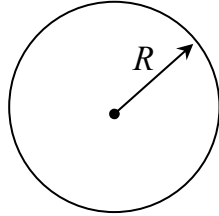


# Métodos Numéricos para a Solução de Problemas de Valor de Contorno

## Equações diferenciais ordinárias

**Exemplo 1.** Difusão-reação em uma partícula catalítica porosa:



**Figura 1.** 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.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Métodos numéricos: – diferenças finitas

– volumes finitos

– elementos finitos

– valor inicial

– aproximação polinomial (e.g. colocação ortogonal)

### **Diferenças finitas**

– transforma o intervalo  $[a, b]$  (no exemplo  $[0, 1]$ ) em uma malha com  $N$  pontos internos:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N < x_{N+1} = 1$$

– aproxima as derivadas pelos quocientes de diferenças

– resolve o sistema de equações algébricas resultante.

Para uma malha uniforme:  $\Delta x = h = \frac{b-a}{N+1}$

$$x_i = a + i.h, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N+1$$

Expandindo  $y(x_i + h)$  em série de Taylor:

$$y(x_i + h) = y(x_i) + hy'(x_i) + \mathcal{O}(h^2)$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i + h) - y(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$\boxed{y'_i \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}} \quad (\text{diferença à direita})$$

Expandindo  $y(x_i - h)$  em série de Taylor:

$$y(x_i - h) = y(x_i) - hy'(x_i) + \mathcal{O}(h^2)$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i) - y(x_i - h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$\boxed{y'_i \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h}} \quad (\text{diferença à esquerda})$$

subtraindo as duas expansões:

$$\begin{aligned} y(x_i + h) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \mathcal{O}(h^4) \\ (-) \quad y(x_i - h) &= y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \mathcal{O}(h^4) \\ \hline y(x_i + h) - y(x_i - h) &= 2hy'(x_i) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i + h) - y(x_i - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\boxed{y'_i \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}} \quad (\text{diferença central})$$

somando as duas expansões:

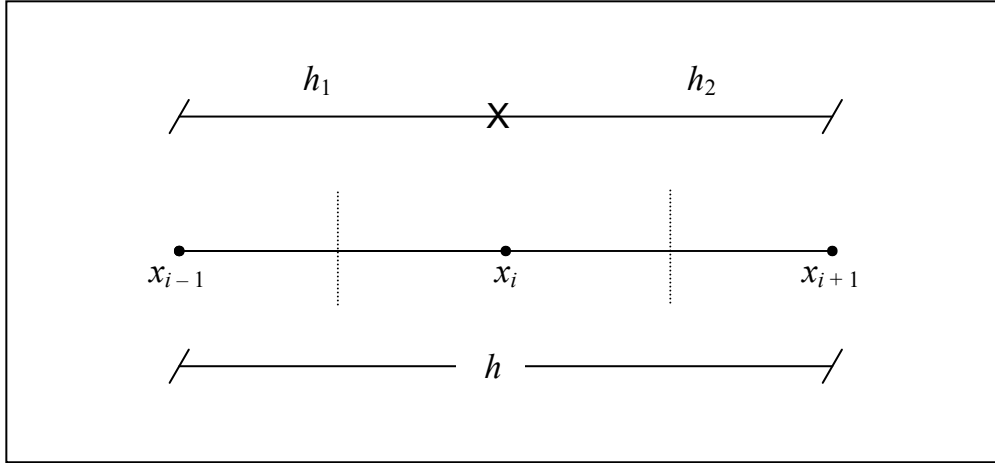
$$\begin{aligned} y(x_i + h) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \mathcal{O}(h^4) \\ (+) \quad y(x_i - h) &= y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \mathcal{O}(h^4) \\ \hline y(x_i + h) + y(x_i - h) &= 2y(x_i) + h^2 y''(x_i) + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

$$y''(x_i) = \frac{y(x_i + h) - 2y(x_i) + y(x_i - h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\boxed{y''_i \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}} \quad (\text{diferença central de 2ª ordem})$$

Para uma malha não uniforme:

$$y'_i \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad \text{ou} \quad \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad \text{ou} \quad \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$



**Figura 2.** Malha não uniforme para diferenças finitas.

$$y''_i \approx \frac{y'_{i+h_2/2} - y'_{i-h_1/2}}{\left(h - \frac{h_1}{2} - \frac{h_2}{2}\right) = \frac{h}{2}} ; \quad y'_{i+h_2/2} \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} ; \quad y'_{i-h_1/2} \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

$$y''_i \approx \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left( \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right) \quad \text{(central)}$$

Para o exemplo da partícula catalítica:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} = \Phi^2 g(y)$$

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \frac{2}{x_i} \left( \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right) = \Phi^2 g(y_i) \quad i = 1, \dots, N$$

$$y_{N+1} = 1$$

$$y'(x=0) \approx \frac{y_1 - y_0}{h} = 0 \Rightarrow y_0 = y_1$$

para  $g(y_i) = y_i$

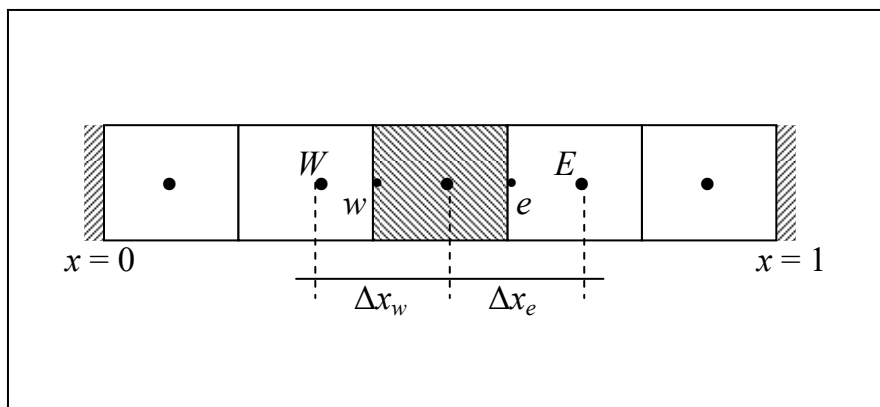
$$\begin{array}{l}
 N + 2 \text{ equações} \\
 N + 2 \text{ variáveis}
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 \left( \frac{x_i}{h} + 1 \right) y_{i+1} - 2 \left( \frac{x_i}{h} + \Phi^2 x_i h \right) y_i + \left( \frac{x_i}{h} - 1 \right) y_{i-1} = 0 \\
 y_{N+1} = 1 \\
 y_1 - y_0 = 0
 \end{array} \right.$$

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.

### 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.** 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  $\boxed{m=1}$

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

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

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

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

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

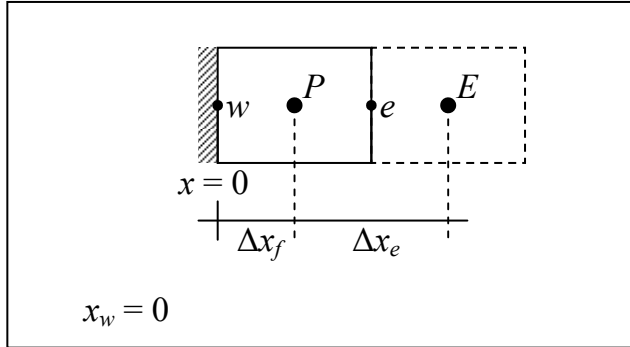
$$\frac{dy_p}{d\tau} = A_W y_W + A_p y_p + A_E y_E - \Phi^2 y_p$$

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

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

Balances para os volumes das fronteiras:

$x = 0$  :



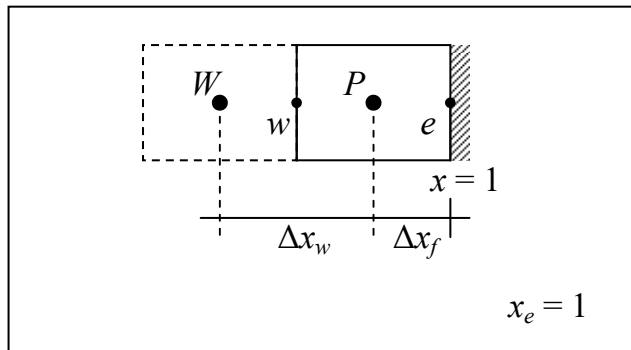
**Figura 4.** Fronteira com fluxo especificado.

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

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

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

$x = 1$  :



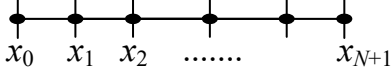
**Figura 5.** Fronteira com variável especificada.

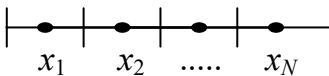
$$x^s \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_w} = x_w^s \frac{(y_p - y_W)}{\Delta x_w}; \quad x^s \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{x_e} = \frac{y_e - y_p}{\Delta x_f} = \frac{1 - y_p}{\Delta x_f}$$

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



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:

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

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

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

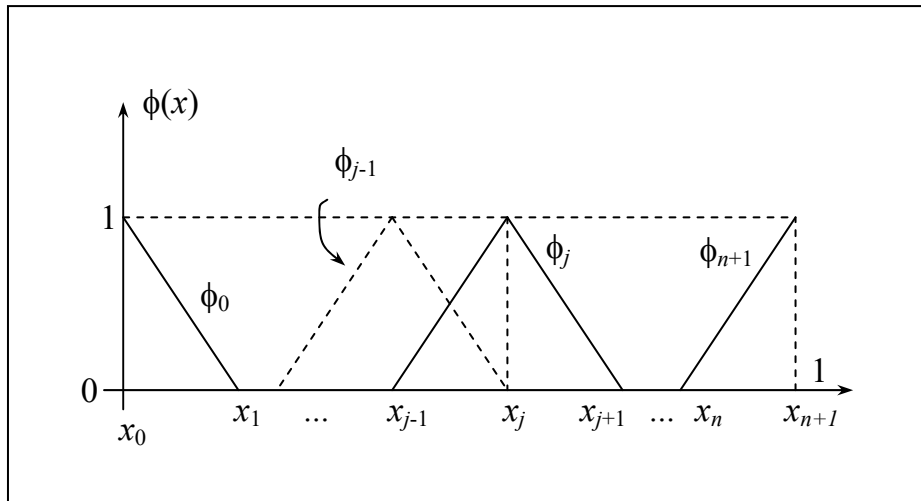
$$\boxed{A\alpha = b} \quad \text{Contorno:} \quad \begin{cases} 0 = \alpha_{n+1}\phi_{n+1}(x_{n+1}) = \alpha_{n+1} \\ 0 = \alpha_0\phi'_0(0) + \alpha_1\phi'_1(0) \Rightarrow \alpha_1 = \alpha_0 \end{cases} \quad (\text{p/ bases lineares})$$

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 6.** 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]:

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

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

$\gamma_1$  e  $\gamma_2$  tais que  $y_1(b) \neq y_2(b)$ .

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

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

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

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

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



## Técnicas de Aproximação polinomial

Referência: “Método de Resíduos Ponderados com Aplicação em Simulação de Processos”, E.C. Biscaia Jr., 1992 – XV CNMAC.

### Interpolação Lagrangeana

$\Rightarrow f(r)$  no intervalo  $a \leq r \leq b$

normalização do intervalo:  $x = \frac{r-a}{b-a}$ ;  $r = a + (b-a)x$

$\Rightarrow f(x)$  no intervalo  $0 \leq x \leq 1$

tendo  $n$  pontos:  $0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n < 1$

com  $f(x_i) = f_i$ ,  $x_i$  : pontos nodais ou internos.

Tem-se  $n$  condições  $\Rightarrow n$  coeficientes a calcular  $\Rightarrow$  polinômios de ordem  $(n-1)$ .

$$P_{n-1}(x) = \sum_{j=0}^{n-1} C_j x^j \quad \Rightarrow \quad C_0, C_1, \dots, C_{n-1} \text{ os } n \text{ coeficientes}$$

$$\sum_{j=0}^{n-1} C_j x_i^j = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1^1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n^1 & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0 \\ \vdots \\ C_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} \quad (\text{sistema de Vandermonde})$$

Este sistema é mal condicionado, pois aumentando o número de pontos  $x_i$  e  $x_{i \pm 1}$  ficam muito próximos. Veja em Golub e Van Loan (1996), p.183-186, uma maneira estável de resolver este sistema.

Definindo o polinômio interpolador de Lagrange:

$$l_j(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k} \quad \Rightarrow \quad \text{Polinômio de grau } (n-1) \text{ em } x$$

tem-se: 
$$P_{n-1}(x) = \sum_{j=1}^n l_j(x) f_j, \quad f_j = f(x_j) = P_{n-1}(x_j) \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$l_j(x_i) = \delta_{ij}, \quad x_1, x_2, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n \text{ são as } (n-1) \text{ raízes de } l_j(x).$$

Definindo:

$P_n(x) \equiv a_n(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$ , polinômio nodal de grau  $n$ .

$$P_n(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$a_n \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n (x - x_k) = \frac{P_n(x)}{x - x_j} \quad \text{e} \quad p_j(x) \equiv \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n (x - x_i)$$

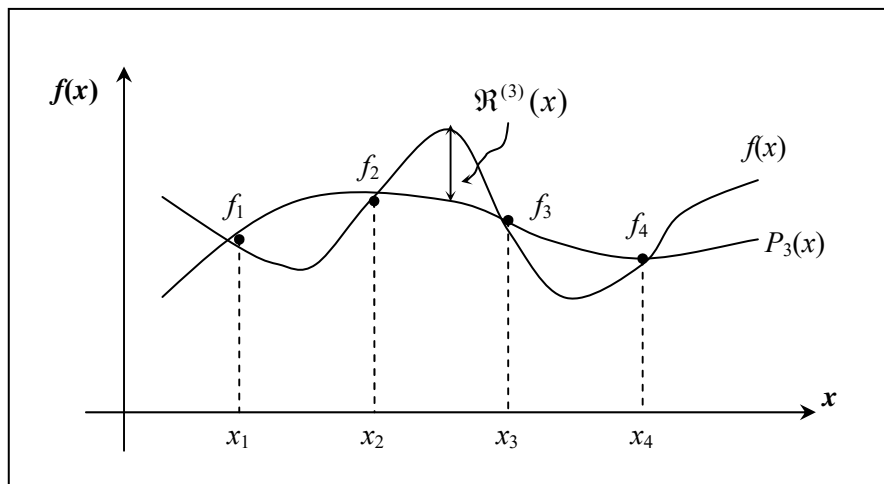
Tem-se: 
$$l_j(x) = \frac{p_j(x)}{p_j(x_j)}$$

Ainda: 
$$\lim_{x \rightarrow x_j} \frac{P_n(x)}{x - x_j} = P_n'(x_j) \quad \therefore \quad a_n p_j(x_j) = P_n'(x_j)$$

Então 
$$l_j(x) = \frac{P_n(x)}{(x - x_j)P_n'(x_j)}$$

Assim: 
$$f(x) = \underbrace{\sum_{j=1}^n l_j(x) \cdot f_j}_{P_{n-1}(x)} + \underbrace{P_n(x) \cdot G(x)}_{\mathfrak{R}^{(n-1)}(x)}, \text{ onde } \mathfrak{R}^{(n-1)}(x) \text{ é o resíduo do}$$

polinômio  $P_{n-1}(x)$  e  $\mathfrak{R}^{(n-1)}(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$



**Figura 8.** Aproximação polinomial.



## Análise de resíduo da interpolação

Definindo  $F(t) \equiv f(t) - P_{n-1}(t) - P_n(t) \cdot G(x)$ , onde  $x$  é um valor fixo e  $t$  é a variável independente.

$$\left. \begin{array}{l} t = x_i \quad \Rightarrow \quad F(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \\ t = x \quad \Rightarrow \quad F(x) = 0 \end{array} \right\} (n + 1) \text{ raízes}$$

Interpolação:  $x_1 < x < x_n \Rightarrow$  intervalo  $I = [x_1, x_n]$

Extrapolação:  $x < x_1 \Rightarrow I = [x, x_n]$

$x > x_n \Rightarrow I = [x_1, x]$

$F(t)$  possui  $(n + 1)$  raízes em  $I$

$\frac{dF(t)}{dt}$  possui pelo menos  $n$  raízes em  $I$

⋮

$\frac{d^n F(t)}{dt^n}$  possui pelo menos 1 raiz em  $I$

$$\frac{d^n P_{n-1}(t)}{dt^n} = 0 \quad (\text{polinômio de grau } n - 1)$$

$$\frac{d^n P_n(t)}{dt^n} = n! a_n$$

sendo então  $t = \xi$  um ponto em  $I$  tal que  $\frac{d^n F(\xi)}{dt^n} = 0$

$$\text{tem-se} \quad G(x) = \frac{1}{n! a_n} \frac{d^n f(\xi)}{dt^n}, \quad \xi \in I$$

$$\therefore \mathfrak{R}^{(n-1)}(x) = P_n(x) \cdot G(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i) \cdot \frac{1}{n!} \frac{d^n f(\xi)}{dt^n}$$

$\mathfrak{R}^{(n-1)}(x)$  é igual a zero  $\forall x$  apenas se  $f(x)$  for uma função polinomial de grau  $< n$  :

$$\frac{d^n f}{dt^n} = 0$$

## Estimativa das derivadas da aproximação polinomial

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{dP_{n-1}}{dx} = \sum_{j=1}^n \frac{dl_j(x)}{dx} \cdot f_j$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{d^2 P_{n-1}}{dx^2} = \sum_{j=1}^n \frac{d^2 l_j(x)}{dx^2} \cdot f_j$$

$\left. \begin{array}{l} \text{grau } (n-2) < n \\ \text{grau } (n-3) < n \end{array} \right\} \text{ Podem ser exatamente representados por } P_{n-1}(x)$

$$\frac{dl_j}{dx} = \sum_{i=1}^n l_i(x) \frac{dl_j(x_i)}{dx} = \sum_{i=1}^n l_i(x) A_{ij}; \quad \boxed{A_{ij} = \frac{dl_j(x_i)}{dx}}$$

$$\frac{d^2 l_j}{dx^2} = \sum_{i=1}^n l_i(x) \frac{d^2 l_j(x_i)}{dx^2} = \sum_{i=1}^n l_i(x) B_{ij}; \quad \boxed{B_{ij} = \frac{d^2 l_j(x_i)}{dx^2}}$$

$$\therefore \frac{dP_{n-1}}{dx} = \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^n l_i(x) A_{ij} \right) \cdot f_j = \sum_{i=1}^n \left( \underbrace{\sum_{j=1}^n A_{ij} f_j}_{\frac{dP_{n-1}(x_i)}{dx}} \right) \cdot l_i(x)$$

$$\frac{d^2 P_{n-1}}{dx^2} = \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^n l_i(x) B_{ij} \right) \cdot f_j = \sum_{i=1}^n \left( \underbrace{\sum_{j=1}^n B_{ij} f_j}_{\frac{d^2 P_{n-1}(x_i)}{dx^2}} \right) \cdot l_i(x)$$

escrevendo  $A_{ij}$  e  $B_{ij}$  em termos de  $P_n(x)$ , tem-se:

$$\boxed{A_{ij} = \frac{P'_n(x_i)}{(x_i - x_j)P'_n(x_j)}, \quad i \neq j} \quad \text{e} \quad \boxed{A_{ii} = \frac{P''_n(x_i)}{2P'_n(x_i)}}$$

$$\boxed{B_{ij} = 2A_{ij} \left[ A_{ii} - \frac{1}{x_i - x_j} \right]}, \quad i \neq j \quad \text{e} \quad \boxed{B_{ii} = \frac{P'''_n(x_i)}{3P'_n(x_i)}}$$

Algumas propriedades de  $l_j(x)$ :

$$x^k = \sum_{j=1}^n l_j(x) x_j^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$k = 0 \quad \boxed{\sum_{j=1}^n l_j(x) = 1}$$

$$\boxed{\sum_{j=1}^n A_{ij} = 0}$$

$$\boxed{\sum_{j=1}^n B_{ij} = 0} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

para o exemplo da partícula catalítica:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} = \Phi^2 g(y); \quad \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=0} = 0 \text{ e } y(1) = 1$$

$$y(x) \approx \sum_{j=0}^{n+1} l_j(x) y_j; \quad x_0 = 0 \text{ e } x_{n+1} = 1$$

$$x^2 \sum_{j=0}^{n+1} \frac{d^2 l_j(x)}{dx^2} y_j + 2x \sum_{j=0}^{n+1} \frac{dl_j(x)}{dx} y_j = \Phi^2 x^2 g\left(\sum_{j=0}^{n+1} l_j(x) y_j\right)$$

para  $x = x_i$ :  $x_i^2 \sum_{j=0}^{n+1} B_{ij} y_j + 2x_i \sum_{j=0}^{n+1} A_{ij} y_j = \Phi^2 x_i^2 g(y_i), \quad i = 1, 2, \dots, n$

C.C.:  $\sum_{j=0}^{n+1} A_{0j} y_j = 0 \text{ e } y_{n+1} = 1$

Portanto, uma vez determinadas as raízes de  $P_{NT}(x)$ , ( $NT = n + 2$ ), que caracterizam o método utilizado, as matrizes  $A_{ij}$  e  $B_{ij}$  são conhecidas, restando a determinar os valores de  $y_i$  ( $i = 0, 1, \dots, n+1$ ) a partir da solução do sistema de  $n+2$  equações algébricas acima.

Para problemas recaindo em equações diferenciais de segunda ordem:

$$\begin{cases} f_1\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2 y}{dt^2}\right) = r(t) & t \in (a, b) \\ g_1\left(a, y, \frac{dy}{dt}\right) = 0 & , t = a \\ h_1\left(b, y, \frac{dy}{dt}\right) = 0 & , t = b \end{cases}$$

Mudança de variável:  $\begin{cases} x = \frac{t-a}{b-a} \\ dx = \frac{dt}{b-a} \end{cases} \Rightarrow x \in [0,1]$

$$\begin{cases} f\left(x, y, \frac{dy}{dt}, \frac{d^2y}{dt^2}\right) = r(x) & x \in (0,1) \\ g\left(0, y, \frac{dy}{dt}\right) = 0 & , x = 0 \\ h\left(1, y, \frac{dy}{dt}\right) = 0 & , x = 1 \end{cases}$$

Aproximação polinomial:  $y(x) \approx P_{n+1}(x) = \sum_{j=0}^{n+1} c_j x^j$

$$P_{n+1}(x) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(x) y_j \quad \text{onde} \quad l_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{n+1} \frac{(x - x_k)}{(x_j - x_k)}$$

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} = 1$$

Resíduo:  $\mathfrak{R}(x; c) = f(x, P_{n+1}, P'_{n+1}, P''_{n+1}) - r(x)$

$$P'_{n+1}(x) = \sum_{j=0}^{n+1} \frac{dl_j}{dx}(x) y_j ; \quad P''_{n+1}(x) = \sum_{j=0}^{n+1} \frac{d^2l_j}{dx^2}(x) y_j$$

Desta forma:  $y(x_i) \approx y_i = P_{n+1}(x_i)$

$$y'(x_i) \approx P'_{n+1}(x_i) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{ij} y_j$$

$$y''(x_i) \approx P''_{n+1}(x_i) = \sum_{j=0}^{n+1} B_{ij} y_j$$

onde  $A_{ij} = \frac{dl_j}{dx}(x_i)$  e  $B_{ij} = \frac{d^2l_j}{dx^2}(x_i)$

Fazendo que  $\mathfrak{R}(x_i; c)$  para  $i = 1, 2, \dots, n$ , isto é, resíduo nulo nos pontos internos, tem-se:

$$\begin{matrix} (n+2) \text{ eq.} \\ (n+2) \text{ var.} \end{matrix} \begin{cases} f\left(x_i, y_i, \sum_{j=0}^{n+1} A_{ij} y_j, \sum_{j=0}^{n+1} B_{ij} y_j\right) - r(x_i) = 0 & i = 1, 2, \dots, n \\ g\left(0, y_0, \sum_{j=0}^{n+1} A_{0j} y_j\right) = 0 \\ h\left(1, y_{n+1}, \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} y_j\right) = 0 \end{cases}$$

Definindo o polinômio nodal:  $P_{NT}(x) = a_{n+2} \prod_{i=0}^{n+1} (x - x_i)$ , grau  $n+2$

Chega-se em:  $l_j(x) = \frac{P_{NT}(x)}{(x - x_j)P'_{NT}(x_j)} \quad \left( \sum_{j=0}^{n+1} l_j(x) = 1 \right)$

$$A_{ij} = \begin{cases} \frac{P'_{NT}(x_i)}{(x_i - x_j)P'_{NT}(x_j)}, & i \neq j \\ \frac{P''_{NT}(x_i)}{2P'_{NT}(x_i)}, & i = j \end{cases} \quad \left( \sum_{j=0}^{n+1} A_{ij} = 0 \right) \\ i = 0, 1, \dots, n+1$$

$$B_{ij} = \begin{cases} 2A_{ij} \left[ A_{ii} - \frac{1}{x_i - x_j} \right], & i \neq j \\ \frac{P''_{NT}(x_i)}{3P'_{NT}(x_i)}, & i = j \end{cases} \quad \left( \sum_{j=0}^{n+1} B_{ij} = 0 \right) \\ i = 0, 1, \dots, n+1$$

Portanto, dados os pontos de colocação  $x_1, x_2, \dots, x_n$  (onde o resíduo é nulo) pode-se obter  $P_{NT}(x)$ ,  $P'_{NT}(x)$ ,  $P''_{NT}(x)$  e  $P'''_{NT}(x)$  para o cálculo de  $l_j(x)$ ,  $A_{ij}$  e  $B_{ij}$ . Nota-se que não é necessário obter  $a_{n+2}$ , pois tem-se sempre a razão de polinômios. Uma forma eficiente de obter estes polinômios é através de suas fórmulas de recursão:

$$j = 1, 2, \dots, n+2 \quad \begin{cases} p_j(x) = (x - x_j)p_{j-1}(x) & \text{com } p_0(x) = 1 \\ q_j(x) = (x - x_j)q_{j-1}(x) + p_{j-1}(x) & \text{com } q_0(x) = 0 \\ r_j(x) = (x - x_j)r_{j-1}(x) + 2q_{j-1}(x) & \text{com } r_0(x) = 0 \\ s_j(x) = (x - x_j)s_{j-1}(x) + 3r_{j-1}(x) & \text{com } s_0(x) = 0 \end{cases}$$

onde  $P_{NT}(x) = p_{n+2}(x)$ ;  $P'_{NT}(x) = q_{n+2}(x)$ ;  $P''_{NT}(x) = r_{n+2}(x)$ ;  $P'''_{NT}(x) = s_{n+2}(x)$

Resta somente escolher a forma de obtenção de  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

### Método dos Resíduos Ponderados:

$$\int_0^1 w(x) H_k(x) \Re(x; c) dx = 0 \quad k = 1, 2, 3, \dots, n$$

onde  $H_k(x)$  são as ponderações do resíduo e  $w(x)$  é a função peso associada a equação diferencial.

Caso desejasse anular o resíduo em  $x_0 = 0$  e/ou  $x_{n+1} = 1$ , dever-se-ia incluir as correspondentes ponderações  $H_0(x)$  e/ou  $H_{n+1}(x)$ , que juntamente com as condições de contorno determinariam os adicionais coeficientes da aproximação polinomial. Neste caso  $x_0$  e/ou  $x_{n+1}$  seriam também pontos de colocação e não apenas pontos de interpolação.

Método da colocação: 
$$H_k(x) = \delta(x - x_k) = \begin{cases} 0, & x \neq x_k \\ \infty, & x = x_k \end{cases}$$

$$\Rightarrow \mathfrak{R}(x_k; c) = 0 \text{ com } x_k \text{ arbitrário}$$

Método dos momentos: 
$$H_k(x) = x^{k-1}$$

Método de Galerkin: 
$$H_k(x) = \frac{\partial y}{\partial c_k}(x; c)$$

Método dos mínimos quadrados: 
$$H_k(x) = \frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial c_k}(x; c)$$

Método da colocação ortogonal:  $x_k$  são raízes de um polinômio ortogonal e  $P_n(x)$  com relação a função peso  $w(x)$ :

$$\int_0^1 w(x)x^{k-1}P_n(x)dx = 0$$

Ex.:  $w(x) = x^\beta(1-x)^\alpha \Rightarrow$  Polinômios de Jacobi  $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$

Exemplo: Difusão-reação (reação de ordem  $m$ ) – estacionário.

$$\frac{1}{x^s} \frac{d}{dx} \left[ x^s \frac{dy}{dx} \right] = \Phi^2 [y(x)]^m$$

s: fator geométrico 
$$\begin{cases} s = 0 & \rightarrow \text{geometria plana} \\ s = 1 & \rightarrow \text{geometria cilíndrica} \\ s = 2 & \rightarrow \text{geometria esférica} \end{cases}$$

CC1:  $\left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$  (simetria)

CC2:  $y(1) = 1$

Fator de efetividade da reação: 
$$\eta \equiv \frac{\text{taxa média de reação}}{\text{taxa máxima de reação}}$$

$$\eta = (s+1) \int_0^1 x^s [y(x)]^m dx = \frac{(s+1)}{\Phi^2} \frac{dy}{dx} \Big|_{x=1}$$

Fazendo a mudança de variável:  $u = x^2$ , tem-se

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{u^{(s-1)/2}} \frac{d}{du} \left[ u^{(s+1)/2} \frac{dy}{du} \right] = p [y(u)]^m, \text{ onde } p = \frac{\Phi^2}{4} \\ \text{CC1: } \frac{dy}{du} \Big|_{u=0} = \text{finito} \\ \text{CC2: } y(1) = 1 \end{array} \right.$$

$$\equiv u \frac{d^2 y}{du^2} + \frac{(s+1)}{2} \frac{dy}{du} = p y^m$$

$$\eta = \frac{(s+1)}{2} \int_0^1 u^{(s-1)/2} [y(u)]^m du = \frac{(s+1)}{2p} \frac{dy}{du} \Big|_{u=1}$$

A função peso associada a equação diferencial é:  $w(u) = u^{(s-1)/2}$

Aproximação polinomial:  $y(x) \approx P_n(x) = \sum_{j=1}^{n+1} l_j(u) y_j = \sum_{j=0}^n c_j u^j$

Utilizando  $u_1, u_2, \dots, u_n$  como pontos de colocação e  $u_{n+1} = 1$  como ponto de interpolação.

$$l_j(u) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{n+1} \frac{(u - u_k)}{(u_j - u_k)}$$

Pela CC2:  $P_n(1) = \sum_{j=0}^n c_j = 1$ , desta forma pode-se representar

$$P_n(x) = 1 + (1-u) \sum_{i=1}^n d_i u^{i-1}$$

Método dos momentos:  $\int_0^1 u^{(s-1)/2} \cdot u^{k-1} R(u, d) du = 0 \quad k = 1, 2, \dots, n$

Método de Galerkin:  $\int_0^1 u^{(s-1)/2} \cdot (1-u) u^{k-1} R(u, d) du = 0$

Método da colocação ortogonal:  $\int_0^1 u^{(s-1)/2} \cdot (1-u)^\alpha \cdot u^{k-1} R(u, d) du = 0$





$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n+1} \left[ u_i B_{ij} + \frac{(s+1)}{2} A_{ij} \right] y_j = p \cdot y_i^m & i = 1, 2, \dots, n \\ y_{n+1} = 1 \end{cases}$$

isto é, um sistema de equações algébricas lineares ( $m = 0$  e  $1$ ) ou não-lineares ( $m \neq 0$  e  $1$ ).

Exemplo: Difusão-reação (reação de ordem  $m$ ) – dinâmico

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial \tau} = \frac{1}{x^s} \frac{\partial}{\partial x} \left[ x^s \frac{\partial y}{\partial x} \right] - \Phi^2 [y(x)]^m & \tau = \frac{Dt}{L^2} \\ CC1: \left. \frac{\partial y}{\partial u} \right|_{u=0} = 0 & \Phi^2 = \frac{L^2 k C_0^{m+1}}{D} \\ CC2: y(1, \tau) = 1 \\ CI: y(x, 0) = y_0(x) \end{cases}$$

fazendo  $u = x^2$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial \tau} = \frac{1}{u^{(s-1)/2}} \frac{\partial}{\partial u} \left[ u^{(s+1)/2} \frac{\partial y}{\partial u} \right] - \Phi^2 [y(x)]^m \\ CC1: \left. \frac{\partial y}{\partial u} \right|_{u=0} = \text{finito} \\ CC2: y(1, \tau) = 1 \\ CI: y(u, 0) = y_0(u) \end{cases}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} = u \frac{\partial^2 y}{\partial u^2} + \frac{(s+1)}{2} \frac{\partial y}{\partial u} - p \cdot y^m$$

$$\text{Aproximação polinomial: } y(x, \tau) \approx p_n(x, \tau) = \sum_{j=1}^{n+1} l_j(u) y_j(\tau) = \sum_{j=0}^n c_j(\tau) u^j$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^{n+1} l_j(u) \frac{dy_j}{d\tau} = \sum_{j=0}^n \frac{dc_j}{d\tau} u^j$$

para  $u_1, u_2, \dots, u_n$  tem-se:

$$\frac{dy_i}{d\tau} = u_i \sum_{j=1}^{n+1} B_{ij} y_j(\tau) + \frac{(s+1)}{2} \sum_{j=1}^{n+1} A_{ij} y_j(\tau) - p [y_i(\tau)]^m$$

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^{n+1} C_{ij} y_j(\tau) - p[y_i(\tau)]^m; & C_{ij} = u_i B_{ij} + \frac{(s+1)}{2} A_{ij} \\ y_{n+1}(\tau) = 1 \\ y_i(0) = y_{0i} \end{cases}$$

ou

$$\text{P.V.I.} \begin{cases} \frac{dy_i}{d\tau} = C_{i,n+1} + \sum_{j=1}^{n+1} C_{ij} y_j(\tau) - p[y_i(\tau)]^m; & i = 1, 2, \dots, n \\ y_i(0) = y_{0i} \end{cases}$$