RESÍDUOS PONDERADOS NO DOMÍNIO DISCRETO

Exemplo Motivador:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \alpha \cdot x_{i-1}(t) + y_{i+1}(t) - \left[\alpha \cdot x_i(t) + y_i(t)\right] \quad \text{para } i=1,\,2,\,\ldots,\,N$$

Sendo: $y_i(t) = y_{eq}\left[x_i(t)\right]$ para $i = 1, 2, \cdots, N$; $x_0(t) = x_{feed}(t)$ e $y_{N+1}(t) = y_{feed}(t)$.

Utilizando a aproximação polinomial de grau n+1 das composições em relação à variável reescalada: $s_i = \frac{i-1}{N}$. Considerando também os pontos internos de interpolação: $0 \le s^{(1)} < s^{(2)} < \cdots s^{(n)} < 1$ e utilizando os pontos extremos do intervalo, isto é: $s^{(0)} = -\frac{1}{N}$ e $s^{(n+1)} = \frac{N+1}{N} = 1 + \frac{1}{N}$, tem-se:

$$x(s,t) \cong x^{(n+1)}(s,t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s) \cdot x^{(n+1)}\left(s^{(j)},t\right).$$

Considerando, para simplificar a notação: $x^{(n+1)}\left(s^{(j)},t\right) = x_j(t)$, tem-se:

$$x(s,t) \cong x^{(n+1)}(s,t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s) \cdot x_j(t)$$

A cada uma dessas variáveis, $x_i(t)$ para i=0, 1, 2, $\cdots$, n, $n+1$, associa-se um resíduo:

$$\Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right) = \frac{dx_i(t)}{dt} - \alpha \cdot x^{(n+1)}\left(s^{(i)}-1,t\right) - y_{eq}\left[x^{(n+1)}\left(s^{(i)}+1,t\right)\right] + \left[\alpha \cdot x_i(t) + y_{eq}\left[x_i(t)\right]\right]$$

Calculando-se $x^{(n+1)}\left(s^{(i)}-1,t\right)$ e $y_{eq}\left[x^{(n+1)}\left(s^{(i)}+1,t\right)\right]$, através de:

$$x^{(n+1)}\left(s^{(i)}-1,t\right) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j\left(s^{(i)}-1\right) \cdot x_j(t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^{(-)} \cdot x_j(t)$$

e

$$\Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right) = \frac{dx_i(t)}{dt} - \alpha \cdot x^{(n+1)}\left(s^{(i)}-1,t\right) - y_{eq}\left[x^{(n+1)}\left(s^{(i)}+1,t\right)\right] + \left[\alpha \cdot x_i(t) + y_{eq}\left[x_i(t)\right]\right]$$

$$y_{eq}\left[x^{(n+1)}\left(s^{(i)}+1,t\right)\right] = \sum_{j=0}^{n+1} l_j\left(s^{(i)}+1\right) \cdot y_j(t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^{(+)} \cdot y_j(t)$$

Sendo: $y_j = y_{eq}\left[x_j(t)\right]$.

Desse modo:

$$\Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right) = \frac{dx_i(t)}{dt} - \alpha \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^{(-)} \cdot x_j(t) - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^{(+)} \cdot y_j(t) + \left[\alpha \cdot x_i(t) + y_i(t)\right]$$

Para calcular os valores de $x_j(t)$ para j = 1, 2,..., n (apenas nos pontos internos!) anulam-se os n resíduos ponderados que, no método dos momentos, são:

$$\Re_k^{(n+1)}(t) = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{j-1}{N}\right)^{k-1} \cdot \Re^{(n+1)}\left(\frac{j-1}{N},t\right) \text{ para } k=1, 2\cdots, n.$$

Mas estes somatórios podem ser computados por métodos discretos de quadratura tipo Lobatto, segundo:

$$\Re_k^{(n+1)}(t) = \sum_{i=0}^{n+1}\omega_i \cdot \left(s^{(i)}\right)^{k-1} \cdot \Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right) = \sum_{i=0}^{n+1} M_{k,i} \cdot \Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right) = 0 \text{, sendo}$$

$$M_{k,i} = \omega_i \cdot \left(s^{(i)}\right)^{k-1}.$$

Esse cômputo é exato para funções polinomiais em s até grau 2n+1, no caso linear $\Re^{(n+1)}(s,t)$ é uma função polinomial de grau n+1 então: $s^{k-1} \cdot \Re^{(n+1)}(s,t)$ é um polinômio em s de grau n+k como k varia de 1 a n o maior valor de n+k é 2n que é inferior a 2n+1. Desse modo, para problemas lineares o procedimento reproduz exatamente o método dos momentos.

Essas n equações são lineares, permitindo escrever o sistema na forma:

$$\Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right) + V_{i,0} \cdot \Re^{(n+1)}\left(s^{(0)},t\right) + V_{i,1} \cdot \Re^{(n+1)}\left(s^{(n+1)},t\right) = 0 \text{ para } i = 1, \ldots, n$$

Substituindo nessa última expressão a expressão de $\Re^{(n+1)}\left(s^{(i)},t\right)$ chega-se, após alguma manipulação, a:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \alpha \cdot \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^{(-)} \cdot x_j(t) + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^{(+)} \cdot y_j(t) - \left[\alpha \cdot X_i(t) + Y_i(t)\right].$$

Em que: $X_i = x_i + V_{i,0} \cdot x_0 + V_{i,1} \cdot x_{n+1}$; $Y_i = y_i + V_{i,0} \cdot y_0 + V_{i,1} \cdot y_{n+1}$;

$B_{i,j}^{(-)} = A_{i,j}^{(-)} + V_{i,0} \cdot A_{0,j}^{(-)} + V_{i,1} \cdot A_{n+1,j}^{(-)}$ e $B_{i,j}^{(+)} = A_{i,j}^{(+)} + V_{i,0} \cdot A_{0,j}^{(+)} + V_{i,1} \cdot A_{n+1,j}^{(+)}$

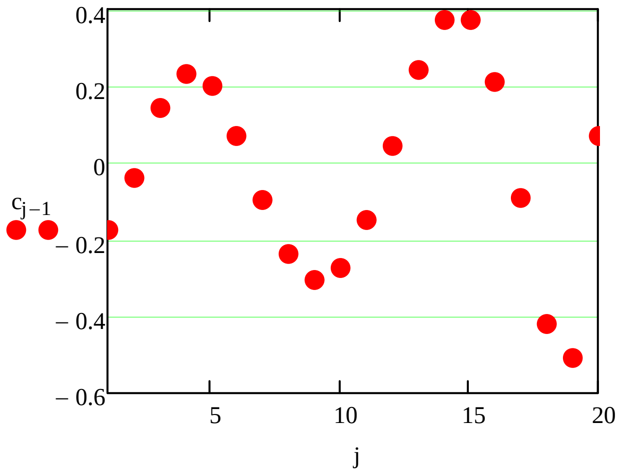
para i= 1, …, n .

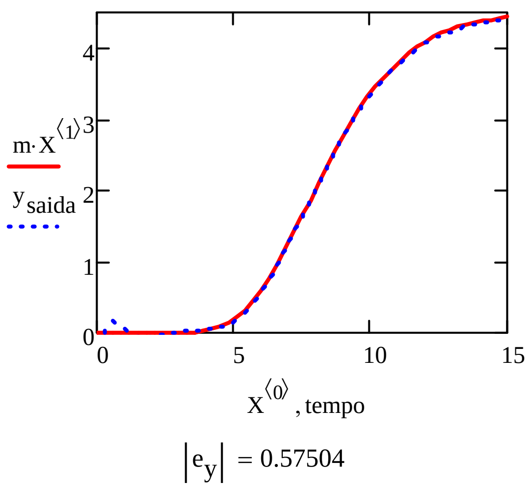
Após resolver o sistema de n EDOs calculam-se:

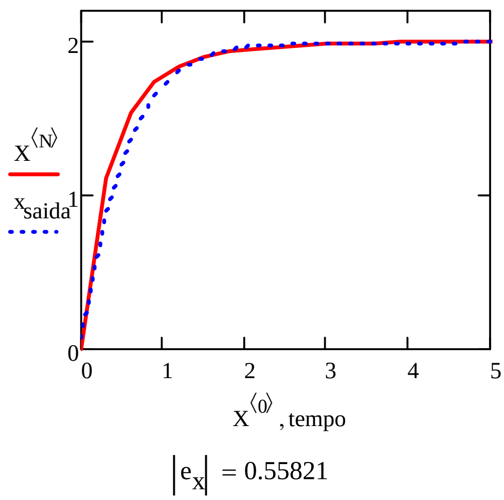
$$x_i = X_i - V_{i,0} \cdot x_0 - V_{i,1} \cdot x_{n+1}.$$

Apresentaremos os resultados do modelo completo e do modelo reduzido para o caso linear, isto é: $y_i(t) = \dfrac{m \cdot x_i(t)}{1+(m-1) \cdot x_i(t)}$. Com N= 20; n =5; parâmetros: α= ¾ ; m =3; $x_{feed}(t)$=0 e $y_{feed}(t) = 6$ e considerando todos os valores das composições nos pratos internos como nulas .

O perfil interpolado inicial é mostrado abaixo:



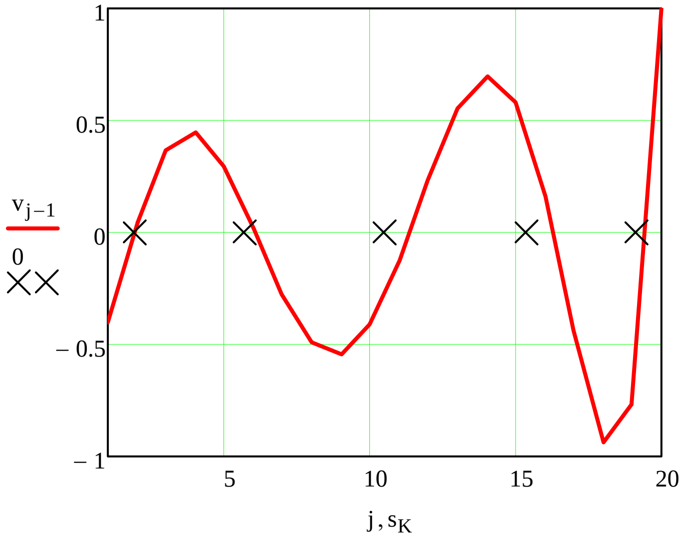




(Curva contínua vermelha: modelo completo; curva pontilhada azul: modelo reduzido)

Resultados bastante satisfatórios!

A variação dos resíduos dos balanços pode ser visualizada a seguir:

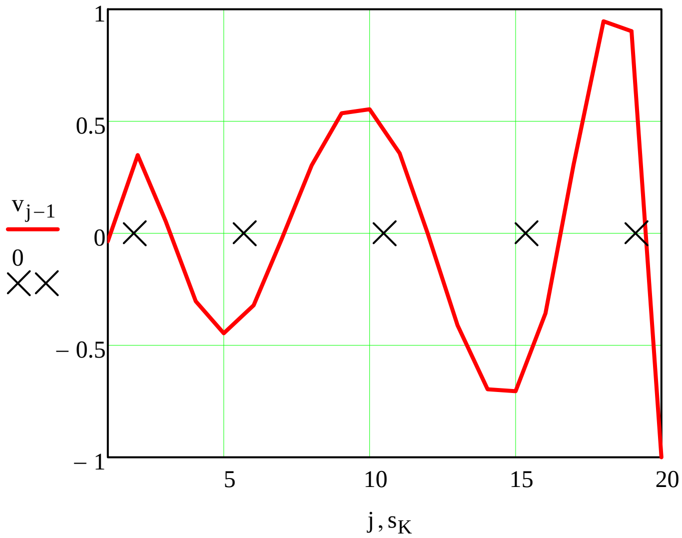


$tempo_k = 2.4$

$v_{max} = 0.03985$

$v_{min} = -0.03748$

$norma = 0.03985$



$tempo_k = 4.5$

$v_{max} = 0.01453$

$v_{min} = -0.01533$

$norma = 0.01533$

Na figura indicam-se os pontos internos da quadratura. O eixo vertical é o perfil do resíduo nos tempo indicados dividido pelo maior valor em módulo dos resíduos.