

UNIVERSIDADE DO PORTO
FACULDADE DE ENGENHARIA

Método dos Elementos Finitos Móveis:
Aplicação a Sistemas de Equações de Derivadas
Parciais Bidimensionais

Maria do Carmo da Costa Patrocínio Coimbra

Julho 2000

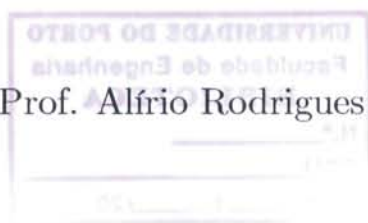


Método dos Elementos Finitos Móveis: Aplicação a Sistemas de Equações de Derivadas Parciais Bidimensionais

Tese apresentada à Universidade do Porto
para obtenção do Grau de Doutor em Ciências de Engenharia
por

Maria do Carmo da Costa Patrocínio Coimbra

Supervisores: Prof. Alípio Rodrigues e Prof. Carlos Sereno(UBI)



*Laboratório de Processos de Separação e Reacção
Departamento de Engenharia Química
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Julho de 2000*

51(043)/001m/MET

UNIVERSIDADE DO PORTO
Faculdade de Engenharia
BIBLIOTECA M
N.º <u>51705</u>
COU <u>51(043)</u>
<u>3</u> <u>1</u> <u>2001</u>

Agradecimentos

Ao apresentar este trabalho gostaria de expressar os meus agradecimentos a todos os que o tornaram possível. Em particular ao Professor Alírio Egídio Rodrigues, da Universidade do Porto, e ao Professor Carlos Alberto Abreu Sereno, da Universidade da Beira Interior, pelo permanente acompanhamento e disponibilidade assim como por todos os valiosos ensinamentos, críticas e sugestões. A finalizar não poderei esquecer todo o apoio da Secção de Matemática e Física do Departamento de Engenharia Civil bem como o acolhimento que me foi dado no Laboratório de Processos de Separação e Reacção.

Ao Tiago, Carolina e António

Resumo

Esta tese tem como objecto de estudo uma classe de problemas de evolução, definidos, quer em domínios de $\mathbb{R}$, quer em domínios de $\mathbb{R}^2$, que são caracterizados por apresentarem soluções com regiões de elevada actividade espacial, móveis no tempo. Na resolução destes problemas é adoptado o método dos elementos finitos móveis numa formulação que se baseia em aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário. Após uma síntese bibliográfica, apresenta-se e desenvolve-se a formulação do método para problemas de evolução em 1-D, que constitui uma extensão do trabalho de Sereno [68] a sistemas implícitos do tipo

$$\mathbf{G}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{H}(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}).$$

Esta formulação é caracterizada por se fazer aproximar a solução por uma função seccionalmente polinomial de grau arbitrário. Para cada uma das variáveis dependentes associa-se uma malha espacial. Embora a escolha de malhas múltiplas acarrete alguns custos computacionais adicionais, ela permite obter com grande precisão e economia de nós, perfis descritos por ondas que se deslocam com diferentes velocidades. Este facto, aliado à técnica desenvolvida para o cálculo dos integrais que envolvem segundas derivadas espaciais, tornam o código computacional elaborado com base nesta formulação do método dos elementos finitos móveis, um poderoso instrumento para a resolução de uma vasta classe de problemas. Vários exemplos numéricos ilustram esta afirmação. É de realçar ainda que o facto de se possuir um código eficiente permitiu validar numericamente alguns modelos, comparando modelos mais complexos com modelos simplificados.

Seguidamente é apresentada e desenvolvida a formulação do método para problemas de evolução em 2-D caracterizados por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}_1(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{F}_2(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mathbf{H}(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}).$$

Nesta formulação a solução é aproximada por uma função seccionalmente polinomial de grau superior ao das aproximações lineares, tradicionalmente usadas. É apresentado um resultado que possibilita a avaliação das derivadas da solução em ordem à variação das posições nodais e à variação da solução num ponto da malha global. O modo de calcular os integrais envolvendo derivadas espaciais de segunda ordem da solução é inovador e eficiente. Se bem que as ideias e a estrutura sejam similares às desenvolvidas para 1-D, a implementação dessas ideias em 2-D torna-se bastante mais complexa. Uma dificuldade fundamental é a que diz respeito à distorção da malha. Para evitar as singularidades da matriz de massa foram introduzidas funções de penalização dependentes da área de cada elemento. São funções que não interferem na qualidade da solução e têm o efeito acrescido de regularizar o movimento dos nós. O tratamento das condições de fronteira e a escolha da malha inicial são também pontos delicados que determinam o desempenho do método.

O código desenvolvido com base no método proposto foi aplicado à resolução de alguns problemas cuja solução apresenta frentes abruptas móveis. São resolvidos vários problemas em 1-D e em 2-D provenientes da Engenharia Química estudados no Laboratório de Processos de Separação e de Reacção (LSRE). Os resultados numéricos são comparados, quer com os experimentais, quer com os fornecidos pela literatura, evidenciando a eficácia e potencialidade do método e do algoritmo computacional desenvolvidos.

Résumé

Cette thèse a pour l'objet l'étude d'une classe de problèmes d'évolution, définis soit sur domaines en $\mathbb{R}$, soit sur $\mathbb{R}^2$, qui présentent des solutions avec régions d'activité spatiale élevée, qui changent au cours du temps. La méthode des éléments finis mobiles avec une formulation basée sur des approximations polynomiales de degré arbitraire est utilisée pour résoudre ce type de problèmes. Après une synthèse bibliographique on présente la formulation de la méthode pour la solution de problèmes d'évolution en 1-D, qui est une extension du travail de Sereno [68] aux systèmes du type

$$\mathbf{G}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{H}(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}).$$

Cette formulation est caractérisée par le fait que la solution est approximée par une fonction polynomiale par morceaux de degré arbitraire. A chaque variable dépendante correspond un réseau spatiale. Le choix de plusieurs réseaux accroît le coût de calcul mais permet d'obtenir avec une grande précision et économie de noeuds, des profils qui se déplacent avec des vitesses différentes. Ce fait, allié à la technique développée pour le calcul des intégrales qui enveloppent des dérivées partielles secondes par rapport aux variables d'espace, rendent le code élaboré avec support en la méthode des éléments finis mobiles, un puissant instrument pour la résolution d'une vaste classe de problèmes. On souligne que le fait d'avoir un code efficace a permis de valider numériquement quelques modèles, en comparant des modèles plus complexes avec des modèles simplifiés.

Ensuite on présente la formulation de la méthode pour des problèmes d'évolution en 2-D caractérisés par

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}_1(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{F}_2(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mathbf{H}(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}).$$

Dans cette formulation la solution est approchée par une fonction polynomiale par morceaux de degré supérieur à celui des approximations linéaires traditionnellement usées. On présente un résultat qui permet le calcul des dérivées de la solution par rapport à la variation des positions des noeuds et à la variation de la valeur de la solution en chaque noeud du réseau global. La façon de calculer les intégrales qui enveloppent des dérivées partielles secondes par rapport aux variables d'espace est originale et efficace. Bien que les idées et la structure soit similaires aux développés pour 1-D, l'implémentation de ces idées en 2-D devient plus complexe. Une difficulté fondamentale concerne la distorsion du réseau. Pour éviter que les matrices de masse soit singulières on introduit des fonctions de pénalisation dépendantes de l'aire de chaque élément. Ces fonctions n'interfèrent pas avec la solution et ont l'effet additionnel de régulariser le mouvement des noeuds. Le traitement des conditions de frontière et le choix du réseau initial sont aussi des points délicats qui déterminent la performance de la méthode.

Le code développé avec support en la méthode proposée a été appliqué à la résolution de quelques problèmes dont la solution présente des profils mobiles. On étudie divers problèmes en 1-D et en 2-D de génie chimique, étudiés au Laboratory of Separation and Reaction Engineering (LSRE). Les résultats numériques sont comparés soit avec les expérimentaux, soit avec les données par la littérature et montrent l'efficacité et la puissance de la méthode et de l'algorithme développé.

Abstract

The objective of the thesis is the study a class of problems of evolution defined on $\mathbb{R}$ and $\mathbb{R}^2$ domains that present solutions with great spatial activity in some regions of space, moving in time. To solve these problems we adopt the moving finite element method in a formulation based on piecewise polynomials approximation of arbitrary degree. After a bibliographic review, we present and develop the formulation of the method for problems of evolution in 1-D that constitute an extension of the work of Sereno [68] to implicit systems described by

$$\mathbf{G}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{H}(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}).$$

This formulation is characterized by the approximation of the solution that is a piecewise polynomial approximation of arbitrary degree. For each one of dependent variables we associate a space grid. Although the choice of several grids has some extra computational costs, it allows great accuracy and economy of nodes in problems of moving profiles with different velocities. This fact and the technique developed to compute integrals involving second spatial derivatives, make the computational code based on this formulation of the moving of finite element method a powerful tool to compute the numerical solution of a large class of problems. Several numerical examples are given.

Then the formulation of the method for problems of evolution in 2-D characterized by

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}_1(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{F}_2(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mathbf{H}(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}),$$

is presented and developed. In this formulation the solution is approximated by a piecewise polynomials approximation of higher degree than the linear approximations usually used. A result that allows the evaluation of the derivatives of the solution with respect to the variation of the nodes position and to the variation of the value of the solution at a global node is presented. The way to calculate the integrals involving second spatial derivatives is innovative and efficient. The ideas and structure are similar to those developed in 1-D, but the implementation of those ideas in 2-D is more complex. One basic difficulty has to do with the grid distortion. To overcome the singularity of the mass-matrix penalty functions depending on the area of each element were introduced. These functions do not interfere on the solution and the additional effect is to regularize the nodes movements. The treatment of boundary conditions and the choice of initial grid are also sensitive points in determining the performance of the method.

The computational code developed was applied to the resolution of same problems whose solutions present sharp moving fronts. Various problems from Chemical Engineering in 1-D and 2-D studied in the Laboratory of Separation and Reaction Engineering (LSRE) are solved. The numerical results are compared with the experimental results as well as those given in the literature, and show the efficiency of the method and computational algorithm developed.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Elementos Finitos Móveis: uma Síntese	9
2.1	Introdução	9
2.2	O método dos EFM de Miller	10
2.2.1	Cálculo dos integrais	16
2.2.2	Condições de fronteira	20
2.2.3	Singularidades	20
2.3	Formulação de Herbst	24
2.4	Formulação variacional	26
2.5	Formulação de Baines	30
2.6	Formulação dos gradientes pesados	35
2.7	Integração no tempo	37
2.8	Sistemas de EDP	38
2.9	Resultados da aplicação do método dos EFM	40

2.10	EFM em espaços de dimensões superiores	41
2.11	Conclusões e Notação	43
3	Método dos Elementos Finitos Móveis em Espaços Unidimensionais	49
3.1	Introdução	49
3.2	O problema	51
3.3	Discretização da variável espacial	52
3.3.1	Abordagem elemento a elemento	54
3.3.2	Abordagem global	56
3.3.3	O sistema de EDO	61
3.3.4	Cálculo dos integrais	66
3.4	Equações gerais do método	70
3.4.1	Sistemas implícitos	70
3.4.2	Sistemas explícitos	81
3.5	Integração no tempo	84
3.6	Implementação do método	85
3.7	Conclusões e Notação	89
4	Exemplos e Resultados do MEFM em 1-D	95
4.1	Introdução	95
4.2	Equação de <i>reacção-difusão</i>	98
4.3	Equação de <i>convecção-difusão</i>	102

4.4	Reactor catalítico não isotérmico	104
4.5	Cromatografia binária	108
4.5.1	O modelo	108
4.5.2	Simulação numérica	116
4.6	Adsorção com modulação da pressão	131
4.6.1	Descrição do modelo base	132
4.6.2	Separação de uma mistura de hélio-metano	144
4.6.3	Separação de uma mistura de oxigénio-azoto	168
4.7	Conclusões e notação	179
5	Método dos Elementos Finitos Móveis em Espaços Bidimensionais	187
5.1	Introdução	187
5.2	O problema	189
5.3	Discretização espacial	190
5.3.1	Abordagem elemento a elemento	192
5.3.2	Abordagem global	200
5.3.3	Formulação do MEFM	209
5.3.4	Singularidades	211
5.3.5	O sistema de EDO	214
5.3.6	Cálculo dos integrais	217
5.4	Equações gerais do método	227
5.4.1	Condições de fronteira	233

5.5	Discretização no tempo	234
5.6	Conclusões e Notação	234
6	Implementação e Aplicações do MEFM em 2-D	241
6.1	Introdução	241
6.2	Equação de <i>convecção-difusão</i>	242
6.3	Equação de <i>reação-difusão</i>	263
6.4	Sistemas de Equações de <i>Burgers</i>	273
6.5	Propagação de ondas de temperatura num leito fixo	277
6.6	Conclusões e Notação	294
7	Conclusões	299
7.1	Considerações finais	299
7.2	Perspectivas de desenvolvimento futuro	303
	Referências Bibliográficas	305

Lista de Figuras

1.1	Patologias: Excesso de dispersão	2
1.2	Patologias: Oscilações incorrectas	3
2.1	(a) Aproximações lineares; (b) Primeira função de base; (c) Segunda função de base	13
3.1	Solução aproximada <i>vs</i> Solução aproximada suavizada	68
3.2	Malhas espaciais e pontos de interpolação relativos às primeira (a) e segunda (b) variáveis dependentes	88
3.3	Blocos não-zeros da matriz dos coeficientes	88
4.1	Reacção com difusão: perfis de temperatura para $\delta = 30$	100
4.2	Reacção com difusão: trajectórias dos nós de separação	100
4.3	Reacção com difusão: movimento dos nós de separação	101
4.4	Equação de convecção-difusão: perfis para $t=0$ e $t=500$	103
4.5	Reactor catalítico não isotérmico: histórias de concentração do reagente	106
4.6	Reactor catalítico não isotérmico: histórias de temperatura	106

4.7	Reactor catalítico não isotérmico: perfis de concentração do reagente	107
4.8	Reactor catalítico não isotérmico: perfis de temperatura	107
4.9	Cromatografia binária, resposta a um salto: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $Pe = 10^3$	117
4.10	Cromatografia binária, resposta a um salto: perfis de concentração de A e B para diferentes tempos, $Pe = 10^4$	119
4.11	Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de A, $Pe = 10^3$	120
4.12	Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de B, $Pe = 10^3$	120
4.13	Cromatografia binária, resposta a um salto: trajectórias dos nós de separação da malha de A, $Pe = 10^3$	121
4.14	Cromatografia binária, resposta a um salto: trajectórias dos nós de separação da malha de B, $Pe = 10^3$	121
4.15	Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de A, $Pe = 10^4$	122
4.16	Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de B, $Pe = 10^4$	122
4.17	Cromatografia binária, resposta a um salto: histórias de concentração de A e B <i>vs</i> teoria de equilíbrio	125

4.18	Cromatografia binária, resposta a um salto: histórias de concentração de A e B vs teoria de equilíbrio	125
4.19	Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $\Delta\theta = 0,05$	127
4.20	Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $\Delta\theta = 0,5$	128
4.21	Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $\Delta\theta = 1$	128
4.22	Cromatografia binária, resposta a um pulso: perfis de concentração de A e B , $Pe = 10^4$, $\Delta\theta = 0,5$	129
4.23	Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $Pe = 10^3$	130
4.24	Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $Pe = 10^4$	130
4.25	Esquema de uma coluna de adsorção. Fase de pressurização.	133
4.26	AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de pressão parcial de A , p_A^*	146
4.27	AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de pressão total, p^*	147
4.28	AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de velocidade mássica, G^*	147

4.29 AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado <i>vs</i> modelo geral:	
perfis de fracção molar de A , y_A	148
4.30 AMP, hélio-metano, Pe <i>vs</i> Pe^{real}	149
4.31 AMP, de hélio-metano, exemplo 2: perfis de velocidade mássica, G^* ,	
caso I	152
4.32 AMP, hélio-metano, exemplo 2: perfis de velocidade mássica, G^* ,	
caso II	152
4.33 AMP, hélio-metano, exemplo 2: perfis de velocidade mássica, G^* ,	
caso III	153
4.34 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de pressão parcial de A , p_A^* ,	
caso I	153
4.35 AMP, de hélio-metano, exemplo 2: histórias de pressão parcial de A ,	
p_A^* , caso II	154
4.36 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de pressão parcial de A , p_A^* ,	
caso III	154
4.37 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de velocidade mássica, G^* ,	
caso I	155
4.38 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de velocidade mássica, G^* ,	
caso II	155
4.39 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de velocidade mássica, G^* ,	
caso III	156

4.40	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 4 \times 10^4$	158
4.41	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 10^4$	158
4.42	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 10^3$	159
4.43	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 4 \times 10^4$	159
4.44	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 10^4$.	160
4.45	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 10^3$.	160
4.46	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 4 \times 10^4$	161
4.47	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^4$	161
4.48	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^3$	162
4.49	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de fracção molar de A , y_A , $Pe = 4 \times 10^4$	162
4.50	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^4$	163
4.51	AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^3$	163

4.52	AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 4 \times 10^4$	164
4.53	AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 10^4$	164
4.54	AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 10^3$	165
4.55	AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão total, p^* , $Pe = 4 \times 10^4$	165
4.56	AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão total, p^* , $Pe = 10^4$	166
4.57	AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão total, p^* , $Pe = 10^3$	166
4.58	AMP, oxigénio-azoto, Pe versus Pe^{real} em $x = 0$	170
4.59	AMP, oxigénio-azoto: histórias de p_A^* em $x = 0$ para diferentes valores de Pe	171
4.60	AMP, oxigénio-azoto: histórias de p_A^* em $x = 1$ para diferentes valores de Pe	171
4.61	AMP, oxigénio-azoto: histórias de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^3$.	172
4.62	AMP, oxigénio-azoto: histórias de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^4$.	173
4.63	AMP, oxigénio-azoto: histórias de velocidade mássica, G^* , $Pe = 4 \times 10^4$	173
4.64	AMP, oxigénio-azoto: histórias da fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^3$.	174
4.65	AMP, oxigénio-azoto: histórias da fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^4$.	174
4.66	AMP, oxigénio-azoto: histórias da fracção molar de A , y_A , $Pe = 4 \times 10^4$	175

4.67	AMP, oxigénio-azoto: perfis de pressão parcial de A , p_A^* , $Pe = 10^4$. .	175
4.68	AMP, oxigénio-azoto: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 10^4$	176
4.69	AMP, oxigénio-azoto: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^4$. . .	176
4.70	AMP, oxigénio-azoto: perfis de fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^4$. . .	177
4.71	AMP, oxigénio-azoto: movimento dos nós para a malha associada a p_A^*	177
4.72	AMP, oxigénio-azoto: movimento dos nós para a malha associada a p^*	178
5.1	Malha espacial inicial uniforme à esquerda	191
5.2	Malha espacial inicial à direita	192
5.3	Coordenadas triangulares definidas num elemento finito	193
5.4	Numeração dos vértices e arestas de um elemento finito	195
5.5	Pontos de interpolação em Ω_i para diferentes graus do polinómio . . .	196
5.6	Numeração dos nós de interpolação em Ω_i	196
5.7	Solução aproximada, U_m , definida por interpolação	202
5.8	Suporte do ponto de interpolação v_j	203
5.9	Malha espacial em torno de ζ_l	206
5.10	Malha degenerada, triângulo de área nula	212
5.11	Malha degenerada, triângulo de área negativa	213
5.12	V_δ para o suporte de um nó espacial	219
5.13	Vizinhança δ , $\mathcal{V}_\delta^j$, de um nó espacial	220
5.14	Função de base α_j	220
5.15	Mudança de variável sobre uma aresta	222

5.16 Gráfico da solução aproximada suavizada, $\tilde{U}_j$, numa secção perpendicular à aresta	223
5.17 Cálculo de integrais em coordenadas triangulares	226
6.1 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 1$. .	246
6.2 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 10^{-2}$	247
6.3 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 10^{-3}$	248
6.4 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 10^{-4}$	249
6.5 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 1$, $c_2 = 10^{-3}$. .	250
6.6 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-2}$, $c_2 = 10^{-3}$	251
6.7 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-4}$, $c_2 = 10^{-3}$	252
6.8 Equação de convecção-difusão, exemplo 2, erro máximo da solução aproximada	254
6.9 Equação de convecção-difusão, exemplo 2, evolução da malha	255
6.10 Equação de convecção-difusão, exemplo 2, solução interpolada	256
6.11 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à direita, perfil da solução em $t = 1$, $p = 0,005$	258
6.12 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à esquerda, perfil da solução em $t = 1$, $p = 0,005$	258
6.13 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, evolução da malha à direita	260
6.14 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, evolução da malha à esquerda	261

6.15 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à esquerda, perfil interpolado para $t = 0,5$, $p = 0,005$	262
6.16 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à esquerda, perfil interpolado para $t = 1$, $p = 0,005$	262
6.17 Equação de reacção-difusão, histórias de temperatura em $x = y = 0$.	264
6.18 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à direita e solução	266
6.19 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à direita e solução	267
6.20 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à esquerda e solução	268
6.21 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à esquerda e solução	269
6.22 Equação de reacção-difusão, $d = 0,1$, evolução da malha	271
6.23 Equação de reacção-difusão, $d = 0,1$, perfis da solução	272
6.24 Sistema de Burgers, evolução da malha	274
6.25 Sistema de Burgers, perfis da primeira componente da solução	275
6.26 Sistema de Burgers, perfis da segunda componente da solução	276
6.27 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 20^\circ C$, histórias de temperatura .	282
6.28 Propagação de ondas térmicas, perfis de temperatura	283
6.29 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha, 1ª simulação	284
6.30 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha, 2ª simulação	285
6.31 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha, 3ª simulação	286
6.32 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ C$, $Pe_a = 100$, histórias de temperatura	288

6.33 Propagação de ondas térmicas, perfis de temperatura	289
6.34 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha	290
6.35 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ C$, $Pe_a = 1000$, histórias de temperatura	292
6.36 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ C$, $Pe_a = 1000$, perfil de temperatura em $t = 1,5$	293
6.37 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ C$, $Pe_a = 1000$, perfil de temperatura em $t = 2$	293

Lista de Tabelas

4.1	Critérios de paragem da fase de pressurização	145
4.2	AMP, separação de hélio-metano, exemplo 1: tempos de pressurização para os modelos <i>simplificado</i> e <i>geral</i>	149
4.3	AMP, separação de hélio-metano, exemplo 2: volumes mortos para três simulações distintas	151
4.4	AMP, separação de hélio-metano, exemplo 2: tempo de CPU para diferentes volumes mortos	151
4.5	AMP, separação de hélio-metano, exemplo 3: tempo de pressurização e tempo de CPU para diferentes valores de Pe	167
4.6	AMP, separação de oxigénio-azoto: tempo de pressurização e tempo de CPU para diferentes valores de Pe	169
6.1	Equação de convecção-difusão, efeito da variação de c_2	243
6.2	Equação de convecção-difusão, efeito da variação de c_1	244

Capítulo 1

Introdução

Muitos dos problemas de Engenharia são modelizados por equações de derivadas parciais (EDP), dependentes do tempo. A estes problemas, *problemas de evolução*, corresponde uma grande diversidade no comportamento das soluções. Neste trabalho estamos especialmente interessados em problemas de evolução cujas soluções exibem regiões de grande actividade espacial que se movem com o tempo. São exemplo disso os problemas modelizados por uma equação de convecção-difusão em que o termo convectivo é dominante.

O objectivo fundamental desta tese é desenvolver um algoritmo computacional que permita resolver este tipo de problemas de evolução, que descrevem fenómenos reais, definidos, quer em domínios de $\mathbb{R}$, quer em domínios de $\mathbb{R}^2$. Os exemplos de aplicação considerados são problemas de Engenharia Química cujos modelos foram desenvolvidos no Laboratório de Processos de Separação e de Reacção.

Para o tipo de problemas que nos propomos resolver, a integração numérica

numa malha espacial fixa é ineficiente. De facto, a menos que se use uma malha espacial muito fina, a utilização de malhas fixas produz diversas patologias como as que são ilustradas nas figuras 1.1 e 1.2. Métodos baseados em diferenças finitas, embora descrevam a solução de modo razoável, tendem a suavizar as frentes como ilustra a figura 1.1. Os métodos de Galerkin, figura 1.2, introduzem oscilações na solução que, por vezes, a tornam irreconhecível.

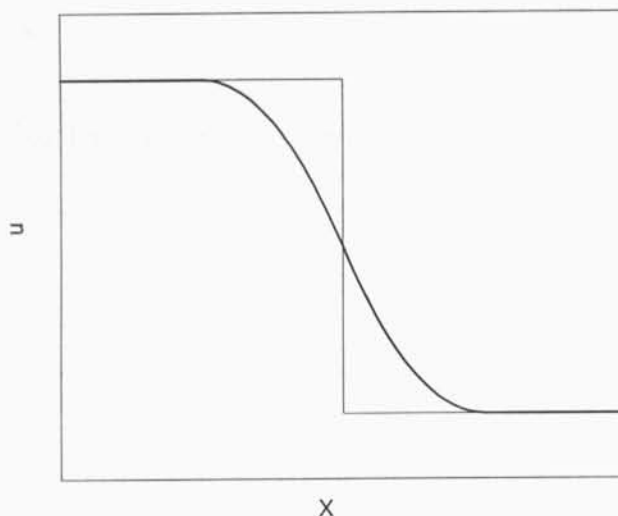


Figura 1.1 Patologias: Excesso de dispersão

O conceito de método adaptativo surgiu para contornar a pouca eficiência dos métodos de malha fixa, neste tipo de problemas. Este é um campo da Análise Numérica em que a investigação tem sido mais intensa nos últimos anos. Em 1981, K. Miller e R. Miller [60] e K. Miller [56] propuseram o método dos elementos finitos móveis (EFM) para a resolução de problemas de evolução cujas soluções exibem muita activi-

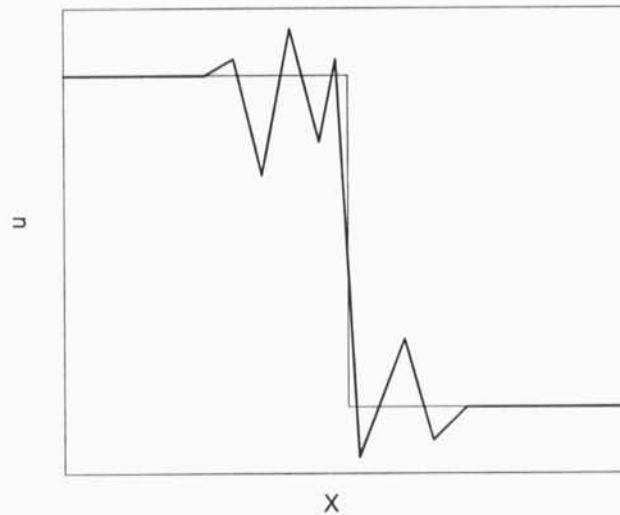


Figura 1.2 Patologias: Oscilações incorrectas

dade espacial, apresentando zonas de transição bruscas que se movem com o tempo. Essencialmente é um método que se baseia na filosofia do *método de linhas* onde a discretização espacial se faz por elementos finitos, permitindo que os nós espaciais se movam com o tempo. Esta discretização espacial conduz a um sistema de equações diferenciais ordinárias na variável tempo. A discretização total do problema obtém-se recorrendo a um integrador numérico para resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDO). Nesta tese apresentamos e desenvolvemos uma formulação do método dos elementos finitos móveis focando a atenção na discretização espacial.

A nossa formulação do método baseia-se nos trabalhos de Sereno [68] e Sereno *et al.* [70, 71], onde o método foi desenvolvido e implementado para uma classe restrita de problemas em domínios espaciais de dimensão 1. Nesta tese apresentamos,

desenvolvemos e implementamos, numa primeira fase, o método dos elementos finitos móveis, com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário, a uma classe mais vasta de problemas em domínios unidimensionais, 1-D. O algoritmo computacional desenvolvido foi especialmente desenhado para problemas de evolução de dimensão 1 do tipo

$$\mathbf{G}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{H}(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}),$$

onde $\mathbf{u}(x, t) = [u_1(x, t), u_2(x, t), \dots, u_n(x, t)]^T \in \mathbb{R}^n$, sujeito a determinadas condições iniciais e a condições de fronteira de Dirichlet, de Neumann ou de Robin. O passo seguinte, é o desenvolvimento do método para problemas de evolução em domínios espaciais bidimensionais, 2-D, e a sua aplicação a problemas de evolução descritos por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}_1(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{F}_2(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mathbf{H}(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}),$$

em que $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$, com condições de Dirichlet, de Neumann ou de Robin para a fronteira.

Este trabalho é constituído por sete capítulos. Neste primeiro capítulo, *Introdução*, apresentamos a motivação e os objectivos da tese, assim como o modo como está organizada.

No capítulo 2, designado por *Elementos Finitos Móveis: uma Síntese*, apre-

sentamos e discutimos as principais formulações do método dos elementos finitos móveis. Tomando como ponto de partida o método dos EFM de Miller e Miller [60], apresentamos uma síntese de diferentes abordagens de algumas questões relevantes que originaram diferentes formulações do método. Tais questões dizem respeito essencialmente à interpretação dada aos integrais envolvendo os operadores diferenciais de segunda ordem e ao tratamento das singularidades inerentes ao método.

No capítulo 3, intitulado *Método dos Elementos Finitos Móveis em Espaços Unidimensionais*, apresentamos e desenvolvemos a formulação do método dos elementos finitos móveis com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário, para problemas de evolução descritos por sistemas implícitos em domínios espaciais de dimensão 1. Esta formulação constitui uma extensão dos trabalhos de Sereno [68] e Sereno *et al.* [70, 71] e permite a obtenção de soluções numéricas de grande qualidade. Neste tipo de métodos a malha espacial assume um papel central tornando-se dinâmica ao adaptar-se ao comportamento da solução. Como muitos dos sistemas a tratar têm componentes com comportamentos diferenciados, a discretização espacial é feita associando uma malha espacial a cada uma das variáveis dependentes. Em cada elemento finito de cada uma das malhas espaciais aproximamos a solução por um polinómio de grau arbitrário, recorrendo ao polinómio interpolador de Lagrange. O grau da aproximação pode variar de elemento para elemento. Considerando o método dos elementos finitos obtido por aplicação do método de Galerkin e permitindo que os nós espaciais se movam com o tempo, a discretização espacial converte cada uma

das equações do sistema de EDP num sistema de EDO na variável tempo.

Para contornar as singularidades inerentes ao método usamos *funções de penalização* que podem, eventualmente, ser caracterizadas para cada um dos elementos finitos. Estas funções têm um carácter empírico e não interferem directamente na solução, apenas no movimento dos nós, evitando que a matriz de massa do sistema se torne singular.

A descontinuidade das segundas derivadas espaciais da solução aproximada semi-discreta e o facto de os problemas a resolver envolverem segundas derivadas espaciais dão origem a que muitos dos integrais que definem o sistema de EDO não existam. Para dar existência a estes integrais usaremos um processo de suavização. O cálculo desses integrais é feito com grande eficiência por quadratura gaussiana sem que haja necessidade de definir catálogos de integrais para cada tipo de problema a resolver, como acontece em muitas outras formulações do método dos elementos finitos móveis. Este estudo em 1-D desempenha um papel importante na implementação do método em 2-D.

Com base na formulação desenvolvida no capítulo 3, desenhámos um algoritmo computacional que permite aplicar o método dos elementos finitos móveis com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário à resolução de diversos problemas. O quarto capítulo, designado por *Exemplos e Resultados do MEFM em 1-D*, conclui a discussão do método dos elementos finitos móveis para problemas de evolução em 1-D, ilustrando a eficácia desta formulação do método na resolução de

diversos problemas.

Os capítulos 5 e 6 cobrem os mesmos assuntos que os capítulos 3 e 4, mas para domínios espaciais de dimensão 2. No capítulo 5, *Método dos Elementos Finitos Móveis em Espaços Bidimensionais*, o método dos elementos finitos móveis com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário é desenvolvido para problemas de evolução definidos em domínios de $\mathbb{R}^2$. Em geral o método dos elementos finitos móveis possui a mesma estrutura que em domínios de $\mathbb{R}$, mas diferenças importantes ocorrem. Na formulação que propomos a solução é aproximada por uma função seccionalmente polinomial de grau p , $p \geq 1$. As equações que definem o método são obtidas, tal como para 1-D, a partir da minimização do quadrado da norma L_2 da soma dos resíduos das equações que constituem o sistema de EDP com respeito às derivadas temporais das coordenadas das posições nodais, abcissa e ordenada, e à derivada temporal do valor da solução aproximada nesse nó. Devido à complexidade da implementação, ao contrário do que fizemos para problemas em 1-D, consideramos uma única malha espacial. É apresentado um resultado que possibilita a avaliação das derivadas temporais da solução em ordem à variação das posições nodais. O tratamento adaptado para o cálculo dos integrais envolvendo os operadores de segunda ordem é inovador e revela-se bastante eficiente. Abordamos ainda o problema da distorção da malha espacial, de difícil tratamento em 2-D e o uso de funções de penalização, dependentes da área de cada elemento, para a regularização do movimento dos nós.

No capítulo 6, *Implementação e Aplicações do MEFM em 2-D*, são apresentados exemplos e resultados numéricos para problemas de evolução em 2-D. Em domínios espaciais de dimensão 2 somente algumas equações têm solução analítica conhecida e a literatura não é fértil na resolução de problemas reais. O código computacional que desenvolvemos com base na formulação do MEFM, apresentada no capítulo 5, é aplicado neste sexto capítulo à resolução de quatro problemas: uma equação de Burgers, um problema proveniente da teoria da combustão, um sistema de duas equações de Burgers e um modelo que descreve a propagação de ondas de temperatura em leito fixo. Alguns dos aspectos analisados são o efeito das constantes de penalização no movimento das malhas e a qualidade da solução.

Este trabalho encerra com o capítulo 7, *Conclusões*, onde são tecidas considerações sobre o trabalho apresentado. Tendo em vista o trabalho futuro de investigação nesta área são apresentadas algumas ideias sobre questões em aberto.

Capítulo 2

Elementos Finitos Móveis: uma Síntese

2.1 Introdução

Com o objectivo de obter soluções numéricas para problemas de equações de derivadas parciais (EDP), lineares ou não lineares, cujas soluções desenvolvem perfis abruptos móveis, K. Miller e R. Miller [60] e Miller [56] introduziram o método dos *Elementos Finitos Móveis* (EFM). Trata-se de um método de malha adaptativa dinâmica em que a malha espacial se deforma continuamente no tempo, de acordo com as características da própria solução da EDP.

Este capítulo, sem pretender fazer uma revisão exaustiva, visa fazer um enquadramento desta tese. Para tal apresentamos uma síntese de diferentes perspectivas. Tomando como ponto de partida o método dos EFM de Miller e Miller [60], vamos abordar algumas questões relevantes que originaram diferentes formulações do método dos elementos finitos móveis. Tais questões dizem respeito, essencialmente, à interpretação dada aos integrais que envolvem os operadores diferenciais de segun-

da ordem, ao movimento da malha e ao tratamento das singularidades inerentes ao método.

Para uma revisão bibliográfica mais pormenorizada remetemos o leitor para o trabalho de Johnson [50], onde se descrevem de forma cuidada diferentes formulações do método. Numa perspectiva mais generalizada pode-se referir o excelente artigo de Hawken *et al.* [38]. Mais recentemente Baines [9] apresenta o método dos EFM, assim como as contribuições mais significativas dos trabalhos desenvolvidos com aproximações lineares em espaços a uma e duas dimensões.

2.2 O método dos EFM de Miller

Consideremos o problema de evolução

$$u_t = \mathcal{L}(u) , \tag{2.1}$$

em que $\mathcal{L}$ é um operador diferencial, em geral não linear, definido para $a \leq x \leq b$, contendo u e as suas derivadas espaciais de primeira e segunda ordem. Admitamos que o problema está sujeito a uma dada condição inicial e a condições de Dirichlet ou de Neumann na fronteira. Seja $U(x, t)$ uma aproximação de $u(x, t)$ obtida por discretização espacial de (2.1) usando elementos finitos fixos, sendo os N elementos finitos caracterizados pelos nós de separação,

$$a = X_1 < \dots < X_j < \dots < X_{N+1} = b . \quad (2.2)$$

A aproximação usual por elementos finitos fixos, exige que a solução aproximada $U(x, t)$ pertença a um subespaço linear de dimensão finita com *funções de base* $\alpha_j(x)$, $j = 1, \dots, N + 1$. Assim,

$$U(x, t) = \sum_{j=1}^{N+1} \alpha_j(x) U_j(t) , \quad (2.3)$$

em que os coeficientes $U_j(t)$ são as amplitudes $u(X_j, t)$ da função nos nós de separação X_j . Na aproximação usual de Galerkin as incógnitas $U_j(t)$ ficam determinadas exigindo que o erro residual, $U_t - \mathcal{L}(U)$, permaneça ortogonal ao subespaço gerado por $\alpha_j(x)$. Deste modo a EDP original converte-se num sistema de $(N + 1)$ EDO cuja i -ésima equação é

$$\sum_{j=1}^{N+1} \left(\int_a^b \alpha_i \alpha_j dx \right) \dot{U}_j(t) = \int_a^b \mathcal{L}(U) \alpha_i dx , \quad (2.4)$$

onde $\dot{U}_j(t) = \frac{\partial U_j}{\partial t}$. Na forma matricial o sistema escreve-se $A\dot{U} = \mathbf{g}$, sendo A uma matriz simétrica definida positiva [86]. Além disso, A é tridiagonal pois

$$\alpha_i(x) = 0, \quad x \notin]X_{i-1}, X_{i+1}[.$$

Para se obter o sistema de EDO completo é também necessário obter as equações para os nós que estão na fronteira. As equações correspondentes a esses nós, são escritas exigindo que U satisfaça as condições de fronteira em $x = a$ e $x = b$. Usando aproximações lineares em cada elemento finito, U é uma função seccionalmente linear relativamente aos nós X_j , figura 2.1(a). As funções triangulares $\alpha_j(x)$ representadas na figura 2.1(b) são definidas por

$$\alpha_j(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{j-1} \vee x \geq X_{j+1} \\ \frac{x-X_{j-1}}{X_j-X_{j-1}} & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \\ \frac{X_{j+1}-x}{X_{j+1}-X_j} & \text{se } X_j \leq x \leq X_{j+1} \end{cases} \quad (2.5)$$

Consideremos agora o método dos elementos finitos móveis. A discretização espacial é feita usando elementos finitos, tal como se descreveu, mas permitindo que as posições nodais variem com o tempo, i.e., $X_j = X_j(t)$. Deste modo, as funções de base α_j dependem também da posição dos nós de separação X_j no instante t ,

$$\alpha_j(x) = \alpha_j(x, X_j(t)), \quad j = 1, \dots, N+1 \quad (2.6)$$

e, portanto, a variação temporal de U é dada por

$$U_t = \sum_{j=1}^{N+1} \left(\dot{U}_j \alpha_j + U_j \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \right). \quad (2.7)$$

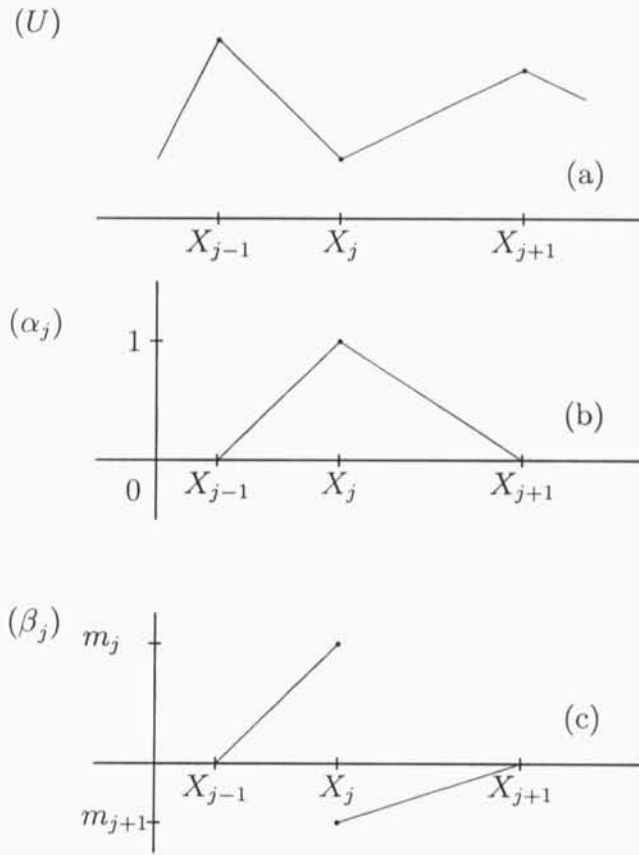


Figura 2.1 (a) Aproximações lineares; (b) Primeira função de base; (c) Segunda função de base

Esta extensão significa que, em relação ao método dos elementos finitos fixos, a equação que caracteriza U_t apresenta os termos extra

$$\sum_{j=1}^{N+1} U_j \frac{\partial \alpha_j}{\partial t}. \quad (2.8)$$

Fazendo $\dot{X}_l(t) = \frac{\partial X_l}{\partial t}$ e atendendo a que

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} = \sum_{l=1}^{N+1} \frac{\partial \alpha_j}{\partial X_l} \dot{X}_l, \quad (2.9)$$

obtemos

$$\sum_{j=1}^{N+1} U_j \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N+1} U_j \left(\sum_{l=1}^{N+1} \frac{\partial \alpha_j}{\partial X_l} \dot{X}_l \right). \quad (2.10)$$

Comutando a ordem dos somatórios e os índices e atendendo ao facto de terem a mesma variação, resulta

$$\sum_{j=1}^{N+1} U_j \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N+1} \left(\sum_{l=1}^{N+1} U_l \frac{\partial \alpha_l}{\partial X_j} \right) \dot{X}_j. \quad (2.11)$$

Deste modo concluímos que a variação temporal de U (2.7) pode ser escrita na forma

$$U_t = \sum_{j=1}^{N+1} \left(\dot{U}_j \alpha_j + \dot{X}_j \beta_j \right), \quad (2.12)$$

em que β_j é o coeficiente de $\dot{X}_j$, dado por

$$\beta_j = \sum_{l=1}^{N+1} U_l \frac{\partial \alpha_l}{\partial X_j}. \quad (2.13)$$

A função β_j , normalmente designada por *segunda função de base*, pode ser definida por

$$\beta_j(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{j-1} \vee x \geq X_{j+1} \\ \frac{\partial \alpha_{j-1}}{\partial X_j} U_{j-1} + \frac{\partial \alpha_j}{\partial X_j} U_j & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \\ \frac{\partial \alpha_j}{\partial X_j} U_j + \frac{\partial \alpha_{j+1}}{\partial X_j} U_{j+1} & \text{se } X_j \leq x \leq X_{j+1} \end{cases}. \quad (2.14)$$

Seja m_j o declive de U no j -ésimo elemento finito $[X_j, X_{j+1}]$,

$$m_j = \frac{U_{j+1} - U_j}{X_{j+1} - X_j}, \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.15)$$

Atendendo a (2.5), facilmente se verifica que

$$\beta_j(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{j-1} \vee x \geq X_{j+1} \\ -\alpha_j m_{j-1} & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \\ -\alpha_j m_j & \text{se } X_j \leq x \leq X_{j+1} \end{cases}, \quad (2.16)$$

como ilustra a figura 2.1(c). Permitindo a variação das posições nodais, formam-se dois conjuntos de incógnitas, $U_j(t)$ e $X_j(t)$. Na formulação de Miller estas incógnitas ficam determinadas exigindo que U_t pertença ao espaço tangente, no ponto U , ao espaço gerado pelas funções de base α_j e β_j . Por outras palavras, $U_j(t)$ e $X_j(t)$ são determinados obrigando a que o quadrado da norma L_2 do erro residual $U_t - \mathcal{L}(U)$,

$$\|U_t - \mathcal{L}(U)\|_{L_2}^2, \quad (2.17)$$

seja mínimo com respeito a $\dot{U}_j$ e $\dot{X}_j$, $j = 1, \dots, N+1$. Trata-se pois de um problema de optimização do qual resulta um sistema de $2(N+1)$ equações que, na forma matricial, se escreve

$$A(\mathbf{Y})\dot{\mathbf{Y}} = \mathbf{g}, \quad \mathbf{Y}(0) = \mathbf{Y}_0, \quad (2.18)$$

sendo $\dot{\mathbf{Y}} = (\dot{U}_1, \dot{X}_1, \dots, \dot{U}_j, \dot{X}_j, \dots, \dot{X}_{N+1}, \dot{U}_{N+1})^T$ e $\mathbf{Y}(0)$ o vector que traduz as condições iniciais

$$\mathbf{Y}(0) = [u_0(X_1), X_1, \dots, u_0(X_j), X_j, \dots, u_0(X_{N+1}), X_{N+1}]^T.$$

A matriz A designada por *matriz de massa*, é uma matriz simétrica, tridiagonal por blocos, sendo cada bloco dado por

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} \int_a^b \alpha_i \alpha_j dx & \int_a^b \alpha_i \beta_j dx \\ \int_a^b \beta_i \alpha_j dx & \int_a^b \beta_i \beta_j dx \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

O vector $\mathbf{g} = \{g_i\}$ escreve-se

$$\{g_i\} = \begin{pmatrix} \int_a^b \mathcal{L}(U) \alpha_i dx \\ \int_a^b \mathcal{L}(U) \beta_i dx \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Uma vez completada a discretização espacial, obtém-se o sistema de EDO (2.18) na variável tempo, que é resolvido apelando a um integrador de EDO.

2.2.1 Cálculo dos integrais

Uma das questões mais pertinentes na implementação do método dos EFM é a que se relaciona com o cálculo dos integrais que definem, quer a matriz de massa A , quer o vector $\mathbf{g} = \{g_i\}$. De facto, devido ao tipo de aproximação usada, os

integrais (2.20) podem eventualmente não estar definidos. Para ilustrar esta situação, considere-se um caso particular, o da equação de difusão linear

$$u_t = u_{xx} . \quad (2.21)$$

Neste exemplo $\mathcal{L}(u) = u_{xx}$. Como U é uma aproximação seccionalmente linear de u , U não pertence ao domínio do operador $\mathcal{L}$. Para contornar este problema, Miller e Miller [60] usaram a ideia de δ -mollification. Este processo consiste em tratar a função U como limite de funções mais suaves. Nesta aproximação $U(x)$ é aproximada pela função

$$S(U)(x) = \int_{x-\delta}^{x+\delta} \rho^\delta(y)(x-y)U(y)dy , \quad (2.22)$$

em que $\rho^\delta(y)$ é uma função satisfazendo

$$\int_{-\delta}^{\delta} \rho^\delta(y)dy = 1 . \quad (2.23)$$

A função $S(U)$ pertence ao domínio de $\mathcal{L}$ e, fazendo $\delta \rightarrow 0$, temos $S(U) \rightarrow U$. Usando δ -mollification não há dificuldade em avaliar os integrais de (2.20) (cf. Miller [60]), excepto para o cálculo do segundo integral $\int_a^b U_{xx} \beta_j dx$ em que se deve especificar o

valor de β_j em X_j . Miller considera o valor médio $-(m_{j-1} + m_j)/2$, do que resulta

$$\int_a^b U_{xx} \beta_j dx \rightarrow -(m_j - m_{j-1})(m_j + m_{j-1})/2. \quad (2.24)$$

Para o primeiro integral, integrando por partes, tal como no método dos elementos finitos fixos, tem-se

$$\int_a^b u_{xx} \alpha_j dx = - \int_a^b u_x \frac{d\alpha_j}{dx} dx. \quad (2.25)$$

Este último integral está bem definido, mesmo quando se substitui u pela aproximação U e

$$\int_a^b U_{xx} \alpha_j dx = m_j - m_{j-1}. \quad (2.26)$$

Mueller e Carey [62] avaliam os integrais que envolvem operadores de segunda ordem usando o teorema de Green. Assumindo que $\frac{\partial S(U)}{\partial x}$ é contínua nos nós de separação, pode-se aplicar a integração por partes. Para o exemplo da equação de difusão linear tem-se

$$\int_a^b u_{xx} \beta_j dx = - \int_{X_{j-1}}^{X_{j+1}} u_{xx} u_x \alpha_j dx, \quad (2.27)$$

pois $[X_{j-1}, X_{j+1}]$ é o intervalo suporte de α_j e $\beta_j = -u_x \alpha_j$. Como

$$-\int_{X_{j-1}}^{X_{j+1}} u_{xx} u_x \alpha_j dx = -\int_{X_{j-1}}^{X_{j+1}} \left(\frac{u_x^2}{2} \right)_x \alpha_j dx, \quad (2.28)$$

integrando este último integral por partes, obtém-se

$$\int_{X_{j-1}}^{X_{j+1}} u_{xx} \beta_j dx = -\int_{X_{j-1}}^{X_{j+1}} \frac{u_x^2}{2} \frac{d\alpha_j}{dx} dx. \quad (2.29)$$

Daqui se conclui que, quando se substitui u pela aproximação seccionalmente polinomial U , não há problemas de definição do integral, visto que o integral resultante apenas contém a primeira derivada de U . Esta técnica pode ser aplicada com sucesso a problemas mais gerais [50]. Morton sugeriu uma alternativa para interpretar aqueles integrais. Consiste em definir explicitamente o operador S , construindo a partir de U uma função $W(x) = S(U(x))$ com condições suficientes de continuidade, de modo a garantir a existência daqueles integrais [50, 80]. Definindo $W(x)$ como sendo o polinómio cúbico de Hermite satisfazendo

$$W(X_j) = U_j, \quad W(X_{j+1}) = U_{j+1}, \quad W_x(X_j) = \frac{m_j + m_{j-1}}{2}, \quad W_x(X_{j+1}) = \frac{m_j + m_{j+1}}{2},$$

Johnson [50] obtém, para aqueles integrais, os mesmos valores que Miller e Miller [60].

Na literatura $S(U)$ designa-se por *recovered function*.

2.2.2 Condições de fronteira

Ao escrever o sistema (2.18) admite-se que é possível reescrever as equações relativamente à fronteira do domínio espacial. Considerando fronteiras fixas, $\dot{X}_1 = \dot{X}_{N+1} = 0$, as condições de fronteira são incorporadas especificando, para o caso de condições de Dirichlet, $U_1 = u_a$ e $U_{N+1} = u_b$ donde, não existem equações associadas a U_1 e a U_{N+1} . Exigindo condições de Neumann os valores de $\frac{\partial u}{\partial x}(a, t)$ e $\frac{\partial u}{\partial x}(b, t)$ são impostos naturalmente e determinam $\dot{U}_1$ e $\dot{U}_{N+1}$. Condições de fronteira mais gerais, incluindo fronteiras móveis, podem também ser incorporadas. Por exemplo, Hrymak e Westerberg [44] trataram problemas com fronteiras móveis. Djohmeri *et al.* [31] resolveram o problema de Stefan com fronteiras móveis, adicionando ao sistema de EDO resultante da discretização espacial uma EDO proveniente da discretização da própria fronteira. Sereno [68] trata problemas em que as condições de fronteira são funções do tempo criando novas variáveis dependentes; as condições de fronteira são reescritas de modo apropriado e novas equações diferenciais ordinárias são acopladas ao sistema de EDP. Estas EDO extra traduzem a evolução das novas variáveis dependentes na fronteira.

2.2.3 Singularidades

Ao contrário do que sucede no método de elementos finitos fixos, em que a matriz de massa é definida positiva, a matriz associada ao método dos EFM é apenas semi-definida positiva [80]. De facto, facilmente se pode constatar que se U_x tem o mesmo valor em elementos finitos adjacentes, então $m_j = m_{j-1} = m$ e

$\beta_j = -m\alpha_j$. Portanto, o determinante do bloco A_{jj} anula-se, tornando a matriz A singular. Usualmente esta situação é descrita por *paralelismo*. Uma outra causa para a ocorrência de singularidades da matriz de massa é a possibilidade de dois nós virem a colidir. Se, por exemplo, $X_j = X_{j+1}$, o bloco A_{jj} torna-se singular, conduzindo à singularidade de A . Para contornar estes dois problemas K. Miller e R. Miller [60] e K. Miller [56] sugeriram a adição de funções penalizadoras à função objectivo (2.17). Deste modo as incógnitas $U_j(t)$ e $X_j(t)$ são determinadas minimizando

$$\|U_t - \mathcal{L}(U)\|_{L_2}^2 + \sum_{l=1}^N \left(\epsilon_l (\dot{X}_{l+1} - \dot{X}_l) - S_l \right)^2, \quad (2.30)$$

com respeito a $\dot{U}_j$ e $\dot{X}_j$, $j = 1, \dots, N+1$. As funções $\epsilon_l = \epsilon(Z_l)$ e $S_l = S(Z_l)$, são funções de Z_l , $Z_l = X_{l+1} - X_l$, positivas e definidas de modo a tomarem valores elevados quando Z_l é muito pequeno ou se aproxima de um valor mínimo especificado. Estas funções actuam no movimento dos nós, restringindo, por um lado, os seus movimentos relativos, *forças viscosas*, ϵ_l e, por outro, obrigando a que os nós de separação mantenham entre si uma distância mínima, *forças de mola*, S_l . As funções de penalização possuem um carácter empírico, dependendo de constantes a definir pelo utilizador. Vários tipos de funções têm sido usadas. Por exemplo, Djomehri [29]

sugeriu

$$\epsilon_l S_l = c_1^{-2} (Z_l - d)^{-2} \quad (2.31)$$

$$\epsilon_l^2 = c_3 (Z_l - d)^{-1},$$

em que os parâmetros c_1 , c_3 e d são especificados pelo utilizador. d é o comprimento mínimo permitido para um dado elemento finito e c_i são constantes positivas pequenas. Como mostra Djomehri [29], a adição das forças viscosas à função objectivo torna a matriz de massa definida positiva. Este facto mostra a importância da escolha das constantes de penalização. Como sabemos, se o sistema de EDO a resolver numericamente possuir uma matriz de massa fortemente definida positiva, as soluções possuem variações suaves no tempo e, portanto, a integração numérica pode ser realizada com um passo de integração de maior amplitude. Por outro lado, se não se introduzirem as penalizações associadas às forças de mola, a tendência dos nós é moverem-se para o interior das frentes abruptas causando insuficiência de resolução. Assim, o uso de funções de penalização tem o efeito acrescido de regularizar o movimento dos nós. As penalizações não influenciam a qualidade da solução numérica obtida, actuando exclusivamente no movimento dos nós, regularizando-o e evitando o aparecimento de singularidades. A adição das funções de penalização à função objectivo resolve de modo eficiente os problemas relacionados com a singularidade da matriz de massa. Tem, no entanto, alguns custos pois é necessário caracterizar *à priori* as constantes

que definem ϵ_l e S_l . Como não é possível estabelecer, à partida, uma relação entre estas constantes empíricas e a EDP a resolver, poderá ser exigido alguma experimentação numérica prévia de modo a obter-se um conjunto de valores razoáveis para essas constantes.

Juarez-Romero e Sargent [52], recorrendo ao uso de mínimos quadrados para a minimização do resíduo e, seguindo uma estratégia em que as funções de penalização são definidas como combinações lineares das forças viscosas e das forças de mola, conseguiram aumentar a robustez do método. Foram ainda desenvolvidas outras alternativas, em que o movimento dos nós é definido recorrendo a características físicas do problema. Por exemplo, Mosher [61] usa a curvatura e o declive da solução para distribuir os nós. Hrymak *et al.* [44] usando um número fixo de nós da malha permitem que alguns nós se movam livremente, embora penalizados, enquanto que para outros é imposto um movimento dependente do movimento dos nós que lhe estão adjacentes. Pipilis [65] e Duarte [32] tratam as singularidades provenientes do paralelismo à custa da introdução de penalizações e impõem restrições à velocidade nodal quando se verifica a colisão de nós. Dado o carácter empírico das penalizações alguns autores optam por não as utilizar, desenvolvendo outras técnicas para eliminar o problema das singularidades. É o que fazem, por exemplo, Wathen e Baines [80] e Johnson [50]. Wathen e Baines [80] propõem que o número de nós da malha espacial possa ser variável, podendo alguns deles ser eliminados sempre que colidirem. O problema é então dividido em dois, sendo introduzida uma condição de fronteira.

Esta nova condição traduz a velocidade de deslocamento de uma frente. Sempre que ocorre paralelismo o nó de separação entre os elementos finitos adjacentes é fixado.

O método dos EFM foi descrito usando aproximações lineares em cada elemento finito. No entanto alguns autores optam por aproximações de grau mais elevado. Sereno [68], fazendo uso das penalizações de Miller [56] desenvolve uma formulação do método dos EFM, onde usa aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário recorrendo a polinómios interpoladores de Lagrange. Hansen e Hassager [37] constroem uma formulação do método dos EFM baseada em aproximações quadráticas. Outros autores, Jimack [47], Pipilis [65] e Duarte [32, 33], optam pelo uso de aproximações por polinómios cúbicos de Hermite. Neste caso tanto a aproximação U como U_x são funções contínuas no domínio espacial.

2.3 Formulação de Herbst

Uma formulação do método dos EFM, combinando a abordagem de Miller com o método dos elementos finitos obtido por aplicação do método de Petrov-Galerkin, foi desenvolvida por Herbst *et al.* [39]. Usando aproximações lineares em cada elemento finito, o sistema de EDO é obtido exigindo que o resíduo da EDP seja ortogonal a um conjunto de funções teste, $\mathcal{S}_j$ e $\mathcal{T}_j$. Estas funções são as funções cúbicas de Hermite definidas por

$$S_j(x) = \begin{cases} S\left(\frac{x-X_{j-1}}{Z_{j-1}}\right) & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \\ S\left(\frac{X_{j+1}-x}{Z_j}\right) & \text{se } X_j \leq x \leq X_{j+1} \end{cases} \quad (2.32)$$

e

$$T_j(x) = \begin{cases} T\left(\frac{x-X_{j-1}}{Z_{j-1}}\right) & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \\ T\left(\frac{X_{j+1}-x}{Z_j}\right) & \text{se } X_j \leq x \leq X_{j+1} \end{cases} \quad (2.33)$$

onde

$$\begin{aligned} S(x) &= (1 - |x|)^2(1 + 2|x|), & |x| < 1 \\ T(x) &= x(1 - |x|)^2, & |x| < 1 \end{aligned} \quad (2.34)$$

e $Z_j = X_j - X_{j-1}$. Herbst *et al.* [40] estudaram também o mecanismo do movimento dos nós para um problema de valor inicial hiperbólico puro, concluindo que os nós se movem em concordância com um princípio de equidistribuição. Para a solução do problema de Burgers,

$$u_t + uu_x = \epsilon u_{xx}, \quad (2.35)$$

o método dos EFM de Miller conduz a

$$Z_{j+1}u_{xx}(X_j^-, t) = Z_ju_{xx}(X_j^+, t) + \mathcal{O}(Z^3), \quad (2.36)$$

enquanto que para esta formulação de Herbst se tem

$$Z_j^2u_{xx}(X_j^+, t) = Z_{j+1}^2u_{xx}(X_j^-, t) + \mathcal{O}(Z^3). \quad (2.37)$$

Em ambos os casos, para um número suficiente de nós, os termos de ordem elevada podem ser desprezados. Verifica-se assim que os termos que intervêm no movimento dos nós são os termos de segunda ordem da equação a resolver. Este princípio de equidistribuição é também usado para a escolha da malha espacial inicial [50, 81].

2.4 Formulação variacional

Para a resolução do problema de evolução (2.1) Mueller e Carey [62] consideram uma transformação de coordenadas dependente do tempo. A ideia fundamental desta formulação consiste em estabelecer uma transformação de coordenadas $x, t \rightarrow \xi, \tau$, de modo que a solução do problema transformado seja mais suave e, portanto, mais adequada a uma aproximação por elementos finitos do que a solução do problema original. É conveniente definir a mudança de coordenadas entre x, t e as novas variáveis dependentes, ξ, τ , igualando t e τ ,

$$x = \hat{x}(\xi, \tau), \quad t = \tau. \quad (2.38)$$

Seja $J = \frac{\partial(x, t)}{\partial(\xi, \tau)}$ a matriz Jacobiana desta transformação. Para a invertibilidade da transformação é necessário que $|J| = \det(J)$ não mude de sinal no domínio e que $|J| \neq 0$. Assim, toma-se como restrição às transformações admissíveis,

$$|J| > 0 \quad \forall x, t. \quad (2.39)$$

Como u depende de x e de t ,

$$u = \hat{u}(\xi, \tau), \quad t = \tau, \quad (2.40)$$

e usando a regra de cadeia,

$$u_t = \hat{u}_\tau \tau_t + \hat{u}_\xi \xi_t. \quad (2.41)$$

A transformação inversa é dada por

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} \xi_x & \xi_t \\ \tau_x & \tau_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{x_\xi} & \frac{-x_\tau}{x_\xi} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

pelo que,

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}}{\partial \tau}, \quad (2.43)$$

em que

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\frac{\partial \hat{u}}{\partial \xi}}{\frac{\partial \hat{x}}{\partial \xi}}. \quad (2.44)$$

O resíduo da EDP é

$$R = \frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}}{\partial \tau} - u. \quad (2.45)$$

O problema variacional é formulado determinando o par (x, u) que minimiza

$$I = \frac{1}{2} \int_a^b R^2 dx \quad (2.46)$$

com respeito a $\frac{\partial \hat{x}}{\partial \tau}$ e $\frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau}$. Considerando as variações $v = \partial(\frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau})$ e $z = \partial(\frac{\partial \hat{x}}{\partial \tau})$, de (2.46) obtém-se

$$\int_a^b \left(\frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}}{\partial \tau} - (u) \right) v dx = 0 \quad (2.47)$$

$$\int_a^b \left(\frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \hat{x}}{\partial \tau} - (u) \right) z \frac{\partial u}{\partial x} dx = 0, \quad (2.48)$$

para todas as funções admissíveis (z, v) , $\tau > 0$, tais que, todas as transformações admissíveis são invertíveis e (x, u) satisfazem as condições iniciais e de fronteira. Uma versão discreta destas equações é obtida substituindo x e u pelas aproximações discretas x_h e u_h ,

$$x_h(\xi, \tau) = \sum_{j=1}^{N+1} X_j(\tau) \chi_j(\xi) \quad (2.49)$$

$$u_h(\xi, \tau) = \sum_{j=1}^{N+1} u_j(\tau) \phi_j(\xi), \quad (2.50)$$

fazendo $v_h = \phi_j$, $z_h = \chi_j$, $j = 1, \dots, N + 1$. A condição (2.39) imposta ao jacobiano da transformação tem um efeito similar ao da aplicação de funções de penalização. De modo a satisfazê-la, I é substituído por

$$I_r = I + P_\epsilon, \quad (2.51)$$

com

$$P_\epsilon = \int_a^b \frac{1}{2\epsilon} \left(\frac{\partial^2 \hat{x}}{\partial \xi \partial \tau} - s \frac{\partial \hat{x}}{\partial \xi} \right) dx, \quad (2.52)$$

sendo s um parâmetro positivo e ϵ dependente do jacobiano da transformação. Exigindo que $|J| > J_{min}$, sendo J_{min} o valor mínimo permitido para o jacobiano, Mueller e

Carey escolhem,

$$\epsilon(x) = \omega \left(\frac{|J| - J_{min}}{J_{min}} \right)^2, \quad (2.53)$$

em que ω é um parâmetro que regula o valor da penalização relativamente ao resíduo, de modo a limitar possíveis perdas de precisão na computação. Quando $|J| \rightarrow J_{min}$, $\epsilon(x) \rightarrow 0$ e o termo de penalização P_ϵ actua de modo a incrementar, localmente, o valor de $|J|$, mantendo a transformação invertível.

2.5 Formulação de Baines

A formulação de Baines para o método dos EFM é também designada por *formulação local* do método dos EFM [7]. Observando que a expressão original (2.12) para U_t se poderia escrever em função dos elementos e não dos nós, Baines introduziu funções de base locais. Deste modo,

$$U_t = \sum_{j=1}^{N+1} (\dot{U}_j \alpha_j + \dot{X}_j \beta_j) = \sum_{k=1}^N (\omega_k^{(1)} \phi_k^{(1)} + \omega_k^{(2)} \phi_k^{(2)}) . \quad (2.54)$$

onde $\phi_k^{(i)}$ são as funções de base (locais) e $\omega_k^{(i)}$ coeficientes relacionados com $\dot{U}_j$ e $\dot{X}_j$.

As funções de base $\phi_k^{(i)}$ não são mais que as restrições de α_j e α_{j+1} ao elemento k definido por X_{j-1} e X_j ,

$$\phi_k^{(1)} = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{j-1} \vee x \geq X_j \\ \frac{x - X_{j-1}}{X_j - X_{j-1}} & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \end{cases} \quad (2.55)$$

e

$$\phi_k^{(2)} = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{j-1} \vee x \geq X_j \\ \frac{X_j - x}{X_j - X_{j-1}} & \text{se } X_{j-1} \leq x \leq X_j \end{cases} . \quad (2.56)$$

Em 1-D o espaço gerado pela base de funções $\phi_k^{(i)}$ coincide com o espaço α_j, β_j [7].

Tal como na proposta de Miller, o resíduo

$$\|U_t - \mathcal{L}(U)\|_{L_2}^2 \quad (2.57)$$

é minimizado, agora com respeito a $\omega_k^{(1)}$ e $\omega_k^{(2)}$, $k = 1, \dots, N$, obtendo-se para cada elemento finito k ,

$$\langle \phi_k^{(1)}, U_t - \mathcal{L}(U) \rangle_k = 0 \quad (2.58)$$

$$\langle \phi_k^{(2)}, U_t - \mathcal{L}(U) \rangle_k = 0, \quad (2.59)$$

em que

$$\langle f, g \rangle_k = \int_{X_{j-1}}^{X_j} f(x)g(x)dx . \quad (2.60)$$

O sistema de EDO assim formado pode ser escrito como N sistemas,

$$C_k \mathbf{w}_k = \mathbf{b}_k, \quad k = 1, \dots, N \quad (2.61)$$

onde

$$\mathbf{w}_k = (\omega_k^{(1)}, \omega_k^{(2)})^T , \quad (2.62)$$

$$C_k = \begin{pmatrix} \langle \phi_k^{(1)}, \phi_k^{(1)} \rangle_k & \langle \phi_k^{(1)}, \phi_k^{(2)} \rangle_k \\ \langle \phi_k^{(2)}, \phi_k^{(1)} \rangle_k & \langle \phi_k^{(2)}, \phi_k^{(2)} \rangle_k \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

e

$$\{\mathbf{b}_k\} = \begin{pmatrix} \langle \phi_k^{(1)}, \mathcal{L}(U) \rangle_k \\ \langle \phi_k^{(2)}, \mathcal{L}(U) \rangle_k \end{pmatrix} . \quad (2.64)$$

As funções α_j e β_j podem escrever-se como combinação linear de $\phi_k^{(i)}$, $i = 1, 2$,

$$\alpha_j = \phi_k^{(2)} + \phi_{k+1}^{(1)} \quad (2.65)$$

$$\beta_j = -m_k \phi_k^{(2)} - m_{k+1} \phi_{k+1}^{(1)}, \quad (2.66)$$

sendo m_k o declive de U no k -ésimo elemento finito, $[X_{j-1}, X_j]$. De (2.65), (2.66) e (2.54) podemos estabelecer a seguinte relação entre os parâmetros $\omega_k^{(i)}$ e $\dot{U}_j$ e $\dot{X}_j$

$$M_j \dot{\mathbf{y}}_j = (\omega_k^{(2)}, \omega_k^{(1)})^T \quad (2.67)$$

onde

$$\dot{\mathbf{y}}_j = (\dot{U}_j, \dot{X}_j)^T, \quad (2.68)$$

e

$$M_k = \begin{pmatrix} 1 & -m_k \\ 1 & -m_{k+1} \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

Uma vez que, quer o método de Miller, quer este método local, minimizam o mesmo resíduo no mesmo espaço as equações obtidas pelos dois processos são idênticas.

Escrevendo

$$C = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & C_k & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

e

$$M = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & M_k & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

obtém-se a decomposição da matriz de massa,

$$A = M^T C M, \quad (2.72)$$

em que C e M são matrizes com blocos 2×2 na diagonal [80]. Esta decomposição permite isolar as causas das singularidades e definir estratégias para as eliminar sem o uso de funções de penalização. Assim, para Wathen e Baines [80] a malha espacial pode ter um número variável de nós, podendo alguns deles ser eliminados sempre que colidirem. O problema é então dividido em dois e é introduzida uma condição de fronteira que não é mais do que a velocidade de deslocamento de uma frente. Por

outro lado, sempre que ocorre paralelismo o nó de separação entre os dois elementos finitos adjacentes é fixado.

2.6 Formulação dos gradientes pesados

Esta formulação do método dos EFM baseada em *gradientes pesados*, *GWMFE*, foi introduzida por Miller [58]. Usando uma forma pesada dos resíduos, Miller [58], Carlson e Miller [18] e Zegeling e Blom [82], conseguem reduzir a sensibilidade do método, quer às constantes que definem as penalizações, quer à distribuição inicial da malha [82]. O essencial do método dos EFM de Miller é mantido mas, com o objectivo de melhorar o controlo dos nós nas regiões em que a solução exhibe choques, a norma L_2 é substituída por uma norma pesada,

$$\| \cdot \|_G^2 = \int (\cdot)_G^2 ds = \int (\cdot)^2 W(m) ds, \quad (2.73)$$

sendo a função peso

$$W(m) = \frac{1}{\sqrt{1+m^2}}, \quad m = U_x. \quad (2.74)$$

Deste modo a componente normal de u_t , $[u_t]_N = \frac{u_t}{\sqrt{1+(u_x)^2}}$, mantém-se limitada, mesmo na presença de frentes abruptas, o que reduz o efeito da minimização nas regiões onde a solução apresenta essas frentes. Observe-se que o uso da função peso impede as singularidades que resultam de dois nós virem a colidir e o comprimento

do elemento finito tender para zero. Para o caso da equação (2.1), a função objectivo passa a ser

$$\int_a^b (U_t - \mathcal{L}(U))^2 W(x) dx, \quad (2.75)$$

em vez da equação (2.17). Miller [58] sugere o uso da penalização

$$\sum_{j=1}^{N+1} (\epsilon_j \dot{l}_j - S_j)^2, \quad (2.76)$$

onde

$$\begin{aligned} \epsilon_j^2 &= \frac{A^2}{l_j} \\ \epsilon_j^2 S_j &= \frac{B^2}{l_j}, \end{aligned} \quad (2.77)$$

com A e B constantes definidas pelo utilizador e $l_j^2 = Z_j^2 - (U_{j+1} - U_j)^2$, de modo a evitar as singularidades provenientes do paralelismo. Para a escolha das constantes arbitrárias A e B Carlson e Miller [19] relacionam-as com TOL , o valor da tolerância do integrador de EDO. O parâmetro relativo às forças viscosas deverá ser $A^2 \geq TOL$, por exemplo, $TOL < A < 10 \times TOL$. A escolha standard para o coeficiente B que caracteriza as forças de mola é $B^2 = 0$. Para problemas com difusividade, em que a possibilidade de ocorrer paralelismo é maior, $B^2 = 0,1 \varepsilon TOL^2$, sendo ε o termo de difusão. Zegeling e Blom [82] verificam que esta proposta de Miller permite

uma escolha de parâmetros num intervalo bastante amplo, aumentando a robustez do método.

O GWMFE foi apresentado, quer em termos variacionais, quer em termos geométrico-mecânicos. Uma versão mais robusta e versátil do GWMFE é apresentada por Miller [59] e Carlson e Miller [19, 20]. Nestes artigos, para além da interpretação variacional, é apresentada também uma interpretação geométrico-mecânica descrevendo o método de forma mais intuitiva como o balanço de *forças* concentradas nos nós.

Kuprat [54] estudou a possibilidade de acrescentar ou eliminar nós ao GWMFE. Nalgumas situações o GWMFE produz um movimento de nós tal que estes se acumulam em certas regiões do espaço e rareiam noutras, pelo que seria desejável um mecanismo que crie ou aniquile nós numa região determinada do espaço. Esse mecanismo designado por *Graph Massage* permitiu o desenvolvimento de um código GWMFE mais robusto e possibilitou a simulação de problemas reais mais complicados.

2.7 Integração no tempo

O método dos EFM dá origem a um sistema de EDO na variável tempo. Como se disse, a discretização total do sistema obtém-se recorrendo a um integrador de EDO apropriado. A escolha do integrador deve ser ponderada e depende do tipo de aproximação usada. Miller e Miller [60] resolvem o sistema de EDO resultante da discretização espacial por elementos finitos móveis usando um integrador

implícito, baseado no método de Runge-Kutta. Carlson e Miller [19, 20] usam um integrador de segunda ordem o BDF2 (Backward-Difference Formulas) de passo variável. Hrymak *et al.* [44, 45] mostram que o uso de funções de penalização introduz rigidez adicional no sistema. Alguns autores consideram que não fazendo uso das funções de penalização, não há necessidade de se recorrer a um integrador *stiff*. Wathen [79] e Johnson [50] mostram que, nesse caso, um integrador explícito de Euler tem um desempenho aceitável. Por outro lado, Sereno [68] verificou que o integrador LSODI [41, 42], de ordem e passo variável, é extremamente eficaz quando se usam penalizações. Zegeling [84] faz comparações numéricas diversas usando o integrador DASSL [63] e LSODI (incluído no package SPRINT [15]) e verifica que a escolha entre os dois não influencia o desempenho do método dos EFM. Num artigo mais generalista Shampine [72] estuda os factores que influenciam a escolha de um integrador de EDO quando se resolve um sistema de EDP usando um qualquer método das linhas.

2.8 Sistemas de EDP

Muitos problemas de interesse prático envolvem sistemas de equações de derivadas parciais com várias variáveis dependentes. A síntese do método dos EFM apresentada confinou-se à descrição de problemas de uma variável dependente. A sua extensão a sistemas de EDP foi desenvolvida por vários autores e aplicada com sucesso a um grande número de problemas. Para a generalização do método dos EFM a várias variáveis dependentes devemos fundamentalmente abordar duas questões: a

minimização do resíduo e a definição da malha espacial.

A minimização do resíduo pode ser feita de um modo directo minimizando a soma dos quadrados das normas dos resíduos associados a cada uma das variáveis dependentes, tal como aparece em Djomehri [29], Miller [57] e Sereno [68]. A soma pode ser ponderada ou não.

Mais pertinente é a escolha da malha espacial a usar. Pode-se optar por considerar uma malha única, comum a todas as variáveis dependentes do sistema, Gelinas, Doss e Miller [36], Djomehri [29], Pipilis [65] e Duarte [32], ou associar uma malha a cada uma das variáveis dependentes, Baines [7], Baines e Wathen [80], Sereno [68]. A escolha da estratégia a usar depende não só do volume de cálculo envolvido mas também do tipo de problemas a resolver. Para problemas em que as regiões de grande actividade espacial sejam coincidentes durante todo o processo de integração a segunda opção conduz, à partida, a sistemas de EDO de maior dimensão. Apesar disso, eles mantêm a mesma estrutura simples dos sistemas originados por uma única equação, o que não sucede quando se usa uma única malha espacial. O uso de várias malhas espaciais apresenta vantagens importantes, especialmente em problemas que apresentam frentes que se deslocam a velocidades diferentes. Com uma malha espacial única não se pode esperar que o método reproduza o comportamento de cada uma das componentes com igual qualidade. A segunda opção tem o inconveniente de obrigar a constantes interpolações pois exige uma inter-conexão entre as diferentes malhas espaciais. A necessidade de relacionar as malhas pode ser facilmente constatada no

cálculo numérico dos integrais que formam o segundo membro do sistema de EDO. Assim, a escolha de uma única malha revela-se mais apropriada para problemas que não envolvem escalas de tempo muito diferenciadas.

2.9 Resultados da aplicação do método dos EFM

O método dos EFM, nas suas diferentes formulações, tem sido aplicado a uma grande variedade de problemas reais. Baines [9] relata-nos com algum pormenor o trabalho de alguns grupos, como o desenvolvido por Carlson e Miller [19, 20], Baines e Wathen e co-autores [12, 51] e ainda o trabalho produzido no CWI por Zegeling [82, 85]. No entanto muitos outros autores têm aplicado diferentes formulações do método a problemas reais. Sereno [68] usa o método dos EFM com aproximações de grau arbitrário na simulação de vários problemas de engenharia química, como por exemplo, o problema da adsorção e reacção química simultâneas numa coluna de adsorção e o problema do funcionamento de um reactor catalítico não isotérmico. Hobbs [43] aplica o GWFEM com *graph massage* na simulação de um processo de modelação de um semicondutor. Na área de ciências do ambiente Cox *et al.* [28] aplicam o GWFEM no estudo de problemas de transporte de água e solutos em solos. Duarte [33] usa o método dos EFM com polinómios cúbicos de Hermite para a resolução de modelos de frente de reacção. Uma extensão da formulação do método dos EFM com aproximações de grau arbitrário é usada por Coimbra *et al.* [23, 25] para a simulação da fase de pressurização de um processo de adsorção com modulação

da pressão. Huang e Chou [46] aplicam o método dos EFM a um ciclo completo do processo de adsorção com modulação da pressão. Kaczmariski *et al.* [53] usam um método de colocação ortogonal em elementos finitos (fixos e móveis) para simular um processo de adsorção em leito fixo. O método dos EFM com aproximações de grau arbitrário foi também aplicado com grande eficácia à resolução de um problema de separação cromatográfica [26], problema que abordaremos com detalhe no capítulo 4.

2.10 EFM em espaços de dimensões superiores

O método dos EFM para resolução de problemas de evolução em domínios espaciais de dimensão 2 foi introduzido por Alexander, Manselli e Miller [4], continuado por Gelinas *et al.* [36] e Djomehri *et al.* [30] e desenvolvido por Carlson e Miller [18]. As diferentes variações do método que descrevemos para 1-D foram também formuladas para 2-D. Os conceitos essenciais que as suportam em 1-D são facilmente transportados para problemas em 2-D. Surgem, no entanto, alguns problemas específicos relacionados com o facto de a malha espacial ser bidimensional. De entre esses problemas salientamos o comportamento dos nós da fronteira do domínio espacial e a distorção da malha espacial. A literatura não apresenta um número significativo de problemas reais em 2-D, apesar de vários problemas teste de aplicação do método poderem ser encontrados, a saber, nas referências [5, 12, 20, 51, 62, 83, 85]. Uma outra técnica considerada na literatura para resolução de problemas de evolução que apresentam frentes móveis é o refinamento uniforme a nível local. Exemplos

de aplicação deste procedimento são os trabalhos de Arney e Flaherty [6], Adjerid e Flaherty [2, 3], e de Verwer e co-autores [17, 74, 75]. São métodos de malha adaptativa estáticos. Pelo contrário, o método dos EFM é um método de malha adaptativa dinâmico por permitir que a malha se deforme continuamente no tempo.

Em 2-D o método dos EFM tem sido estudado por vários autores. Saliente-se os trabalhos de Baines [8, 11], Baines e Wathen [8, 13, 78, 80], Miller [59], Carlson e Miller [18, 20], Zegeling e Blom [83] e Zegeling [81, 84]. O trabalho de Baines [9] estabelece uma importante propriedade teórica que relaciona o método dos EFM, quer em 1-D, quer em 2-D, com o método das características para EDP hiperbólicas. Baines [9, 10] e Zegeling e Blom [83, 85] mostram que o método dos EFM se parece com um método das características perturbado, para equações de convecção-difusão com um pequeno coeficiente de difusão. Para problemas em 1-D está provado, quer teórica, quer experimentalmente [11, 83], que o método dos EFM quando aplicado a problemas parabólicos, produz malhas não uniformes equidistribuídas, estando a função peso dependente das derivadas de primeira e segunda ordem da solução da EDP. Também para 1-D Jimack [48] mostra que, para certos casos, o método dos EFM fornece a melhor aproximação possível à solução do estado estacionário sendo, portanto, um método apropriado para resolver EDP que possuem soluções em estado estacionário. Quando se considera domínios espaciais de dimensão 2, poucos resultados teóricos relativos ao movimento da malha estão disponíveis. Para problemas parabólicos em 2-D a experiência mostra que, quando um método dos EFM

com aproximações lineares é aplicado a EDP parabólicas, os nós da malha espacial posicionam-se nas regiões onde são mais elevadas as derivadas de segunda ordem. Há, pois, uma forte ligação entre o método dos EFM e princípios de equidistribuição. Jimack [49] estuda o comportamento da malha espacial gerada pelo método dos elementos finitos de Miller *et al.* [19, 20, 36, 56, 60], quando aplicada a uma classe específica de problemas parabólicos. Todas estas propriedades influenciam o desempenho do método quando aplicado a diferentes tipos de problemas e o seu estudo levará certamente ao desenvolvimento de métodos adaptativos mais robustos.

O uso em 2-D do método dos EFM com aproximações de grau superior é pouco frequente na literatura. Todos estes autores usam aproximações lineares em cada elemento finito. Apenas Mueller *et al.* [62] referem que consideram aproximações lineares para limitar a complexidade do programa, remetendo o uso de aproximações de grau superior para uma extensão que não implementam.

2.11 Conclusões e Notação

Neste capítulo apresentámos uma revisão sucinta do método dos elementos finitos móveis. Não foi intenção fazer uma descrição exhaustiva dos métodos existentes, mas somente introduzir as ideias básicas do método proposto por Miller. O método dos EFM é um método de linhas em que a discretização espacial se faz usando elementos finitos, com a particularidade de se permitir que os nós espaciais se movam no tempo. A discretização espacial conduz a um sistema de equações diferenciais or-

dinárias na variável tempo, o qual é resolvido recorrendo a um integrador de sistemas de EDO apropriado. O movimento da malha, as singularidades inerentes ao sistema de EDO e o cálculo dos integrais que envolvem os termos de segunda ordem foram motivo de investigação, conduzindo a formulações alternativas ao método de Miller. Tais formulações têm contribuído de forma significativa para aprofundar e clarificar algumas das propostas iniciais de Miller. Para além dos problemas teste em que o método se revela eficiente e preciso, foram resolvidos com sucesso muitos problemas reais em diversas áreas.

letras minúsculas

- a extremo esquerdo do domínio espacial
- b extremo direito do domínio espacial
- c_i constantes de penalização
- d comprimento mínimo permitido para um elemento finito
- g vector do sistema de EDO
- m_j declive de U no j -ésimo elemento finito
- t variável independente de tempo
- $u(x, t)$ solução analítica do modelo matemático
- u_t derivada parcial de $u(x, t)$ em ordem ao tempo

- u_x derivada parcial de $u(x, t)$ em ordem ao espaço
- u_{xx} segunda derivada parcial de $u(x, t)$ em ordem ao espaço
- x variável independente de espaço

letras maiúsculas

- A matriz de massa do sistema de EDO
- C matriz que intervém na decomposição da matriz de massa
- J matriz jacobiana da transformação de coordenadas na formulação variacional
- $\mathcal{L}$ operador diferencial
- M matriz que intervém na decomposição da matriz de massa
- N número de elementos finitos da malha espacial
- P_ϵ termo penalizador
- S_j funções teste na formulação de Herbst
- S_l termo de penalização correspondente às forças de mola no l -ésimo elemento finito
- $\mathcal{T}_j$ funções teste na formulação de Herbst
- $U(x, t)$ aproximação de $u(x, t)$ seccionalmente linear

- $U_j(t)$ amplitudes $u(X_j, t)$
- U_t variação temporal de U
- U_x derivada parcial de U em ordem ao espaço
- U_{xx} segunda derivada parcial de U em ordem ao espaço
- $\dot{U}_j$ derivada temporal de $U_j(t)$
- $W(x)$ polinómio cúbico de Hermite
- $W(m)$ função peso
- X_j nós de separação da malha espacial
- $\dot{X}_j$ derivada temporal de $X_j(t)$
- $\mathbf{Y}$ vector das variáveis dependentes do sistema de EDO
- $\mathbf{Y}(0)$ vector que define as condições iniciais de $\mathbf{Y}$
- Z_l comprimento do l -ésimo elemento finito

letras gregas

- $\alpha_j(x)$ primeiras funções de base
- $\beta_j(x)$ segundas funções de base
- ϵ_l termo de penalização correspondente às forças viscosas no l -ésimo elemento finito

- ξ variável independente na formulação variacional
- τ variável independente na formulação variacional
- $\phi_k^{(i)}$ funções de base na formulação de Baines
- $\omega_k^{(i)}$ coeficientes relacionados com $\dot{U}_j$ e $\dot{X}_j$ na formulação de Baines

* $V_1 \subset V_2 \subset \dots$

* $V = \bigcup_{i=1}^{\infty} V_i$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

Seja $V = \bigcup_{i=1}^{\infty} V_i$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

* $V_i \cap V_j = V_{\min(i,j)}$

Capítulo 3

Método dos Elementos Finitos Móveis em Espaços Unidimensionais

3.1 Introdução

Neste capítulo centramos a nossa atenção na resolução de problemas de evolução, lineares ou não lineares, em domínios de $\mathcal{R}$, cujas soluções desenvolvem perfis abruptos que se movem no tempo e para os quais pretendemos obter uma solução numérica com elevada precisão. É desenvolvida uma formulação do método dos elementos finitos móveis, MEFM, especialmente desenhada para este tipo de problemas de evolução em domínios espaciais unidimensionais [23, 24, 26]. Esta formulação, obtida a partir dos trabalhos de Sereno [68] e Sereno *et al.* [70, 71], permite a obtenção de soluções numéricas de grande qualidade para uma vasta classe de problemas de evolução.

O MEFM é um método de linhas em que a discretização espacial é feita por

elementos finitos, considerando o método de Galerkin e usando para funções de base, funções polinomiais de grau arbitrário. Em cada elemento finito de cada uma das malhas espaciais, constrói-se uma aproximação da solução por um polinómio de grau arbitrário, recorrendo aos polinómios de Lagrange. A definição das posições dos nós de interpolação em cada elemento finito é feita como no método de colocação ortogonal [77]. Deste modo a discretização espacial por elementos finitos converte cada uma das equações do sistema de EDP num sistema de EDO, na variável tempo. Ao implementarmos o MEFM enfrentamos dois problemas significativos que, como vimos no capítulo anterior, dizem respeito à ocorrência de singularidades e à não existência de alguns integrais. É pois necessário definir estratégias para resolver estes problemas.

A matriz do sistema contém singularidades potenciais que advêm, quer do paralelismo, quer da coalescência de nós. Para contornar estas singularidades, inerentes ao método, usamos *funções de penalização*, que podem, eventualmente, ser caracterizadas para cada um dos elementos finitos. Estas funções de penalização têm um carácter empírico e não interferem na solução, apenas no movimento dos nós, evitando que a matriz do sistema se torne singular.

A descontinuidade das segundas funções de base nos nós da malha espacial e o facto de os problemas a resolver envolverem segundas derivadas espaciais dão origem a que muitos dos integrais que definem o sistema de EDO não existam. Para dar sentido a estes integrais usaremos um processo de suavização, substituindo, sempre

que necessário, numa vizinhança, $\mathcal{V}_\delta$, de um nó, a solução aproximada por uma outra suavizada. Com este processo de suavização os integrais, envolvendo as segundas derivadas da solução aproximada, ficam bem definidos e têm limites consistentes quando $\delta \rightarrow 0$. O cálculo desses integrais é feito por quadratura gaussiana sem que haja necessidade de definir catálogos de integrais para cada tipo de problema a resolver, como acontece em muitas outras formulações de elementos finitos móveis.

Como muitos destes problemas reais apresentam soluções com escalas de tempo diferentes, preferimos associar a cada uma das variáveis dependentes do sistema uma malha espacial independente. É uma escolha consciente, que sabemos acarretar custos computacionais mas que se nos afigurou interessante explorar uma vez que procuramos soluções de elevada qualidade.

3.2 O problema

Consideremos a classe de sistemas de n EDP em que a m -ésima equação é dada por

$$\sum_{l=1}^n g_{m,l}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial u_l}{\partial t} = \sum_{l=1}^n \left[f_{m,l} \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 u_l}{\partial x^2} \right] + h_m \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \right), \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{u}(x, t) = [u_1(x, t), u_2(x, t), \dots, u_n(x, t)]^T \in \mathbb{R}^n$, $t \geq 0$ e $a \leq x \leq b$, sujeita às condições iniciais, $u_m(x, 0) = u_{0m}(x)$, $a \leq x \leq b$ e a condições de fronteira de Dirichlet, de Neumann ou de Robin. Sejam

$$\gamma_m^a \frac{\partial u_m}{\partial x} \Big|_{x=a} = \mu_m^a u_m(a, t) + \nu_m^a, \quad t \geq 0 \quad (3.2)$$

$$\gamma_m^b \frac{\partial u_m}{\partial x} \Big|_{x=b} = \mu_m^b u_m(b, t) + \nu_m^b, \quad t \geq 0 \quad (3.3)$$

as condições de fronteira para $x = a$ e $x = b$, respectivamente. Esta classe de problemas abrange um grande número de modelos que surgem com frequência no estudo de problemas de transporte em meios porosos, como por exemplo, processos de separação cromatográficos, migração de poluentes em solos e aquíferos e reactores químicos. Relativamente aos trabalhos de Sereno [68] e Sereno *et al.* [70, 71] esta classe é mais vasta. Recorde-se que na implementação de Sereno, a classe (3.1) se reduz à classe de problemas em que as funções $f_{m,l}$ e $g_{m,l}$ são funções nulas, para todo $l \neq m$, ou seja, $\{f_{m,l}\}$ é uma matriz diagonal e $\{g_{m,l}\}$ a matriz identidade. Partindo dos trabalhos de Sereno [68] e Sereno *et al.* [70, 71], o MEFM é desenvolvido e implementado de modo a resolver com eficácia esta classe de problemas de evolução.

3.3 Discretização da variável espacial

O MEFM é um processo de aproximação desenvolvido em duas etapas independentes: a discretização espacial e a integração no tempo. Este tipo de aproximação, designado na literatura por método de linhas, teve grande projecção a partir do momento em que surgiram integradores de sistemas de EDO muito eficazes, mesmo na resolução de sistemas implícitos *stiff*, tais como os desenvolvidos por Hindmarsh [41, 42] e Petzold [63]. Assim, a segunda etapa do processo, que conduz à discretização total

do sistema de EDP, consiste apenas na utilização de um integrador de EDO adequado.

Analisemos então a primeira etapa do processo, a discretização espacial por elementos finitos. Designemos por $\mathcal{M}_m$ o sistema de elementos finitos associado à m -ésima variável dependente, por N_m o número de elementos finitos dessa malha e por

$$X_{m,j+1}, j = 1, \dots, N_m \quad (3.4)$$

o nó de separação entre o j -ésimo e o $j + 1$ -ésimo elementos finitos dessa malha

$$a = X_{m,1} < \dots < X_{m,j} < X_{m,j+1} < \dots < X_{m,N_m+1} = b. \quad (3.5)$$

Seja $\mathbf{U}(x, t) = [U_1(x, t), \dots, U_n(x, t)]^T$ uma aproximação de $\mathbf{u}(x, t)$ obtida por elementos finitos. Considerando em cada elemento finito aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário vejamos como ficam definidas as aproximações $U_m(x, t)$. Para tal, abordaremos o problema segundo duas perspectivas. Em primeiro lugar vamos construir a solução aproximada, assim como as suas derivadas em ordem aos diversos parâmetros, em cada um dos elementos finitos da malha $\mathcal{M}_m$. Designaremos esta abordagem por *abordagem elemento a elemento*. Uma vez construída a aproximação $U_m(x, t)$ em cada elemento finito finitos da malha $\mathcal{M}_m$, torna-se necessário definir a solução aproximada em todo o domínio espacial. Esta segunda fase será designada por *abordagem global*.

3.3.1 Abordagem elemento a elemento

Em cada um dos N_m elementos finitos da malha espacial $\mathcal{M}_m$ a solução $\mathbf{u}_m(x, t)$ é aproximada por um polinómio de grau arbitrário, $U_m(x, t)$, definido por interpolação, considerando $p_{m, j}$ pontos do intervalo $[X_{m, j}, X_{m, j+1}]$. Para definirmos as funções de base é necessário escolher os pontos de interpolação. Estes pontos, que designamos por *nós locais*, definem uma malha local associada ao j -ésimo elemento finito da malha $\mathcal{M}_m$,

$$X_{m, j} \leq s_{m, j}^1 < \dots < s_{m, j}^k < \dots < s_{m, j}^{p_{m, j}} \leq X_{m, j+1} \quad (3.6)$$

e a malha normalizada

$$0 \leq \xi_{m, j}^1 < \dots < \xi_{m, j}^k < \dots < \xi_{m, j}^{p_{m, j}} \leq 1. \quad (3.7)$$

Em vez do sinal $\leq$ usa-se o sinal $<$ quando o extremo correspondente é um ponto da fronteira e não é ponto de interpolação. A partir daqui designaremos por $s = s_{m, j}$ a variável espacial naquele elemento finito e por $\xi = \xi_{m, j} \in [0, 1]$

$$\xi = \frac{s - X_{m, j}}{X_{m, j+1} - X_{m, j}}, \quad (3.8)$$

essa variável normalizada pelo comprimento do elemento finito. A posição dos pontos interiores de interpolação relativamente aos extremos do intervalo, $X_{m, j}$ e $X_{m, j+1}$,

que se designam simplesmente por *nós interiores*, é otimizada como no método de colocação ortogonal [70]. Estas posições são determinadas pelas raízes do polinómio de Jacobi, $P_{p_{m,j}-2}^{(1,1)}$. Exceptuam-se o primeiro e o último elementos finitos, no caso em que o extremo do domínio espacial não é nó da malha e, nesses casos, a posição relativa dos nós de interpolação é dada pelas raízes de $P_{p_{m,1}-1}^{(1,0)}$ e $P_{p_{m,N_m}-1}^{(0,1)}$. Observe-se que $P_p^{(\alpha,\beta)}(x)$ é o polinómio de Jacobi de grau p que obedece à condição

$$\int_0^1 x^\beta (1-x)^\alpha x^k P_p^{(\alpha,\beta)}(x) dx = 0, \quad k = 0, 1, \dots, p-1. \quad (3.9)$$

A restrição da função $U_m(x, t)$ ao elemento finito $[X_{m,j}, X_{m,j+1}]$, $U_{m,j}(s, t)$, é um polinómio de grau $p_{m,j} - 1$. Obtém-se, recorrendo aos polinómios interpoladores de Lagrange e escreve-se

$$U_{m,j}(s, t) = \sum_{i=1}^{p_{m,j}} \ell_{m,j}^i(\xi) U_{m,j}^i(t), \quad (3.10)$$

onde $U_{m,j}^i$ é o valor de U_m no i -ésimo nó local do elemento finito considerado e

$$\ell_{m,j}^i(\xi) = \prod_{k=1, k \neq i}^{p_{m,j}} \frac{\xi - \xi_{m,j}^k}{\xi_{m,j}^i - \xi_{m,j}^k}, \quad i = 1, \dots, p_{m,j}. \quad (3.11)$$

Observe-se que o i -ésimo polinómio de Lagrange, $\bar{\ell}_{m,j}^i(s)$, na variável s , verifica

$$\bar{\ell}_{m,j}^i(s) = \ell_{m,j}^i(\xi). \quad (3.12)$$

As derivadas espaciais de $U_{m,j}$, de primeira e segunda ordem, são polinómios de grau $p_{m,j} - 2$ e $p_{m,j} - 3$, respectivamente. Portanto, qualquer uma destas derivadas pode também ser definida através de polinómios interpoladores de Lagrange, considerando os mesmos $p_{m,j}$ pontos de interpolação usados na definição de $U_{m,j}$. Seja $Z_{m,j} = X_{m,j+1} - X_{m,j}$ o comprimento do j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$. Se designarmos por

$$\begin{aligned} A_{m,j}^k(\xi_{m,j}^i) &= \left. \frac{d\ell_{m,j}^k(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi_{m,j}^i} \\ B_{m,j}^k(\xi_{m,j}^i) &= \left. \frac{d^2\ell_{m,j}^k(\xi)}{d\xi^2} \right|_{\xi_{m,j}^i} \end{aligned} \quad (3.13)$$

então

$$\frac{\partial U_{m,j}}{\partial s} = \sum_{i=1}^{p_{m,j}} \ell_{m,j}^i(\xi) (Z_{m,j})^{-1} \sum_{k=1}^{p_{m,j}} A_{m,j}^k(\xi_{m,j}^i) U_{m,j}^k \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial^2 U_{m,j}}{\partial s^2} = \sum_{i=1}^{p_{m,j}} \ell_{m,j}^i(\xi) (Z_{m,j})^{-2} \sum_{k=1}^{p_{m,j}} B_{m,j}^k(\xi_{m,j}^i) U_{m,j}^k. \quad (3.15)$$

Deste modo, fica caracterizada a aproximação $U_{m,j}$ de u_m em $[X_{m,j}, X_{m,j+1}]$, bem como as suas derivadas espaciais de primeira e segunda ordem.

3.3.2 Abordagem global

No parágrafo anterior construímos as aproximações semi-discretas num dado elemento finito de uma malha espacial. A nível global vamos definir a aproximação U_m de u_m , no domínio espacial $[a, b]$, como sendo a função contínua que em cada elemento finito $[X_{m,j}, X_{m,j+1}]$ coincide com o polinómio $U_{m,j}$ acabado de construir.

Dizemos que U_m é uma função *seccionalmente polinomial*, i.e.,

$$U_m \big|_{[X_{m,j}, X_{m,j+1}]} \equiv U_{m,j} \quad (3.16)$$

é um polinómio. Observe-se que na construção de U_m não fizemos exigências de continuidade suficientes, para que se possa garantir que existam as derivadas espaciais de primeira e segunda ordem de U_m nos nós de separação da malha $\mathcal{M}_m$. Como U_m é uma função seccionalmente polinomial, existem mas não são necessariamente iguais as derivadas laterais

$$\frac{\partial U_m}{\partial x} \bigg|_{X_{m,j+1}^-} \quad \text{e} \quad \frac{\partial U_m}{\partial x} \bigg|_{X_{m,j+1}^+} . \quad (3.17)$$

U_m diz-se *seccionalmente diferenciável* em $[a, b]$. Os pontos $X_{m,j+1}$ são *pontos angulosos* da malha $\mathcal{M}_m$. Nestes pontos as derivadas $\frac{\partial U_m}{\partial x}$ e $\frac{\partial^2 U_m}{\partial x^2}$ não estão definidas.

A aproximação seccionalmente polinomial, U_m , que construímos depende da posição dos nós de separação, $X_{m,j}$, $j = 1, 2, \dots, N_m$ e das ordenadas da solução aproximada em todos os nós locais, $U_{m,j}^k$, $j = 1, \dots, N_m$, $k = 1, 2, \dots, p_{m,j}$. Estes parâmetros dependem apenas da variável t , donde

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U_m}{\partial t} = & \sum_{j=1}^{N_m} \left[\sum_{k=2}^{p_{m,j}-1} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} \frac{dU_{m,j}^k}{dt} \right] + \\
& + \sum_{j=1}^{N_m-1} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \frac{dU_{m,j}^{p_{m,j}}}{dt} + \sum_{j=1}^{N_m-1} \frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}} \frac{dX_{m,j+1}}{dt} + \\
& + \left(\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,1}^1} \frac{dU_{m,1}^1}{dt} \right) + \left(\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,N_m}^{p_{m,j}}} \frac{dU_{m,N_m}^{p_{m,j}}}{dt} \right). \quad (3.18)
\end{aligned}$$

Observe-se que os dois últimos termos da equação (3.18) são nulos quando o extremo do domínio espacial correspondente à variável u_m é fixado por uma condição de Dirichlet. Nesse caso, $U_{m,1}^1$ (ou $U_{m,N_m}^{p_{m,j}}$) é uma constante. Para o cálculo de $\frac{\partial U_m}{\partial t}$ é necessário avaliar $\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k}$ e $\frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}}$. Seja

$$\Delta_m = \bigcup_{j=1}^{N_m} \{s_{m,j}^k, k = 1, \dots, p_{m,j}\} \quad (3.19)$$

o conjunto ordenado de todos os nós de separação e de todos os nós interiores da malha $\mathcal{M}_m$. Diz-se que Δ_m é o conjunto de todos os *nós globais* da malha $\mathcal{M}_m$. Seja M_m o número de nós globais dessa malha. Podemos definir a aproximação semi-discreta $U_m(x, t)$ de $u_m(x, t)$, $m = 1, \dots, n$, por

$$U_m(x, t) = \sum_{i=1}^{M_m} \Phi_{m,i}(x) U_m(\Delta_{m,i}), \quad (3.20)$$

em que $U_m(\Delta_{m,i})$ é o valor de U_m no i -ésimo nó global, $\Delta_{m,i}$, da malha $\mathcal{M}_m$ para o instante t e $\Phi_{m,i}(x)$ a função básica global associada ao nó $\Delta_{m,i}$. Admitindo que este nó global é o k -ésimo ponto de interpolação do j -ésimo elemento dessa malha,

i.e., $\Delta_{m,i} \equiv s_{m,j}^k$, a função básica $\Phi_{m,i}(x)$ verifica

$$\Phi_{m,i}(\Delta_{m,l}) = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq l \\ 1 & \text{se } i = l \end{cases} \quad (3.21)$$

Como $U_m(\Delta_{m,i}) = U_{m,j}^k$ tem-se, por (3.20),

$$\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} = \Phi_{m,i}(x) \quad (3.22)$$

e, portanto, o polinómio que obedece às condições (3.21) no j -ésimo elemento finito é o polinómio de Lagrange $\ell_{m,j}^k(\xi)$. Em cada um dos restantes elementos finitos o polinómio que representa $\Phi_{m,i}(x)$ é o polinómio nulo, uma vez que as ordenadas em todos os seus nós são nulas. Portanto, se $\Delta_{m,i}$ for um nó interior desse elemento

$$\Phi_{m,i}(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{m,j} \vee x \geq X_{m,j+1} \\ \ell_{m,j}^k(\xi) & \text{se } X_{m,j} < x < X_{m,j+1} \end{cases} \quad (3.23)$$

Se $\Delta_{m,i}$ for um nó de separação, $\Delta_{m,i} \equiv X_{m,j} \equiv X_{m,j+1} \equiv \xi_{m,j}^{p_{m,j}} \equiv \xi_{m,j+1}^1$, podemos escrever ainda

$$\Phi_{m,i}(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{m,j} \vee x \geq X_{m,j+2} \\ \ell_{m,j}^{p_{m,j}}(\xi) & \text{se } X_{m,j} < x \leq X_{m,j+1} \\ \ell_{m,j+1}^1(\xi) & \text{se } X_{m,j+1} \leq x < X_{m,j+2} \end{cases} \quad (3.24)$$

Neste último caso tem-se também que $U_{m,j}^{N_m} = U_{m,j+1}^1$. Conjugando (3.22), (3.23) e (3.24) podemos calcular a derivada de U_m em ordem à ordenada no nó interior $s_{m,j}^k$, $U_{m,j}^k$. Assim, se $s_{m,j}^k$ for um nó interior

$$\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{m,j} \vee x \geq X_{m,j+1} \\ \ell_{m,j}^k(\xi) & \text{se } X_{m,j} < x < X_{m,j+1} \end{cases}. \quad (3.25)$$

Se $s_{m,j}^k$ for um nó de separação, i.e., $k = p_{m,j}$, temos

$$\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq X_{m,j} \vee x \geq X_{m,j+2} \\ \ell_{m,j}^{p_{m,j}}(\xi) & \text{se } X_{m,j} < x \leq X_{m,j+1} \\ \ell_{m,j+1}^1(\xi) & \text{se } X_{m,j+1} \leq x < X_{m,j+2} \end{cases}. \quad (3.26)$$

Calculemos agora as derivadas de U_m em ordem ao nó de separação $X_{m,j+1}$. Admitamos que, em $\mathcal{M}_m$, existem pelo menos dois elementos finitos. Fazendo variar apenas a posição do nó de separação $X_{m,j+1}$ e mantendo todos os outros parâmetros fixos, U_m só wariará nos elementos j e $(j+1)$, $[X_{m,j}, X_{m,j+1}]$ e $[X_{m,j+1}, X_{m,j+2}]$. Considerando os resultados de Sereno [68] para o cálculo da derivada de uma dada função real, definida num intervalo, em ordem a cada um dos extremos desse intervalo, e atendendo a (3.8) obtemos

$$\frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}}(s_{m,j}) = - \left(\frac{\partial U_{m,j}}{\partial s_{m,j}} \xi_{m,j} \right) \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}}(s_{m,j+1}) = - \left[\frac{\partial U_{m,j+1}}{\partial s_{m,j+1}} (1 - \xi_{m,j+1}) \right]. \quad (3.28)$$

Recorrendo aos polinómios interpoladores de Lagrange e usando os mesmos $p_{m,j}$ e $p_{m,j+1}$ pontos de interpolação, temos

$$\frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}}(s_{m,j}) = - \sum_{k=1}^{p_{m,j}} \ell_{m,j}^k(\xi_{m,j}) \xi_{m,j}^k \dot{s}_{m,j}^k \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}}(s_{m,j+1}) = - \sum_{k=1}^{p_{m,j+1}} \ell_{m,j+1}^k(\xi_{m,j+1}) (1 - \xi_{m,j+1}^k) \dot{s}_{m,j+1}^k \quad (3.30)$$

onde $\dot{s}_{m,j}^k = \left. \frac{\partial U_{m,j}}{\partial s_{m,j}} \right|_{s_{m,j}^k}$. Nos restantes elementos finitos tem-se que

$$\frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}} = 0. \quad (3.31)$$

Deste modo, foi possível definir as derivadas da aproximação U_m em relação aos diversos parâmetros dos quais depende.

3.3.3 O sistema de EDO

Dada a aproximação $\mathbf{U}(x,t) = [U_1(x,t), \dots, U_n(x,t)]^T$ de $\mathbf{u}$, considere-se o resíduo $\mathbf{R} = \{R_m\}$ definido por

$$R_m = \sum_{l=1}^n g_{m,l}(x, t, \mathbf{U}) \frac{\partial U_l}{\partial t} - \sum_{l=1}^n \left[f_{m,l} \left(x, t, \mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} \right] + h_m \left(x, t, \mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right). \quad (3.32)$$

Como a ocorrência de singularidades é independente do grau da aproximação [47], torna-se necessário evitar que a matriz do sistema de EDO se torne singular. Considerem-se as penalizações propostas por Miller [56] para resolver os problemas decorrentes das singularidades. Assim, o sistema de EDO na variável independente t que aproxima o sistema de EDP original obtém-se, tal como se descreveu no capítulo anterior, minimizando a função

$$\mathcal{T} = \sum_{m=1}^n \left[\int_a^b (R_m)^2 dx + \sum_{j=1}^{N_m} \left(\epsilon_{m,j} \frac{dZ_{m,j}}{dt} - S_{m,j} \right)^2 \right] \quad (3.33)$$

com respeito a

$$\dot{U}_{m,j}^k = \frac{dU_{m,j}^k}{dt}, \begin{cases} m = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, N_m \\ k = 1, 2, \dots, p_{m,j} \end{cases} \quad (3.34)$$

e a

$$\dot{X}_{m,j+1} = \frac{dX_{m,j+1}}{dt}, \begin{cases} m = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, N_m - 1. \end{cases} \quad (3.35)$$

$S_{m,j}$ e $\epsilon_{m,j}$ são, respectivamente, os termos correspondentes às *forças de mola* e às *forças viscosas* no j -ésimo elemento finito da m -ésima malha espacial. Note-se que se $U_m(a)$ for fixado por uma condição de fronteira de Dirichlet então, para o primeiro elemento finito de todas as malhas, teremos em (3.34), $k = 2, \dots, p_{m,1}$. De igual modo, se $U_m(b)$ for fixado por uma condição de fronteira de Dirichlet então, para o último elemento finito de todas as malhas, teremos em (3.34), $k = 1, 2, \dots, p_{m,N_m} - 1$. Tem-se ainda que se o sistema for constituído por um único elemento finito e em ambos os extremos do domínio espacial se considerar uma condição de fronteira de Dirichlet, em (3.34), $k = 2, \dots, p_{m,1} - 1$. O sistema de EDO na variável t que aproxima o sistema de EDP original é,

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{U}_{m,j}^k} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{X}_{m,j+1}} = 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

Recorrendo à definição de $\mathcal{T}$ e aplicando a fórmula de Leibnitz, temos

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \int_a^b R_i \frac{\partial R_i}{\partial \dot{U}_{m,j}^k} dx = 0 \\ \sum_{i=1}^n \int_a^b R_i \frac{\partial R_i}{\partial \dot{X}_{m,j+1}} dx - (\epsilon_{m,j})^2 \frac{dX_{m,j}}{dt} + [(\epsilon_{m,j})^2 + (\epsilon_{m,j+1})^2] \frac{dX_{m,j+1}}{dt} - (\epsilon_{m,j+1})^2 \frac{dX_{m,j+2}}{dt} - \epsilon_{m,j} S_{m,j} + \epsilon_{m,j+1} S_{m,j+1} = 0 \end{cases} \quad (3.37)$$

Atendendo agora à equação (3.32), que define R_i e à equação correspondente a $\frac{\partial U_m}{\partial t}$ (3.18), obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \int_a^b R_i g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} dx = 0 \\ \sum_{i=1}^n \int_a^b R_i g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}} dx - (\epsilon_{m,j})^2 \frac{dX_{m,j}}{dt} + [(\epsilon_{m,j})^2 + (\epsilon_{m,j+1})^2] \frac{dX_{m,j+1}}{dt} - \\ - (\epsilon_{m,j+1})^2 \frac{dX_{m,j+2}}{dt} - \epsilon_{m,j} S_{m,j} + \epsilon_{m,j+1} S_{m,j+1} = 0 \end{array} \right. \quad (3.38)$$

Neste sistema podemos destacar três tipos de equações:

1. **Equação associada à ordenada num nó interior:** Seja $U_{m,j}^k$ a ordenada no nó interior $s_{m,j}^k$. A equação associada a $U_{m,j}^k$ obtém-se, a partir da primeira equação do sistema (3.38) e da equação do resíduo (3.32). Assim,

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} \left(\sum_{l=1}^n g_{i,l} \frac{\partial U_l}{\partial t} \right) dx \\ &= \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} \left[\sum_{l=1}^n f_{i,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} + h_i \right] dx. \end{aligned} \quad (3.39)$$

2. **Equação associada à ordenada num nó de separação:**

Seja $U_{m,j}^{p_{m,j}} = U_{m,j+1}^1$ a ordenada no nó de separação

$$X_{m,j+1} \equiv s_{m,j}^{p_{m,j}} \equiv s_{m,j+1}^1, \quad j = 1, \dots, N_m - 1.$$

Partindo da primeira equação do sistema (3.38) e da equação do resíduo (3.32), tem-se

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \left(\sum_{l=1}^n g_{i,l} \frac{\partial U_l}{\partial t} \right) dx \\ &= \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \left[\sum_{l=1}^n f_{i,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} + h_i \right] dx . \end{aligned} \quad (3.40)$$

No caso do nó de separação ser um ponto da fronteira do domínio espacial sujeito a uma condição de Dirichlet, não existe equação associada à ordenada nesse nó.

3. **Equação associada a um nó de separação:** Considere-se a equação associada ao nó de separação $X_{m,j+1}$, $j = 1, \dots, N_m - 1$. Observe-se que os nós de separação $X_{m,1}$ e X_{m,N_m+1} são fixos, pelo que

$$\frac{dX_{m,1}}{dt} = \frac{dX_{m,N_m+1}}{dt} \Rightarrow 0 .$$

A partir da segunda equação do sistema (3.38) e da equação do resíduo (3.32), a equação associada a esse nó de separação será

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}} \left(\sum_{l=1}^n g_{i,l} \frac{\partial U_l}{\partial t} \right) dx - (\epsilon_{m,j})^2 \frac{dX_{m,j}}{dt} + \\
& + [(\epsilon_{m,j})^2 - (\epsilon_{m,j+1})^2] \frac{dX_{m,j+1}}{dt} - (\epsilon_{m,j+1})^2 \frac{dX_{m,j+2}}{dt} \\
& = \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial X_{m,j+1}} \left[\sum_{l=1}^n f_{i,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} + h_i \right] dx + \\
& + \epsilon_{m,j} S_{m,j} - \epsilon_{m,j+1} S_{m,j+1} .
\end{aligned} \tag{3.41}$$

3.3.4 Cálculo dos integrais

Antes de definirmos explicitamente cada uma das equações do sistema de EDO na variável tempo, que constituem a aproximação semi-discreta ao sistema original de EDP, definamos Π , o conjunto ordenado de todos os nós de separação de todos os sistemas de elementos finitos associados a todas as variáveis dependentes do sistema de EDP,

$$\Pi = \bigcup_{m=1}^n \{X_{m,1}, X_{m,2}, \dots, X_{m,N_m+1}\} . \tag{3.42}$$

Designemos por Π_i e Π_{i+1} dois elementos consecutivos do conjunto ordenado Π . Consideremos um subconjunto de Π ,

$$\Theta_{m,j} = \{\Theta_{m,j}^0, \Theta_{m,j}^1, \dots, \Theta_{m,j}^{P_{m,j}}, \Theta_{m,j}^{P_{m,j}+1}\} , \tag{3.43}$$

tal que,

$$\Theta_{m,j}^0 = X_{m,j}, \quad \Theta_{m,j}^{P+1} = X_{m,j+1}, \quad (3.44)$$

onde P designa, para simplicidade de notação, $P_{m,j}$, o número de nós de separação dos outros sistemas de elementos finitos que pertencem ao interior do j -ésimo elemento finito da malha $\mathcal{M}_m$, $[X_{m,j}, X_{m,j+1}]$. Se por exemplo $\Theta_{m,j}^0 = \Pi_i$ então $\Theta_{m,j}^{P+1} = \Pi_{i+P+1}$. Para explicitarmos as equações gerais do método é necessário o cálculo de vários integrais. Vamos fazê-lo por integração numérica decompondo os intervalos de integração de modo a fazer intervir os pontos de Π_i de Π . Observe-se que como a aproximação seccionalmente polinomial U_m de u_m não é diferenciável nos nós da malha espacial, alguns dos integrais que formam as equações do sistema (3.38) não existem formalmente. Para dar sentido àquelas equações consideramos, numa vizinhança de um ponto anguloso, X_{ang} , de uma malha $\mathcal{M}_m$, uma aproximação suavizada de U_m . Seja $\mathcal{V}_\delta = [X_{ang} - \delta/2, X_{ang} + \delta/2]$ essa vizinhança. Definamos a aproximação suavizada, $\tilde{U}_m$, tal como a figura 3.1 ilustra,

$$\tilde{U}_m = \begin{cases} U_m & \text{se } x \notin \mathcal{V}_\delta \\ \mathcal{H} & \text{se } x \in \mathcal{V}_\delta \end{cases} \quad (3.45)$$

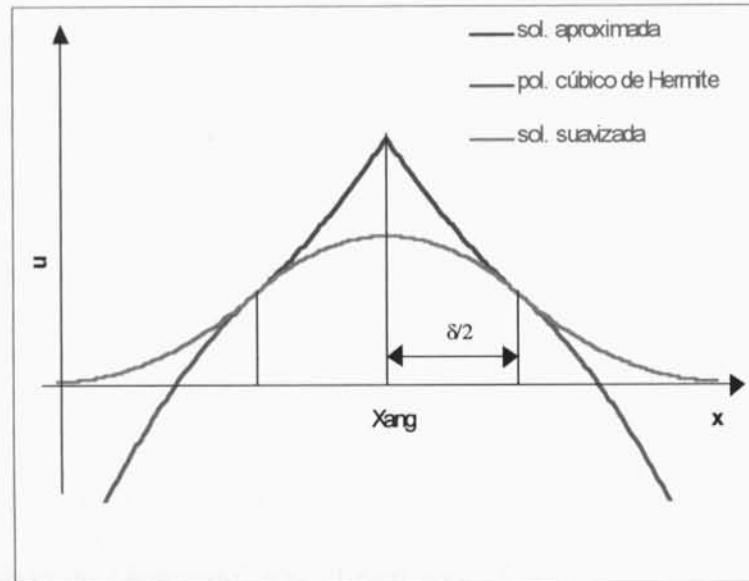


Figura 3.1 Solução aproximada vs Solução aproximada suavizada

onde $\mathcal{H}$ é o polinômio de Hermite, $\mathcal{H}(x)$, de terceiro grau que verifica

$$\mathcal{H}(X_{ang} - \delta/2) = U_m(X_{ang} - \delta/2)$$

$$\mathcal{H}(X_{ang} + \delta/2) = U_m(X_{ang} + \delta/2)$$

$$\mathcal{H}'(X_{ang} - \delta/2) = \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang} - \delta/2)$$

$$\mathcal{H}'(X_{ang} + \delta/2) = \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang} + \delta/2). \quad (3.46)$$

Quando $\delta \rightarrow 0$ este polinômio aproxima-se de U_m . Assim, os integrais que envolvem segundas derivadas espaciais vão ser calculados como sendo o limite, quando $\delta \rightarrow 0$, desses mesmos integrais, mas em que U_m é substituída pela aproximação suavizada,

$\tilde{U}_m$. O polinómio $\mathcal{H}(x)$ é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x) = & U_m(X_{ang} - \delta/2) \left(+2w^3 - \frac{3}{2}w + \frac{1}{2} \right) + \\ & + \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang} - \delta/2) \left[\delta \left(w^3 - \frac{1}{2}w^2 - \frac{1}{4}w + \frac{1}{8} \right) \right] + \\ & + U_m(X_{ang} + \delta/2) \left(-2w^3 - \frac{3}{2}w + \frac{1}{2} \right) + \\ & + \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang} + \delta/2) \left[\delta \left(w^3 + \frac{1}{2}w^2 - \frac{1}{4}w - \frac{1}{8} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde $w = \frac{1}{\delta}(x - X_{ang})$. Desenvolvendo em série de Taylor as funções U_m e $\frac{\partial U_m}{\partial x}$, em torno de X_{ang} , nos intervalos $[X_{ang} - \delta/2, X_{ang}]$ e $[X_{ang}, X_{ang} + \delta/2]$, obtemos as aproximações

$$U_m(X_{ang} - \delta/2) \sim U_m(X_{ang}) - \frac{\delta}{2} \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^-) \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang} - \delta/2) \sim \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^-) - \frac{\delta}{2} \frac{\partial^2 U_m}{\partial x^2}(X_{ang}^-) \quad (3.49)$$

$$U_m(X_{ang} + \delta/2) \sim U_m(X_{ang}) + \frac{\delta}{2} \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^+) \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang} + \delta/2) \sim \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^+) + \frac{\delta}{2} \frac{\partial^2 U_m}{\partial x^2}(X_{ang}^+). \quad (3.51)$$

Deste modo, as primeiras e segundas derivadas espaciais de U_m em X_{ang} podem ser aproximadas por

$$\frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}) \sim \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^-) + \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^+) \right) \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial^2 U_m}{\partial x^2}(X_{ang}) \sim \frac{1}{\delta} \left(\frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^+) - \frac{\partial U_m}{\partial x}(X_{ang}^-) \right). \quad (3.53)$$

Para efeito de cálculo dos integrais, o domínio de integração $[a, b]$ é decomposto considerando $[a, b] = \bigcup_i [\Pi_i, \Pi_{i+1}]$ por forma a que se calculem os integrais nos intervalos $]\Pi_i, \Pi_{i+1}[$ e ainda em cada um dos intervalos $\mathcal{V}_\delta$, $\delta \rightarrow 0$, associado a cada um dos pontos angulosos Π_i . O cálculo dos integrais em $]\Pi_i, \Pi_{i+1}[$ não oferece qualquer problema. Em $\mathcal{V}_\delta$ os integrais ficam bem definidos desde que se considere a aproximação suavizada de U_m definida pelo polinómio de Hermite (3.47), podendo ser calculados numericamente, usando, por exemplo, a regra do ponto médio.

3.4 Equações gerais do método

Definamos agora as equações gerais do MEFM para o problema de evolução (3.1). Consideremos primeiramente o caso geral, em que o sistema de EDP é um sistema implícito. Seguidamente apresentaremos o caso particular de um sistema de EDP explícito em que algumas simplificações ocorrem.

3.4.1 Sistemas implícitos

Para simplificação de notação consideremos nas equações (3.39), (3.40) e (3.41)

$$\mathcal{F}_i = \sum_{l=1}^n f_{i,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} + h_i \quad (3.54)$$

$$\mathcal{G}_i = \sum_{l=1}^n g_{i,l} \frac{\partial U_l}{\partial t} . \quad (3.55)$$

1 **Equação associada à ordenada num nó interior:** Consideremos a equa-

ção (3.39) associada a $U_{m,j}^k$, a ordenada no nó interior $s_{m,j}^k$,

$$\sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} \mathcal{G}_i dx = \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^k} \mathcal{F}_i dx. \quad (3.56)$$

Observe-se que, por (3.22) e (3.25), são nulos todos os integrais calculados em $]\Pi_i, \Pi_{i+1}[$, excepto os definidos no intervalo $]X_{m,j}, X_{m,j+1}[$. Quanto aos integrais calculados nos intervalos $\mathcal{V}_\delta$ associados a cada $\Theta_{m,j}^i$, tem-se que:

- Os que não envolvem as segundas derivadas espaciais das variáveis dependentes são nulos, no limite quando $\delta \rightarrow 0$, pois são aproximados por um produto de δ por um valor que não depende de δ ;
- Os que envolvem as segundas derivadas espaciais das variáveis dependentes são nulos pois a função integranda anula-se no ponto anguloso. De facto, (3.25) torna nula a função integranda no ponto anguloso, com excepção dos casos em que $\mathcal{V}_\delta$ está associado a um ponto da fronteira do domínio espacial que não é ponto de interpolação. Mas, nesse caso

$$\left. \frac{\partial U_m}{\partial x} \right|_{X_{m,1}^-} = \left. \frac{\partial U_m}{\partial x} \right|_{X_{m,1}^+}, \quad (3.57)$$

$$\left. \frac{\partial U_m}{\partial x} \right|_{X_{m,N_m+1}^-} = \left. \frac{\partial U_m}{\partial x} \right|_{X_{m,N_m+1}^+}, \quad (3.58)$$

o que também anula o valor da função integranda no ponto da fronteira.

Deste modo, a equação associada à ordenada num nó interior escreve-se

$$\sum_{i=1}^n \int_{X_{m,j}^+}^{X_{m,j+1}^-} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(s) \mathcal{G}_i ds = \sum_{i=1}^n \int_{X_{m,j}^+}^{X_{m,j+1}^-} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(s) \mathcal{F}_i ds . \quad (3.59)$$

Definindo

$$F_{m,j}^k = (Z_{m,j})^{-1} \sum_{i=1}^n \int_{X_{m,j}^+}^{X_{m,j+1}^-} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(s) \mathcal{F}_i ds \quad (3.60)$$

e atendendo à definição de $\Theta_{m,j}$ e de $P = P_{m,j}$, tem-se finalmente, como equação associada à ordenada no nó interior $s_{m,j}^k$

$$\sum_{r=0}^P \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,j}^{r,+}}^{\Theta_{m,j}^{r+1,-}} (g_{i,m} \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{G}_i) d\Theta = Z_{m,j} F_{m,j}^k . \quad (3.61)$$

2 Equação associada à ordenada num nó interior de separação: A equação

(3.39) associada à ordenada num nó de separação escreve-se

$$\sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \mathcal{G}_i dx = \sum_{i=1}^n \int_a^b g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \mathcal{F}_i dx . \quad (3.62)$$

Neste caso duas situações podem ocorrer:

(a) O nó não é ponto da fronteira do domínio espacial. Determinemos

a equação associada a $U_{m,j}^{p_{m,j}} = U_{m,j+1}^1$, a ordenada no nó de separação

$X_{m,j+1} \equiv s_{m,j}^{p_{m,j}} \equiv s_{m,j+1}^1$, $j = 1, \dots, N_m - 1$. Após uma decomposição do domínio de integração análoga à que foi feita anteriormente e atendendo agora a (3.22) e a (3.26) obtemos

$$\sum_{i=1}^n \int_{X_{m,j}^+}^{X_{m,j+2}^-} g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \mathcal{G}_i ds = \sum_{i=1}^n \int_{X_{m,j}^+}^{X_{m,j+2}^-} g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \mathcal{F}_i ds. \quad (3.63)$$

Por outro lado, usando a regra do ponto médio, o integral

$$I_{m,j+1} = \int_{X_{m,j+1} - \delta/2}^{X_{m,j+1} + \delta/2} g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \mathcal{F}_i ds \quad (3.64)$$

é aproximado por

$$\delta \mathcal{F}_i \left(|_{X_{m,j+1}} \right) = \delta \left(g_{i,m} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \sum_{l=1}^n f_{i,l} \frac{\partial^2 \tilde{U}_l}{\partial x^2} \right) \Big|_{X_{m,j+1}}. \quad (3.65)$$

Comutando a ordem dos somatórios e dos índices e, atendendo a que

$$\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,j}^{p_{m,j}}} \Big|_{X_{m,j+1}} = 1$$

e que $\frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} \Big|_{X_{m,j+1}}$ é dado por (3.53), obtém-se, no limite quando $\delta \rightarrow 0$,

$$I_{m,j+1} = \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{X_{m,j+1}^+} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{X_{m,j+1}^-} \right) \sum_{i=1}^n (g_{i,m} f_{i,l}) \Big|_{X_{m,j+1}}, \quad (3.66)$$

pelo que a equação associada à ordenada num nó de separação tem a forma

$$\begin{aligned}
 & \sum_{r=0}^{P_{m,j}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,j}^{r,+}}^{\Theta_{m,j}^{r+1,-}} g_{i,m} \ell_{m,j}^{p_{m,j}}(s) \mathcal{G}_i ds \\
 & + \sum_{r=0}^{P_{m,j+1}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,j+1}^{r,+}}^{\Theta_{m,j+1}^{r+1,-}} g_{i,m} \ell_{m,j+1}^1(s) \mathcal{G}_i ds \\
 & = Z_{m,j} F_{m,j}^{p_{m,j}} + Z_{m,j+1} F_{m,j+1}^1 + I_{m,j+1} . \quad (3.67)
 \end{aligned}$$

(b) O nó é ponto da fronteira do domínio espacial. Relativamente às equações associadas às ordenadas, quer no primeiro, quer no último nó de separação, convém distinguir as várias hipóteses que podem ocorrer, dependendo do comportamento de u_m nos pontos fronteira do domínio espacial, a e b .

- Se em $x = a$ a variável u_m for fixada por uma *condição de fronteira de Dirichlet*, então $U_{m,1}^1$ é uma constante e $\frac{dU_{m,1}^1}{dt} = 0$. Deste modo não existe qualquer equação associada a $U_{m,1}^1$.
- Se em $x = a$ a variável u_m for fixada por uma *condição de fronteira de Robin* ($\gamma_m^a = 1$), a equação associada a $U_{m,1}^1$ é

$$\sum_{r=0}^{P_{m,1}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,1}^{r,+}}^{\Theta_{m,1}^{r+1,-}} (g_{i,m} \ell_{m,1}^1(\Theta) \mathcal{G}_i) d\Theta = Z_{m,1} F_{m,1}^1 + I_{m,1} , \quad (3.68)$$

em que

$$U_l(X_{m,1}) = U_l(X_{l,1}) = U_{l,1}^1, \quad l = 1, \dots, n \quad (3.69)$$

e, atendendo à equação (3.52),

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m,1}} = \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{l,1}} = \frac{1}{2} \left(\mu_l^a U_{l,1}^1 + \nu_l^a + \frac{\partial U_{l,1}}{\partial s_{l,1}} \Big|_{s_{l,1}^1} \right). \quad (3.70)$$

Portanto, para todas as variáveis u_l para as quais há uma condição de fronteira de Robin,

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m,1}^+} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m,1}^-} = \frac{\partial U_{l,1}}{\partial s_{l,1}^1} - \mu_l^a U_{l,1}^1 - \nu_l^a. \quad (3.71)$$

Para todas as outras

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m,1}^+} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m,1}^-} = 0. \quad (3.72)$$

- Se em $x = a$ não for fixada qualquer condição de fronteira, atendendo a (3.57), a equação associada a $U_{m,1}^1$ é

$$\sum_{r=0}^{P_{m,1}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,1}^{r,+}}^{\Theta_{m,1}^{r+1,-}} (g_{i,m} \ell_{m,1}^1(\Theta) \mathcal{G}_i) d\Theta = Z_{m,1} F_{m,1}^1. \quad (3.73)$$

- Se em $x = b$ a variável u_m for fixada por uma condição de fronteira

de *Dirichlet*, então $U_{m, N_m}^{p_m, N_m}$ é uma constante e $\frac{dU_{m, N_m}^{p_m, N_m}}{dt} = 0$. Por conseguinte, não existe qualquer equação associada a $U_{m, N_m}^{p_m, N_m}$.

- Se em $x = b$ a variável u_m for fixada por uma *condição de fronteira de Robin* ($\gamma_m^b = 1$), a equação associada a $U_{m, N_m}^{p_m, N_m}$ é

$$\sum_{r=0}^{P_{m, N_m}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m, N_m}^r}^{\Theta_{m, N_m}^{r+1}} (g_{i,m} \ell_{m, N_m}^{p_m, N_m}(\Theta) \mathcal{G}_i) d\Theta = Z_{m, N_m} F_{m, N_m}^{p_m, N_m} + I_{m, N_m+1} \quad (3.74)$$

com

$$U_l(X_{m, N_m+1}) = U_l(X_{l, N_l+1}) = U_{l, N_l+1}^{p_l, N_l}, \quad l = 1, \dots, n \quad (3.75)$$

e, atendendo a (3.52),

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{l, N_l+1}} = \frac{1}{2} \left(\mu_l^b U_{l, N_l+1}^{p_l, N_l} + \nu_l^b + \frac{\partial U_{l, N_l+1}}{\partial s_{l, N_l+1}} \Big|_{s_{l, N_l+1}}^{p_l, N_l} \right). \quad (3.76)$$

Portanto, para todas as variáveis u_l para as quais há uma *condição de fronteira de Robin*,

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m, N_m+1}^+} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m, N_m+1}^-} = \mu_l^b U_{l, N_l}^{p_l, N_l} + \nu_l^b - \frac{\partial U_{l, N_l}}{\partial s_{l, N_l}} \Big|_{s_{l, N_l}}^{p_l, N_l}. \quad (3.77)$$

Para todas as outras

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m, N_m+1}^+} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{x_{m, N_m+1}^-} = 0. \quad (3.78)$$

- Se em $x = b$ não for fixada qualquer condição de fronteira, atendendo a (3.58), a equação associada a $U_{m, N_m}^{p_m, N_m}$ será

$$\sum_{r=0}^{P_{m, N_m}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m, N_m}^{r+}}^{\Theta_{m, N_m}^{r+1}-} \left(g_{i, m} \ell_{m, N_m}^{p_m, N_m}(\Theta) \mathcal{G}_i \right) d\Theta = Z_{m, N_m} F_{m, N_m}^{p_m, N_m}.$$

3 Equação associada a um nó de separação: Consideremos a equação associada ao nó de separação $X_{m, j+1}$, $j = 1, \dots, N_m - 1$, definida pela equação (3.41). Os nós de separação $X_{m, 1}$ e X_{m, N_m+1} são fixos, pelo que apenas interessa considerar nós interiores ao domínio espacial. Por decomposição do domínio de integração, tal como anteriormente e, atendendo à definição de $\Theta_{m, j}$ e às equações (3.29), (3.30) e (3.31), obtém-se, após alguma manipulação algébrica, como equação associada ao nó de separação $X_{m, j+1}$, a equação

$$\begin{aligned} & \alpha \mathcal{J} - (\epsilon_{m, j})^2 \dot{X}_{m, j} + [(\epsilon_{m, j})^2 + (\epsilon_{m, j+1})^2] \dot{X}_{m, j+1} - (\epsilon_{m, j+1})^2 \dot{X}_{m, j+2} \\ & = \alpha (Z_{m, j} F_{m, j}^{p_m, j} - Z_{m, j+1} F_{m, j+1}^1) + \epsilon_{m, j} S_{m, j} - \epsilon_{m, j+1} S_{m, j+1} \end{aligned} \quad (3.79)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{J} = & \sum_{r=0}^{P_{m,j}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,j}^{r+} }^{\Theta_{m,j}^{r+1-}} g_{i,m} \ell_{m,j}^{p_{m,j}}(\Theta) \mathcal{G}_i d\Theta - \\ & - \sum_{r=0}^{P_{m,j+1}} \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,j+1}^{r+} }^{\Theta_{m,j+1}^{r+1-}} g_{i,m} \ell_{m,j+1}^1(\Theta) \mathcal{G}_i d\Theta \end{aligned} \quad (3.80)$$

e

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\left. \frac{\partial U_{m,j+1}}{\partial s_{m,j+1}} \right|_{s_{m,j+1}^1} - \left. \frac{\partial U_{m,j}}{\partial s_{m,j}} \right|_{s_{m,j}^{p_{m,j}}} \right). \quad (3.81)$$

Observemos ainda que a equação associada ao nó de separação $X_{m,2}$ é dada pela equação anterior fazendo $j = 1$ mas sem o termo $-(\epsilon_{m,1})^2 \dot{X}_{m,1}$. Por sua vez a equação associada ao nó de separação X_{m,N_m} é também dada pela equação anterior fazendo $j = N_m - 1$ mas sem o termo $-(\epsilon_{m,N_m})^2 \dot{X}_{m,N_m+1}$.

Cálculo do factor $F_{m,j}^k$

Em todas as equações que definem o sistema de EDO que aproxima o sistema de EDP original intervém $F_{m,j}^k$ dado por (3.60). É pois necessário calcular o integral que aparece na equação (3.60). Atendendo às considerações feitas anteriormente basta decompor o domínio de integração de modo a fazer intervir todos os nós de separação $\Theta_{m,j}^i$. Considerando todos os intervalos $]\Theta_{m,j}^i, \Theta_{m,j}^{i+1}[$, $i = 0, \dots, P$ e todos

os intervalos $\mathcal{V}_\delta$ associados a cada $\Theta_{m,j}^i$, $i = 1, \dots, P$, obtemos

$$\begin{aligned} \int_{X_{m,j}^+}^{X_{m,j+1}^-} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(s) \mathcal{F}_i ds &= \sum_{r=0}^P \int_{\Theta_{m,j}^{r-}}^{\Theta_{m,j+1}^{r+}} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_i d\Theta + \\ &+ \sum_{r=1}^P \int_{\Theta_{m,j}^{r-}}^{\Theta_{m,j}^{r+}} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_i d\Theta. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Os integrais definidos nos intervalos $\mathcal{V}_\delta$ são calculados fazendo intervir a função aproximada suavizada e a regra do ponto médio para avaliar os integrais não nulos. Assim,

$$\begin{aligned} &\int_{\Theta_{m,j}^{r-}}^{\Theta_{m,j}^{r+}} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_i d\Theta \\ &= \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r+}} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r-}} \right) [\ell_{m,j}^k(\xi_{m,j}) g_{i,m} f_{i,l}] \Big|_{\Theta_{m,j}^r}, \end{aligned} \quad (3.83)$$

donde, comutando a ordem dos somatórios e dos índices, $F_{m,j}^k$ fica definido por

$$\begin{aligned} Z_{m,j} F_{m,j}^k &= \sum_{r=0}^P \sum_{i=1}^n \int_{\Theta_{m,j}^{r-}}^{\Theta_{m,j+1}^{r+}} g_{i,m} \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_i d\Theta + \\ &+ \sum_{r=1}^P \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r+}} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r-}} \right) \sum_{i=1}^n [\ell_{m,j}^k(\xi_{m,j}) g_{i,m} f_{i,l}] \Big|_{\Theta_{m,j}^r}, \end{aligned} \quad (3.84)$$

onde $\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r+}} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r-}}$ toma os seguintes valores, dependendo da posição de $\Theta_{m,j}^r$ na malha espacial $\mathcal{M}_l$:

Se $\Theta_{m,j}^r$ não for nó de separação para a variável U_l ,

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^r}^+ - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^r}^- = 0. \quad (3.85)$$

Se $\Theta_{m,j}^r$ for nó de separação para a variável U_l , i.e., se J for tal que $X_{l,J+1} \equiv \Theta_{m,j}^r$, então

$$U_l(\Theta_{m,j}^r) = U_l(X_{l,J+1}) = U_{l,J}^{p_{l,J}} = U_{l,J+1}^1. \quad (3.86)$$

A partir de (3.52) temos

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^r} = \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{X_{l,J+1}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_{l,J}}{\partial s_{l,J}} \Big|_{s_{l,J}^{p_{l,J}}} + \frac{\partial U_{l,J+1}}{\partial s_{l,J+1}} \Big|_{s_{l,J+1}^1} \right) \quad (3.87)$$

e, portanto,

$$\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^r}^+ - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^r}^- = \frac{\partial U_{l,J+1}}{\partial s_{l,J+1}} \Big|_{s_{l,J+1}^1} - \frac{\partial U_{l,J}}{\partial s_{l,J}} \Big|_{s_{l,J}^{p_{l,J}}}. \quad (3.88)$$

Se $\Theta_{m,j}^r$ for nó de separação e ponto da fronteira do domínio espacial, então a equação (3.86) é substituída por (3.69) ou por (3.75), conforme se trate do extremo esquerdo ou do extremo direito do domínio espacial. De igual modo a equação (3.87) é substituída por (3.70) ou por (3.76). A equação (3.88) é substituída por (3.85),

excepto se forem impostas condições de Robin, caso em que é substituída por (3.71) ou por (3.77).

3.4.2 Sistemas explícitos

Para o caso particular em que o sistema de n EDP (3.1) é explícito, ou seja, $g_{m,l} = 0$, para todo $l \neq m$, a implementação do MEFM é mais simples. A m -ésima equação do sistema escreve-se

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} = \sum_{l=1}^n f_{m,l} \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) \frac{\partial^2 u_l}{\partial x^2} + h_m \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right). \quad (3.89)$$

Uma vez que Sereno et al. [71] implementam o MEFM para o caso particular de sistemas explícitos em que $f_{m,l} = 0$, para todo $l \neq m$, basta considerar o trabalho de Sereno e reescrever as equações correspondentes ao valor aproximado de u_m no nó de separação $X_{m,j+1}$, $U_{m,j}^N = U_{m,j+1}^1$ e a forma como se calcula o integral

$$F_{m,j}^k = (Z_{m,j})^{-1} \int_{X_{m,j}}^{X_{m,j+1}} l_{m,j}^k(s) \mathcal{F}_m ds. \quad (3.90)$$

Decompondo o domínio de integração de modo a fazer intervir todos os nós de separação $\Theta_{m,j}^r$, torna-se necessário considerar todos os intervalos

$$]\Theta_{m,j}^r, \Theta_{m,j}^{r+1}[, \quad r = 0, \dots, P$$

e todos os intervalos $\mathcal{V}_\delta$ associados a cada um dos pontos $\Theta_{m,j}^r$, $r = 1, \dots, P$. Deste modo e atendendo às considerações anteriormente efectuadas para o cálculo dos integrais, temos

$$Z_{m,j} F_{m,j}^k = \sum_{r=0}^P \int_{\Theta_{m,j}^{r+} }^{\Theta_{m,j}^{r+1-} } \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_m d\Theta + \sum_{r=1}^P \int_{\Theta_{m,j}^{r-} }^{\Theta_{m,j}^{r+} } \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_m d\Theta . \quad (3.91)$$

Os integrais que figuram no último somatório do segundo membro são integrais calculados na vizinhança dos nós de separação. Todos os integrais em que não figuram segundas derivadas espaciais são nulos, pois, podemos aproximá-los por um produto de δ por um valor que não depende de δ . Os integrais que envolvem as segundas derivadas espaciais da solução aproximada são calculados considerando a aproximação suavizada. Usando a regra do ponto médio, no limite quando $\delta \rightarrow 0$, o segundo somatório de (3.91) escreve-se

$$\sum_{r=1}^P \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r+} } - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r-} } \right) [\ell_{m,j}^k(\xi_{m,j}) f_{m,l}] \Big|_{\Theta_{m,j}^r} , \quad (3.92)$$

donde,

$$\begin{aligned} Z_{m,j} F_{m,j}^k &= \sum_{r=0}^P \int_{\Theta_{m,j}^{r-1+} }^{\Theta_{m,j}^{r+} } \ell_{m,j}^k(\Theta) \mathcal{F}_m d\Theta + \\ &+ \sum_{r=1}^P \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r+} } - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{\Theta_{m,j}^{r-} } \right) (\ell_{m,j}^k(v_{m,j}) f_{m,l}) \Big|_{\Theta_{m,j}^r} , \end{aligned} \quad (3.93)$$

em que $P = P_{m,j}$ designa, como se viu, o número de nós de separação de todos os sistemas de elementos finitos que pertencem ao intervalo $] X_{m,j}, X_{m,j+1} [$, o j -ésimo elemento finito da m -ésima variável dependente e $\Theta_{m,j}^i$ é o i -ésimo nó de entre todos os nós de separação de todas as variáveis dependentes que pertencem àquele intervalo. Em relação à equação associada à ordenada de um nó de separação, $U_{m,j}^N = U_{m,j+1}^1$, temos,

$$\sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{X_{m,j+1}^+} - \frac{\partial U_l}{\partial x} \Big|_{X_{m,j+1}^-} \right) f_{m,l} \Big|_{X_{m,j+1}} + Z_{m,j} G_{p_{m,j}}^{m,j} + Z_{m,j+1} G_1^{m,j+1} = 0, \quad (3.94)$$

em que

$$G_i^{m,j} = F_{m,j}^i - \sum_{k=1}^{p_{m,j}} J_{m,j}^{i,k} \frac{dU_{m,j}^k}{dt} + D_{m,j}^i \frac{dX_{m,j}}{dt} + C_{m,j}^i \frac{dX_{m,j+1}}{dt}, \quad (3.95)$$

com

$$J_{m,j}^{i,k} = \int_0^1 \ell_{m,j}^i(\xi) \ell_{m,j}^k(\xi) d\xi \quad (3.96)$$

$$C_{m,j}^i = \sum_{k=1}^{p_{m,j}} J_{m,j}^{i,k} \xi_{m,j}^k \frac{\partial U_{m,j}}{\partial x} \Big|_{s_{m,j}^k} \quad (3.97)$$

$$D_{m,j}^i = \sum_{k=1}^{p_{m,j}} J_{m,j}^{i,k} (1 - \xi_{m,j}^k) \frac{\partial U_{m,j}}{\partial x} \Big|_{s_{m,j}^k}. \quad (3.98)$$

3.5 Integração no tempo

Esta etapa do MEFM consiste na resolução do sistema de EDO que aproxima o sistema de EDP original. Para tal recorre-se ao integrador de sistemas de equações diferenciais ordinárias LSODI [41] desenvolvido no Lawrence National Laboratory e que é apropriado para resolver sistemas implícitos de EDO

$$A(\mathbf{y}, t)\mathbf{y}'(t) = \mathbf{G}(\mathbf{y}, t), \quad \mathbf{y}'(t_0) = \mathbf{y}_0. \quad (3.99)$$

LSODI é uma variante da família de integradores ODEPACK [42], desenvolvidos a partir do código base LSODE [41].

O integrador LSODI obriga a que o utilizador forneça as seguintes rotinas:

ADDA rotina que adiciona a matriz A dos coeficientes do sistema de EDO a uma outra matriz com a mesma forma;

RES rotina que define o resíduo de cada uma das equações do sistema de ODE,

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}(\mathbf{y}, t) - A(\mathbf{y}, t)\mathbf{y}'(t), \quad (3.100)$$

em função do escalar t e dos vectores $\mathbf{y}$ e $\mathbf{y}'$;

JAC rotina que define a matriz jacobiana de $\mathbf{R}$. Esta rotina é opcional. Caso se pretenda que a matriz jacobiana seja calculada numericamente pelo integrador deve-se introduzir uma rotina muda.

Saliente-se que o integrador LSODI foi ligeiramente modificado, tal como refere

Sereno em [68], de modo a que as listas de argumentos das chamadas às subrotinas ADDA, RES e JAC incluam as funções que caracterizam o sistema de EDP a resolver. Por outro lado, a multiplicação dos elementos da matriz jacobiana por uma certa constante definida pelo próprio integrador LSODI passou a ser feita na rotina JAC e não na rotina PREPJI. O integrador LSODI sofreu também alterações no que diz respeito à forma como é definido o incremento das variáveis dependentes no sistema de EDO, sempre que estas correspondam às posições dos nós de separação. Como não admitimos que haja cruzamento dos nós de separação, o respectivo incremento pode ser diminuído tanto quanto for necessário. Esta operação é feita na rotina RESJAC que, tal como a rotina RES calcula o resíduo de cada uma das equações de derivadas ordinárias no tempo, mas especificamente na situação descrita. Ao integrador LSODI com estas alterações chamamos LSODIS [68].

3.6 Implementação do método

Para especificar as equações gerais do MEFM, quando aplicado ao problema de evolução (3.1), é necessário, por um lado, calcular os integrais que nelas figuram e, por outro, definir as penalizações do movimento dos nós. Relativamente às penalizações e, tomando como referência [60] e [68], consideramos as expressões empíricas,

$$S_{m,j} = \left(\frac{c_1^{m,j}}{Z_j^m - c_4^{m,j}} \right) \left(1 + \frac{c_4^{m,j}}{Z_j^m - c_4^{m,j}} \right)^2 \quad (3.101)$$

$$\epsilon_{m,j} = \left(\frac{c_2^{m,j}}{Z_j^m - c_4^{m,j}} + c_3^{m,j} \right) \left(1 + \frac{c_4^{m,j}}{Z_j^m - c_4^{m,j}} \right)^2,$$

onde $c_i^{m,j}$, $i = 1, 2, 3, 4$, são constantes pequenas, definidas pelo utilizador. Estas constantes têm um carácter empírico, não afectando a qualidade da solução, pois diferentes valores de $c_i^{m,j}$ conduzem a soluções numéricas de qualidade semelhante. No entanto, uma má caracterização destas constantes pode levar a tempos de computação inoportáveis. Para se obterem valores adequados é necessária uma certa experimentação numérica, em virtude de elas interferirem no movimento das malhas. A constante $c_4^{m,j}$ indica o comprimento mínimo permitido para o elemento finito. As constantes $c_2^{m,j}$ e $c_3^{m,j}$ com valores elevados restringem o movimento dos nós, tornando o MEFM semelhante a um método de elementos finitos fixo. Observe-se ainda que $c_1^{m,j}$ controla o comprimento relativo de cada um dos elementos finitos de uma dada malha, sendo menor o comprimento dos elementos aos quais está associado um menor valor de $c_1^{m,j}$.

O cálculo dos integrais é efectuado por quadratura de Radau ou de Lobatto. Em cada intervalo de integração usamos o mesmo número de pontos de quadratura, sendo esse número superior ou igual ao maior número de nós locais de cada uma das malhas espaciais. Os pontos interiores de quadratura, tal como os nós interiores locais de cada elemento finito são determinados recorrendo à rotina JCOBI de Villad-

sen e Michelsen [77]. Os pesos de quadratura são definidos pela rotina RADAU [77] e os valores das funções nos pontos de quadratura são determinados por interpolação, recorrendo à rotina INTRP [77]. Observe-se que se usa quadratura de Lobatto, excepto se o extremo esquerdo do intervalo de integração é ponto da fronteira e não é nó da malha, ou se o extremo direito do intervalo de integração é ponto da fronteira e não é nó da malha. Nestes casos fazem-se quadraturas de Radau à esquerda ou à direita. Para a determinação da primeira e segunda derivadas dos coeficientes de interpolação de Lagrange, usa-se a rotina DFOPR de Villadsen e Michelsen [77]. Os valores dos polinómios de Lagrange nos diferentes pontos são calculados recorrendo a INTRP [77].

Por último, analisemos a estrutura da matriz dos coeficientes dos termos das derivadas dos parâmetros em ordem ao tempo do sistema de EDO que aproxima o sistema original. Tomemos, como exemplo, um problema com duas variáveis dependentes. Admita-se que as condições de fronteira são de Dirichlet e que os pontos da fronteira são nós das malhas espaciais. Considere-se ainda que a malha associada à primeira variável dependente é discretizada por 3 elementos finitos com 5, 2 e 5 nós interiores, respectivamente e que a segunda variável dependente é discretizada por 4 elementos finitos com 3, 2, 2 e 3 nós interiores em cada um dos elementos finitos. Esta discretização espacial origina um sistema de 36 equações diferenciais ordinárias, na variável independente tempo, que possibilitam a determinação das 36 variáveis dependentes. Admita-se que a posição inicial dos nós de separação e dos nós interio-

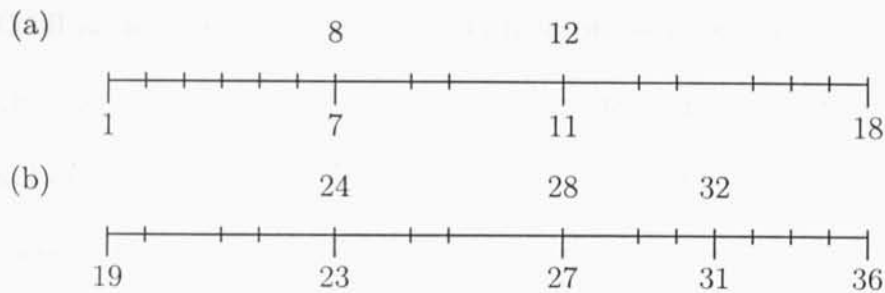


Figura 3.2 Malhas espaciais e pontos de interpolação relativos às primeira (a) e segunda (b) variáveis dependentes

res é a descrita pela figura 3.2. Então, no instante inicial, a matriz dos coeficientes do sistema de EDO apresenta a configuração que a figura 3.3 ilustra. Num instante

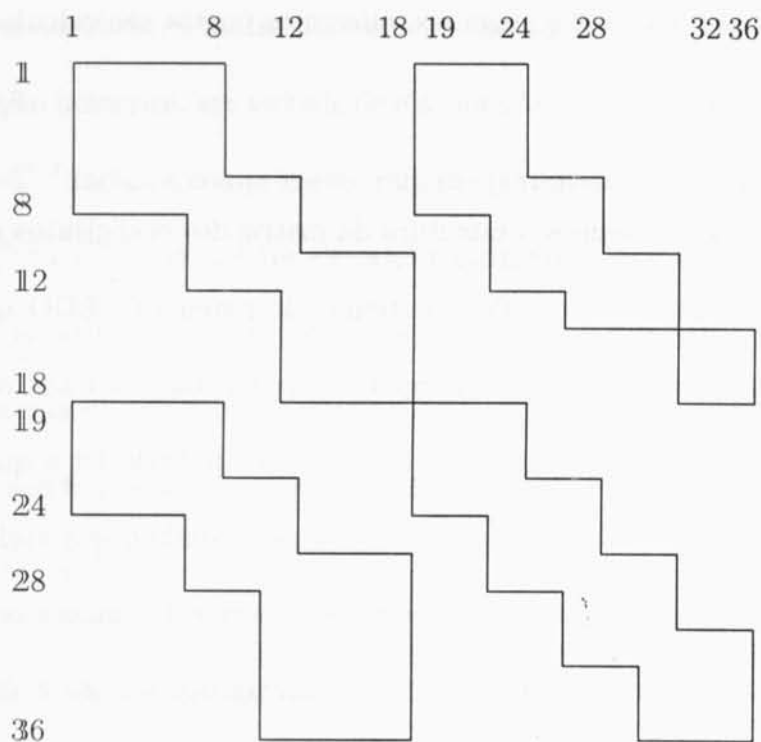


Figura 3.3 Blocos não-zeros da matriz dos coeficientes

posterior, os blocos de não zeros da diagonal mantém a estrutura inicial, pois é fixo o número de nós globais de cada uma das malhas. No entanto, a estrutura dos blocos

de não zeros fora da diagonal varia no tempo, dependendo da posição relativa dos nós de separação de uma malha em relação aos nós de separação da outra malha. A estrutura da matriz dos coeficientes do sistema de EDO a resolver é variável no tempo. Apesar do número elevado de zeros, a posição dos blocos de não-zeros depende da posição relativa dos nós de separação de uma dada malha em relação aos nós das outras malhas num dado instante, pelo que se torna impraticável aplicar as técnicas usuais para matrizes esparsas. Devido ao elevado número de zeros será compensador desenvolver um tratamento algébrico específico para este tipo de matrizes, que permita diminuir o volume de cálculo envolvendo zeros.

3.7 Conclusões e Notação

Neste capítulo apresentámos uma formulação do método dos elementos finitos móveis que se baseia na construção de uma solução aproximada, seccionalmente polinomial que, em cada elemento finito, usa polinómios de grau arbitrário. O MEFM foi desenvolvido e implementado de modo a poder ser aplicado a uma vasta classe de sistemas de EDP implícitos.

Algumas das técnicas desenvolvidas diferem das propostas por Miller e revelam-se bastante eficientes. É exemplo disso o modo como foram calculados os diversos integrais, em que não há necessidade de, para cada problema, catalogar *à priori* os integrais que intervêm nas equações do método.

No capítulo seguinte veremos como o algoritmo computacional, obtido com

base no MEFM, permite obter soluções numéricas de qualidade para um grande número de problemas reais que são modelizados por EDP, cujas soluções desenvolvem frentes abruptas móveis.

letras minúsculas

- a extremo esquerdo do domínio espacial
- b extremo direito do domínio espacial
- $c_i^{m,j}$ $i = 1, \dots, 4$, constantes de penalização no j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- $c_4^{m,j}$ comprimento mínimo permitido para o j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- $f_{m,l}$ coeficiente dos termos que envolvem as derivadas espaciais de segunda ordem no sistema de EDP
- $g_{m,l}$ coeficiente dos termos que envolvem as derivadas temporais no sistema de EDP
- h_m termos que não envolvem nem derivadas temporais nem derivadas espaciais de segunda ordem no sistema de EDP
- $\ell_{m,j}^i(\xi)$ i -ésimo elemento da base do polinómio interpolador de Lagrange no j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- n dimensão do sistema de EDP
- $p_{m,j}$ número de pontos de interpolação no j -ésimo elemento de $\mathcal{M}_m$

- s variável espacial no elemento finito
- $s_{m,j}^k$ posição do k -ésimo ponto de interpolação do j -ésimo elemento de $\mathcal{M}_m$
- t variável independente de tempo
- $u(x, t)$ solução analítica do modelo matemático
- $u_m(x, t)$ m -ésima componente da solução analítica do modelo matemático
- $u_{0_m}(x)$ m -ésima componente do vector das condições iniciais
- x variável independente de espaço
- y_0 vector que define as condições iniciais para o sistema de EDO

letras maiúsculas

- $A(y, t)$ matriz de massa do sistema de EDO
- $G(y, t)$ vector do sistema de EDO
- $\mathcal{H}$ polinómio cúbico de Hermite
- M_m número de nós globais da malha $\mathcal{M}_m$
- $\mathcal{M}_m$ sistema de elementos finitos associado à m -ésima variável dependente
- N_m número de elementos finitos da m -ésima malha espacial
- $P_p^{(\alpha, \beta)}(x)$ polinómio de Jacobi de grau p caracterizado pela função peso $x^\beta(1-x)^\alpha$

- $P_{m,j}$ número de nós de separação de outros sistemas de elementos finitos que pertencem ao interior do j -ésimo elemento finito da malha $\mathcal{M}_m$
- $\mathbf{R}$ vector dos resíduos
- $S_{m,j}$ termo de penalização correspondente às forças de mola no j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- $\mathcal{T}$ função objectivo
- $\mathbf{U}(x, t)$ uma aproximação de $u(x, t)$ seccionalmente polinomial
- $U_m(x, t)$ m -ésima componente de $\mathbf{U}(x, t)$
- $\tilde{U}_m$ aproximação suavizada de U_m
- $U_{m,j}(s, t)$ restrição de $U_m(x, t)$ ao j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- $U_{m,j}^i$ valor de U_m no i -ésimo nó local do j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- $U_m(\Delta_{m,i})$ valor de U_m no i -ésimo nó global, $\Delta_{m,i}$, da malha $\mathcal{M}_m$
- $\dot{U}_{m,j}^k$ derivada de $U_{m,j}^k$ em ordem ao tempo
- $\mathcal{V}_\delta$ intervalo aberto de amplitude $\delta/2$ centrado em X_{ang}
- $X_{m,j+1}$ nó de separação entre o j -ésimo e o $j + 1$ -ésimo elementos finitos da m -ésima malha espacial
- $\dot{X}_{m,j+1}$ derivada em ordem ao tempo de $X_{m,j+1}$

- X_{ang} ponto angular de uma malha espacial
- $\mathbf{Y}$ vector das variáveis dependentes do sistema de EDO
- $Z_{m,j}$ comprimento do j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$

letras gregas

- $\epsilon_{m,j}$ termo de penalização correspondente às forças viscosas no l -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- ξ variável espacial normalizada definida num elemento finito
- $\xi_{m,j}^k$ posição normalizada do k -ésimo ponto de interpolação do j -ésimo elemento de $\mathcal{M}_m$
- Δ_m conjunto ordenado de todos os nós de separação e de todos os nós interiores da malha $\mathcal{M}_m$
- $\Delta_{m,i}$ i -ésimo elemento de Δ_m
- $\Theta_{m,j}$ subconjunto de Π definido tal que o primeiro e último elementos definem o j -ésimo elemento de $\mathcal{M}_m$
- $\Theta_{m,j}^i$ j -ésimo elemento de $\Theta_{m,j}$
- Π conjunto ordenado de todos os nós de separação de todas as malhas $\mathcal{M}_m$
- $\Phi_{m,i}(x)$ função básica global associada ao nó global $\Delta_{m,i}$

$$u(x) = \sum_{j=1}^n u_j \phi_j(x) \quad \text{com } u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad (1)$$

$$u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad \text{com } h_j = x_j - x_{j-1} \quad (2)$$

$$u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad (3)$$

$$u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad (4)$$

$$u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad (5)$$

$$u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad (6)$$

$$u_j = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{h_j} + \frac{x_{j+1} - x_j}{h_{j+1}} \right) \quad (7)$$

Capítulo 4

Exemplos e Resultados do MEFM em 1-D

4.1 Introdução

No capítulo anterior apresentámos e desenvolvemos o método dos elementos finitos móveis com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário. Desse trabalho resultou um código numérico que permite resolver sistemas implícitos de equações de derivadas parciais, dependentes do tempo, em domínios espaciais de uma dimensão. Este código permite resolver uma gama importante de problemas da Engenharia Química. Neste capítulo, o código numérico desenvolvido é aplicado à resolução de um conjunto de problemas, cujas soluções têm comportamentos diversificados, de modo a ilustrar a eficácia e desempenho do método. Os três primeiros exemplos são retirados da literatura. Normalmente são usados como problemas teste, permitindo aferir o desempenho do método. Os restantes exemplos são modelos para problemas de Engenharia Química estudados no Laboratório de Processos de Separação e Reacção, LSRE.

O primeiro exemplo, proveniente da teoria da combustão, é modelizado por uma equação escalar de *reação-difusão* [24]. Podemos verificar a eficácia e precisão do MEFM, pois, o grau de dificuldade na sua resolução é determinado pelos valores dos diversos parâmetros que definem a equação. Este problema pode ser usado como um problema teste que permite aferir a resposta do método numérico a situações que, do ponto de vista numérico, correspondem a problemas com graus de dificuldade distintos.

O segundo exemplo apresenta uma equação de *convecção-difusão* usada por Carlson e Miller [19] como problema teste ao GWMFE. As simulações realizadas usam um coeficiente de difusão pequeno por forma a podermos tornar dominante o termo convectivo da equação. Como podemos constatar, a resposta do MEFM com aproximações de grau arbitrário é eficaz, produzindo soluções de elevada precisão.

O terceiro problema, a simulação de um *reactor catalítico não isotérmico* [35], retoma um problema resolvido por Sereno [68] e posteriormente por Duarte [32], usando elementos finitos móveis com polinómios de Hermite. A aproximação com polinómios de grau arbitrário revela-se mais eficaz, sendo o problema resolvido com grande precisão e menor esforço computacional [24].

No quarto exemplo o MEFM é usado para simular um processo de adsorção multicomponente. Estuda-se um problema de *cromatografia binária*, analisando a resposta, quer a um salto, quer a um pulso na concentração da alimentação. O MEFM resolve este problema, fornecendo soluções de grande qualidade, mesmo em situações

numericamente complexas quando, por exemplo, se simula a resposta a um salto na concentração de alimentação, com dispersão axial muito pequena. Nesta situação as equações que descrevem o modelo tornam-se hiperbólicas e a teoria de equilíbrio prevê duas frentes abruptas separadas por um patamar [26].

O quinto exemplo [23, 24] trata um problema de pressurização de leitos de adsorção, uma das fases de um processo de *adsorção com modulação da pressão* (AMP). São apresentados dois modelos para a sua resolução. A simulação realizada com estes modelos permite validar o uso do *modelo simplificado* na modelação da fase de pressurização de um processo de AMP. Sereno e Rodrigues [69] usaram estes modelos, considerando apenas espécies inertes. A comparação dos resultados das simulações dos dois modelos desenvolvidos mostra que o *modelo simplificado* descreve de modo correcto a pressurização de colunas de adsorção com uma mistura binária e, portanto, pode ser usado com segurança na simulação da fase de pressurização de um processo de AMP.

O MEFM desenvolvido mostrou-se eficaz na resolução destes problemas que englobam situações bastante diferenciadas. Todas as simulações foram realizadas num computador Pentium II de 266 MHz. As malhas espaciais iniciais foram definidas colocando um nó em cada um dos extremos do domínio espacial e concentrando todos os outros nós muito próximo do extremo esquerdo, $x = 0$. No que diz respeito aos valores de tolerância do integrador de EDO, tol_1 e tol_2 , relativamente à amplitude

nodal e à posição nodal, respectivamente, considerámos,

$$tol_1 = tol_2 = tol = 10^{-3}.$$

Para esta escolha padrão, considerámos os seguintes valores para as constantes de penalização,

$$c_1^{m,L} = 10^{-2} \times tol, \quad c_2^{m,L} = tol, \quad c_3^{m,L} = 10 \times tol \quad \text{e} \quad c_4^{m,L} = 10^{-5}.$$

4.2 Equação de reacção-difusão

Consideremos o problema teste descrito por Adjrid [1], L. Petzold [64] e Verwer *et al.* [76]. Trata-se de um problema de combustão escalar modelizado por uma equação de reacção com difusão. A equação do modelo é

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + D(1 + \alpha - T) \exp\left(-\frac{\delta}{T}\right), \quad (4.1)$$

com $0 \leq x \leq 1$ e $t > 0$. As condições iniciais e de fronteira são

$$T(x, 0) = 1 \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = 0 \quad 0 < t \quad (4.3)$$

$$T(1, t) = 1 \quad 0 < t, \quad (4.4)$$

em que $D = \frac{R \exp(\delta)}{\alpha \delta}$, R, δ e α constantes. De acordo com [1] seja $R = 5$ e $\alpha = 1$. Tomemos para valor de δ , $\delta = 30$. Na solução deste problema, que representa a temperatura da mistura reagente no sistema químico, podemos distinguir duas etapas distintas, a formação da frente e a sua propagação até $x = 1$. A etapa de formação da frente processa-se rapidamente, pelo que os erros resultantes da integração no tempo são mais importantes do que os resultantes da discretização espacial. Para este valor de δ os perfis de temperatura tornam-se bastante abruptos, como se pode verificar na figura 4.1, onde se apresenta a solução em diferentes instantes, a saber, $t = 0$, $t = 0,1$, $t = 0,238$, $t = 0,24$, $t = 0,245$ e $t = 0,3$.

A discretização espacial foi realizada com 5 elementos finitos com aproximação seccionalmente polinomial de grau 5 em cada elemento finito. Na figura 4.2 podemos visualizar a trajectória dos nós de separação e na figura 4.3 a posição desses mesmos nós no tempo. Os integrais foram calculados com 6 pontos interiores de quadratura e considerámos os valores padrão para a tolerância do integrador de EDO e para as constantes de penalização. O tempo de CPU foi de 2,9 segundos para completar a integração com $t \in [0; 0,3]$.

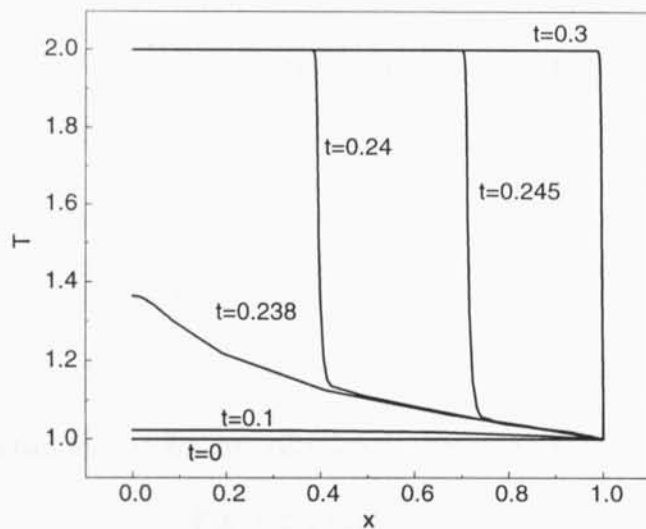


Figura 4.1 Reacção com difusão: perfis de temperatura para $\delta = 30$

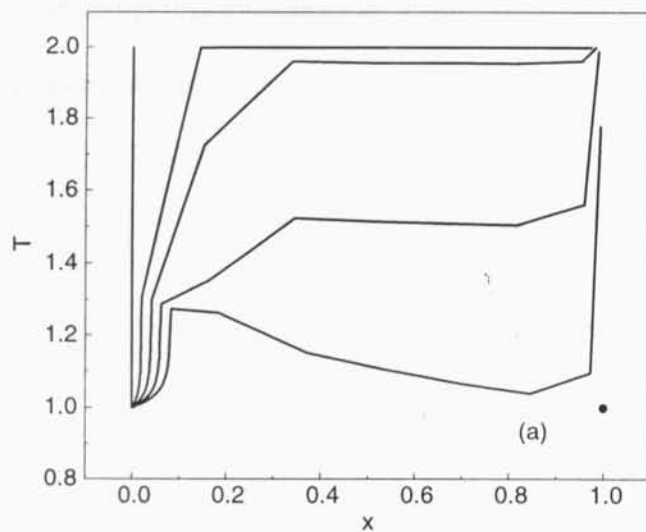


Figura 4.2 Reacção com difusão: trajetórias dos nós de separação

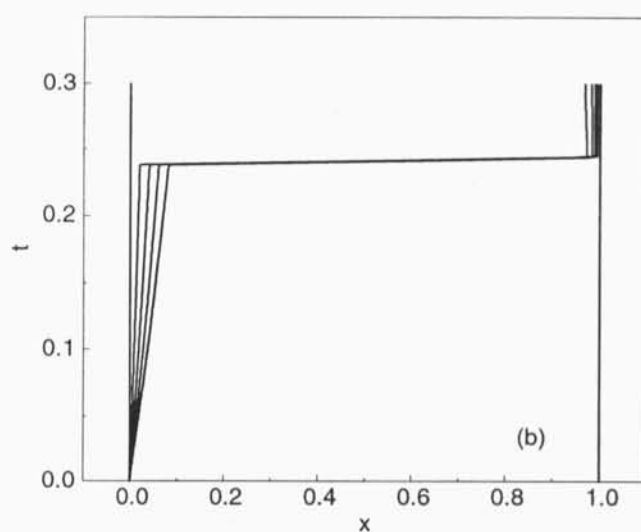


Figura 4.3 Reacção com difusão: movimento dos nós de separação

4.3 Equação de *convecção-difusão*

O segundo exemplo estudado é um problema teste modelizado por uma equação de convecção-difusão descrita por Carlson e Miller em [19],

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0 \quad (4.5)$$

$$u(0, t) = 0, \quad u(1, t) = 1, \quad t \geq 0 \quad (4.6)$$

$$u(x, 0) = x^{16}, \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (4.7)$$

Os valores considerados para o coeficiente de difusão ν , foram $\nu = 10^{-3}$ e $\nu = 10^{-4}$. Resolvemos o problema para $0 \leq t \leq 500$ com uma malha espacial de 8 elementos finitos usando polinómios de grau 3 em cada elemento. O tempo de CPU foi de 3,5 segundos para $\nu = 10^{-3}$ e de 3,7 segundos para $\nu = 10^{-4}$. Uma vez mais o MEFM produziu soluções de grande qualidade como mostra a figura 4.4, onde estão representados os gráficos das soluções nos instantes $t = 0$ e $t = 500$, assim como a posição dos nós da malha espacial para $\nu = 10^{-4}$. Para $t = 0$ os nós estão concentradas numa vizinhança de $x = 0$, com excepção do nó posicionado na fronteira $x = 1$.

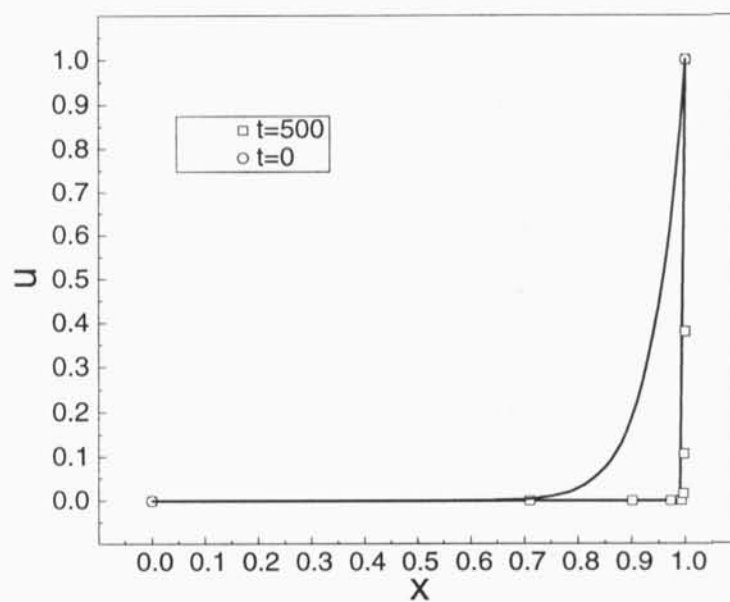


Figura 4.4 Equação de convecção-difusão: perfis para $t=0$ e $t=500$

4.4 Reactor catalítico não isotérmico

O problema da simulação de um reactor catalítico não isotérmico foi descrito por Ferreira [35] recorrendo ao modelo pseudo-homogéneo com dispersão axial para a concentração no seio do fluido. Este problema foi tratado por Sereno [68] e mais recentemente por Duarte [32] usando o método dos EFM com polinómios de Hermite. As equações que descrevem o modelo são

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial x} - D_a x v \exp \left(-\gamma \left(\frac{1}{v} - 1 \right) \right) \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\tau}{\tau_{hl}} \left[-\frac{\partial v}{\partial x} + \beta D_a x v \exp \left(-\gamma \left(\frac{1}{v} - 1 \right) \right) - N_{wh} (v - v_w) \right] \quad (4.9)$$

em que u , v , e v_w são, respectivamente, a concentração no seio do fluido, a temperatura no reactor e a temperatura da parede, adimensionais. As variáveis dependentes são, x , variável espacial normalizada pelo comprimento do leito e t , variável temporal normalizada pelo tempo de passagem, τ . As condições iniciais e de fronteira são

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= 0 \text{ e } v(x, 0) = 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) &= Pe(u - 1), & t \geq 0 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) &= 0, & t \geq 0 \\ v(0, t) &= 1 & t \geq 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Os valores considerados para os restantes parâmetros são,

- $\frac{\tau}{\tau_{hl}} = 2,08 \times 10^{-4}$
- $\beta = Da = 0,7$
- $N_{wh} = 33,7$
- $Pe = 10^4$
- $\gamma = 21,8$
- $v_w = 1$

A simulação numérica foi realizada considerando, para cada variável dependente, 8 elementos finitos e 5 nós interiores em cada elemento finito. Os integrais foram calculados com 6 pontos de quadratura no interior de cada intervalo. Considerámos os parâmetros de definição das forças internodais e os valores de tolerância do integrador ODE padrão, com excepção de $c_1^{2,L} = 10^{-4}$, $L = 5, 6, 7, 8$. O intervalo de integração no tempo foi $[0, 1500]$ e o tempo de CPU necessário para a integração completa de 39,6 segundos.

Na figura 4.5 apresentam-se as histórias de concentração do reagente e na figura 4.6 apresentam-se as histórias de temperatura, em algumas secções do reactor. As figuras 4.7 e 4.8 mostram os perfis de concentração e de temperatura respectivamente para diferentes instantes. Indica-se, a título de exemplo, a posição dos nós de separação associados a cada uma das malhas.

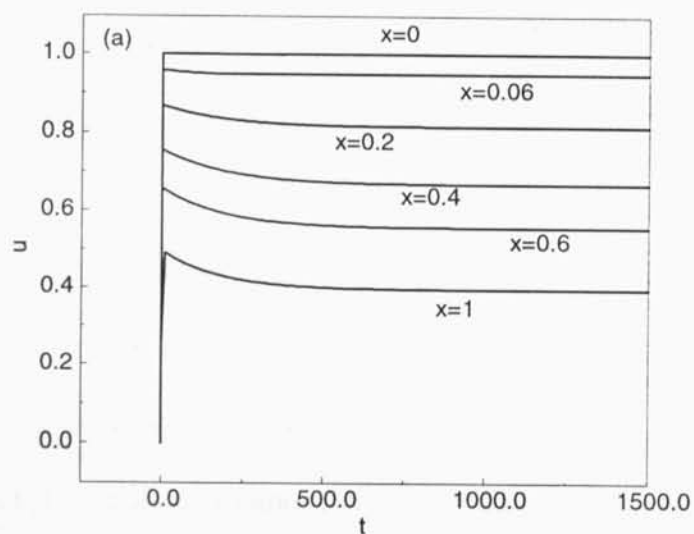


Figura 4.5 Reactor catalítico não isotérmico: histórias de concentração do reagente

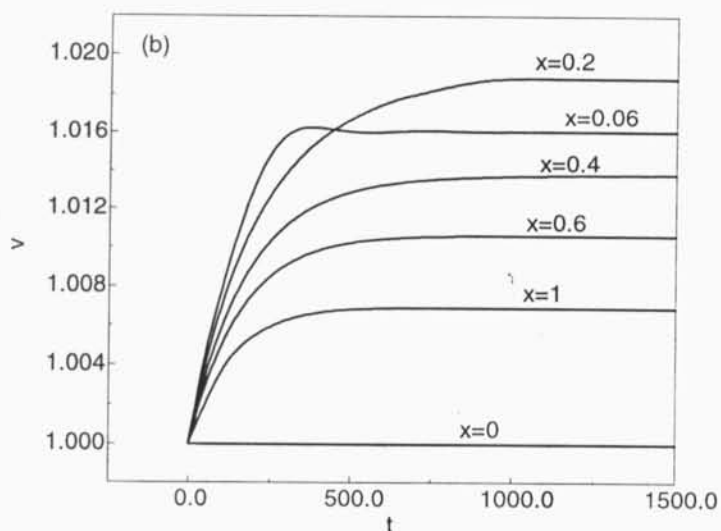


Figura 4.6 Reactor catalítico não isotérmico: histórias de temperatura

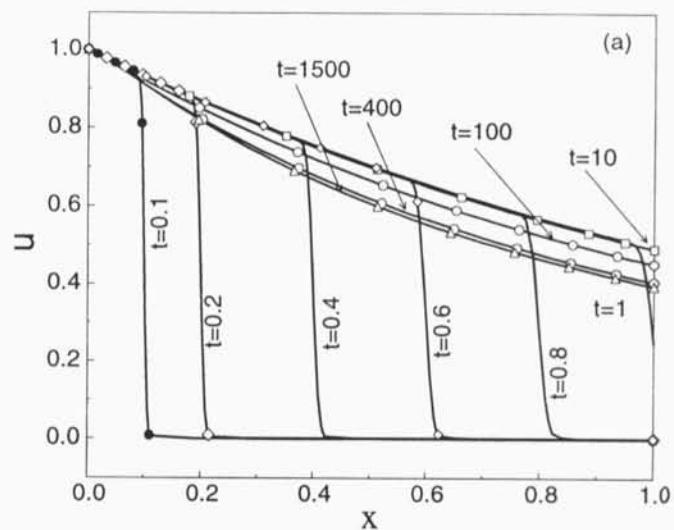


Figura 4.7 Reactor catalítico não isotérmico: perfis de concentração do reagente

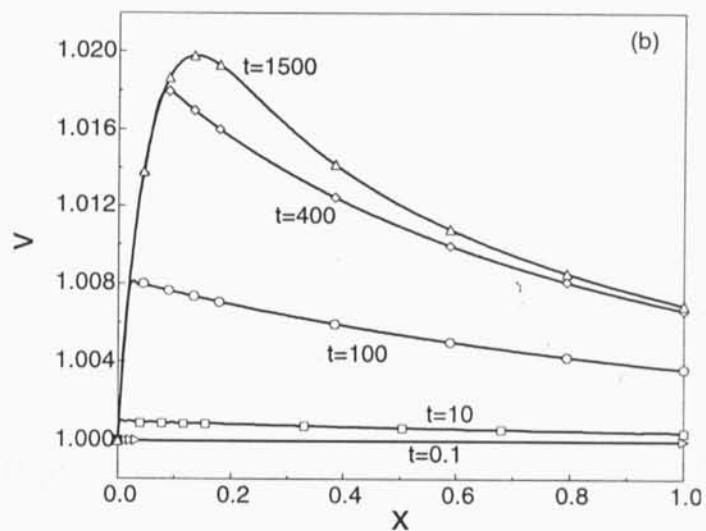


Figura 4.8 Reactor catalítico não isotérmico: perfis de temperatura

4.5 Cromatografia binária

4.5.1 O modelo

Relativamente a um sistema em que dois componentes, A e B , são adsorvidos numa coluna de adsorção de secção recta constante S e comprimento L , formulemos as seguintes hipóteses:

- Na fase fluida os componentes, A e B estão muito diluídos no solvente inerte C , sendo c_A e c_B as suas concentrações.
- O processo é isotérmico.
- O enchimento é constituído por um adsorvente sólido poroso granular.
- O processo de adsorção é descrito pelo modelo de equilíbrio.

Nestas condições e considerando um elemento de volume do leito de espessura Δz , o balanço de massa ao componente A durante o intervalo de tempo Δt conduz a

$$\begin{aligned} \Delta t \varepsilon S n_{Az}|_z - \Delta t \varepsilon S n_{Az}|_{z+\Delta z} &= \varepsilon_t \Delta z S \rho_A|_{t+\Delta t} - \varepsilon_t \Delta z S \rho_A|_t + \\ &+ (1 - \varepsilon) \Delta z S Q_A|_{t+\Delta t} - (1 - \varepsilon) \Delta z S Q_A|_t \end{aligned} \quad (4.11)$$

e o balanço de massa ao componente B no mesmo intervalo de tempo conduz a

$$\begin{aligned} \Delta t \varepsilon S n_{Bz}|_z - \Delta t \varepsilon S n_{Bz}|_{z+\Delta z} &= \varepsilon_t \Delta z S \rho_B|_{t+\Delta t} - \varepsilon_t \Delta z S \rho_B|_t + \\ &+ (1 - \varepsilon) \Delta z S Q_B|_{t+\Delta t} - (1 - \varepsilon) \Delta z S Q_B|_t \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde

- ε representa a porosidade do leito;
- ε_t a porosidade total;
- ρ a massa específica da solução, praticamente igual à massa específica total do solvente, $\rho = \rho_C$;
- Q_A e Q_B as concentrações mássicas dos componentes A e B no sólido (*massa do componente adsorvida por unidade de massa de adsorvente*);
- n_{Az} e n_{Bz} representam o fluxo mássico dos componentes A e B na direcção z ,

$$\begin{aligned} n_{Az} &= \rho_A v - \rho D'_{ax} \frac{\partial w_A}{\partial z} \\ n_{Bz} &= \rho_B v - \rho D'_{ax} \frac{\partial w_B}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.13)$$

- w_A e w_B a fracção mássica dos componentes A e B na fase fluida;
- ρ_A e ρ_B a concentração mássica dos componentes A e B na fase fluida, $\rho_A = \rho w_A$ e $\rho_B = \rho w_B$;
- D'_{ax} o coeficiente de dispersão axial no leito;
- v a velocidade mássica (pode ser considerada constante pois ρ é praticamente constante).

Sejam M_A e M_B as massas moleculares de cada um dos componentes e q_A e q_B as concentrações molares de cada um dos componentes na fase sólida, expressas em moles de componentes adsorvidas por unidade de massa de adsorvente. Então

$$q_A = \frac{Q_A}{M_A} \quad \text{e} \quad q_B = \frac{Q_B}{M_B}. \quad (4.14)$$

Como

$$\rho_A = c_A M_A \quad \text{e} \quad \rho_B = c_B M_B, \quad (4.15)$$

obtém-se,

$$\begin{aligned} n_{Az} &= M_A c_A v - M_A D'_{ax} \frac{\partial c_A}{\partial z} \\ n_{Bz} &= M_B c_B v - M_B D'_{ax} \frac{\partial c_B}{\partial z}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Deste modo, o balanço de massa de A pode ser expresso por

$$\begin{aligned} M_A c_A v \Delta t \varepsilon S|_z - M_A c_A v \Delta t \varepsilon S|_{z+\Delta z} - M_A D'_{ax} \frac{\partial c_A}{\partial z} \Delta t \varepsilon S|_z + \\ + M_A D'_{ax} \frac{\partial c_A}{\partial z} \Delta t \varepsilon S|_{z+\Delta z} = \varepsilon_t \Delta z S c_A M_A|_{t+\Delta t} - \\ - (1 - \varepsilon) \Delta z S M_A q_A|_t - \varepsilon_t \Delta z S c_A M_A|_t + (1 - \varepsilon) \Delta z S M_A q_A|_{t+\Delta t} \end{aligned} \quad (4.17)$$

e o balanço de massa de B por,

$$\begin{aligned}
 & M_B c_B v \Delta t \varepsilon S|_z - M_B c_B v \Delta t \varepsilon S|_{z+\Delta z} - M_B D'_{ax} \frac{\partial c_B}{\partial t} \Delta t \varepsilon S|_z + \\
 & + M_B D'_{ax} \frac{\partial c_B}{\partial t} \Delta t \varepsilon S|_{z+\Delta z} = \varepsilon_t \Delta z S c_B M_B|_{t+\Delta t} - \\
 & - (1 - \varepsilon) \Delta z S M_B q_B|_t - \varepsilon_t \Delta z S c_B M_B|_t + (1 - \varepsilon) \Delta z S M_B q_B|_{t+\Delta t}.
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Seja $D_{ax} = \varepsilon D'_{ax}$ e $u = \varepsilon v$ a velocidade superficial. Dividindo as equações anteriores respectivamente por $M_A S \Delta t \Delta z$ e $M_B S \Delta t \Delta z$ e fazendo Δt e Δz tenderem para zero, obtém-se,

$$-u \frac{\partial c_A}{\partial z} + D_{ax} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} = \varepsilon \frac{\partial c_A}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial q_A}{\partial t} \tag{4.19}$$

$$-u \frac{\partial c_B}{\partial z} + D_{ax} \frac{\partial^2 c_B}{\partial z^2} = \varepsilon \frac{\partial c_B}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial q_B}{\partial t}. \tag{4.20}$$

Introduzindo as normalizações $\zeta = \frac{z}{L}$, $\theta = \frac{t}{\tau}$, em que $\tau = \frac{L}{v}$ é o tempo de passagem, obtemos as equações,

$$-\frac{u}{L} \frac{\partial c_A}{\partial \zeta} + \frac{D_{ax}}{L^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \zeta^2} = \frac{\varepsilon}{\tau} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + \frac{1 - \varepsilon}{\tau} \frac{\partial q_A}{\partial \theta} \tag{4.21}$$

$$-\frac{u}{L} \frac{\partial c_B}{\partial \zeta} + \frac{D_{ax}}{L^2} \frac{\partial^2 c_B}{\partial \zeta^2} = \frac{\varepsilon}{\tau} \frac{\partial c_B}{\partial \theta} + \frac{1 - \varepsilon}{\tau} \frac{\partial q_B}{\partial \theta}. \tag{4.22}$$

Seja $Pe = \frac{uL}{D_{ax}}$ o número de Peclet. Uma vez que q_A e q_B são funções de c_A e de c_B , as equações do balanço de massa aos componentes A e B , são

$$\left(1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_A}{\partial c_A}\right) \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_A}{\partial c_B} \frac{\partial c_B}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial c_A}{\partial \zeta} \quad (4.23)$$

$$\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_B}{\partial c_A} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + \left(1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_B}{\partial c_B}\right) \frac{\partial c_B}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 c_B}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial c_B}{\partial \zeta}. \quad (4.24)$$

Consideremos as seguintes isotérmicas de equilíbrio

$$q_A = 1,57c_A + \frac{5,8 * 0,045c_A}{1 + 0,045c_A + 0,127c_B} \quad (4.25)$$

$$q_B = 1,57c_B + \frac{5,8 * 0,127c_B}{1 + 0,045c_A + 0,127c_B}. \quad (4.26)$$

O problema de evolução descrito por este modelo, sujeito a determinadas condições iniciais e de fronteira, pode ser resolvido numericamente usando o MEFM com aproximações polinomiais de grau arbitrário. As equações (4.23) e (4.24) podem ser escritas com a forma,

$$\mathbf{G} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \theta} = \mathbf{F}_1 \frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial \zeta^2} + \mathbf{f}_2, \quad (4.27)$$

em que $\mathbf{y} = [c_A, c_B]^T$, $\mathbf{F}_1$ é a matriz diagonal $\Lambda = (\frac{1}{Pe}, \frac{1}{Pe})$, $\mathbf{f}_2 = \left(-\frac{\partial c_A}{\partial \zeta}, -\frac{\partial c_B}{\partial \zeta}\right)^T$ e

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_A}{\partial c_A}\right) & \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_A}{\partial c_B} \\ \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_B}{\partial c_A} & \left(1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\partial q_B}{\partial c_B}\right) \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Resposta a um salto na concentração de alimentação

Admitamos que para $t < 0$ a coluna de adsorção é alimentada por um solvente puro a um caudal Q e que em $t = 0$ passa a ser alimentada por uma mistura de dois componentes diluídos no solvente inerte C , com concentrações $c_{A0} = c_{B0} = 5,0 \text{ g/l}$. Este caso corresponde ao modelo descrito pelas equações (4.20) sujeito à condição inicial dada por

$$c_A = c_B = 0, \quad 0 \leq \zeta \leq 1, \quad \theta = 0 \quad (4.29)$$

e às condições de fronteira

$$\frac{\partial c_A}{\partial \zeta} = Pe(c_A - c_{A0}), \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial \zeta} = Pe(c_B - c_{B0}), \quad (4.31)$$

para $\zeta = 0$ e $\theta \geq 0$ e

$$\frac{\partial c_A}{\partial \zeta} = \frac{\partial c_B}{\partial \zeta} = 0, \quad (4.32)$$

para $\zeta = 1$ e $\theta \geq 0$.

Resposta a um pulso na concentração de alimentação

Consideremos agora o caso de a coluna de adsorção ser submetida a um pulso na alimentação, com uma solução contendo os componentes A e B com as concentrações c_{A_0} e c_{B_0} , diluídos no solvente inerte C , através de uma válvula de injeção, durante um intervalo de tempo t_{inj} . Suponhamos que para $t < 0$ a coluna é alimentada por solvente puro a um caudal Q . Em $t = 0$ corta-se a passagem do solvente puro e permite-se a passagem de um certo volume da solução contendo os componentes A e B , com concentrações c_{A_0} e c_{B_0} , respectivamente, após o que se retoma a passagem do solvente puro. Seja V_{inj} o volume da solução injectada durante aquele intervalo de tempo a um caudal Q . Assim,

$$t_{inj} = \frac{V_{inj}}{Q}. \quad (4.33)$$

Seja $R = \frac{V_{inj}}{\varepsilon SL}$ a razão entre o volume da injeção e o volume de poros do leito.

Introduzindo, como no caso anterior, as normalizações nas variáveis independentes, o instante de tempo normalizado correspondente a $t = t_{inj}$ é,

$$\Delta\theta = \frac{t_{inj}}{\tau} = R. \quad (4.34)$$

Como em $\theta = \Delta\theta$ se corta a passagem da solução e se restabelece a passagem de solvente puro, podemos descrever este modelo do seguinte modo:

- Para $\theta \leq \Delta\theta$, o modelo coincide com o descrito anteriormente, o que corresponde às equações (4.20), sujeito à condição inicial (4.29) e às condições de fronteira (4.31) e (4.32).
- Para $\theta > \Delta\theta$, as equações que descrevem o modelo são as mesmas, mas a condição inicial é a distribuição de A e B em $\theta = \Delta\theta = R$. Quanto às condições de fronteira, tem-se,

$$\frac{\partial c_A}{\partial \zeta} = Pe \, c_A \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial \zeta} = Pe \, c_B, \quad (4.36)$$

para $\zeta = 0$ e $\theta \geq \Delta\theta$ e

$$\frac{\partial c_A}{\partial \zeta} = \frac{\partial c_B}{\partial \zeta} = 0, \quad (4.37)$$

para $\zeta = 1$ e $\theta \geq \Delta\theta$.

4.5.2 Simulação numérica

A simulação numérica apresentada nesta secção diz respeito à aplicação do MEFM aos modelos de adsorção multicomponente descritos. Seja $\varepsilon = 0,4$ o valor para a porosidade do leito. Foram realizadas simulações considerando diferentes valores de Pe . Para a resposta a um pulso na concentração de alimentação usaram-se diferentes valores de $\Delta\theta$, por forma a analisar, quer a resposta do sistema, quer o comportamento do método numérico em diferentes situações. Em todos os casos considerados foram usados os valores padrão para o valor da tolerância do integrador de EDO e para os valores das constantes de penalização.

Exemplo 1: Consideremos primeiramente a resposta a um salto na concentração de alimentação. Neste exemplo realizámos duas simulações nas mesmas condições de alimentação, mas usando diferentes valores para o número de Peclet, $Pe = 10^3$ e $Pe = 10^4$. Com um número de Peclet elevado é possível simular o modo como o método se comporta quando as equações que descrevem o modelo se tornam quase hiperbólicas. O intervalo de integração no tempo considerado foi $[0; 4, 5]$. Para o caso de $Pe = 10^3$ o domínio espacial foi discretizado definindo 5 elementos finitos em cada uma das malhas e usando aproximações seccionalmente polinomiais de grau 6 em cada elemento. Todos os integrais foram calculados com 6 pontos de quadratura no interior de cada intervalo de integração. O tempo de CPU para esta simulação foi de 27 segundos. Na simulação com um menor valor para a dispersão axial, $Pe = 10^4$, houve necessidade de considerar, para a malha associada ao componente A um maior número

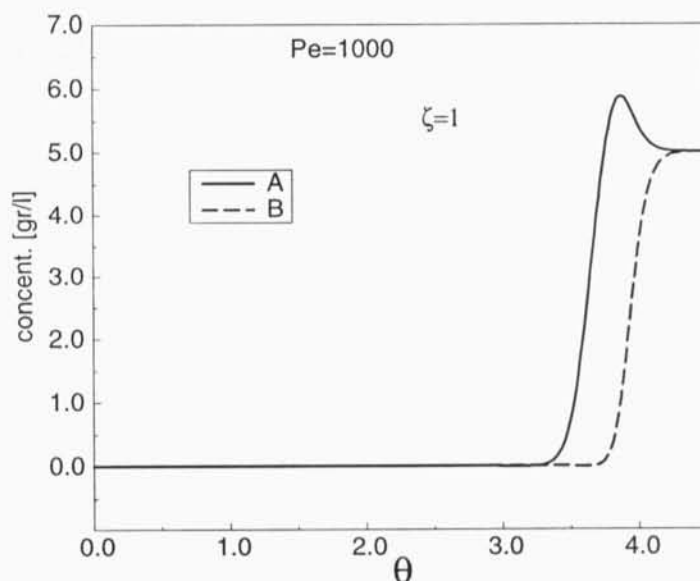


Figura 4.9 Cromatografia binária, resposta a um salto: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $Pe = 10^3$

de pontos, assim como aproximar a solução por polinómios de grau mais elevado. Deste modo e para a primeira malha espacial, associada ao componente A, definimos 7 elementos finitos e usámos aproximações seccionalmente polinomiais de grau 11 em cada elemento. Para a segunda malha espacial a discretização foi feita considerando 5 elementos finitos e usando aproximações seccionalmente polinomiais de grau 6 em cada elemento. Os integrais foram calculados com 11 pontos de quadratura no interior de cada intervalo de integração. Neste caso o tempo de CPU foi de 256 segundos.

A figura 4.9 mostra a história de concentração de cada um dos componentes em $\zeta = 1$. A figura 4.10 apresenta os perfis de concentração para alguns valores de θ , para $Pe = 10^4$. Os perfis das concentrações de A e de B mostram claramente

a formação das frentes cuja forma não varia e se movem com velocidade constante. Observe-se que é necessário um certo intervalo de tempo para a formação das frentes, uma vez que elas resultam da contribuição de dois factores opostos: as isotérmicas de equilíbrio favoráveis conduzem a frentes compressivas, enquanto que efeitos cinéticos, tais como a dispersão axial, conduzem a frentes dispersivas.

Nas figuras 4.11 e 4.12 pode-se observar o movimento de cada um dos nós de cada uma das malhas e nas figuras 4.13 e 4.14 as respectivas trajectórias, para $Pe = 10^3$. As figuras 4.15 e 4.16 ilustram o movimento dos nós de separação de cada uma das malhas espaciais, para $Pe = 10^4$. Como seria de esperar os nós seguem as frentes respectivas. Assim que a frente do componente B atinge o fim da coluna os nós iniciam um movimento que os coloca nas posições do estado estacionário. Para o componente A este movimento dos nós para as posições do estado estacionário é perturbado pela chegada do componente B .

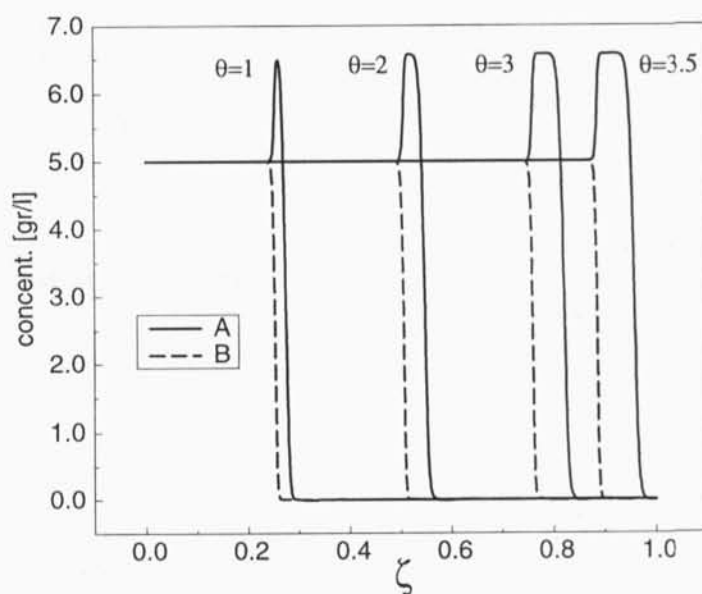


Figura 4.10 Cromatografia binária, resposta a um salto: perfis de concentração de A e B para diferentes tempos, $Pe = 10^4$

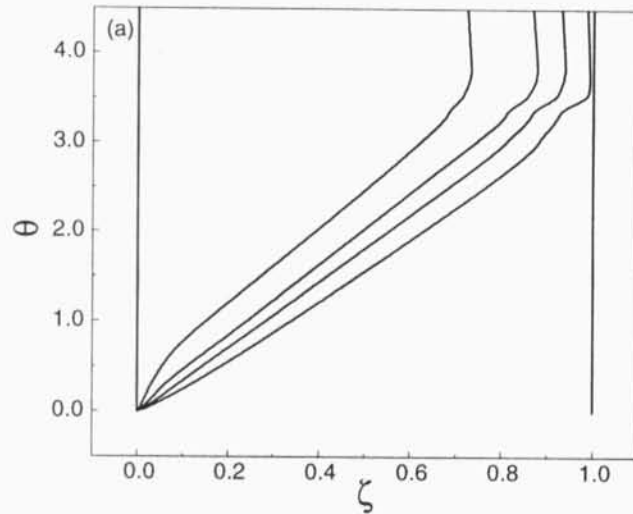


Figura 4.11 Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de A, $Pe = 10^3$

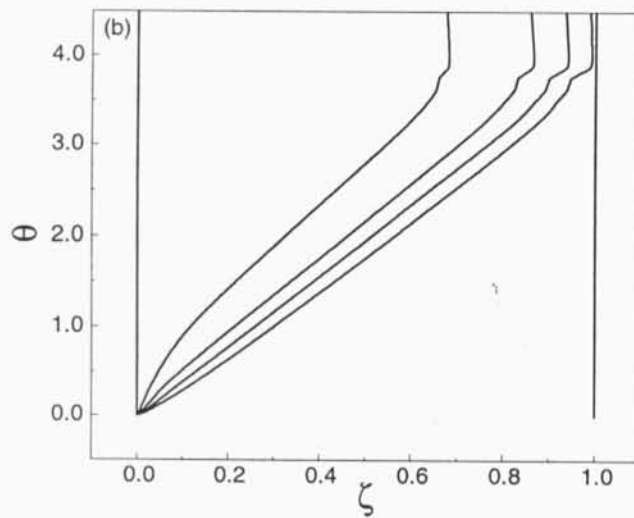


Figura 4.12 Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de B, $Pe = 10^3$

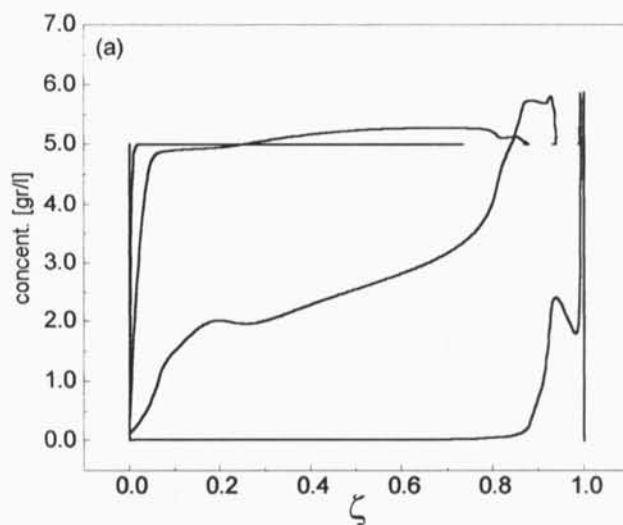


Figura 4.13 Cromatografia binária, resposta a um salto: trajectórias dos nós de separação da malha de A, $Pe = 10^3$

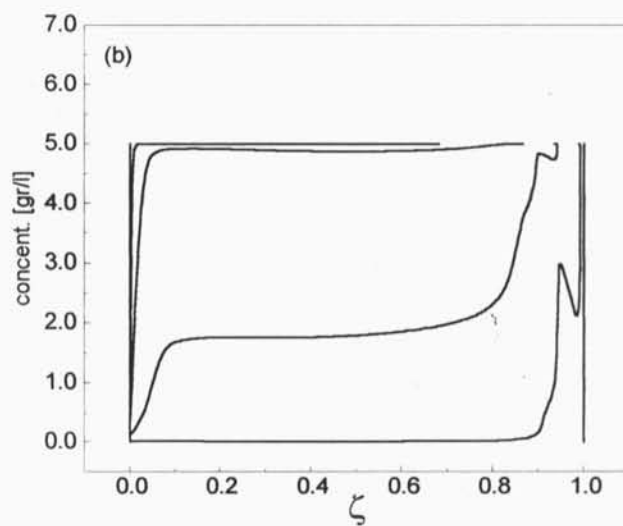


Figura 4.14 Cromatografia binária, resposta a um salto: trajectórias dos nós de separação da malha de B, $Pe = 10^3$

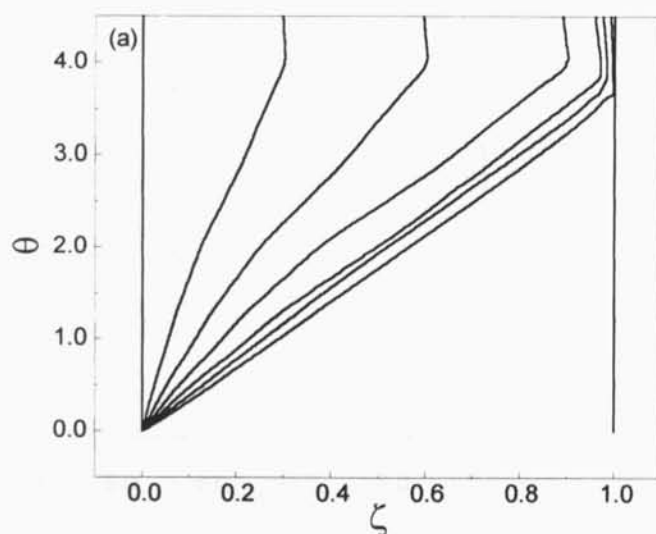


Figura 4.15 Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de A, $Pe = 10^4$

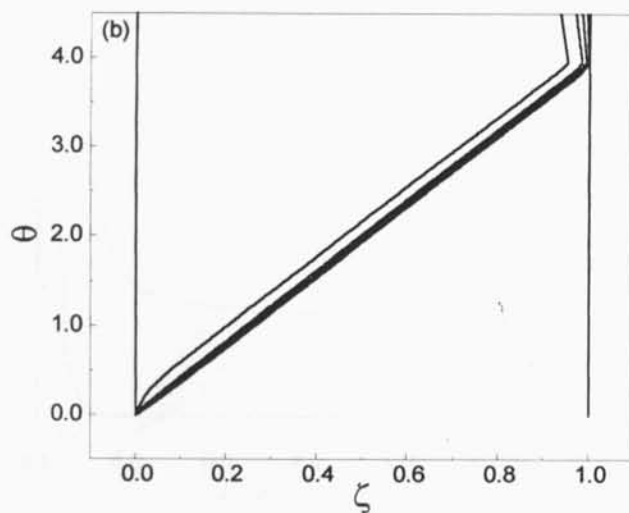


Figura 4.16 Cromatografia binária, resposta a um salto: movimento dos nós de separação da malha de B, $Pe = 10^4$

As figuras 4.17 e 4.18 ilustram o efeito da variação de Pe nas histórias das concentrações de A e de B , em $\zeta = 1$. As soluções numéricas obtidas são também comparadas com as soluções determinadas a partir da teoria de equilíbrio, na ausência de dispersão axial. Em ambas as simulações as histórias das concentrações mostram inicialmente um patamar correspondente ao estado inicial da coluna e, para tempos mais avançados, o patamar correspondente à concentração de alimentação. Entre estes dois estados desenvolvem-se duas frentes compressivas de concentrações, separadas por um patamar no componente A com concentração superior à concentração de A na alimentação. No caso de a dispersão axial ser baixa, o que corresponde a valores de Pe mais elevados, as frentes tornam-se abruptas. No limite, na ausência de dispersão axial, $Pe \rightarrow \infty$, as equações que descrevem o modelo tornam-se hiperbólicas e a teoria de equilíbrio prevê duas frentes abruptas separadas por um patamar. Seguindo um tratamento semelhante ao de Rhee [66] para a teoria de equilíbrio de sistemas multicomponente de Langmuir, é possível determinar os instantes em que os choques ocorrem, neste caso,

$$\theta = 3,657 \quad \text{e} \quad \theta = 3,948$$

assim como as concentrações dos componentes A e B no patamar intermédio,

$$c_A = 6,596 \text{ gr/l} \quad \text{e} \quad c_B = 0 \text{ gr/l}.$$

De facto, a equação de balanço de massa ao componente i , no caso de isotérmicas multicomponentes de Langmuir,

$$q_i = \frac{Qk_i c_i}{1 + \sum_i c_i}, \quad (4.38)$$

é dada por

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial \zeta} + \left(1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} Q k_i \frac{\partial y_i^L}{\partial \phi_i}\right) \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta} = 0, \quad (4.39)$$

com $y_i^L = \frac{q_i}{Q}$ e $\phi_i = k_i c_i$. Os estudos de Rhee [66] permitem determinar, para cada um dos componentes, os instantes em que os choques ocorrem, assim como as respectivas concentrações nos patamares. No caso presente a isotérmica é

$$q_i = m c_i + q_i^L, \quad (4.40)$$

com q_i^L dado por (4.38). A equação de balanço de massa ao componente i escreve-se,

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial \zeta} + \left(1 + \frac{1-\varepsilon}{1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} m} Q k_i \frac{\partial y_i^L}{\partial \phi_i}\right) \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta'} = 0, \quad (4.41)$$

com $\theta' = \frac{\theta}{1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} m}$. Como se constata a equação (4.41) é análoga à equação (4.39) pelo que, se pode aplicar a teoria de Rhee, substituindo θ por θ' .

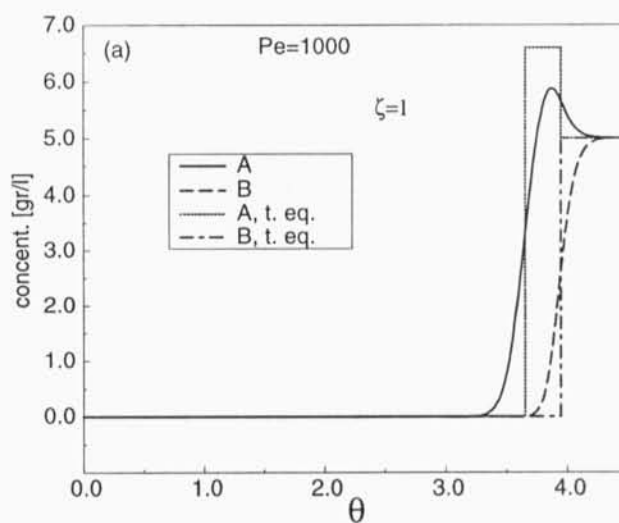


Figura 4.17 Cromatografia binária, resposta a um salto: histórias de concentração de A e B vs teoria de equilíbrio

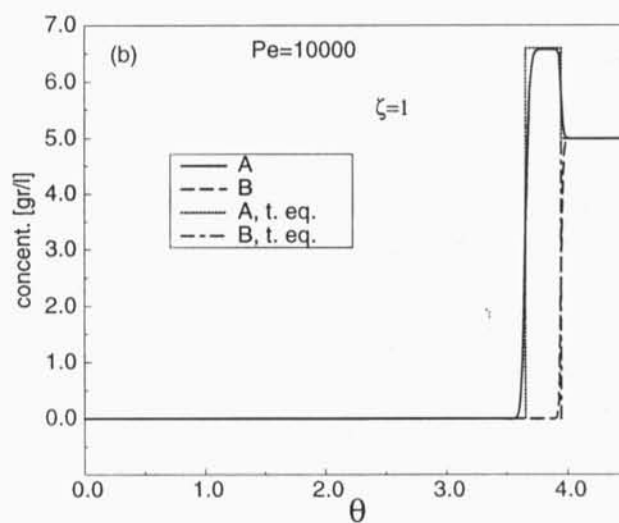


Figura 4.18 Cromatografia binária, resposta a um salto: histórias de concentração de A e B vs teoria de equilíbrio

Exemplo 2: Consideremos agora a resposta a um pulso na concentração de alimentação. Para ilustrarmos o desempenho do MEFM foram realizadas três simulações usando para valor de Peclet, $Pe = 10^4$ e para tempos de injeção, $\Delta\theta = 0,05$, $\Delta\theta = 0,5$ e $\Delta\theta = 1$. A estas três situações correspondem soluções com comportamentos diferentes, pelo que as exigências feitas ao método numérico para que este forneça soluções de qualidade são também diferentes. Relativamente a $\Delta\theta = 0,05$ foi possível obter a solução numérica usando os mesmos parâmetros que na segunda simulação do exemplo anterior. Assim, considerámos 7 elementos finitos para discretizar a primeira malha espacial com aproximações de grau 11 em cada elemento e 5 elementos finitos para discretizar a segunda malha espacial, com aproximações de grau 6 em cada elemento. O tempo de CPU foi de 301 segundos. Para as outras duas simulações, o número de nós em cada malha foi aumentado para evitar o aparecimento de pequenas oscilações. Definimos em cada uma das malhas 10 elementos finitos. Para o caso de $\Delta\theta = 0,5$ considerámos aproximações seccionalmente polinomiais de grau 6 em cada elemento, com excepção dos elementos 7, 8 e 9 da malha associada à concentração de A , em que definimos aproximações de grau 11. Para o caso de $\Delta\theta = 1$ considerámos, em ambas as malhas, aproximações seccionalmente polinomiais de grau 11 nos elementos 7, 8 e 9 e de grau 6 nos restantes. Para todos os outros parâmetros escolhidos considerámos os valores padrão. Os integrais foram calculados com 11 pontos de quadratura no interior de cada intervalo de integração. Os tempos de CPU foram de 1549 e 1584 segundos para $\Delta\theta = 0,5$ e $\Delta\theta = 1$, respectivamente.

As histórias das concentrações para os componentes A e B em $\zeta = 1$, para estes diferentes tempos de injeção são apresentados nas figuras 4.19, 4.20 e 4.21. Na figu-

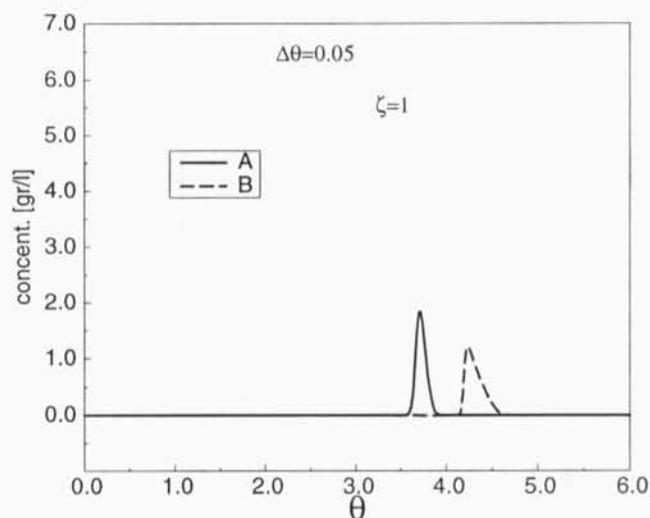


Figura 4.19 Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $\Delta\theta = 0,05$

ra 4.22 apresentamos os perfis de concentração para alguns valores de θ , para o caso de $\Delta\theta = 0,5$. Nos três casos o intervalo de tempo considerado para a integração foi $[0; 6]$. Escolhendo o caso em que $\Delta\theta = 0,5$ procurou-se analisar o efeito de Pe na solução. Assim, nas figuras 4.23 e 4.24 compara-se o efeito de Pe nas histórias das concentrações dos componentes A e B , em $\zeta = 1$. A figura 4.23 apresenta a solução numérica para $Pe = 10^3$ e a figura 4.24 a solução para $Pe = 10^4$, em que os perfis se mostram mais abruptos. Para a simulação com o valor de Peclet menor, $Pe = 10^3$, considerámos os mesmos valores padrão para os diferentes parâmetros, definindo 7 elementos finitos em cada uma das malhas e usando aproximações seccionalmente

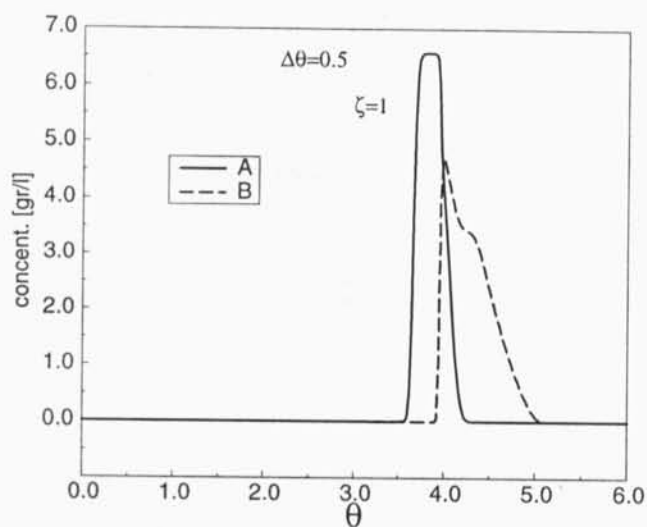


Figura 4.20 Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $\Delta\theta = 0,5$

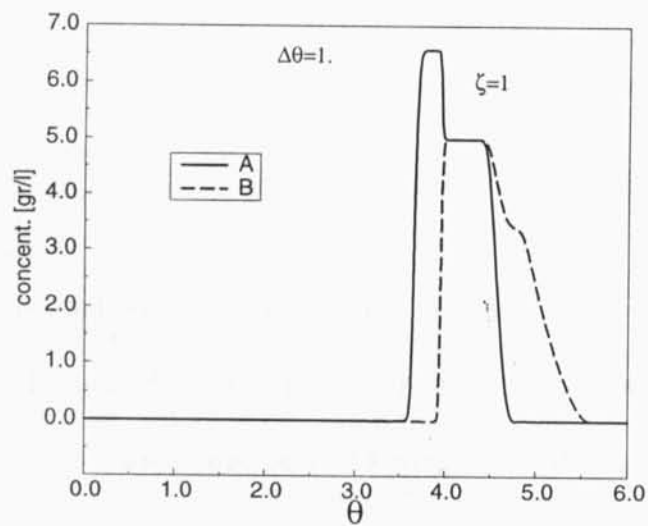


Figura 4.21 Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $\Delta\theta = 1$

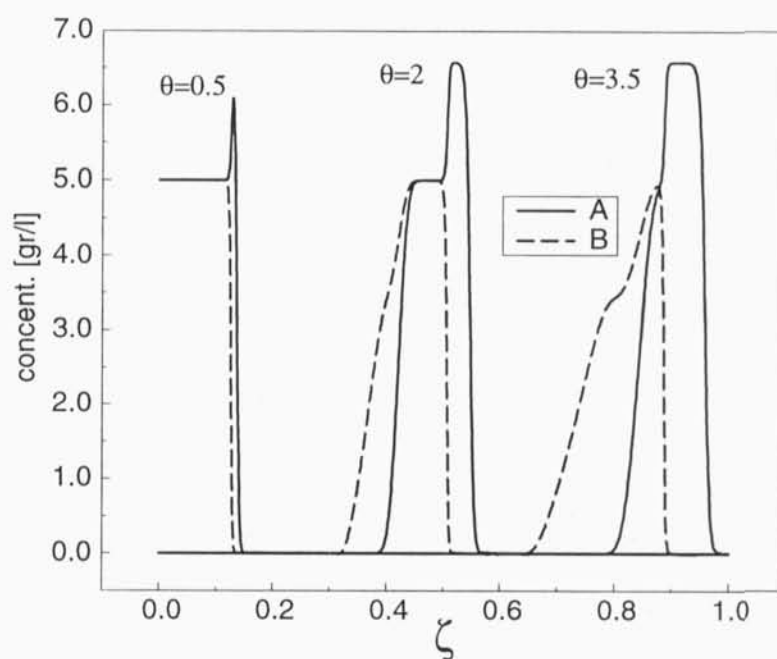


Figura 4.22 Cromatografia binária, resposta a um pulso: perfis de concentração de A e B , $Pe = 10^4$, $\Delta\theta = 0,5$

polinomiais de grau 6 em cada elemento, sendo os integrais calculados com 6 pontos de quadratura no interior de cada intervalo de integração. O tempo de CPU foi de 153 segundos.

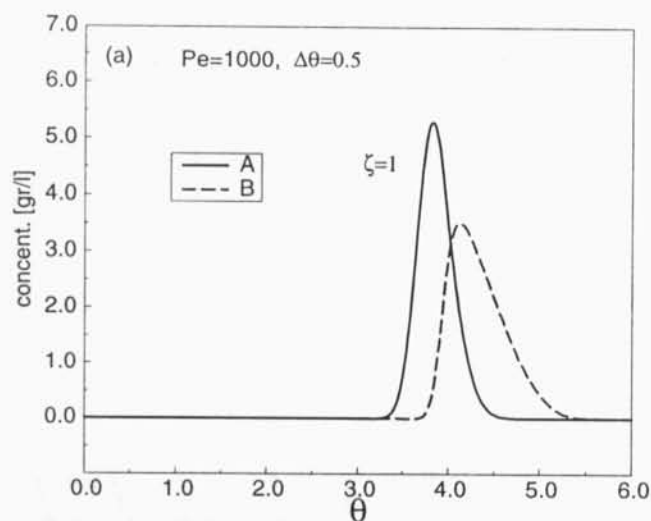


Figura 4.23 Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $Pe = 10^3$

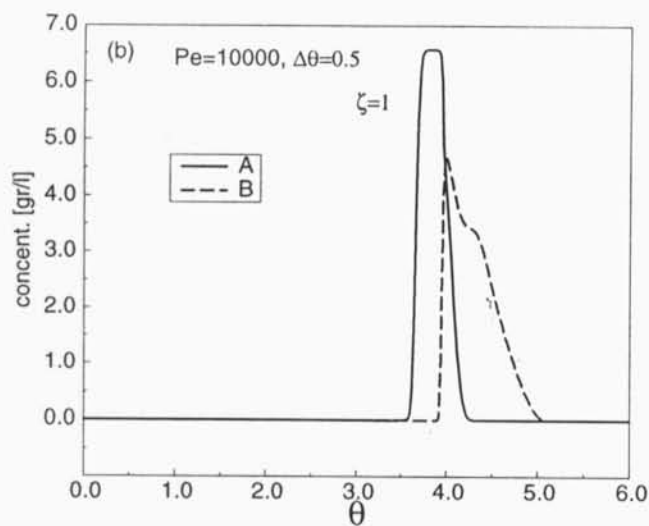


Figura 4.24 Cromatografia binária, resposta a um pulso: histórias de concentração de A e B em $\zeta = 1$, $Pe = 10^4$

4.6 Adsorção com modulação da pressão

Nesta secção o MEFM é aplicado à simulação da fase de pressurização de um processo de adsorção com modulação da pressão (AMP). Os processos de AMP baseiam-se na adsorção selectiva de um ou mais componentes de uma mistura gasosa a separar no sólido adsorvente. A tecnologia destes processos envolve a existência de um ou mais leitos e baseia-se na sequência de várias etapas, *Pressurização-Produção-Despressurização-Purga*. Na etapa de pressurização a mistura gasosa é admitida na coluna e a pressão é incrementada de p_l^* a p_h^* , permanecendo fechado o outro extremo da coluna. Atingida a pressão p_h^* no fundo da coluna, é aberta a válvula nessa extremidade, passando a mistura através dela. Dá-se, então início à etapa de produção em que o produto é mais rico no componente menos adsorvido. Imediatamente antes do componente mais adsorvido atingir o fundo da coluna esta etapa é interrompida e inicia-se a despressurização. Fecha-se a válvula do fundo da coluna e o gás sai em contracorrente pelo topo da coluna. O gás que sai vem enriquecido no componente que na etapa de pressurização foi mais adsorvido. O ciclo de regeneração que se inicia na fase de despressurização é completado com a etapa de purga. O modelo matemático usado para descrever o comportamento dinâmico do sistema de AMP baseia-se no modelo de equilíbrio. Partindo deste modelo, o *modelo geral* e, pressupondo que a variação de energia cinética é desprezável, bem como a acumulação da quantidade de movimento na equação de balanço de quantidade de movimento ao gás que ocupa os poros interparticulares, apresentamos outro modelo, o *modelo simplificado* que des-

creve de modo eficiente o comportamento do sistema. Com base nestes dois modelos vamos simular a fase de pressurização de um processo de AMP. Duas aplicações são apresentadas: a separação dos elementos de uma mistura de hélio-metano e a separação do oxigénio do azoto no ar. Inicialmente temos uma mistura binária em que uma das espécies é inerte. Os dados relativos ao sistema físico deste primeiro estudo baseiam-se na experimentação descrita por Cheng e Hill [21]. O segundo caso trata da separação de duas espécies activas. Os dados físicos relativos usados na sua simulação baseiam-se no trabalho de Mendes [55].

4.6.1 Descrição do modelo base

Consideremos a coluna formada por um leito de adsorção de comprimento L e secção recta S , precedido e seguido por duas câmaras, perfeitamente agitadas, com a mesma secção, de comprimento L_1^* e L_2^* e volume V_1 e V_2 , respectivamente, tal como a figura 4.25 ilustra. O enchimento do leito é granular e é constituído por partículas sólidas, adsorventes e porosas de diâmetro D_p . A massa específica aparente do enchimento referida ao volume das partículas é ρ_{ap} . A porosidade do leito é ε e a porosidade total ε_t . As câmaras não contêm qualquer enchimento. A fase fluida é constituída por uma mistura de dois gases A e B e a temperatura absoluta do sistema é T . Inicialmente, o sistema está à pressão p_l^* e a fracção molar da espécie A na mistura gasosa é $y_{A_{inic}}$. Seja t a variável tempo expressa em segundos e z a variável independente de espaço, expressa em metros. Em $t = 0$ a coluna é alimentada através de uma válvula, com uma mistura gasosa em que a fracção molar da espécie,

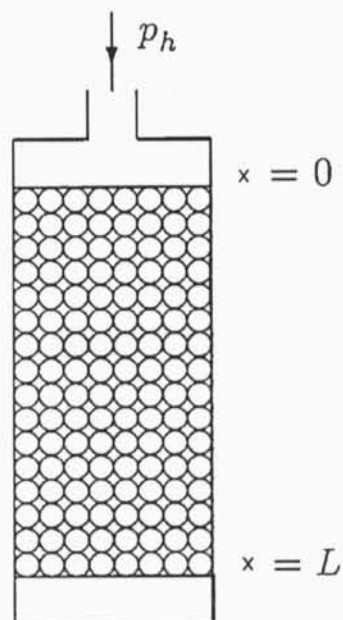


Figura 4.25 Esquema de uma coluna de adsorção. Fase de pressurização.

A , é $y_A = y_{A_{atim}}$, à pressão $p^* = p_h^*$. Para o desenvolvimento do modelo matemático admitimos válidas as seguintes hipóteses:

- Modelo de equilíbrio
- Sistema isotérmico
- Mistura gasosa ideal
- Na coluna o escoamento é subsônico e a relação entre as perdas de carga (em cada ponto da coluna e em cada instante) e as condições de escoamento prevalentes (nesse mesmo ponto e instante) estabelece-se instantaneamente

- Isotérmicas de Langmuir
- Despreza-se o efeito da transferência de massa entre o fluido intraparticular e o fluido interparticular nos perfis de velocidade, assim como a adição de quantidade de movimento ao gás que ocupa os poros interparticulares.

As equações que descrevem o sistema são:

Balanco de massa ao componente A: A equação do balanço de massa ao componente A na fase gasosa, num ponto qualquer da coluna e num qualquer instante, expresso em moles é

$$\varepsilon_t \frac{\partial c_A^*}{\partial t} + \rho_{ap}(1 - \varepsilon) \frac{\partial q_A^*}{\partial t} = -\varepsilon \frac{\partial}{\partial z}(c_A^* v^*) + \varepsilon D_{ax} \frac{\partial}{\partial z} \left(c^* \frac{M_B}{M} \frac{\partial y_A}{\partial z} \right), \quad (4.42)$$

sendo,

c_i^* a concentração molar da espécie i na fase gasosa, Kg mole m^{-3}

c^* a concentração molar total na fase gasosa, Kg mole m^{-3}

q_i^* a concentração molar da espécie i na fase sólida, Kg mole Kg $^{-1}$

v^* a velocidade média na direcção z , m s $^{-1}$

D_{ax} o coeficiente de dispersão axial z , m 2 s $^{-1}$

M_i a concentração molar da espécie i , Kg Kg mole $^{-1}$

M a concentração molar média na fase gasosa, Kg Kg mole $^{-1}$

y_i a fracção molar da espécie i

ρ_{ap} a massa específica aparente do adsorvente.

Balanco total de massa: A equação do balanço total de massa à fase gasosa num ponto qualquer da coluna e em qualquer instante, expresso em unidades de massa é

$$\varepsilon_t \frac{\partial \rho^*}{\partial t} + M_A \rho_{ap} (1 - \varepsilon) \frac{\partial q_A^*}{\partial t} + M_B \rho_{ap} (1 - \varepsilon) \frac{\partial q_B^*}{\partial t} = -\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* v^*), \quad (4.43)$$

sendo, ρ^* a massa específica da fase gasosa expressa em $Kg m^{-3}$.

Balanco de quantidade de movimento ao gás que ocupa os poros interparticulares: Considerando a equação de Ergun, a equação do balanço de quantidade de movimento ao gás que ocupa os poros interparticulares, na direcção axial da coluna, num ponto qualquer e em qualquer instante, escreve-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho^* v^*) = & -\frac{\partial}{\partial z} (\rho^* (v^*)^2) - \frac{\partial p^*}{\partial z} - 150 \frac{\mu^* v^*}{D_p^2} \left(\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right)^2 + \\ & + \text{sign} \left(\frac{\partial p^*}{\partial z} \right) 1,75 \frac{\rho^* (v^*)^2}{D_p} \left(\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right), \end{aligned} \quad (4.44)$$

sendo, p^* a pressão da mistura, μ^* a viscosidade da mistura expressa em Pas e $\text{sign}(\alpha) = \frac{\alpha}{|\alpha|}$, $\alpha \neq 0$. Esta equação foi deduzida tendo em conta que

$$\frac{\partial p^*}{\partial z} \leq 0 \implies v^* \geq 0 \implies F_z \geq 0 \quad (4.45)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial z} > 0 \implies v^* < 0 \implies F_z < 0, \quad (4.46)$$

em que F_z é a componente da força que o gás exerce sobre o sólido na direcção do escoamento. Admite-se que a viscosidade da mistura gasosa é definida através da relação de Curtiss e Hirschfelder [16],

$$\mu = \frac{1}{\mu_B} \left(\frac{y_A \mu_A}{y_A + y_B \phi_{AB}} + \frac{y_B \mu_B}{y_A \phi_{BA} + y_B} \right) \quad (4.47)$$

com,

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i^*}{\mu_j^*} \right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j} \right)^{1/4} \right]^2, i, j = A, B, \quad (4.48)$$

μ_i^* a viscosidade da espécie i , expressa em Pas, à temperatura e pressão do sistema.

Seja $G^* = \rho^* v^*$ a velocidade mássica. Definam-se as seguintes variáveis adimensionais

$$x = \frac{z}{L}; \quad \theta = \frac{t}{\tau_c}; \quad p_i = \frac{p_i^*}{p_{ref}} \quad i = A, B; \quad p = \frac{p^*}{p_{ref}}; \quad G = \frac{G^*}{G_{ref}}$$

em que,

$$\tau_c = \frac{L}{v_{ref}} \quad \text{e} \quad v_{ref} = \sqrt{\frac{RT}{M_B}} \quad (4.49)$$

R a constante dos gases perfeitos e

$$p_{ref} = p_h^* - p_l^* \quad \text{e} \quad G_{ref} = \frac{p_{ref}}{v_{ref}}. \quad (4.50)$$

Seja ainda

$$\mu = \frac{\mu^*}{\mu_B} \quad (4.51)$$

$$\rho = \rho^* \frac{RT}{p_{ref} M_B} = p_A \left(\frac{M_A}{M_B} - 1 \right) + p \quad (4.52)$$

$$\lambda = p_A \frac{\partial p}{\partial x} - p \frac{\partial p_A}{\partial x} \quad (4.53)$$

e Pe , o número de Peclet referido à velocidade de referência,

$$Pe = \frac{Lv_{ref}}{D_{ax}}. \quad (4.54)$$

O equilíbrio entre as concentrações molares das espécies A e B , na fase sólida, q_A^* e q_B^* e na gasosa, c_A^* e c_B^* é estabelecido pela isotérmica de Langmuir para misturas binárias,

$$q_i^* = f_i(c_A^*, c_B^*) = \frac{Q_i k_i c_i^*}{1 + k_A c_A^* + k_B c_B^*}, \quad i = A, B. \quad (4.55)$$

As condições de fronteira, relativas à pressão parcial e pressão total, são determinadas pelas câmaras adjacentes ao leito. Considerem-se as quatro variáveis extra,

$$p_A|_{x=0+}, \quad p|_{x=0+}, \quad p_A|_{x=1-}, \quad p|_{x=1-} \quad (4.56)$$

que representam a pressão parcial e pressão total no início do leito e no fim do leito, respectivamente. Os balanços de massa (ao componente A e total) feitos à entrada e saída das câmaras e do leito relacionam estas quatro variáveis e originam quatro equações diferenciais ordinárias:

$$\left. \frac{\partial p_A}{\partial \theta} \right|_{x=0+} = \frac{S_1}{SL_1} \frac{y_{A_{alim}}}{y_{A_{alim}} \omega + 1} G_{ent} - \quad (4.57)$$

$$\omega \left. \frac{\partial p_A}{\partial \theta} \right|_{x=0+} + \left. \frac{\partial p}{\partial \theta} \right|_{x=0+} = \frac{S_1}{SL_1} G_{ent} - \frac{\varepsilon}{L_1} G|_{x=0+} - \frac{\varepsilon}{L_1} \frac{1}{Pe} \frac{\lambda}{\rho} \bigg|_{x=0+} \quad (4.58)$$

$$\left. \frac{\partial p_A}{\partial \theta} \right|_{x=1-} = \frac{\varepsilon}{L_2} \frac{p_A}{\rho} \bigg|_{x=1-} G|_{x=1-} + \frac{\varepsilon}{L_2} \frac{1}{Pe} \frac{\lambda}{\rho} \bigg|_{x=1-} - \frac{S_2}{SL_2} \frac{y_{A_{exit}}}{y_{A_{exit}} \omega + 1} G_{exit} \quad (4.59)$$

$$\omega \left. \frac{\partial p_A}{\partial \theta} \right|_{x=1-} + \left. \frac{\partial p}{\partial \theta} \right|_{x=1-} = \frac{\varepsilon}{L_2} G|_{x=1-} - \frac{S_2}{SL_2} G_{exit} \quad (4.60)$$

onde $L_i = L_i^*/L$, G_{ent} é a velocidade mássica normalizada à entrada da câmara que precede o leito, G_{exit} é a velocidade mássica normalizada à saída da câmara que segue o leito e $\omega = \frac{M_A}{M_B} - 1$. Estas velocidades são obtidas a partir das fórmulas de escoamento de gases através de uma válvula. Não se impõe condição de fronteira relativa à velocidade mássica, G , porque esta é imposta pela pressão, p . Estas quatro equações são integradas conjuntamente com o sistema de EDO resultante da aplicação do MEFM ao sistema de EDP definido por (4.42), (4.43) e (4.44). A etapa de pressurização fica caracterizada pelas condições iniciais e pelas condições de alimentação.

As condições iniciais do sistema são,

$$p_A = y_{A_{inic}} p_l, \quad p = p \quad \text{e} \quad G = 0. \quad (4.61)$$

Em $t = 0$ é feita a alimentação nas seguintes condições

$$p_{A_{alim}} = y_{A_{alim}} p_{alim} \quad \text{e} \quad p_{alim} = p_h \quad (4.62)$$

que permanecem constantes durante a etapa de pressurização. Como nesta etapa a saída da coluna é fechada, temos que

$$G|_{exit} = 0, \quad \theta \geq 0. \quad (4.63)$$

Pelo mesmo motivo as condições de pressão parcial e de pressão à saída da câmara que segue a coluna são iguais às que reinam nessa câmara e iguais às que se verificam em $x = 1^-$. Na câmara de entrada verifica-se

$$p|_{ent} = \begin{cases} 0,53p_h & \text{se } p|_{x=0+} \leq 0,53p_h \\ p|_{x=0+} & \text{se } p|_{x=0+} \geq 0,53p_h \end{cases} \quad (4.64)$$

$$p_{A|ent} = y_{A_{alim}} p|_{ent} \quad (4.65)$$

$$G|_{ent} = \begin{cases} 1,410 \times 10^{-5} C_{ent} & \text{se } p|_{x=0+} \leq 0,53p_h \\ 1,663 \times 10^{-5} C_{ent} \sqrt{1 - \left(\frac{p|_{x=0+}}{p_h}\right)^2} & \text{se } p|_{x=0+} \geq 0,53p_h \end{cases} \quad (4.66)$$

sendo

$$C_{ent} = p_h \frac{C_v}{S_i} y_{A_{atim}} \omega + 1, \quad (4.67)$$

S_1 a secção recta da entrada da câmara que precede o leito e C_v o coeficiente de descarga da válvula. As condições de pressão parcial e de pressão nos outros pontos da câmara que antecede a coluna são iguais às que se verificam em $x = 0^+$.

Modelo Geral

As variáveis independentes normalizadas são x e θ . Para variáveis dependentes adimensionais considerou-se, a pressão parcial da espécie A , $p_A = p_A(x, \theta) = py_A$, a pressão total, $p = p_A + p_B = p(x, \theta)$ e a velocidade mássica $G = G(x, \theta)$. As equações que constituem o sistema de EDP, formadas a partir das equações de balanço de massa ao componente A , de balanço total de massa e de balanço de quantidade de movimento ao gás que ocupa os poros interparticulares, podem, após alguma manipulação algébrica, ser definidas na forma matricial por

$$\mathbf{G}\mathbf{Y}_\theta = \mathbf{F}\mathbf{Y}_{xx} + \mathbf{H} \quad (4.68)$$

em que,

$$\mathbf{Y}_\theta = \left[\frac{\partial p_A}{\partial \theta}, \frac{\partial p}{\partial \theta}, \frac{\partial G}{\partial \theta} \right]^T, \quad (4.69)$$

$$\mathbf{Y}_{xx} = \left[\frac{\partial^2 p_A}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} \right]^T, \quad (4.70)$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \varepsilon_t + \rho_{ap}(1 - \varepsilon)K_A & \rho_{ap}(1 - \varepsilon)\frac{\partial q_A^*}{\partial c_B^*} & 0 \\ \varepsilon_t\omega + \left[\frac{M_A}{M_B}K_A + K_B \right] & \varepsilon_t\omega + \left[\frac{M_A}{M_B}K_A + K_B \right] & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.71)$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \varepsilon \frac{1}{Pe} \frac{1}{\rho} p & \varepsilon \frac{1}{Pe} \frac{1}{\rho} p_A & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.72)$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon}{\rho} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{Pe} + p_A G \right) - \frac{\partial p_A}{\partial x} G - p_A \frac{\partial G}{\partial x} \right] \\ -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial x} \\ -2G \frac{\partial G}{\partial x} + \left(\frac{G}{\rho} \right)^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial p}{\partial x} - \varepsilon \frac{v_{ref}}{P_{BK}} \frac{\mu}{\rho} G + \text{sign} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) \frac{1}{\beta} \frac{G^2}{\rho} \end{bmatrix}, \quad (4.73)$$

sendo

$$\begin{aligned} K_A &= \frac{\partial q_A^*}{\partial c_A^*} - \frac{\partial q_A^*}{\partial c_B^*}, & K_B &= \frac{\partial q_B^*}{\partial c_A^*} - \frac{\partial q_B^*}{\partial c_B^*} \\ P_{BK} &= \frac{D_p^2 \varepsilon^3 p_{ref}}{150(1 - \varepsilon)^2 \mu_B L}, & \beta &= \frac{D_p \varepsilon}{1,75(1 - \varepsilon)L} \end{aligned} \quad (4.74)$$

Modelo Simplificado

Sejam x e θ as variáveis independentes normalizadas. Desprezemos, tal como em Sereno e Rodrigues [69], a variação de energia cinética e a acumulação da quantidade de movimento na equação de balanço de quantidade de movimento ao gás que ocupa os poros interparticulares. Deste modo podemos exprimir a velocidade mássica em função da pressão parcial de A e da pressão total. Escolhendo para variáveis dependentes normalizadas, a pressão parcial da espécie A , $p_A = p_A(x, \theta) = py_A$ e a pressão total, $p = p_A + p_B = p(x, \theta)$, a velocidade mássica normalizada é dada por,

$$G = \text{sign} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) \left(\alpha \mu - \sqrt{(\alpha \mu)^2 + \beta \rho \left| \frac{\partial p}{\partial x} \right|} \right), \quad (4.75)$$

onde

$$\alpha = \frac{\varepsilon^2 D_p v_{ref}}{3,5(1 - \varepsilon) L P_{BK}}. \quad (4.76)$$

As equações que constituem o sistema de EDP, formadas a partir das equações de balanço de massa ao componente A e de balanço total de massa podem, após manipulação algébrica, ser definidas por

$$\mathbf{G} \mathbf{Y}_\theta = \mathbf{F} \mathbf{Y}_{xx} + \mathbf{H}, \quad (4.77)$$

onde,

$$\mathbf{Y}_\theta = \left[\frac{\partial p_A}{\partial \theta}, \frac{\partial p}{\partial \theta} \right]^T, \quad (4.78)$$

$$\mathbf{Y}_{xx} = \left[\frac{\partial^2 p_A}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right]^T, \quad (4.79)$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \varepsilon_t + \rho_{ap}(1 - \varepsilon)K_A & \rho_{ap}(1 - \varepsilon)\frac{\partial q_A^*}{\partial c_B^*} \\ \varepsilon_t\omega + \left[\frac{M_A}{M_B}K_A + K_B \right] & \varepsilon_t + \rho_{ap}(1 - \varepsilon) \left[\frac{M_A}{M_B}\frac{\partial q_A^*}{\partial c_A^*} + \frac{\partial q_B^*}{\partial c_B^*} \right] \end{bmatrix}, \quad (4.80)$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \varepsilon \frac{1}{Pe} \frac{1}{\rho} p & -\varepsilon p_A \left(\frac{1}{Pe} \frac{1}{\rho} - \varphi \beta \right) \\ 0 & \varepsilon \varphi \beta \rho \end{bmatrix}, \quad (4.81)$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon}{\rho} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{Pe} + p_A G \right) - \frac{\partial p_A}{\partial x} G - p_A \gamma \right] \\ -\varepsilon \gamma \end{bmatrix}, \quad (4.82)$$

sendo

$$\varphi = \left(2 \sqrt{(\alpha \mu)^2 + \beta \rho \left| \frac{\partial p}{\partial x} \right|} \right)^{-1} \quad (4.83)$$

e

$$\gamma = p_A \text{sign} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) \left[\alpha \frac{\partial \mu}{\partial x} - \varphi \left(2 \alpha^2 \mu \frac{\partial \mu}{\partial x} + \beta \frac{\partial \rho}{\partial x} \left| \frac{\partial p}{\partial x} \right| \right) \right] \quad (4.84)$$

4.6.2 Separação de uma mistura de hélio-metano

Neste caso apenas um dos componentes é adsorvido, pelo que as equações do modelo são um caso particular das apresentadas. Seja A o componente activo, o metano. A isotérmica de Langmuir é

$$q_A = f(c_A) = \frac{Q_A k_A c_A^*}{1 + k_A c_A^*}, \quad (4.85)$$

com $Q_A = 5,94 \times 10^{-3} \text{Kg mole Kg}^{-1}$ e $k_A = 4,62 \text{Kg mole}^{-1} \text{m}^3$. Os dados relativos a este problema são [21],

- $\varepsilon = 0,4470$
- $\mu_A = 0,1106 \times 10^{-4} \text{Kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
- $\varepsilon_t = 0,7760$
- $\mu_B = 0,91406 \times 10^{-4} \text{Kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
- $p_h^* = 5 \text{ atm}$
- $D_{col} = 0,0109 \text{ m}$
- $p_l^* = 1 \text{ atm}$
- $S_1 = 0,01 \times S$
- $M_A = 16,04 \text{ Kg Kg mole}^{-1}$
- $\rho_{ap} = 850 \text{ Kg m}^{-3}$
- $M_B = 4,003 \text{ Kg Kg mole}^{-1}$
- $D_p = 0,315 \times 10^{-4} \text{ m}$
- $T = 298^\circ \text{K}$
- $V_1 = 9,2 \times 10^{-6} \text{ m}^3$
- $L = 0,914 \text{ m}$
- $V_2 = 10,6 \times 10^{-6} \text{ m}^3$.

t_f	p_f
t_f^1	$0,95p_h$
t_f^2	$0,95p_h + 0,05p_l$
t_f^3	$0,99p_l$
t_f^4	$0,99p_h + 0,01p_l$
t_f^5	$p_h - 0,01p_l$

Tabela 4.1 Critérios de paragem da fase de pressurização

A variável de tempo t varia de 0 a t_f , sendo t_f o instante em que p_f , a pressão total no fim da coluna, $x = 1$, atinge um determinado valor. Estabelecemos os cinco critérios que figuram na tabela 4.1. Nos exemplos que se seguem a simulação é terminada quando $p_f = p_h - 0,01p_l$.

Exemplo 1: Neste exemplo comparamos o desempenho do *modelo simplificado* relativamente ao *modelo geral*. Seja $C_v = 0,02$ o valor da constante de descarga da válvula e $Pe = 40000$ o valor de Peclet referido à velocidade de referência. A fracção molar de A na alimentação é $y_{A_{atim}} = 0,5$ e a fracção molar inicial de A é $y_{A_{inic}} = 1$. Seja $V_1 = 9,2 \times 10^{-6} \text{ m}^3$ e $V_2 = 10,6 \times 10^{-6} \text{ m}^3$. Relativamente aos parâmetros necessários ao funcionamento do método, considerámos, no *modelo simplificado* 8 elementos finitos em cada um dos sistemas de elementos finitos, colocando 5 nós interiores em cada elemento. Os integrais foram calculados com 6 pontos interiores de quadratura. No que diz respeito à simulação do *modelo geral* a discretização espacial foi obtida com 8 elementos finitos em cada uma das três malhas, colocando 5 nós interiores em cada elemento. Os integrais foram calculados com 11 pontos interiores

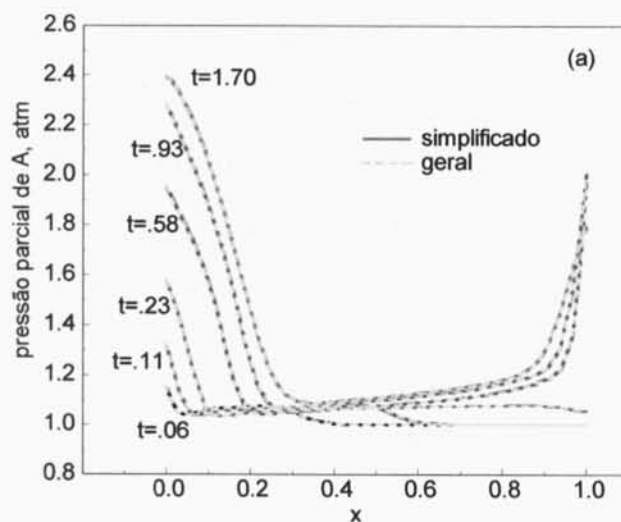


Figura 4.26 AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de pressão parcial de A , p_A^*

de quadratura. As figuras 4.26, 4.27, 4.28 e 4.29 mostram os perfis de pressão parcial para o componente A , pressão total, velocidade mássica e fracção molar de A para diferentes instantes, relativos às duas simulações, podendo-se constatar que a qualidade dos perfis é semelhante. Como era de esperar a simulação com o modelo geral envolve um volume de cálculo bastante superior, o que se traduz no tempo de CPU de 8600 segundos para a simulação feita com o *modelo geral*, contra os 238 segundos para a simulação feita com o *modelo simplificado*. Na tabela 4.2 podemos comparar os instantes para o quais se obtém, para cada um dos modelos o fim da pressurização, t_f e ainda o instante em que em que $p|_{x=0+}$ atinge $0,53p_h$, instante esse que designamos por t_c .

Neste modelo o número de Peclet usado é o número de Peclet de referência,

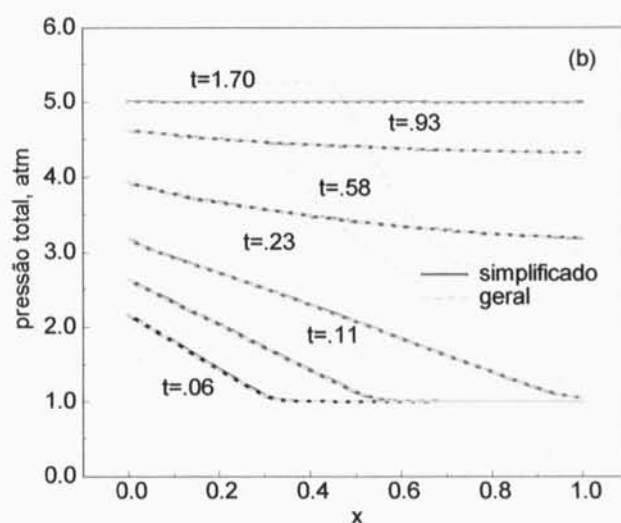


Figura 4.27 AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de pressão total, p^*

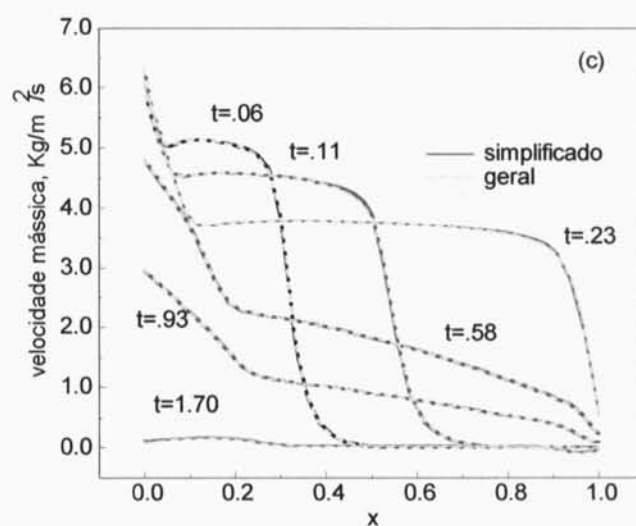


Figura 4.28 AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de velocidade mássica, G^*

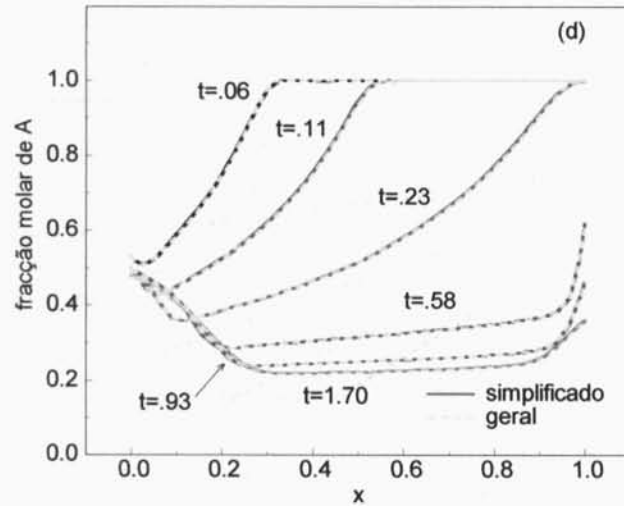


Figura 4.29 AMP, hélio-metano, exemplo 1: modelo simplificado vs modelo geral: perfis de fracção molar de A, y_A

Pe que pode ser facilmente relacionado com o número de Peclet, $Pe^{\text{real}} = \frac{Lv^*}{D_{ax}}$, em cada instante e em cada ponto da coluna. A relação entre eles é estabelecida através de

$$Pe^{\text{real}} = Pe \frac{v^*}{v_{\text{ref}}}, \quad (4.86)$$

Como $v^* \ll v_{\text{ref}}$ segue-se que $Pe^{\text{real}} \ll Pe$. A figura 4.30 apresenta o valor de Pe^{real} em função do tempo, à entrada da coluna, $x = 0$, em $x = 0,2$ e em $x = 0,6$.

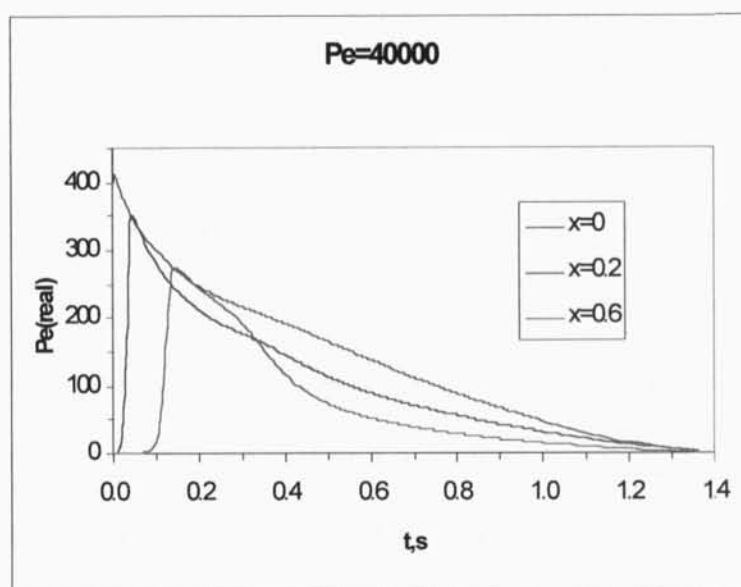


Figura 4.30 AMP, hélio-metano, Pe vs Pe^{real}

	<i>modelo simplificado</i>	<i>modelo geral</i>
t_c	0,1103s	0,1108s
t_f	1,702s	1,704s

Tabela 4.2 AMP, separação de hélio-metano, exemplo 1: tempos de pressurização para os modelos *simplificado* e *geral*

Exemplo 2: Neste exemplo analisámos o efeito dos volumes mortos na solução do problema. Considerando as condições de operação do exemplo 1, fizeram-se variar os valores dos volumes mortos, tal como mostra a tabela 4.3. Uma vez que o volume do leito é $V = 8.5 \times 10^{-5} \text{ m}^3$, o caso III simula perfeitamente uma coluna em que os volumes mortos são desprezáveis. O caso II simula uma coluna com volume morto apenas na câmara que antecede o leito, sendo o outro desprezável. O caso I uma coluna com volumes mortos em ambos os topos. As figuras 4.31, 4.32 e 4.33 mostram os perfis de velocidade mássica para os casos I, II e III, respectivamente. Nas figuras 4.34, 4.35 e 4.36 podemos comparar o efeito dos volumes mortos nas histórias da pressão parcial de A. As histórias para a velocidade mássica são apresentadas nas figuras 4.37, 4.38 e 4.39. As histórias apresentadas foram traçadas nos extremos da coluna, em $x = 0$ e $x = 1$ e ainda em $x = 0,05$, $x = 0,1$, $x = 0,15$, $x = 0,2$, $x = 0,25$, $x = 0,3$, $x = 0,4$ e $x = 0,6$. Como Rodrigues *et al.* [67] referem, a formação ou não de frentes abruptas depende, do valor de $(py_A)_{alim}$ relativamente ao valor de $(py_A)_{inic}$. Neste caso $(py_A)_{alim} > (py_A)_{inic}$, o que sugere o desenvolvimento de frentes abruptas. No entanto, a presença do volume morto à entrada da câmara atenua a variação da fracção molar e à entrada da coluna as frentes de descontinuidade dispersam-se. No que diz respeito aos parâmetros necessários ao funcionamento do método, considerámos, no que concerne ao caso II os mesmos parâmetros que foram usados para o caso I e que corresponde ao exemplo 1, usando o modelo simplificado. Para o caso III, considerámos 10 elementos finitos em cada um dos sistemas de elementos

	I	II	III
V_1	$9,2 \times 10^{-6} m^3$	$9,2 \times 10^{-6} m^3$	$9,2 \times 10^{-8} m^3$
V_2	$10,6 \times 10^{-6} m^3$	$10,6 \times 10^{-8} m^3$	$10,6 \times 10^{-8} m^3$

Tabela 4.3 AMP, separação de hélio-metano, exemplo 2: volumes mortos para três simulações distintas

	I	II	III
t_f	1.7s	1.4s	1.3s
CPU	338s	125s	764s

Tabela 4.4 AMP, separação de hélio-metano, exemplo2: tempo de CPU para diferentes volumes mortos

finitos, colocando 5 nós interiores em cada elemento. Usámos $tol_1 = 10^{-5}$ e $tol = tol_2 = 10^{-3}$ e considerámos as constantes de penalização padrão, com excepção de c_1 que, para o primeiro e segundo elementos da malha associada a p_A , tomou o valor $c_1 = 10^{-6}$. A tabela (4.4) mostra o tempo de CPU para as simulações respeitantes a cada caso.

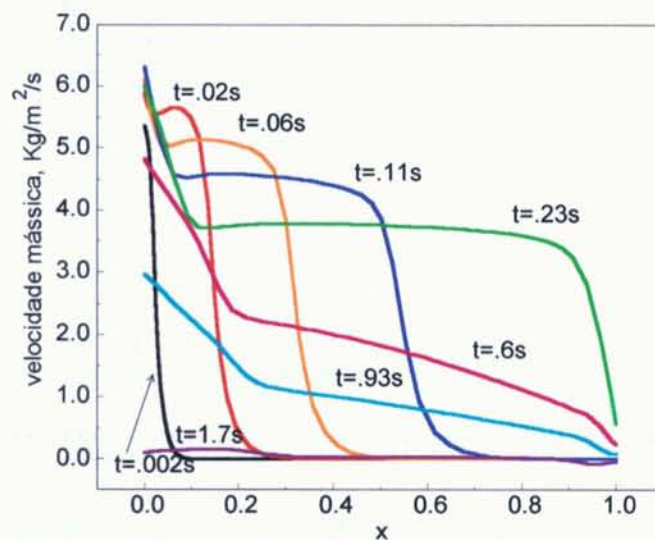


Figura 4.31 AMP, de hélio-metano, exemplo 2: perfis de velocidade mássica, G^* , caso I

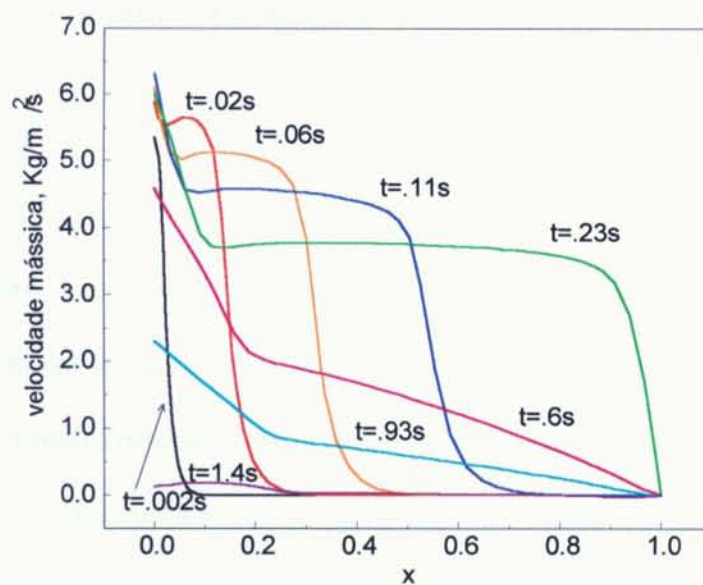


Figura 4.32 AMP, hélio-metano, exemplo 2: perfis de velocidade mássica, G^* , caso II

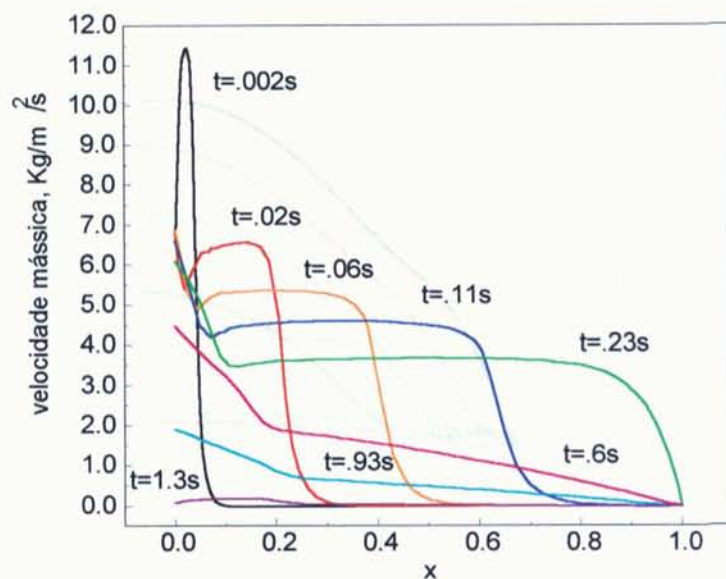


Figura 4.33 AMP, hélio-metano, exemplo 2: perfis de velocidade mássica, G^* , caso III

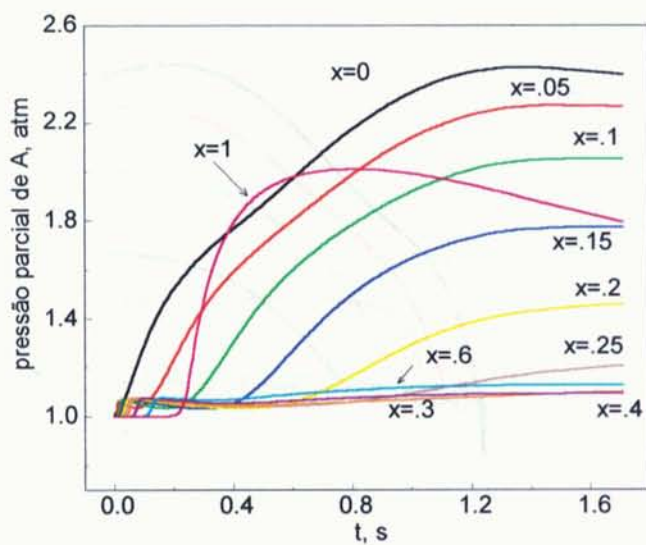


Figura 4.34 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de pressão parcial de A, p_A^* , caso I

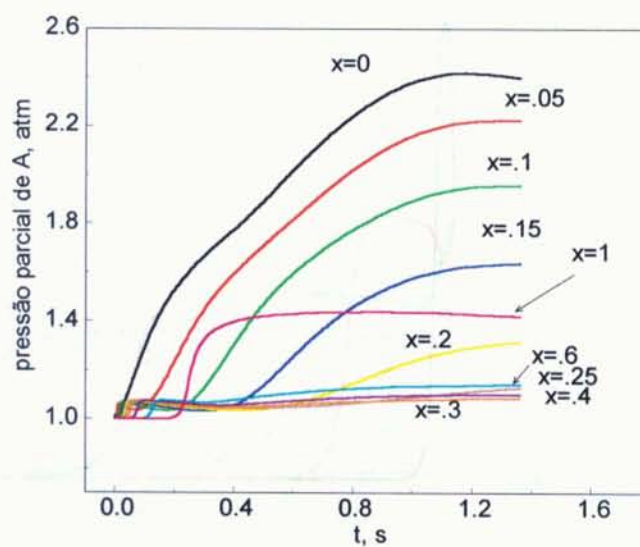


Figura 4.35 AMP, de hélio-metano, exemplo 2: histórias de pressão parcial de A, p_A^* , caso II

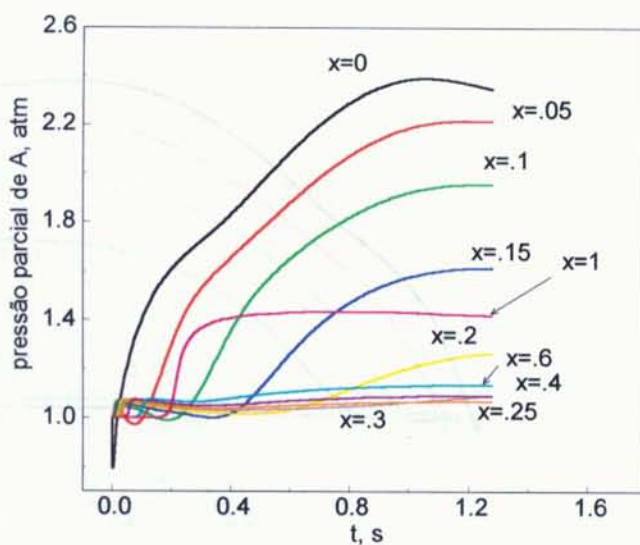


Figura 4.36 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de pressão parcial de A, p_A^* , caso III

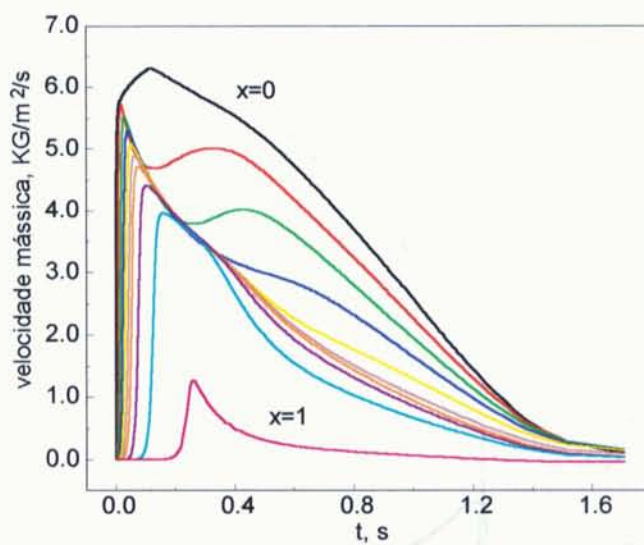


Figura 4.37 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de velocidade mássica, G^* , caso I

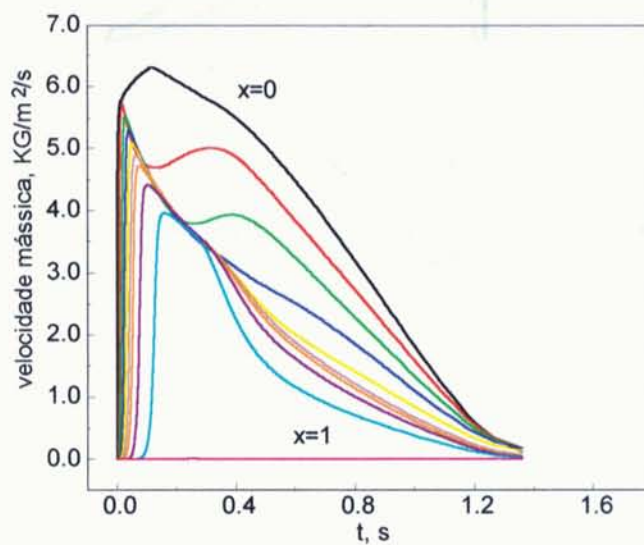


Figura 4.38 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de velocidade mássica, G^* , caso II

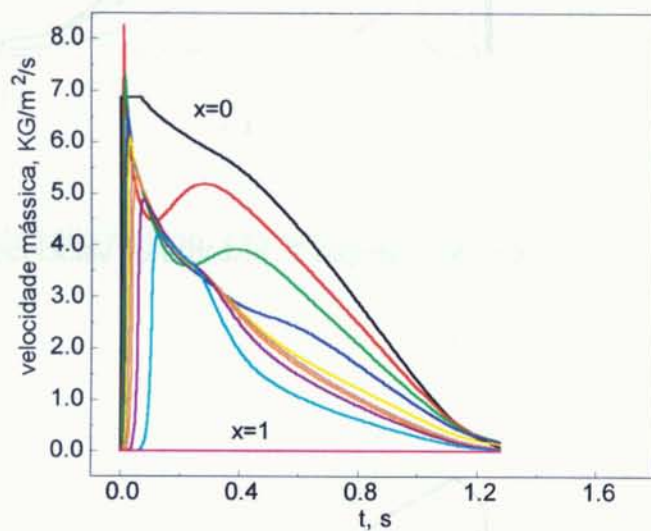


Figura 4.39 AMP, hélio-metano, exemplo 2: histórias de velocidade mássica, G^* , caso III

Exemplo 3: Tomando os valores dos volumes mortos do exemplo 2, caso II e as mesmas condições de operação consideraram-se diferentes valores de Pe . As figuras 4.40, 4.41 e 4.42 mostram os perfis de pressão parcial de A , para $Pe = 40000$, $Pe = 10000$ e $Pe = 1000$, respectivamente. Para estes mesmos valores de Pe temos, nas figuras 4.43, 4.44 e 4.45 os perfis de pressão total, nas figuras 4.46, 4.47 e 4.48 os perfis de velocidade mássica e nas figuras 4.49, 4.50 e 4.51 os perfis da fracção molar de A . Os perfis de velocidade mássica ilustram bem o que se passa na coluna. Observe-mos, que para valores de Pe baixos, esses perfis são funções monótonas decrescentes, enquanto que para Pe elevados os perfis iniciais apresentam dois máximos relativos. Para valores de Pe baixos verifica-se que os valores da pressão parcial de A tendem para uma situação estacionária, sendo reduzida a sua variação ao longo da coluna no fim da pressurização. Pelo contrário, para valores de Pe elevados em que os perfis de p_A apresentam variações significativas. Isto pode ser observado nas figuras 4.40, 4.41 e 4.42. As figuras 4.52, 4.53 e 4.54 mostram as histórias da pressão parcial de A , traçadas nos extremos da coluna, em $x = 0$, $x = 0,05$, $x = 0,1$, $x = 0,15$, $x = 0,2$, $x = 0,25$, $x = 0,3$, $x = 0,4$, $x = 0,6$ e $x = 1$ e as figuras 4.55, 4.56 e 4.57 as histórias da pressão total para os mesmos valores de x e para $Pe = 40000$, $Pe = 10000$ e $Pe = 1000$, respectivamente.

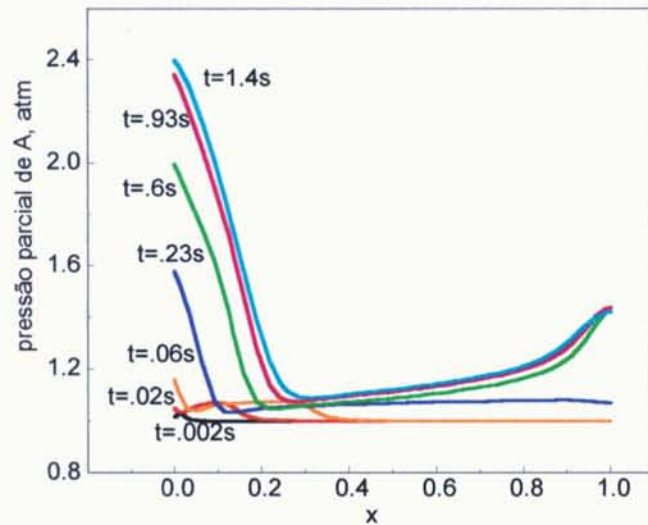


Figura 4.40 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 4 \times 10^4$

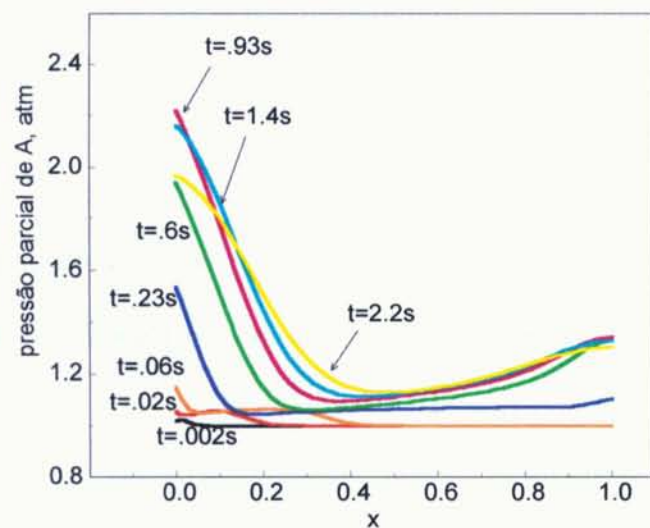


Figura 4.41 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 10^4$

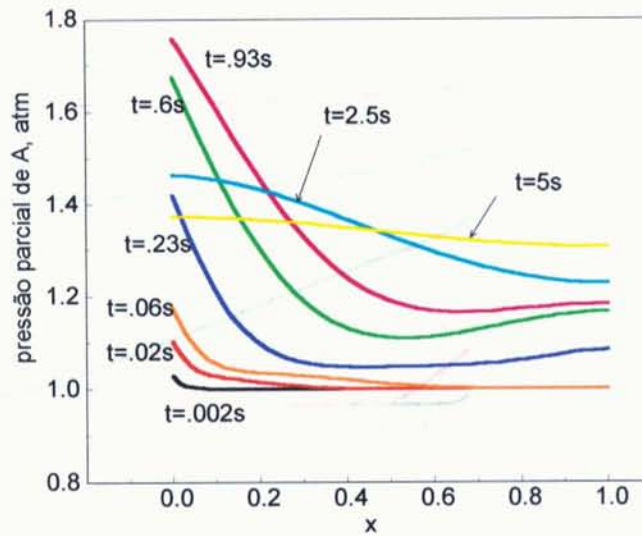


Figura 4.42 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 10^3$

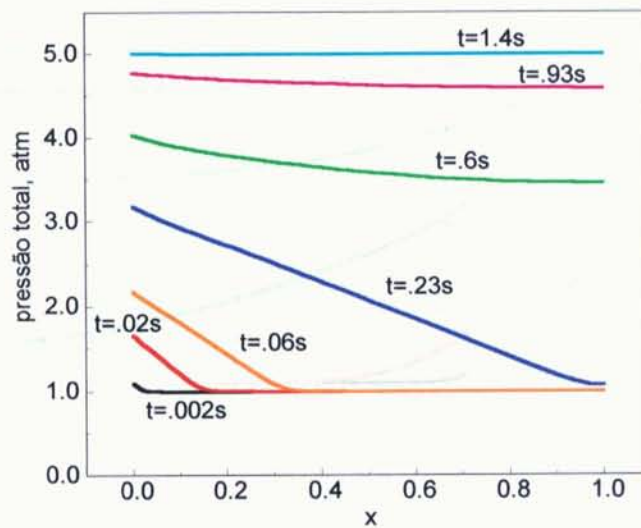


Figura 4.43 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 4 \times 10^4$

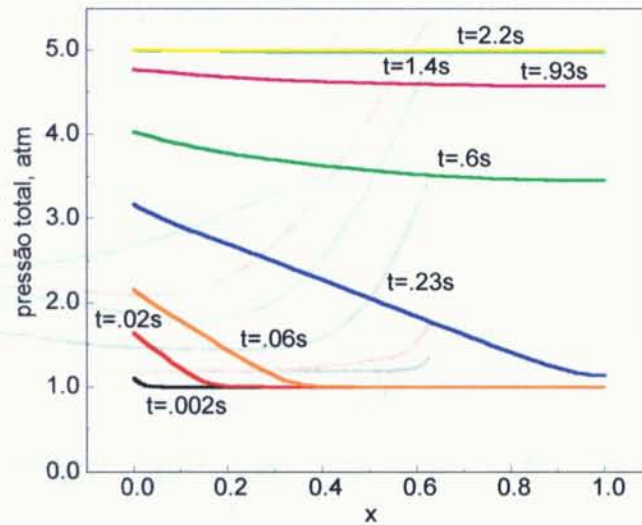


Figura 4.44 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 10^4$

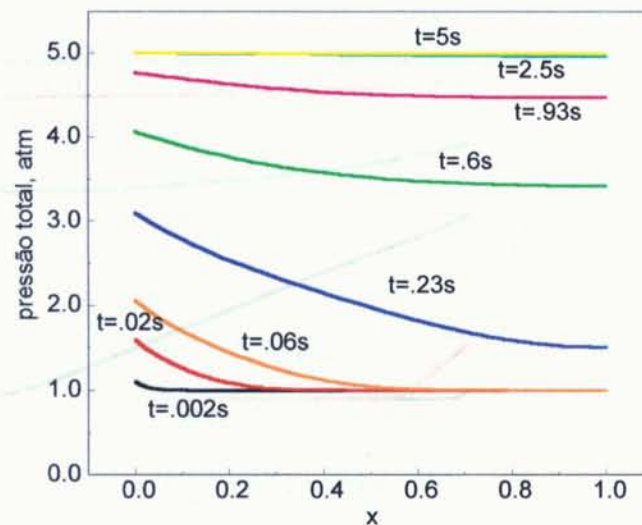


Figura 4.45 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 10^3$

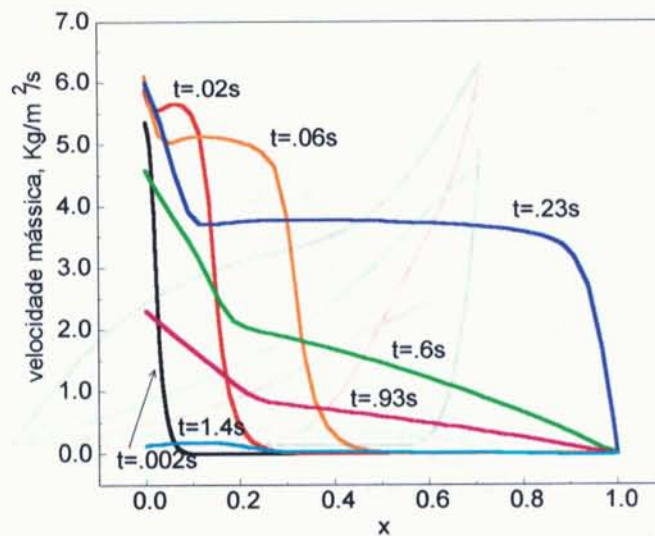


Figura 4.46 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 4 \times 10^4$

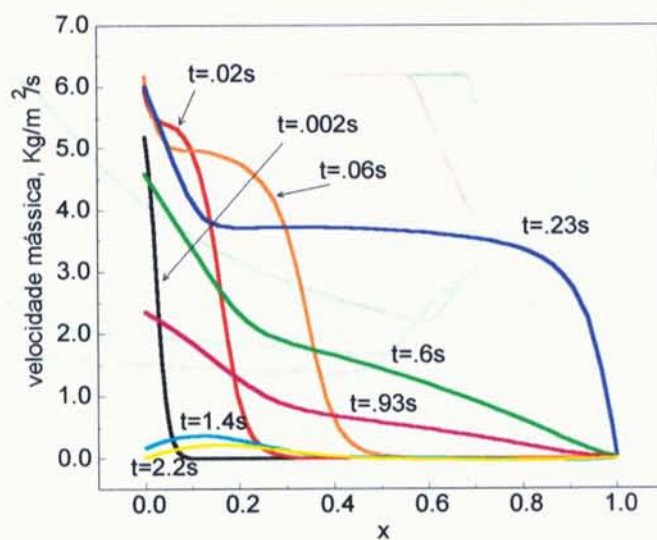


Figura 4.47 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^4$

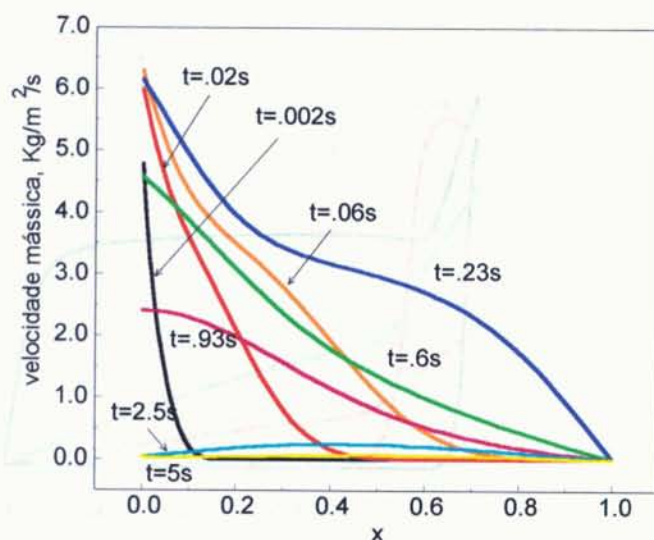


Figura 4.48 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^3$

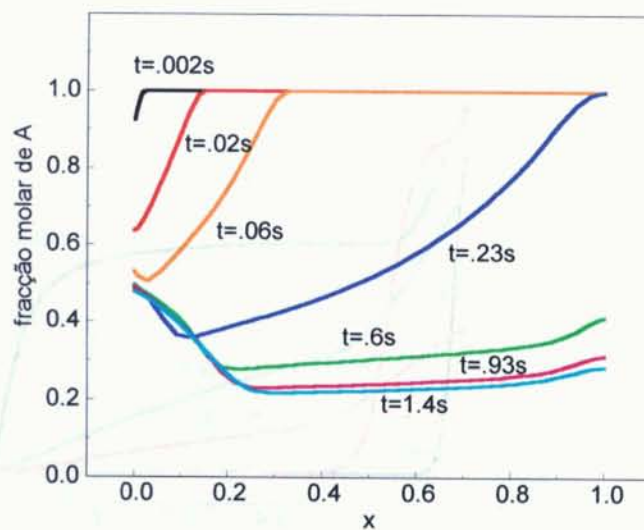


Figura 4.49 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de fracção molar de A, y_A , $Pe = 4 \times 10^4$

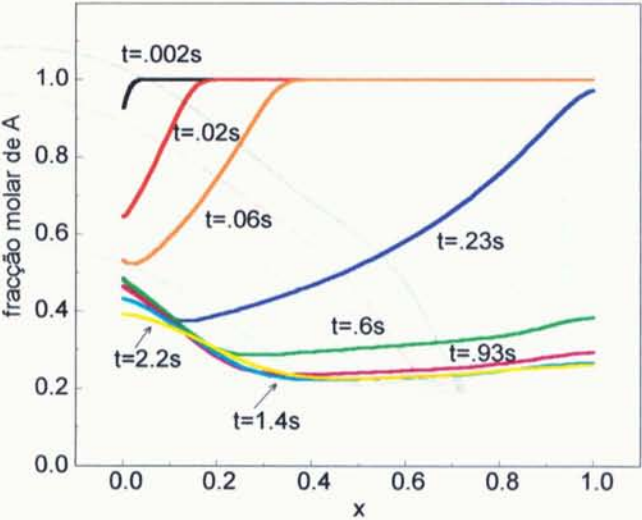


Figura 4.50 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^4$

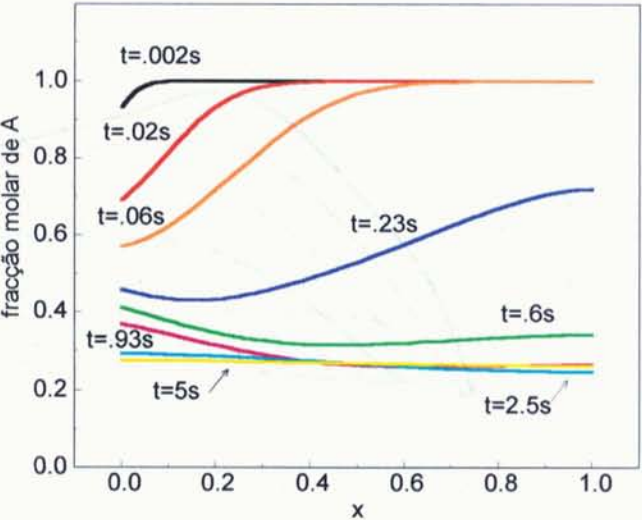


Figura 4.51 AMP, hélio-metano, exemplo 3: perfis de fracção molar de A , y_A , $Pe = 10^3$

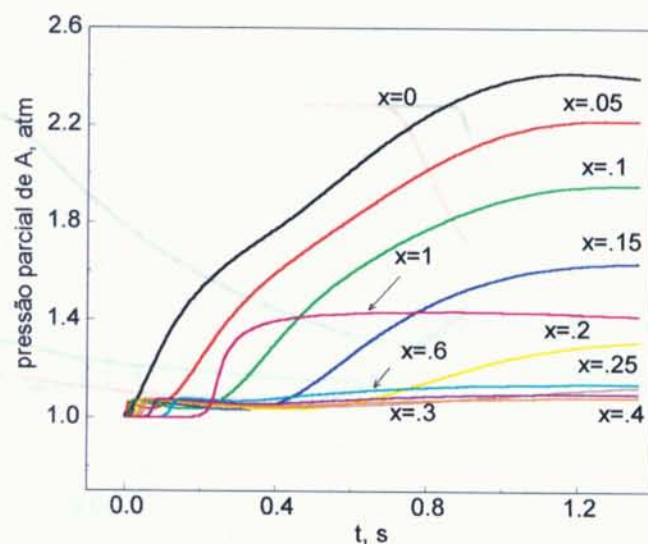


Figura 4.52 AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 4 \times 10^4$

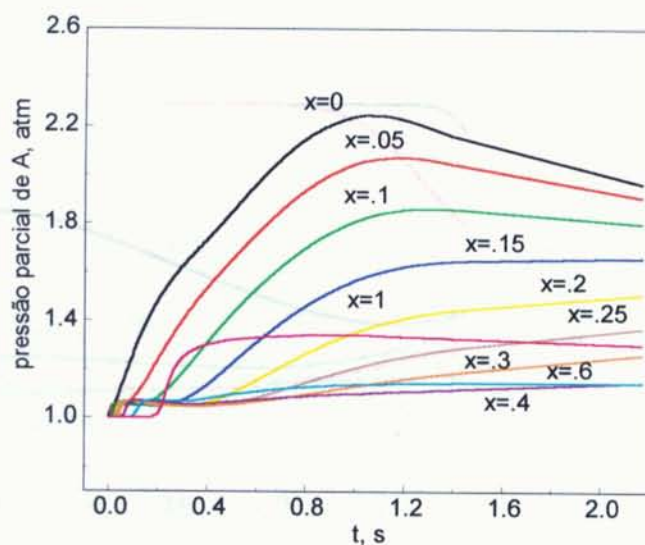


Figura 4.53 AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 10^4$

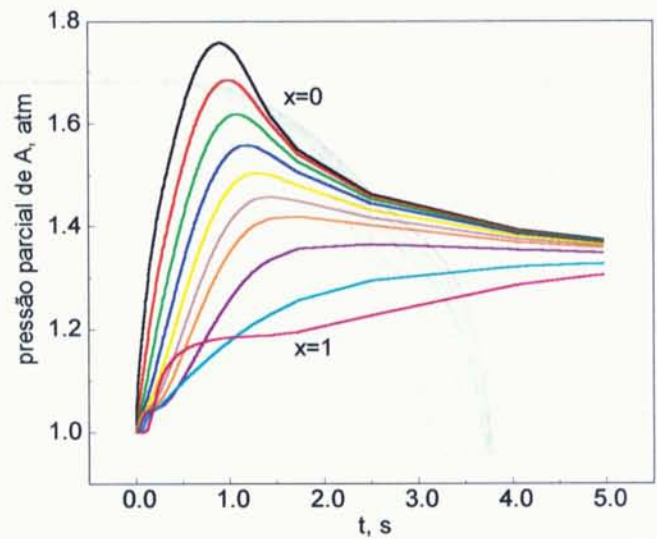


Figura 4.54 AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 10^3$

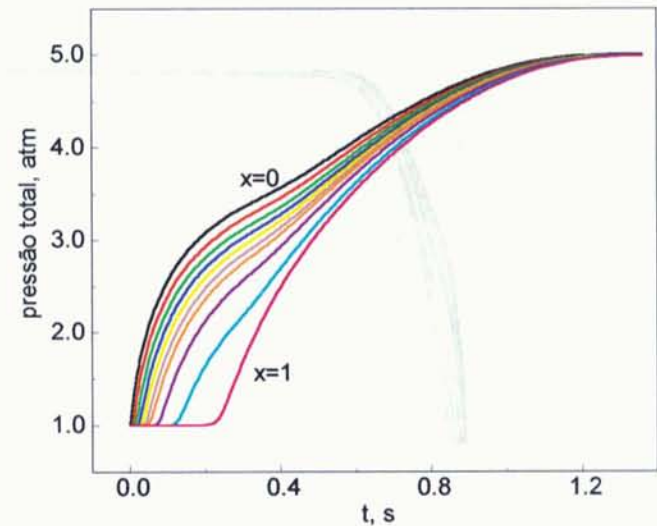


Figura 4.55 AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão total, p^* , $Pe = 4 \times 10^4$

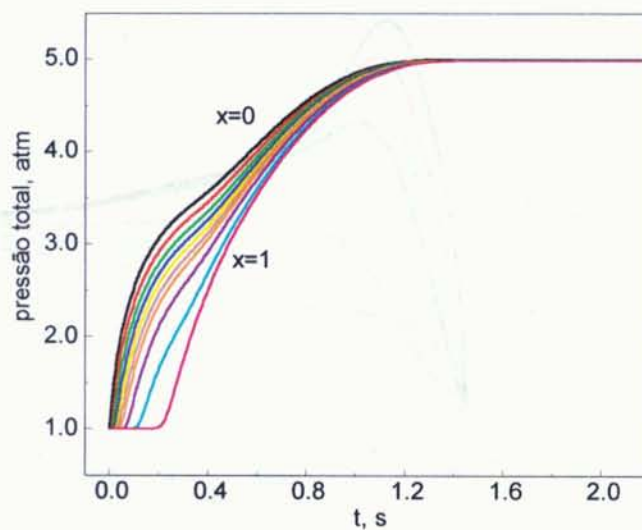


Figura 4.56 AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão total, p^* , $Pe = 10^4$

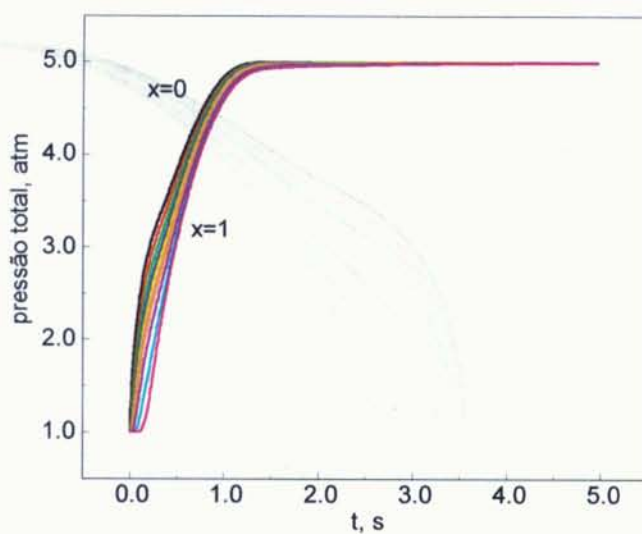


Figura 4.57 AMP, hélio-metano, exemplo 3: histórias de pressão total, p^* , $Pe = 10^3$

A tabela 4.5 mostra o tempo de CPU para as três simulações, usando diferentes critérios de paragem. Verifica-se que quanto menor o valor de Pe , maior o tempo de pressurização, t_f . O tempo de CPU é maior para valores de Pe menores. Isto deve-se não só ao facto de o intervalo de integração ser maior mas também porque durante uma parte significativa a pressão total em $x = 1$ está muito perto do valor que se pretende atingir, $p_h - 0,01p_l$, como a figura 4.57 ilustra. Quando nos aproximamos deste valor torna-se necessário mudar o funcionamento do integrador LSODIS, passando a funcionar passo a passo de modo a ser possível determinar com precisão o instante de paragem, t_f , o que acarreta maior tempo de computação.

Pe	$t_f^2(s)$	$CPU_2(s)$	$t_f^3(s)$	$CPU_3(s)$	$t_f^4(s)$	$CPU_4(s)$	$t_f^5(s)$	$CPU_5(s)$
4×10^4	1.04	77.7	1.2	81.7	1.2	82.7	1.4	135
10^4	1.1	58	1.2	64	1.3	68	2.2	1390
10^3	1.15	67	1.7	434	2.5	1809	5	7178

Tabela 4.5 AMP, separação de hélio-metano, exemplo 3: tempo de pressurização e tempo de CPU para diferentes valores de Pe

4.6.3 Separação de uma mistura de oxigénio-azoto

Consideremos um exemplo em que ambos os componentes são adsorvidos. Trata-se de uma mistura gasosa de oxigénio e azoto. Designemos por A o oxigénio e por B o azoto. Os dados físicos e operacionais relativos a este problema são [55],

- $L = 0,84 \text{ m}$
- $D_{col} = 0,025 \text{ m}$
- $\varepsilon = 0,4$
- $\varepsilon_t = 0.586$
- $p_h^* = 5 \text{ bar}$
- $p_l^* = 1 \text{ bar}$
- $M_A = 32,00 \text{ Kg Kg mole}^{-1}$
- $M_B = 28,02 \text{ Kg Kg mole}^{-1}$
- $T = 293^\circ K$
- $V_1 = 4,1 \times 10^{-6} \text{ m}^3$
- $V_2 = 4,1 \times 10^{-6} \text{ m}^3$
- $D_p = 1,7 \times 10^{-3} \text{ m}$
- $\mu_A = 0,02031 \times 10^{-4} \text{ Pa s}$
- $\mu_B = 0,01754 \times 10^{-4} \text{ Pa s}$
- $\rho_{ap} = 1160 \text{ Kg m}^{-3}$
- $S_1 = 0,01 \times S$
- $y_{A_{alim}} = 0,22$
- $y_{A_{inic}} = 0,22$

O volume da coluna é

$$V_{col} = 4,1 \times 10^{-4} \text{ m}^3 = 100 \times V_1 = 100 \times V_2,$$

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>
<i>Pe</i>	10^3	10^4	4×10^4
t_c	2,34s	2,33s	2,33s
t_f	6,1s	5,9s	5,8s
<i>CPU</i>	144s	233s	349s

Tabela 4.6 AMP, separação de oxigênio-azoto: tempo de pressurização e tempo de CPU para diferentes valores de *Pe*

e, portanto, pode-se admitir que se está a simular a pressurização de uma coluna de adsorção em que os volumes mortos são desprezáveis. No instante inicial a fracção molar do oxigénio é $y_{A_{inic}} = 0,22$ e a pressão total é $p^* = 1$ bar. A alimentação faz-se a $y_{A_{lim}} = 0,22$ e $p^* = 5$ bar. A isotérmica de Langmuir bicomponente (4.55), [55], é caracterizada por

- $Q_A = 3,376 \text{ Kg mole Kg}^{-1}$
- $k_A = 87,33 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ Kg mole}^{-1}$
- $Q_B = 2,220 \text{ Kg mole Kg}^{-1}$
- $k_B = 387,8 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ Kg mole}^{-1}$.

O valor do coeficiente de descarga da válvula à entrada da coluna é, $C_v = 0,05$. O valor de Peclet, *Pe*, referido à velocidade de referência é parâmetro das diferentes simulações, conforme a tabela 4.6 indica. A figura 4.58 relaciona o valores de *Pe* e Pe^{real} , equação 4.86, à entrada da coluna $x = 0$.

Tal como no caso da mistura de hélio-metano, a variável de tempo *t* varia de 0 a t_f , instante em que a pressão total no fim da coluna, $x = 1$, atinge $p_h - 0,01p_l$. Para as simulações realizadas usaram-se 8 elementos finitos em cada um dos sistemas

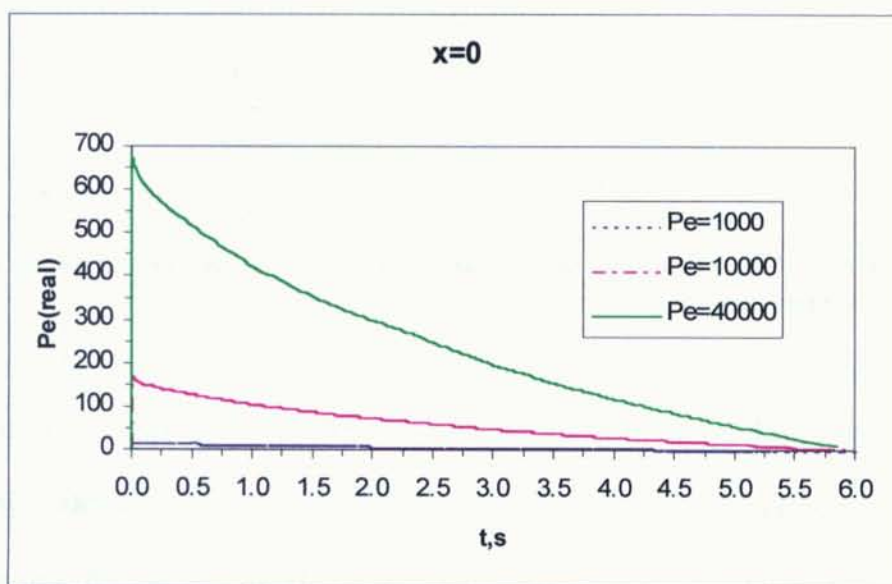


Figura 4.58 AMP, oxigénio-azoto, Pe versus Pe^{real} em $x = 0$

de elementos finitos e aproximações seccionalmente polinomiais de grau 6 em cada elemento. Para o cálculo dos integrais usaram-se 6 pontos interiores de quadratura. Nas figuras 4.59 e 4.60 podemos comparar as histórias de pressão parcial de A, quer à entrada, $x = 0$, quer à saída da coluna, $x = 1$, para os diferentes valores de Pe . O papel da difusão que é bem visível nas figuras 4.59 e 4.60. Para valores de Peclet muito baixos as concentrações de oxigénio à entrada e à saída tendem a tornar-se mais próximas.

O efeito de Pe nas histórias de velocidade mássica é apresentado nas figuras 4.61, 4.62 e 4.63. As figuras 4.64, 4.65 e 4.66 mostram o efeito de Pe na fracção molar de A. As histórias foram traçadas nos extremos da coluna, em $x = 0$ e $x = 1$, e ainda $x = 0,1$, $x = 0,15$, $x = 0,2$, $x = 0,3$, $x = 0,4$, $x = 0,5$, $x = 0,6$ e $x = 0,8$.

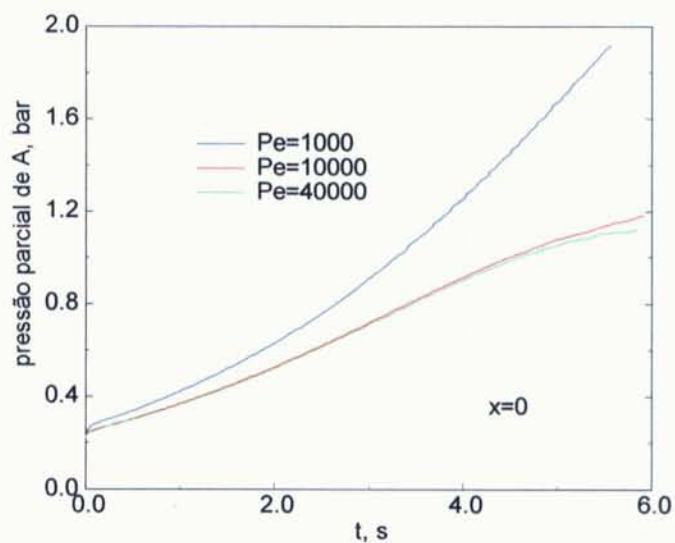


Figura 4.59 AMP, oxigénio-azoto: histórias de p_A^* em $x = 0$ para diferentes valores de Pe

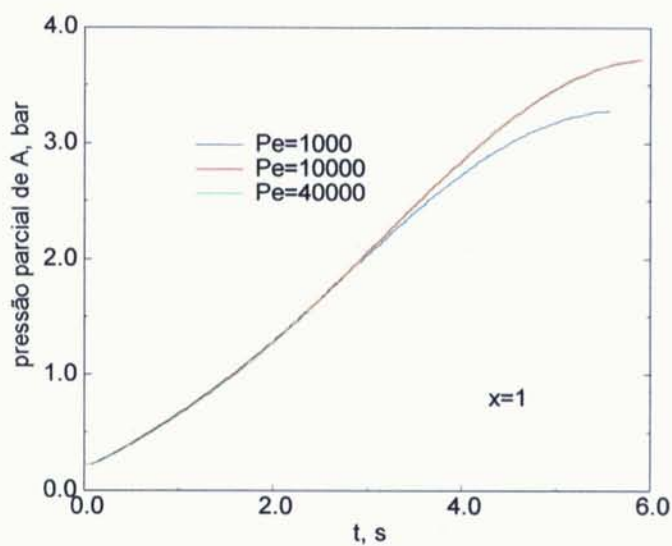


Figura 4.60 AMP, oxigénio-azoto: histórias de p_A^* em $x = 1$ para diferentes valores de Pe

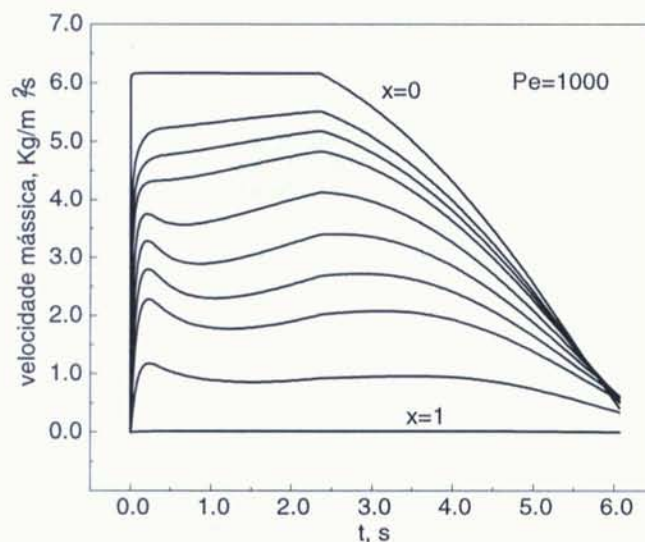


Figura 4.61 AMP, oxigénio-azoto: histórias de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^3$

As figuras 4.67, 4.68, 4.69 e 4.70 mostram os perfis axiais de pressão parcial, pressão total, velocidade mássica e fracção molar de A para o caso em que $Pe = 10^4$.

O movimento dos nós de separação de cada uma das malhas espaciais, figura 4.71 e 4.72, traduzem a dificuldade da resolução numérica. Relativamente à pressão, caracterizada por perfis bastante suaves, os nós tendem para uma posição de equilíbrio e aí se mantêm. Pelo contrário, para a pressão parcial, há uma dinâmica permanente, devido à presença de uma frente abrupta.

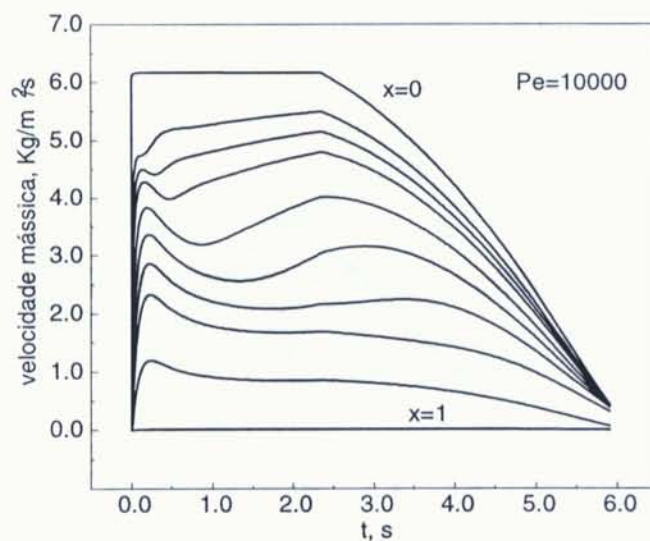


Figura 4.62 AMP, oxigénio-azoto: histórias de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^4$

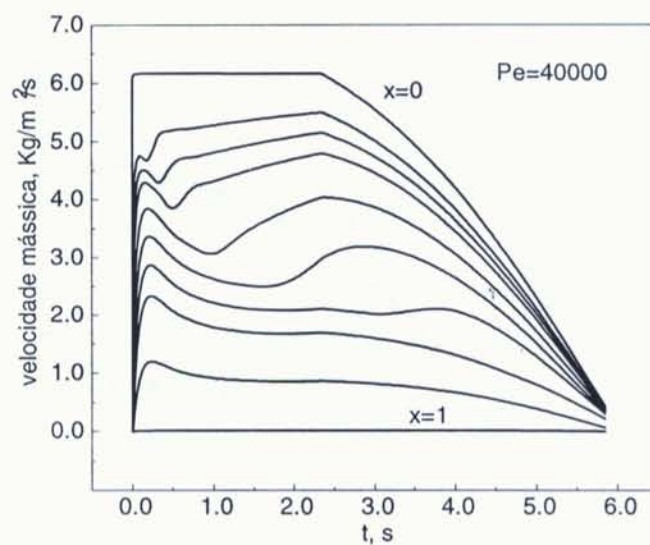


Figura 4.63 AMP, oxigénio-azoto: histórias de velocidade mássica, G^* , $Pe = 4 \times 10^4$

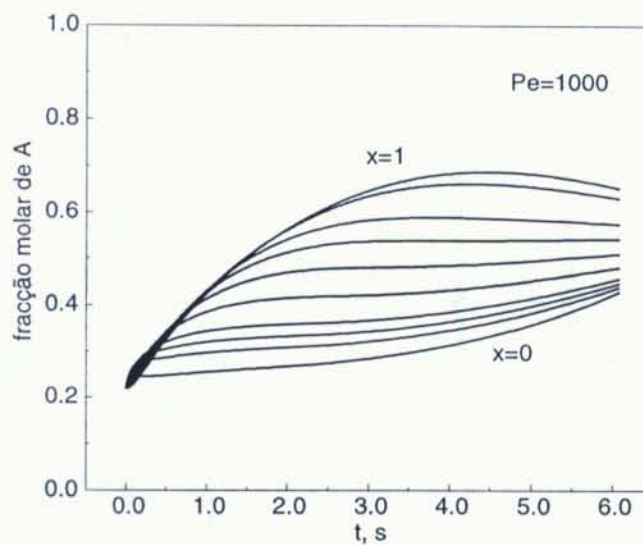


Figura 4.64 AMP, oxigénio-azoto: histórias da fracção molar de A, y_A , $Pe = 10^3$

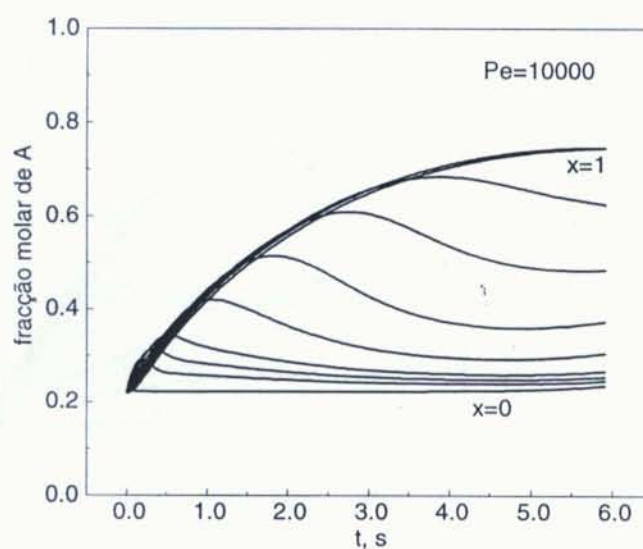


Figura 4.65 AMP, oxigénio-azoto: histórias da fracção molar de A, y_A , $Pe = 10^4$

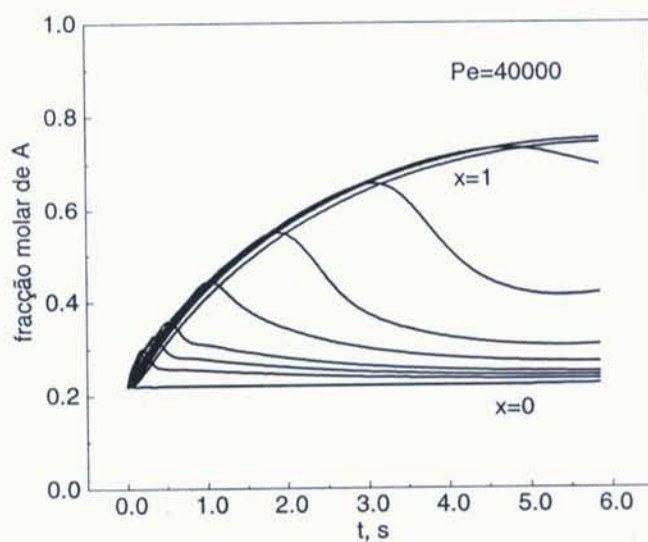


Figura 4.66 AMP, oxigénio-azoto: histórias da fracção molar de A, y_A , $Pe = 4 \times 10^4$

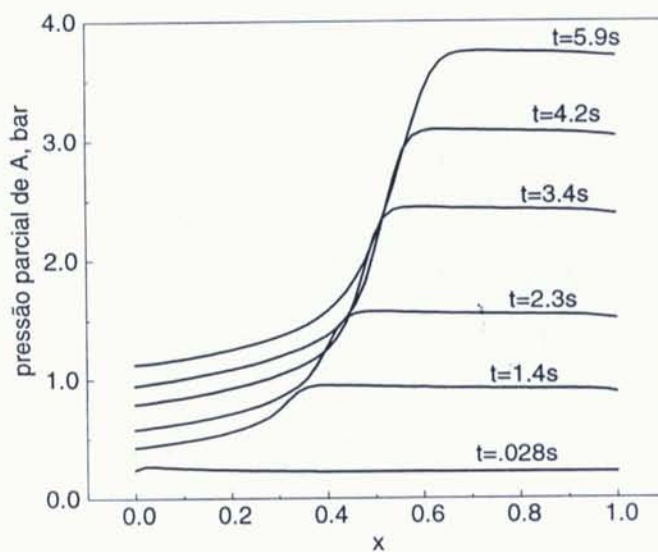


Figura 4.67 AMP, oxigénio-azoto: perfis de pressão parcial de A, p_A^* , $Pe = 10^4$

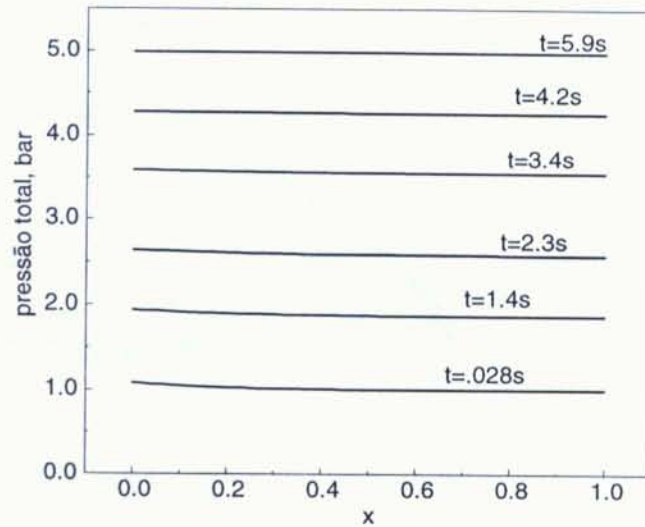


Figura 4.68 AMP, oxigénio-azoto: perfis de pressão total, p^* , $Pe = 10^4$

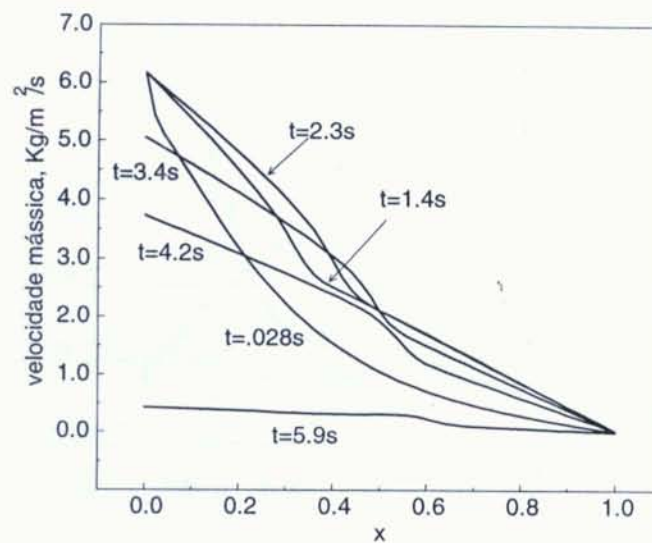


Figura 4.69 AMP, oxigénio-azoto: perfis de velocidade mássica, G^* , $Pe = 10^4$

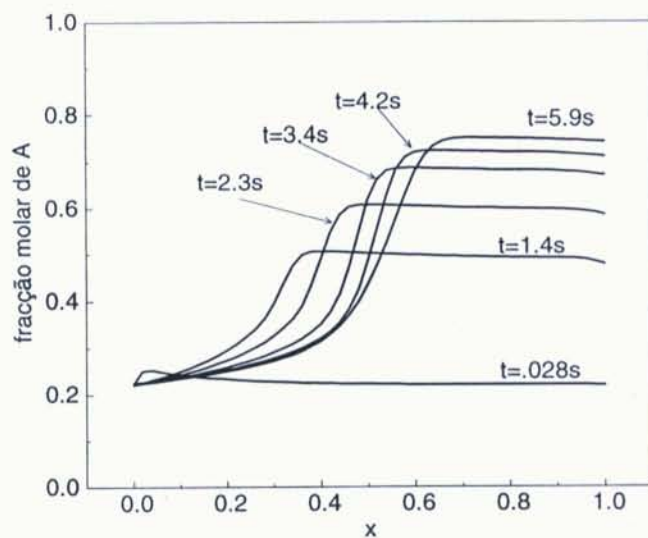


Figura 4.70 AMP, oxigénio-azoto: perfis de fracção molar de A, y_A , $Pe = 10^4$

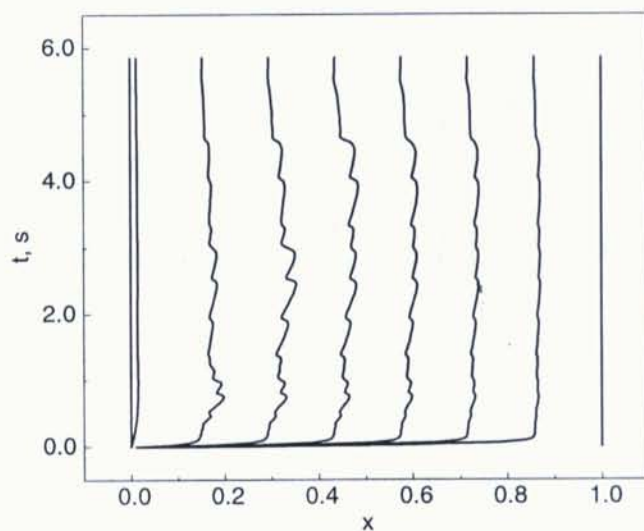


Figura 4.71 AMP, oxigénio-azoto: movimento dos nós para a malha associada a p_A^*

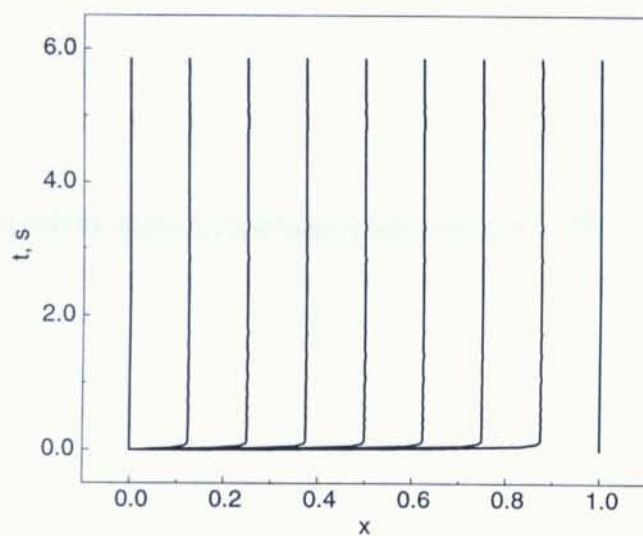


Figura 4.72 AMP, oxigénio-azoto: movimento dos nós para a malha associada a p^*

4.7 Conclusões e notação

Neste capítulo o MEFM foi aplicado à resolução de diversos problemas de EDP. O algoritmo computacional baseado no MEFM revela-se um instrumento poderoso para o cálculo de soluções numéricas de vários problemas provenientes da Engenharia Química, modelizados por EDP cujas soluções exibem regiões de grande actividade espacial móveis no tempo. Utilizando um conjunto de parâmetros padrão foi possível obter soluções de grande qualidade para problemas diversos, o que mostra a eficácia do método.

Geral

- $c_i^{m,j}$, $i = 1, \dots, 4$, constantes de penalização no j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- $c_4^{m,j}$ comprimento mínimo permitido para o j -ésimo elemento finito de $\mathcal{M}_m$
- tol valor standard para a tolerância
- tol_1 tolerância relativa à amplitude nodal
- tol_2 tolerância relativa à posição nodal

Reacção com difusão

- t variável temporal normalizada
- x variável espacial normalizada
- $T(x, t)$ temperatura

Reactor catalítico não isotérmico

- t variável temporal normalizada
- u concentração no seio do fluido, adimensional
- v temperatura no reactor, adimensional
- v_w temperatura da parede, adimensional
- x variável espacial normalizada
- Da número de Damkhöler
- N_{wh} número de unidades de transferência de calor na parede
- Pe número de Peclet
- β elevação adiabática de temperatura adimensional
- γ número de Arrhenius
- τ tempo de passagem do fluido
- τ_{hl} tempo de passagem da onda térmica

Cromatografia binária

- c_A concentração do componente A
- c_B concentração do componente B

- c_{A_0} concentração do componente A na alimentação
- c_{B_0} concentração do componente B na alimentação
- n_{Az} fluxo mássico do componente A na direcção z
- n_{Bz} fluxo mássico do componente B na direcção z
- q_A concentração molar do componente A na fase sólida
- q_B concentração molar do componente B na fase sólida
- t_{inj} tempo de injeção
- u velocidade superficial
- v a velocidade mássica
- w_A fracção mássica do componente A na fase fluida
- w_B fracção mássica do componente B na fase fluida
- z variável espacial
- A componente activo
- B componente activo
- C solvente inerte
- D'_{ax} coeficiente de dispersão axial no leito

- L comprimento da coluna de adsorção
- M_A massa molecular do componente A
- M_B massa molecular do componente B
- Pe número de Peclet
- Q caudal
- Q_A concentração mássica do componente A no sólido
- Q_B concentração mássica do componente B no sólido
- R razão entre o volume da injeção e o volume de poros do leito
- S secção recta da coluna de adsorção
- V_{inj} volume da solução injectada durante t_{inj}
- ε porosidade do leito
- ε_t porosidade total
- ζ variável espacial normalizada
- θ variável temporal normalizada
- ρ massa específica da solução
- ρ_A concentração mássica do componente A na fase fluida

- ρ_B concentração mássica do componente B na fase fluida
- ρ_C massa específica do solvente
- τ tempo de passagem
- $\Delta\theta$ instante t_{inj} normalizado

Adsorção com modulação da pressão

- c^* concentração molar total na fase gasosa, Kg mole m^{-3}
- c_i^* concentração molar da espécie i na fase gasosa, Kg mole m^{-3}
- p pressão da mistura, adimensional
- p^* pressão da mistura
- p_A pressão parcial da espécie A , adimensional
- p_B pressão parcial da espécie B , adimensional
- p_A^* pressão parcial da espécie A
- $p|_{ent}$ pressão na câmara de entrada, adimensional
- $p_{A|ent}$ pressão parcial da espécie A na câmara de entrada, adimensional
- p_l^* pressão inicial do sistema
- p_h^* pressão de alimentação do sistema

- p_{ref} pressão de referência
- q_i^* concentração molar da espécie i na fase sólida, Kg mole Kg^{-1}
- t a variável independente de tempo, s
- t_c instante em que $p|_{x=0+}$ atinge $0,53p_h$, s
- t_f instante em que se termina a pressurização, s
- v^* velocidade média na direcção z , m s^{-1}
- v_{ref} velocidade de referência, m s^{-1}
- $y_{A_{inic}}$ fracção molar inicial da espécie A na mistura gasosa
- y_A fracção molar da espécie A
- x variável espacial normalizada
- z variável independente de espaço, m
- A componente
- B componente
- C_v coeficiente de descarga da válvula
- D_{ax} coeficiente de dispersão axial na direcção z , $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
- D_p diâmetro das partículas, m

- F_z componente da força que o gás exerce sobre o sólido na direcção do escoamento
- G^* velocidade mássica, $\text{Kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
- G_{ent}^* velocidade mássica normalizada à entrada da câmara que precede o leito,, $\text{Kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
- G_{exit}^* velocidade mássica normalizada à saída da câmara que segue o leito,, $\text{Kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
- G_{ref} velocidade mássica de referência, $\text{Kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
- L comprimento da coluna de adsorção, m
- L_1^* comprimento da câmara que precede o leito, m
- L_2^* comprimento da câmara que segue o leito, m
- L_i normalização de L_i^*
- M_i concentração molar da espécie i , Kg Kg mol^{-1}
- M concentração molar média na fase gasosa, Kg Kg mol^{-1}
- Pe número de Peclet referido à velocidade de referência
- R constante dos gases perfeitos
- S secção recta da coluna de adsorção e das câmaras, m^2

- S_1 secção recta da entrada da câmara que precede o leito, m^2
- T temperatura absoluta do sistema, $^{\circ}K$
- V_1 volume da câmara que precede o leito, m^3
- V_2 volume da câmara que segue o leito, m^3
- ε porosidade do leito
- ε_t porosidade total
- θ variável de tempo normalizada
- μ^* viscosidade da mistura, $Pa\ s$
- μ_i^* viscosidade da espécie i , $Pa\ s$
- ρ^* massa específica da fase gasosa, $Kg\ m^{-3}$
- ρ_{ap} massa específica aparente do enchimento, $Kg\ m^{-3}$
- τ_c tempo de passagem, s

Capítulo 5

Método dos Elementos Finitos Móveis em Espaços Bidimensionais

5.1 Introdução

Nos capítulos anteriores desenvolvemos e aplicámos o MEFM à resolução de alguns problemas reais em 1-D. Com a experiência adquirida e as técnicas desenvolvidas construiremos neste capítulo um método baseado em elementos finitos móveis que, em 2-D, permita obter soluções numéricas para problemas cujas soluções apresentem regiões de grande actividade espacial. Exporemos detalhadamente os conceitos e técnicas desenvolvidos de modo a podermos aplicar o MEFM à resolução de problemas de evolução em domínios espaciais de duas dimensões.

A discretização espacial faz-se, considerando uma malha espacial única, definida por uma triangularização conforme hexagonal do domínio e aproximando a solução exacta por uma função seccionalmente polinomial de grau p , $p \geq 1$, em cada elemento

finito. Tal como em 1-D permite-se que os nós, vértices dos triângulos, se movam com o tempo, minimizando a norma L_2 do resíduo, não só com respeito às derivadas temporais da solução nos pontos de interpolação, mas também com respeito às velocidades dos nós da malha espacial. Deste modo cada uma das equações de um sistema de EDP é convertida num sistema de EDO na variável tempo. A resolução numérica deste sistema permite definir a solução aproximada que pretendemos. Relativamente à formulação feita para 1-D, não se permite que o grau da aproximação varie de elemento para elemento. A solução aproximada é definida em cada elemento finito usando polinómios interpoladores de Lagrange em *coordenadas triangulares*.

A matriz do sistema de EDO contém, tal como em 1-D, singularidades potenciais. Em 2-D a ocorrência de paralelismo cresce em complexidade e a distorção da malha não se reduz à sobreposição de dois nós. Para contornar estas singularidades, inerentes ao método, usam-se como anteriormente, funções de penalização. São funções positivas e definidas de modo a tomarem valores muito elevados quando a área de um elemento se aproxima de um valor mínimo especificado. No que diz respeito ao cálculo dos integrais, este é feito por quadratura gaussiana, em *coordenadas triangulares*, substituindo sempre que necessário, nas vizinhanças dos lados dos triângulos, a solução aproximada por outra suavizada.

5.2 O problema

Consideremos a classe de sistemas de n EDP em que a m -ésima equação é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_m}{\partial t} = & \sum_{k=1}^n \left[f_{m,k} \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \right) \frac{\partial^2 u_k}{\partial x^2} \right] + \\ & + \sum_{k=1}^n \left[g_{m,k} \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \right) \frac{\partial^2 u_k}{\partial y^2} \right] + h_m \left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde

$$\mathbf{u}(\zeta, t) = [u_1(\zeta, t), u_2(\zeta, t), \dots, u_n(\zeta, t)]^T \in \mathbb{R}^n, \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}(\zeta, t) &= \left[\frac{\partial u_1}{\partial x}, \frac{\partial u_2}{\partial x}, \dots, \frac{\partial u_n}{\partial x} \right]^T \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}(\zeta, t) &= \left[\frac{\partial u_1}{\partial y}, \frac{\partial u_2}{\partial y}, \dots, \frac{\partial u_n}{\partial y} \right]^T \end{aligned} \quad (5.3)$$

$t \geq 0$ e $\zeta = (x, y) \in \Omega$, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, sujeita às condições iniciais, $u_m(\zeta, 0) = u_{0m}(\zeta)$, $\zeta \in \Omega$, e a condições de fronteira de Dirichlet, de Neumann ou de Robin. O MEFM desenvolve-se em duas etapas. Inicialmente é feita a discretização espacial por elementos finitos, permitindo que os nós da malha espacial se movam, dando origem a um sistema de equações diferenciais ordinárias. Este sistema é resolvido numa segunda fase, recorrendo a um integrador apropriado de sistemas de EDO.

5.3 Discretização espacial

Admitamos que Ω é um quadrado de $\mathbb{R}^2$, $\Omega = [a, b] \times [c, d]$. A discretização espacial de Ω faz-se, considerando uma triangularização conforme de Ω , i.e., um conjunto de triângulos não degenerados, Ω_j , $j = 1, \dots, n_e$, em que cada triângulo contém apenas os seus vértices e verifica

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^{n_e} \Omega_i \quad (5.4)$$

$$\overset{\circ}{\Omega}_i \cap \overset{\circ}{\Omega}_j = \emptyset, \quad i \neq j. \quad (5.5)$$

Escolha-se uma triangularização hexagonal, i.e., cada nó interior de Ω é vértice de 6 triângulos, tal como a figura 5.1 ilustra. Considerando as partições de $[a, b]$ e de $[c, d]$,

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_{n_x+1} = b, \quad (5.6)$$

$$c = y_1 < y_2 < \dots < y_{n_y+1} = d, \quad (5.7)$$

em que n_x e n_y são definidos pelo utilizador, constrói-se a discretização de Ω ,

$$\bar{\zeta} = \{\zeta_i \in \Omega : \zeta_i = (x_i, y_i), i = 1, \dots, n_s\}, \quad (5.8)$$

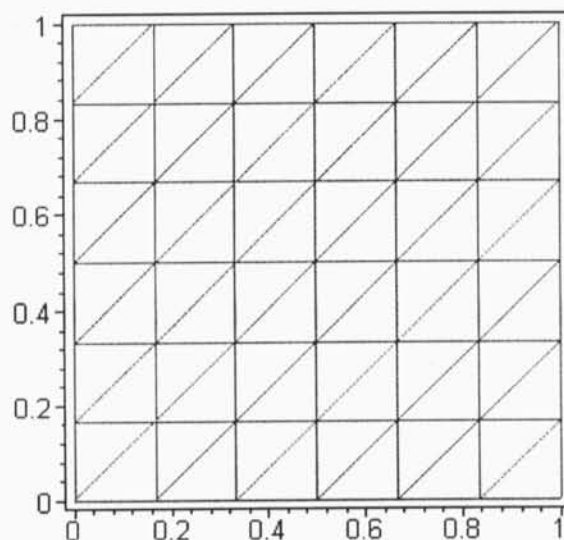


Figura 5.1 Malha espacial inicial uniforme à esquerda

onde

$$x_k = a + \frac{b-a}{n_x}(k-1), \quad k = 1, \dots, n_x + 1, \quad (5.9)$$

e

$$y_k = c + \frac{d-c}{n_y}(k-1), \quad k = 1, \dots, n_y + 1, \quad (5.10)$$

$n_s = (n_x + 1)(n_y + 1)$ é o número de nós da malha e $n_e = 2n_x n_y$ o número de elementos dessa malha. A malha espacial inicial assim definida é uniforme. No entanto, podemos usar malhas não uniformes, considerando $n_x + 1$ pontos quaisquer sobre $y = c$ e $y = d$, $a \leq x \leq b$, $n_y + 1$ pontos quaisquer sobre $x = a$ e $x = b$, $c \leq y \leq d$ e definir os pontos

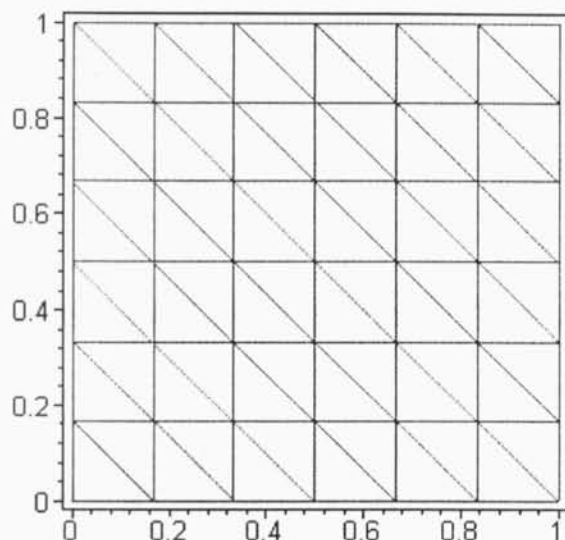


Figura 5.2 Malha espacial inicial à direita

ζ_i como o resultado da intersecção das rectas que unem esses pontos. Os nós espaciais ζ_i definem rectângulos e são numerados da esquerda para a direita e de baixo para cima. Os triângulos são obtidos a partir destes rectângulos usando, quer as diagonais com declive positivo, figura 5.1, quer as diagonais com declive negativo, figura 5.2. Os triângulos são também numerados da esquerda para a direita e de baixo para cima.

5.3.1 Abordagem elemento a elemento

Uma vez que se considera uma discretização espacial por triângulos, é vantajoso definir a aproximação numérica da solução em cada elemento finito, Ω_i , em coordenadas triangulares. Estas coordenadas, também designadas por coordenadas baricêntricas, podem ser interpretadas considerando a transformação das coordenadas cartesianas em 2-D, (x, y) , em coordenadas triangulares, (L_1, L_2, L_3) , que transforma

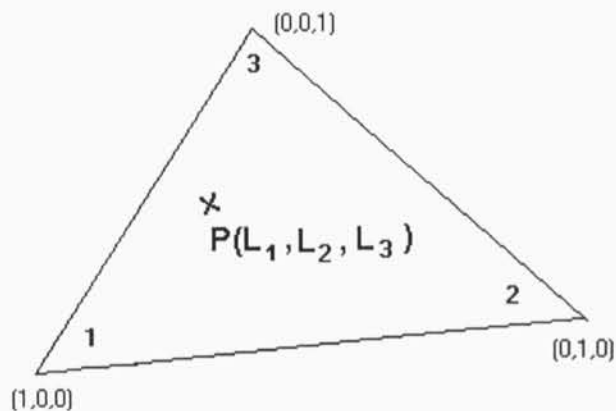


Figura 5.3 Coordenadas triangulares definidas num elemento finito

os vértices do triângulo Ω_i , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) e (x_3, y_3) nos pontos $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ e $(0, 0, 1)$ do espaço cartesiano 3-D, tal como se mostra na figura 5.3. Identificando o plano xy com o plano $z = 1$, podemos escrever

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{bmatrix}, \quad (5.11)$$

onde

$$M = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Um ponto $P(x, y) \in \Omega_i$ fica definido em coordenadas triangulares por $P(L_1, L_2, L_3)$, onde

$$L_N = (\det(M))^{-1} (a_N + \Delta y_N x + \Delta x_N y), \quad N = 1, 2, 3, \quad (5.12)$$

sendo

$$\det(M) = a_1 + a_2 + a_3 \quad (5.13)$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 = x_2 y_3 - x_3 y_2 \\ \Delta y_1 = y_2 - y_3 \\ \Delta x_1 = x_3 - x_2 \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} a_2 = x_3 y_1 - x_1 y_3 \\ \Delta y_2 = y_3 - y_1 \\ \Delta x_2 = x_1 - x_3 \end{array} \right\} \quad \text{e} \quad \left\{ \begin{array}{l} a_3 = x_1 y_2 - x_2 y_1 \\ \Delta y_3 = y_1 - y_2 \\ \Delta x_3 = x_2 - x_1 \end{array} \right\}. \quad (5.14)$$

Numerando os vértices do triângulo Ω_i no sentido directo, o determinante de M é igual ao dobro da área de Ω_i , $A(\Omega_i)$,

$$\det(M) = 2A(\Omega_i). \quad (5.15)$$

No plano xy as coordenadas triangulares $L_N = L_N(x, y)$ são polinómios em x e y .

A equação $L_N(x, y) = 0$ representa a recta que contém o lado oposto ao vértice N ,

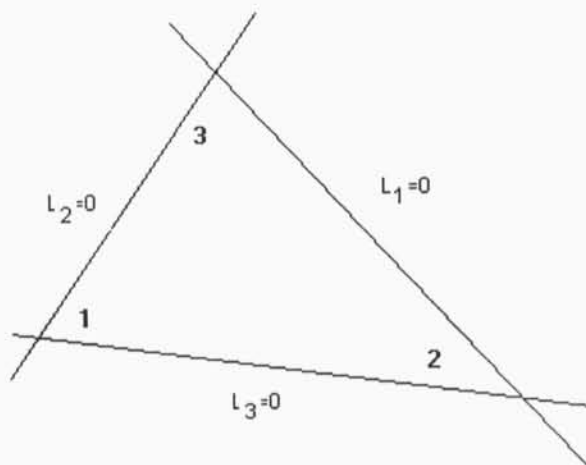


Figura 5.4 Numeração dos vértices e arestas de um elemento finito

como representa a figura 5.4.

Seja $\mathbf{U}(x, y, t) = [U_1(x, y, t), \dots, U_n(x, y, t)]^T$ uma aproximação de $\mathbf{u}(x, y, t)$, obtida por elementos finitos. Vamos construir a aproximação U_m de u_m , $m = 1, \dots, n$, em Ω , seccionalmente polinomial, i.e., $U_m|_{\Omega_i}$ é um polinómio de grau p , com p igual para todos os elementos Ω_i . Considere-se em Ω_i os pontos de interpolação, tal como a figura 5.5 mostra. A posição de cada ponto de interpolação está em correspondência com as entradas no triângulo de Pascal e os pontos de interpolação são numerados por níveis. Em cada nível numeram-se primeiramente os vértices em sentido directo e, seguidamente, os nós das arestas 1 – 2, 2 – 3 e 3 – 1. A figura 5.6 ilustra a numeração usada para o caso de $p = 4$. Como o grau do polinómio é o mesmo para todos os elementos finitos, as posições dos pontos de interpolação relativamente aos vértices são iguais para todos os elementos finitos. O número de pontos de interpolação é

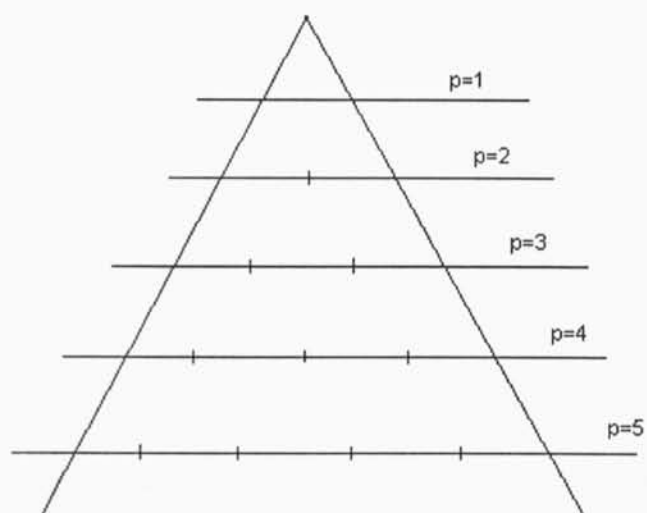


Figura 5.5 Pontos de interpolação em Ω_i para diferentes graus do polinómio

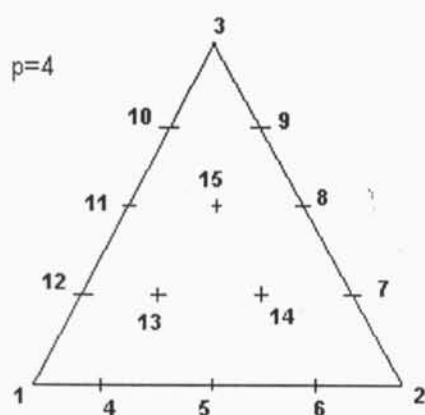


Figura 5.6 Numeração dos nós de interpolação em Ω_i

$n_p = (p+2)(p+1)/2$, p o grau do polinómio, previamente definido. Para um dado ponto $P(x, y)$ de Ω_i ,

$$U_m(x, y, t) = U_{m,i}(x, y, t) = \sum_{k=1}^{n_p} \phi_{i,k}(P) U_{m,i}^k(t), \quad (5.16)$$

em que $U_{m,i}^k$ é o valor de U_m no k -ésimo ponto de interpolação de Ω_i e $\phi_{i,k}(P)$, $k = 1, \dots, n_p$, são os elementos da base do polinómio interpolador de Lagrange da solução u_m no elemento Ω_i . A fórmula interpoladora de Lagrange em coordenadas triangulares escreve-se

$$\phi_{i,k} = \phi_k = B^{(k)}(L_1)B^{(k)}(L_2)B^{(k)}(L_3), \quad (5.17)$$

sendo

$$B^{(k)}(L_N) = \begin{cases} \prod_{s=1}^d \frac{1}{s} (pL_N - s + 1) & \text{se } d \geq 1 \\ 1 & \text{se } d = 0 \end{cases}, \quad (5.18)$$

com $d = pL_N^{(k)}$, $N = 1, 2, 3$ e $k = 1, \dots, n_p$, sendo $L_N^{(k)}$ a N -ésima coordenada triangular do k -ésimo ponto de interpolação [22].

Averiguemos agora como são definidas as derivadas de U_m em ordem aos diversos parâmetros, num dado elemento finito Ω_i . Uma vez que $U_{m,i}$ é um polinómio, as suas derivadas espaciais também o são e podem ser definidas pelos mesmos pontos de interpolação P_i^k , $k = 1, \dots, n_p$, da malha local de Ω_i . Seja $P(x, y) \in \Omega_i$. Relativa-

mente às primeiras derivadas espaciais, de (5.16) temos,

$$\frac{\partial U_{m,i}}{\partial x} = \sum_{k=1}^{n_p} \frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial x}(P) U_{m,i}^k \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial U_{m,i}}{\partial y} = \sum_{k=1}^{n_p} \frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial y}(P) U_{m,i}^k . \quad (5.20)$$

Para o cálculo de $\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial x}$ e $\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial y}$ notemos que

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial x} = \sum_{N=1}^3 \frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial L_N} \frac{\partial L_N}{\partial x}, \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial y} = \sum_{N=1}^3 \frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial L_N} \frac{\partial L_N}{\partial y}, \quad (5.22)$$

onde,

$$\frac{\partial L_N}{\partial x} = \frac{\Delta y_N}{\det(M)}, \quad N = 1, 2, 3, \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial L_N}{\partial y} = \frac{\Delta x_N}{\det(M)}, \quad N = 1, 2, 3 \quad (5.24)$$

e

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial L_N} = \frac{\partial}{\partial L_N} [B^{(k)}(L_N)] \left(\prod_{K=1, K \neq N}^3 B^{(k)}(L_K) \right), \quad N = 1, 2, 3, \quad (5.25)$$

com $B^{(k)}(L_K)$ definidos por (5.18) e

$$\frac{\partial B^{(k)}(L_N)}{\partial L_N} = \begin{cases} \sum_{s=1}^d \frac{p}{s} \left[\prod_{r=1, r \neq s}^d \frac{1}{r} (pL_N - r + 1) \right] & \text{se } d \geq 1 \\ 0 & \text{se } d < 1 \end{cases}. \quad (5.26)$$

Resumindo, de (5.21), (5.23) e (5.25) podemos concluir que

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial x} = (\det(M))^{-1} \sum_{N=1}^3 \Delta y_N \frac{\partial}{\partial L_N} [B^{(k)}(L_N)] \left(\prod_{K=1, K \neq N}^3 B^{(k)}(L_K) \right), \quad (5.27)$$

e analogamente, associando (5.22), (5.24) e (5.25), obtemos

$$\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial y} = (\det(M))^{-1} \sum_{N=1}^3 \Delta x_N \frac{\partial}{\partial L_N} [B^{(k)}(L_N)] \left(\prod_{K=1, K \neq N}^3 B^{(k)}(L_K) \right), \quad (5.28)$$

com $B^{(k)}(L_K)$ definidos por (5.18) e $\frac{\partial B^{(k)}(L_N)}{\partial L_N}$ definidos por (5.26).

Quanto às segundas derivadas espaciais, de (5.19) e (5.20) obtém-se

$$\frac{\partial^2 U_{m,i}}{\partial x \partial y} = \sum_{k=1}^{n_p} \frac{\partial^2 \phi_{i,k}}{\partial x \partial y}(P) U_{m,i}^k. \quad (5.29)$$

Para o cálculo de $\frac{\partial^2 \phi_{i,k}}{\partial x \partial y}$, como $L_N(x, y)$ são polinómios de primeiro grau em x e y ,

$$\frac{\partial^2 L_N}{\partial x \partial y} = 0, \quad N = 1, 2, 3. \quad (5.30)$$

De (5.25) segue-se que, para $I \neq N$,

$$\frac{\partial^2 \phi_{i,k}}{\partial L_I \partial L_N} = \frac{\partial}{\partial L_N} [B^{(k)}(L_N)] \frac{\partial}{\partial L_I} [B^{(k)}(L_I)] B^{(k)}(L_K), \quad \begin{matrix} N = 1, 2, 3 \\ K \neq N, K \neq I \end{matrix} \quad (5.31)$$

e, para $I = N$,

$$\frac{\partial^2 \phi_{i,k}}{\partial L_N^2} = \frac{\partial^2}{\partial (L_N)^2} [B^{(k)}(L_N)] \left(\prod_{K=1, K \neq N}^3 B^{(k)}(L_K) \right), \quad N = 1, 2, 3. \quad (5.32)$$

onde

$$\frac{\partial^2 B^{(k)}(L_N)}{\partial (L_N)^2} = \begin{cases} \sum_{s=1}^d \frac{p}{s} \sum_{r=1, r \neq s}^d \frac{p}{r} \prod_{q=1, q \neq r, q \neq s}^d \frac{1}{q} (pL_N - q + 1) & \text{se } d > 1 \\ 0 & \text{se } d \leq 1 \end{cases}, \quad (5.33)$$

com $d = pL_N^k$.

5.3.2 Abordagem global

Uma vez construída a função polinomial de grau p num dado elemento Ω_i que aproxima u_m , definamos a solução aproximada semi-discreta, U em Ω , para o problema (5.1). Seja U_m a aproximação de u_m , em Ω_i , $m = 1, \dots, n$, a função sec-

cionalmente polinomial, que em cada elemento Ω_i coincide com $U_{m,i}$, onde $U_{m,i}$ está definida por (5.16). Deste modo verifica-se que U_m depende de

$$\begin{aligned} U_{m,i}^k, \quad i = 1, \dots, n_e, \quad k = 1, \dots, n_p \\ \zeta_l = (x_l, y_l), \quad l = 1, \dots, n_s. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Seja $\mathcal{M}$ o conjunto de todos os pontos de interpolação de todos os elementos finitos. Designemos por $\mathcal{M}$ a malha global e por nó global um seu elemento. Os nós globais podem ser nós espaciais, se forem vértices de algum triângulo, ou não. Seja n_g o cardinal de $\mathcal{M}$. A figura 5.7 ilustra o caso particular em que $p = 2$. Cada um dos elementos finitos possui 6 pontos de interpolação. Os nós globais representados a preto são nós espaciais. Seja v_j o nó global associado ao k -ésimo ponto de interpolação do i -ésimo elemento, i.e., $v_j \equiv P_i^k$. A solução aproximada U_m definida em Ω fica caracterizada por

$$U_m = \sum_{j=1}^{n_g} \Phi_j(\zeta) U_{m,i}^k, \quad \zeta \in \Omega. \quad (5.35)$$

A função básica global Φ_j associada a v_j é tal que

$$\Phi_l(v_j) = \begin{cases} 0 & \text{se } l \neq j \\ 1 & \text{se } l = j \end{cases}. \quad (5.36)$$

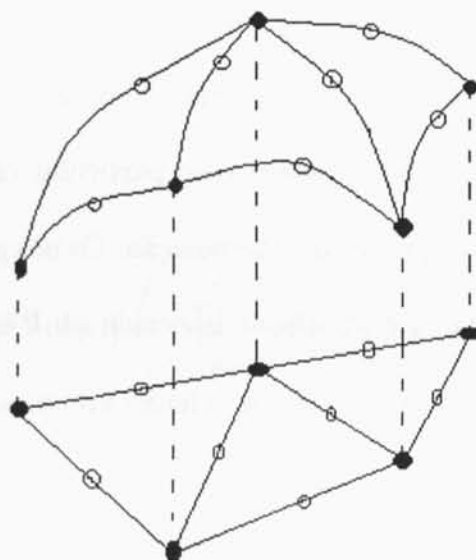


Figura 5.7 Solução aproximada, U_m , definida por interpolação

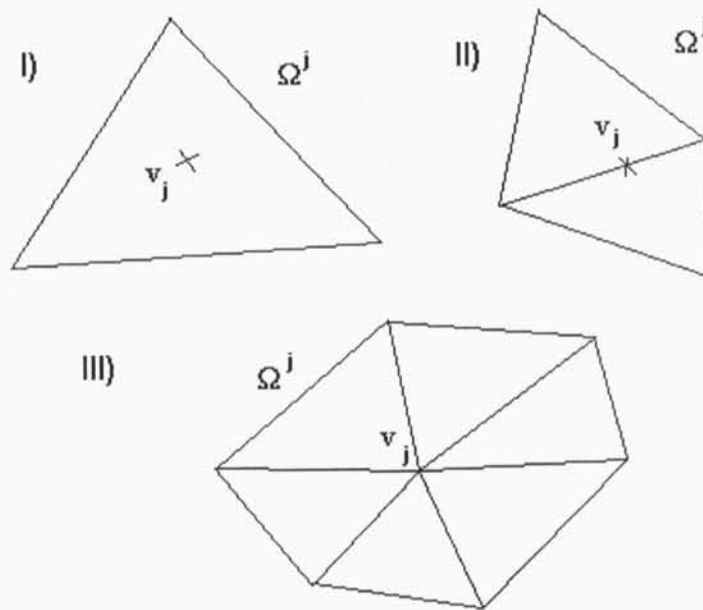


Figura 5.8 Suporte do ponto de interpolação v_j

Designemos por *suporte de v_j* o conjunto

$$\Omega^j = \bigcup_{g=1}^I \Omega_g,$$

onde $v_j \in \Omega_g$, $g = 1, \dots, I$, tal como representado na figura (5.8). De (5.35) temos

$$\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,i}^k} = \Phi_j(\zeta), \quad (5.37)$$

em que:

1. Se $v_j \in \overset{o}{\Omega}_i$, de acordo com a figura 5.8 I, então

$$\Phi_j(\zeta) = \begin{cases} 0 & \text{se } \zeta \notin \Omega_i \\ \phi_{i,k} & \text{se } \zeta \in \Omega_i \end{cases}, \quad (5.38)$$

onde $\phi_{i,k}$ é a função básica local associada a P_i^k dada por (5.17).

2. Se $v_j \in \delta\Omega_i$, $\delta\Omega_i$ a fronteira de Ω_i , e não é nó espacial, figura 5.8 II, então v_j pertence à aresta comum a dois elementos, Ω_{l1} e Ω_{l2} , i.e., $v_j \equiv P_{l1}^{k1}$ de Ω_{l1} e $v_j \equiv P_{l2}^{k2}$ de Ω_{l2} . Donde,

$$\Phi_j(\zeta) = \begin{cases} 0 & \text{se } \zeta \notin (\Omega_{l1} \cup \Omega_{l2}) \\ \phi_{l1,k1} & \text{se } \zeta \in \Omega_{l1} \\ \phi_{l2,k2} & \text{se } \zeta \in \Omega_{l2} \end{cases}. \quad (5.39)$$

3. Se $v_j \in \delta\Omega_i$ é nó espacial, figura 5.8 III, então $v_j \equiv \zeta_l$ pertence aos I elementos que têm ζ_l por vértice. Assim,

$$\Phi_i(\zeta) = \begin{cases} 0 & \text{se } \zeta \notin \bigcup_{s=1}^I \Omega_{ls} \\ \phi_{ls,ks} & \text{se } \zeta \in \Omega_{ls}, \quad ls = 1, \dots, I \end{cases}. \quad (5.40)$$

Caracterizemos a variação de U_m com a variação da abscissa de um nó espacial $\frac{\partial U_m}{\partial x_l}$ e com a variação da ordenada de um nó espacial, $\frac{\partial U_m}{\partial y_l}$. Mantendo fixos todos os parâmetros dos quais U_m depende e fazendo variar apenas x_l , a aproximação U_m

apenas varia nos elementos que têm por vértice ζ_l . Seja Ω_i um desses elementos. Em Ω_i

$$U_m(x, y, t) |_{\Omega_i} = U_{m,i} = \sum_{r=1}^{n_p} \phi_r(\zeta) U_{m,i}^r \quad (5.41)$$

e

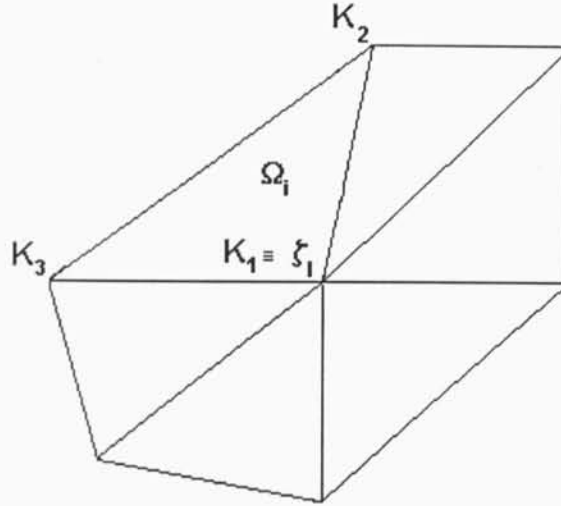
$$\frac{\partial U_{m,i}}{\partial x_l} = \sum_{r=1}^{n_p} \frac{\partial \phi_r}{\partial x_l}(\zeta) U_{m,i}^r. \quad (5.42)$$

Para calcular $\frac{\partial \phi_r}{\partial x_l}$, atendendo a (5.17) temos que

$$\frac{\partial \phi_r}{\partial x_l} = \sum_{N=1}^3 \frac{\partial}{\partial L_N} (B^{(r)}(L_N)) \frac{\partial L_N}{\partial x_l} \left[\prod_{K=1, K \neq N}^3 B^{(r)}(L_K) \right]. \quad (5.43)$$

Admitindo que ζ_l é o K_1 -ésimo vértice de Ω_i e que os outros dois vértices são K_2 e K_3 , numerados no sentido directo, figura 5.9, a partir da definição de L_N (5.12) e de (5.14) podemos escrever,

$$\frac{\partial L_N}{\partial x_{K_1}} = -(\det(M))^{-1} \Delta y_N L_{K_1}. \quad (5.44)$$

Figura 5.9 Malha espacial em torno de ζ_l

Donde

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \phi_r}{\partial x_l} = & -(\det(M))^{-1} L_{K_1} \left\{ \Delta y_{K_1} \left[\frac{\partial}{\partial L_{K_1}} (B^{(r)}(L_{K_1})) \right] B^{(r)}(L_{K_2}) B^{(r)}(L_{K_3}) \right. \\
 & + \Delta y_{K_2} \left[\frac{\partial}{\partial L_{K_2}} (B^{(r)}(L_{K_2})) \right] B^{(r)}(L_{K_1}) B^{(r)}(L_{K_3}) + \\
 & \left. \Delta y_{K_3} \left[\frac{\partial}{\partial L_{K_3}} (B^{(r)}(L_{K_3})) \right] B^{(r)}(L_{K_1}) B^{(r)}(L_{K_2}) \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

Comparando (5.45) com (5.27), concluímos que

$$\frac{\partial \phi_r}{\partial x_l} = -L_{K_1} \frac{\partial \phi_r}{\partial x} \tag{5.46}$$

Fazendo agora intervir (5.42) e (5.19) segue-se que

$$\frac{\partial U_{m,i}}{\partial x_l} = -L_{K_1} \frac{\partial U_{m,i}}{\partial x}. \quad (5.47)$$

De modo análogo, mantendo fixos todos os parâmetros dos quais U_m depende e fazendo variar apenas y_l , temos que

$$\frac{\partial U_{m,i}}{\partial y_l} = \sum_{r=1}^{n_p} \frac{\partial \phi_r}{\partial y_l}(\zeta) U_{m,i}^r \quad (5.48)$$

e

$$\frac{\partial \phi_r}{\partial y_l} = \sum_{N=1}^3 \frac{\partial}{\partial L_N} (B^{(r)}(L_N)) \frac{\partial L_N}{\partial y_l} \left[\prod_{K=1, K \neq N}^3 B^{(r)}(L_K) \right], \quad (5.49)$$

com

$$\frac{\partial L_N}{\partial y_{K_1}} = -(\det(M))^{-1} \Delta x_N L_{K_1}, \quad (5.50)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_r}{\partial y_l} = & -(\det(M))^{-1} L_{K_1} \left\{ \Delta x_{K_1} \left[\frac{\partial}{\partial L_{K_1}} (B^{(r)}(L_{K_1})) \right] B^{(r)}(L_{K_2}) B^{(r)}(L_{K_3}) \right. \\ & + \Delta x_{K_2} \left[\frac{\partial}{\partial L_{K_2}} (B^{(r)}(L_{K_2})) \right] B^{(r)}(L_{K_1}) B^{(r)}(L_{K_3}) + \\ & \left. \Delta x_{K_3} \left[\frac{\partial}{\partial L_{K_3}} (B^{(r)}(L_{K_3})) \right] B^{(r)}(L_{K_1}) B^{(r)}(L_{K_2}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Comparando (5.51) com (5.28) concluímos que

$$\frac{\partial \phi_r}{\partial y_l} = -L_{K_1} \frac{\partial \phi_r}{\partial y}. \quad (5.52)$$

Fazendo agora intervir (5.48) e (5.20), segue-se que

$$\frac{\partial U_{m,i}}{\partial y_l} = -L_{K_1} \frac{\partial U_{m,i}}{\partial y}. \quad (5.53)$$

Uma vez que U_m depende apenas de $U_{m,i}^k$ e de ζ_l podemos escrever,

$$\frac{\partial U_m}{\partial t} = \sum_{i=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_t} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,i}^k} \frac{\partial U_{m,i}^k}{\partial t} + \sum_{l=1}^{n_s} \frac{\partial U_m}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial t} + \sum_{l=1}^{n_s} \frac{\partial U_m}{\partial y_l} \frac{\partial y_l}{\partial t}. \quad (5.54)$$

Observe-se que a fronteira é fixa, pelo que o movimento dos nós espaciais da fronteira de Ω não é livre. Admitimos que um nó espacial que inicialmente se encontra na fronteira de Ω permanece na fronteira durante todo o processo de integração, pelo que os dois últimos somatórios de (5.54) têm na realidade menos parcelas. O mesmo sucede em relação ao primeiro somatório quando são impostas condições de Dirichlet.

Designando por

$$\dot{U}_{m,i}^k = \frac{\partial U_{m,i}^k}{\partial t}, \quad m = 1, \dots, n, \quad i = 1, \dots, n_e, \quad k = 1, \dots, n_p \quad (5.55)$$

e por

$$\dot{x}_l = \frac{\partial x_l}{\partial t}, \quad l = 1, \dots, n_s \quad (5.56)$$

e

$$\dot{y}_l = \frac{\partial y_l}{\partial t}, \quad l = 1, \dots, n_s, \quad (5.57)$$

a equação (5.54) escreve-se

$$\frac{\partial U_m}{\partial t} = \sum_{i=1}^{n_e} \sum_{k=1}^{n_t} \frac{\partial U_m}{\partial U_{m,i}^k} \dot{U}_{m,i}^k + \sum_{l=1}^{n_s} \frac{\partial U_m}{\partial x_l} \dot{x}_l + \sum_{l=1}^{n_s} \frac{\partial U_m}{\partial y_l} \dot{y}_l, \quad (5.58)$$

com $\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,i}^k}$ definido por (5.37), $\frac{\partial U_m}{\partial x_l}$ por (5.47) e $\frac{\partial U_m}{\partial y_l}$ por (5.53).

5.3.3 Formulação do MEFM

Com o objectivo de estabelecer as equações gerais do MEFM, defina-se o resíduo associado a cada uma das equações do sistema de EDP

$$\begin{aligned} R_m = & \frac{\partial U_m}{\partial t} - \sum_{k=1}^n \left[f_{m,k} \left(x, t, \mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \right) \frac{\partial^2 U_k}{\partial x^2} \right] - \\ & - \sum_{k=1}^n \left[g_{m,k} \left(x, t, \mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \right) \frac{\partial^2 U_k}{\partial y^2} \right] - h_m \left(x, t, \mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (5.59)$$

A solução aproximada que procuramos fica determinada desde que, para cada instante t , seja possível conhecer

$$\begin{aligned} U_{m,i}^k, \quad m &= 1, \dots, n, \quad i = 1, \dots, n_e, \quad k = 1, \dots, n_p \\ (x_l, y_l), \quad l &= 1, \dots, n_s. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Ora, tal como em 1-D, estes valores são obtidos minimizando a função

$$\mathcal{T} = \sum_{s=1}^n \iint_{\Omega} (R_s)^2 d\Omega + \sum_{i=1}^{n_e} (P_i)^2, \quad (5.61)$$

com respeito a

$$\begin{aligned} \dot{U}_{m,i}^k, \quad m &= 1, \dots, n, \quad i = 1, \dots, n_e, \quad k = 1, \dots, n_p \\ \dot{x}_l, \dot{y}_l, \quad l &= 1, \dots, n_s. \end{aligned} \quad (5.62)$$

A minimização de $\mathcal{T}$ é obtida fazendo

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{x}_l} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{y}_l} = 0 \end{cases} \quad (5.63)$$

com $m = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, n_e$, $k = 1, \dots, n_p$ e $l = 1, \dots, n_s$, resultando um sistema de EDO de grande dimensão nas variáveis $U_{m,i}^k(t)$, $x_l(t)$ e $y_l(t)$.

Para cada elemento finito Ω_i considerem-se os vectores,

$$\begin{aligned} Y_i^1 &= [x_{k_1}, y_{k_1}, U_{1,i}^1, \dots, U_{n,i}^1]^T \\ Y_i^2 &= [x_{k_2}, y_{k_2}, U_{1,i}^2, \dots, U_{n,i}^2]^T \\ Y_i^3 &= [x_{k_3}, y_{k_3}, U_{1,i}^3, \dots, U_{n,i}^3]^T \\ Y_i^4 &= [U_{1,i}^4, \dots, U_{n,i}^4, \dots, U_{1,i}^{n_p}, \dots, U_{n,i}^{n_p}]^T, \end{aligned} \quad (5.64)$$

em que (x_{k_i}, y_{k_i}) , $i = 1, 2, 3$, é o i -ésimo vértice de Ω_i . Percorrendo a malha espacial elemento a elemento e eliminando as variáveis repetidas, definamos o vector

$$\mathbf{Y}(t) = [\dots, Y_i^1, Y_i^2, Y_i^3, Y_i^4, \dots]^T, \quad l = 1, \dots, n_e. \quad (5.65)$$

Deste modo o sistema de EDP inicial converte-se num sistema de EDO que na forma matricial tem a forma,

$$\mathcal{A}(\mathbf{Y}(t)) \dot{\mathbf{Y}} = \mathcal{G}(\mathbf{Y}(t)), \quad t > 0, \quad \mathbf{Y}(0) = \mathbf{Y}_0.$$

5.3.4 Singularidades

O segundo somatório que constitui a função objectivo (5.61) permite evitar situações de singularidade da matriz de massa, $\mathcal{A}$, que define o sistema de EDO. As singularidades de $\mathcal{A}$ decorrem do facto de $\mathcal{A}$ ser obtida por um processo de optimização e, portanto, toda a informação redundante resultar em singularidades. Um motivo que

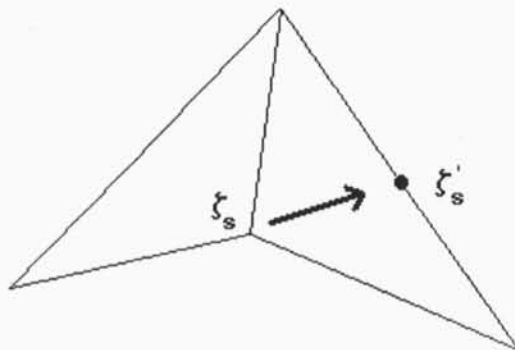


Figura 5.10 Malha degenerada, triângulo de área nula

conduz ao aparecimento de singularidades é a ocorrência de paralelismo. Esta situação ocorre sempre que a parametrização (5.58) de $\frac{\partial U_m}{\partial t}$ degenera, o que acontece, por exemplo, na ausência de curvatura na solução da EDP. Outra fonte de singularidades é a distorção da malha. Em 1-D isso ocorria, como vimos, sempre que dois nós da malha colidiam. Em 2-D a distorção é provocada sempre que a área de um elemento se anula, o que acontece quando dois nós colidem ou quando um nó se desloca para uma posição sobre o lado oposto, tal como representado na figura 5.10. Essa distorção pode também ocorrer se um nó atravessa para o lado oposto, tornando a área negativa, como a figura 5.11 ilustra. Seja

$$P_i = \epsilon_i \dot{\Delta}_i - S_i, \quad i = 1, \dots, n_e, \quad (5.66)$$

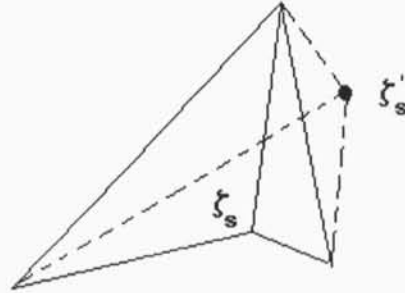


Figura 5.11 Malha degenerada, triângulo de área negativa

a penalização associada ao elemento Ω_i , de área $\Delta_i = A(\Omega_i)$, onde $\dot{\Delta}_i = \frac{\partial \Delta_i}{\partial t}$ e

$$\begin{aligned} S_i &= \frac{c_1}{\Delta_i - c_3} \left(1 + \frac{c_3}{\Delta_i - c_3} \right)^2, \\ \epsilon_i &= \left(\frac{c_2}{\Delta_i - c_3} + c_2 \right) \left(1 + \frac{c_3}{\Delta_i - c_3} \right)^2, \end{aligned} \quad (5.67)$$

com c_1 , c_2 e c_3 constantes positivas, pequenas. Por 5.15 segue-se que

$$\frac{\partial \Delta_i}{\partial t} = \dot{\Delta}_i = \frac{1}{2} (\dot{x}_1 \Delta y_1 + \dot{x}_2 \Delta y_2 + \dot{x}_3 \Delta y_3 + \dot{y}_1 \Delta x_1 + \dot{y}_2 \Delta x_2 + \dot{y}_3 \Delta x_3), \quad (5.68)$$

donde,

$$\frac{\partial \dot{\Delta}_i}{\partial \dot{x}_N} = \frac{1}{2} \Delta y_N, \quad N = 1, 2, 3, \quad (5.69)$$

$$\frac{\partial \dot{\Delta}_i}{\partial \dot{y}_N} = \frac{1}{2} \Delta x_N, \quad N = 1, 2, 3. \quad (5.70)$$

5.3.5 O sistema de EDO

A formulação do MEFM definida nas secções anteriores conduz ao sistema de EDO definido por (5.63). Vamos deduzir cada uma dessas equações.

Primeira equação

Uma vez que $\dot{U}_{m,i}^k$ não intervém na definição das penalizações temos que,

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} = \frac{\partial}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} \left(\sum_{s=1}^n \iint_{\Omega} (R_s)^2 d\Omega \right) = 2 \sum_{s=1}^n \iint_{\Omega} R_s \frac{\partial R_s}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} d\Omega. \quad (5.71)$$

Atendendo à expressão (5.59) que define R_s e à expressão (5.58) que define $\frac{\partial U_s}{\partial t}$, segue-se que,

$$\frac{\partial R_s}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} = \frac{\partial}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} \left(\frac{\partial U_s}{\partial t} \right) = \begin{cases} 0 & \text{se } s \neq m \\ \frac{\partial U_m}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} & \text{se } s = m \end{cases}, \quad (5.72)$$

pelo que a primeira equação do sistema (5.63) se escreve

$$\iint_{\Omega} R_m \frac{\partial U_m}{\partial \dot{U}_{m,i}^k} d\Omega = 0, \quad (5.73)$$

para $m = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, n_e$ e $k = 1, \dots, n_p$.

Seja $\Omega^j = \bigcup_{g=1}^I \Omega_g$ o suporte do nó global $v_j \equiv P_i^k \in \Omega_i$. Recordando que

$$\frac{\partial U_m}{\partial U_{m,i}^k} = \begin{cases} \Phi_j & \text{se } \zeta \in \Omega^j \\ 0 & \text{se } \zeta \notin \Omega^j \end{cases} \quad (5.74)$$

a primeira equação do sistema (5.63) escreve-se

$$\iint_{\Omega^j} R_m \Phi_j d\Omega = 0, \quad (5.75)$$

com $m = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, n_g$. Finalmente por (5.59) temos

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega^j} \Phi_j \frac{\partial U_m}{\partial t} d\Omega &= \iint_{\Omega^j} \left[\Phi_j \sum_{l=1}^n f_{m,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} \right] d\Omega + \\ &+ \iint_{\Omega^j} \left[\Phi_j \sum_{l=1}^n g_{m,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial y^2} \right] d\Omega + \\ &+ \iint_{\Omega^j} (\Phi_j h_m) d\Omega, \end{aligned} \quad (5.76)$$

para $m = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, n_g$.

Segunda equação

A segunda equação do sistema (5.63), $\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{x}_l} = 0$, é equivalente a

$$\sum_{s=1}^n \iint_{\Omega} 2R_s \frac{\partial R_s}{\partial \dot{x}_l} d\Omega + \sum_{j=1}^{n_e} 2P_j \frac{\partial P_j}{\partial \dot{x}_l} = 0. \quad (5.77)$$

Seja $\Omega^l = \bigcup_{i=1}^I \Omega_i$ o suporte do nó espacial $\zeta_l = (x_l, y_l)$, como a figura 5.9 ilustra.

Admitindo que para o elemento $\Omega_i, i = 1, \dots, I$, o l -ésimo nó espacial é o K_1 -ésimo vértice, então,

$$\frac{\partial P_i}{\partial \dot{x}_l} = 0, \quad \zeta \notin \Omega^l \quad (5.78)$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial \dot{x}_l} = \frac{1}{2} \epsilon_i \Delta y_{K_1}, \quad \zeta \in \Omega_i. \quad (5.79)$$

Por outro lado, atendendo à equação do resíduo, (5.59),

$$\frac{\partial R_s}{\partial \dot{x}_l} = \frac{\partial}{\partial \dot{x}_l} \left(\frac{\partial U_s}{\partial t} \right) = \frac{\partial U_s}{\partial x_l}, \quad (5.80)$$

onde, a segunda equação escreve-se

$$\iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x_l} R_s \right) d\Omega + \sum_{i=1}^I \frac{1}{2} \epsilon_i \Delta y_{K_1} P_i = 0, \quad l = 1, \dots, n_s, \quad (5.81)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega^l} \sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x_l} \frac{\partial U_s}{\partial t} d\Omega &= \iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x_l} \sum_{j=1}^n f_{s,j} \frac{\partial^2 U_j}{\partial x^2} \right) d\Omega + \\ &+ \iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x_l} \sum_{j=1}^n g_{s,j} \frac{\partial^2 U_j}{\partial y^2} \right) d\Omega + \\ &+ \iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x_l} h_s \right) d\Omega - \sum_{i=1}^I \frac{1}{2} \epsilon_i \Delta y_{K_1} (\epsilon_i \dot{\Delta}_i - S_i), \end{aligned} \quad (5.82)$$

para $l = 1, \dots, n_s$.

Terceira equação

Por analogia com a segunda equação do sistema (5.63), a terceira equação

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{y}_l} = 0, \text{ é}$$

$$\iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial y_l} R_s \right) d\Omega + \sum_{i=1}^I \frac{1}{2} \epsilon_i \Delta x_{K_1} P_i = 0, \quad l = 1, \dots, n_s, \quad (5.83)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial y_l} \frac{\partial U_s}{\partial t} \right) d\Omega &= \iint_{\Omega^l} \left(\sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial y_l} \sum_{j=1}^n f_{s,j} \frac{\partial^2 U_j}{\partial x^2} \right) d\Omega + \\ &+ \iint_{\Omega^l} \sum_{s=1}^n \left(\frac{\partial U_s}{\partial y_l} \sum_{j=1}^n g_{s,j} \frac{\partial^2 U_j}{\partial y^2} \right) d\Omega + \\ &+ \iint_{\Omega^l} \sum_{s=1}^n \left(\frac{\partial U_s}{\partial y_l} h_s \right) d\Omega - \sum_{i=1}^I \frac{1}{2} \epsilon_i \Delta x_{K_1} (\epsilon_i \dot{\Delta}_i - S_i), \end{aligned} \quad (5.84)$$

para $l = 1, \dots, n_s$.

5.3.6 Cálculo dos integrais

Para explicitarmos o sistema de EDO (5.63) necessitamos avaliar os integrais que intervêm nas equações (5.76), (5.82) e (5.84). Estes integrais são calculados em cada elemento Ω_i , por integração numérica, usando n_q pontos de Ω_i .

Seja $Q_k = (L_1, L_2, L_3)$ um ponto de quadratura. Então,

$$\iint_{\Omega_i} \mathcal{F}(x, y) d\Omega = A(\Omega_i) \sum_{k=1}^{n_q} W(k) \mathcal{F}(Q_k),$$

onde $A(\Omega_i)$ é a área do elemento Ω_i , $W(k)$ o peso expresso em coordenadas baricêntricas, associado ao ponto de quadratura Q_k e $\mathcal{F}(Q_k)$ o valor da função integranda em Q_k . O trabalho mais significativo relativamente ao cálculo aproximado de integrais múltiplos foi o publicado em 1971 por Stroud [73]. As fórmulas de quadratura gaussiana usadas na implementação do MEFM são as descritas por Cowper em [27].

A solução aproximada U_s é, em cada elemento Ω_i , um polinómio de grau p . As segundas derivadas espaciais não estão definidas nas arestas dos triângulos. Alguns dos integrais que figuram nas equações (5.76), (5.82) e (5.84), os que envolvem segundas derivadas, carecem de significado. Para lhes dar existência, admitimos que, numa vizinhança $\mathcal{V}_\delta$ das arestas, a solução aproximada U_s é suavizada, i.e., U_s é substituída por $\tilde{U}_s$ tal que $\tilde{U}_s$ possui propriedades suficientes de continuidade para que aqueles integrais existam e ainda que $\tilde{U}_s \rightarrow U_s$ quando $\delta \rightarrow 0$. A figura 5.12 apresenta, a sombreado, a definição da vizinhança $\mathcal{V}_\delta$ para o suporte de um nó espacial. Deste modo vamos calcular todos os integrais que figuram nas equações (5.76), (5.82) e (5.84) com $\tilde{U}_s$ em vez de U_s e fazer $\delta \rightarrow 0$. No entanto, apenas necessitamos avaliar os integrais que envolvem segundas derivadas no interior de cada elemento, sobre os lados adjacentes ao nó espacial ζ_j , e sobre o lado que contém o nó global no caso em que este não é nó da malha espacial, figura 5.8 II, pois:

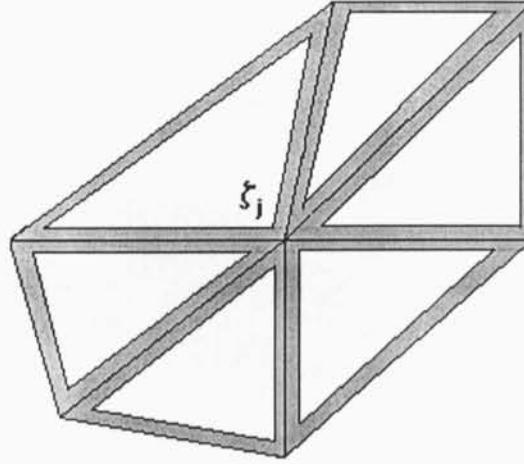


Figura 5.12 V_δ para o suporte de um nó espacial

1. Nos lados opostos ao nó global, $\Phi_j \sim \mathcal{O}(\delta)$ e, portanto, os integrais anulam-se quando $\delta \rightarrow 0$.
2. Em todas as vizinhanças $\mathcal{V}_\delta^j$ de um nó espacial, ζ_j , os integrais que envolvem segundas derivadas espaciais anulam-se quando $\delta \rightarrow 0$. No suporte de ζ_j , $\Omega^j = \bigcup_{i=1}^I \Omega_i$ considere-se uma vizinhança $\mathcal{V}_\delta^j$ de ζ_j , de acordo com a figura 5.13. Para simplicidade de exposição admitamos que se trata de um problema escalar. Considere-se o triângulo $\Upsilon_{i,\delta} = \Omega_i \cap \mathcal{V}_\delta^j$ e defina-se T_i como sendo o plano definido por $U(\zeta_j)$, $U(P_1)$ e $U(P_2)$. Em $\Upsilon_{i,\delta}$ tome-se $U = T_i$. Então em $\mathcal{V}_\delta^j$ a função base é $\Phi_j = \alpha_j$, sendo α_j a função chapéu com suporte $\Upsilon_{i,\delta}$ ilustrada na figura 5.14. Assim, em $\Upsilon_{i,\delta}$, definimos uma aproximação seccionalmente linear T^j tal que $T^j|_{\Omega_i} \equiv T_i$. Recorrendo ao estudo feito para aproximações

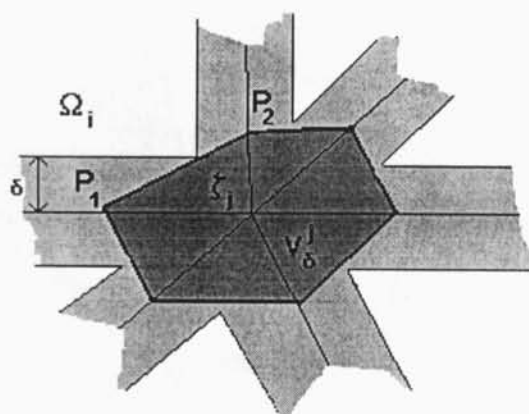


Figura 5.13 Vizinhança δ , $\mathcal{V}_\delta^j$, de um nó espacial

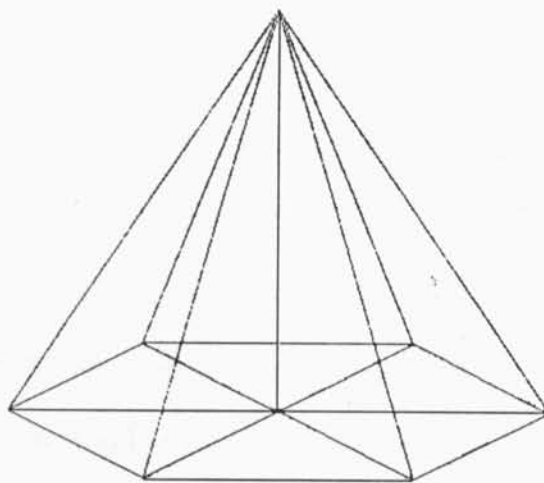


Figura 5.14 Função de base α_j

lineares [18] temos que, para $\tau \in \Upsilon_{i,\delta}$,

$$\frac{\partial T}{\partial t}(\tau) = \sum_j \dot{T}^j \alpha_j + \dot{x}_j \beta_j + \dot{y}_j \gamma_j, \quad (5.85)$$

com $\beta_j = -\frac{\partial T^j}{\partial x} \alpha_j$ e $\gamma_j = -\frac{\partial T^j}{\partial y} \alpha_j$. Supondo que a EDP a resolver tem a forma $u_t = \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u)$ e usando a abordagem proposta por [84], o produto interno de β_j por u_t (ou de γ_j por u_t) pode ser tratado do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \langle \beta_j, u_t \rangle &= \int_{\Omega \setminus \Upsilon_{i,\delta}} \beta_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega + \sum_{i=1}^I \int_{\Upsilon_{i,\delta}} \beta_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega \quad (5.86) \\ &= \int_{\Omega \setminus \Upsilon_{i,\delta}} \beta_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega + \sum_{i=1}^I \int_{\Upsilon_{i,\delta}} -T_x \alpha_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega \end{aligned}$$

e, como T_x é constante em cada um dos triângulos suporte de α_j , temos

$$\Upsilon = \sum_{i=1}^I \int_{\Upsilon_{i,\delta}} -T_x \alpha_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega = \sum_{i=1}^I -T_x(\tau) \int_{\Upsilon_{i,\delta}} \alpha_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega. \quad (5.87)$$

Os integrais $\int_{\Upsilon_{i,\delta}} \alpha_j \nabla \cdot \Psi(u, \nabla u) d\Omega$ estão bem definidos e podem ser aproximados por um produto da área de $\Upsilon_{i,\delta}$ por um valor que não depende de δ . Como a área de cada um dos triângulos $\Upsilon_{i,\delta}$ tende para zero quando $\delta \rightarrow 0$, segue-se que $\Upsilon \rightarrow 0$ quando $\delta \rightarrow 0$. Deste modo, para uma certa classe de problemas, não é necessário avaliar os integrais que envolvem segundas derivadas espaciais

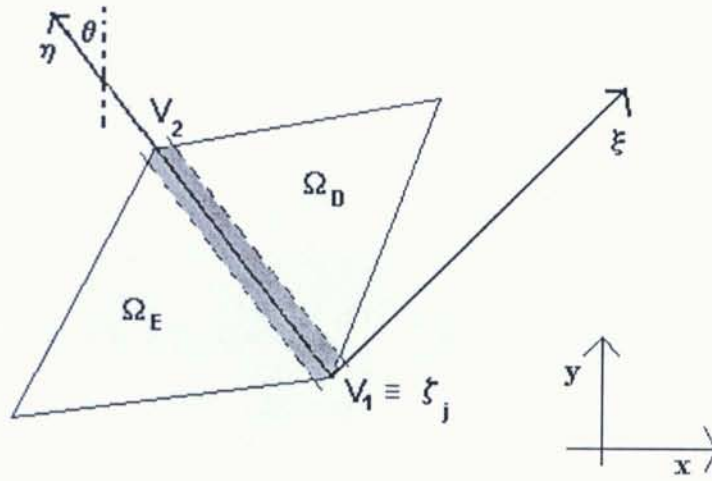


Figura 5.15 Mudança de variável sobre uma aresta

em torno dos nós espaciais, mas apenas no interior de cada elemento e numa vizinhança δ das arestas adjacentes ao nó espacial.

Cálculo dos integrais sobre as arestas

Em cada vizinhança δ das arestas adjacentes a um nó espacial pretendemos calcular integrais do tipo

$$\mathcal{I}_a = \iint_R \left[\mathcal{F}_s \left(f_{s,j} \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial x^2} + g_{s,j} \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial y^2} \right) \right] dx dy, \quad (5.88)$$

em que $\tilde{U}_j$ é uma suavização de U_j , a j -ésima componente de $\mathbf{U}$, $R = [-\delta, \delta] \times [0, a]$ a região sombreada da figura 5.15, a o comprimento da aresta $[V_1 V_2]$ adjacente ao nó espacial ζ_j , $\delta > 0$ e $\mathcal{F}_s = \mathcal{F}_s(x, y)$. A suavização $\tilde{U}_j$ da função U_j é tal que o gráfico de uma sua secção provocada por um corte perpendicular à aresta é, para $\xi \in$

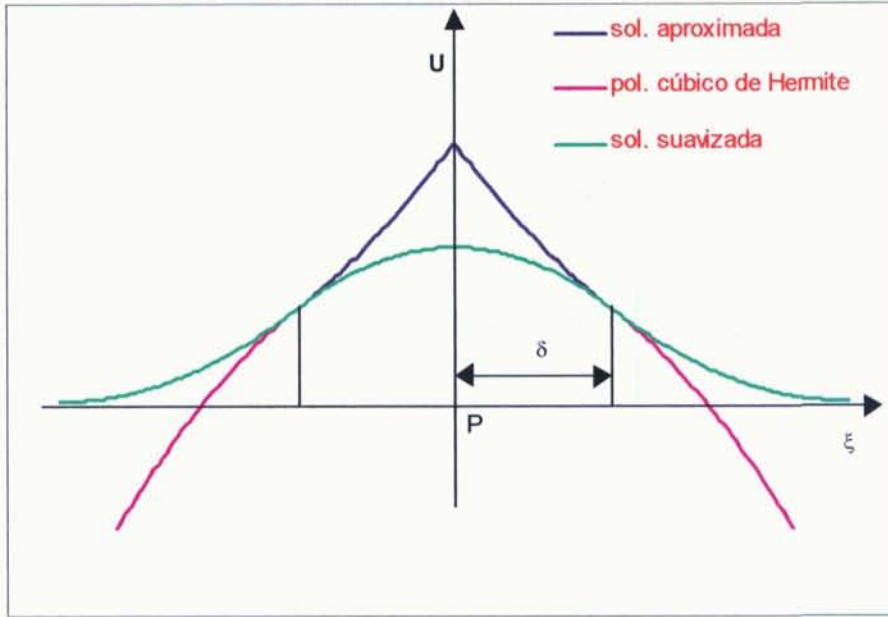


Figura 5.16 Gráfico da solução aproximada suavizada, $\tilde{U}_j$, numa secção perpendicular à aresta

$[-\delta, \delta]$, o polinômio cúbico de Hermite definido para 1-D, como a figura 5.16 ilustra. Para o cálculo de $\mathcal{I}_a$, (5.88), consideremos a mudança de coordenadas definida pela composição de uma rotação de um ângulo θ , no sentido directo, com uma translação definida pelo vector $\overrightarrow{OV_1}$, representada na figura 5.15 e definida por

$$\begin{cases} \xi + \alpha = x \cos \theta + y \sin \theta \\ \eta + \beta = y \cos \theta - x \sin \theta \end{cases}, \quad (5.89)$$

em que,

$$\begin{cases} \alpha = \gamma_1 \cos \theta + \gamma_2 \sin \theta \\ \beta = \gamma_2 \cos \theta - \gamma_1 \sin \theta \end{cases}, \quad (5.90)$$

sendo (γ_1, γ_2) as coordenadas cartesianas de V_1 . Então,

$$\begin{cases} x = (\alpha + \xi) \cos \theta - (\beta + \eta) \sin \theta \\ y = (\alpha + \xi) \sin \theta + (\beta + \eta) \cos \theta \end{cases}, \quad (5.91)$$

donde,

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \xi} = \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x} \cos \theta + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial y} \sin \theta \\ \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \eta} = \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x} \sin \theta - \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial y} \cos \theta \end{cases} \quad (5.92)$$

e

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \xi} \cos \theta - \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \eta} \sin \theta \\ \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial y} = \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \xi} \sin \theta + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \eta} \cos \theta \end{cases}. \quad (5.93)$$

Quanto às segundas derivadas, admitindo condições suficientes de continuidade para

$\tilde{U}_j$ e suas derivadas parciais, temos

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \xi^2} \cos^2 \theta - 2 \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \xi \partial \eta} \cos \theta \sin \theta + \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \eta^2} \sin^2 \theta \\ \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \xi^2} \sin^2 \theta + 2 \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \xi \partial \eta} \cos \theta \sin \theta + \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \eta^2} \cos^2 \theta \end{cases}. \quad (5.94)$$

Substituindo (5.94) no integral (5.88), o único integral não nulo é

$$\mathcal{I}_a = \int_0^a \left[\int_{-\delta}^{\delta} \mathcal{F}_s(\xi, \eta) (f_{s,j}(\xi, \eta) \cos^2 \theta + g_{s,j}(\xi, \eta) \sin^2 \theta) \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \xi^2} d\xi \right] d\eta, \quad (5.95)$$

pois todas as outras parcelas podem ser aproximadas por um produto de δ por um valor que não depende de δ . No limite, quando $\delta \rightarrow 0$, obtemos para esses integrais o valor zero. Resta-nos calcular o integral (5.95).

Seja $P = (0, \eta_a)$, $0 \leq \eta_a \leq a$, um ponto sobre a aresta. Aplicando o estudo feito para 1-D podemos definir as primeiras e segundas derivadas em ordem à nova variável espacial ξ , no ponto angular P , como sendo

$$\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \xi} \Big|_P \sim \frac{\frac{\partial U_j}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_D} + \frac{\partial U_j}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_E}}{2} \quad (5.96)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial \xi^2} \Big|_P \sim \frac{\frac{\partial U_j}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_D} - \frac{\partial U_j}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_E}}{2\delta}. \quad (5.97)$$

Usando quadratura gaussiana em 1-D ao longo da aresta e aproximando o integral interior, por exemplo, pela regra do ponto médio, fazendo $\delta \rightarrow 0$, obtemos para $\mathcal{I}_a$ o valor

$$\mathcal{I}_a = a \sum_P w(P) \left(\frac{\partial U_j}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_D} - \frac{\partial U_j}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_E} \right) [\mathcal{F}_s (f_{s,j} \cos^2 \theta + g_{s,j} \sin^2 \theta)] \Big|_P, \quad (5.98)$$

onde $w(P)$ é o peso associado ao ponto de quadratura em 1-D.

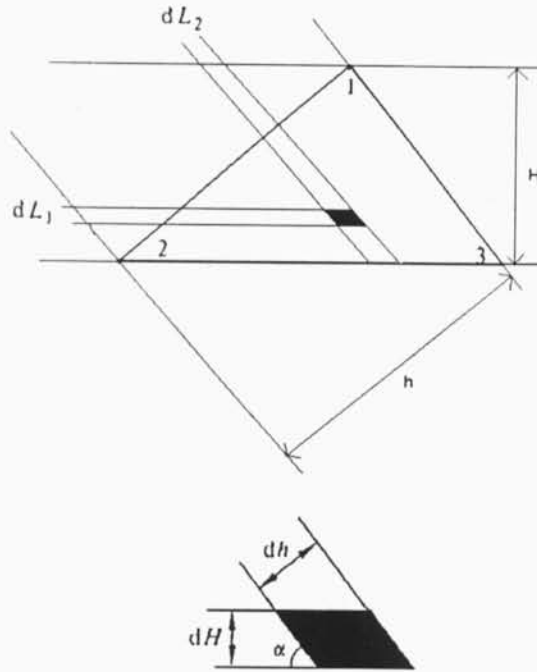


Figura 5.17 Cálculo de integrais em coordenadas triangulares

Cálculo de integrais em triângulos

A implementação do MEFM envolve o cálculo de alguns integrais com a forma

$$\mathcal{I} = \int_{\Omega_e} \mathcal{F}(L_1, L_2, L_3) dA, \quad (5.99)$$

em que Ω_e é um triângulo de área A . Com auxílio da figura 5.17 facilmente se verifica que

$$dA = \frac{dh dH}{\sin(\alpha)} = \frac{(h dL_1)(H dL_2)}{\sin(\alpha)} = 2A dL_1 dL_2 \quad (5.100)$$

e, portanto,

$$\mathcal{I} = 2A \int_0^1 \int_0^{1-L_1} \mathcal{F}(L_1, L_2, L_3) dL_1 dL_2. \quad (5.101)$$

Um caso particular importante é aquele em que

$$\mathcal{F}(L_1, L_2, L_3) = L_1^m L_2^n L_3^p.$$

Nesse caso $\mathcal{I}$ é dado por [22]

$$\mathcal{I} = 2A \frac{m!n!p!}{(m+n+p+2)!}. \quad (5.102)$$

Este resultado pode ser usado para calcular analiticamente todos os integrais que envolvem produtos das funções básicas ϕ_j , i.e., todos os integrais do tipo

$$\mathcal{I} = \int_{\Omega_e} \phi_j \phi_i dA. \quad (5.103)$$

5.4 Equações gerais do método

As equações que formam o sistema de EDO (5.63) resultante da discretização espacial do domínio Ω por elementos finitos foram deduzidas na secção 5.3.5. Essas equações requerem o cálculo das derivadas de cada uma das componentes da solução semi-discreta em ordem ao tempo, (5.58), o cálculo de diversos integrais (secção 5.3.6)

e a caracterização das funções de penalização (secção 5.3.4). Estamos assim em condições de escrever as equações gerais do MEFM.

Cada uma das equações do sistema de EDO é classificada de acordo com a origem da componente do vector $\mathbf{Y}(t)$ associada. Seja v_j o nó global associado ao k -ésimo ponto de interpolação do i -ésimo elemento, i.e., $v_j \equiv P_i^k$. Assim, dizemos que a w -ésima equação é de:

- *tipo 1* se a w -ésima componente de $\mathbf{Y}(t)$, $Y_w(t)$, tem origem no valor da m -ésima componente da solução aproximada num nó global, v_j , i.e., se $Y_w(t)$ tem origem no valor de $U_{m,i}^k$.
- *tipo 2* se $Y_w(t)$ tem origem no valor da abcissa de um nó espacial, x_j .
- *tipo 3* se $Y_w(t)$ tem origem no valor da ordenada de um dado nó espacial, y_j .

As equações gerais do método são:

Equação de tipo 1

De entre as equações de tipo 1 destacamos as que estão associadas a um nó espacial e as que estão associadas a um nó global que não é nó espacial.

Seja v_j um nó espacial e $\Omega^j = \bigcup_{g=1}^I \Omega_g$ o seu suporte. Admita-se que v_j é o gk -ésimo ponto de interpolação de Ω_g e que o nó espacial $l_i, i = 1, 2, 3$, é o ki -vértice de Ω_g . A equação de *tipo 1* escreve-se

$$\begin{aligned}
 & \sum_{g=1}^I \sum_{k=1}^{n_i} \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} \phi_{g,k} d\Omega \right) \dot{U}_{m,g}^k + \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \phi_{g,gk} \frac{\partial U_m}{\partial x} d\Omega \right) \dot{x}_{li} + \\
 & + \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \phi_{g,gk} \frac{\partial U_m}{\partial y} d\Omega \right) \dot{y}_{li} \\
 & = \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} \sum_{l=1}^n f_{m,l} \frac{\partial^2 U_m}{\partial x^2} d\Omega \right) + \\
 & + \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} \sum_{l=1}^n g_{m,l} \frac{\partial^2 U_m}{\partial y^2} d\Omega \right) + \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} h_m d\Omega \right) + \\
 & + \sum_{g=1}^I \int_0^{a_g} \phi_{g,gk} \sum_{l=1}^n (f_{m,l} \cos^2 \theta + g_{m,l} \sin^2 \theta) \left(\frac{\partial U_m}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_D} - \frac{\partial U_m}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_E} \right) d\eta,
 \end{aligned} \tag{5.104}$$

onde a_g é o comprimento da g -ésima aresta que contém o nó s_j , P um ponto dessa aresta, θ o ângulo de rotação e ξ, η as coordenadas (5.89).

Seja v_j um nó global que não é nó espacial e $\Omega^j = \bigcup_{g=1}^I \Omega_g$ o seu suporte. Admita-se que v_j é o gk -ésimo ponto de interpolação de Ω_g e que o nó espacial $l_i, i = 1, 2, 3$, é o ki -vértice de Ω_g . Neste caso a equação de *tipo 1* escreve-se

$$\begin{aligned}
 & \sum_{g=1}^I \sum_{k=1}^{n_t} \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} \phi_{g,k} d\Omega \right) \dot{U}_{m,g}^k + \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \phi_{g,gk} \frac{\partial U_m}{\partial x} d\Omega \right) \dot{x}_{li} + \\
 & + \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \phi_{g,gk} \frac{\partial U_m}{\partial y} d\Omega \right) \dot{y}_{li} \\
 & = \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} \sum_{l=1}^n f_{m,l} \frac{\partial^2 U_m}{\partial x^2} d\Omega \right) + \\
 & + \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} \sum_{l=1}^n g_{m,l} \frac{\partial^2 U_m}{\partial y^2} d\Omega \right) + \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} \phi_{g,gk} h_m d\Omega \right) + \\
 & + \int_0^a \phi_{g,gk} \sum_{l=1}^n (f_{m,l} \cos^2 \theta + g_{m,l} \sin^2 \theta) \left(\frac{\partial U_m}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_D} - \frac{\partial U_m}{\partial \xi} \Big|_{P \in \Omega_E} \right) d\eta
 \end{aligned} \tag{5.105}$$

onde a é o comprimento da aresta que contém o nó v_j , P um ponto dessa aresta, θ o ângulo de rotação e ξ, η as coordenadas (5.89).

Equação de tipo 2

Seja $\zeta_j = (x_j, y_j)$ um nó espacial e $\Omega^j = \bigcup_{g=1}^I \Omega_g$ o seu suporte. Seja ζ_j o $k1$ -ésimo vértice de Ω_g . Admita-se que o nó espacial $l_i, i = 1, 2, 3$, é o ki -vértice de Ω_g . A equação de *tipo 2* escreve-se

$$\begin{aligned}
& \sum_{g=1}^I \sum_{k=1}^{n_i} \left(\iint_{\Omega_g} -L_{k1} \phi_{g,k} \sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x} d\Omega \right) \dot{U}_{s,g}^k + \\
& \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} L_{ki} L_{k1} \sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x} \frac{\partial U_s}{\partial y} d\Omega \right) \dot{x}_{li} + \\
& \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} L_{ki} L_{k1} \sum_{s=1}^n \left(\frac{\partial U_s}{\partial y} \right)^2 d\Omega \right) \dot{y}_{li} + \sum_{g=1}^I \frac{1}{2} \varepsilon_g^2 \Delta y_{K1} \dot{\Delta}_g \\
& = \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \frac{\partial U_s}{\partial x} \sum_{l=1}^n f_{s,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} d\Omega \right) + \\
& \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \frac{\partial U_s}{\partial x} \sum_{l=1}^n g_{s,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial y^2} d\Omega \right) + \\
& + \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \frac{\partial U_s}{\partial x} h_s d\Omega \right) + \sum_{g=1}^I \frac{1}{2} \varepsilon_g S_g \Delta y_{K1} + \\
& + \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \int_0^{ag} -L_{ki} \left(\frac{\frac{\partial U_s}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_D} + \frac{\partial U_s}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_E}}{2} \cos \theta - \frac{\partial \tilde{U}_s}{\partial \eta} \sin \theta \right) S_s d\eta,
\end{aligned} \tag{5.106}$$

onde

$$S_s = \sum_{l=1}^n (f_{s,l} \cos^2 \theta + g_{s,l} \sin^2 \theta) \left(\frac{\partial U_l}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_D} - \frac{\partial U_l}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_E} \right), \tag{5.107}$$

a_g é o comprimento da g -ésima aresta que contém o nó ζ_j , P um ponto dessa aresta, θ o ângulo de rotação e ξ, η as coordenadas (5.89).

Para o cálculo de $\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial \eta}$ admitimos que $\tilde{U}_j(0, \eta) = \tilde{U}_j(\eta)$, $0 \leq \eta \leq a_g$ pode ser aproximado por um polinómio de grau $p + 1$.

Equação de tipo 3

Nas mesmas condições da equação de *tipo 2*, uma equação de *tipo 3* escreve-se

$$\begin{aligned}
 & \sum_{g=1}^I \sum_{k=1}^{n_t} \left(\iint_{\Omega_g} -L_{k1} \phi_{g,k} \sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial y} d\Omega \right) \dot{U}_{s,g}^k + \\
 & + \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} L_{ki} L_{k1} \sum_{s=1}^n \frac{\partial U_s}{\partial x} \frac{\partial U_s}{\partial y} d\Omega \right) \dot{x}_{li} + \\
 & + \sum_{g=1}^I \sum_{i=1}^3 \left(\iint_{\Omega_g} L_{ki} L_{k1} \sum_{s=1}^n \left(\frac{\partial U_s}{\partial y} \right)^2 d\Omega \right) \dot{y}_{li} + \sum_{g=1}^I \frac{1}{2} \varepsilon_g^2 \Delta x_{K1} \dot{\Delta}_g \\
 = & \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \frac{\partial U_s}{\partial y} \sum_{l=1}^n f_{s,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x^2} d\Omega \right) + \\
 & + \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \frac{\partial U_s}{\partial y} \sum_{l=1}^n g_{s,l} \frac{\partial^2 U_l}{\partial y^2} d\Omega \right) + \\
 & + \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \left(\iint_{\Omega_g} -L_{ki} \frac{\partial U_s}{\partial y} h_s d\Omega \right) + \sum_{g=1}^I \frac{1}{2} \varepsilon_g S_g \Delta x_{K1} + \\
 & + \sum_{s=1}^n \sum_{g=1}^I \int_0^{a_g} -L_{ki} \left(\frac{\frac{\partial U_s}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_D} + \frac{\partial U_s}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_E}}{2} \sin \theta + \frac{\partial \tilde{U}_s}{\partial \eta} \cos \theta \right) S_s d\eta,
 \end{aligned} \tag{5.108}$$

onde S_s é dado por (5.107), a_g é o comprimento da g -ésima aresta que contém o nó ζ_j , P um ponto dessa aresta, θ o ângulo de rotação e ξ, η as coordenadas (5.89).

5.4.1 Condições de fronteira

O sistema de EDO na variável tempo resultante da discretização espacial escreve-se, na forma matricial,

$$\mathcal{A}(\mathbf{Y}(t)) \dot{\mathbf{Y}} = \mathcal{G}(\mathbf{Y}(t)), \quad t > 0, \quad \mathbf{Y}(0) = \mathbf{Y}_0, \quad (5.109)$$

em que $\mathbf{Y}(t)$ é o vector dado por (5.65). Para que este problema semi-discreto aproxime o problema que pretendemos resolver, devemos reescrever o sistema impondo as condições de fronteira. Isto corresponde a reescrever algumas equações e a eliminar outras, diminuindo, eventualmente, a dimensão do sistema. Por exemplo, se Ω_i for um elemento com uma aresta na fronteira vertical, $x = a$, sujeita a uma condição de Dirichlet, os vectores definidos por (5.64) são substituídos por

$$\begin{aligned} Y_i^1 &= [y_{k1}]^T \\ Y_i^2 &= [x_{k2}, y_{k2}, U_{1,i}^2, \dots, U_{n,i}^2]^T \\ Y_i^3 &= [y_{k3}]^T \\ Y_i^4 &= [\quad]^T, \end{aligned} \quad (5.110)$$

em que (x_{ki}, y_{ki}) , $i = 1, 2, 3$, é o i -ésimo vértice de Ω_i , reduzindo a dimensão do sistema de EDO. Relativamente ao cálculo dos integrais sobre triângulos que figuram nas equações (5.104), (5.105), (5.106) e (5.108) não há qualquer interferência das condições de fronteira, uma vez que estes integrais são calculados usando pontos de

quadratura interiores ao triângulo. Para o cálculo dos integrais sobre as arestas devemos atender às condições de fronteira. A orientação introduzida para as arestas é tal que sempre, que uma aresta pertence à fronteira não existe o elemento designado por elemento à *direita*, Ω_D . Assim, a avaliação de $\frac{\partial U_j}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_D}$ efectua-se fazendo intervir a condição de fronteira. Se se tratar de uma condição de Dirichlet, admitimos que

$$\frac{\partial U_j}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_D} = \frac{\partial U_j}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_{DE}} .$$

Para uma condição de Robin, o valor de $\frac{\partial U_j}{\partial \xi} |_{P \in \Omega_D}$ é imposto naturalmente pela condição de fronteira.

5.5 Discretização no tempo

Para obtermos a discretização total do sistema de EDP (5.1), o sistema de EDO definido pelas equações (5.76), (5.82) e (5.84) deve ser integrado numericamente. É sabido [84] que este sistema exhibe elevado grau de *stiffness*. O integrador LSODIS usado para os problemas em 1-D revelou-se bastante eficaz, pelo que será de novo usado para a obtenção da solução discreta apesar de o sistema de EDO a resolver ser agora de dimensão superior.

5.6 Conclusões e Notação

Neste capítulo apresentámos e desenvolvemos o método dos elementos finitos móveis com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário em 2-D. Con-

siderando coordenadas baricêntricas deduzimos um resultado que permite o cálculo da derivada da solução aproximada em ordem ao tempo. Para contornar os problemas provenientes da singularidade da matriz do sistema de EDO, optámos por manter a utilização de funções de penalização, introduzindo funções que dependem da área de cada elemento finito. Para o cálculo dos integrais sobre o suporte de um nó espacial, que envolvem segundas derivadas espaciais, suavizámos a solução aproximada. Mostrámos que, para uma certa classe de problemas, apenas é necessário calcular estes integrais no interior dos elementos finitos, nas arestas adjacentes a um nó espacial e na aresta que contém o nó global que define a equação, caso este nó não seja nó da malha espacial. O cálculo destes integrais é feito com base no trabalho desenvolvido para 1-D. Deste modo é possível calcular todos os integrais recorrendo apenas a quadratura numérica, independentemente do problema a tratar. Esta formulação do MEFM em 2-D deu origem a um algoritmo computacional cujo desempenho será objecto de reflexão no próximo capítulo.

letras minúsculas

- a extremo esquerdo do domínio de variação de x
- b extremo direito do domínio de variação de x
- c extremo esquerdo do domínio de variação de y
- c_1 , c_2 e c_3 constantes de penalização

- d extremo direito do domínio de variação de y
- $f_{m,l}$ coeficiente dos termos que envolvem as derivadas espaciais de segunda ordem, em x , no sistema de EDP
- $g_{m,l}$ coeficiente dos termos que envolvem as derivadas espaciais de segunda ordem, em y , no sistema de EDP
- h_m termos que não envolvem nem derivadas temporais nem derivadas espaciais de segunda ordem no sistema de EDP
- n dimensão do sistema de EDP
- n_e número de elementos finitos
- n_g número de pontos da malha global
- n_p número de pontos de interpolação em cada elemento finito
- n_q número de pontos de quadratura em cada elemento finito
- n_s número de nós da malha espacial
- n_x número de sub-intervalos de $[a, b]$
- n_y número de sub-intervalos de $[c, d]$
- p grau da aproximação polinomial definida num elemento
- t variável independente de tempo

- $\mathbf{u}(\zeta, t)$ solução analítica do modelo matemático
- $u_m(\zeta, t)$ m -ésima componente da solução analítica do modelo matemático
- $u_{0_m}(\zeta)$ m -ésima componente do vector das condições iniciais
- v_j j -ésimo nó global
- x primeira componente da variável espacial ζ
- y segunda componente da variável espacial ζ

letras maiúsculas

- $\mathcal{A}(\mathbf{Y}(t))$ matriz de massa do sistema de EDO
- $B^{(k)}(L_N)$ polinómio em L_N que define $\phi_{i,k}$
- $\mathcal{G}(\mathbf{Y}(t))$ vector do sistema de EDO
- L_N , $N = 1, 2, 3$, coordenadas triangulares de $P(x, y)$
- L_N^k N -ésima coordenada triangular no k -ésimo ponto de interpolação
- M matriz que define a mudança de coordenadas triangulares para coordenadas cartesianas
- $\mathcal{M}$ malha global
- P_j^k posição do k -ésimo ponto de interpolação do j -ésimo elemento

- R_m resíduo associado à m -ésima equação
- $\mathcal{T}$ função objectivo
- $\mathbf{U}(x, y, t)$ aproximação de $u(\zeta, t)$ seccionalmente polinomial
- $U_m(x, y, t)$ m -ésima componente de $\mathbf{U}(x, y, t)$
- $\tilde{U}_m$ aproximação suavizada de U_m
- $U_{m,j}$ restrição de $U_m(x, y, t)$ ao j -ésimo elemento finito
- $U_{m,j}^k$ valor de U_m no k -ésimo nó local do j -ésimo elemento finito
- $\dot{U}_{m,j}^k$ derivada de $U_{m,j}^k$ em ordem ao tempo
- $\mathcal{V}_\delta$ vizinhança δ do suporte de um nó global ζ_j
- $\mathcal{V}_\delta^j$ vizinhança δ de um nó espacial ζ_j
- $\mathbf{Y}(t)$ vector das variáveis dependentes do sistema de EDO
- $\mathbf{Y}_0$ vector que define as condições iniciais para o sistema de EDO

letras gregas

- $\delta\Omega_i$ conjunto fronteira de Ω_i
- ϵ_i termo de penalização associado ao i -ésimo elemento finito
- $\zeta = (x, y)$ variável independente de espaço

- $\zeta_i = (x_i, y_i)$ i -ésimo nó espacial
- η variável independente sobre a aresta
- ξ variável independente na perpendicular à aresta
- $\phi_k = \phi_{i,k}$ função base associada ao k -ésimo nó local do i -ésimo elemento finito
- $\Phi_j(x)$ função interpoladora global, associada ao j -ésimo nó global
- Ω domínio espacial
- Ω^j suporte do nó global s_j
- Ω_j j -ésimo elemento finito
- $\overset{o}{\Omega}_j$ conjunto interior de Ω_j

Capítulo 6

Implementação e Aplicações do MEFM em 2-D

6.1 Introdução

No capítulo anterior apresentámos e desenvolvemos o método dos elementos finitos móveis com aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário em domínios espaciais de dimensão 2. Desse trabalho resultou um algoritmo que permite resolver numericamente problemas de evolução em 2-D. Neste capítulo o código numérico desenvolvido é aplicado à resolução de um conjunto de problemas de modo a ilustrar a eficácia e desempenho do MEFM.

O primeiro problema que apresentamos é um problema de *convecção-difusão* não linear modelizado por uma equação de Burgers com condições de fronteira de Dirichlet. O segundo problema considerado, proveniente da teoria da combustão, é modelizado por uma equação escalar de *reacção com difusão*, análoga à que resolvemos

em 1-D [24]. Este problema não possui solução analítica e portanto a qualidade da solução obtida é aferida pelas soluções disponíveis na literatura [2, 74, 85]. O terceiro problema é um sistema de duas equações de Burgers, usualmente usado como problema-teste. O quarto e último problema, um modelo que descreve a propagação de ondas de temperatura em leito fixo, foi proposto por Ferreira [34].

Nos exemplos numéricos que apresentamos todos os integrais foram calculados numericamente considerando fórmulas de integração numérica de ordem 7, o que corresponde a usar 9 pontos de quadratura em 1-D e 13 pontos de quadratura em 2-D. Tal como em 1-D todas as simulações foram realizadas num computador Pentium II de 266 MHz.

6.2 Equação de *convecção-difusão*

Consideremos a equação teste de convecção com difusão [14]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = p \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - u \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (6.1)$$

com $0 \leq x, y \leq 1$ e $t \geq 0$. As condições iniciais e de fronteira são dadas pela solução exacta

$$u(x, y, t) = (1 + \exp((x + y - t)/(2p)))^{-1} \quad (6.2)$$

O coeficiente de difusão p determina o comportamento da solução. Para valores pequenos de p o efeito da difusão é desprezável e o comportamento da solução é dominado pela convecção. Neste caso os perfis tornam-se mais abruptos e, sob o ponto de vista numérico, aumentam as dificuldades na resolução.

Exemplo 1: Neste exemplo considerámos para coeficiente de difusão $p = 0,025$ e procurámos estudar o movimento da malha para diferentes valores das constantes de penalização. Partindo de uma malha uniforme à direita com 7×7 nós espaciais, considerámos aproximações quadráticas. Os valores de tolerância para o integrador LSODIS foram $tol1 = tol2 = 10^{-5}$, o intervalo de tempo considerado foi $0 \leq t \leq 2$ e a constante de penalização que determina a área mínima de cada elemento durante todo o processo de integração foi fixada em 10^{-6} i.e., $c_3 = 10^{-6}$. Simulámos os seguintes casos:

Caso I Neste caso fixámos a constante de penalização $c_1 = 10^{-6}$ e fizemos variar a constante c_2 conforme a tabela 6.1 ilustra.

c_2	tempo de comp.(seg)	n.resíduos	n.jacobiana	erro máx. em $t = 1$
1	10613	51648	261	$6,9 \times 10^{-2}$
10^{-2}	6685	53477	269	$2,4 \times 10^{-2}$
10^{-3}	13432	107974	545	$1,5 \times 10^{-2}$
10^{-4}	66876	310875	1570	$1,0 \times 10^{-2}$

Tabela 6.1 Equação de convecção-difusão, efeito da variação de c_2

Caso II Neste caso fixámos o valor de $c_2 = 10^{-3}$ e fizemos variar a constante c_1 de acordo com a tabela 6.2.

c_1	tempo de comp.(seg)	n.resíduos	n.jacobiana	erro máx. em $t = 1$
1	11244	56825	285	$6,9 \times 10^{-2}$
10^{-2}	16902	136226	686	$3,5 \times 10^{-2}$
10^{-4}	15564	125154	632	$2,2 \times 10^{-2}$
10^{-6}	13432	107974	545	$1,5 \times 10^{-2}$

Tabela 6.2 Equação de convecção-difusão, efeito da variação de c_1

As tabelas 6.1 e 6.2 indicam o tempo de computação, o número de avaliações de resíduos, o número de avaliações da matriz jacobiana e o erro máximo para o instante $t = 1$. O número de avaliações de resíduos corresponde ao número de chamadas à rotina RES e RESJAC. O número de avaliações da matriz jacobiana iguala o número de chamadas à rotina ADDA e o número de decomposições LU. Da tabela 6.2 podemos concluir que, pelo menos para este exemplo, a constante de penalização c_1 não interfere de modo significativo no processo de integração no tempo e, portanto, podemos escolher valores pequenos para esta constante por forma a obtermos uma malha adaptativa. Relativamente à escolha da constante c_2 , um valor demasiado pequeno poderá acarretar custos computacionais elevados. Deste exemplo podemos situar para valores aceitáveis para c_2 o intervalo $[10^{-4}, 10^{-2}]$. Vejamos em pormenor qual a relação entre as constantes c_1 e c_2 e o movimento da malha espacial para este problema.

Caso I A figura 6.1 apresenta a evolução da malha para $c_2 = 1$. A constante c_2 determina o termo penalizador associado às *forças viscosas*. Um valor elevado para esta constante de penalização torna a malha praticamente fixa. Diminuindo o valor de c_2 a malha torna-se progressivamente mais adaptativa. É isso que observamos nas figuras 6.2, 6.3 e 6.4.

Na figura 6.4, $c_2 = 10^{-6}$, podemos verificar como evoluem os nós da malha espacial e se posicionam nas regiões de maior actividade espacial. Esta escolha das constantes de penalização caracteriza um MEFM em que a malha tem um comportamento fortemente adaptativo. Obtém-se uma solução aproximada com maior precisão que nas simulações anteriores.

Caso II O valor de c_2 é fixado em $c_2 = 10^{-3}$ e fez-se variar a constante c_1 . Esta constante relaciona-se com o termo penalizador definindo as *forças de mola* entre os nós espaciais de um dado elemento. Assim $c_1 = 1$ produz uma malha uniforme fixa, figura 6.5. Nas figuras 6.6, 6.7 e 6.3 podemos verificar que diminuindo o valor de c_1 as malhas vão adquirindo mais adaptatividade, mantendo um carácter uniforme para valores de c_1 não muito pequenos.

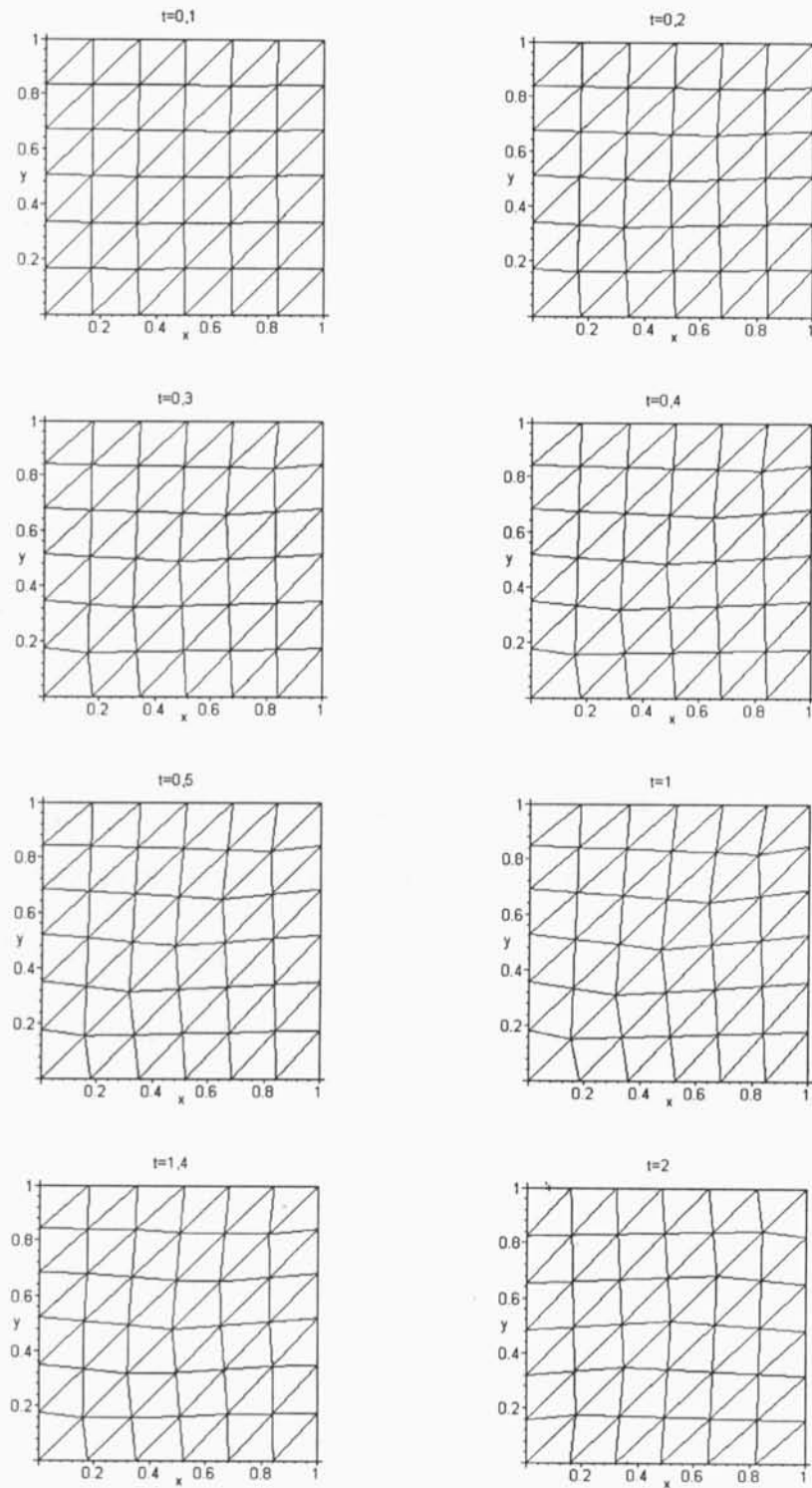


Figura 6.1 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 1$

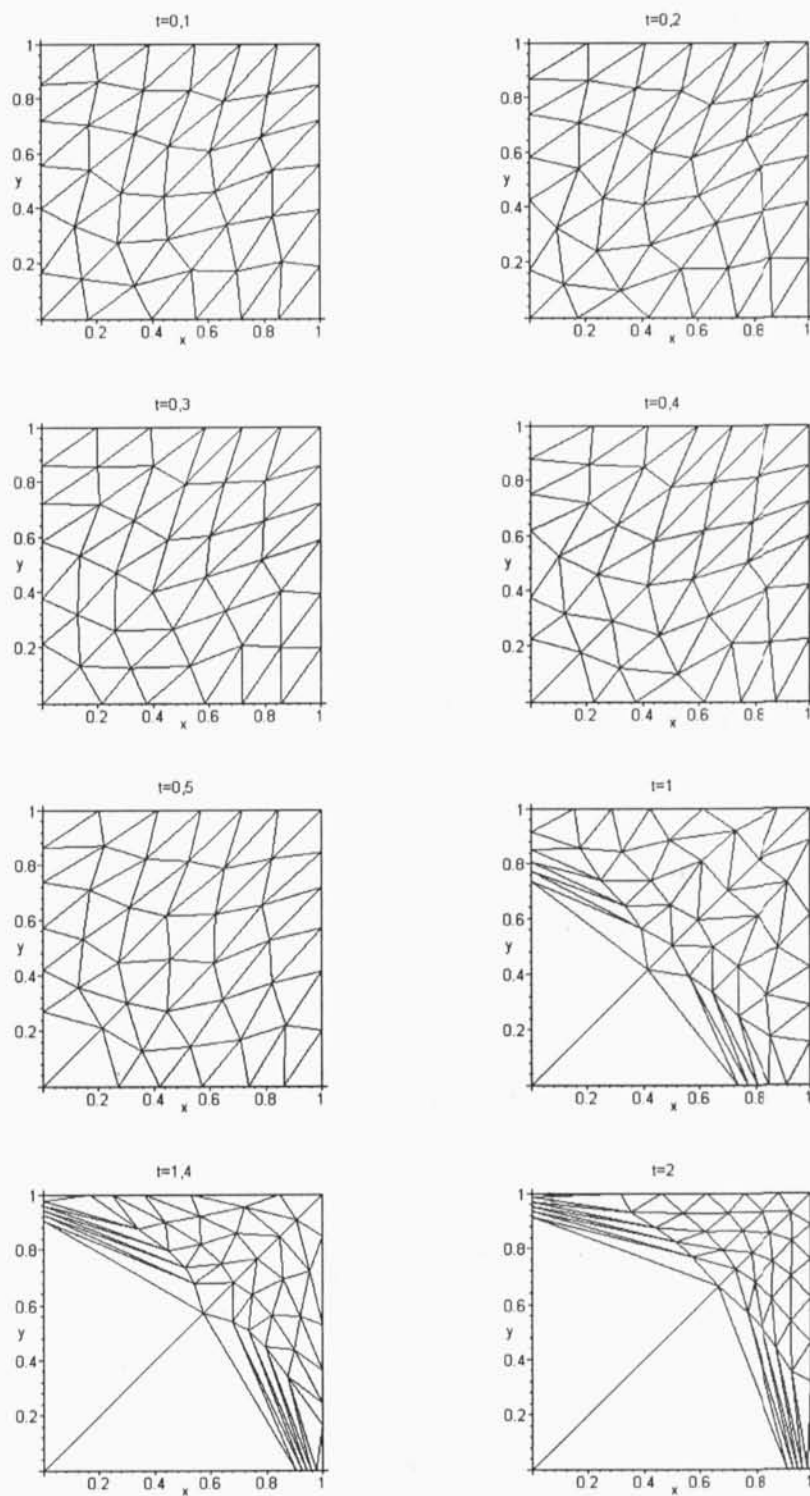


Figura 6.2 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 10^{-2}$

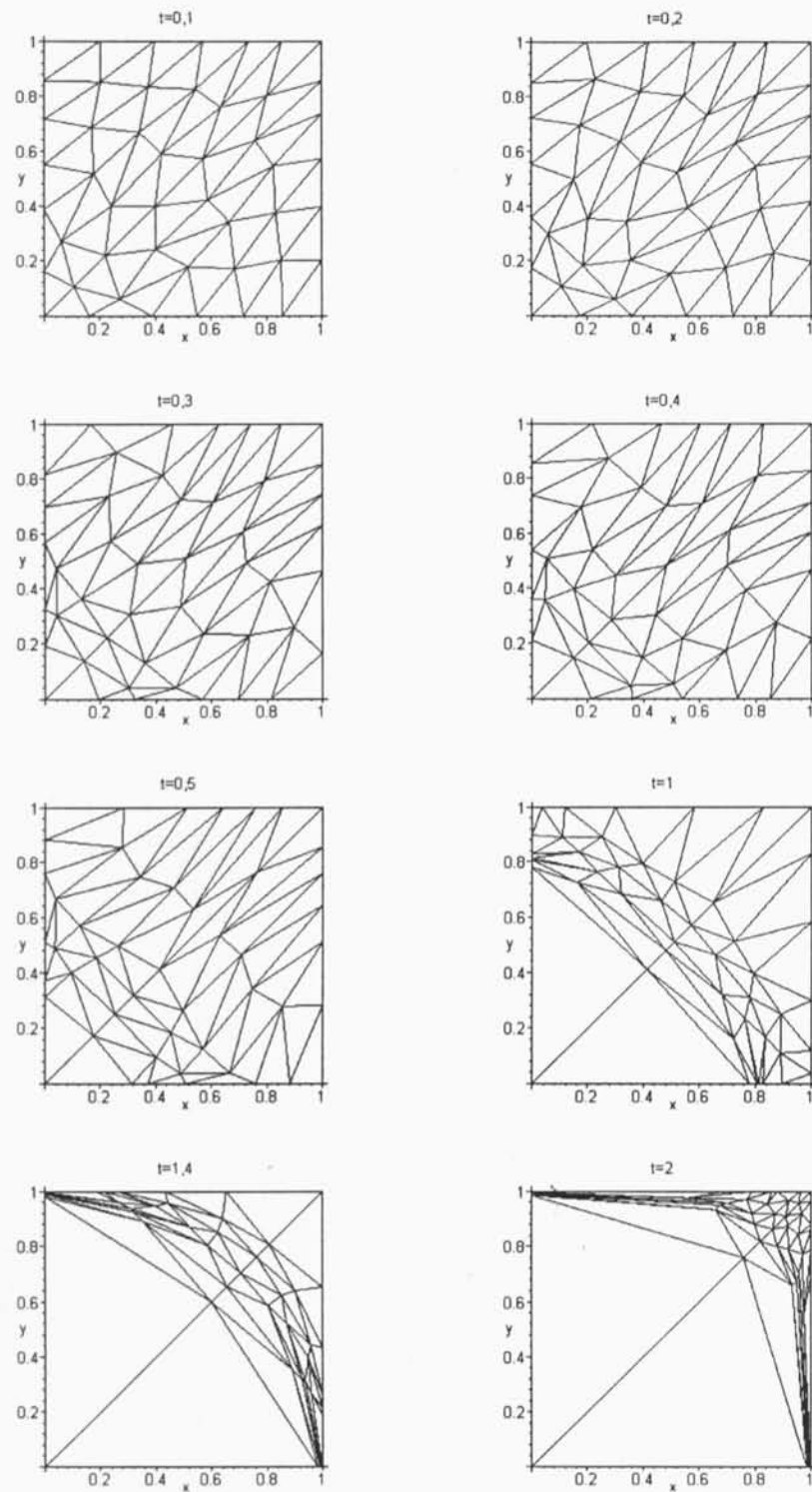


Figura 6.3 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 10^{-3}$

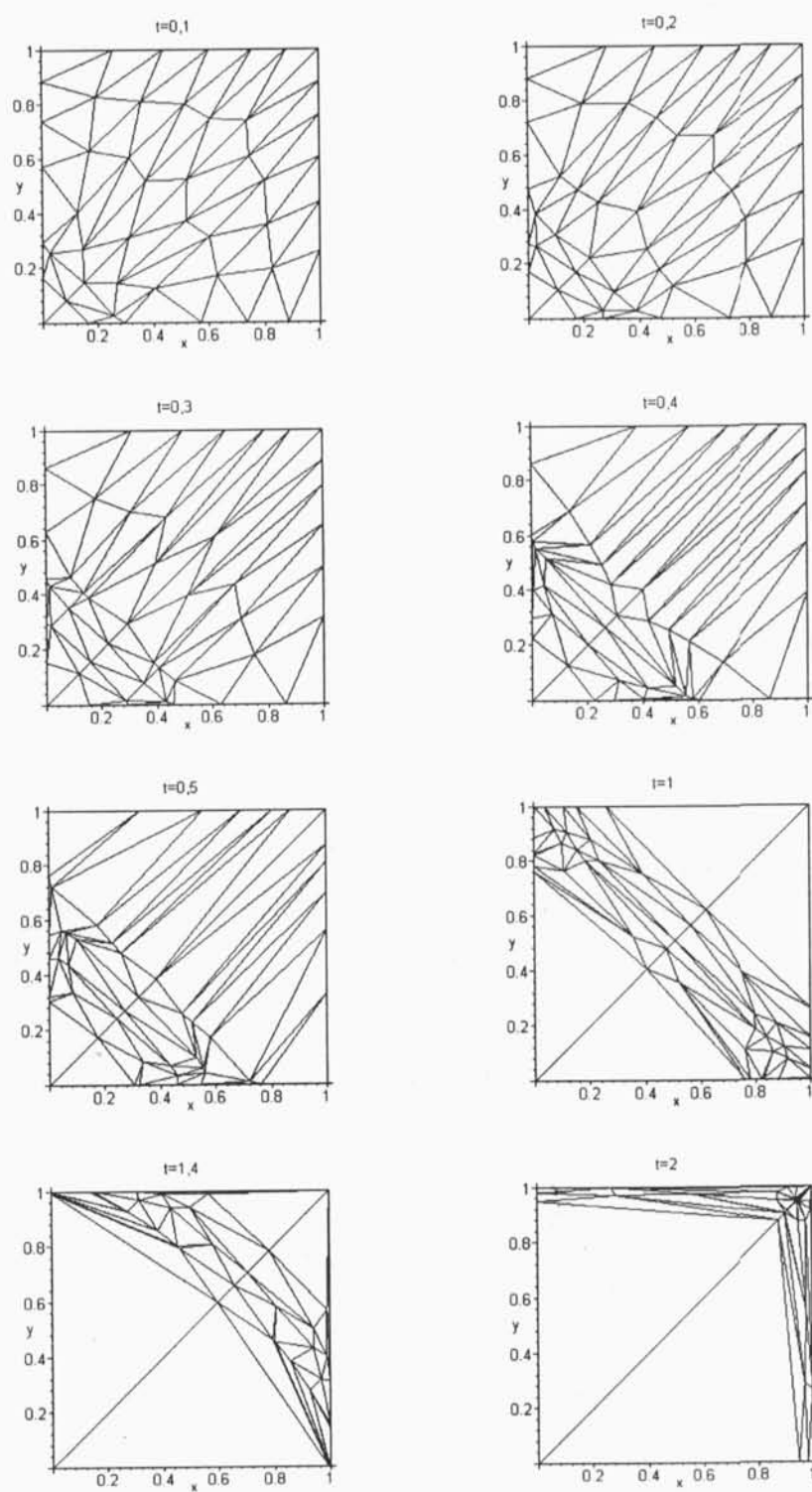


Figura 6.4 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-6}$, $c_2 = 10^{-4}$

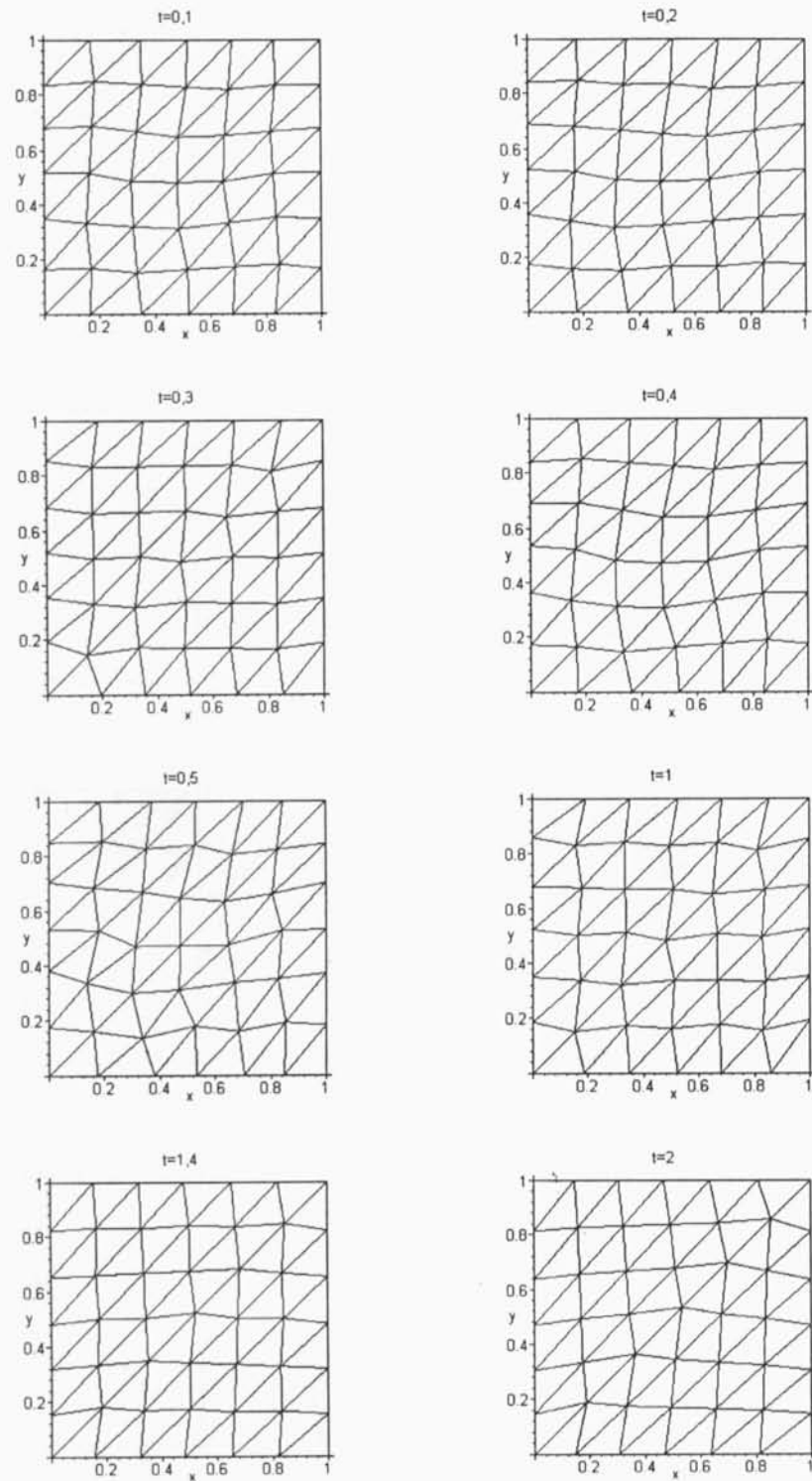


Figura 6.5 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 1$, $c_2 = 10^{-3}$

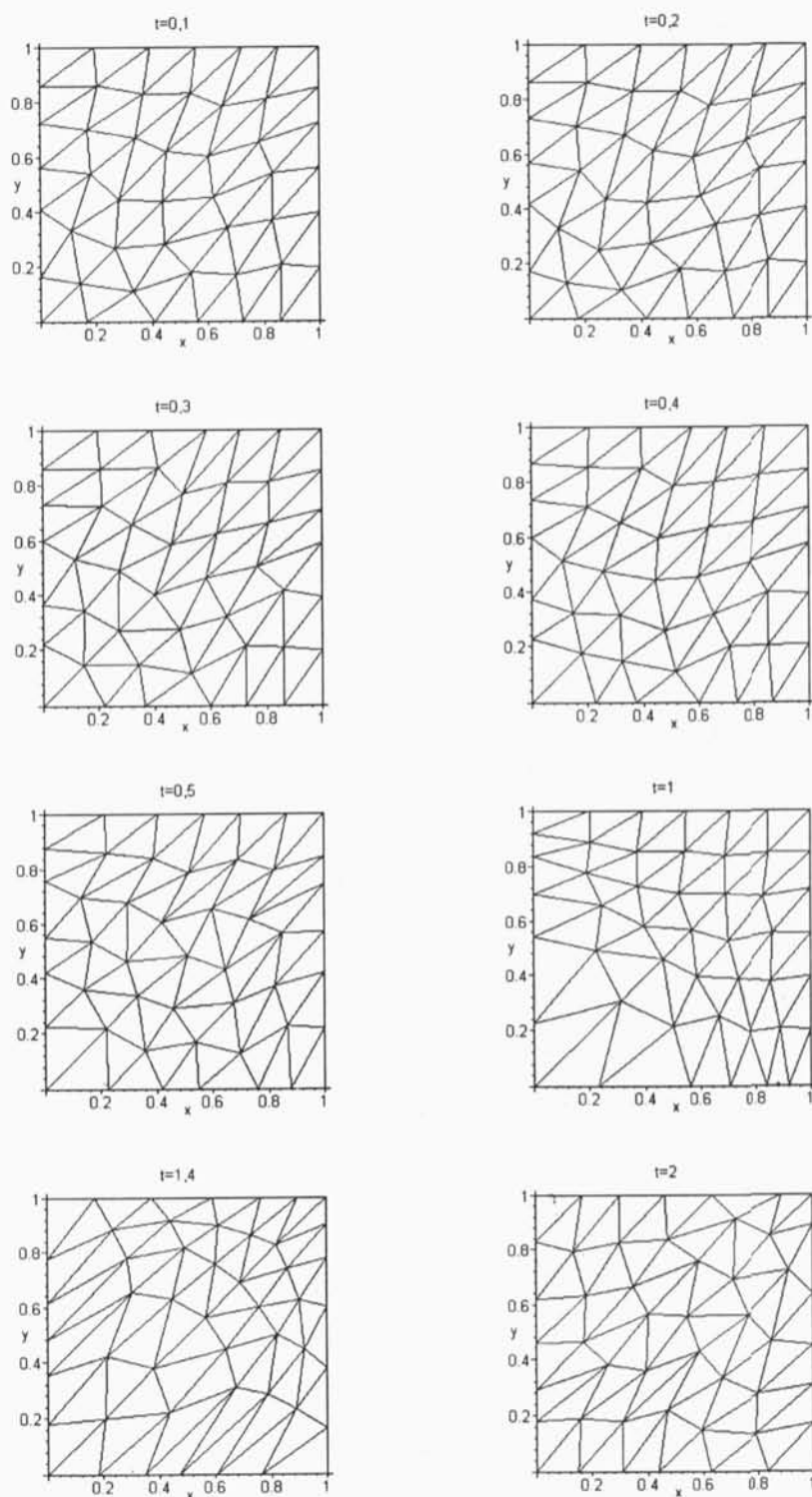


Figura 6.6 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-2}$, $c_2 = 10^{-3}$

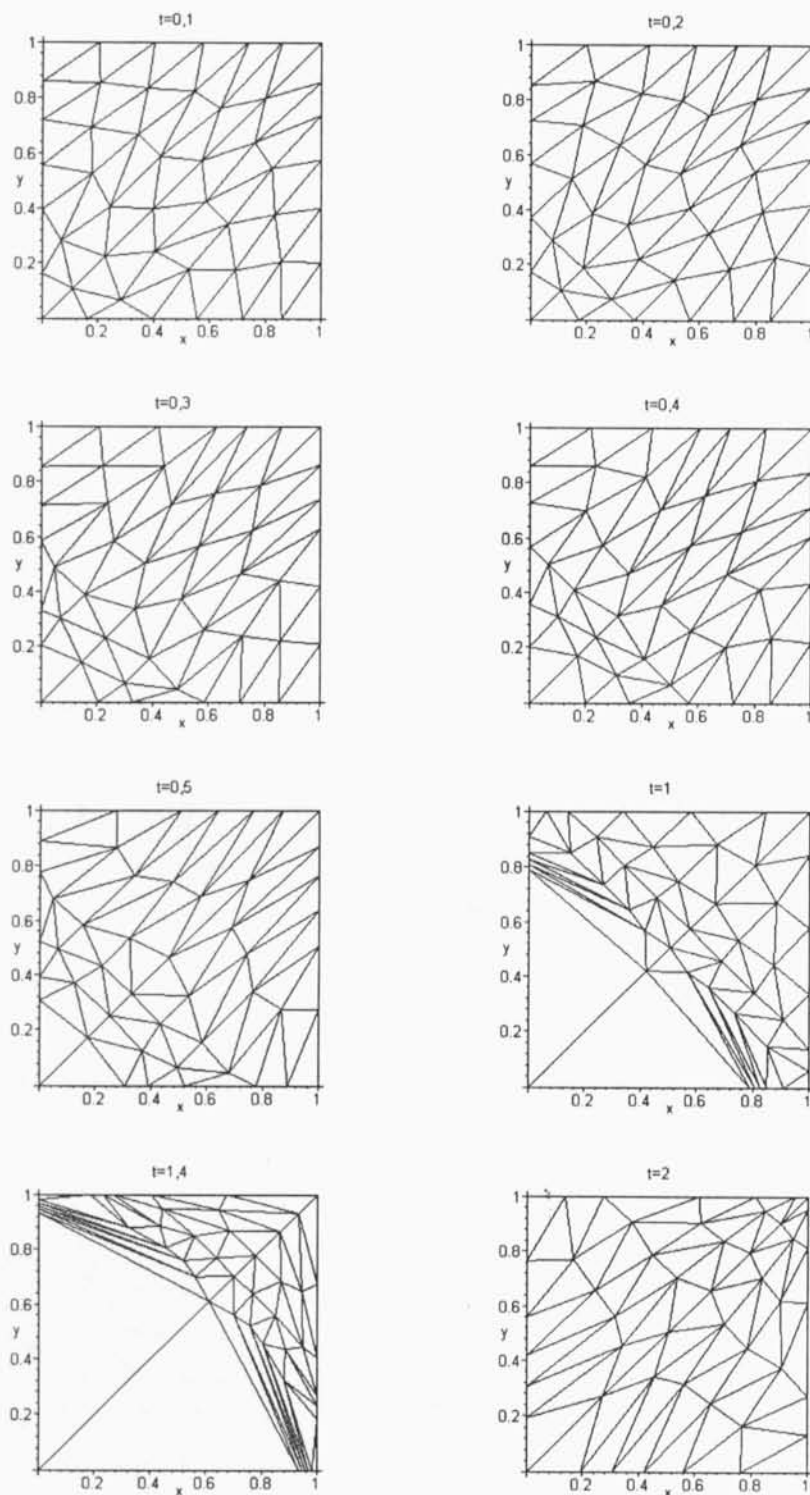


Figura 6.7 Equação de convecção-difusão, evolução da malha, $c_1 = 10^{-4}$, $c_2 = 10^{-3}$

Exemplo 2: Neste segundo exemplo considerámos, para o mesmo coeficiente de difusão, $p = 0,025$, uma malha *à esquerda* de 7×7 nós espaciais uniformemente distribuídos e aproximações cúbicas. Realizámos uma simulação considerando $tol1 = tol2 = 10^{-7}$, $c_2 = 10^{-4}$ e $c_1 = c_3 = 10^{-6}$. O intervalo de tempo considerado foi $0 \leq t \leq 2$. A figura 6.8 mostra a precisão dos resultados obtidos. Para cada instante a precisão foi avaliada calculando o máximo do erro da solução aproximada em cada nó da malha espacial. A figura 6.9 apresenta a evolução dessa malha. Usámos as mesmas constantes de penalização que na última simulação do caso I do exemplo 1. No entanto, o movimento da malha é bastante diferente, o que mostra que as constantes de penalização apesar de regularizarem o movimento dos nós não o determinam. Podemos também concluir que o efeito de um dado conjunto de penalizações depende, não só do problema a resolver, mas também das escolhas que se fizeram, quer para a malha inicial, quer para o grau das aproximações. Na figura 6.10 podemos observar os perfis interpolados da solução, para uma malha de 21×21 nós espaciais uniformemente distribuídos, em diversos instantes.

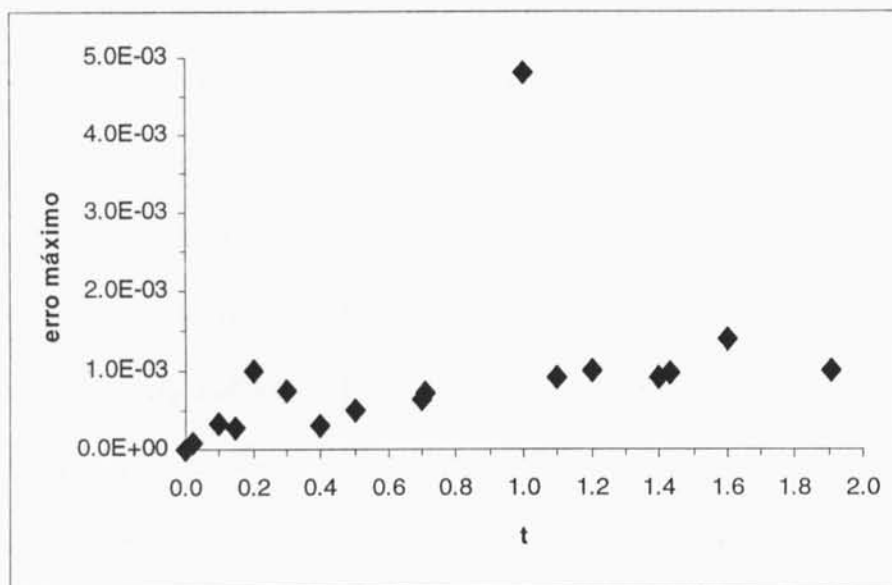


Figura 6.8 Equação de convecção-difusão, exemplo 2, erro máximo da solução aproximada

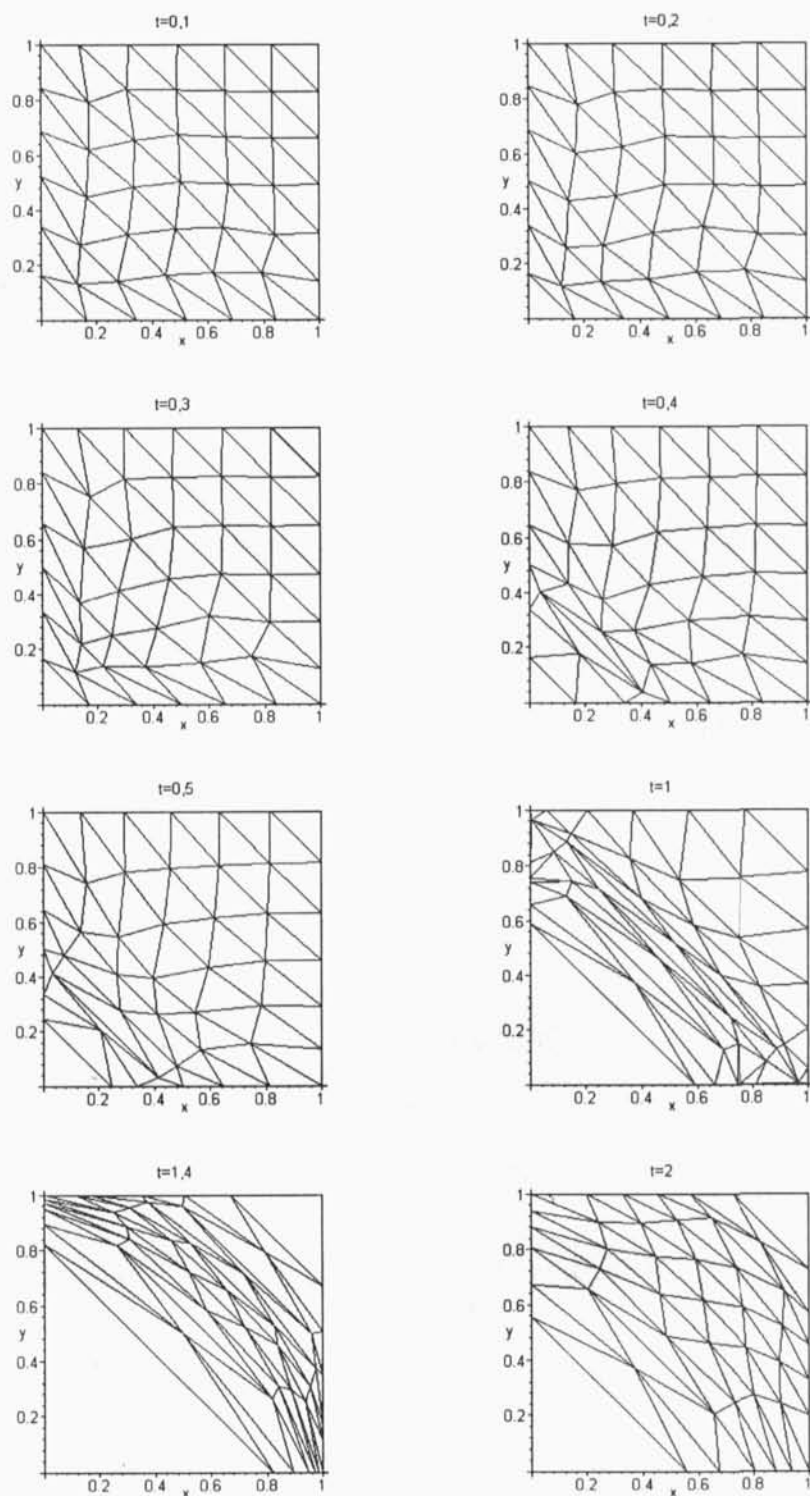


Figura 6.9 Equação de convecção-difusão, exemplo 2, evolução da malha

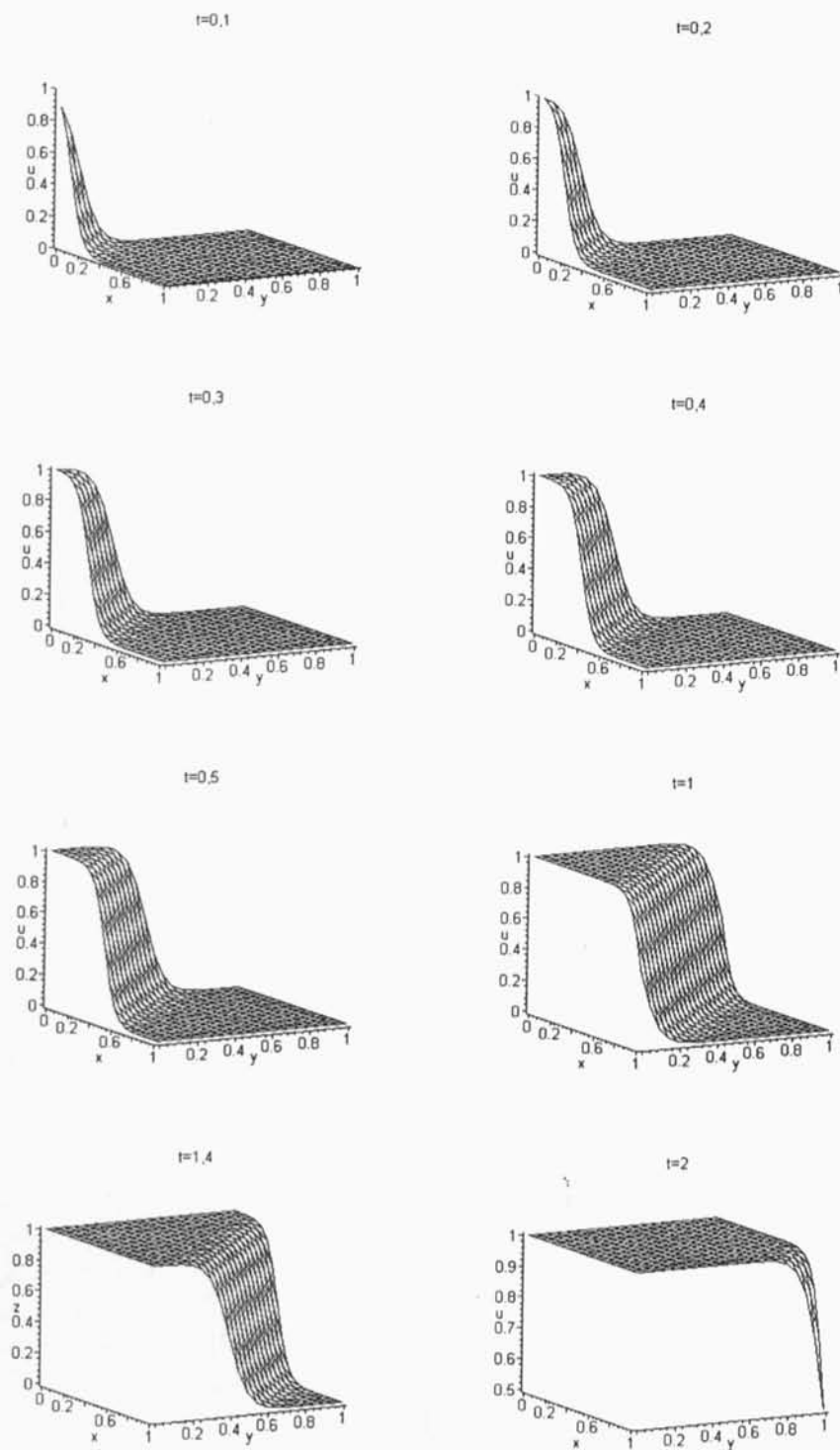


Figura 6.10 Equação de convecção-difusão, exemplo 2, solução interpolada

Exemplo 3: Neste último exemplo considerámos para coeficiente de difusão $p = 0,005$. O intervalo de tempo considerado foi $0 \leq t \leq 1$. Para ambas as simulações usámos uma malha com 9×9 nós espaciais uniformemente distribuídos no domínio espacial. Em cada elemento finito aproximámos a solução por polinómios de grau 2. Os valores para as constantes de penalização foram $c_2 = 10^{-4}$, $c_1 = c_3 = 10^{-6}$. Para valores de tolerância do integrador LSODIS considerou-se $tol1 = tol2 = 10^{-7}$. Com os mesmos parâmetros realizámos duas simulações, a primeira partindo de uma malha uniforme à *direita* e a segunda partindo de uma malha uniforme à *esquerda*. Foram requeridas, pelo integrador de EDO, 1516 avaliações da matriz jacobiana para o caso da malha à *direita* e 1984 para a malha à *esquerda*. A figura 6.11 mostra a solução aproximada em $t = 1$ para a simulação com uma malha à *direita*, enquanto que a figura 6.12 mostra a solução aproximada em $t = 1$ para a simulação com uma malha à *esquerda*. A figura 6.13 apresenta a evolução da malha espacial à *esquerda*. Na figura 6.14 apresentamos a evolução da malha espacial à *direita*. Esta malha possui o mesmo eixo de simetria da solução do problema. Essa simetria é conservada ao longo da integração. A malha à *direita* tem um grau de adaptatividade maior que a malha à *esquerda*. Os nós espaciais da malha à *esquerda* posicionados nas regiões do espaço que ainda não foram atingidas pela frente têm pouca mobilidade, o que não sucede nos nós da malha à *direita* que se posicionam e evoluem com a frente. No que respeita ao movimento da malha, este exemplo mostra que a escolha das constantes de penalização deve ser feita de acordo com a malha inicial que adoptamos

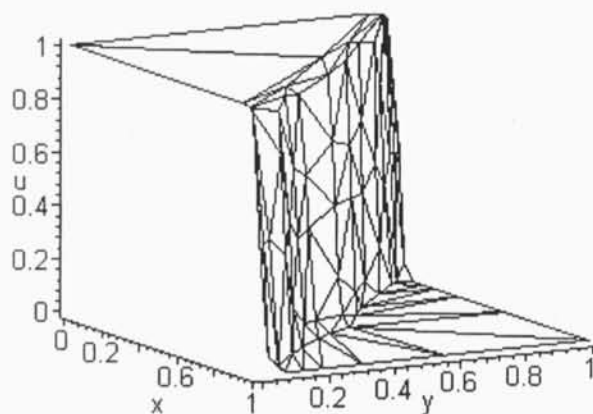
$p=0.005; t=1$ 

Figura 6.11 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à *direita*, perfil da solução em $t = 1$, $p = 0,005$

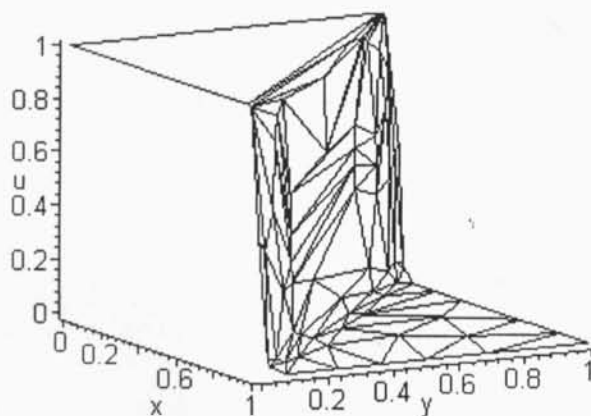
 $p=0,005; t=1$ 

Figura 6.12 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à *esquerda*, perfil da solução em $t = 1$, $p = 0,005$

e não pode ser feita *à priori*. Relativamente à qualidade da solução obtida, não há diferenças significativas. As figuras 6.15 e 6.16 mostram a solução numérica obtida por interpolação numa malha uniforme 21×21 para a malha *à esquerda*, nos instantes $t = 0,5$ e $t = 1$, respectivamente.

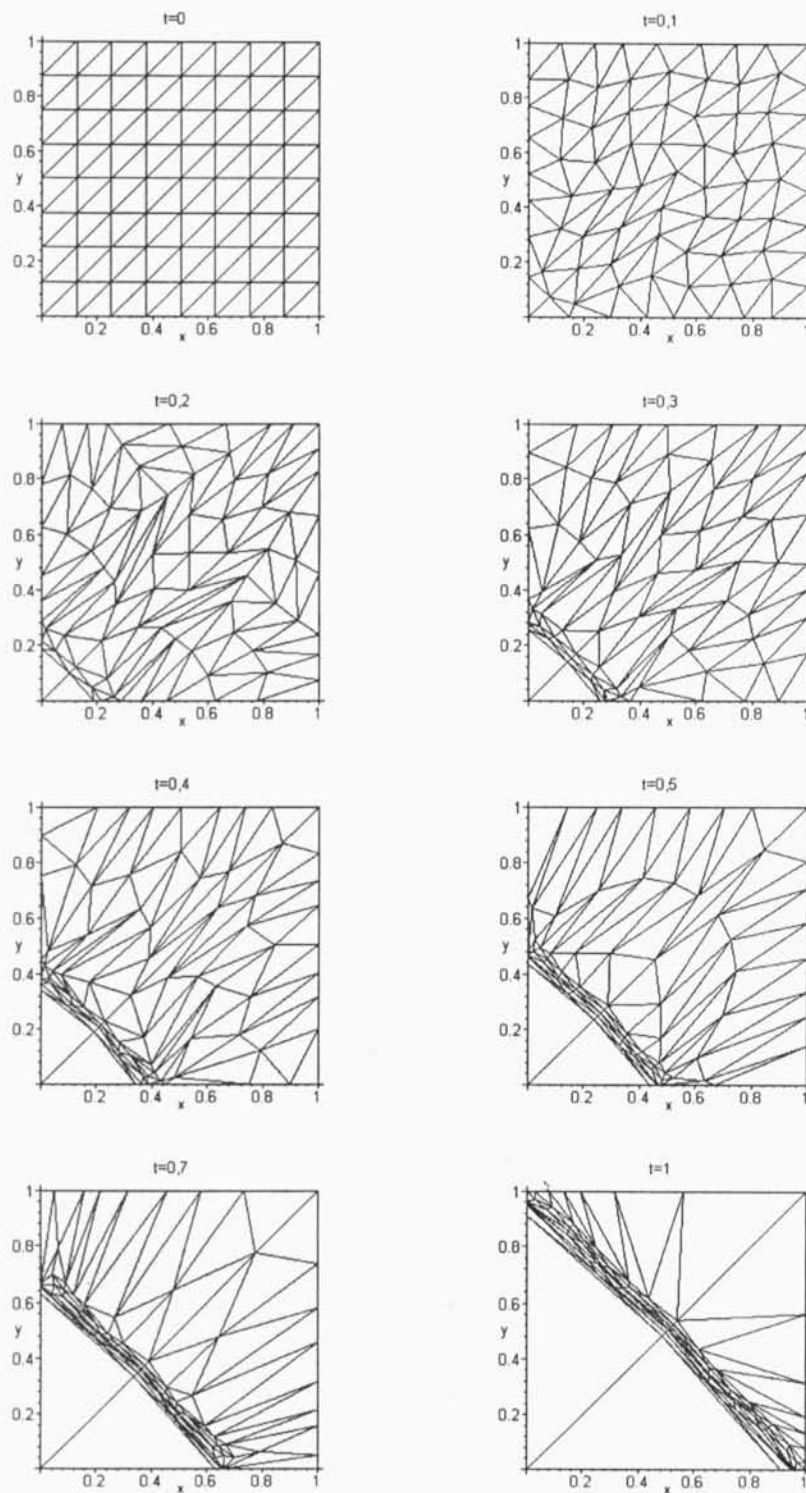


Figura 6.13 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, evolução da malha à direita

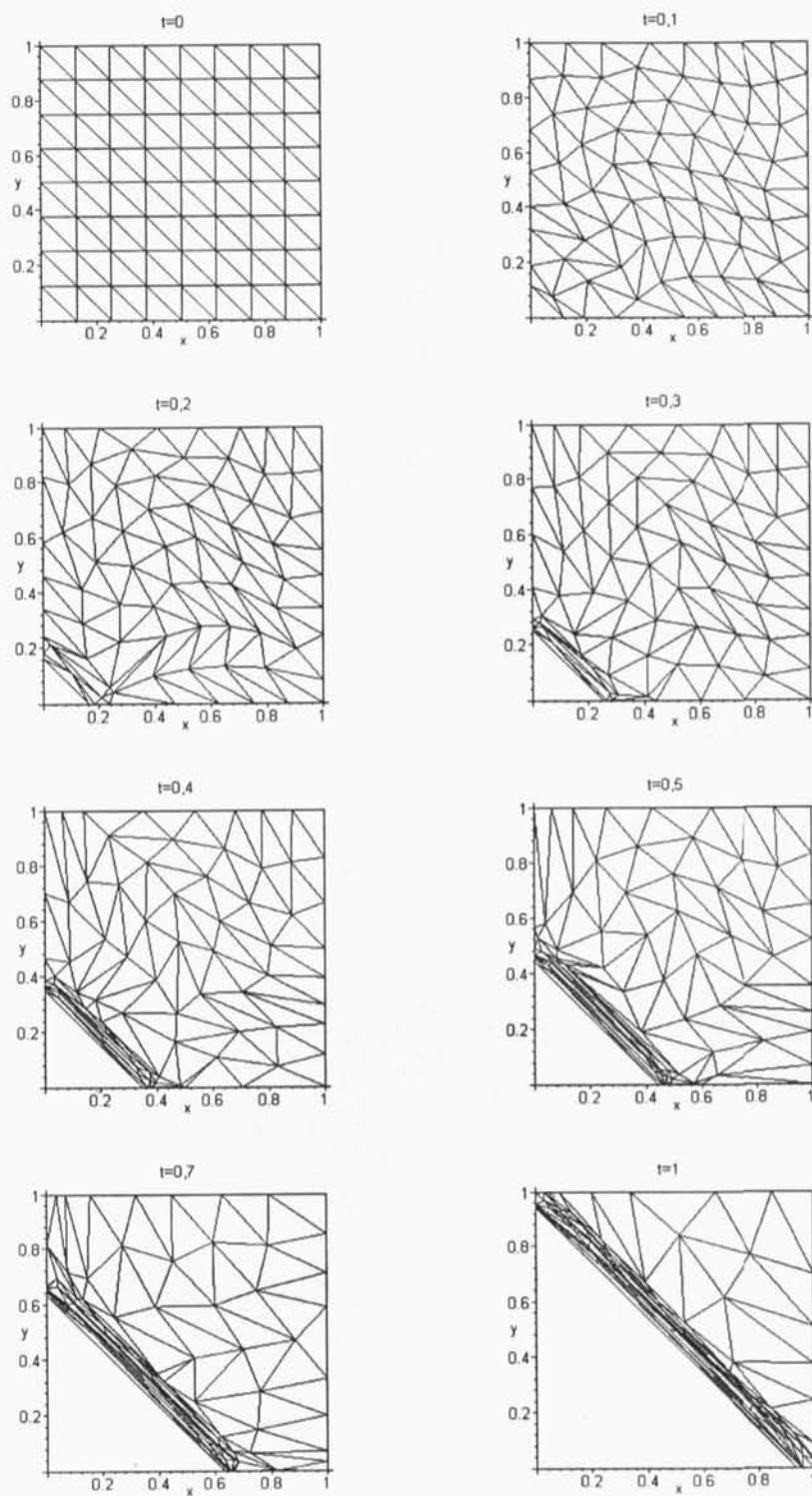


Figura 6.14 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, evolução da malha à esquerda

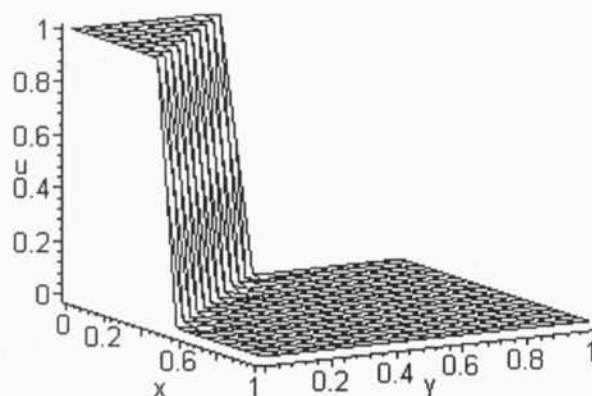
$t=0,5$ 

Figura 6.15 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à esquerda, perfil interpolado para $t = 0,5$, $p = 0,005$

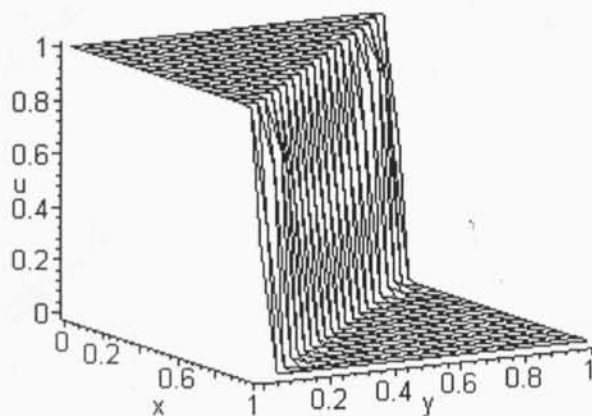
 $t=1$ 

Figura 6.16 Equação de convecção-difusão, exemplo 3, malha à esquerda, perfil interpolado para $t = 1$, $p = 0,005$

6.3 Equação de reacção-difusão

Consideremos o problema teste descrito por Adjrid e Flaherty [2], Trompert e Verwer [74] e Zegeling [85], que já resolvemos em 1-D. Trata-se de um problema de combustão escalar modelizado por uma equação de reacção com difusão. Neste problema a variável dependente u representa a temperatura da mistura reagente no sistema químico. A equação que descreve o modelo é

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + D (1 + \alpha - u) \exp \left(-\frac{\delta}{u} \right), \quad (6.3)$$

com $0 \leq x, y \leq 1$ e $t > 0$. As condições iniciais e de fronteira são

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= 1, & 0 \leq x, y \leq 1 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, y, t) &= 0, & 0 < t, 0 \leq y \leq 1 \\ u(1, y, t) &= 1, & 0 < t, 0 \leq y \leq 1 \\ \frac{\partial u}{\partial y}(x, 0, t) &= 0, & 0 < t, 0 \leq x \leq 1 \\ u(x, 1, t) &= 0, & 0 < t, 0 \leq x \leq 1 \end{aligned} \quad (6.4)$$

em que $D = \frac{R \exp(\delta)}{\alpha \delta}$, R , δ e α constantes. Para tempos pequenos a temperatura aumenta gradualmente numa área circular em torno da origem. Num dado instante

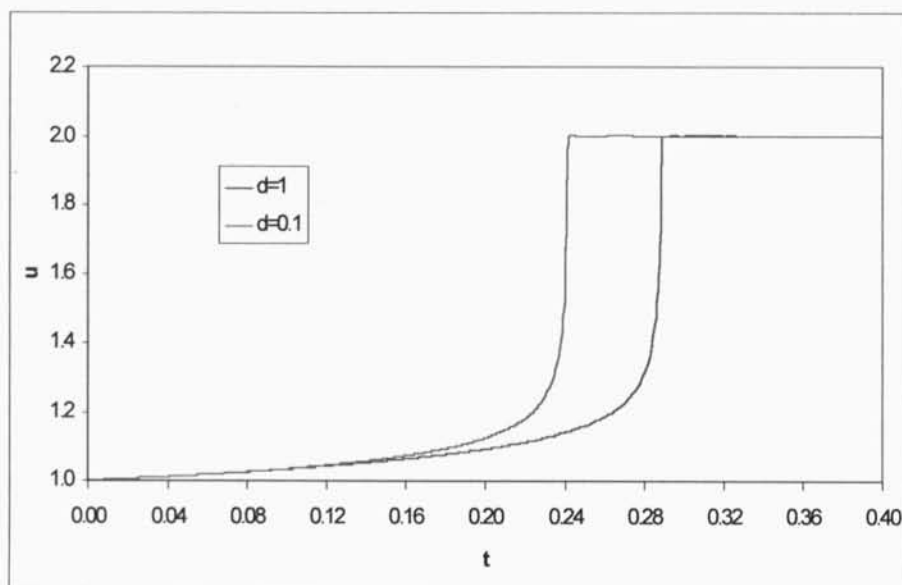


Figura 6.17 Equação de reacção-difusão, histórias de temperatura em $x = y = 0$

ocorre a ignição e a temperatura passa rapidamente de um valor perto de 1 para $1 + \alpha$. Simultaneamente forma-se uma frente de reacção que se propaga circularmente da origem para as fronteiras sujeitas a condições de Dirichlet. De acordo com [2] seja $R = 5$, $\alpha = 1$ e $\delta = 20$. Para coeficiente de difusão escolhemos $d = 1$ [2] e também $d = 0,1$ [74, 85]. Uma escolha de um coeficiente de difusão menor tem o efeito de tornar a frente mais abrupta, especialmente quando a solução se aproxima do estado estacionário. A ignição também ocorre mais cedo. A figura 6.17 mostra as histórias de temperatura na origem para $d = 1$ e $d = 0,1$. Para $d = 1$ a ignição ocorre no instante $t = 0,289$ enquanto que para $d = 0,1$ ocorre em $t = 0,242$.

Simulação numérica para $d = 1$

Neste exemplo, usando os mesmos parâmetros, realizámos duas simulações, a primeira partindo de uma malha uniforme à *direita* e a segunda de uma malha uniforme à *esquerda*. O intervalo de tempo considerado foi $0 \leq t \leq 0,4$. Para ambas as simulações usámos uma malha com 9×9 nós espaciais uniformemente distribuídos no domínio espacial e aproximações quadráticas. Os valores escolhidos para as constantes de penalização foram $c_2 = 10^{-2}$, $c_1 = 10^{-3}$ e $c_3 = 10^{-6}$. Para valores de tolerância do integrador LSODIS considerou-se $tol1 = tol2 = 10^{-7}$. As figuras 6.18 e 6.19 apresentam a evolução da malha à *direita* e dos perfis da solução interpolada em diferentes instantes. Nas figuras 6.20 e 6.21 podemos observar perfis semelhantes para a malha à *esquerda*. Observemos que os mesmos valores para as constantes de penalização produzem um comportamento bastante diferenciado no que diz respeito ao movimento da malha. No caso da malha à *direita* os nós posicionam-se de modo a descrever adequadamente a frente. Quando a solução atinge o estado estacionário os nós reposicionam-se de modo a ocuparem uma posição de equilíbrio no domínio espacial. No caso da malha à *esquerda* o movimento dos nós é mais restrito, embora se note uma evolução no sentido de se posicionarem nas regiões de maior actividade. A malha mantém uma distribuição quase uniforme, o que significa que o valor escolhido para a constante c_1 não é, para esta malha, suficientemente pequeno.

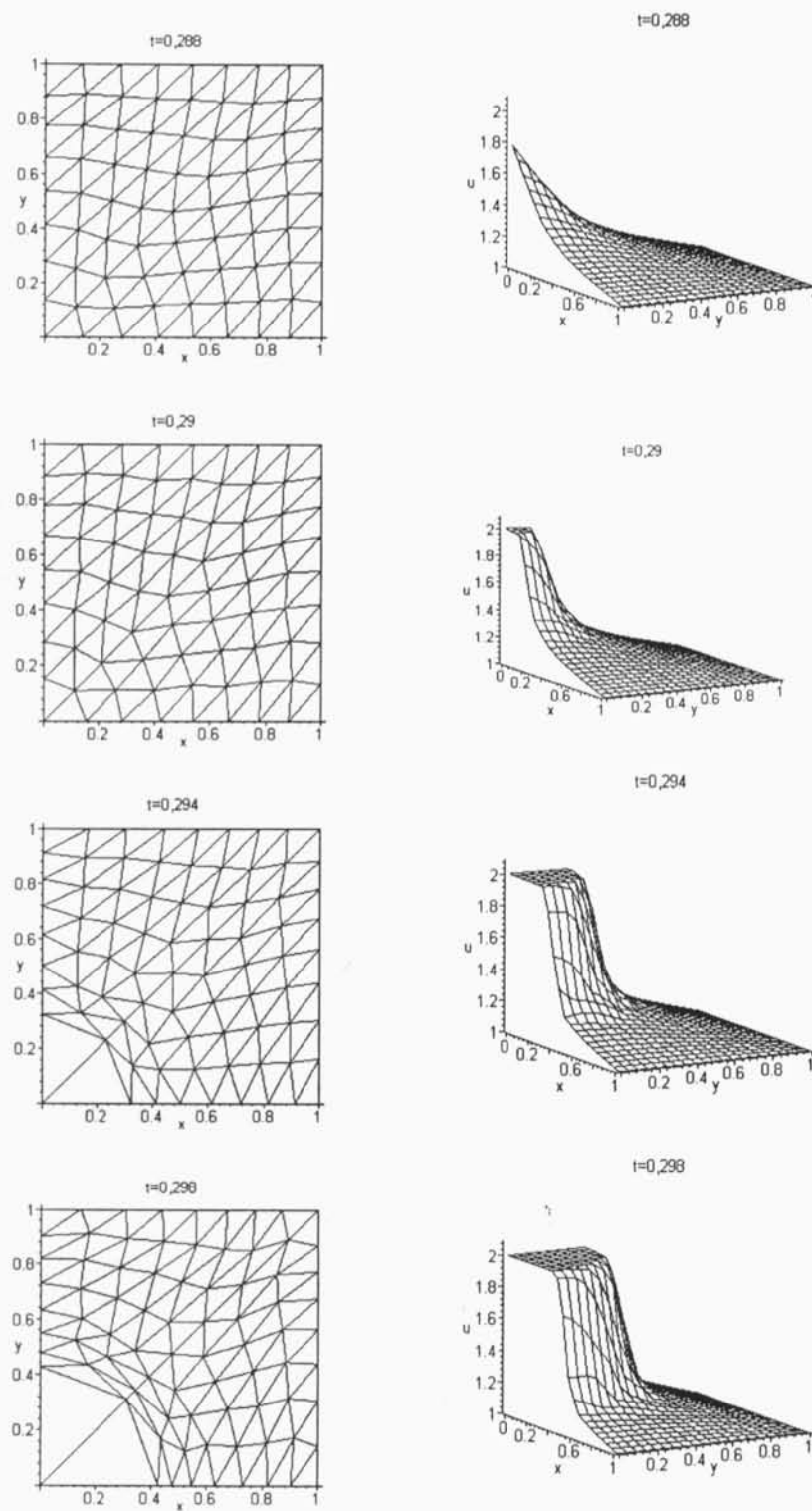


Figura 6.18 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à direita e solução

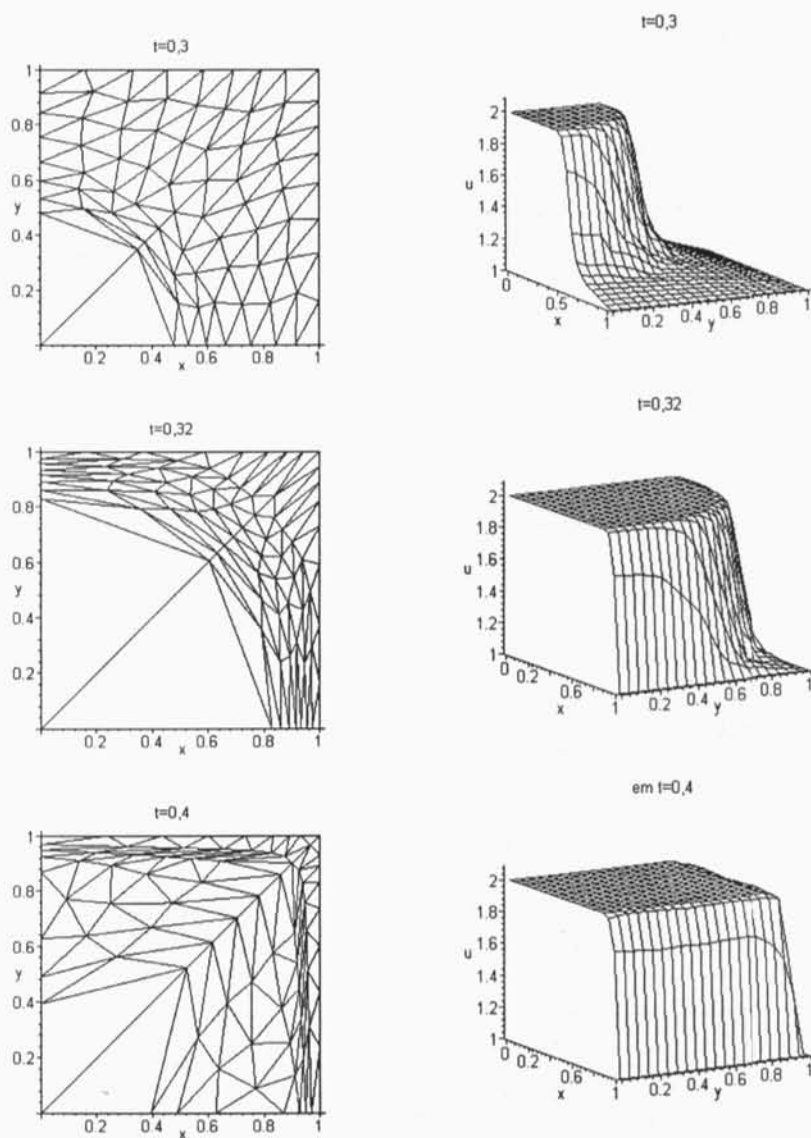


Figura 6.19 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à direita e solução

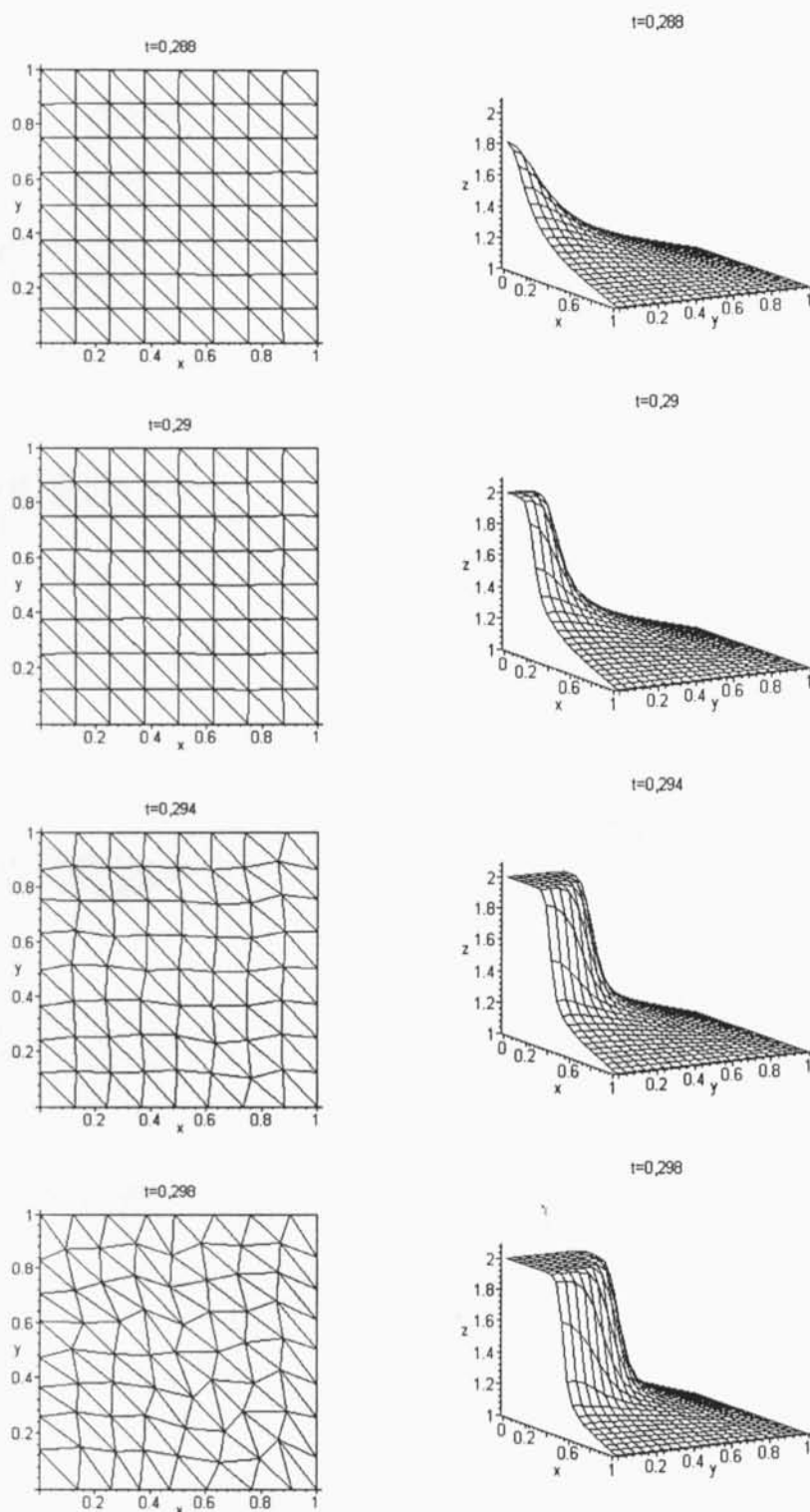


Figura 6.20 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, da malha à esquerda e solução

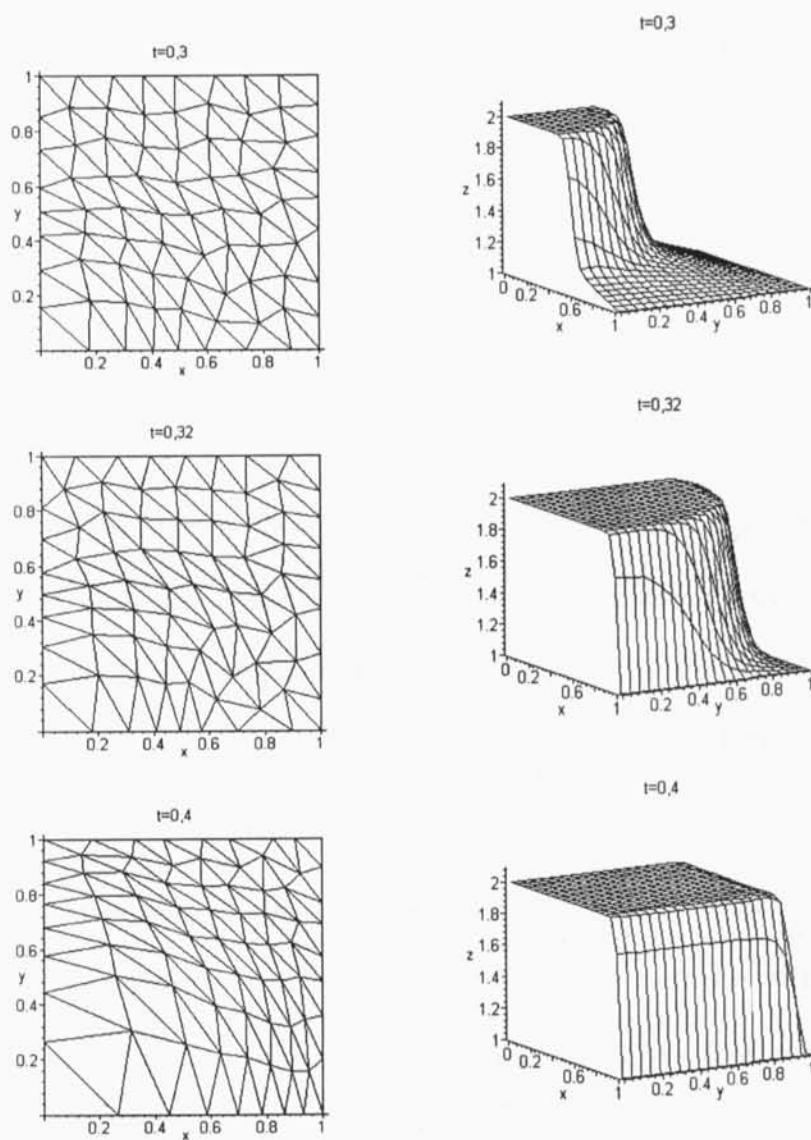
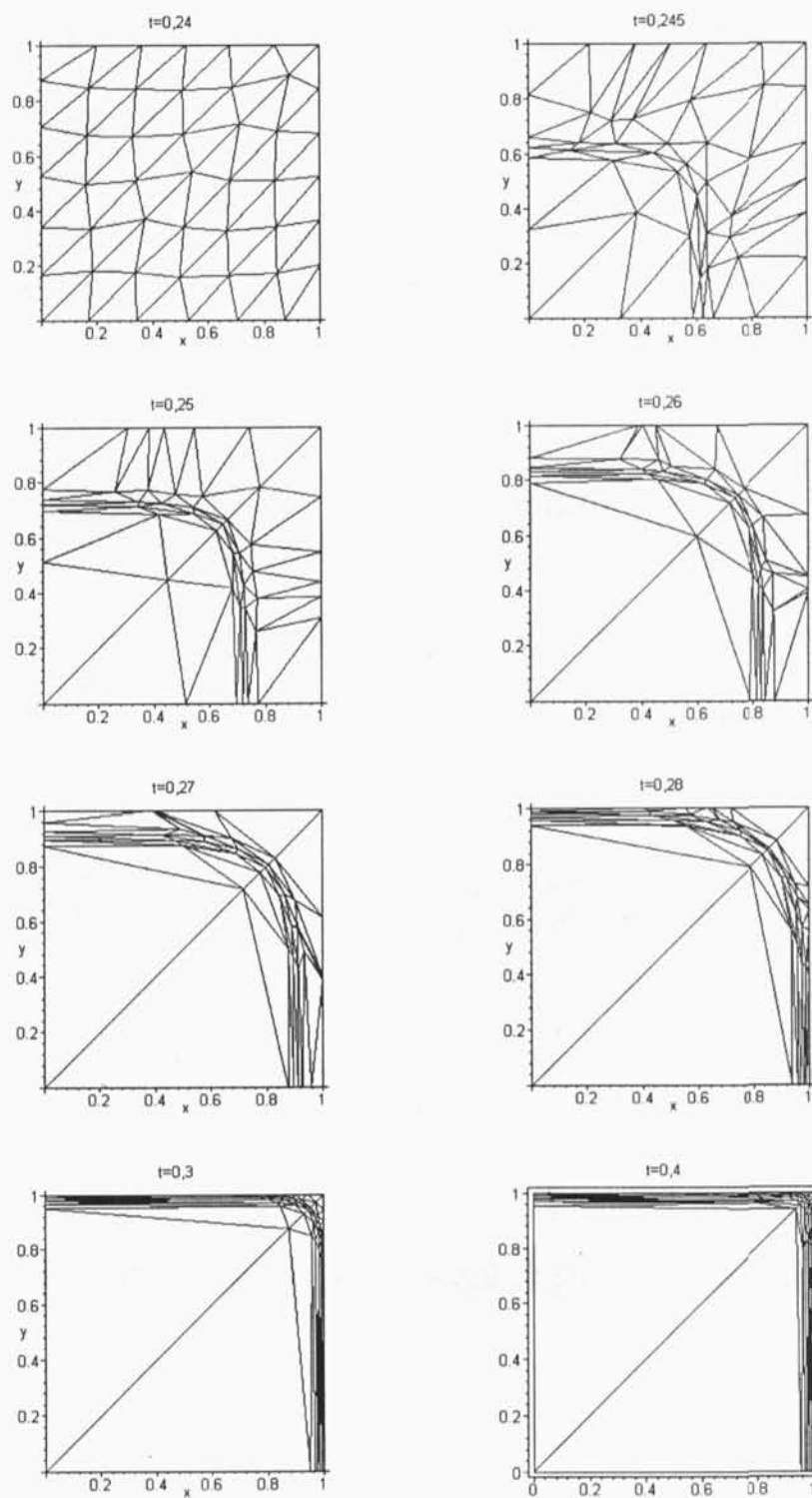


Figura 6.21 Equação de reacção-difusão, $d = 1$, malha à esquerda e solução

Simulação numérica para $d = 0, 1$

Neste exemplo considerámos uma malha inicial uniforme à *direita* com 7×7 nós espaciais uniformemente distribuídos no domínio espacial e aproximações cúbicas. O intervalo de tempo considerado foi $0 \leq t \leq 0,4$. Para valores de tolerância do integrador LSODIS considerou-se $tol1 = tol2 = 10^{-7}$. As constantes de penalização usadas foram $c_2 = 10^{-4}$, $c_1 = c_3 = 10^{-6}$, sendo necessárias 2212 avaliações da matriz jacobiana para completar a integração. Para esta escolha das constantes o MEFM produziu uma malha adaptativa que segue a frente abrupta, tal como a figura 6.22 ilustra. Na figura 6.23 estão representados os perfis da solução interpolada em alguns instantes. É uma solução com grau de precisão elevado, noção subjectiva pois, neste exemplo, apenas podemos comparar esta solução com as soluções disponíveis na literatura, obtidas por outros processos numéricos. Neste caso os nós não se reposicionaram no domínio espacial quando a solução se aproxima do estado estacionário. Isso deve-se ao facto de o número de nós espaciais usados não ser suficiente, de modo a permitir deslocar alguns deles da região onde a solução apresenta maiores variações.

Figura 6.22 Equação de reacção-difusão, $d = 0,1$, evolução da malha

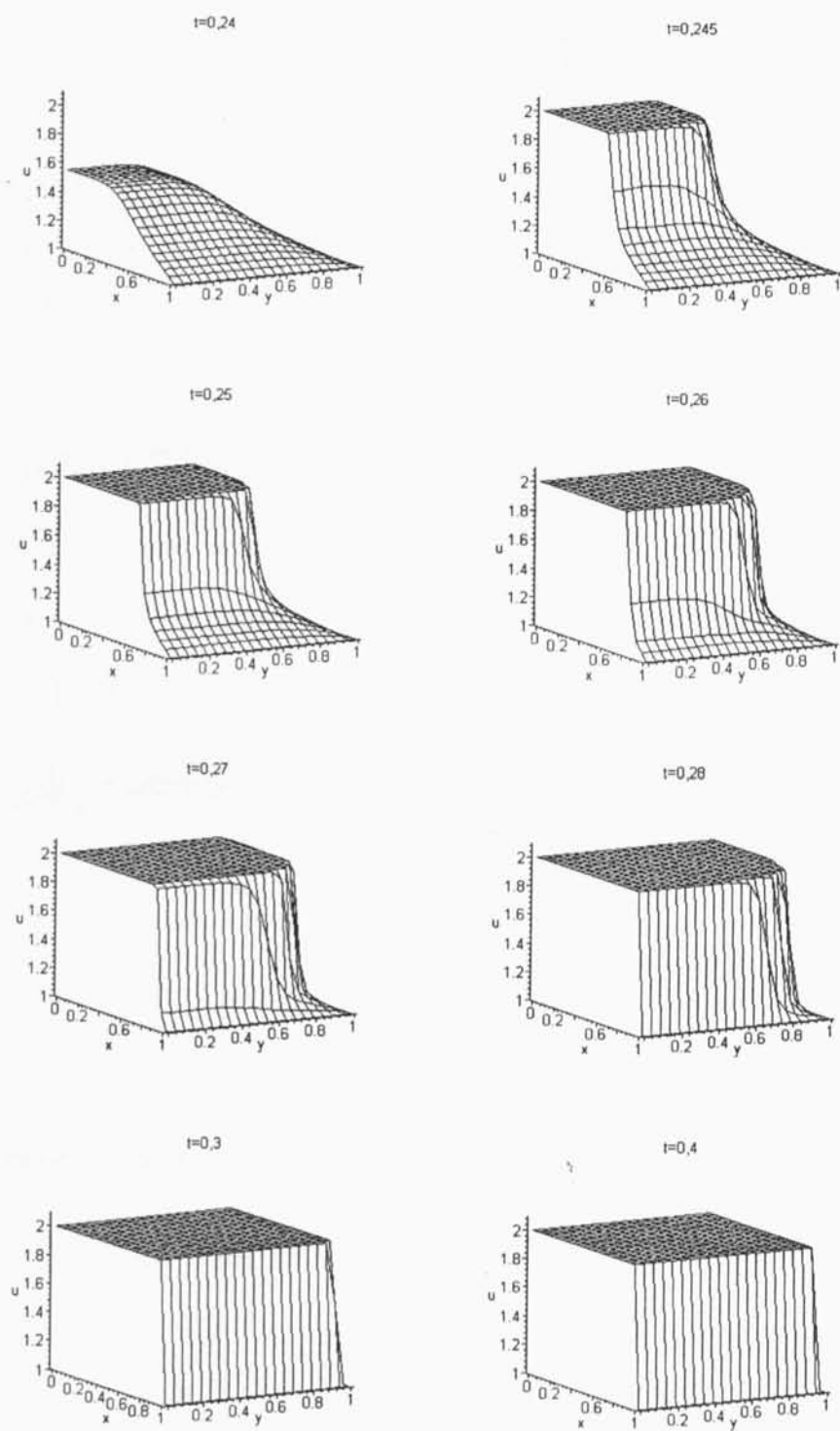


Figura 6.23 Equação de reacção-difusão, $d = 0, 1$, perfis da solução

6.4 Sistemas de Equações de Burgers

Consideremos o seguinte sistema de equações de Burgers [17]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = p \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} \quad (6.5)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = p \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (6.6)$$

com $0 \leq x, y \leq 1$ e $t \geq 0$. Nas fronteiras assumimos condições de Dirichlet.

Uma solução exacta é

$$u(x, y, t) = \frac{3}{4} - \frac{1}{4} (1 + \exp((-4x + 4y - t)/(32p)))^{-1} \quad (6.7)$$

$$v(x, y, t) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} (1 + \exp((-4x + 4y - t)/(32p)))^{-1}. \quad (6.8)$$

A solução representa uma frente abrupta em $y = x + 0,25t$. Resolvemos este problema para $p = 0,01$ no intervalo de tempo $[0, 3]$. As condições de simulação foram as seguintes: malha espacial inicial uniforme à direita com 7×7 , aproximações cúbicas, $tol1 = tol2 = 10^{-5}$ e para valores das constantes de penalização $c_2 = 10^{-4}$, $c_1 = c_3 = 10^{-6}$. O tempo de computação foi de 67318 segundos, sendo avaliadas 264 matrizes jacobianas. O número de chamadas à rotina RES e RESJAC foi 161020. A figura 6.24 ilustra o movimento da malha induzido pelo MEFM. As figuras 6.25 e 6.26 mostram diversos perfis de cada uma das componentes da solução interpoladas para uma malha uniforme 21×21 .

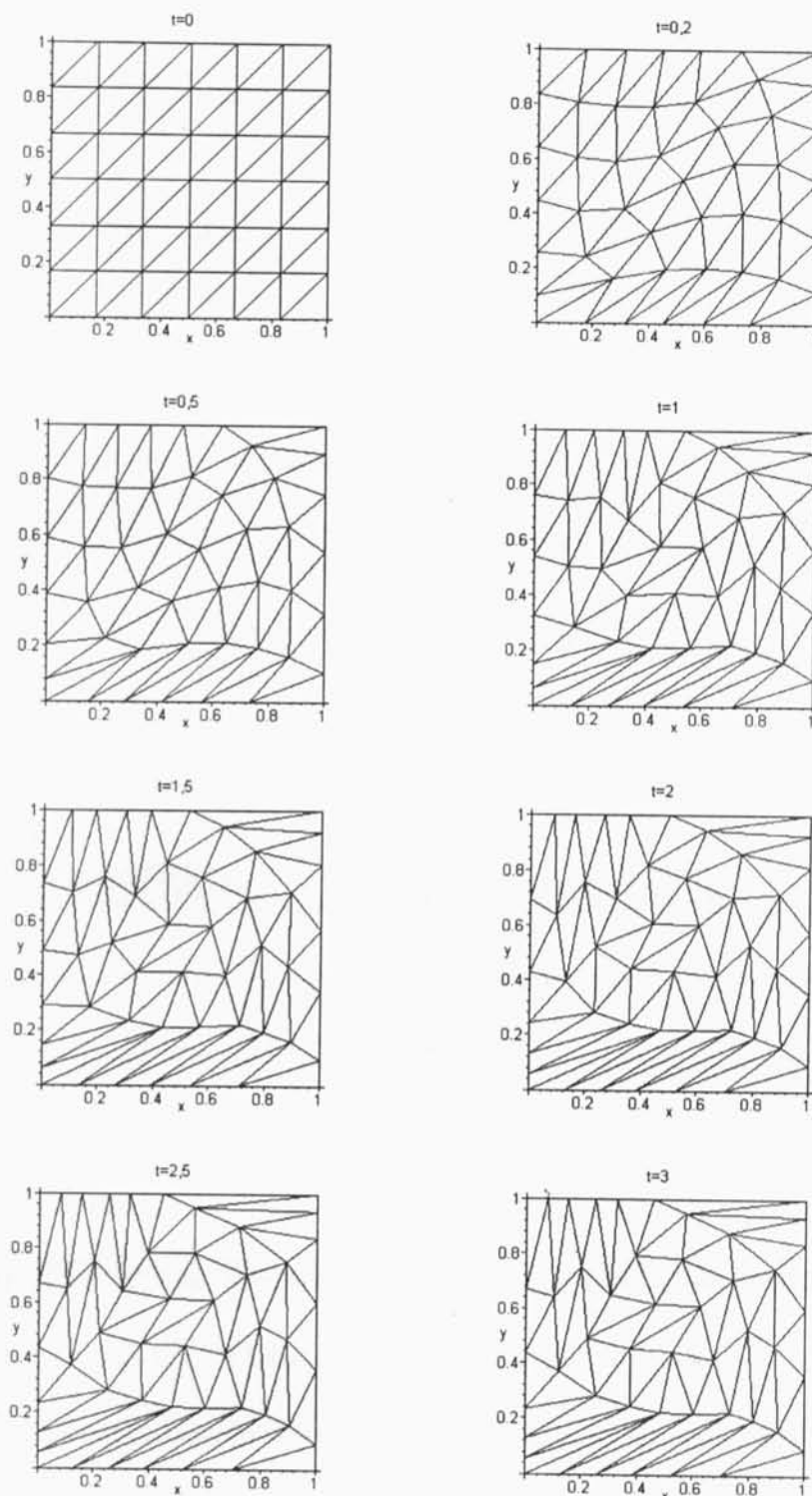


Figura 6.24 Sistema de Burgers, evolução da malha

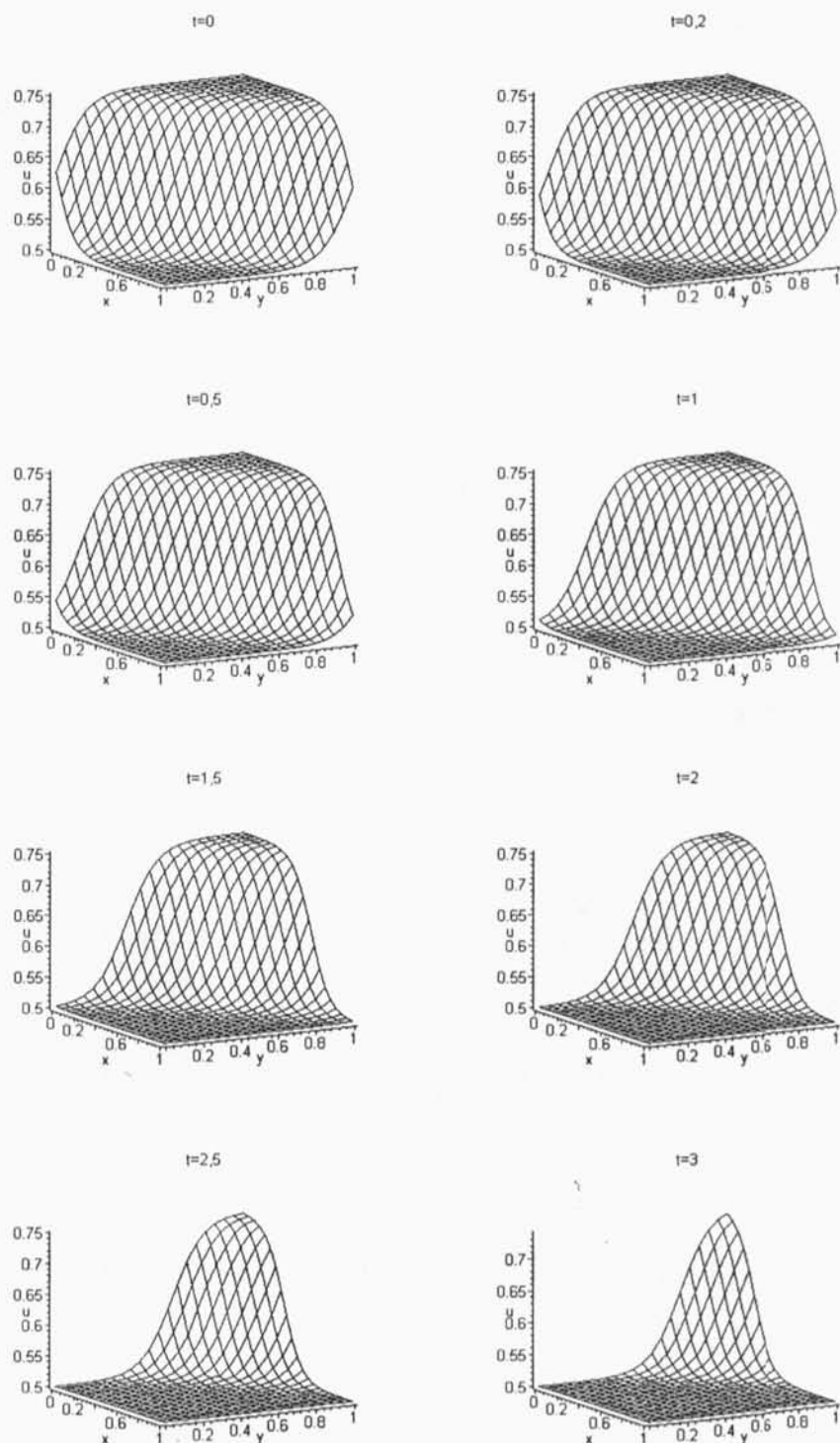


Figura 6.25 Sistema de Burgers, perfis da primeira componente da solução

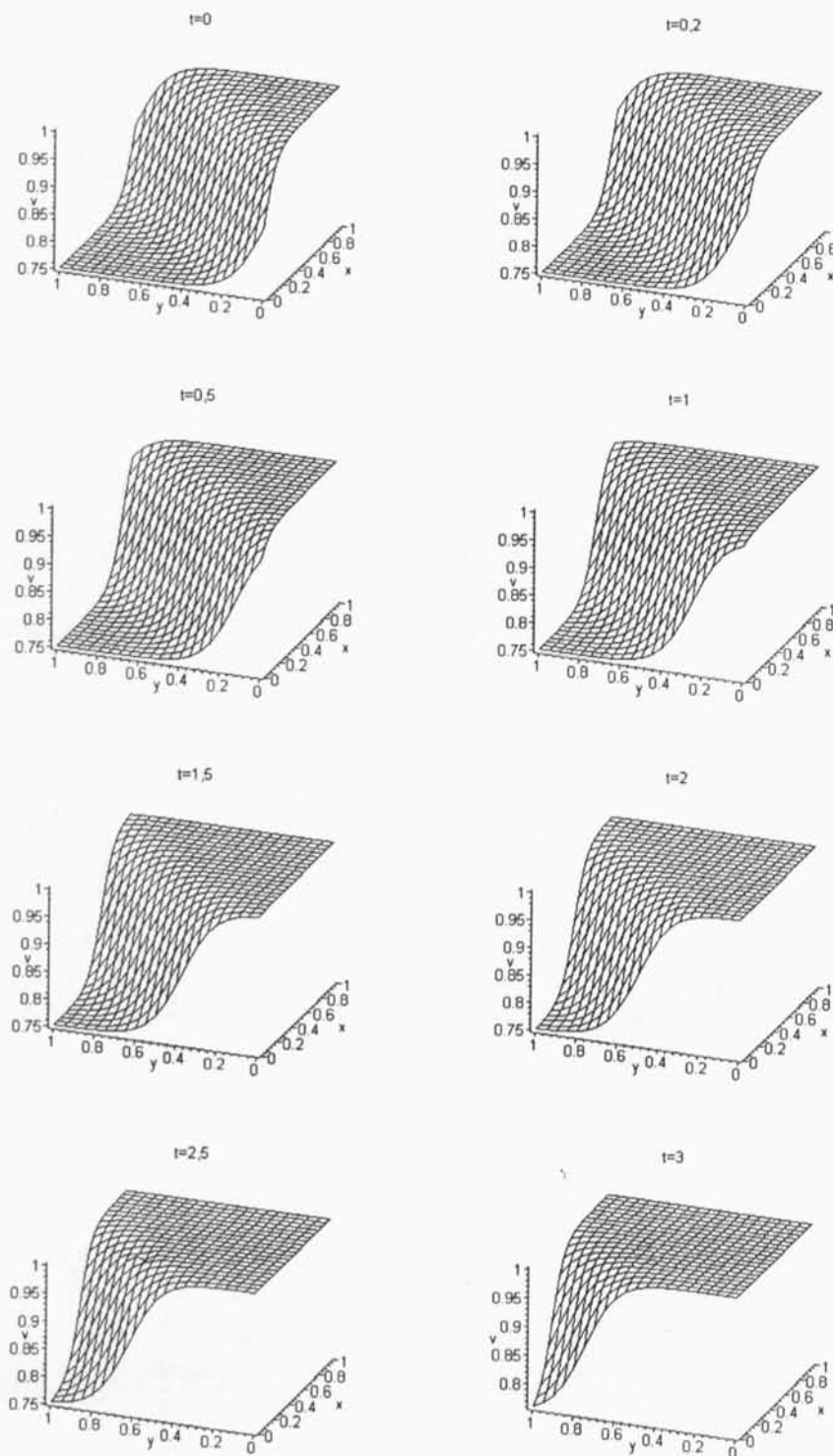


Figura 6.26 Sistema de Burgers, perfis da segunda componente da solução

6.5 Propagação de ondas de temperatura num leito fixo

O seguinte modelo bidimensional pseudo-homogêneo foi usado por Ferreira [34] para descrever a propagação de ondas de temperatura em leito fixo. A utilização destes modelos fornece informações sobre a propagação das ondas térmicas e o perfil que se estabelece no sistema em condições estacionárias. A descrição matemática do modelo é feita com base em equações de conservação de energia para ambas as fases, sem que se faça distinção entre as temperaturas do sólido e do fluido. Assume-se dispersão axial de calor e que a transferência de calor na parede é governada por um coeficiente global de transferência de calor. Assim, considerando que a temperatura T não é uniforme ao longo da secção transversal da coluna, i.e., para além da coordenada espacial z , $0 \leq z \leq L$, L o comprimento da coluna, T depende também da posição radial r , $0 \leq r \leq R$, R o raio da secção recta, $T = T(z, r, \theta)$. A equação de balanço energético do modelo pseudo-homogêneo em regime transiente escreve-se

$$A \frac{\partial T(z, r, \theta)}{\partial \theta} = K_{ae} \frac{\partial^2 T(z, r, \theta)}{\partial z^2} - u \rho_f C_f \frac{\partial T(z, r, \theta)}{\partial z} + \frac{K_{re}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T(z, r, \theta)}{\partial r} \right), \quad (6.9)$$

onde θ é a variável de tempo expressa em segundos, $A = [\rho_f C_f \varepsilon + \rho_s C_s (1 - \varepsilon)]$,

sendo

$\rho_f C_f$ a capacidade térmica volumétrica do fluido, $\text{J m}^{-3}(\text{°K})^{-1}$,

ε a porosidade do leito,

$\rho_s C_s$ a capacidade volumétrica térmica do sólido, $\text{J m}^{-3}(\text{°K})^{-1}$,

K_{ae} a condutibilidade térmica axial, $\text{J m}^{-3}(\text{°K})^{-1}\text{s}^{-1}$,

u , a velocidade, m s^{-1} ,

K_{re} a condutibilidade térmica radial, $\text{J m}^{-3}(\text{°K})^{-1}\text{s}^{-1}$.

Considerou-se que a coluna estava inicialmente a uma temperatura uniforme, T_0 , e que depois era perturbada à entrada por uma alimentação quente de T_F , em escoamento ascendente. A condição inicial é

$$T(z, r, 0) = \begin{cases} T_0 & \text{se } z, r > 0 \\ T_F & \text{se } z = 0 \end{cases} \quad (6.10)$$

e as condições de fronteira são dadas por

$$\begin{aligned} T(0, r, \theta) &= T_F \\ \frac{\partial T(L, r, \theta)}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial T(z, 0, \theta)}{\partial r} &= 0 \\ -K_{re} \frac{\partial T(z, R, \theta)}{\partial r} &= h_{we} (T(z, R, \theta) - T_a) \end{aligned} \quad (6.11)$$

onde,

h_{we} é o coeficiente de transferência de calor médio na parede, $\text{J m}^{-3}(\text{°K})^{-1}\text{s}^{-1}$,

T_0 é a temperatura inicial, °K ,

T_F é a temperatura de alimentação, °K ,

T_a é a temperatura ambiente, °K .

Para se obter a equação adimensional foram introduzidas as seguintes variáveis:

$$T^* = \frac{T - T_a}{T_F - T_a} \quad (6.12)$$

$$x = \frac{z}{L} \quad (6.13)$$

$$y = \frac{r}{R} \quad (6.14)$$

$$t = \frac{\theta}{\tau}, \quad (6.15)$$

em que $\tau = \frac{\varepsilon L}{u}$, é o tempo de passagem e, ainda, os seguintes grupos adimensionais:

$$Pe_a = \frac{G_f C_f L}{K_{ae}} \quad (6.16)$$

$$Pe_r = \frac{G_f C_f L}{K_{re}} \quad (6.17)$$

$$Bi = \frac{h_{we} R}{K_{re}} \quad (6.18)$$

$$\xi_h = \frac{\rho_s C_s (1 - \varepsilon)}{\rho_f C_f \varepsilon} \quad (6.19)$$

onde

Pe_a é o número de Peclet axial térmico,

Pe_r é o número de Peclet radial térmico,

Bi é o número de Biot,

ξ_h é o parâmetro de capacidade térmica.

A equação (6.9) adimensional escreve-se

$$(1 + \xi_h) \frac{\partial T^*}{\partial t} = \frac{1}{Pe_h} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^2} - \frac{\partial T^*}{\partial x} + \frac{L}{RPe_r} \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^2} + \frac{L}{yRPe_r} \frac{\partial T^*}{\partial y}. \quad (6.20)$$

A condição inicial é

$$T^*(x, y, 0) = \begin{cases} T_0^* & \text{se } x, y > 0 \\ 1 & \text{se } x = 0 \end{cases} \quad (6.21)$$

e as condições de fronteira são dadas por

$$T^*(0, y, t) = 1 \quad (6.22)$$

$$\frac{\partial T^*(1, y, t)}{\partial x} = 0 \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial T^*(x, 0, t)}{\partial y} = 0 \quad (6.24)$$

$$\frac{\partial T^*(x, 1, t)}{\partial y} = -BiT^*(x, 1, t). \quad (6.25)$$

Nas simulações realizadas, considerou-se $Pe_a = 100$, $Pe_r = 500$, $Bi = 8$ e $\xi_h = 1, 3$.

Admitimos que a coluna estava inicialmente equilibrada a uma temperatura uniforme

$T_0 = 20^\circ C$ e que depois era perturbada à entrada com uma alimentação quente de

$T_F = 56^\circ C$. A condição de fronteira definida pela equação (6.22) foi modificada para

entrada em exponencial

$$T^*(0, y, t) = 1 + (T_0^* - 1) \exp(-100t). \quad (6.26)$$

Exemplo 1: Neste primeiro exemplo considerou-se a temperatura ambiente igual à temperatura inicial, i.e., $T_a = T_0 = 20^\circ C$. A malha inicial é uma malha não uniforme à *direita* caracterizada pela distribuição de nós com abcissas $x = 0, x = 0,05, x = 0,1, x = 0,2, x = 0,4, x = 0,7$ e $x = 1$ e ordenadas $y = 0, y = 0,2, y = 0,4, y = 0,6, y = 0,8$ e $y = 1$. A escolha de uma malha inicial não uniforme deve-se ao facto de a solução inicial ter um perfil axial abrupto em $x = 0$. O intervalo de tempo considerado foi $0 \leq t \leq 4$. Os valores para as constantes de penalização foram $c_2 = 10^{-2}, c_1 = c_3 = 10^{-6}$. Para valores de tolerância do integrador LSODIS considerou-se $tol1 = tol2 = 10^{-7}$ e considerámos aproximações quadráticas. O tempo de computação foi de 14554 segundos, sendo avaliados 437 matrizes jacobianas e calculados 86920 resíduos. Na figura 6.27 estão representadas as histórias de temperatura no meio da coluna ($x = 0,5$ e $y = 0$), na parede ($x = 0,5$ e $y = 1$) e a média do topo ($y = 1$). A figura 6.28 mostra os perfis de temperatura em vários instantes.

A figura 6.29 apresenta a evolução da malha para esta simulação. Seguidamente e nas condições da simulação anterior realizámos uma simulação em que se consideraram aproximações cúbicas. A figura 6.30 mostra a evolução da malha nessa situação. Ao passar de aproximações quadráticas para cúbicas a malha tornou-se menos adaptativa. Para a tornarmos mais adaptativa será necessário escolher para

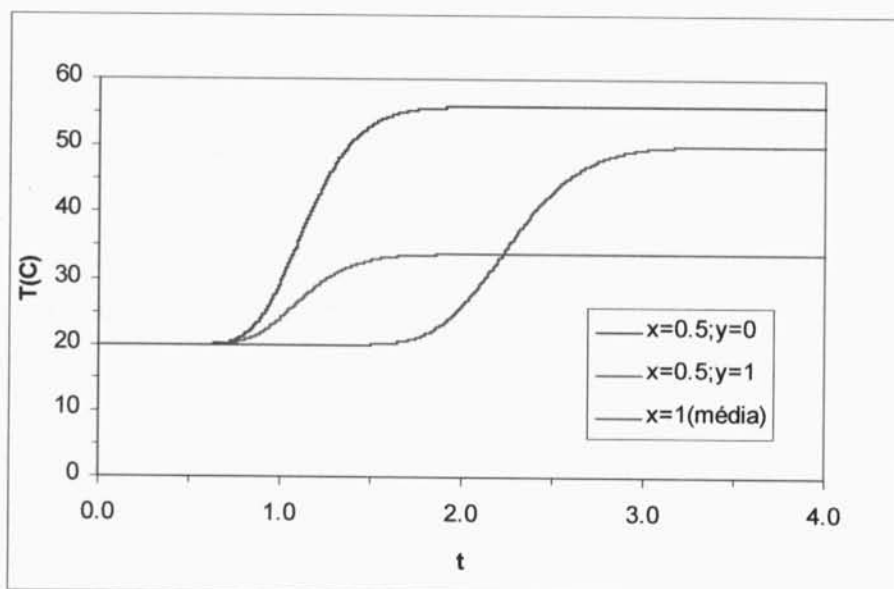


Figura 6.27 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 20^\circ C$, histórias de temperatura

valor da constante c_2 um valor menor. A figura 6.31 mostra o movimento da malha induzido pelo MEFM simulado nas condições anteriores, com aproximações cúbicas e $c_2 = 10^{-4}$. Como podemos constatar os nós posicionam-se nas regiões de maior variação da função, i.e., em $x = 1$ e numa vizinhança de $(0, 1)$. A qualidade das soluções numérica obtidas com estas simulações é semelhante. No entanto os custos computacionais são mais elevados quando se aumenta o grau da aproximação ou se diminui c_2 .

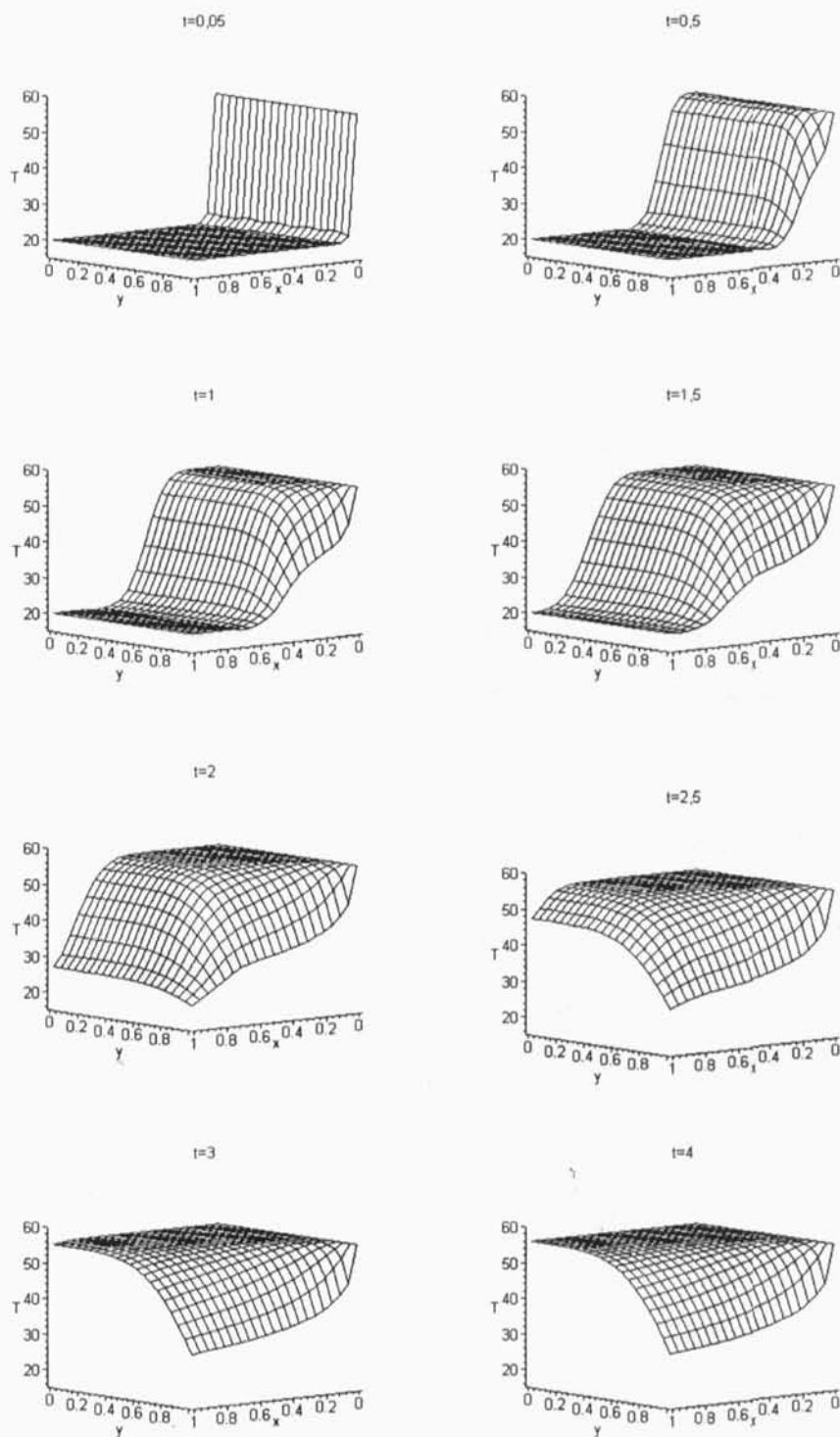


Figura 6.28 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 20^\circ C$, perfis de temperatura

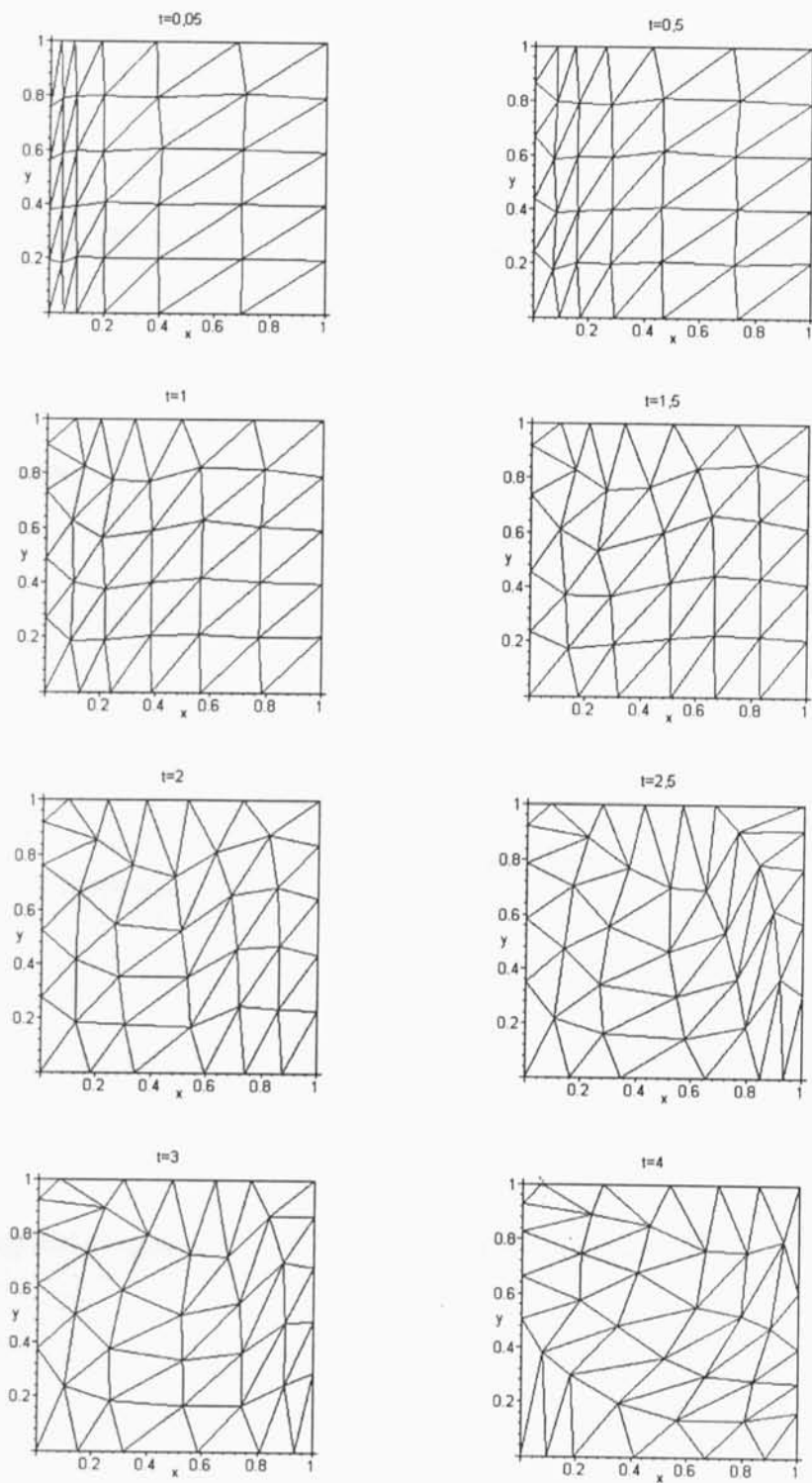


Figura 6.29 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha, 1ª simulação

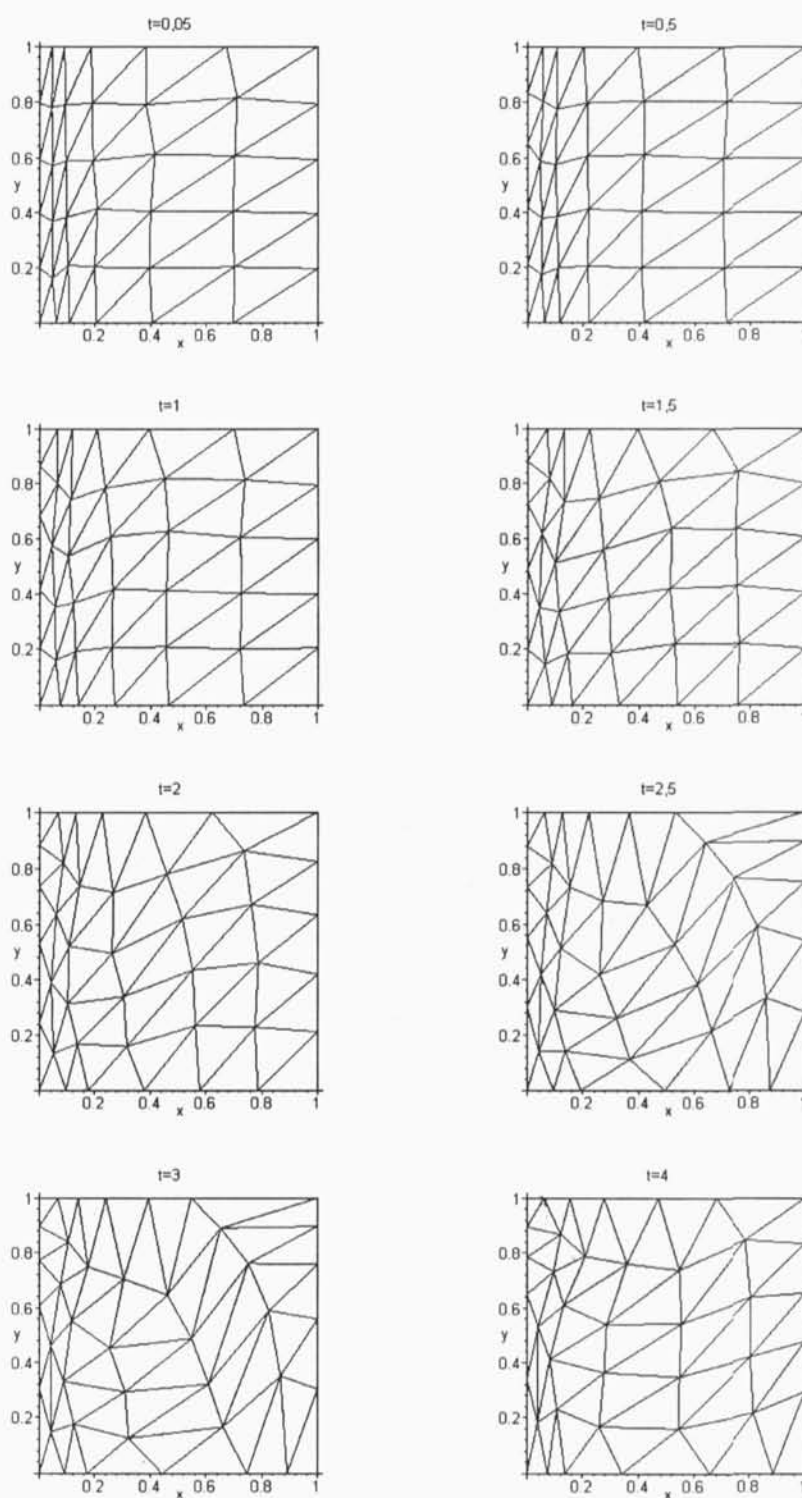


Figura 6.30 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha, 2ªsimulação

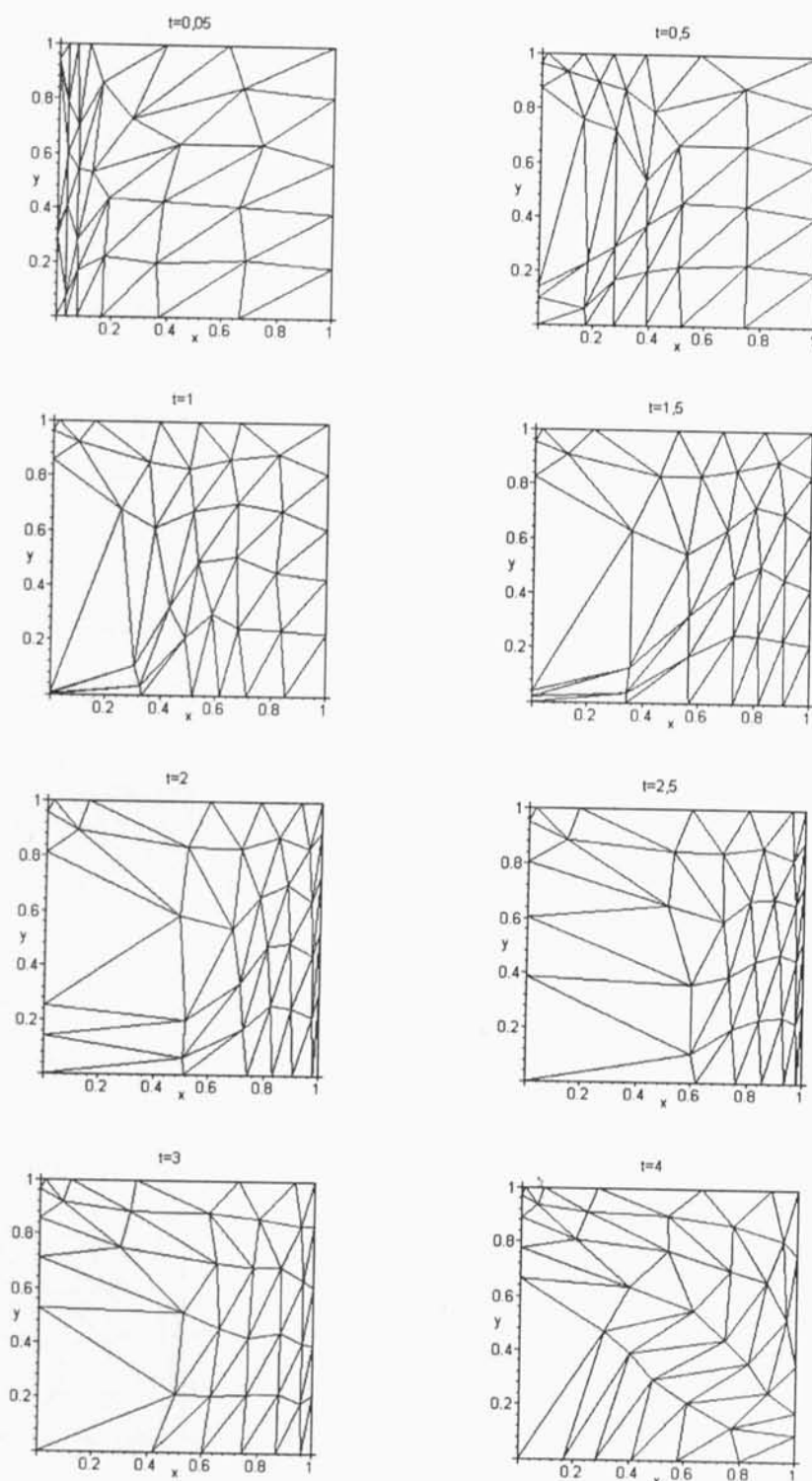


Figura 6.31 Propagação de ondas térmicas, evolução da malha, 3ª simulação

Exemplo 2: Simulemos agora o mesmo problema com as mesmas condições do exemplo 1, considerando a temperatura ambiente $T_a = 24^\circ C$, tal como em [34]. Nestas condições, no instante inicial existirá um perfil radial em que a temperatura na parede será muito próxima da temperatura ambiente, $T_a = 24^\circ C$. É isso que está realçado nos primeiros instantes da história de temperatura na parede da coluna ($x = 0,5$ e $y = 1$) da figura 6.32. A temperatura sofre uma variação inicial e depois mantém-se praticamente constante até ao instante em que é afectada pela onda térmica. Nesta figura são também representadas as histórias de temperatura no meio da coluna ($x = 0,5$ e $y = 0$) e a média do topo ($y = 1$).

Os parâmetros relativos ao método foram os mesmos que os considerados na primeira simulação do exemplo 1.

A figura 6.33 apresenta os perfis de temperatura em vários instantes. Observe-mos que, nos instantes iniciais e enquanto não se faz sentir o efeito da onda térmica, a solução na parede da coluna, $y = 1$, está acima de $20^\circ C$. A figura 6.34 ilustra a evolução da malha nos mesmos instantes.

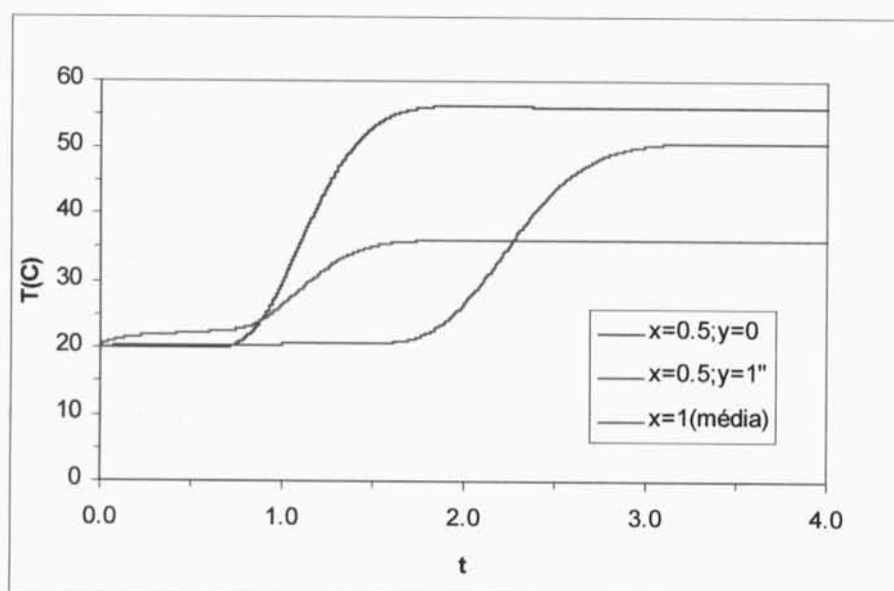


Figura 6.32 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ\text{C}$, $Pe_a = 100$, histórias de temperatura

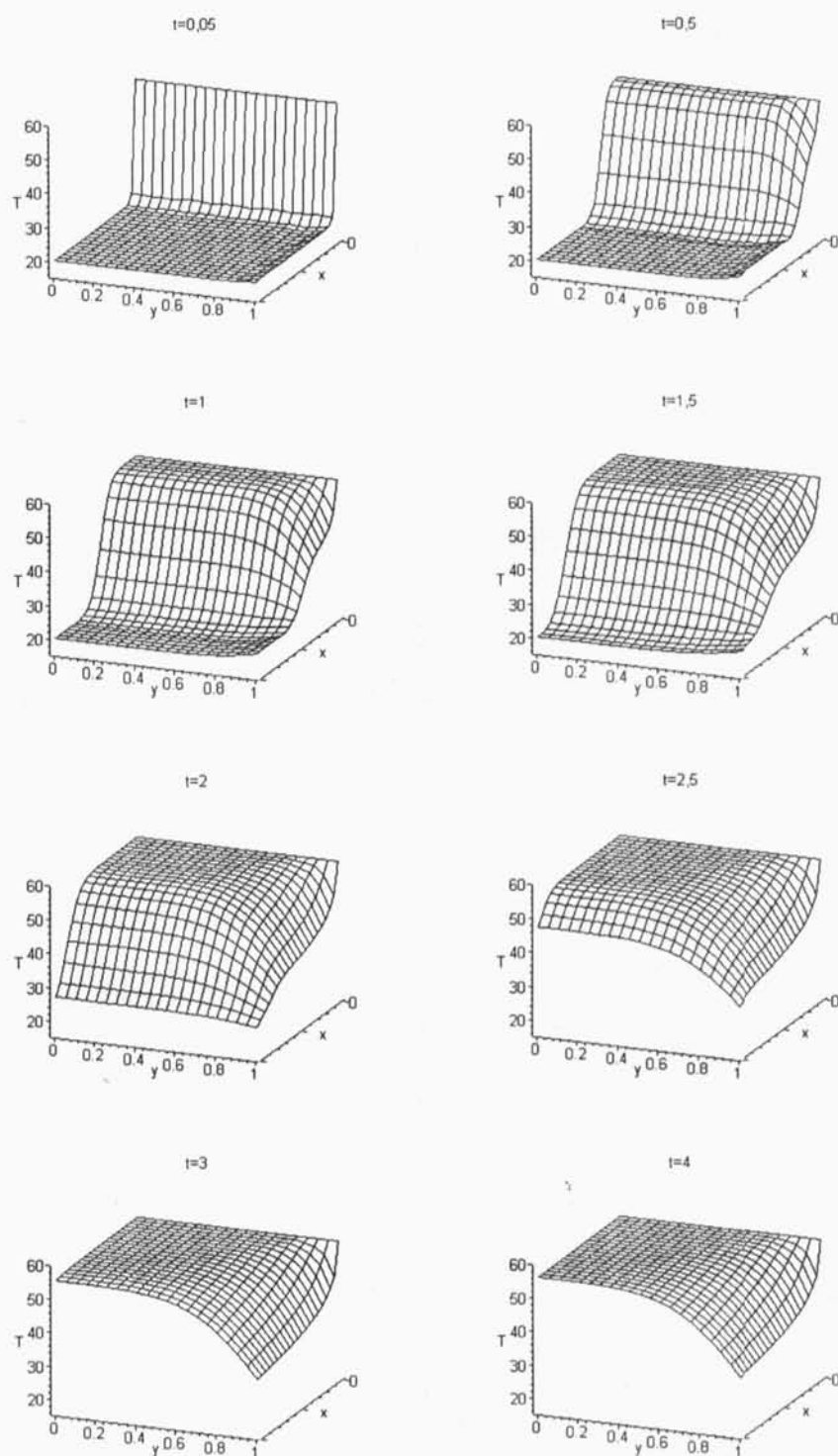


Figura 6.33 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ\text{C}$, perfis de temperatura

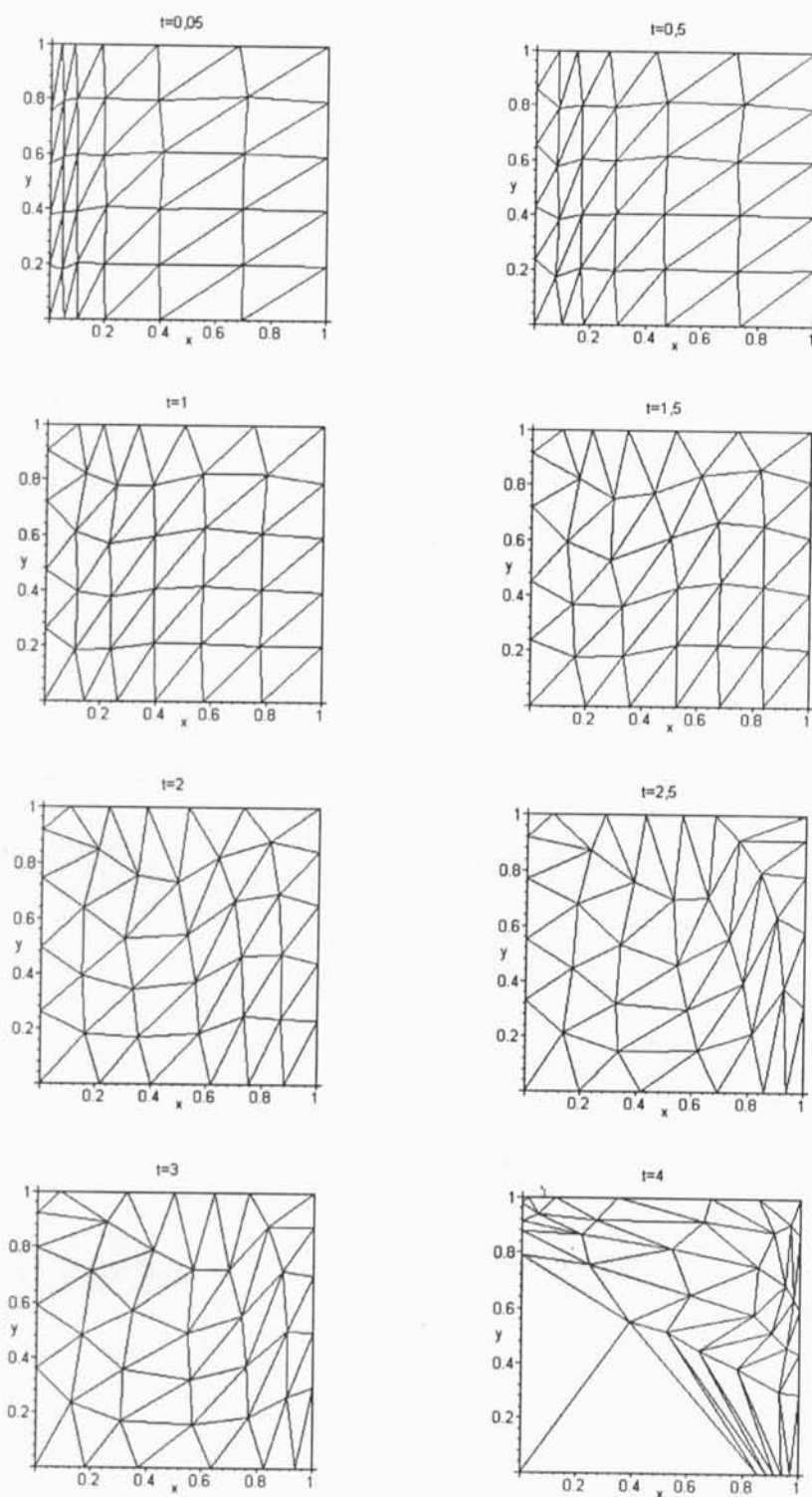


Figura 6.34 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ C$, evolução da malha

Exemplo 3: Neste exemplo pretendemos simular o efeito do número de Peclet axial térmico sobre o comportamento do sistema. Quando Pe_a é elevado, o que corresponde a uma dispersão axial térmica desprezável, a variação transiente da onda térmica tende a ser uma resposta do tipo degrau, tal como a perturbação térmica de entrada. Sob o ponto de vista numérico, a equação parabólica que descreve o modelo torna-se quase hiperbólica, aumentando as dificuldades de resolução. Considerámos as condições do problema no exemplo 2 e um valor elevado para Pe_a , $Pe_a = 1000$. As condições relativas ao método para esta simulação são as da segunda simulação do exemplo 1, $c_2 = 10^{-2}$, $c_1 = c_3 = 10^{-6}$, $tol1 = tol2 = 10^{-7}$ e aproximações cúbicas. O tempo de computação foi de 63164 segundos. A figura 6.35 apresenta as histórias de temperatura na parede da coluna ($x = 0,5$ e $y = 1$), as histórias de temperatura no meio da coluna ($x = 0,5$ e $y = 0$) e a média do topo ($y = 1$). O efeito do valor de Pe_a sobre o comportamento do sistema é representado nas figuras 6.32 e 6.35. A figura 6.36 mostra o perfil de temperatura que se forma no instante $t = 1,5$.

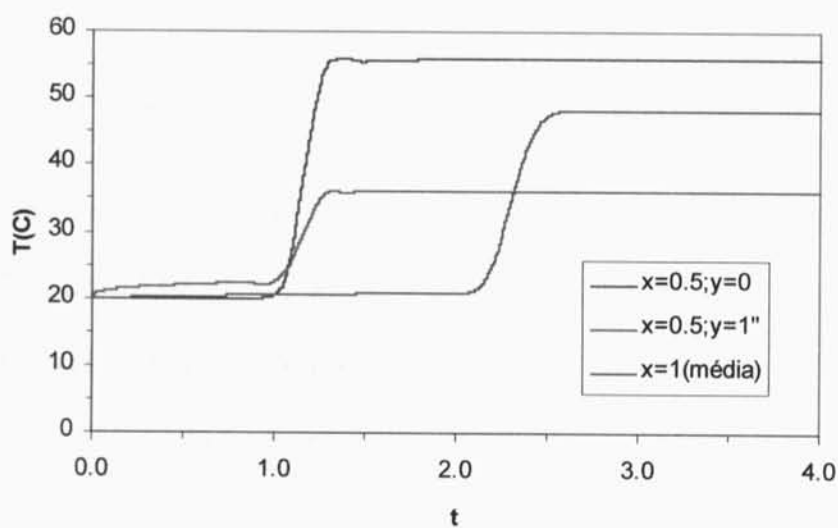


Figura 6.35 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ C$, $Pe_a = 1000$, histórias de temperatura

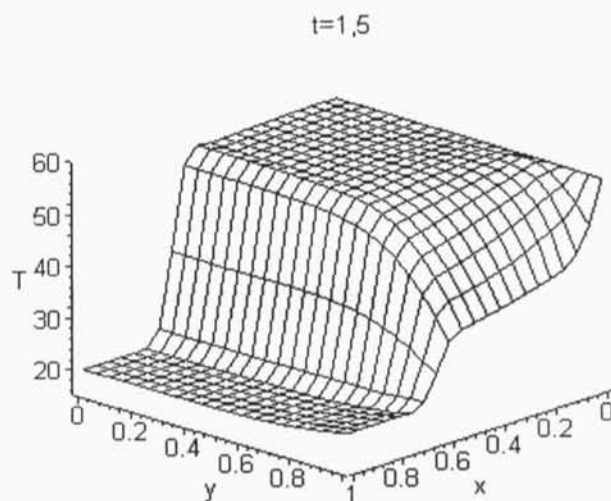


Figura 6.36 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ\text{C}$, $Pe_a = 1000$, perfil de temperatura em $t = 1,5$

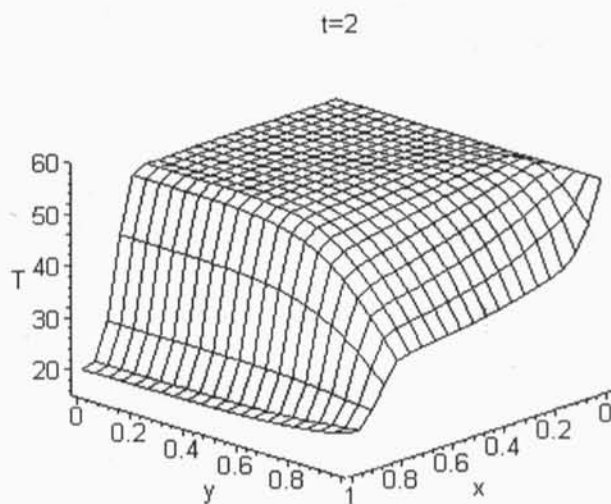


Figura 6.37 Propagação de ondas térmicas, $T_a = 24^\circ\text{C}$, $Pe_a = 1000$, perfil de temperatura em $t = 2$

6.6 Conclusões e Notação

O MEFM desenvolvido mostrou-se eficaz na resolução de problemas de evolução em espaços bidimensionais. No entanto, a sua aplicação em 2-D é mais complexa do que em 1-D, uma vez que a distorção da malha é mais frequente e o controlo dos diversos parâmetros mais difícil. Um aspecto interessante observado é o efeito dos parâmetros de penalização no movimento da malha e na qualidade da solução. A primeira conclusão a retirar é que o mesmo conjunto de constantes de penalização produzem, para o mesmo problema, efeitos diferentes no movimento da malha, dependendo da malha inicial e do grau da aproximação escolhidos. Deste modo torna-se difícil definir um conjunto de constantes de penalização padrão. Contudo os valores de $c_1 = c_3 = 10^{-6}$ e c_2 no intervalo $[10^{-4}, 10^{-2}]$ mostraram-se apropriados na resolução de diversos problemas. Em muitas situações, movimentos distintos da malha produzem soluções de qualidade semelhante, em especial se se considerarem aproximações de grau elevado. Na definição dos parâmetros relativos ao método devemos ter em conta que o aumento do grau da aproximação se reflecte no aumento da dimensão do sistema de EDO a resolver. Por outro lado um valor pequeno de c_2 torna esse mesmo sistema mais *stiff*, sendo necessário exigir tolerâncias elevadas ao integrador LSODIS, o que acarreta custos computacionais consideráveis.

Uma outra conclusão importante diz respeito à relação entre as malhas geradas pelo MEFM e princípios de equidistribuição. Em 2-D não existe nenhuma teoria disponível para prever o comportamento dos nós da malha quando a solução se

aproxima do estado estacionário. Nos exemplos numéricos que apresentámos, verificamos que para uma malha com um número suficiente de nós, estes se reposicionam segundo um certo princípio de equidistribuição, quando as soluções se aproximam do estado estacionário. Este princípio é caracterizado por alguns nós se deslocarem da região da frente para ocuparem uma posição mais equitativa no domínio espacial.

Geral

- c_i , $i = 1, 2, 3$, constantes de penalização do i -ésimo elemento finito
- tol_1 tolerância relativa à amplitude nodal
- tol_2 tolerância relativa às posições nodais

Equação de convecção-difusão

- p coeficiente de difusão
- t variável temporal normalizada
- x variável espacial normalizada
- y variável espacial normalizada
- $u(x, y, t)$ velocidade

Reacção com difusão

- d coeficiente de difusão

- t variável temporal normalizada
- x variável espacial normalizada
- y variável espacial normalizada
- $u(x, y, t)$ temperatura

Sistema de equações de Burgers

- p coeficiente de difusão
- t variável temporal normalizada
- x variável espacial normalizada
- y variável espacial normalizada
- $u(x, y, t)$ primeira componente da variável independente
- $v(x, y, t)$ segunda componente da variável independente

Propagação de ondas de temperatura em leito fixo

- h_{we} coeficiente de transferência de calor médio na parede
- t variável temporal normalizada
- u a velocidade
- x variável axial normalizada

- y variável radial normalizada
- Bi número de Biot
- K_{ae} condutibilidade térmica axial
- K_{re} condutibilidade térmica radial
- L comprimento da coluna
- Pe_a número de Peclet axial térmico
- Pe_r número de Peclet radial térmico
- R raio da secção recta da coluna
- $T(z, r, \theta)$ temperatura na coluna
- $T^*(z, r, \theta)$ temperatura na coluna, adimensional
- T_a temperatura ambiente
- T_F temperatura de alimentação
- T_0 temperatura inicial
- ε porosidade do leito
- θ variável de tempo
- ξ_h parâmetro de capacidade térmica

- $\rho_f C_f$ a capacidade térmica volumétrica do fluido
- $\rho_s C_s$ a capacidade térmica volumétrica do sólido
- τ tempo de passagem

Capítulo 7

Conclusões

7.1 Considerações finais

Nesta tese considerámos a aplicação do método dos elementos finitos para a semi-discretização de problemas de evolução em 1-D e em 2-D, usando malhas espaciais que se deformam continuamente no tempo. Em particular, investigámos o método dos elementos finitos móveis com aproximações de grau superior a 1.

Para espaços unidimensionais desenvolvemos e implementámos uma formulação do MEFM que permite resolver com precisão uma classe de problemas evolutivos, descrita por sistemas implícitos de EDP do tipo

$$\mathbf{G}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}(x, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{H}(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}),$$

que constitui uma extensão ao trabalho de Sereno. Esta formulação baseia-se na construção de uma solução aproximada usando funções polinomiais de grau arbitrário em

cada elemento finito. Foram introduzidas novas técnicas para aproximar os integrais que envolvem segundas derivadas espaciais e que não têm existência no espaço a que a solução aproximada pertence. Esta técnica permite o cálculo numérico de todos os integrais intervenientes na formação das equações gerais do MEFM, sem necessidade de, para cada problema, se catalogar os diversos integrais a avaliar. No que respeita às singularidades inerentes ao MEFM foram consideradas funções de penalização que, para além de tornarem a matriz não singular, têm o efeito acrescido de regularizar o movimento da malha, permitindo obter malhas que se adaptam ao comportamento da solução. O MEFM foi implementado associando uma malha espacial a cada variável dependente do sistema de EDP a resolver. As penalizações podem ser caracterizadas elemento a elemento e não interferem na qualidade da solução, no sentido de que diferentes constantes de penalização produzem soluções de qualidade semelhante.

O algoritmo computacional baseado no MEFM permitiu resolver vários problemas provenientes da Engenharia Química. Partindo de uma malha espacial com os nós centrados à esquerda foi possível obter um conjunto de parâmetros padrão para a resolução dos diferentes problemas, limitando assim a experimentação numérica necessária à escolha dos melhores valores para as constantes de penalização, tolerância do integrador de EDO e posição inicial dos nós espaciais. Com base nos resultados numéricos obtidos podemos afirmar que o MEFM é um instrumento poderoso para o cálculo de soluções numéricas de problemas de evolução modelizados por EDP, cujas soluções exibem regiões de grande actividade espacial que se movem no tempo.

Os mesmos princípios que fundamentam o MEFM com aproximações polinomiais de grau arbitrário em 1-D foram aplicados em espaços bidimensionais, na resolução de problemas de evolução do tipo

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}_1(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} + \mathbf{F}_2(x, y, t, \mathbf{u}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2} + \mathbf{H}(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}),$$

sujeitos a condições iniciais e a condições de fronteira de Dirichlet, de Neumann ou de Robin. O MEFM foi implementado considerando uma única malha triangular hexagonal conforme e, quer a interpolação, quer o cálculo dos integrais, foi efectuada usando coordenadas baricêntricas. Para o cálculo da derivada temporal da solução é necessário avaliar as derivadas da solução aproximada com respeito às posições nodais. Foi deduzido um resultado que permite relacionar estas derivadas com as derivadas parciais espaciais da solução. Relativamente à singularidade da matriz de massa mantivemos o uso de funções de penalização, introduzindo novas funções que dependem da área de cada elemento finito. Para o cálculo dos integrais que envolvem segundas derivadas espaciais, sobre o suporte de um nó espacial, aproximámos a solução aproximada por uma sua suavização. Mostrámos que, para uma certa classe de problemas, apenas é necessário calcular estes integrais no interior dos elementos finitos e nas arestas adjacentes a um nó espacial. O cálculo dos integrais sobre as arestas é feito com base nas técnicas desenvolvidas para 1-D. Deste modo todos os integrais que figuram nas equações gerais do método são calculados por integração numérica, independentemente do problema a tratar.

O MEFM foi aplicado com sucesso a vários problemas de evolução em 2-D. Ficou demonstrado que é possível obter boas soluções numéricas de problemas difíceis usando aproximações de grau elevado. Foi também investigado o efeito das constantes de penalização na evolução da malha e na qualidade da solução. Da experimentação numérica ficou claro que as constantes de penalização, para além de evitarem as singularidades, regularizam o movimento da malha, mas não o determinam. Para o mesmo problema, as mesmas constantes produzem malhas com movimentos distintos se se considerarem, por exemplo, malhas iniciais distintas ou aproximações de grau diferente. Por outro lado podemos obter soluções com precisão semelhante usando constantes de penalização distintas.

Em conclusão pensamos que o método e algoritmo computacional desenvolvidos constituem uma importante contribuição para a resolução de problemas de evolução cujas soluções apresentam regiões de grande actividade espacial, móveis com o tempo. O MEFM reduz grandemente o número de graus de liberdade exigidos para resolver com precisão certos problemas de evolução. Reduz também, de forma significativa, a dispersão associada a malhas fixas. Numa outra perspectiva o MEFM dá uma resposta adequada à questão de como deformar a malha espacial de modo a descrever da melhor forma o comportamento da solução.

7.2 Perspectivas de desenvolvimento futuro

No seguimento do trabalho desenvolvido nesta tese existem várias possibilidades de trabalhos futuros de entre os quais destacamos:

- a) Aplicação do MEFM em 2-D a domínios não rectangulares.
- b) Aplicação do MEFM em espaços bidimensionais a problemas com fronteiras móveis.
- c) Generalização do MEFM de modo a permitir a simulação de sistemas físicos em espaços tridimensionais.
- d) Estudo das relações observadas na experimentação numérica entre o movimento das malhas e princípios de equidistribuição. Uma investigação cuidada deste tema levará à construção de um método mais robusto, i.e., menos dependente dos parâmetros definidos pelo utilizador.

Entretanto será interessante a aplicação do MEFM em 2-D a problemas reais provenientes de outras áreas da Engenharia. Será também importante rever a utilização do integrador de equações diferenciais ordinárias LSODI de passo e ordem variável. Trata-se de um integrador poderoso, no entanto os custos computacionais que acarreta são elevados. Pensamos ser possível tirar partido de um código menos complexo mas mais rápido e mais adaptado aos sistemas de EDO gerados pela discretização espacial das EDP pelo MEFM.

Referências Bibliográficas

1. S. Adjerid and J. Flaherty. A moving finite element method with error estimation and refinement for one-dimensional time dependent partial differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 23:778–796, 1986.
2. S. Adjerid and J. Flaherty. A local refinement finite element method for two-dimensional parabolic systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 9(5):792–811, 1988.
3. S. Adjerid and J. Flaherty. Second-order finite element approximations a posteriori error estimation for two-dimensional parabolic systems. *Numer. Math.*, 53:183–198, 1988.
4. R. Alexander, P. Manselli, and K. Miller. Moving finite elements for the Stefan problem in two dimension. *Rend. Accad. Naz. Lincei (Rome)*, pages 57–61, 1979.
5. R. D. Alstead. Moving finite element modelling of the 2D shallow water equations. *Numerical Analysis Report, University of Reading*, 5, 1987.
6. C. Arney and J. Flaherty. An adaptive mesh-moving and local refinement method for time-dependent partial differential equations. *ACM Trans. Math. Softw.*, 16:48–71, 1990.

7. M. Baines. Local adaptive moving finite elements. In K. Morton and M. Baines, editors, *Numerical Methods for fluid dynamics II*, pages 1–26. Oxford University Press, 1985.
8. M. Baines. An analysis of the moving finite element procedure. *SIAM J. Num. Anal.*, 28(5):1323–1349, 1991.
9. M. Baines. *Moving finite elements*. Clarendon press, Oxford, 1994.
10. M. Baines. On the relationship between the moving finite element procedure and best piecewise L2 fits with adjustable nodes. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 10:191–203, 1994.
11. M. Baines. Grid adaptation via node movement. *Applied Numerical Mathematics*, 26:77–96, 1998.
12. M. Baines and A. Wathen. Moving finite element modelling of compressible flow. *Applied Num. Maths.*, 2:495–514, 1986.
13. M. Baines and A. Wathen. Moving finite element methods for evolutionary problems I: Theory. *J. Comput. Phys*, 79(2):245–269, 1988.
14. M. Berzins, R. Fairlie, S. Pennington, J. Ware, and J. Scales. SPRINT2D: Adaptive software for PDEs. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 24:475–499, 1998.
15. M. Berzins and R. M. Furzeland. A user's manual for SPRINT - a versatile software package for solving systems of algebraic, ordinary and partial differential equations. *Technical Report, Thornton Research Center, Shell REsearch ltd., U.k.*, 1985.
16. R. Bird, W. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. Wiley, N.Y., 1960.
17. J. Blom, R. Trompert, and J. G. Verwer. VLUGR2: A vectorizable adaptive grid

- solver for PDEs in 2D. *ACM Trans. Math. Softw.*, 22:302–328, 1996.
18. N. Carlson and K. Miller. Gradient weighted moving finite element in two dimensions. In M. Hussaini, D. Dwoyer, and R. Voight, editors, *Finite elements theory and application*, pages 151–164. Springer Verlag, 1988.
 19. N. Carlson and K. Miller. Design and application of a gradient-weighted moving finite element code I: in one dimension. *SIAM J. Sci. Comput*, 19(3):728–765, 1998.
 20. N. Carlson and K. Miller. Design and application of a gradient-weighted moving finite element code II: in two dimension. *SIAM J. Sci. Comput*, 19(3):766–798, 1998.
 21. H. Cheng and F. Hill. Separation of helium-methane mixtures by pressure swing adsorption. *AIChE Journal*, 31:95–102, 1985.
 22. T. J. Chung. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*. McGraw-Hill, 1978.
 23. M. Coimbra, C. Sereno, and A. Rodrigues. Moving finite elements: Simulation of the pressurization of adsorption beds with a mixture of helium-methane. In *First Meeting on Numerical Methods for Differential equations*, pages 9–17, 1995.
 24. M. Coimbra, C. Sereno, and A. Rodrigues. Applications of a moving finite element method. In *Second Meeting on Numerical Methods for Differential equations*, pages 420–429, 1998.
 25. M. Coimbra, C. Sereno, and A. Rodrigues. Simulated pressurization of adsorption beds by a moving finite element method. In *Paper 244: High performance computing*, 1998.
 26. M. Coimbra, C. Sereno, and A. Rodrigues. Modelling multicomponent adsorption process by a moving finite element method. *Journal of Computational and Applied*

Mathematics, (115):169–179, 2000.

27. G. R. Cowper. Gaussian quadrature formulas for triangles. *Int. J. Numer. Meth. Engrn.*, 7:405–408, 1973.
28. C. Cox, W. Jones, V. Quisenberry, and F. Yo. One-dimensional infiltration with moving finite elements and improving soil water diffusivity. *Water resources research*, 30(5):1431–1438, 1994.
29. M. Djomehri. *Moving finite element solution of systems of partial differential equations in one-dimension*. PhD thesis, University of California, 1983.
30. M. Djomehri, S. Doss, R. Gelinas, and K. Miller. Applications of the moving finite element for systems. *J. Comput. Phys*, pages 1–41, 1985.
31. M. Djomehri and J. George. Applications of the moving finite element to moving boundary Stefan problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engrn.*, pages 71–125, 1988.
32. B. Duarte. *Método dos elementos finitos móveis com aproximações de Hermite*. PhD thesis, Universidade de Coimbra, 1994.
33. B. Duarte and A. Portugal. Moving finite elements method applied to the solution of front reaction models: causticizing reaction. *Computers chem Engng*, 19:S421–S426, 1995.
34. L. Ferreira. *Dinâmica de processos de sorpção: Separação por bombagem paramétrica e recuperação de metais com resinas complexantes*. PhD thesis, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 1994.
35. R. Ferreira. *Contribuição para o estudo de reactores catalíticos em leito fixo: efeito*

da convecção em catalisadores de poros largos e casos de catalisadores bidispersos.

PhD thesis, Universidade do Porto, 1988.

36. R. Gelinas, S. Doss, and K. Miller. The moving finite element method: Applications to general partial differential equations with multiple large gradients. *J. Comput. Phys*, 40:202–249, 1981.
37. J. Hanser and O. Hasseger. A new moving finite element method based on quadratic approximation functions. *Int. J. Numer. Meth. Engn.*, 28:415–430, 1989.
38. D. Hawken, J. Gottlieb, and J. Hansen. Review of some adaptive node-movement techniques in finite-element and finite-difference solutions of partial differential equations. *J. Comput. Phys*, 95(2):254–302, 1991.
39. B. Herbst, S. Schoombie, and A. Mitchell. A moving Petrov-Galerkin method for transport equations. *Int. J. Numer. Meth. Engn.*, 18:1321–1336, 1982.
40. B. Herbst, S. Schoombie, and A. Mitchell. Generalised Petrov-Galerkin methods for the numerical solution of Burger's equation. *Int. J. Numer. Meth. Engn.*, 20:1273–1289, 1984.
41. A. Hindmarsh. LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers. *ACM-SIGNUM Newslett*, 15:10–11, 1980.
42. A. Hindmarsh. Odepack, a systematized collection of ode solvers. In R. S. S. et al., editor, *Scientific Computing*, pages 55–64. North-Holland, 1983.
43. J. Hobbs. *Moving finite elements approach to semiconductor process modelling in 1-D*. PhD thesis, Numerical Analysis MSC dissertation, Department of Mathematics, University of Reading, 1993.

44. A. Hrymak, G. Mcrae, and A. Westerberg. An implementation of a moving finite element method. *J. Comput. Phys.*, 63:168–190, 1986.
45. A. Hrymak and A. Westerberg. Computational consideration for moving finite element methods. *Chemical Engineering Science*, 41(6):1673–1680, 1986.
46. W. Huang and C. Chou. A moving finite element simulation of a pressure swing adsorption process. *Computers chem. Engng*, 21(3):301–315, 1997.
47. P. Jimack. *Finite element methods using high degree piecewise polynomials on continuously deforming grids*. PhD thesis, University of Bristol, 1989.
48. P. Jimack. On steady and large time solution of the semi-discrete moving finite element equations for one dimensional diffusion problems. *IMA J. of Numerical Analysis*, 12:545–564, 1992.
49. P. Jimack. Local minimization of errors and residuals using the moving finite element method. *Report 98.17 School of Computer Studies Univ. of Leeds*, 1998.
50. I. Johnson. *Moving finite elements for Diffusion Problems*. PhD thesis, University of Reading, 1986.
51. I. Johnson, M. Baines, and A. Wathen. Moving finite element methods for evolutionary problems, II: Applications. *J. Comput. Phys*, 79(2):270–297, 1988.
52. D. Juarez-Romero and R. Sargent. Improving the robustness of the moving finite element method. *Comput. chem. Engng*, 12(5):433–441, 1988.
53. K. Kaczmariski, M. Mazzotti, G. Storti, and M. Morbidelli. Modelling fixed-bed adsorption columns through orthogonal collocations on moving finite elements. *Comput. chem. Engng*, 21(6):660–667, 1997.

54. A. Kuprat. *Creation and annihilation of nodes in the moving finite element method*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 1992.
55. A. Mendes. *Adsorção com modulação da pressão. Aplicação à separação do oxigénio do ar*. PhD thesis, Universidade do Porto, 1993.
56. K. Miller. Moving finite elements II. *SIAM J.Numer.Anal*, 18(6):1033–1057, 1981.
57. K. Miller. Alternate modes to control the nodes in the moving finite element method. In I. Babuska, J. Chandra, and J. Flaherty, editors, *Adaptive Computational Methods for PDEs*, pages 165–182. SIAM, 1983.
58. K. Miller. Recent results on finite element methods with moving nodes. In I. Babuska, O. Zienkiewicz, J. Gago, and A. Oliveira, editors, *Accuracy estimates and adaptive refinements in finite element computations*, pages 325–338. Wiley, 1986.
59. K. Miller. A geometrical-mechanical interpretation of gradient-weighted moving finite elements. *SIAM J.Numer.Anal*, 34(1):67–90, 1997.
60. K. Miller and R. Miller. Moving finite elements I. *SIAM J.Numer.Anal*, 18(6):1019–1032, 1981.
61. M. Mosher. A variable node finite element method. *J. Comput. Phys.*, 57:157–187, 1985.
62. A. C. Mueller and G. F. Carey. Continuously deforming finite elements. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 19:2099–2126, 1985.
63. L. R. Petzold. A description of DASSL: A differential-algebraic system solver. In R. S. Stepleman and et al., editors, *IMACS Trans. Scientific Computing*, page 65. North-Holland, 1983.

64. L. R. Petzold. An adaptive grid method for one-dimensional systems of PDEs and its numerical solution. In J. Flaherty, P.J.Paslow, M.S:Shephard, and J. D. Vasilakis, editors, *Adaptive Computational Methods for PDEs*, pages 253–265. SIAM, 1988.
65. K. G. Pipilis. *Higher order moving finite element methods for systems described by partial differential-algebraic equations*. PhD thesis, Imperial College of Science Techonology and Medicine, 1991.
66. H. K. Rhee. Equilibrium theory of multicomponent chromatography. In A. Rodrigues and D.Tondeur, editors, *Percolation processes: theory and application*. Sijthoff Noordhoff, 1980.
67. A. Rodrigues, J. M. Loureiro, and M. LeVan. Simulated pressurization of adsorption beds. *Gas Separation and Purification*, 5:115–123, 1991.
68. C. Sereno. *Método dos elementos finitos móveis: Aplicações em engenharia química*. PhD thesis, Universidade do Porto, 1989.
69. C. Sereno and A. Rodrigues. Can steady-state momentum equations be used in modelling pressurization of adsorption beds? *Gas Separation and Purification*, 17(3):167–174, 1993.
70. C. Sereno, A. Rodrigues, and J. Villadsen. The moving finite element method with polynomial approximation of any degree. *Comput. chem. Engng.*, 15(1):25–33, 1991.
71. C. Sereno, A. Rodrigues, and J. Villadsen. Solution of partial differential equations systems by the moving finite element method. *Comput. chem. Engng.*, 16(6):583–592, 1992.
72. L. Shampine. Ode solvers and the method of lines. *Numerical Methods for Partial*

Differential Equations, 10:739–755, 1994.

73. A. H. Stroud. *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. Prentice-Hall, 1971.
74. R. A. Trompert and J. G. Verwer. A static-regridding method for two-dimensional parabolic partial differential equations. *Applied Numerical Mathematics*, 8:65–90, 1991.
75. R. A. Trompert, J. G. Verwer, and J. Blom. Computing brine transport in porous media with adaptive-grid method. *Int. J. Num. Meth. in Fluids*, 16:43–63, 1993.
76. J. Verwer, J. Blom, R. Furzeland, and P. Zegeling. A moving grid method for one-dimensional PDEs. In J. Vasikalis, J. E. Flaherty, and P. Paslow, editors, *Adaptive methods for partial differential equations*, pages 160–175. SIAM, 1989.
77. J. Villadsen and M. Michelsen. *Solution of differential equations models by polynomial approximation*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1978.
78. A. Wathen. Mesh-independent spectra in the moving finite element equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 23:797–814, 1986.
79. A. Wathen. *Moving finite element and oil reservoir modeling*. PhD thesis, University of Reading, 1989.
80. A. Wathen and M. Baines. On the structure of the moving finite element equations. *IMA J. of Numeric. Anal.*, 5:161–182, 1985.
81. P. Zegeling. MFE revisited, Part 1: Adaptive grid-generation using heat equation. *Department of Mathematics, University of Utrecht, Preprint 946*, 1996.
82. P. Zegeling and J. Blom. An evaluation of the gradient-weighted moving-finite-element method in one space dimension. *J. Comput. Phys.*, 103:422–441, 1992.

83. P. Zegeling and J. Blom. A note on the grid movement induced by MFE. *Int. J. Meth. Eng.*, 35:623–636, 1992.
84. P. A. Zegeling. *Moving-grid methods for time dependent partial differential equations*. PhD thesis, University of Amsterdam, 1992.
85. P. A. Zegeling. Moving-finite-element solution of time-dependent partial differential equations in two space dimensions. *Comp. Fluid Dyn.*, 1:135–159, 1993.
86. O. C. Zienkiewicz and K. Morgan. *Finite elements and approximation*. Wiley, 1983.

Errata

Página	Linha	Onde está	Deveria estar
7	17	tratamento adaptado	tratamento adoptado
21	3	singularidades	singularidade
81	Eq 3.89	$f_{m,l}\left(x,t,\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}\right); h_m\left(x,t,\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}\right)$	$f_{m,l}\left(x,t,\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right); h_m\left(x,t,\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)$
104	Eq 4.8 Eq 4.9	$-D_a x v \exp\left(-\gamma\left(\frac{1}{v}-1\right)\right)$	$-D_a u v \exp\left(-\gamma\left(\frac{1}{v}-1\right)\right)$
133	Fig 4.25	$x=L$	$x=1$
134	16,17	concentração molar	massa molecular
181	9	velocidade mássica	velocidade
185	13,14	concentração molar	massa molecular
204	Eq 5.40	$l s = 1, \dots, I$	$s = 1, \dots, I$
208 209	Eq 5.54 Eq 5.58	$\sum_{k=1}^{n_i}$	$\sum_{k=1}^{n_p}$
222	7	$R = [-\delta, \delta] \times [0, a]$	$R,$
229 230 231 232	Eq 5.104 Eq 5.105 Eq 5.106 Eq 5.108	$\sum_{k=1}^{n_i}$	$\sum_{k=1}^{n_p}$
263	Eq 6.4	$u(1, y, t) = 1; u(x, 1, t) = 0$	$u(1, y, t) = 1; u(x, 1, t) = 1$
299 resumos	8 9/8/8	$\mathbf{F}(x, t, \mathbf{u})$	$\mathbf{F}\left(x, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)$
301 resumos	4 23/21/19	$\mathbf{F}_1(x, y, t, \mathbf{u})$ $\mathbf{F}_2(x, y, t, \mathbf{u})$	$\mathbf{F}_1\left(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}\right);$ $\mathbf{F}_2\left(x, y, t, \mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}\right)$



FACULDADE DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE DO PORTO

BIBLIOTECA



0000051705