

3.5 Métodos Numéricos para a Solução de Problemas de Contorno

Equações diferenciais ordinárias

Exemplo 3.7. Difusão-reação em uma partícula catalítica porosa:

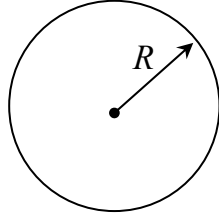


Figura 3.6. Partícula catalítica esférica.

Balanco de massa: (estado estacionário, isotérmico)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(D r^2 \frac{dC}{dr} \right) = r_A, \quad 0 < r < R$$

$$\left. \frac{dC}{dr} \right|_{r=0} = 0 \quad \text{e} \quad C(R) = C_o$$

(simetria) (concentração fixa na superfície)

Outras considerações: D constante e $r_A = k.f(C)$, onde k é a constante da reação.

$$D \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC}{dr} \right) = k f(C)$$

Pode-se ainda definir um fator de efetividade da partícula (forma integral):

$$\eta = \frac{\int_V r_A(C) dV}{\int_V r_A(C_o) dV} = \frac{\int_0^R k f(C) r^2 dr}{\int_0^R k f(C_o) r^2 dr} \equiv \frac{\text{taxa de reação média na partícula}}{\text{taxa da reação máxima baseada na superfície}}$$

e $\Phi = R \sqrt{\frac{k}{D}}$, conhecido como módulo de Thiele $\equiv \frac{\text{reação}}{\text{difusão}}$

para uma reação de primeira ordem, ou

$$\Phi = R \sqrt{\frac{k f(C_o)}{D C_o}} \quad \text{para uma reação de qualquer ordem.}$$

Outra definição para o Módulo de Thiele é a sua versão generalizada:

$$\hat{\Phi} = L \frac{r_A(C_o)}{\sqrt{2D \int_0^{C_o} r_A(C) dC}} \quad (\text{Módulo de Thiele Generalizado})$$

onde L é o comprimento característico da partícula, definido como o volume da partícula dividido pela sua superfície externa, que para o caso da esfera $L = R/3$. Com esta definição tem-se $\Phi = 3\hat{\Phi}$ para uma reação de primeira ordem na esfera.

Re-escrevendo a equação diferencial: $k f(C)r^2 dr = D d\left(r^2 \frac{dC}{dr}\right)$

$$\therefore \eta = \frac{D \int_0^R d\left(r^2 \frac{dC}{dr}\right)}{k f(C_o) \int_0^R r^2 dr} = 3 \frac{D \left[r^2 \frac{dC}{dr} \right]_0^R}{k f(C_o) R^3} = 3 \frac{D}{k f(C_o) R^3} \frac{dC}{dr} \Big|_{r=R} \quad (\text{forma diferencial})$$

$$[\bar{r}_A = \eta r_A(C_o)] \quad \eta = \frac{3R}{\Phi^2 C_o} \frac{dC}{dr} \Big|_{r=R} = \frac{3}{\Phi^2} \frac{dy}{dx} \Big|_{x=1} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{dC}{dr} \Big|_{r=R} = ? \\ \frac{dy}{dx} \Big|_{x=1} = ? \end{array} \right.$$

$$\text{Definindo: } y \equiv \frac{C}{C_o}; \quad x \equiv \frac{r}{R} \quad \text{e} \quad g(y) \equiv \frac{f(C_o y)}{f(C_o)}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} = \Phi^2 g(y), \quad 0 < x < 1 \\ \frac{dy}{dx} \Big|_{x=0} = 0 \quad \text{e} \quad y(1) = 1 \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{Problema de} \\ \text{valor de} \\ \text{contorno} \end{array}$$

$g(y) = y \quad \Rightarrow$ equação de Bessel modificada (solução analítica):

$$\text{Solução: } y = \frac{\sinh(\Phi x)}{x \sinh(\Phi)} \Rightarrow \eta = \frac{3}{\Phi} \left[\frac{1}{\text{tgh}(\Phi)} - \frac{1}{\Phi} \right]$$

$$\text{Nota: } - y(0) \text{ é finito, } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sinh(\Phi x)}{x} = \Phi \quad \therefore y(0) = \frac{\Phi}{\sinh(\Phi)}$$

- $\eta < 1 \quad \Rightarrow$ mostra o efeito da transferência de massa.

$$\Phi \rightarrow 0 : \eta \rightarrow 1 \quad \text{e} \quad \Phi \rightarrow \infty : \eta \rightarrow 0 \quad \left[\eta_\infty \approx \frac{3}{\Phi} \right]$$

$g(y) = y^n \quad \Rightarrow$ reação de ordem $n \neq 0$ ou 1.

$$\begin{array}{l}
 N + 2 \text{ equações} \\
 N + 2 \text{ variáveis}
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 \left(\frac{x_i}{h} + 1 \right) y_{i+1} - 2 \left(\frac{x_i}{h} + \Phi^2 x_i h \right) y_i + \left(\frac{x_i}{h} - 1 \right) y_{i-1} = 0 \\
 y_{N+1} = 1 \\
 y_1 - y_0 = 0
 \end{array} \right.$$

Que é um sistema de equações lineares em estrutura tridiagonal, que pode ser resolvido pelo método de Thomas. Para o caso de reações de ordens diferentes de zero ou um tem-se um sistema não-linear de equações algébricas, que pode ser resolvido pelos métodos numéricos já vistos na seção 3.1.

Volumes finitos

Referência: “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”, C.R. Maliska, 1995.

Consiste na realização de balanços de propriedades em volumes elementares (volumes finitos), ou de forma equivalente na integração sobre o volume elementar da equação diferencial na forma conservativa (ou forma divergente, onde os fluxos aparecem dentro das derivadas).

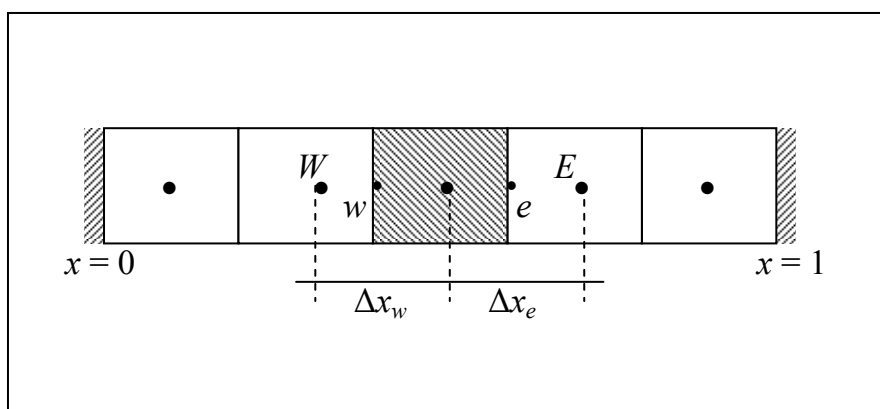


Figura 3.8. Volumes finitos.

$$\text{Exemplo: } \begin{cases} \frac{\partial y}{\partial \tau} = \frac{1}{x^s} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^s \frac{\partial y}{\partial x} \right) - \Phi^2 [y(x)]^m \\ \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 ; y(1, \tau) = 1 \\ y(x, 0) = y_0 \end{cases}$$

$$\text{Volume elementar: } dV = \beta x^s dx \begin{cases} s = 0 \rightarrow \beta = 1 \\ s = 1 \rightarrow \beta = 2\pi \\ s = 2 \rightarrow \beta = 4\pi \end{cases}$$

Com $\boxed{m=1}$

$$\int_w^e \frac{\partial y}{\partial \tau} x^s dx = \int_w^e \frac{\partial}{\partial \tau} \left(x^s \frac{\partial y}{\partial x} \right) - \int_w^e \Phi^2 x^s y dx$$

$$\text{valor médio no volume: } y_p = \frac{\int_w^e y x^s dx}{\int_w^e x^s dx} = \frac{(s+1)}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})} \int_w^e y x^s dx$$

$$\therefore \frac{dy_p}{d\tau} = \frac{(s+1)}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})} \left[x^s \frac{\partial y}{\partial x} \right]_w^e - \Phi^2 y_p$$

$$\text{diferenças centrais: } \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x=x_e} = \frac{y_E - y_p}{\Delta x_e} ; \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x=x_w} = \frac{y_p - y_W}{\Delta x_w}$$

$$\frac{dy_p}{d\tau} = \frac{(s+1)}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})} \left[x_e^s \frac{(y_E - y_p)}{\Delta x_e} - x_w^s \frac{(y_p - y_W)}{\Delta x_w} \right] - \Phi^2 y_p$$

$$\frac{dy_p}{d\tau} = A_W y_W + A_p y_p + A_E y_E - \Phi^2 y_p$$

$$A_W = \frac{(s+1)x_w^s}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})\Delta x_w} ; \quad A_p = \frac{-(s+1)}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})} \left(\frac{x_e^s}{\Delta x_e} + \frac{x_w^s}{\Delta x_w} \right)$$

$$A_E = \frac{(s+1)x_e^s}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})\Delta x_e}$$

Balanços para os volumes das fronteiras:

$x = 0$:

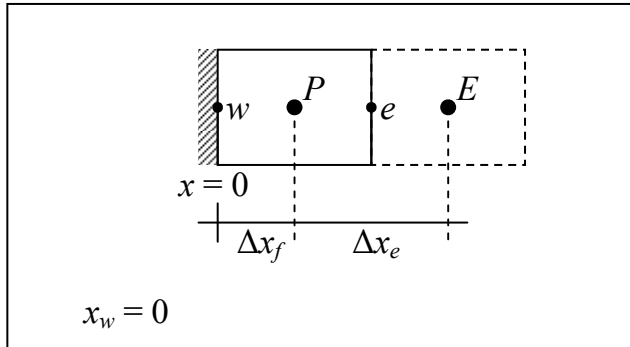


Figura 3.9. Fronteira com fluxo especificado.

$$\frac{dy_p}{d\tau} = \frac{(s+1)}{(x_e^{s+1} - x_w^{s+1})} \left[x^s \frac{\partial y}{\partial x} \right]_w^e - \Phi^2 y_p$$

$$x^s \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_w} = 0; \quad x^s \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_e} = x_e^s \frac{(y_E - y_p)}{\Delta x_e}$$

$$\therefore \frac{dy_p}{d\tau} = \frac{(s+1)}{x_e} \frac{(y_E - y_p)}{\Delta x_e} - \Phi^2 y_p$$

$x = 1$:

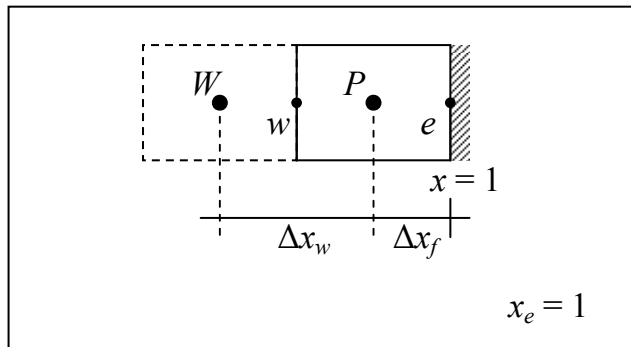
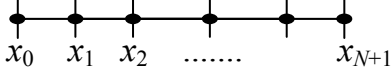


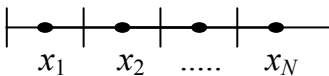
Figura 3.10. Fronteira com variável especificada.

$$x^s \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_w} = x_w^s \frac{(y_p - y_W)}{\Delta x_w}; \quad x^s \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_e} = \frac{y_e - y_p}{\Delta x_f} = \frac{1 - y_p}{\Delta x_f}$$

$$\frac{dy_p}{d\tau} = \frac{(s+1)}{(1 - x_w^{s+1})} \left[\frac{1 - y_p}{\Delta x_f} - x_w^s \frac{(y_p - y_W)}{\Delta x_w} \right] - \Phi^2 y_p$$

Sistema resultante: $\frac{dy}{d\tau} = Ay + b$, onde A é uma matriz tridiagonal.

Nota: Diferenças-finitas: malha 

Volumes-finitos: malha 

Elementos finitos

Referência: “Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineering”, M. E. Davis, 1984.

Aproxima a variável dependente por um polinômio contínuo por partes:

$$y(x) \cong \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i(x) \quad (\text{estacionário}), \quad x \in [0,1]$$

onde $\phi_i(x)$ são funções conhecidas (bases) continuamente diferenciáveis e que satisfazem as condições de contorno, e α_i são coeficientes a determinar.

$$y(x, \tau) \cong \sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j(\tau) \phi_j(x) \quad (\text{dinâmico}), \quad x \in [0,1]$$

A forma da determinação destes coeficientes é que caracteriza o método de elementos finitos utilizado, tais como:

- método de Galerkin
- método da colocação

Exemplo: $y(x) = 1 - \tilde{y}(x)$
(mudança de variável)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} \left[x^s \frac{dy}{dx} \right] + x^s \Phi^2 [1 - y(x)]^m = 0 \quad x \in (0,1) \\ \frac{dy}{dx} \Big|_{x=0} = 0 \\ y(1) = 0 \end{array} \right.$$

Multiplicando a equação por $\phi_i(x)$ e integrando em $[0, 1]$:

$$\int_0^1 \left[\frac{d}{dx} \left(x^s \frac{dy}{dx} \right) + x^s \Phi^2 (1-y)^m \right] \phi_i dx = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Integrando por partes o primeiro termo:

$$\int_0^1 \frac{d}{dx} \left(x^s \frac{dy}{dx} \right) \phi_i dx = \left[x^s \frac{dy}{dx} \phi_i \right]_0^1 - \int_0^1 x^s \frac{dy}{dx} \phi_i'(x) dx$$

Como $\phi_i(x)$, $i=1, \dots, n$, satisfaz as condições de contorno: $(\phi_i'(0) = 0; \phi_i(1) = 0)$

$$\frac{dy}{dx} \Big|_{x=1} \cdot \underbrace{\phi_i(1)}_{=0} - \underbrace{\left[x^s \frac{dy}{dx} \right]_{x=0}}_{=0} \cdot \phi_i(0) = 0$$

tem-se que $\int_0^1 \frac{d}{dx} \left(x^s \frac{dy}{dx} \right) \phi_i dx = - \int_0^1 x^s \frac{dy}{dx} \phi_i'(x) dx$

então: $-\int_0^1 x^s \frac{dy}{dx} \phi_i'(x) dx + \int_0^1 x^s \Phi^2 (1-y)^m \phi_i dx = 0$

Como $y(x) \approx \sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j \phi_j(x)$, tem-se para $\boxed{m=1}$

$$\sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j \int_0^1 x^s \phi_j'(x) \phi_i'(x) dx + \sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j \Phi^2 \int_0^1 x^s \phi_j(x) \phi_i(x) dx = \Phi^2 \int_0^1 x^s \phi_i(x) dx$$

Definindo:

$$\int_0^1 x^s a(x) b(x) dx \equiv (a, b), \quad \text{resulta em:}$$

$$\sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j (\phi_j', \phi_i') + \sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j \Phi^2 (\phi_j, \phi_i) = \Phi^2 (1, \phi_i), \text{ chamada de } \underline{\text{forma fraca}} \text{ da}$$

equação diferencial.

$$\sum_{j=0}^{n+1} \left[(\phi_j', \phi_i') + \Phi^2 (\phi_j, \phi_i) \right] \alpha_j = \Phi^2 (1, \phi_i) \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\boxed{A\alpha = b} \quad \text{Contorno:} \quad \begin{cases} 0 = \alpha_{n+1}\phi_{n+1}(x_{n+1}) = \alpha_{n+1} \\ 0 = \alpha_0\phi'_0(0) + \alpha_1\phi'_1(0) \Rightarrow \alpha_1 = \alpha_0 \end{cases}$$

Funções bases lineares $\mathcal{S}(h^2)$:

$$\phi_0(x) = \begin{cases} \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0}, & x_0 \leq x \leq x_1 \\ 0, & x \geq x_1 \end{cases}$$

$$\phi_j(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}, & x_{j-1} \leq x \leq x_j \\ \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j}, & x_j \leq x \leq x_{j+1} \\ 0, & x \leq x_{j-1}, x \geq x_{j+1} \end{cases}$$

$$\phi_{n+1}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_n \\ \frac{x - x_n}{x_{n+1} - x_n}, & x_n \leq x \leq x_{n+1} \end{cases}$$

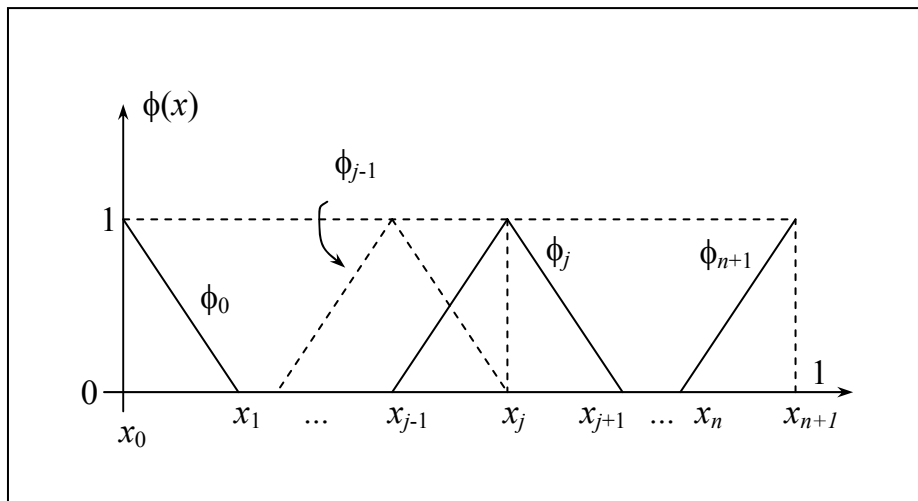


Figura 3.11. Funções bases lineares.

outras funções bases: – cúbicas de Hermite (1ª derivada contínua), $\mathcal{S}(h^4)$

– B-splines, etc.

Para $m \neq 0$ e 1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j (\phi'_j, \phi'_i) - \Phi^2 \left(\left(1 - \sum_{j=0}^{n+1} \alpha_j \phi_j \right)^m, \phi_j \right) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n \\ \\ F(\alpha) = 0 \rightarrow \text{sistema não-linear} \\ \\ \alpha_{n+1} \phi_{n+1}(1) = 0 ; \quad \alpha_0 \phi'_0(0) + \alpha_1 \phi'_1(0) = 0 \end{array} \right.$$

Valor inicial

- transforma o problema de valor de contorno em um problema de valor inicial (P.V.I.)
- atribui um valor inicial para as variáveis com valor inicial desconhecido e resolve o P.V.I.
- verifica se as condições finais foram satisfeitas e retorna ao passo anterior até estas serem satisfeitas.

Para o exemplo da partícula catalítica:

$$\frac{dy}{dx} = v, \quad y = u$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{du}{dx} = v & v(0) = 0 \\ \frac{dv}{dx} = \Phi^2 g(u) - \frac{2}{x} v & u(1) = 1 \end{array} \right.$$

Métodos: – tentativa-e-erro ou “shooting”

– múltiplo “shooting”

– superposição (linear)

1) Equações diferenciais lineares: “shooting” e superposição

Exemplo:
$$\begin{cases} y'' + f(x)y' + g(x)y = r(x) & x \in (a, b) \\ y(a) = \alpha ; y(b) = \beta \end{cases}$$

$$L[y] = y'' + f(x)y' + g(x)y \quad (\text{operador linear})$$

$$L[c_1y_1 + c_2y_2] = c_1L[y_1] + c_2L[y_2]$$

a) “shooting”:

$$\begin{cases} L[y_1] = 0 \\ y_1(a) = 0 \\ y_1'(a) = 1 \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} L[y_2] = r(x) \\ y_2(a) = \alpha \\ y_2'(a) = 0 \end{cases}$$

superposição: $y(x) = c_1y_1(x) + c_2y_2(x)$

$$L[y] = r(x) = c_1 \underbrace{L[y_1]}_{=0} + c_2 \underbrace{L[y_2]}_{=r(x)} \Rightarrow c_2 = 1$$

$$y(x) = c_1y_1(x) + y_2(x) ; \quad y(a) = \alpha = c_1y_1(a) + c_2y_2(a)$$

$$y(b) = \beta = c_1y_1(b) + y_2(b)$$

$$c_1 = \frac{\beta - y_2(b)}{y_1(b)}$$

$$y(x) = y_2(x) + \frac{\beta - y_2(b)}{y_1(b)} y_1(x)$$

b) “shooting”:

$$\begin{cases} L[y_1] = r(x) \\ y_1(a) = \alpha \\ y_1'(a) = \gamma_1 \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} L[y_2] = r(x) \\ y_2(a) = \alpha \\ y_2'(a) = \gamma_2 \end{cases}$$

γ_1 e γ_2 tais que $y_1(b) \neq y_2(b)$.

superposição: $L[y] = r(x) = c_1 \underbrace{L[y_1]}_{r(x)} + c_2 \underbrace{L[y_2]}_{r(x)} \Rightarrow c_1 + c_2 = 1$

$$y(a) = \alpha = c_1y_1(a) + c_2y_2(a)$$

$$y(b) = \beta = c_1y_1(b) + c_2y_2(b)$$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ y_1(b)c_1 + y_2(b)c_2 = \beta \end{cases}$$

$$c_1 = \frac{\beta - y_2(b)}{y_1(b) - y_2(b)} ; \quad c_2 = \frac{y_1(b) - \beta}{y_1(b) - y_2(b)}$$

$$y(x) = \frac{1}{y_1(b) - y_2(b)} \{ [\beta - y_2(b)] y_1(x) + [y_1(b) - \beta] y_2(x) \}$$

2) Equações diferenciais não-lineares

$$\begin{cases} F\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}\right) = 0 \\ y(a) = \alpha ; y(b) = \beta \end{cases}$$

a) “shooting”:

$$\begin{cases} F(x, y_k, y_k', y_k'') = 0 \\ y_k(a) = \alpha \\ y_k'(a) = \gamma_k \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

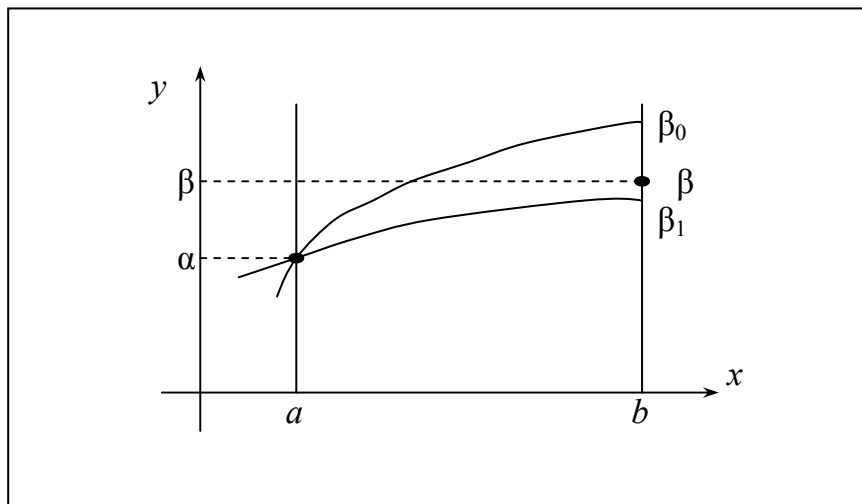


Figura 3.12. Método do “shooting”.

Problema: $g(\gamma) = y(b; \gamma) - \beta = 0$

Ex.: Newton-secante

$$\gamma_{k+1} = \gamma_k - \frac{(y_k(b) - \beta)(\gamma_k - \gamma_{k-1})}{y_k(b) - y_{k-1}(b)}$$