



# Métodos Numéricos para Equações Diferenciais

Helio Pedro Amaral Souto

Nova Friburgo, 5 de Novembro de 2019

Graduação em Engenharia

# 1 Propagação de uma Frente de Temperatura

Um dos ramos da engenharia trata dos problemas de transferência de calor que ocorrem em várias aplicações práticas. Como alguns exemplos, onde a transferência de calor é importante, temos os trocadores de calor; os dissipadores de calor em componentes eletrônicos; a secagem de madeira, grãos e cimento; os sistemas de refrigeração de veículos; etc.

Um caso bem simples, incluindo a advecção e a condução de calor, que podemos considerar é o da propagação de uma frente de temperatura. Nesse problema, no instante inicial  $t = 0$  uma frente descontínua de temperatura encontra-se localizada em  $x = 0$ . Na Figura 1, vemos esquematicamente a representação da condição inicial para a propagação da frente de temperatura.

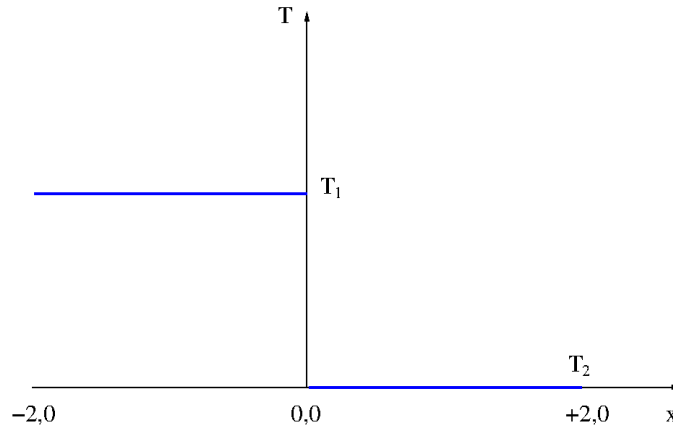


Figura 1: Perfil inicial da frente de temperatura.

Do balanço de energia, podemos mostrar que a transferência de calor é governada pela equação de advecção-condução de calor unidimensional [1]

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad u > 0 \quad (1)$$

onde  $T$  é a temperatura,  $u$  a velocidade de advecção e  $\alpha$  a difusividade térmica, ou seja,  $\alpha = k/(\rho c_p)$ , sendo  $k$  a condutividade térmica,  $\rho$  a massa específica e  $c_p$  a capacidade térmica a pressão constante.

A fim de que possamos resolver esta equação diferencial parcial, devemos fornecer as condições de contorno e inicial em termos da variável dependente (a temperatura). Nesse caso específico, vamos considerar que a condição inicial é dada por

$$T(x, 0) = \begin{cases} 1, 0 & \text{se } x < 0 \\ 0, 0 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (2)$$

enquanto que as condições de contorno impostas são

$$T(x, t) = \begin{cases} T_1 & \text{se } x = -2 \\ T_2 & \text{se } x = +2 \end{cases} \quad (3)$$

sendo que vemos que  $T_1$  é maior do que  $T_2$  para o caso em questão.

## 2 Solução Analítica

Para essa geometria simples e considerando o sistema de coordenadas cartesianas, sabemos que é possível obter uma solução analítica, para uma velocidade de advecção constante, a partir do Método de Separação de Variáveis [2], que pode ser aplicado à resolução de equações diferenciais parciais lineares e homogêneas, com condições de contorno homogêneas [2]. Portanto, a seguinte solução analítica é obtida [1]

$$T(x, t) = 0,5 - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2k-1} \exp \left[ \frac{-\alpha(2k-1)^2 \pi^2 t}{L^2} \right] \sin \left[ (2k-1) \frac{\pi(x-ut)}{L} \right] \quad (4)$$

onde as variáveis  $x$ ,  $t$ ,  $\alpha$ ,  $L$  e  $u$  já foram definidas anteriormente.

## 3 Solução Numérica

Embora a solução analítica seja conhecida, vamos obter a solução numérica no intuito de mostrarmos a acurácia da solução numérica e podermos testar os critérios de estabilidade, determinados empregando o método de von Neumann para as formulações explícita e implícita.

### 3.1 Esquema Geral a Três Níveis de Tempo

Aplicando o esquema geral a três níveis de tempo, para  $\gamma = 0$ , ao problema de advecção-condução de calor unidimensional, sabendo que as derivadas espaciais são aproximadas por diferenças centradas, ou *upwind* de primeira ordem em se tratando do termo advectivo, e a três pontos centrada para o termo difusivo, obtemos a sua forma final discretizada [1]

$$-\beta[0,5C(1+\sigma)+s]\phi_{j-1}^{n+1} + [1+2\beta(0,5C\sigma+s)]\phi_j^{n+1} - \beta[0,5C(\sigma-1)+s]\phi_{j+1}^{n+1}$$

$$= (1-\beta)[0, 5C(1+\sigma) + s]\phi_{j-1}^n + [1 - 2(1-\beta)(0, 5C\sigma + s)]\phi_j^n + (1-\beta)[0, 5C(\sigma-1) + s]\phi_{j+1}^n \quad (5)$$

onde  $C = u\Delta t/\Delta x$  e  $s = \alpha\Delta t/\Delta x^2$ . Para  $\beta = 0$  obtemos a formulação explícita, enquanto que para  $\beta = 1/2$  recuperamos o esquema de Crank-Nicolson e, para  $\beta = 1$ , temos a formulação totalmente implícita. Tomando  $\sigma = 0$  obtemos o esquema do tipo diferença centrada para o termo advectivo e o esquema *upwind*, de primeira ordem, é obtido fazendo  $\sigma = 1$ .

Da análise de estabilidade de von Neumann, podemos mostrar quais são as condições necessárias para que esses diferentes métodos explícitos e implícitos convirjam. Os critérios resumidos são apresentados na Tabela 1 [1].

Tabela 1: Condições de estabilidade para os diferentes métodos numéricos.

Método	$\beta$	$\sigma$	Condição
FTCS	0	0	$0 \leq C^2 \leq 2s \leq 1$
Upwind (Explícito)	0	1	$C + 2s \leq 1$
Crank-Nicolson	0,5	0 ou 1	nenhuma
Totalmente Implícito	1	0 ou 1	nenhuma

### 3.2 O Algoritmo de Thomas

Como  $\beta$  pode ser diferente de zero, na forma geral da equação discretizada, devemos empregar um método numérico de resolução de sistemas de equações algébricas. Dentre os métodos disponíveis, vamos escolher o algoritmo de Thomas, ou TDMA, para obtermos a solução numérica do sistema de equações:

$$-c_j\phi_{j-1}^{n+1} + a_j\phi_j^{n+1} - b_j\phi_{j+1}^{n+1} = d_j^n$$

A aplicação desse algoritmo pode ser resumida na seguinte sequência de operações:

1. Determinação dos valores de  $P_1$  e  $Q_1$ :  $P_1 = 0$  e  $Q_1 = T_1$ ;
2. Cálculo dos valores de  $P_j$  e  $Q_j$  para  $j = 2$  até  $j = J - 1$ :

$$P_j = \frac{b_j}{a_j - c_j P_{j-1}}$$

e

$$Q_j = \frac{d_j + c_j Q_{j-1}}{a_j - c_j P_{j-1}};$$

3. Determinação dos valores  $P_J$  e  $Q_J$ :  $P_J = 0$  e  $Q_J = T_2$ ;
4. Calcular a solução numérica do sistema algébrico,  $\phi_j^{n+1}$ , para  $j$  variando de  $J - 1$  até 1:

$$\phi_j^{n+1} = P_j \phi_{j+1}^{n+1} + Q_j.$$

No caso do método numérico utilizado, os valores dos coeficientes  $a_j$ ,  $b_j$ ,  $c_j$  e  $d_j$  podem ser facilmente identificados a partir da forma geral discretizada, Equação (5),

$$a_j = 1 + 2\beta(0, 5C\sigma + s) \quad (6)$$

$$b_j = \beta[0, 5C(\sigma - 1) + s] \quad (7)$$

$$c_j = \beta[0, 5C(1 + \sigma) + s] \quad (8)$$

$$\begin{aligned} d_j = & (1 - \beta)[0, 5C(1 + \sigma) + s]\phi_{j-1}^n + [1 - 2(1 - \beta)(0, 5C\sigma + s)]\phi_j^n \\ & + (1 - \beta)[0, 5C(\sigma - 1) + s]\phi_{j+1}^n \end{aligned} \quad (9)$$

### 3.3 Parâmetros Físicos

Na resolução numérica do problema de advecção-condução vamos empregar o conjunto de parâmetros apresentados na Tabela 2.

Além dos valores da difusividade térmica, comprimento do domínio físico e temperaturas, nas regiões à esquerda e à direita da origem, as simulações numéricas devem ser realizadas considerando os diferentes quatro casos propostos a seguir.

#### Primeiro caso

$$\beta = 0 \rightarrow \begin{cases} C = 0 \\ s = 1/6 \text{ e } 1 \end{cases} \quad (10)$$

Tabela 2: Parâmetros físicos a serem empregados nas simulações.

Variável	Valor
$\alpha$	$1,0 \times 10^{-1}$
$L$	4,0
$T_1$	1,0
$T_2$	0,0
$t_{max}$	1,0

#### Segundo caso

$$\beta = 0 \rightarrow \begin{cases} u = 0,5 \text{ e } 4,0 \\ \Delta t = 0,05 \\ \Delta x = 0,2 \\ \sigma = 0 \text{ e } 1 \end{cases} \quad (11)$$

#### Terceiro caso

$$\beta = 1 \rightarrow \begin{cases} u = 0,5 \\ \Delta t = 0,05 \\ \Delta x = 0,2 \\ \sigma = 0 \text{ e } 1 \end{cases} \quad (12)$$

#### Quarto caso

$$\beta = 1/2 \rightarrow \begin{cases} u = 0,5 \\ \Delta t = 0,05 \\ \Delta x = 0,2 \\ \sigma = 0 \text{ e } 1 \end{cases} \quad (13)$$

Para os últimos três casos, comparar a acurácia dos resultados obtidos com  $\sigma=0$  e  $\sigma=1$ . Caso seja possível, apresente um gráfico comparativo entre a solução exata e as soluções numéricas. Como regra geral, comente todos os resultados obtidos!

A título de ilustração, a Figura 2 mostra os resultados comparativos para os esquemas explícito ( $\beta = 0$ ) e Crank-Nicolson ( $\beta = 1/2$ ), empregando diferenças centradas (DC),

$\sigma = 0$ , e *upwind* (UPW),  $\sigma = 1$ , na discretização do termo advectivo. Os valores da temperatura foram calculados considerando que  $C = 0,125$ ,  $s = 0,125$  e para um tempo final de simulação  $t = 1,0$ .

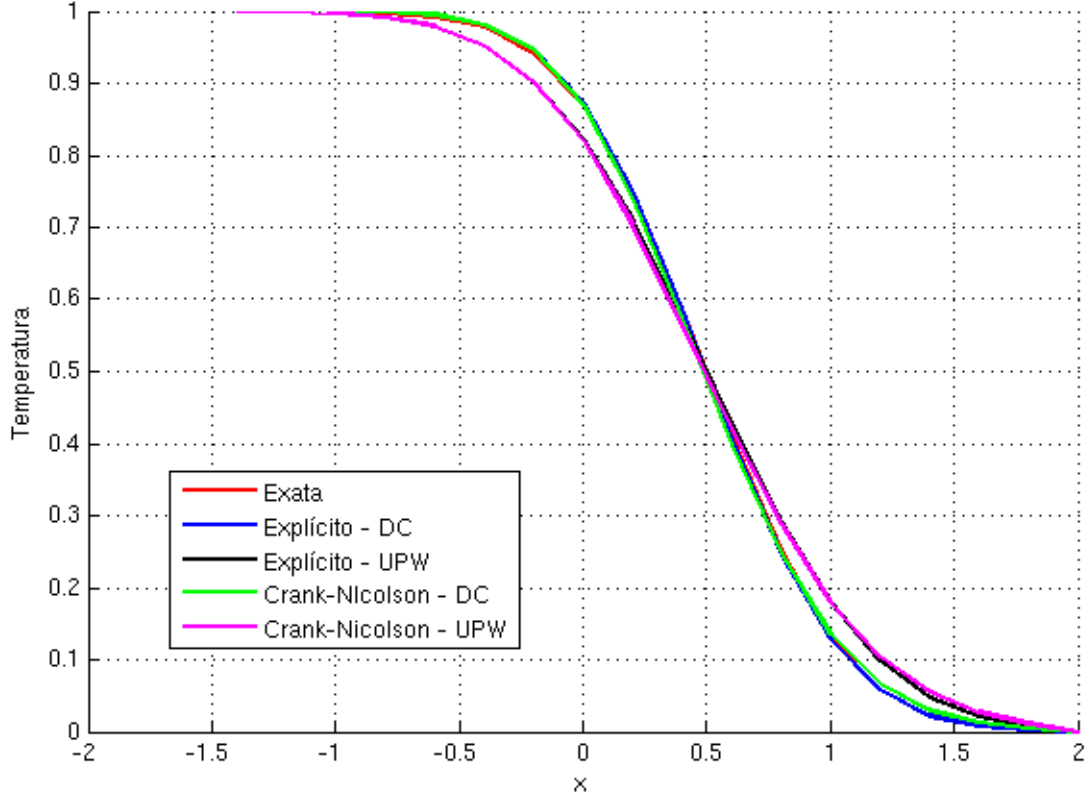


Figura 2: Comparação entre os perfis de temperatura para  $C = 0,125$ ,  $s = 0,125$  e  $t = 1,0$ .

Uma vez terminada a resolução numérica, quando o tempo máximo de simulação  $t_{max}$  for atingido, devemos calcular o erro médio quadrático (EMQ) entre a solução analítica  $T(x_j, t^n)$  e a solução numérica  $T_j^n$ . O erro médio quadrático deve ser calculado a partir da expressão

$$EMQ = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{J_{max}} [T_j^n - T(x_j, t^n)]^2}{J_{max}}} \quad (14)$$

A saída impressa dos resultados deve seguir, **o mais próximo possível**, a formatação da listagem fornecida após esse parágrafo. Na listagem dos resultados  $t$  é o tempo,  $TN$  é o valor numérico da temperatura, nos diferentes nós da malha,  $TE$  o valor teórico da temperatura, determinado a partir da Equação (4), para o último valor do tempo calculado e para as posições correspondentes aos nós da malha, e  $EMQ$  representa o valor do erro médio quadrático.

EQUACAO DE ADVECCAO-DIFUSAO: CRANK-NICOLSON  
TERMO ADVECTIVO: DIFERENCAS CENTRADAS

JMAX= 11 MAXEX= 100 NMAX= 1  
TMAX= 1.00 T1= 1.00 T2= 0.00  
BETA= 0.50000E+00 SIGMA= 0.00000E+00  
DELT= 0.40000E-01 DELTX= 0.40000E+00  
S= 0.25000E-01 ALPH= 0.10000E+00  
U= 0.25000E+00 C= 0.25000E-01 RCEL= 0.10000E+01

t= 0.040	TN=	1.000	1.000	1.000	1.000	0.994	0.512	0.019	0.000	0.000	0.000	0.000
t= 0.080	TN=	1.000	1.000	1.000	1.000	0.988	0.524	0.037	0.001	0.000	0.000	0.000
t= 0.120	TN=	1.000	1.000	1.000	1.000	0.983	0.535	0.054	0.003	0.000	0.000	0.000
t= 0.160	TN=	1.000	1.000	1.000	0.999	0.978	0.545	0.071	0.005	0.000	0.000	0.000
t= 0.200	TN=	1.000	1.000	1.000	0.999	0.974	0.556	0.088	0.008	0.000	0.000	0.000
t= 0.240	TN=	1.000	1.000	1.000	0.999	0.970	0.565	0.104	0.011	0.001	0.000	0.000
t= 0.280	TN=	1.000	1.000	1.000	0.999	0.966	0.574	0.120	0.014	0.001	0.000	0.000
t= 0.320	TN=	1.000	1.000	1.000	0.998	0.962	0.583	0.136	0.018	0.002	0.000	0.000
t= 0.360	TN=	1.000	1.000	1.000	0.998	0.959	0.592	0.151	0.023	0.002	0.000	0.000
t= 0.400	TN=	1.000	1.000	1.000	0.997	0.956	0.600	0.166	0.028	0.003	0.000	0.000
t= 0.440	TN=	1.000	1.000	1.000	0.997	0.953	0.608	0.180	0.033	0.004	0.000	0.000
t= 0.480	TN=	1.000	1.000	1.000	0.997	0.951	0.615	0.194	0.038	0.005	0.001	0.000
t= 0.520	TN=	1.000	1.000	1.000	0.996	0.948	0.622	0.208	0.043	0.007	0.001	0.000
t= 0.560	TN=	1.000	1.000	1.000	0.996	0.946	0.629	0.221	0.049	0.008	0.001	0.000
t= 0.600	TN=	1.000	1.000	1.000	0.995	0.944	0.636	0.234	0.055	0.009	0.001	0.000
t= 0.640	TN=	1.000	1.000	1.000	0.995	0.942	0.642	0.247	0.062	0.011	0.002	0.000
t= 0.680	TN=	1.000	1.000	1.000	0.994	0.941	0.648	0.259	0.068	0.013	0.002	0.000
t= 0.720	TN=	1.000	1.000	1.000	0.994	0.939	0.654	0.271	0.074	0.015	0.002	0.000
t= 0.760	TN=	1.000	1.000	0.999	0.993	0.938	0.660	0.283	0.081	0.017	0.003	0.000
t= 0.800	TN=	1.000	1.000	0.999	0.993	0.936	0.666	0.294	0.088	0.019	0.003	0.000
t= 0.840	TN=	1.000	1.000	0.999	0.992	0.935	0.671	0.306	0.095	0.022	0.004	0.000
t= 0.880	TN=	1.000	1.000	0.999	0.992	0.934	0.676	0.317	0.102	0.024	0.005	0.000
t= 0.920	TN=	1.000	1.000	0.999	0.991	0.933	0.682	0.327	0.109	0.027	0.005	0.000
t= 0.960	TN=	1.000	1.000	0.999	0.991	0.932	0.686	0.338	0.116	0.030	0.006	0.000
t= 1.000	TN=	1.000	1.000	0.999	0.991	0.931	0.691	0.348	0.124	0.033	0.007	0.000

t= 1.000 TE= 1.000 1.000 0.999 0.991 0.927 0.712 0.369 0.109 0.017 0.001 0.000

EMQ= 0.1119D-01



O código fonte e a listagem dos resultados devem ser fornecidos impressos!  
Comente os resultados obtidos com as formulações explícita e implícita.

## Referências

- [1] C. A. J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, Volume 1. Springer-Verlag, 1991.
- [2] M. Necati Özisik. *Heat Conduction*. John Wiley & Sons, 1980.