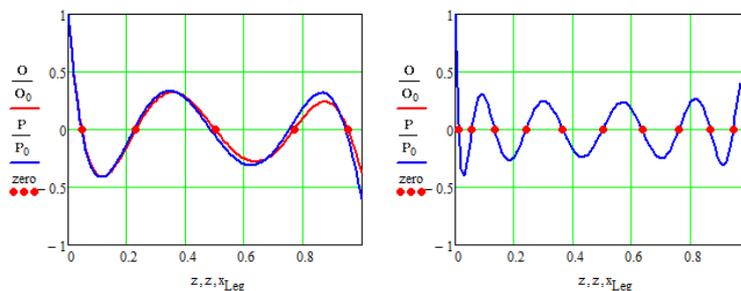
momentos convencional é igual a $9,96 \cdot 10^{-8}$ e do método dos momentos aplicado às aproximações polinomiais das variáveis de estado é igual a $8,68 \cdot 10^{-8}$. Outra vantagem desse último método é a anulação dos resíduos em onze pontos no lugar dos dez pontos do primeiro método, tais resíduos são apresentados na figura a seguir.



O fato de o último procedimento anular o resíduo em $n+1$ pontos pode ser explicado pelo fato das integrais $\mathbb{R}_k = \int_{z=0}^{z=1} z^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z) \cdot dz$ serem nulas para $k = 0, \dots, n$, o cômputo dessas integrais por quadratura de Lobatto equivale a aproximar o resíduo $\mathfrak{R}^{(n+1)}(z)$ por um polinômio de grau $n+1$ em z , como o polinômio de Legendre de $n+1$ apresenta a propriedade: $\int_{z=0}^{z=1} z^k \cdot P_{n+1}(z) \cdot dz = 0$ para $k < n$ o resíduo $\mathfrak{R}^{(n+1)}(z)$ será nulo nas $n+1$ raízes de $P_{n+1}(z)$. Sendo assim, o método pode ser considerado como quase equivalente ao método de colocação adotando como pontos de colocação as $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$. Dando origem assim às equações algébricas:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe} \cdot v_k = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \\ \mathfrak{R}^{(n+1)}(\hat{z}_{k+1}) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot \left[\sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot u_i + Da \cdot v_j \right] + Da \cdot (u_{n+1} - v_{n+1}) \cdot e^{-Pe(1-\hat{z}_{k+1})} = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n \end{array} \right.$$

Em que: $u_0 = 1$ e $0 < \hat{z}_1 < \hat{z}_2 < \dots < \hat{z}_{n+1} < 1$ são as $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$. Nas figuras abaixo os dois métodos de calcular os momentos nulos, dos dois exemplos numéricos anteriores, são confrontados. Os pontos nas figuras são as $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$.



2-) Modelo transiente da partida de um reator tubular com dispersão isotérmico.

Neste caso o modelo é constituído por uma equação diferencial parcial de segunda ordem que descreve a variação com z e t da concentração do reagente:

$$\frac{\partial y(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} = \frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial^2 y(z,t)}{\partial z^2} - Da \cdot y(z,t), \text{ definida no domínio: } 0 < z < 1 \text{ e } t > 0.$$

Sujeita às condições:

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: -\frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=0} + y(z,t) \Big|_{z=0} = 1$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: \frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0.$$

$$\text{E à condição inicial: } y(z,t) \Big|_{t=0} = 0.$$

Com a definição da variável: $u(z,t) = -\frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} + y(z,t)$ reescrevem-se as equações

do problema na forma:

$$\begin{cases} y(z,t) - \frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} = u(z,t) \\ \frac{\partial y(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial u(z,t)}{\partial z} + Da \cdot y(z,t) = 0 \end{cases}$$

Sujeitas às condições:

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: u(z,t) \Big|_{z=0} = 1$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: u(z,t) \Big|_{z=1} = y(z,t) \Big|_{z=1}.$$

$$\text{E à condição inicial: } y(z,t) \Big|_{t=0} = 0 \text{ e } u(z,t) \Big|_{t=0} = 0$$

Resolução por aproximação polinomial global+ método dos momentos

Considerando a aproximação polinomial de grau $n+1$ de $y(z,t)$:

$$y(z,t) \cong y^{(n+1)}(z,t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j(t). \text{ Satisfazendo as condições de contorno originais:}$$

$$\text{CC1: } z=0 \rightarrow -\frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j(t) + y_0(t) = 1 \text{ e CC2: } z=1 \rightarrow -\frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t) = 0.$$

Obtêm-se, da mesma forma que a do problema estacionário, as equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{dY_k(t)}{dt} = -Da \cdot Y_k(t) - \sum_{i=0}^{n+1} D_{k,i} \cdot y_i(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n-1, \text{ sendo: } D_{k,i} = \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot C_{j,i}$$

$$\text{Em que: } Y_k(t) = \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot y_j(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n-1.$$

Para calcular os valores de $y_i(t)$ [$i = 0, 1, \dots, n$], resolve-se o sistema algébrico linear:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j(t) + y_0(t) = 1 \\ \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot y_j(t) = Y_k(t) \quad \text{para } k = 0, 1, \dots, n-1 \\ \frac{1}{Pe} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t) = 0 \end{array} \right.$$

Resolução por aproximação polinomial global aplicada às variáveis de estado+ método dos momentos

Considerando a aproximação polinomial de grau $n+1$ em z de $u(z, t)$:

$$u(z, t) \cong u^{(n+1)}(z, t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot u_j(t), \text{ com } u_0(t) = 1.$$

Substituindo essa aproximação na equação: $y^{(n+1)}(z, t) - \frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial y^{(n+1)}(z, t)}{\partial z} = u^{(n+1)}(z, t)$.

Essa última equação apresenta a solução analítica:

$$y^{(n+1)}(z, t) = a(t) \cdot e^{Pe \cdot z} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot v_j(t), \text{ em que os valores de } v_j(t) \text{ são calculados}$$

através da resolução do sistema algébrico linear:

$$v_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe} \cdot v_k(t) = u_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1.$$

Além disso, como:

$$u(z, t)|_{z=1} = y(z, t)|_{z=1} \Rightarrow a(t) \cdot e^{Pe} + v_{n+1}(t) = u_{n+1}(t) \rightarrow a(t) = [u_{n+1}(t) - v_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe},$$

$$\text{resultando em: } y^{(n+1)}(z, t) = [u_{n+1}(t) - v_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe(1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot v_j(t).$$

As substituições das expressões de $u^{(n+1)}(z, t)$ e $y^{(n+1)}(z, t)$ em

$\frac{\partial y(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + Da \cdot y(z, t) = 0$ dão origem à expressão do resíduo em cada um dos pontos de interpolação:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(z_j, t) = \frac{dy_j(t)}{dt} + \left(\sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot u_i(t) \right) + Da \cdot y_j(t), \text{ em que:}$$

$$y_j(t) = [u_{n+1}(t) - v_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe(1-z_j)} + v_j(t).$$

Considerando o momento de ordem k do resíduo: $\mathbb{R}_k(t) = \int_{z=0}^{z=1} z^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z, t) \cdot dz$ que

pode ser computado por quadratura de Gauss-Lobatto na forma:

$$\mathbb{R}_k(t) \cong \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z_j, t), \text{ igualando a zero os } n+1 \text{ primeiros momentos,}$$

definindo as variáveis:

$$Y_k(t) = \int_{z=0}^{z=1} z^k \cdot y^{(n+1)}(z,t) \cdot dz = [u_{n+1}(t) - v_{n+1}(t)] \cdot I_k + \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot v_j(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n$$

em que:

$$I_k = \int_0^1 z^k e^{-Pe(1-z)} \cdot dz \Rightarrow I_0 = \int_0^1 e^{-Pe(1-z)} \cdot dz = \frac{1 - e^{-Pe}}{Pe} \text{ e } I_k = \frac{1 - k \cdot I_{k-1}}{Pe} \text{ para } k = 1, \dots, n.$$

Resultado:

$$\frac{dY_k(t)}{dt} = -Da \cdot Y_k(t) - \sum_{i=0}^{n+1} B_{k,i} \cdot u_i(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \text{ sendo } B_{k,i} = \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot A_{j,i}$$

A essas equações diferenciais ordinárias associam-se as equações algébricas:

$$\begin{cases} v_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe} \cdot v_k(t) = u_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0(t) = 1 \\ [u_{n+1}(t) - v_{n+1}(t)] \cdot I_k + \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot v_j(t) = Y_k(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \end{cases}$$

Que é um sistema algébrico linear!

Anulando os resíduos nas $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$ resulta em:

$$\frac{dY_k(t)}{dt} = -Da \cdot Y_k(t) - \sum_{i=0}^{n+1} B_{k,i} \cdot u_i(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \text{ sendo } B_{k,i} = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot A_{j,i}$$

A essas equações diferenciais ordinárias associam-se as equações algébricas:

$$\begin{cases} v_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe} \cdot v_k(t) = u_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0(t) = 1 \\ [u_{n+1}(t) - v_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe(1-\hat{z}_{k+1})} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot v_j(t) = Y_k(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \end{cases}$$

Em que $0 < \hat{z}_1 < \hat{z}_2 < \dots < \hat{z}_{n+1}$ são as $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$.

Resolução por aproximação parabólica em elementos finitos aplicada às variáveis de estado+ método dos momentos

$$u^{(i)}(\xi, t) = \frac{\xi \cdot (\xi - 1)}{2} \cdot p_{i-1}(t) + (1 - \xi^2) \cdot a^{(i)}(t) + \frac{\xi \cdot (\xi + 1)}{2} \cdot p_i(t)$$

Com: $u^{(i)}(\xi, t)|_{\xi=+1} = u^{(i+1)}(\xi, t)|_{\xi=-1}$ para $i = 1, \dots, n-1$

$u^{(1)}(-1, t) = p_0(t) = 1$ e $u^{(n)}(+1, t) = p_n(t)$

$$y^{(i)}(\xi, t) - \lambda \cdot \frac{\partial y^{(i)}(\xi, t)}{\partial \xi} = u^{(i)}(\xi, t) = \frac{\xi \cdot (\xi - 1)}{2} \cdot p_{i-1}(t) + (1 - \xi^2) \cdot a^{(i)}(t) + \frac{\xi \cdot (\xi + 1)}{2} \cdot p_i(t)$$

Em que $\lambda = \frac{2n}{Pe}$. Resolvendo analiticamente essa equação, resulta:

$$\begin{aligned}
 y^{(i)}(\xi, t) &= b^{(i)}(t) \cdot e^{-\left(\frac{1-\xi}{\lambda}\right)} + \left[\frac{\xi \cdot (\xi - 1)}{2} + \lambda \left(\xi + \lambda - \frac{1}{2} \right) \right] \cdot p_{i-1}(t) + \left[(1 - \xi^2) - 2\lambda(\xi + \lambda) \right] \cdot a^{(i)}(t) + \\
 &+ \left[\frac{\xi \cdot (\xi + 1)}{2} + \lambda \left(\xi + \lambda + \frac{1}{2} \right) \right] \cdot p_i(t) \\
 y^{(i)}(-1, t) &= b^{(i)}(t) \cdot e^{-\frac{2}{\lambda}} + \left[1 + \lambda \left(\lambda - \frac{3}{2} \right) \right] \cdot p_{i-1}(t) - 2\lambda(\lambda - 1) \cdot a^{(i)}(t) + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \cdot p_i(t) \\
 y^{(i)}(0, t) &= b^{(i)}(t) \cdot e^{-\frac{1}{\lambda}} + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \cdot p_{i-1}(t) + (1 - 2 \cdot \lambda^2) \cdot a^{(i)}(t) + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \cdot p_i(t) \\
 y^{(i)}(1, t) &= b^{(i)}(t) + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \cdot p_{i-1}(t) - 2\lambda(1 + \lambda) \cdot a^{(i)}(t) + \left[1 + \lambda \left(\lambda + \frac{3}{2} \right) \right] \cdot p_i(t) \\
 \bar{y}^{(i)}(t) &= \lambda \left(\frac{1 - e^{-\frac{2}{\lambda}}}{2} \right) b^{(i)}(t) + \left[\frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \right] p_{i-1}(t) + \left(\frac{2}{3} - 2\lambda^2 \right) a^{(i)}(t) + \left[\frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \right] p_i(t) \\
 q_i(t) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} y^{(i)}(\xi, t) \cdot \xi \cdot d\xi = \frac{\lambda}{2} \left[1 - \lambda + (1 + \lambda) e^{-\frac{2}{\lambda}} \right] b^{(i)}(t) + \left(\frac{\lambda}{3} - \frac{1}{6} \right) p_{i-1}(t) - \frac{2\lambda}{3} \cdot a^{(i)}(t) + \left(\frac{\lambda}{3} + \frac{1}{6} \right) p_i(t)
 \end{aligned}$$

Para que: $y^{(i)}(+1, t) = y^{(i+1)}(-1, t)$, deve-se ter:

$$\begin{aligned}
 &b^{(i)} + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \cdot p_{i-1} - 2\lambda(1 + \lambda) \cdot a^{(i)} + \left[1 + \lambda \left(\lambda + \frac{3}{2} \right) \right] \cdot p_i = \\
 &= b^{(i+1)} \cdot e^{-\frac{2}{\lambda}} + \left[1 + \lambda \left(\lambda - \frac{3}{2} \right) \right] \cdot p_i - 2\lambda(\lambda - 1) \cdot a^{(i+1)} + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \cdot p_{i+1}
 \end{aligned}$$

Rearranjando a expressão:

$$\lambda \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \cdot p_{i-1} + 3 \cdot \lambda \cdot p_i + \lambda \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \cdot p_{i+1} = \left(b^{(i+1)} \cdot e^{-\frac{2}{\lambda}} - b^{(i)} \right) + 2\lambda \left[(1 - \lambda) \cdot a^{(i+1)} + (1 + \lambda) \cdot a^{(i)} \right]$$

para $i = 1, \dots, n-1$.

Tendo sido omitida, nas expressões acima, a dependência com a variável independente t . Além disso:

$$\begin{aligned}
 y^{(n)}(+1, t) &= b^{(n)} + \lambda \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \cdot p_{n-1} - 2 \cdot \lambda(1 + \lambda) \cdot a^{(n)} + \left[1 + \lambda \left(\frac{3}{2} + \lambda \right) \right] \cdot p_n = u^{(n)}(+1, t) = p_n \\
 \lambda \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \cdot p_{n-1} &+ \lambda \left(\frac{3}{2} + \lambda \right) \cdot p_n = -b^{(n)} + 2 \cdot \lambda(1 + \lambda) \cdot a^{(n)}
 \end{aligned}$$

Resultando no sistema tri-diagonal:

$$\left\{ \begin{array}{l} p_0 = 1 \\ \lambda \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \cdot p_{i-1} + 3 \cdot \lambda \cdot p_i + \lambda \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \cdot p_{i+1} = \left(b^{(i+1)} \cdot e^{-\frac{Pe}{n}} - b^{(i)} \right) + 2\lambda \left[(1-\lambda) \cdot a^{(i+1)} + (1+\lambda) \cdot a^{(i)} \right] \\ \text{para } i = 1, \dots, n-1 \\ \lambda \left(\frac{1}{2} + \lambda \right) \cdot p_{n-1} + \lambda \left(\frac{3}{2} + \lambda \right) \cdot p_n = -b^{(n)} + 2 \cdot \lambda (1+\lambda) \cdot a^{(n)} \end{array} \right.$$

Tendo em vista: $\frac{\partial u^{(i)}(\xi, t)}{\partial \xi} = \left(\xi - \frac{1}{2} \right) \cdot p_{i-1}(t) - 2 \cdot \xi \cdot a^{(i)}(t) + \left(\xi + \frac{1}{2} \right) \cdot p_i(t)$ e obrigando

aos dois primeiros momentos da equação: $\frac{\partial y^{(i)}(\xi, t)}{\partial t} + 2n \frac{\partial u^{(i)}(\xi, t)}{\partial \xi} + Da \cdot y^{(i)}(\xi, t) = 0$

serem nulos, resulta:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{y}_i(t)}{dt} + Da \cdot \bar{y}_i(t) + n \cdot [p_i(t) - p_{i-1}(t)] = 0 \\ \frac{dq_i(t)}{dt} + Da \cdot q_i(t) + 2n \cdot \left(\frac{p_i(t) - 2 \cdot a^{(i)}(t) + p_{i-1}(t)}{3} \right) = 0 \end{array} \right. \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n.$$

Sendo:

$$\bar{y}^{(i)}(t) = \lambda \left(\frac{1 - e^{-\frac{2}{\lambda}}}{2} \right) \cdot b^{(i)}(t) + \left[\frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \right] \cdot p_{i-1}(t) + \left(\frac{2}{3} - 2\lambda^2 \right) \cdot a^{(i)}(t) + \left[\frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \right] \cdot p_i(t)$$

e

$$q_i(t) = \frac{\lambda}{2} \left[1 - \lambda + (1 + \lambda) e^{-\frac{2}{\lambda}} \right] \cdot b^{(i)}(t) + \left(\frac{\lambda}{3} - \frac{1}{6} \right) \cdot p_{i-1}(t) - \frac{2\lambda}{3} \cdot a^{(i)}(t) + \left(\frac{\lambda}{3} + \frac{1}{6} \right) \cdot p_i(t)$$

Ou seja:

$$\left(\begin{array}{cc} \left(\frac{2}{3} - 2\lambda^2 \right) & \lambda \left(\frac{1 - e^{-\frac{2}{\lambda}}}{2} \right) \\ -\frac{2\lambda}{3} & \frac{\lambda}{2} \left[1 - \lambda + (1 + \lambda) e^{-\frac{2}{\lambda}} \right] \end{array} \right) \cdot \begin{pmatrix} a^{(i)}(t) \\ b^{(i)}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{y}^{(i)}(t) \\ q_i(t) \end{pmatrix} - \left(\begin{array}{cc} \frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) & \frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \\ \frac{\lambda}{3} - \frac{1}{6} & \frac{\lambda}{3} + \frac{1}{6} \end{array} \right) \cdot \begin{pmatrix} p_{i-1}(t) \\ p_i(t) \end{pmatrix}$$

Permitindo expressar:

$$\begin{pmatrix} a^{(i)}(t) \\ b^{(i)}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \cdot \bar{y}^{(i)}(t) + \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \cdot q_i(t) + \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} \cdot p_{i-1}(t) + \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix} \cdot p_i(t)$$

Assim:

$$\left(b^{(i+1)} \cdot e^{-\frac{Pe}{n}} - b^{(i)} \right) + 2\lambda \left[(1-\lambda) \cdot a^{(i+1)} + (1+\lambda) \cdot a^{(i)} \right] = \alpha_1 \cdot \bar{y}_{i+1} + \alpha_2 \cdot \bar{y}_i + \alpha_3 \cdot q_{i+1} + \alpha_4 \cdot q_i + \beta_1 \cdot p_{i+1} + \beta_2 \cdot p_i + \beta_3 \cdot p_{i-1}$$

e

$$-b^{(n)} + 2 \cdot \lambda(1 + \lambda) \cdot a^{(n)} = \alpha_2 \cdot \bar{y}_n + \alpha_4 \cdot q_n + \hat{\beta}_2 \cdot p_n + \hat{\beta}_3 \cdot p_{n-1}$$

Mantendo a natureza tridiagonal do sistema original, na forma:

$$\begin{cases} p_0 = 1 \\ a \cdot p_{i-1} + b \cdot p_i + c \cdot p_{i+1} = \alpha_1 \cdot \bar{y}_{i+1} + \alpha_2 \cdot \bar{y}_i + \alpha_3 \cdot q_{i+1} + \alpha_4 \cdot q_i \text{ para } i = 1, \dots, n-1 \\ a \cdot p_{n-1} + \hat{b} \cdot p_n = \alpha_2 \cdot \bar{y}_n + \alpha_4 \cdot q_n \end{cases}$$

Resultando em um sistema algébrico-diferencial no qual a parte algébrica é linear e apresenta uma estrutura tridiagonal!

No caso estacionário, tem-se:

$$\begin{pmatrix} 2\lambda^2 - \frac{2}{3} & \lambda \left(\frac{e^{-\frac{2}{\lambda}} - 1}{2} \right) \\ \frac{2\lambda}{3} - \frac{4n}{3Da} & \frac{\lambda}{2} \left[\lambda - 1 - (1 + \lambda)e^{-\frac{2}{\lambda}} \right] \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a^{(i)} \\ b^{(i)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) + \frac{n}{Da} & \frac{1}{6} + \lambda \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) - \frac{n}{Da} \\ \frac{\lambda}{3} - \frac{1}{6} - \frac{2n}{3Da} & \frac{\lambda}{3} + \frac{1}{6} - \frac{2n}{3Da} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} p_{i-1} \\ p_i \end{pmatrix}$$

Permitindo expressar:

$$\begin{pmatrix} a^{(i)}(t) \\ b^{(i)}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} \cdot p_{i-1}(t) + \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix} \cdot p_i(t)$$

$$\text{Assim: } \left(b^{(i+1)} \cdot e^{-\frac{Pe}{n}} - b^{(i)} \right) + 2\lambda \left[(1 - \lambda) \cdot a^{(i+1)} + (1 + \lambda) \cdot a^{(i)} \right] = \beta_1 \cdot p_{i+1} + \beta_2 \cdot p_i + \beta_3 \cdot p_{i-1}$$

$$\text{E } -b^{(n)} + 2 \cdot \lambda(1 + \lambda) \cdot a^{(n)} = \beta_2 \cdot p_n + \beta_3 \cdot p_{n-1}$$

Mantendo a natureza tridiagonal do sistema original, na forma:

$$\begin{cases} p_0 = 1 \\ a \cdot p_{i-1} + b \cdot p_i + c \cdot p_{i+1} = 0 \text{ para } i = 1, \dots, n-1 \\ a \cdot p_{n-1} + \hat{b} \cdot p_n = 0 \end{cases}$$

É importante ressaltar que a determinação das variáveis: $a^{(i)}$, $b^{(i)}$ e p_i tanto no caso transiente como no estacionário é obtida através de um sistema linear tridiagonal, mesmo se o problema original for não linear.

3-) Modelo estacionário do reator com dispersão axial adiabático.

$$\begin{cases} \frac{d}{dz} \left[y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \right] + Da \cdot y(z) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z)} \right) \right] = 0 \\ \left(\theta(z) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz} \right) + \beta \cdot \left(y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \right) - (\theta_f + \beta \cdot y_f) = 0 \end{cases}$$

Definidas no domínio: $0 < z < 1$ e sujeitas às condições de contorno:

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: -\frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=0} + y(z) \Big|_{z=0} = y_f$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: -\frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=1} = 0$$

$$\text{CC3: balanço global de energia: } \theta(1) = \theta_f + \beta \cdot [y_f - y(1)]$$

Resolução por aproximação polinomial global+ método dos momentos

$$\begin{cases} \frac{dy(z)}{dz} = \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{d^2y(z)}{dz^2} - Da \cdot y(z) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z)} \right) \right] \\ \theta(z) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz} = \theta_f + \beta \cdot \left[y_f - y(z) + \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \right] \end{cases}$$

Definidas no domínio: $0 < z < 1$ e sujeitas às condições de contorno:

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: -\frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=0} + y(z) \Big|_{z=0} = y_f$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz} \Big|_{z=1} = 0$$

$$\text{CC3: balanço global de energia: } \theta(1) = \theta_f + \beta \cdot [y_f - y(1)]$$

Considerando a aproximação polinomial de grau $n+1$ de $y(z)$:

$$y(z) \cong y^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j, \text{ em que se considera, por simplicidade: } y^{(n+1)}(z_j) = y_j.$$

A introdução dessa aproximação no balanço de energia, permite calcular a solução analítica da equação de acordo com:

$$\theta(z) = A \cdot e^{Pe_h \cdot z} + \theta_f + \beta \cdot y_f + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \theta_{p,j}, \text{ em que os valores de } \theta_{p,j} \text{ são}$$

determinados através da resolução do sistema algébrico linear:

$$\theta_{p,i} - \frac{1}{Pe_h} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j} \cdot \theta_{p,j} = \beta \cdot \left[\frac{1}{Pe_m} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j} \cdot y_j - y_i \right] \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1.$$

A constante A é determinada pelo balanço global de energia, assim:

$$\theta(1) = A \cdot e^{Pe_h} + \theta_f + \beta \cdot y_f + \theta_{p,n+1} = \theta_f + \beta \cdot [y_f - y_{n+1}] \Rightarrow A = -(\theta_{p,n+1} + \beta \cdot y_{n+1}) \cdot e^{-Pe_h}.$$

$$\text{Resultando em: } \theta(z) = \theta_f + \beta \cdot y_f + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \theta_{p,j} - (\theta_{p,n+1} + \beta \cdot y_{n+1}) \cdot e^{-Pe_h \cdot (1-z)}$$

O resíduo do balanço de massa em cada ponto de interpolação é dado por:

$$\mathfrak{R}_i^{(n+1)} = \sum_{j=0}^{n+1} \left(A_{i,j} - \frac{B_{i,j}}{Pe_m} \right) \cdot y_j + Da \cdot y_i \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta_i} \right) \right] = \sum_{j=0}^{n+1} C_{i,j} \cdot y_j + Da \cdot y_i \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta_i} \right) \right]$$

$$\text{Sendo: } A_{i,j} = \frac{dl_j(z)}{dz} \Big|_{z_i}, \quad B_{i,j} = \frac{d^2l_j(z)}{dz^2} \Big|_{z_i} \quad \text{e } C_{i,j} = A_{i,j} - \frac{B_{i,j}}{Pe_m}.$$

A aplicação do método dos momentos, computando as integrais por quadratura de Gaus-Lobatto, dá origem ao sistema algébrico:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0 - \frac{1}{Pe_m} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j = y_f \\ \sum_{i=0}^{n+1} \omega_i \cdot z_i^k \cdot \left(\Omega_i + \sum_{j=0}^{n+1} C_{i,j} \cdot y_j \right) = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n-1 \\ \frac{1}{Pe_m} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j = 0 \end{array} \right.$$

Sendo: $\Omega_i = Da \cdot y_i \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta_i} \right) \right]$, $\theta_i = \theta_f + \beta \cdot y_f + \theta_{p,i} - (\theta_{p,n+1} + \beta \cdot y_{n+1}) \cdot e^{-Pe_h(1-z_i)}$ e

$$\theta_{p,i} - \frac{1}{Pe_h} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j} \cdot \theta_{p,j} = \beta \cdot \left[\frac{1}{Pe_m} \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j} \cdot y_j - y_i \right] \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1.$$

Resolução por aproximação polinomial global aplicada às variáveis de estado+ método dos momentos

Usando as variáveis de estado: $u(z) = y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz}$ e $v(z) = \theta(z) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz}$,

$$\text{tem-se: } \left\{ \begin{array}{l} \frac{du(z)}{dz} + Da \cdot y(z) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z)} \right) \right] = 0 \\ v(z) + \beta \cdot u(z) - (\theta_f + \beta \cdot y_f) = 0 \end{array} \right., \text{ associadas a:}$$

CC1: $z=0$: $u(z)|_{z=0} = y_f$ CC2: $z=1$: $u(z)|_{z=1} = y(z)|_{z=1}$ e CC3: $\theta_{n+1} = \theta_f + \beta \cdot (y_f - y_{n+1})$

De maneira semelhante aos exemplos anteriores, propõem-se:

$$u(z) \cong u^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot u_j, \text{ com } u_0 = y_f.$$

$$v(z) \cong v^{(n+1)}(z) = (\theta_f + \beta \cdot y_f) - \beta \cdot \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot u_j = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot v_j, \text{ sendo } v_j = \theta_f + \beta \cdot (y_f - u_j)$$

Em vista de $u(z) = y(z) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{dy(z)}{dz}$ e $v(z) = \theta(z) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{d\theta(z)}{dz}$, obtêm-se:

$$y^{(n+1)}(z) = (u_{n+1} - y_{n+1}) \cdot e^{-Pe_m(1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j \text{ e}$$

$$\theta^{(n+1)}(z) = (v_{n+1} - \varphi_{n+1}) \cdot e^{-Pe_h(1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \varphi_j$$

Em que:

$$y_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_m} \cdot y_k = u_i \text{ e } \varphi_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_h} \cdot \varphi_k = v_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0 = y_f \text{ e } v_0 = \theta_f$$

As substituições das expressões de $u^{(n+1)}(z)$, $y^{(n+1)}(z)$, $v^{(n+1)}(z)$ e $\theta^{(n+1)}(z)$ na equação do balanço de massa dão origem a expressão do resíduo:

$$\mathfrak{R}_y^{(n+1)}(z) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} A_{j,k} \cdot u_k \right] + \Omega(z).$$

Em que:

$$\Omega(z) = Da \cdot \left[(u_{n+1} - y_{n+1}) \cdot e^{-Pe_m \cdot (1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j \right] \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{(v_{n+1} - \varphi_{n+1}) \cdot e^{-Pe_h \cdot (1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \varphi_j} \right) \right]$$

Considerando o momento de ordem k dos resíduos: $\mathbb{R}_k = \int_{z=0}^{z=1} z^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z) \cdot dz$ que podem

ser computados por quadratura de Gauss-Lobatto na forma:

$$\mathbb{R}_k \cong \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \mathfrak{R}^{(n+1)}(z_j) .$$

Anulando os n primeiros momentos, obtém-se o sistema algébrico:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_m} \cdot y_k = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0 = y_f \\ \varphi_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_h} \cdot \varphi_k = v_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } v_0 = \theta_f . \\ \sum_{i=0}^{n+1} B_{k,i} \cdot u_i + \sum_{i=0}^{n+1} C_{k,i} \cdot \Omega_i = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n \end{array} \right.$$

$$\text{Sendo: } \Omega_i = Da \cdot \left[(u_{n+1} - y_{n+1}) \cdot e^{-Pe_m \cdot (1-z_i)} + y_i \right] \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{(v_{n+1} - \varphi_{n+1}) \cdot e^{-Pe_h \cdot (1-z_i)} + \varphi_i} \right) \right]$$

$$\text{e } C_{k,i} = \omega_i \cdot z_i^k \text{ e } \mathbf{B} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{A}$$

De forma quase equivalente, anulando-se os resíduos nas $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$ resulta em:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_m} \cdot y_k = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0 = y_f \\ \varphi_i - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_h} \cdot \varphi_k = u_i \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0 = y_f \\ \sum_{i=0}^{n+1} B_{k,i} \cdot u_i + \sum_{i=0}^{n+1} C_{k,i} \cdot \Omega_i = 0 \text{ para } k = 0, \dots, n \end{array} \right.$$

Sendo, neste caso, $C_{k,i} = l_i(\hat{z}_{k+1})$ e $\mathbf{B} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{A}$.

4-) Modelo transiente do reator com dispersão axial adiabático.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial y(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left[y(z,t) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} \right] + Da \cdot y(z,t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z,t)} \right) \right] = 0 \\ \frac{\partial \theta(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta(z,t) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{\partial \theta(z,t)}{\partial z} \right] - \beta \cdot Da \cdot y(z,t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z,t)} \right) \right] = 0 \end{array} \right.$$

Definidas no domínio: $0 < z < 1$ e $t > 0$. Sujeitas às condições:

Condições iniciais: $y(z,0) = 0$ e $\theta(z,0) = \theta_f$.

$$\text{CC1: na entrada do reator: } z=0: \left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=0} + y(z,t) \Big|_{z=0} = y_f \\ -\frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{\partial \theta(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=0} + \theta(z,t) \Big|_{z=0} = \theta_f \end{array} \right.$$

$$\text{CC2: na saída do reator: } z=1: \left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0 \\ -\frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{\partial \theta(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0 \end{array} \right.$$

Adotando: $u(z,t) = y(z,t) - \frac{1}{Pe_m} \cdot \frac{\partial y(z,t)}{\partial z}$ e $v(z,t) = \theta(z,t) - \frac{1}{Pe_h} \cdot \frac{\partial \theta(z,t)}{\partial z}$, resulta:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial y(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial u(z,t)}{\partial z} + Da \cdot y(z,t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z,t)} \right) \right] = 0 \\ \frac{\partial \theta(z,t)}{\partial t} + \frac{\partial v(z,t)}{\partial z} - \beta \cdot Da \cdot y(z,t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(z,t)} \right) \right] = 0 \end{array} \right.$$

Condições iniciais: $y(z,0) = u(z,0) = 0$ e $\theta(z,0) = v(z,0) = \theta_f$.

$$\text{CC1: } z=0: \left\{ \begin{array}{l} u(z,t) \Big|_{z=0} = y_f \\ v(z,t) \Big|_{z=0} = \theta_f \end{array} \right. \quad \text{CC2: } z=1: \left\{ \begin{array}{l} u(1,t) = y(1,t) \\ v(1,t) = \theta(1,t) \end{array} \right.$$

Considerando as aproximações polinomiais:

$$u(z,t) \cong u^{(n+1)}(z,t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot u_j(t), \text{ com } u_0 = y_f \text{ e}$$

$$v(z,t) \cong v^{(n+1)}(z,t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot v_j(t) \text{ com } v_0 = \theta_f.$$

$$\text{Resulta em: } y^{(n+1)}(z,t) = [u_{n+1}(t) - y_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe_m(1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot y_j(t) \text{ e}$$

$$\theta^{(n+1)}(z,t) = [v_{n+1}(t) - \varphi_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe_h(1-z)} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(z) \cdot \varphi_j(t).$$

As substituições das expressões de $y^{(n+1)}(z,t)$ e $\theta^{(n+1)}(z,t)$ nas equações diferenciais dão origem aos resíduos:

$$\mathfrak{R}_y^{(n+1)}(z_j,t) = \frac{dy_j(t)}{dt} + \left(\sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot u_i(t) \right) + Da \cdot y_j(t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta_j(t)} \right) \right] \text{ e}$$

$$\mathfrak{R}_\theta^{(n+1)}(z_j,t) = \frac{d\theta_j(t)}{dt} + \left(\sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot v_i(t) \right) - \beta \cdot Da \cdot y_j(t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta_j(t)} \right) \right]$$

Em que:

$$y_j(t) = [u_{n+1}(t) - y_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe_m(1-z_j)} + y_j(t) \text{ e } \theta_j(t) = [v_{n+1}(t) - \varphi_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe_h(1-z_j)} + \varphi_j(t)$$

Anulando os n primeiros momentos, obtém-se o sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dY_k(t)}{dt} = - \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \left[\Omega_j(t) + \sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot u_i(t) \right] \\ \frac{d\Theta_k(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \left[\beta \cdot \Omega_j(t) - \sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot v_i(t) \right] \end{array} \right. \text{ para } k = 0, 1, \dots, n$$

$$\text{sendo } \Omega_j(t) = Da \cdot y_j(t) \cdot \exp \left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta_j(t)} \right) \right]$$

$$\text{Com: } Y_k(0) = \int_0^1 z^k \cdot y(z,0) \cdot dz = 0 \text{ e } \Theta_k(0) = \int_0^1 z^k \cdot \theta(z,0) \cdot dz = \frac{\theta_{feed}}{k+1}$$

A essas equações diferenciais ordinárias associam-se as equações algébricas:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_m} \cdot y_k(t) = u_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0(t) = y_f \\ \varphi_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_h} \cdot \varphi_k(t) = v_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } v_0(t) = \theta_f \\ [u_{n+1}(t) - y_{n+1}(t)] \cdot I_k^{(m)} + \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot y_j(t) = Y_k(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \\ [v_{n+1}(t) - \varphi_{n+1}(t)] \cdot I_k^{(h)} + \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j \cdot z_j^k \cdot \varphi_j(t) = \Theta_k(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \end{array} \right.$$

Em que $I_k^{(m)} = \int_0^1 z^k e^{-Pe_m(1-z)} \cdot dz$ e $I_k^{(h)} = \int_0^1 z^k e^{-Pe_h(1-z)} \cdot dz$ (computados de forma recursiva

análoga à anteriormente apresentada).

De forma quase equivalente, anulando-se os resíduos nas $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$ resulta em:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dY_k(t)}{dt} = - \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot \left[\Omega_j(t) + \sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot u_i(t) \right] \\ \frac{d\Theta_k(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot \left[\beta \cdot \Omega_j(t) - \sum_{i=0}^{n+1} A_{j,i} \cdot v_i(t) \right] \end{array} \right. \text{ para } k = 0, 1, \dots, n$$

$$\left\{ \begin{array}{l} y_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_m} \cdot y_k(t) = u_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } u_0(t) = y_f \\ \varphi_i(t) - \sum_{k=0}^{n+1} \frac{A_{i,k}}{Pe_h} \cdot \varphi_k(t) = v_i(t) \text{ para } i = 0, 1, \dots, n+1 \text{ com } v_0(t) = \theta_f \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [u_{n+1}(t) - y_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe_m(1-\hat{z}_{k+1})} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot y_j(t) = Y_k(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \\ [v_{n+1}(t) - \varphi_{n+1}(t)] \cdot e^{-Pe_h(1-\hat{z}_{k+1})} + \sum_{j=0}^{n+1} l_j(\hat{z}_{k+1}) \cdot \varphi_j(t) = \Theta_k(t) \text{ para } k = 0, 1, \dots, n \end{array} \right.$$

Em que $0 < \hat{z}_1 < \hat{z}_2 < \dots < \hat{z}_{n+1} < 1$ são as $n+1$ raízes do polinômio de Legendre de grau $n+1$.