

ESCOLA PILOTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

MÉTODOS NUMÉRICOS EM PROBLEMAS DE ENGENHARIA QUÍMICA

**PROGRAMA DE ENGENHARIA QUÍMICA / COPPE
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO**

Março / 1997

Professores:

José Carlos Pinto - pinto@peq.coppe.ufrj.br

Paulo L. C. Lage - paulo@peq.coppe.ufrj.br

Cidade Universitária - CP: 68502

Rio de Janeiro - 21945-970 RJ

FAX:(021) 5907135

Capítulo 1

Modelagem Matemática de Sistemas de Engenharia Química

1.1- Introdução

Um modelo é qualquer objeto, concreto ou abstrato, que é utilizado para explicar algum tipo de fenômeno. Por exemplo, na Psicologia é comum interpretar o comportamento de pessoas adultas tomando como base o relacionamento destas pessoas com seus pais. São os famosos “*Complexo de Édipo*” e “*Complexo de Eletra*”, que servem como referência para o entendimento comportamental do ser humano. Um outro exemplo é bastante conhecido dos cariocas. Devido às características particulares da costa do Leblon, grandes quantidades de areia são transportadas pelas marés em certas épocas do ano, o que traz sérios transtornos aos banhistas e ao ecossistema da Lagoa Rodrigo de Freitas. No Programa de Engenharia Oceânica da COPPE montou-se uma “*mini praia do Leblon*”, para tornar possível o entendimento e o controle dos fenômenos que provocam o transporte destas grandes quantidades de areia.

O modelo psicológico usado como exemplo é certamente abstrato, no sentido de que ele é resultado de um encadeamento de idéias montadas por certos pesquisadores num corpo teórico refinado. O modelo oceanográfico usado como exemplo, por sua vez, é concreto e pode ser visto e tocado pelos pesquisadores. (Tais modelos concretos são usualmente chamados de “*plantas pilotos*”). O mais comum (e barato !) na Engenharia, contudo, é que um certo conjunto de dados e idéias abstratas seja utilizado para explicar um fenômeno de interesse e relacionar as várias variáveis do problema. Quando um modelo de Engenharia atinge o seu ápice, ele torna possível estabelecer relações quantitativas precisas entre as variáveis do problema: ele vira um **MODELO MATEMÁTICO**.

É bastante importante dizer que não é possível haver Engenharia sem modelos matemáticos. São eles que tornam possível o projeto e otimização de novas unidades. Sem os modelos, estaríamos eternamente condenados a repetir apenas aquelas coisas que deram certo ou a desperdiçarmos tempo e dinheiro fazendo milhares de tentativas para descobrir qual delas é a melhor. Sem um modelo, não seríamos capazes de responder como um sistema responde a uma perturbação ou saber como a modificação de uma variável pode alterar as demais. Por exemplo, quanto tempo é gasto numa viagem do Rio a Salvador ? Sabendo-se que a distância é $\Delta S = 1700$ Km (dado) e que a velocidade média do automóvel é $v_m = 80$ Km/h (dado), é possível utilizar o modelo abaixo:

$$t = \Delta S / v_m \quad (1.1)$$

e deduzir que serão necessárias 21.25 h de viagem.

Antes de darmos continuidade a esta discussão, é necessário afirmar que o modelo não é a realidade, mas apenas a representa de forma adequada. Os psicólogos brigam até hoje nos Congressos de Psicologia sobre a forma mais adequada de interpretar o comportamento humano. É possível que todos os modelos apresentem formas mais ou menos adequadas de compreender a realidade comportamental, certamente muito mais complexa que todos eles. Da mesma forma, a “mini praia do Leblon” não é a praia do Leblon e é possível que detalhes importantes tenham sido esquecidos durante a construção da planta piloto. É possível também que um mesmo fenômeno tenha importância distinta em diferentes escalas.

Desta maneira, tanto melhor será o modelo quanto mais adequadamente ele descrever a realidade, embora não se deva ter a esperança (nem a presunção !) de que ele descreva todos os aspectos da realidade. Por exemplo, no nosso problema da viagem Rio-Salvador, alguém pode argumentar que o ser humano precisa dar uma paradinha para comer alguma coisa e fazer outras necessidades a cada 3 horas. Se esta paradinha for de 30 minutos, a cada 3 horas de viagem serão necessários mais 30 minutos de parada; ou seja, um acréscimo de mais 1/6 do tempo total de viagem. Neste caso, o nosso modelo toma a forma:

$$t = (7 / 6) \Delta S / v_m \quad (1.2)$$

prevendo um tempo total de viagem de 24.79 h. Este “pequeno erro de cálculo” (3.54 h) levaria uma pessoa que espera por sua chegada na Rodoviária à loucura!!! Alguém poderia ainda argumentar que é necessário dormir, que não é possível manter a média de 80 Km/h na BR-101 por causa dos buracos, etc., etc., etc. Ou seja, como não é possível levar em conta todos os aspectos da realidade, temos que nos contentar com algumas hipóteses e simplificações e, portanto, com algumas incertezas. É a vida ...

1.2- Classificação e Hipóteses Básicas

Modelos matemáticos podem ser classificados genericamente como teóricos ou empíricos. Modelos teóricos são aqueles desenvolvidos a partir de pressupostos teóricos que tentam descrever de forma mais fundamentada os vários aspectos envolvidos no problema. Modelos empíricos são aqueles que não estão baseados em quaisquer pressupostos teóricos, mas apenas são utilizados para descrever um certo conjunto de pontos experimentais conhecidos. A princípio, os modelos empíricos são tão bons quanto os modelos teóricos, embora os modelos teóricos possam ser utilizados de forma bem mais racional do que modelos empíricos. Por exemplo, as extrapolações feitas com modelos empíricos não são recomendadas, haja visto que nada garante que a realidade vá continuar se comportando daquela forma numa faixa diferente de condições. No entanto, a continuidade dos pressupostos teóricos (e, portanto, do modelo matemático a que dão origem) em condições diferentes é bem mais aceitável.

Imagine que a operação de preparação de uma certa solução consiste em adicionar uma massa conhecida de reagente a um tanque de seção transversal $A = \pi R^2$ e depois diluí-la com uma certa quantidade de solvente (ver Figura 1.1). A questão fundamental é determinar até que altura,

que é a medida disponível, deve-se encher o tanque para que se atinja uma concentração pré-especificada.

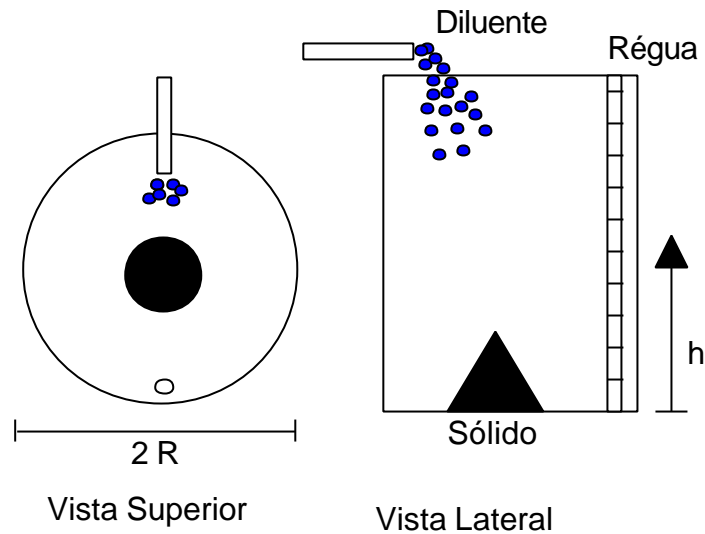


Figura 1.1 - Tanque de Preparação de Solução

Uma análise teórica do problema permite descrever:

$$C = \frac{M}{V} = \frac{M}{A h} = \frac{K}{h} \quad (1.3)$$

onde C é a concentração, V é o volume da solução (diluente), h é a altura da solução e K é um coeficiente de proporcionalidade (M/A). Medindo-se a massa inicial de sólido adicionada e o diâmetro do tanque, obtém-se o valor de K . Segundo a Equação (1.3), a altura final pode então ser definida como

$$h_f = \frac{K}{C_f} \quad (1.4)$$

onde C_f é a concentração final desejada.

Um modelo similar poderia ser construído empiricamente, a partir de dados de planta. Por exemplo, uma operação poderia ser executada e amostras poderiam ser tomadas em tempos regulares, para posterior determinação das concentrações no laboratório. Suponha que os dados da Tabela 1 tenham sido obtidos. Neste caso, é fácil compreender que K é igual a 2 Kg/m².

Tabela 1.1 - Dados Amostrados Durante Diluição

Amostra	h (m)	C (Kg/m ³)
1	2	1

2	4	0.5
3	6	0.33
4	8	0.25

Suponha que um novo tanque, de diâmetro duas vezes maior, é comprado. Segundo o modelo teórico, o novo valor de K será quatro vezes menor para o novo tanque. Desta forma, a altura final da operação no novo tanque será quatro vezes menor que no primeiro. Nenhuma destas conclusões pode ser tirada com o modelo empírico. Ou o ajuste tem que ser feito de novo ou será feita uma extrapolação completamente equivocada para o novo equipamento, com K igual a 2 Kg/m².

Para que modelos teóricos mais consistentes possam ser desenvolvidos, é necessário discutir, portanto, as hipóteses fundamentais que balizam a análise de problemas da Engenharia Química. As hipóteses fundamentais são os princípios de conservação, que dizem que:

- 1- A massa se conserva (Princípio de Lavoisier);
- 2- A energia se conserva (1ª Lei da Termodinâmica);
- 3- A quantidade de movimento se conserva (3ª Lei de Newton).

Observe uma vez mais o exercício de modelagem que deve ser feito, pois embora estas hipóteses sejam muito boas no mundo da Engenharia Química, elas já foram questionadas há muito tempo no mundo das altas energias e das partículas subatômicas.

Pragmaticamente, os princípios de conservação podem ser expressos numa forma matemática da seguinte maneira:

$$\text{Grandeza Acumulada} = \text{Grandeza Adicionada} - \text{Grandeza Removida} \quad (1.5)$$

onde a Grandeza é a massa, a energia ou a quantidade de movimento numa determinada região do espaço. Quando apenas uma pequena porção i da grandeza analisada está sendo considerada (apenas a massa de um dos reagentes ou apenas a energia térmica, por exemplo), é conveniente escrever a Equação (1.5) na forma:

$$\text{Grandeza Acumulada } i = \text{Grandeza Adicionada } i - \text{Grandeza Removida } i + \text{Grandeza Produzida } i \quad (1.6)$$

onde o termo “Grandeza Produzida i ” deve ser compreendido como o resultante da transformação de outras porções j na porção i analisada. Além disto, para que a Equação (1.5) seja satisfeita é necessário que

$$\sum_i \text{Grandeza Produzida } i = 0 \quad (1.7)$$

o que significa dizer que, para que os princípios de conservação sejam satisfeitos, se certas porções estão sendo geradas, outras têm que estar sendo consumidas.

A aplicação dos princípios de conservação permite construir modelos para um grande número de sistemas de Engenharia Química. Como veremos, no entanto, informações adicionais que não podem ser obtidas das equações de balanço são frequentemente necessárias. Por exemplo, saber como a densidade de um fluido depende da temperatura ou como a velocidade da reação depende das concentrações dos reagentes. Nestes casos, equações empíricas podem ser utilizadas para descrever a fração desconhecida do modelo ou uma modelagem mais detalhada do fenômeno pode ser utilizada. Por exemplo, pode-se dizer simplesmente que a velocidade de reação varia com uma potência da concentração e tentar determinar o expoente a partir de experimentos, introduzindo-se assim um certo grau de empirismo ao nosso modelo teórico, ou tentar descrever o mecanismo de reação de forma detalhada para tentar desvendar a forma com que a velocidade de reação depende da concentração do reagente.

Uma classificação útil de ser introduzida é a que define os modelos como dinâmicos ou estacionários. Modelos dinâmicos são aqueles que consideram as variações temporais das variáveis envolvidas. Modelos estacionários são aqueles que admitem que as variáveis não se modificam com o passar do tempo. Estes últimos costumam ser mais simples e adequados para projetos onde as unidades devam operar continuamente. Os primeiros costumam ser mais complexos, mas podem ser utilizados numa gama bem mais ampla de problemas de interesse e são fundamentais para descrever operações descontínuas ou de batelada.

Na realidade, mesmo numa planta contínua, tudo muda com o tempo. Se isto não fosse verdade, não haveria necessidade de se controlar a operação da planta. Os equipamentos envelhecem, a qualidade da matéria-prima muda, o clima muda e altera o funcionamento de plantas expostas ao ambiente, etc. Por isto, a compreensão da dinâmica do processo é fundamental, mesmo durante a fase de projeto, para que o esquema de controle possa ser desenvolvido e implementado.

Uma outra classificação útil é a que define modelos a parâmetros concentrados e distribuídos. Modelos a parâmetros concentrados são aqueles nos quais admite-se que as propriedades são uniformes no espaço; ou seja, que as propriedades (concentrações, temperaturas, etc.) não variam com as coordenadas de posição. O exemplo clássico é o tanque bem misturado, onde se admite que em qualquer lugar do tanque as propriedades são as mesmas. Modelos a parâmetros distribuídos, por sua vez, são aqueles nos quais admite-se que as propriedades variam com as coordenadas espaciais. O exemplo clássico é o reator tubular, no qual as propriedades variam continuamente, à medida que nos movimentamos da entrada para a saída do reator. Modelos a parâmetros distribuídos são usualmente mais complexos que aqueles a parâmetros concentrados, por introduzirem graus de liberdade adicionais no sistema. No caso do reator tubular, por exemplo, a temperatura do reator passa a ser uma função da distância percorrida a partir da entrada; ou seja, deixa de ser um número e passa a ser uma função da posição axial.

Veremos a seguir como construir, a partir dos princípios básicos de conservação, modelos matemáticos para sistemas de interesse da Engenharia Química, tanto estáticos quanto dinâmicos, tanto a parâmetros concentrados quanto a parâmetros distribuídos. Apertem os cintos e BOA VIAGEM !!!

1.3- Um Modelo a Parâmetros Concentrados - O Tanque Agitado Exotérmico com Reação de 1ª Ordem

Dentre todos os sistemas de Engenharia Química, o sistema de reação em tanque agitado talvez seja o mais estudado e o mais conhecido. Isto é particularmente verdadeiro para os casos onde ocorrem reações de 1ª ordem exotérmicas. O sistema está mostrado na Figura 1.2 abaixo.

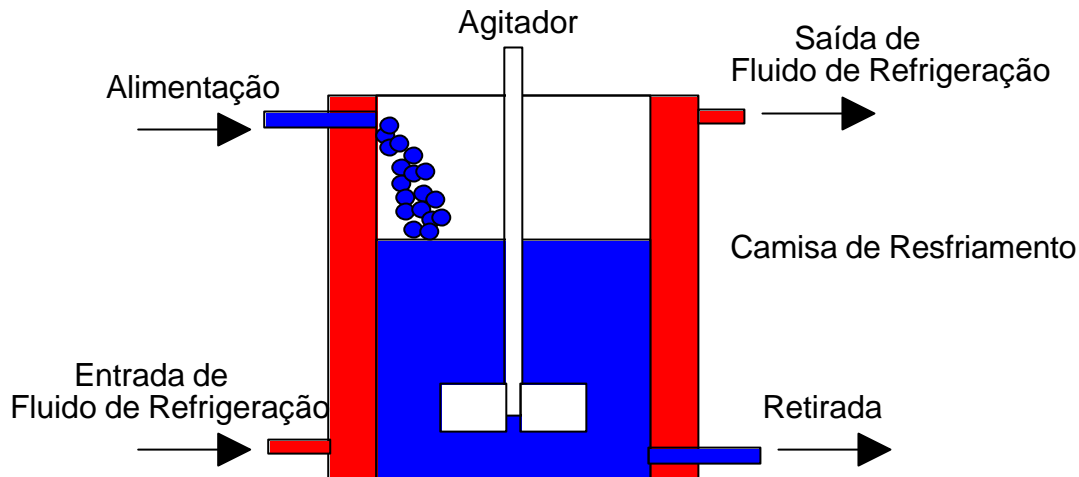


Figura 1.2- O Reator Tipo Tanque Agitado

De acordo com a discussão apresentada anteriormente, para que o modelo seja desenvolvido é necessário escrever os balanços de massa e energia para o sistema. O balanço de forças será aqui negligenciado.

Para que os balanços de massa sejam escritos, é necessário definir as espécies químicas presentes no meio reacional. Admitiremos que três são as espécies envolvidas: o solvente (representado pela letra S), o reagente (representado pela letra A) e o produto (representado pela letra B). Admitiremos ainda que a estequiometria da reação é a seguinte:



Além disto, admitiremos que o mecanismo da reação é exatamente aquele descrito pela Equação (1.8), de forma que a velocidade da reação, em moles / m³ s, pode ser descrita como:

$$R_B = - R_A = K C_A \quad (1.9)$$

onde K é a constante cinética da reação e C_A é a concentração molar do reagente. (Repare que a modelagem já começou quando admitimos conhecer a estequiometria e o mecanismo da reação. Estas informações são usualmente fornecidas pelos Químicos. Repare que a modelagem continua ao admitirmos que a expressão da taxa segue as formas clássicas da Teoria Cinética de Reações, o que não pode ser considerado como verdade absoluta.)

Para escrever os balanços de massa, na forma da Equação (1.5) para o balanço global e da Equação (1.6) para as frações escolhidas (S, A, B), faz-se:

Balanço de Massa Global

$$\text{Grandeza Acumulada} = \text{Grandeza Adicionada} - \text{Grandeza Removida} \quad (1.5)$$

$$M|_{t+\Delta t} - M|_t = q_e \rho_e \Delta t - q_s \rho_s \Delta t \quad (1.10)$$

onde M é a massa no interior do reator num determinado instante de tempo, q_e é a vazão volumétrica da alimentação, q_s é a vazão volumétrica da retirada, ρ_e é a densidade da corrente de entrada, ρ_s é a densidade da corrente de saída, t é o tempo e Δt é o intervalo de tempo considerado. Dividindo-se a Equação (1.10) por Δt , chega-se a:

$$\frac{M|_{t+\Delta t} - M|_t}{\Delta t} = q_e \rho_e - q_s \rho_s \quad (1.11)$$

No limite em que Δt tende a zero, o termo à esquerda da Equação (1.11) é a própria definição de derivada, de forma que:

$$\frac{dM}{dt} = q_e \rho_e - q_s \rho_s \quad (1.12)$$

Admitindo-se que o reator é bem misturado, a densidade no interior do reator é a mesma em todos os pontos, o que inclui o bocal de retirada. Desta forma,

$$\rho_s = \rho \quad (1.13)$$

Admitindo-se ainda que o fluido é incompressível, a densidade é constante. Desta forma,

$$\rho_e = \rho_s = \rho = \text{constante} \quad (1.14)$$

Lembrando ainda que

$$M = \rho V \quad (1.15)$$

é possível escrever a Equação (1.12) na forma:

$$\rho \frac{dV}{dt} = q_e \rho - q_s \rho \quad (1.16)$$

$$\frac{dV}{dt} = q_e - q_s \quad (1.17)$$

Repare que a Equação (1.17) só é válida para fluidos incompressíveis, em tanques bem agitados !!!

Se o sistema de controle de nível do reator é eficiente, o volume do reator é mantido constante, de forma que

$$\frac{dV}{dt} = 0 \Rightarrow q_e = q_s = q \quad (1.18)$$

ou seja, as vazões de entrada e saída num reator agitado com controle de nível e fluido incompressível são iguais. Lembramos, no entanto, que a Equação (1.18) é válida única e exclusivamente neste contexto.

Balanco de Massa do Componente A

Para escrevermos o balanço da porção da massa chamada componente A, faz-se uso da Equação (1.6), na forma:

$$\text{Grandeza Acumulada } i = \text{Grandeza Adicionada } i - \text{Grandeza Removida } i + \text{Grandeza Produzida } i \quad (1.6)$$

$$M_A|_{t+\Delta t} - M_A|_t = q_e C_{Ae} \Delta t - q_s C_{As} \Delta t + R_A V \Delta t \quad (1.19)$$

Dividindo-se tudo por Δt e levando-se ao limite em que Δt vai a zero, chega-se a:

$$\frac{dM_A}{dt} = q_e C_{Ae} - q_s C_{As} + R_A V \quad (1.20)$$

Já sabemos, do balanço de massa global, que as vazões são iguais. Sabemos também que o volume é constante, devido à existência de um bom controle de nível. Além disto, como o reator é bem misturado, as concentrações no interior do reator e na corrente de saída são idênticas. O mesmo não pode ser dito da entrada, que pode ser arbitrariamente fixada em qualquer valor pelo operador do processo. Desta forma:

$$M_A = V C_A \quad (1.21)$$

$$V \frac{dC_A}{dt} = q C_{Ae} - q C_A + R_A V \quad (1.22)$$

Utilizando a Equação (1.9), que define a velocidade da reação, chega-se a:

$$V \frac{dC_A}{dt} = q C_{Ae} - q C_A - K C_A V \quad (1.23)$$

que expressa o balanço de massa do componente A, consumido numa reação de 1ª ordem, num tanque contínuo bem agitado e com eficiente controle de nível, no qual escoar um fluido incompressível.

Balanço de Massa do Componente B

Para escrevermos o balanço da porção da massa chamada componente B, faz-se uso da Equação (1.6), na forma:

$$\text{Grandeza Acumulada } i = \text{Grandeza Adicionada } i - \text{Grandeza Removida } i + \text{Grandeza Produzida } i \quad (1.6)$$

$$M_B \Big|_{t+\Delta t} - M_B \Big|_t = q_e C_{Be} \Delta t - q_s C_{Bs} \Delta t + R_B V \Delta t \quad (1.24)$$

Dividindo-se tudo por Δt e levando-se ao limite em que Δt vai a zero, chega-se a:

$$\frac{dM_B}{dt} = q_e C_{Be} - q_s C_{Bs} + R_B V \quad (1.25)$$

Já sabemos, do balanço de massa global, que as vazões são iguais. Sabemos também que o volume é constante, devido à existência de um bom controle de nível. Além disto, como o reator é bem misturado, as concentrações no interior do reator e na corrente de saída são idênticas. O mesmo não pode ser dito da entrada, que pode ser arbitrariamente fixada em qualquer valor pelo operador do processo. Particularmente, como B é o produto da reação, é razoável imaginar que a concentração de B na alimentação é igual a zero. Desta forma:

$$M_B = V C_B \quad (1.26)$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = - q C_B + R_B V \quad (1.27)$$

Utilizando a Equação (1.9), que define a velocidade da reação, chega-se a:

$$V \frac{dC_B}{dt} = - q C_B + K C_A V \quad (1.28)$$

que expressa o balanço de massa do componente B, produzido a partir do componente A numa reação de 1ª ordem, num tanque contínuo bem agitado e com eficiente controle de nível, no qual escoar um fluido incompressível. Repare que as Equações (1.23) e (1.28), que definem os balanços individuais dos componentes A e B, estão desacopladas; ou seja, é possível resolver primeiro uma e depois a outra. Isto nem sempre é possível em outros sistemas mais complexos de reação.

Balanço de Massa do Componente S

Aqui, dois caminhos são possíveis. O primeiro deles é escrever a equação de balanço como feito anteriormente para os componentes A e B. No entanto, isto não é necessário. Diz-se que o

último balanço é redundante, no sentido de que como as somas dos balanços individuais tem que dar obrigatoriamente o balanço global, este último balanço pode sair mais simplesmente como uma diferença dos demais. Por exemplo, sabe-se que a concentração mássica total deve ser a densidade da mistura. Assim,

$$C_S W_S + C_A W_A + C_B W_B = \rho \quad (1.29)$$

onde W_i é o peso molecular do componente i , ou simplesmente

$$C_S = \frac{\rho - C_A W_A - C_B W_B}{W_S} \quad (1.30)$$

Balanço de Energia Térmica

A quantidade total de energia presente no sistema pode ser decomposta em várias porções: energia química acumulada nas moléculas, energia mecânica devida à movimentação do fluido, energia térmica devida à vibração das moléculas, etc. Pragmaticamente, o maior interesse do Engenheiro Químico é acompanhar as variações de temperatura do sistema, associadas à fração térmica da energia. Para escrevermos o balanço desta porção, faz-se uso da Equação (1.6), na forma:

$$\begin{aligned} \text{Grandeza Acumulada } i = & \text{Grandeza Adicionada } i - \text{Grandeza Removida } i + \\ & \text{Grandeza Produzida } i \end{aligned} \quad (1.6)$$

$$E_T|_{t+\Delta t} - E_T|_t = q_e \rho_e e_{Te} \Delta t - q_s \rho_s e_{Ts} \Delta t + \dot{Q} \Delta t + \dot{W} \Delta t + \dot{R}_T V \Delta t \quad (1.31)$$

onde E_T é o conteúdo de energia térmica no reator num determinado instante t , e_{Te} é o conteúdo energético por unidade de massa da alimentação, e_{Ts} é o conteúdo energético por unidade de massa da corrente de exaustão, \dot{Q} é a taxa de calor fornecida ao sistema pelo ambiente externo (camisa) (J/s), \dot{W} é a taxa de trabalho executado sobre a massa de fluido no interior do reator (J/s) e \dot{R}_T é a taxa de liberação de energia térmica no sistema (J/m³s) por conta de transformações químicas que reduzem o conteúdo de energia química armazenada nas moléculas. No limite em que Δt vai a zero,

$$\frac{dE_T}{dt} = q_e \rho_e e_{Te} - q_s \rho_s e_{Ts} + \dot{Q} + \dot{W} + \dot{R}_T V \quad (1.32)$$

Para que a Equação (1.32) possa ser escrita de forma mais adequada, é necessário descrever cada um dos termos como função das variáveis usualmente utilizadas para caracterizar o estado do sistema: concentrações, temperatura e pressão. Para começar, lancemos mão uma vez mais das hipóteses de fluido incompressível, reator bem misturado e volume constante. Neste caso,

$$E_T = \rho V e_T \quad (1.33)$$

$$q_e \rho_e e_{Te} = q \rho e_{Te} \quad (1.34)$$

$$q_s \rho_s e_{Ts} = q \rho e_T \quad (1.35)$$

Além disto, a Termodinâmica nos diz que o conteúdo energético de um certo material é aproximadamente proporcional à diferença de temperaturas existente entre o estado do material e um certo estado de referência definido de forma mais ou menos arbitrária, cujo coeficiente de proporcionalidade (C_p) é chamado de capacidade calorífica ou calor específico¹ (J/KgK). Desta forma,

$$e_T = C_p (T - T^R) \quad (1.36)$$

Admitindo-se que a capacidade calorífica é aproximadamente constante e independe da composição e da temperatura do meio reacional, é possível escrever a Equação (1.32) na forma

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = q \rho C_p (T_e - T) + \dot{Q} + \dot{W} + \dot{R}_T V \quad (1.37)$$

Segundo a Lei de Resfriamento de Newton, a quantidade de calor trocado entre dois meios é proporcional à diferença de temperatura existente entre os eles e à área de contato. Mesmo quando existem vários meios e paredes intervenientes, o calor trocado entre os meios mais externos ainda pode ser expresso como sendo proporcional à diferença de temperatura e a uma área de contato. Neste caso, o coeficiente de proporcionalidade (U) é chamado de coeficiente global de transferência de calor (W/m²K). Deve-se notar que U não é constante, dependendo de diversos fatores (escoamento do fluido, configuração geométrica, propriedades físicas dos meios intervenientes, etc.), inclusive da própria temperatura (T). Assim,

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = q \rho C_p (T_e - T) + UA (T_c - T) + \dot{W} + \dot{R}_T V \quad (1.38)$$

onde T_c é a temperatura da camisa de resfriamento. Desta forma, se T_c for maior que T , calor é ganho pelo sistema e vice-versa.

O trabalho mecânico executado sobre ou pelo sistema é usualmente pouco importante, quando comparado aos demais termos do balanço. Por isto, ele será aqui desprezado. Isto não deve ser considerado como regra geral, no entanto. Já a velocidade com que a energia química se transforma em energia térmica é obviamente proporcional à velocidade da reação. O coeficiente de proporcionalidade é o calor de reação ($-\Delta H_R$), definido aqui desta forma por convenção, já que a liberação de energia térmica deve-se ao fato do conteúdo energético químico dos produtos ser menor do que o dos reagentes. Desta forma, quando ΔH_R é negativo há liberação de calor (reação exotérmica) e vice-versa. Substituindo estas expressões na Equação (1.38), resulta

¹Na realidade, este é o calor específico utilizado para medir a variação de energia térmica de um meio em processos reversíveis a pressão constante, existindo também um calor específico para processos a volume constante (C_v). Para fluidos incompressíveis, estes dois calores específicos são idênticos.

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = q \rho C_p (T_e - T) + U A (T_c - T) + K C_A (-\Delta H_R) V \quad (1.39)$$

Finalmente, vale lembrar que a constante cinética de velocidade depende da temperatura, podendo ser usada a forma exponencial de Arrhenius

$$K = K_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{R T}\right) \quad (1.40)$$

onde K_0 e ΔE são constantes que caracterizam a reação, respectivamente chamadas de fator pré-exponencial de Arrhenius e energia de ativação. R é a constante universal dos gases.

A Adimensionalização

Como procedimento geral de modelagem, é conveniente redefinir as variáveis do problema de forma a torná-las adimensionais, evitando assim problemas de interpretação advindos do uso de sistemas diferentes de unidades e permitindo agrupar os parâmetros do problema num conjunto menor de agrupamentos paramétricos. Por exemplo, pode-se definir as concentrações dos componentes em função das concentrações da corrente de alimentação na forma

$$x_A = \frac{C_A}{C_{Ae}} \quad (1.41)$$

$$x_B = \frac{C_B}{C_{Ae}} \quad (1.42)$$

$$x_S = \frac{C_S}{C_{Ae}} \quad (1.43)$$

Pode-se definir também um tempo adimensional na forma:

$$\tau = \frac{t q}{V} \quad (1.44)$$

onde a razão V/q tem dimensão de tempo e é usualmente chamada de tempo de residência do reator (Θ).

Pode-se ainda definir uma temperatura adimensional na forma

$$\gamma = \frac{T}{T_e} \quad (1.45)$$

Substituindo-se as expressões (1.41-45) nas equações do modelo, resulta

$$\frac{dx_A}{d\tau} = 1 - x_A - (K_0 \Theta) x_A \exp\left(\frac{(-\Delta E / R T_e)}{\gamma}\right) \quad (1.46)$$

$$\frac{dx_B}{d\tau} = -x_B + (K_0 \Theta) x_A \exp\left(\frac{(-\Delta E / R T_e)}{\gamma}\right) \quad (1.47)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (1.48)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\gamma}{d\tau} = & (1 - \gamma) + \frac{U A}{q \rho C_p} (\gamma_c - \gamma) + \\ & (K_0 \Theta) \frac{C_{Ae} (-\Delta H_R)}{\rho C_p T_e} x_A \exp\left(\frac{(-\Delta E / R T_e)}{\gamma}\right) \end{aligned} \quad (1.49)$$

Redefinindo os grupamentos paramétricos como

$$\Theta_R = K_0 \Theta \quad (1.50)$$

$$-\Delta E_R = \frac{-\Delta E}{R T_e} \quad (1.51)$$

$$\beta = \frac{U A}{q \rho C_p} \quad (1.52)$$

$$\Delta h_R = \frac{C_{Ae} (-\Delta H_R)}{\rho C_p T_e} \quad (1.53)$$

o modelo ganha a forma adimensionalizada final

$$\frac{dx_A}{d\tau} = 1 - x_A - \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.54)$$

$$\frac{dx_B}{d\tau} = -x_B + \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.55)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (1.56)$$

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = (1 - \gamma) + \beta (\gamma_c - \gamma) + \Theta_R \Delta h_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.57)$$

que independe do sistema de unidades utilizado e depende de um conjunto bem menor de grupamentos paramétricos. O comportamento do reator tanque agitado pode ser predito por este modelo, revolvendo as Equações (1.54) a (1.57), desde que a condição inicial do mesmo seja conhecida. Isto caracteriza este modelo como um *problema de valor inicial*.

No estado estacionário, quando não há variações temporais e as derivadas podem ser igualadas a zero, é possível escrever:

$$0 = 1 - x_A - \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.58)$$

$$0 = -x_B + \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.59)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (1.60)$$

$$0 = (1 - \gamma) + \beta (\gamma_c - \gamma) + \Theta_R \Delta h_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.61)$$

Repare que um modelo dinâmico de um sistema a parâmetros concentrados resulta num conjunto de equações diferenciais ordinárias (ou algébrico-diferenciais), que precisa ser resolvido a partir de determinadas condições iniciais para que se conheçam os perfis temporais das variáveis do problema. Já um modelo estacionário de um sistema a parâmetros concentrados resulta num conjunto de equações algébricas, cuja solução fornece uma condição de equilíbrio do sistema. É por isto que no Capítulo 2 deste curso serão vistas algumas técnicas clássicas para solução numérica de equações algébricas. No Capítulo 3 serão vistas algumas técnicas numéricas adequadas para resolver equações diferenciais ordinárias que descrevem o comportamento dinâmico de sistemas a parâmetros concentrados.

1.4- Um Modelo a Parâmetros Distribuídos - O Reator Tubular Tipo “Plug-Flow” Exotérmico com Reação de 1ª Ordem

Um outro equipamento muito comum na Engenharia Química é o reator tubular. O reator tubular, mostrado na Figura 1.3, é normalmente constituído por um par de tubos concêntricos, sendo que na região central flui a mistura reacional e na região anular passa o fluido de resfriamento. Desta forma, é possível remover o calor normalmente liberado pela reação. A região central do reator é normalmente preenchida com partículas de catalisador sólido ou com material inerte (também chamados de misturadores estáticos), cuja função é homogeneizar o fluido ao longo da direção radial. Diz-se então que se estabelece um regime do tipo empistonado ou “*plug-flow*”: não há variações radiais das propriedades e o perfil radial de velocidades é uniforme. Reatores tubulares são particularmente interessantes em aplicações que requeiram altas áreas para troca de calor e em aplicações que levariam a consumo excessivo de energia para homogeneização em tanques agitados.

Em relação ao sistema analisado anteriormente, a mudança fundamental é que as propriedades no interior do reator já não podem ser mais consideradas uniformes no espaço. Claramente, à medida que se avança no reator, da entrada para a saída, há aumento progressivo das concentrações de produto e decréscimo continuado das concentrações de reagente. Portanto, os balanços têm que ser modificados. No entanto, se uma “fatia” suficientemente fina do reator é analisada, como mostrado na Figura 1.4, é razoável admitir que as propriedades sejam praticamente constante no volume delimitado pela “fatia” ou elemento de controle.

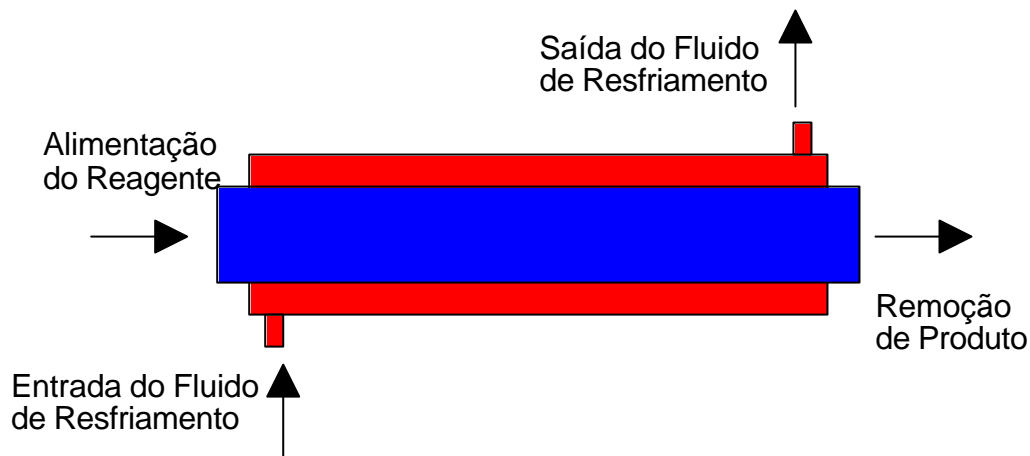


Figura 1.3- Esquema do Reator Tubular

Valendo-se das mesmas hipóteses utilizadas anteriormente, é possível aplicar as mesmas equações já apresentadas ao elemento de volume $\pi R^2 \Delta z$. Neste caso, as equações ficam na forma:

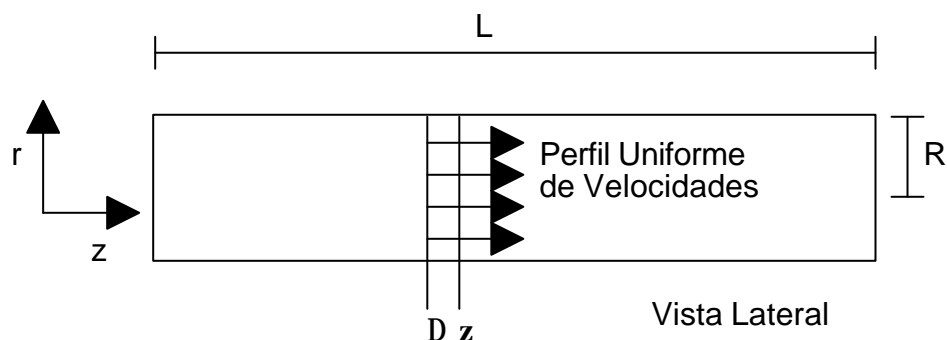


Figura 1.4- A Geometria do Reator Tubular

Balanco de Massa Global

$$\frac{dV}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad q_e = q_s = q \quad (1.18)$$

Ou seja, a vazão volumétrica não muda no elemento de controle. Logo, a vazão volumétrica é a mesma ao longo de todo o reator. Lembramos que este resultado só é válido para fluidos incompressíveis. Como

$$q = v \pi R^2 \quad (1.62)$$

conclui-se que a velocidade do escoamento é constante ao longo de todo o tubo.

Balço de Massa do Componente A

$$V \frac{dC_A}{dt} = q C_{Ae} - q C_A - K C_A V \quad (1.23)$$

No elemento de controle, a Equação (1.23) fica na forma:

$$\pi R^2 \Delta z \frac{dC_A}{dt} = \pi R^2 v C_A \Big|_z - \pi R^2 v C_A \Big|_{z+\Delta z} - K C_A \pi R^2 \Delta z \quad (1.63)$$

Dividindo-se por $\pi R^2 \Delta z$ e levando-se ao limite em que Δz vai a zero, chega-se a:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - K C_A \quad (1.64)$$

Balço de Massa do Componente B

Analogamente, lembrando apenas que a concentração de B na entrada no elemento não é mais igual a zero,

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -v \frac{\partial C_B}{\partial z} + K C_A \quad (1.65)$$

Balço de Massa do Componente S

$$C_S = \frac{\rho - C_A W_A - C_B W_B}{W_S} \quad (1.30)$$

Balço de Energia Térmica

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = q \rho C_p (T_e - T) + UA (T_c - T) + K C_A (-\Delta H_R) V \quad (1.39)$$

Utilizando-se procedimento análogo ao anterior

$$\rho \pi R^2 \Delta z C_p \frac{dT}{dt} = \pi R^2 v \rho C_p \left(T|_z - T|_{z+\Delta z} \right) + 2\pi R \Delta z U \left(T_c - T \right) + KC_A \left(-\Delta H_R \right) \pi R^2 \Delta z \quad (1.66)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - v \rho C_p \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{2 U}{R} \left(T_c - T \right) + KC_A \left(-\Delta H_R \right) \quad (1.67)$$

A Adimensionalização

Definindo-se:

$$x_A = \frac{C_A}{C_{Ae}} \quad (1.41)$$

$$x_B = \frac{C_B}{C_{Ae}} \quad (1.42)$$

$$x_S = \frac{C_S}{C_{Ae}} \quad (1.43)$$

$$\gamma = \frac{T}{T_e} \quad (1.45)$$

$$\tau = \frac{t v}{L} \quad (1.68)$$

$$\xi = \frac{z}{L} \quad (1.69)$$

chega-se a:

$$\frac{\partial x_A}{\partial \tau} = - \frac{\partial x_A}{\partial \xi} - \frac{K_0 L}{v} x_A \exp\left(\frac{(-\Delta E / RT_e)}{\gamma}\right) \quad (1.70)$$

$$\frac{\partial x_B}{\partial \tau} = - \frac{\partial x_B}{\partial \xi} + \frac{K_0 L}{v} x_A \exp\left(\frac{(-\Delta E / RT_e)}{\gamma}\right) \quad (1.71)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (1.56)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial \tau} = -\frac{\partial \gamma}{\partial \xi} + \frac{2 U L}{R v \rho C_p} (\gamma_c - \gamma) + \frac{K_0 L}{v} \frac{(-\Delta H_R) C_{Ae}}{\rho C_p T_e} x_A \exp\left(\frac{(-\Delta E / RT_e)}{\gamma}\right) \quad (1.72)$$

É, portanto, conveniente redefinir os grupamentos adimensionais na forma:

$$\Theta_R = \frac{K_0 L}{v} \quad (1.73)$$

$$-\Delta E_R = \frac{-\Delta E}{R T_e} \quad (1.51)$$

$$\beta = \frac{2 U L}{R v \rho C_p} \quad (1.74)$$

$$\Delta h_R = \frac{C_{Ae} (-\Delta H_R)}{\rho C_p T_e} \quad (1.53)$$

de maneira que o modelo final ganha a forma:

$$\frac{\partial x_A}{\partial \tau} = -\frac{\partial x_A}{\partial \xi} - \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.75)$$

$$\frac{\partial x_B}{\partial \tau} = -\frac{\partial x_B}{\partial \xi} + \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.76)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (1.56)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial \tau} = -\frac{\partial \gamma}{\partial \xi} + \beta (\gamma_c - \gamma) + \Theta_R \Delta h_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.77)$$

Para resolver o modelo acima é necessário não só definir um conjunto de condições iniciais (em $t = 0$) como também especificar as condições de alimentação (em $z = 0$). Observe que o fato das propriedades variarem ao longo da direção axial aumentou o grau de complexidade do modelo dinâmico, que passou a ser descrito por equações diferenciais parciais do tempo e do comprimento. Entretanto, este modelo determina a evolução do sistema a partir de um estado inicial, sendo, portanto, um *problema de valor inicial*. Técnicas numéricas que podem ser aplicadas a problemas deste tipo serão discutidas nos Capítulos 3, 4, 5 e 6 deste curso. Repare que, mesmo em condições estacionárias, quando as derivadas temporais são iguais a zero, o modelo a parâmetros distribuídos ao longo de uma direção ainda é descrito por um conjunto de equações diferenciais ordinárias desta direção na forma:

$$\frac{\partial x_A}{\partial \xi} = - \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.78)$$

$$\frac{\partial x_B}{\partial \xi} = \Theta_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.79)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (1.56)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial \xi} = \beta (\gamma_c - \gamma) + \Theta_R \Delta h_R x_A \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (1.80)$$

Compare o modelo estacionário do reator tubular com o modelo dinâmico do tanque agitado. São muito semelhantes, não ? Você consegue dizer por quê ?

1.5- Um Modelo com Parâmetros Parcialmente Distribuídos - O Tubo de um Trocador de Calor

Os dois modelos dinâmicos vistos anteriormente são matematicamente representados por sistemas de equações diferenciais ordinárias ou parciais de 1ª ordem, isto é, contêm apenas derivadas de primeira ordem em relação ao tempo ou a uma coordenada espacial. Nesta seção e na que se segue, veremos como o fenômeno da difusão eleva a ordem das equações diferenciais de um dado modelo matemático. Para tanto, usaremos exemplos bastante simples, que são representados apenas por uma equação diferencial parcial.

Um dos problemas básicos da Transferência de Calor é determinar o comportamento térmico de um fluido que escoar por um duto que está em uma outra condição térmica. Tal problema ocorre em trocadores de calor e reatores tubulares. A condição térmica mais simples é a manutenção de uma certa temperatura ao longo da parede do tubo, o que é fisicamente realizável através da condensação de vapor saturado a uma dada pressão.

Considere um fluido escoando em um duto cilíndrico de raio R como apresentado na Figura 1.5. O fluido entra no duto em $y = L$ a uma temperatura T_L , sendo aquecido através da parede que é mantida a uma temperatura T_p , através de um coeficiente pelicular de transferência de calor h . Como as propriedades físicas do fluido (densidade, ρ , e calor específico, c) são consideradas constantes, a velocidade média do fluido, u , também é constante.

Sob a hipótese de que a temperatura T é um valor representativo médio na área de seção reta do duto, podemos fazer um balanço de energia térmica em um volume diferencial situado na posição genérica y . Isto é, o modelo é *a parâmetros distribuídos* na direção y , mas é *a parâmetros concentrados* na direção normal a y .

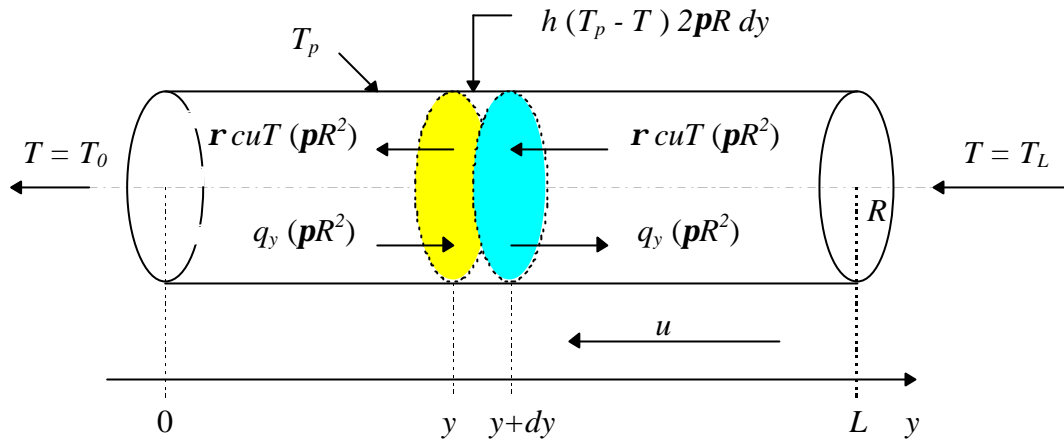


Figura 1.5 - Tubo cilíndrico de um trocador de calor.

Na Figura 1.5, estão especificados os três tipos de fluxos de calor: convectivo, difusivo e de troca térmica com a parede. Este último aparece representado pelo coeficiente de transferência de calor h , que é o resultado global do transporte convectivo-difusivo na direção normal à parede do tubo, cujos detalhes não são visíveis na formulação do presente modelo. O fluxo difusivo é dado pela *lei de Fourier*, que neste caso é expressa por

$$q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} \quad (1.81)$$

onde k é a condutividade térmica do fluido, também suposta constante. Já o fluxo de calor convectivo consiste apenas no transporte da energia térmica armazenada no próprio fluido pelo escoamento do mesmo.

O balanço de energia transiente no volume diferencial leva a

$$\text{Grandeza Acumulada } i = \text{Grandeza Adicionada } i - \text{Grandeza Removida } i + \text{Grandeza Produzida } i \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\pi R^2 dy \rho c T] = [\pi R^2 \rho u c T]_y^{y+dy} + \left[\pi R^2 k \frac{\partial T}{\partial y} \right]_y^{y+dy} + h(T_p - T) 2\pi R dy \quad (1.82)$$

onde a Equação (1.81) foi usada, u tem a direção dada na figura e $[f(y)]_y^{y+dy} = f(y+dy) - f(y)$.

Dividindo a Equação (1.82) por $\pi R^2 dy$, lembrando que as propriedades físicas são consideradas constantes e utilizando a definição de derivada parcial, obtém-se, finalmente

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \rho c u \frac{\partial T}{\partial y} + k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{2h}{R} (T - T_p) \quad (1.83)$$

ou, dividindo por ρc , tem-se

$$\frac{\partial T}{\partial t} = u \frac{\partial T}{\partial y} + \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{2h}{\rho c R} (T - T_p) \quad (1.84)$$

onde $\alpha = k/(\rho c)$ é a difusividade térmica do fluido.

A Equação (1.84) modela o comportamento térmico dentro do duto, ao nível de complexidade da presente formulação, desde que condições adicionais sejam impostas. Estas condições dizem respeito ao estado inicial do fluido no duto e as suas características na entrada e na saída do mesmo, sendo chamadas, respectivamente, de condições inicial e de contorno.

A condição inicial consiste na especificação da temperatura ao longo do duto no início dos tempos, usualmente $t = 0$, na forma

$$t = 0, \quad T = F(y) \quad (1.85)$$

A condição de contorno na entrada do fluido no duto é fácil de ser especificada, pois pode-se dizer que o mesmo entra a uma certa temperatura fixa T_L . No caso mais geral, esta temperatura de entrada poderia ser uma função do tempo

$$y = L, \quad T = T_L(t) \quad (1.86)$$

Já a condição de contorno na saída do duto é mais difícil, pois a temperatura de saída do fluido, T_o , depende de todo o aquecimento ocorrido no interior do duto. Entretanto, pode-se supor que após sair do duto o fluido não será mais aquecido, o que equivale a dizer que

$$y = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (1.87)$$

Este tipo de condição de contorno é designada como condição de *continuidade*.

As Equações (1.84), (1.85), (1.86) e (1.87) formam um *problema de valor inicial*, cuja solução deve fornecer o comportamento do sistema a partir de um estado inicial. Note como a presença da difusão térmica no modelo elevou para 2 a ordem da equação diferencial parcial em relação à coordenada espacial y , requerendo duas condições de contorno, dadas pelas Equações (1.86) e (1.87), para especificar completamente o problema.

Quando as condições de contorno não dependem do tempo e o tempo tende a infinito, o sistema atinge o que se chama de *regime estacionário*, onde as variáveis deixam de ser funções do tempo. No presente modelo, isto implica em se anular o membro esquerdo da Equação (1.84). Além disso, para o regime estacionário, uma outra maneira pode ser empregada para especificar a condição de contorno na saída do duto. Basta admitir que o comprimento L é longo o suficiente para que o fluido saia do mesmo na temperatura da parede. Caso o comprimento físico seja menor,

não há problema, pois pode-se utilizar a solução obtida apenas até este ponto. Assim, o modelo para o regime estacionário fica

$$u \frac{dT}{dy} + \alpha \frac{d^2T}{dy^2} - \frac{2h}{\rho c R} (T - T_p) = 0 \quad (1.88)$$

$$y = L, \quad T = T_L \quad (1.89)$$

$$y = 0, \quad T = T_0 = T_p \quad (1.90)$$

As Equações (1.88), (1.89) e (1.90) formam um *problema de valor de contorno*, onde o comportamento do sistema deve ser obtido a partir dos seus valores no contorno do domínio da equação diferencial. Note que, pela presença da difusão, o modelo para o regime estacionário é representado por uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, Equação (1.88), cuja solução numérica é obtida por procedimento bem diferente do usado para a solução do modelo estacionário do reator tubular, Equações (1.78) a (1.80), que é um *problema de valor inicial*.

Os problemas descritos acima apresentam um grande número de parâmetros. Por exemplo, as Equações (1.88), (1.89) e (1.90) do problema de valor de contorno, apresentam 9 parâmetros: ρ , c , u , α , h , R , L , T_L e T_p . A solução deste problema dependerá, portanto, destes 9 parâmetros, sendo difícil apresentar resultados na forma de gráficos e tabelas ou mesmos fazer comparações entre diversos casos. Entretanto, pode-se reduzir o número de parâmetros nas equações de um dado modelo utilizando o conceito de *adimensionalização*.

Como já visto, por adimensionalização entende-se a redefinição das variáveis dependentes e independentes e dos parâmetros de um dado problema, de forma que os mesmos se tornam adimensionais. Quando isto é feito, o número de parâmetros nas equações resultantes é reduzido.

Para os problemas acima com T_L constante, podemos definir as seguintes variáveis adimensionais:

$$x = \frac{y}{R} \quad X = \frac{L}{R} \quad \tau = \frac{\alpha t}{R^2} \quad \phi = \frac{T - T_p}{T_L - T_p} \quad \varphi = \frac{F - T_p}{T_L - T_p} \quad Pe = \frac{uR}{\alpha} \quad Nu = \frac{hR}{k} \quad (1.91)$$

onde Nu é o número de Nusselt, Pe é o número de Péclet e τ é o número de Fourier.

Assim o *problema transiente* pode ser escrito como

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = Pe \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 2Nu\phi \quad (1.92)$$

$$\tau = 0, \quad \phi = \varphi(x) \quad (1.93)$$

$$x = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (1.94)$$

$$x = X, \quad \phi = 1 \quad (1.95)$$

enquanto que o *problema estacionário* fica

$$Pe \frac{d\phi}{dx} + \frac{d^2\phi}{dx^2} - 2Nu\phi = 0 \quad (1.96)$$

$$x = 0, \quad \phi = 0 \quad (1.97)$$

$$x = X, \quad \phi = 1 \quad (1.98)$$

Vê-se, pois, que a adimensionalização reduziu o número de parâmetros do problema estacionário de 9 para apenas 3: Pe , Nu e X .

O problema de valor de contorno acima é linear, sendo possível obter a sua solução analítica, que é dada por

$$\phi(x) = \frac{e^{\xi_1 x} - e^{\xi_2 x}}{e^{\xi_1 X} - e^{\xi_2 X}} \quad (1.99)$$

onde

$$\xi_1 = -\frac{1}{2} \left[Pe - \sqrt{Pe^2 + 8Nu} \right] \quad \text{e} \quad \xi_2 = -\frac{1}{2} \left[Pe + \sqrt{Pe^2 + 8Nu} \right] \quad (1.100)$$

Metodologias para a solução de problemas de valor de contorno serão vistas nos Capítulos 3, 4, 5 e 6 do presente curso.

1.6- Um Modelo com Parâmetros Totalmente Distribuídos - O Tubo de um Trocador de Calor

Um problema intimamente relacionado com o da seção anterior é aquele que trata da obtenção do coeficiente pelicular de transferência de calor entre o fluido escoando em um duto e a parede do mesmo. Para ser possível a determinação deste coeficiente, a temperatura tem que ser considerada uma função não só da coordenada axial, mas também da coordenada radial.

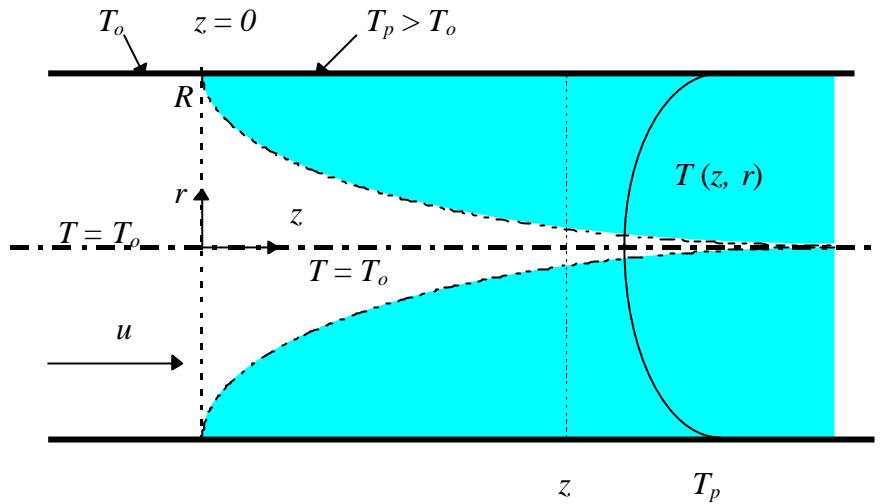


Figura 1.6 - Troca de calor na região de entrada de um duto cilíndrico

Considere a Figura 1.6, que representa a entrada de um fluido, originalmente à temperatura T_o , na região aquecida de um duto de seção reta circular de raio R , cuja parede é mantida à temperatura $T_p > T_o$ para $z > 0$. Considerando que o fluido tem propriedades físicas constantes, que o regime é estacionário e que a difusão radial e a convecção axial são os dois principais mecanismos presentes de transporte de calor, pode-se deduzir o seguinte balanço de energia:

$$\text{Grandeza Acumulada } i = \text{Grandeza Adicionada } i - \text{Grandeza Removida } i + \text{Grandeza Produzida } i \quad (1.6)$$

$$0 = 2\pi r dr \rho C_p u T \Big|_z - 2\pi r dr \rho C_p u T \Big|_{z+dz} + [2\pi r dz q_r]_r - [2\pi r dz q_r]_{r+dr} \quad (1.101)$$

conforme ilustrado na Figura 1.7. Usando o fato que o fluxo radial de calor é dado pela Lei de Fourier

$$q_r = -k \frac{\partial T}{\partial r} \quad (1.102)$$

e dividindo a Equação (1.101) por $2\pi r dr \rho C_p$, temos

$$u(r) \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\alpha}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1.103)$$

onde α é a difusividade térmica do fluido e $u(r)$ é a velocidade do fluido em cada posição radial. Considerando o escoamento na aproximação “plug-flow”, $u = \text{constante}$, independente de r , enquanto que para escoamento laminar temos que

$$u = u_{max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (1.104)$$

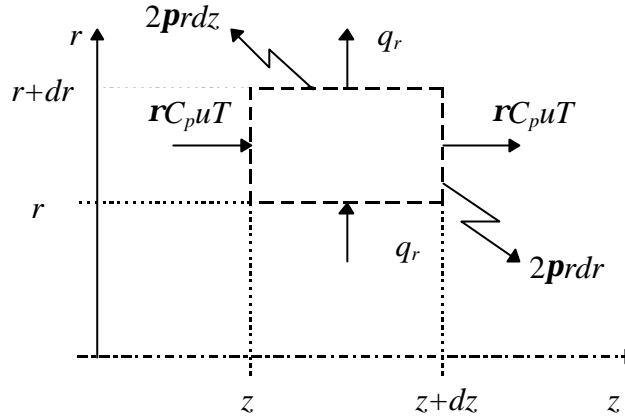


Figura 1.7 - Fluxos e áreas de troca térmica no volume diferencial bidimensional.

Tal como nos outros modelos, é necessário definir as chamadas condições de contorno e inicial. Da Figura 1.6, fica claro que

$$z = 0, \quad T = T_o \quad (1.105)$$

$$r = R, \quad T = T_p \quad (z > 0) \quad (1.106)$$

$$r = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad (\text{por simetria}) \quad (1.107)$$

Este modelo permite calcular o coeficiente de transferência de calor, h , entre a parede e o fluido, utilizado no modelo da Seção 1.5. De sua definição, temos que

$$q_r|_{r=R} = -k \frac{\partial T}{\partial r} \bigg|_{r=R} = h(\bar{T} - T_p) \quad (1.108)$$

onde \bar{T} é uma temperatura média convenientemente calculada, podendo ser, por exemplo, a chamada temperatura “bulk”:

$$\bar{T}(z) = \int_0^R u(r) T(r, z) r dr \bigg/ \int_0^R u(r) r dr \quad (1.109)$$

O significado físico da temperatura média acima é facilmente percebido da sua própria definição. Sendo uma média que leva em conta a velocidade do fluido em cada posição radial, fica claro que quando o fluido é descarregado para um recipiente e homogeneizado, a sua temperatura será àquela

dada pela Equação (1.109). Assim, como a derivada de T em relação a r na parede e \bar{T} são funções de z , h também é função de z . Isto mostra que o valor constante utilizado no modelo da Seção 1.5 é apenas uma aproximação de menor ordem.

Tal como antes, pode-se usar o processo de adimensionalização para reduzir o número de parâmetros deste modelo. Definindo as variáveis adimensionais

$$\Theta = \frac{T - T_o}{T_p - T_o}, \quad \eta = \frac{r}{R}, \quad \zeta = \frac{z}{R}, \quad U(\eta) = \frac{u}{u_{max}}, \quad Pe = \frac{u_{max} R}{\alpha} \quad (1.110)$$

o problema de valor inicial composto pelas Equações (1.103), (1.105), (1.106) e (1.107) pode ser escrito como:

$$Pe U(\eta) \frac{\partial \Theta}{\partial \zeta} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right) \quad (1.111)$$

$$\zeta = 0, \quad \Theta = 0 \quad (1.112)$$

$$\eta = 1, \quad \Theta = 1 \quad (1.113)$$

$$\eta = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} = 0, \quad (\text{por simetria}) \quad (1.114)$$

onde $U = 1$ para o escoamento “plug-flow” e

$$U(\eta) = 1 - \eta^2 \quad (1.115)$$

para o escoamento laminar. Observe como o número de Péclet, Pe , aparece novamente multiplicando o termo de transferência de calor por convecção, sendo o único parâmetro do modelo adimensionalizado.

A solução do modelo formado pelas Equações (1.111), (1.112), (1.113) e (1.114) determina o perfil de temperatura adimensional, Θ , ao longo da coordenada radial η , para diversos valores da coordenada axial ζ , a partir de um perfil de temperatura na entrada do duto ($\zeta = 0$). Note a semelhança com o problema dinâmico da Seção 1.5, que determinava o perfil de temperatura em cada instante de tempo a partir de uma condição inicial. No presente modelo, há apenas derivadas de 1ª ordem em relação à coordenada espacial ζ , o que faz ela se assemelhar a uma coordenada temporal. Isto é característico dos chamados *problemas parabólicos*, onde uma coordenada espacial se comporta como se fosse a coordenada do tempo (“time-like coordinate”). Além disso, devido a este comportamento, as Equações (1.111), (1.112), (1.113) e (1.114) formam também um *problema de valor inicial*.

Como já comentamos, os diversos métodos numéricos utilizados para a solução de problemas de valor inicial serão vistos nos Capítulos 3, 4, 5 e 6 do presente curso.

Capítulo 2

Solução Numérica de Sistemas Lineares e Não Lineares de Equações Algébricas

Como já discutido anteriormente, modelos estacionários a parâmetros concentrados dão origem a sistemas de equações algébricas, que precisam ser resolvidas para fins de projeto e simulação de equipamentos. Quase sempre, tais modelos não admitem soluções analíticas e, por isto, precisam ser resolvidos numericamente.

Diz-se que uma solução de uma certa equação é numérica se ela é obtida de forma APROXIMADA através da manipulação NUMÉRICA da equação. Neste conceito estão implícitos dois dados importantes:

- 1- A solução é obtida NUMERICAMENTE; ou seja, através de uma série de testes e procedimentos numéricos e não da manipulação analítica da equação;
- 2- A solução é sempre APROXIMADA, como resultado da série de testes realizados. Por isto, 2 fatos devem ser salientados:
 - 2a- A solução numérica e a solução real são diferentes, coincidindo apenas dentro de uma certa TOLERÂNCIA;
 - 2b- Várias soluções numéricas diferentes podem ser obtidas, coincidindo apenas dentro de uma certa TOLERÂNCIA.

Neste momento é necessário introduzir a noção de tolerância. Chama-se de tolerância a um certo critério numérico utilizado para permitir a obtenção das raízes da equação em um número finito de testes. Por exemplo, se a equação $f(x)=0$ precisa ser resolvida através de testes numéricos, é conveniente considerar que o número x^* tal que $|f(x^*)| < \epsilon$, onde ϵ é um número pequeno (tipicamente da ordem de 10^{-4} , 10^{-5}) é uma raiz aproximada da equação.

É conveniente apresentar o conjunto de técnicas numéricas adequadas para resolver sistemas de equações algébricas em dois grupos: técnicas para solução de sistemas lineares e de sistemas não lineares de equações algébricas. Estas técnicas são apresentadas nas Seções 2.1 e 2.2 que seguem.

2.1- Solução de Sistemas Lineares de Equações Algébricas

A solução de sistemas de equações algébricas lineares é um tópico extremamente importante dentro da área de métodos numéricos, uma vez que quase todos os procedimentos de solução numérica de modelos envolvendo sistemas de equações não lineares, sistemas de equações diferenciais ordinárias ou equações diferenciais parciais envolvem, no seu cerne, a solução de sistemas lineares.

Além disso, os sistemas lineares também ocorrem diretamente na solução de diversos problemas de engenharia. Considere, por exemplo, a combustão parcial de propeno com ar em uma câmara de combustão termicamente isolada e mantida a 1 atm de pressão, esquematizada na Figura 2.1.

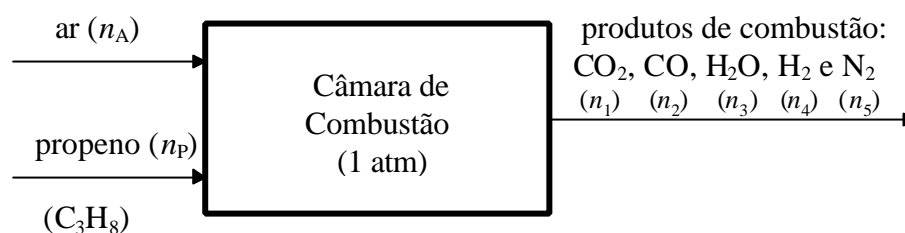


Figura 2.1- Combustão de propeno com ar atmosférico.

Ar (21% molar de O_2) e propeno (C_3H_8) são alimentados em uma certa proporção mássica que permite calcular o número de moles de ar, n_A , e de propeno, n_P , que entram na câmara para uma certa base mássica. Sabendo que os produtos de combustão são apenas o dióxido e o monóxido de carbono, o vapor d'água e o hidrogênio, além do nitrogênio existente no ar de alimentação, queremos calcular a composição do gás de combustão. Precisamos, então, calcular o número de moles, n_i , dos seus 5 componentes. Para tanto, são necessárias 5 equações independentes que relacionem os seus valores. Quatro destas equações podem ser obtidas através do balanço de massa na câmara de combustão, uma para cada espécie química:

$$\text{C:} \quad n_1 + n_2 = 3 n_P \quad (2.1)$$

$$\text{H:} \quad 2 n_3 + 2 n_4 = 8 n_P \quad (2.2)$$

$$\text{O:} \quad 2 n_1 + n_2 + n_3 = 0,21 n_A \quad (2.3)$$

$$\text{N:} \quad n_5 = 0,79 n_A \quad (2.4)$$

enquanto que uma última equação é obtida pelo dado adicional que, na temperatura de combustão da câmara (2030 K), a razão entre o número de moles do monóxido de carbono e do dióxido de carbono é de 0,342:

$$0,324 n_1 - n_2 = 0 \quad (2.5)$$

Assim, a composição dos gases de combustão pode ser obtida da solução simultânea das Equações (2.1) a (2.5), que formam um sistema linear de equações algébricas. Embora este sistema

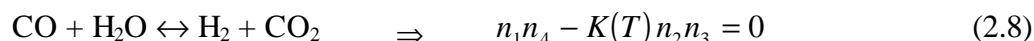
seja simples o suficiente para ser resolvido por substituição direta, vamos escrevê-lo na forma matricial:

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (2.6)$$

onde \mathbf{A} é a matriz de coeficientes, \mathbf{x} é o vetor de incógnitas e \mathbf{b} o vetor dos termos não-homogêneos, dados por

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0,324 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \\ n_5 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3n_p \\ 8n_p \\ 0,21n_A \\ 0,79n_A \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

Nosso objetivo é calcular a solução de sistemas lineares na forma da Equação (2.6), para um número n de equações a n incógnitas, o que será visto nas próximas seções. Convém ressaltar que, no exemplo acima, o sistema final de equações poderia ser não-linear se a condição adicional fosse dada da forma mais usual, ou seja, como sendo a condição de equilíbrio da reação reversível de formação do gás d'água:



onde $K(T)$ é a constante de equilíbrio da reação, avaliada na temperatura da câmara de combustão. A solução de equações e sistemas de equações não-lineares será vista mais adiante neste capítulo.

2.1.1- Métodos Diretos e Iterativos de Solução

A Equação (2.6) descreve um sistema linear genérico, na forma matricial, onde \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes, com elementos a_{ij} na linha i e coluna j , \mathbf{x} é o vetor de incógnitas e \mathbf{b} é o vetor dos termos não-homogêneos. Sistemas lineares podem ter quatro tipos de solução: (i) uma única solução, (ii) nenhuma solução, (iii) um número infinito de soluções e (iv) a solução trivial ($\mathbf{x} = \mathbf{0}$). Os sistemas de uma única solução são os mais usuais nas soluções das equações matemáticas de um dado modelo físico.

Os sistemas lineares podem ser resolvidos através de dois tipos de métodos: **os métodos diretos e os métodos iterativos**.

Os métodos diretos consistem em procedimentos, baseados na eliminação algébrica, que obtêm a solução exata em um número fixo de operações. Entre estes métodos, encontram-se: (i) a eliminação Gaussiana, (ii) a eliminação de Gauss-Jordan, (iii) a inversão matricial, (iv) a decomposição LU e outros métodos derivados para matrizes de coeficientes de formas especiais, como o algoritmo de Thomas.

Os métodos iterativos obtêm uma solução aproximada para o sistema de equações utilizando um procedimento iterativo a partir de uma solução aproximada inicial (“chute”). O grau de aproximação requerido na solução controlará o número de operações necessárias para obtê-la. Exemplos de métodos iterativos são: (i) iteração de Jacobi, (ii) iteração de Gauss-Seidel, (iii) sobre-relaxação sucessiva (“successive overrelaxation”, SOR), (iv) relaxação por linhas (LSOR), (v) método “Alternating-Direction Implicit” (ADI), além de outros métodos específicos para matrizes de coeficientes de formas especiais, como o “Modified Strong Implicit Procedure” (MSIP).

Neste curso, veremos apenas os métodos de eliminação Gaussiana, fatorização LU, algoritmo de Thomas, iteração de Gauss-Seidel e sobre-relaxação sucessiva (SOR), que serão suficientes para a solução dos problemas a serem apresentados.

2.1.2- Eliminação Gaussiana

O processo de eliminação Gaussiana consiste na aplicação sucessiva das operações com linhas para transformar o sistema linear em um outro equivalente, mas cuja matriz dos coeficientes seja triangular superior ou inferior.

Uma matriz triangular superior, **U**, tem todos os elementos abaixo da diagonal principal nulos, enquanto que em uma matriz triangular inferior, **L**, todos os elementos acima da diagonal principal são nulos. Em ambos os casos, o processo de solução do sistema linear é bem simples.

Vejamos o caso de um sistema linear na forma triangular superior

$$\mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (2.9)$$

onde **U** tem a forma

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1,n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2,n} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & \mathbf{0} & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ & & & & u_{n,n} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

A solução do sistema (2.9) é facilmente obtida pela chamada *substituição reversa* (“back-substitution”). A última incógnita é facilmente determinada por

$$x_n = \frac{b_n}{u_{n,n}} \quad (2.11)$$

Pode-se, então, obter sucessivamente todos os outros x_i da penúltima para a primeira equação

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n u_{i,j} x_j}{u_{i,i}}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1 \quad (2.12)$$

As Equações (2.11) e (2.12) constituem o processo de substituição reversa, resolvendo o sistema.

Considere agora um sistema na forma triangular inferior

$$\mathbf{L}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (2.13)$$

onde \mathbf{L} tem a forma

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \mathbf{0} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \dots & l_{n,n-1} & l_{n,n} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

A solução do sistema (2.13) também é facilmente obtida, utilizando um processo similar ao anterior, mas que começa da primeira para a última linha do sistema, sendo denominado de *substituição progressiva* (“forward substitution”)

$$x_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \quad (2.15)$$

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{i,j} x_j}{l_{i,i}}, \quad i = 2, 3, \dots, n \quad (2.16)$$

Voltemos agora ao processo de eliminação Gaussiana, que transforma um sistema linear com uma matriz de coeficientes de forma genericamente cheia (Equação 2.6), na qual todos os elementos podem ser não-nulos, em um sistema equivalente, de mesma solução, mas cuja matriz de coeficientes é triangular superior (Equação 2.9).

As operações com linhas não modificam a solução do sistema linear e derivam-se das seguintes propriedades de suas equações:

- (1) uma equação pode ser multiplicada por uma constante diferente de zero;
- (2) a ordem das equações pode ser trocada;
- (3) qualquer equação pode ser substituída por uma combinação linear dela mesma com outras equações do sistema.

As operações (1) e (3) afetam apenas o valor dos coeficientes da matriz \mathbf{A} e dos termos independentes de \mathbf{b} , não alterando o vetor \mathbf{x} , enquanto que a operação (2) troca a ordem das

incógnitas dentro de \mathbf{x} , mas não os seus valores. A operação (1) é por vezes utilizada para alterar a ordem de grandeza dos coeficientes das equações. A operação (2) é utilizada para evitar divisões por zero e diminuir o erro de truncamento na solução final. A operação (3) é a que efetivamente realiza o processo de eliminação.

Considere um sistema linear qualquer com n equações, que pode ser escrito na forma

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.17)$$

Utilizando a operação (2) podemos fazer com que a_{11} seja diferente de zero. Mais do que isto, escolhe-se para ser a primeira equação aquela na qual a_{11} é o maior possível para reduzir os erros de truncamento, operação que é chamada de *pivotamento*. Com a operação (3), podemos substituir cada uma das equações com índices $i = 2, \dots, n$ pela combinação linear dela mesma com a primeira equação multiplicada por $-a_{i1}/a_{11}$, o que transforma em zeros todos os elementos da primeira coluna, exceto a_{11} . Toma-se agora o novo sistema, utilizando a operação (2) para colocar na segunda linha aquela equação com o maior elemento existente na segunda coluna para $i = 2, \dots, n$ (maior a_{22}). Utilizando de novo a operação (3), substitui-se cada uma das linhas com $i = 3, \dots, n$ por uma combinação linear dela própria com a segunda linha multiplicada por $-a_{i2}/a_{22}$, o que elimina os elementos da segunda coluna abaixo de a_{22} . Prosseguindo neste processo de eliminação até a equação $n-1$ obtém-se um sistema equivalente ao original, mas cuja matriz dos coeficientes é triangular superior.

Pode-se descrever matematicamente o procedimento acima utilizando a notação a_{ij}^k, b_i^k , onde o sobrescrito k denota o número de eliminações menos um necessário para se obter aquele elemento. O processo de eliminação Gaussiana consiste, então, nas seguintes operações

$$a_{i,j}^k = a_{i,j}^{k-1} - \frac{a_{i,k-1}^{k-1}}{a_{k-1,k-1}^{k-1}} a_{k-1,j}^{k-1} \quad k = 1, 2, \dots, n-1 \quad (2.18)$$

$$b_i^k = b_i^{k-1} - \frac{a_{i,k-1}^{k-1}}{a_{k-1,k-1}^{k-1}} b_{k-1}^{k-1} \quad k = 1, 2, \dots, n-1 \quad (2.19)$$

onde $a_{ij}^1 = a_{ij}$, $b_i^1 = b_i$ e o termo $a_{k-1,k-1}^{k-1}$ sempre é obtido por pivotamento antes da eliminação de índice k . A matriz dos coeficientes finalmente obtida, \mathbf{A}^n , é triangular superior, sendo designada por \mathbf{U} , e o vetor final de termos independentes é o \mathbf{b}^n , sendo dados por

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{U} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n} \\ & a_{22}^2 & a_{23}^2 & \cdots & a_{2,n}^2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & \mathbf{0} & & a_{n-1,n-1}^{n-1} & a_{n-1,n}^{n-1} \\ & & & & a_{n,n}^n \end{bmatrix} \quad \mathbf{b}^n = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^2 \\ \vdots \\ b_{n-1}^{n-1} \\ b_n^n \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

O sistema linear finalmente obtido é

$$\mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{b}^n \quad (2.21)$$

onde se deve atentar para o fato de que a ordem das incógnitas no vetor \mathbf{x} pode ter sido trocada pelo processo de pivotamento. A solução do sistema (2.21) é, então, obtida por *substituição reversa*, Equações (2.11) e (2.12), que, neste caso, tornam-se

$$x_n = \frac{b_n^n}{a_{n,n}^n} \quad (2.22)$$

$$x_i = \frac{b_i^i - \sum_{j=i+1}^n a_{i,j}^i x_j}{a_{i,i}^i}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1 \quad (2.23)$$

Nada impede que a eliminação Gaussiana seja usada para resolver, ao mesmo tempo, mais de um sistema linear com a mesma matriz de coeficientes. Para isto, basta fazer a eliminação da seguinte matriz aumentada

$$[\mathbf{A} \quad \vdots \quad \mathbf{b}_1 \quad \vdots \quad \dots \quad \vdots \quad \mathbf{b}_m] \quad (2.24)$$

onde $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_m$ são os diversos vetores independentes para os quais se quer a solução do sistema. É claro que a substituição reversa (Equações 2.22 e 2.23) deverá ser executada uma vez para cada vetor de termos independentes.

Exemplo 2.1: A solução do sistema representado pela Equação (2.6) com

$$[\mathbf{A} \quad \vdots \quad \mathbf{b}] = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \vdots & 7 \\ 1 & 5 & 2 & \vdots & 17 \\ 1 & 2 & 3 & \vdots & 14 \end{bmatrix}$$

é feita em duas etapas:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \vdots & 7 \\ 0 & 4,5 & 1,5 & \vdots & 13,5 \\ 0 & 1,5 & 2,5 & \vdots & 10,5 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \text{(linha 2) - } 1/2 \text{ (linha 1)} \\ \text{(linha 2) - } 1/2 \text{ (linha 1)} \end{matrix}$$

e

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \vdots & 7 \\ 0 & 4,5 & 1,5 & \vdots & 13,5 \\ 0 & 0 & 2 & \vdots & 6 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \text{(linha 2) - } 1/3 \text{ (linha 1)} \end{matrix}$$

de onde, pelo processo de substituição reversa, obtém-se

$$\mathbf{x} = [1 \quad 2 \quad 3]$$

Exercício 2.1: Resolva o sistema linear abaixo por eliminação Gaussiana

$$\begin{bmatrix} 2 & -2 & 2 & 1 \\ 2 & -4 & 1 & 3 \\ -1 & 3 & -4 & 2 \\ 2 & 4 & 3 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 10 \\ -14 \\ 1 \end{bmatrix}$$

2.1.3- Fatoração LU

Pode-se provar que a matriz triangular inferior construída com os fatores utilizados no processo de eliminação, cuja forma é

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & & \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & \frac{a_{32}^2}{a_{22}^2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \vdots & \cdots & \frac{a_{n-1,n-1}^{n-1}}{a_{n-1,n-1}^{n-1}} & 1 \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

é tal que

$$\mathbf{LU} = \mathbf{A} \quad (2.26)$$

Isto é, obtém-se a fatoração da matriz \mathbf{A} em matrizes triangulares superior, \mathbf{U} , e inferior, \mathbf{L} , sendo que esta última tem uma diagonal principal unitária (método de Doolittle).

A vantagem da fatoração LU é que ela pode ser calculada uma única vez, independentemente do vetor de termos não-homogêneos. Uma vez dado um vetor independente, as matrizes obtidas na fatoração permitem resolver facilmente o sistema dado pela Equação (2.6). Isto pode ser visto substituindo a fatoração no sistema original

$$\mathbf{LUx} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{Ux} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{b}^n = \mathbf{c} \quad (2.27)$$

ou

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{c} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{Lc} = \mathbf{b} \quad (2.29)$$

Assim, uma vez fatorada a matriz dos coeficientes, podemos considerar posteriormente o vetor de termos independentes, **b**, para obter **c**, resolvendo a Equação (2.29) pelo processo de *substituição progressiva*, Equações (2.15) e (2.16), com c_i no lugar de x_i . Após a determinação do vetor **c**, podemos resolver o sistema da Equação (2.28) por *substituição reversa*, Equações (2.11) e (2.12), com c_i no lugar de b_i . Deve-se apenas tomar cuidado em guardar a informação sobre as trocas de posição das linhas durante a fatoração, pois as mesmas trocas estão presentes na ordem das variáveis de **x**.

Exemplo 2.2: Considere o sistema dado no Exemplo 2.1, onde a matriz triangular superior da fatoração da matriz **A** = **LU** foi obtida. De acordo com a Equação (2.25), a matriz triangular inferior é dada por (veja, no Exemplo 2.1, os fatores multiplicativos ao lado da matriz estendida durante a eliminação):

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1 \end{bmatrix}$$

A verificação da fatoração pode ser feita diretamente por multiplicação de **L** e **U**. A solução da Equação (2.29) com o vetor **b** dado no Exemplo 2.1 leva a

$$\mathbf{c} = [7 \quad 13,5 \quad 6]$$

gerando, quando substituído na Equação (2.28), o mesmo sistema que já foi resolvido no Exemplo 2.1.

Exercício 2.2: Obtenha a fatoração LU da matriz dos coeficientes do sistema linear dado no Exercício 2.1, calculando também a sua solução.

2.1.4- Algoritmo de Thomas

Diversos métodos de solução de problemas de valor de contorno envolvendo equações diferenciais unidimensionais geram sistemas lineares onde a matriz dos coeficientes tem a chamada forma *tridiagonal*

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} d_1 & u_1 & & & \\ l_2 & d_2 & u_2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \mathbf{0} & l_{n-1} & d_{n-1} & u_{n-1} \\ & & & l_n & d_n \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Neste caso, podemos fazer a eliminação Gaussiana apenas dos elementos que sabemos que não são nulos (os l_i), sem nenhum pivotamento. Evidentemente, é necessário que $d_i \neq 0$, para todo i . Este procedimento é chamado de algoritmo de Thomas (TDMA).

As equações básicas do processo de eliminação são

$$\bar{d}_1 = d_1, \quad \bar{d}_i = d_i - \frac{\bar{l}_i}{\bar{d}_{i-1}} u_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, n \quad (2.31)$$

$$\bar{b}_1 = b_1, \quad \bar{b}_i = b_i - \frac{\bar{l}_i}{\bar{d}_{i-1}} \bar{b}_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, n \quad (2.32)$$

A solução do sistema linear é obtida pela substituição reversa que, neste caso, consiste nas equações

$$x_n = \frac{\bar{b}_n}{\bar{d}_n}, \quad x_i = \frac{\bar{b}_i - u_i x_{i+1}}{\bar{d}_i}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1 \quad (2.33)$$

Exercício 2.3: Resolva o sistema linear abaixo pelo algoritmo de Thomas.

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -7 \\ -1 \end{bmatrix}$$

2.1.5- Iteração de Gauss-Seidel

O método de Gauss-Seidel é uma variante da iteração de Jacobi. Esta última consiste em rearranjar a Equação (2.17) da seguinte forma

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.34)$$

onde o índice k indica a iteração. Inicia-se o processo iterativo com um valor inicial para o vetor solução, $\mathbf{x}^{(0)}$, utilizando-se sucessivamente a Equação (2.34) para todo i , até que a solução seja obtida dentro da tolerância que foi prescrita. A convergência é garantida se o sistema linear tiver a *dominância diagonal*, isto é

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.35)$$

sendo estritamente maior para, pelo menos, uma linha. Algumas vezes, é possível modificar um sistema linear que não é diagonalmente dominante através de trocas de linhas, para transformá-lo em um com dominância diagonal. Sistemas lineares originários da discretização de equações diferenciais usualmente são diagonalmente dominantes.

O método de Gauss-Seidel consiste em se usar sempre o valor mais recente para cada variável do processo iterativo. Assim, supondo que as linhas são processadas em ordem crescente de seu índice, a iteração é dada por

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.36)$$

A convergência também é garantida para sistemas com dominância diagonal.

Exemplo 2.3: Vamos utilizar o método de Gauss-Seidel para resolver o sistema linear já resolvido por eliminação no Exemplo 2.1. Escrevendo as equações do sistema de acordo com a Equação (2.36), temos

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{2} [7 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)}]$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{5} [17 - x_1^{(k+1)} - 2x_3^{(k)}]$$

$$x_3^{(k+1)} = \frac{1}{3} [14 - x_1^{(k+1)} - 2x_2^{(k+1)}]$$

Escolhendo um conjunto inicial de valores para $k = 0$ (“chute inicial”), as 5 primeiras iterações do método estão na Tabela 2.1. Devido à dominância diagonal, os valores iterados tendem rapidamente à solução exata $[1, 2, 3]$.

Tabela 2.1 - Iterações do método de Gauss-Seidel

k	0	1	2	3	4	5
$x_1^{(k)}$	3,5	1,300	0,973	0,968	0,987	0,996
$x_2^{(k)}$	2,7	2,460	2,168	2,048	2,011	2,002
$x_3^{(k)}$	1,7	2,593	2,897	2,979	2,997	3,000

Exercício 2.4: Resolva o sistema linear dado no Exercício 2.3, usando a iteração de Gauss-Seidel, até que três dígitos significativos sejam invariantes em todos os valores do vetor solução.

2.1.6- Sobre-Relaxação Sucessiva (SOR)

Considere um método iterativo qualquer que está sendo usado para determinar a solução de um problema na forma

$$\mathbf{x}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}^{(k)} \quad (2.37)$$

como, por exemplo, a iteração de Gauss-Seidel. Podemos tentar aumentar a taxa de convergência do processo, isto é, diminuir o número de iterações necessárias para obter a solução dentro da tolerância prescrita, utilizando a própria “tendência” do processo de convergência. Considere a correção dada por

$$\mathbf{x}_c^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \omega(\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}) \quad (2.38)$$

onde ω é chamado de fator de relaxação. Note que a diferença entre duas aproximações sucessivas, (k) e $(k+1)$, fornece a “tendência” do processo de convergência. Assim, ao se fazer ω maior que 1, tenta-se aumentar a velocidade de um processo com boa convergência, enquanto que, ao se fazer ω menor que 1, pode-se tornar convergente um processo originalmente divergente. Desta forma, podemos classificar

- $1 < \omega < 2$: sobre-relaxação
- $0 < \omega < 1$: sub-relaxação

O valor de ω não pode superar 2, ou o processo iterativo se tornará divergente em algum ponto próximo a sua solução.

Exemplo 2.4: Vamos utilizar a sobre-relaxação na solução pelo método de Gauss-Seidel do sistema linear resolvido no Exemplo 2.3. As equações do sistema linear são escritas tal como no Exemplo 2.3, determinando o valor do vetor solução *antes* da correção. Após *todo* o vetor ser obtido, a relaxação é então efetuada.

As 4 primeiras iterações estão na Tabela 2.2, onde fica clara a tendência de convergência para os valores exatos da solução. É patente, também, uma melhoria na velocidade de convergência do processo iterativo, pois as 4 iterações levaram, praticamente, ao mesmo resultado obtido com as 5 iterações do método de Gauss-Seidel. O valor do parâmetro de relaxação foi arbitrariamente escolhido, podendo não ser o melhor possível.

Note que a relaxação também poderia ser feita elemento a elemento de \mathbf{x} , logo após o seu valor iterado ser obtido. Aplicar-se-ia, desta forma, a Equação (2.38) na forma escalar a cada um dos componentes do vetor \mathbf{x} .

Tabela 2.2 - Iterações do método de relaxação usando Gauss-Seidel ($\omega = 1,3$)

k	0	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	3,5	0,640	0,946	1,007	1,001
$x_2^{(k)}$	2,7	2,388	1,988	1,992	2,000
$x_3^{(k)}$	1,7	2,861	3,026	3,003	3,000

Exercício 2.5: Resolva o sistema linear dado no Exercício 2.3 usando SOR, variando ω no intervalo $[1,2, 1,4]$, com variações de 0,01, até que três dígitos significativos sejam invariantes em todos os valores do vetor solução. Compare e comente os resultados.

2.1.7- Teste de Convergência

Na descrição dos processos iterativos, falou-se várias vezes em se obter a solução “dentro da tolerância prescrita”. Mais adiante, na solução de equações não-lineares, teremos a mesma necessidade de definir quando o processo numérico iterativo já obteve a solução “dentro da tolerância prescrita”. O significado desta expressão será aqui analisado.

Primeiramente, é necessário estabelecer uma medida do grau de afastamento (distância) entre a solução exata e a sua aproximação. Como, usualmente, a solução exata não é conhecida, utiliza-se o artifício de comparar aproximações sucessivas da mesma. A distância entre dois escalares é facilmente medida pelo valor absoluto da diferença entre eles:

$$\left| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right| \quad (2.39)$$

Para medir a distância entre dois vetores, devemos definir uma norma no espaço vetorial, como por exemplo

$$\|\mathbf{x}\| \equiv \left[\sum_{i=1}^n x_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{ou} \quad \|\mathbf{x}\| \equiv \max_i |x_i| \quad (2.40)$$

Com uma norma, podemos definir a distância entre vetores e exigir que a mesma satisfaça determinados critérios de convergência que envolvem as chamadas *tolerâncias*. Por exemplo, o critério de *tolerância absoluta* é

$$\left\| \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)} \right\| < \epsilon_a \quad (2.41)$$

enquanto que o de *tolerância relativa* é dado por

$$\left\| \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)} \right\| < \epsilon_r \left\| \mathbf{x}^{(k+1)} \right\| \quad (2.42)$$

O critério dado pela Equação (2.42) apresenta problemas para ser satisfeito se a solução é próxima de zero, isto é, $\left\| \mathbf{x}^{(k)} \right\| \rightarrow 0$. Um critério misto que corrige esta deficiência é dado por

$$\left\| \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)} \right\| < \epsilon_a + \epsilon_r \left\| \mathbf{x}^{(k+1)} \right\| \quad (2.43)$$

onde ϵ_a é a tolerância absoluta e ϵ_r é a tolerância relativa.

Às vezes, deseja-se um certo grau de convergência em todos os elementos do vetor \mathbf{x} , o que leva ao uso dos critérios expressos pelas Equações (2.41), (2.42) ou (2.43), trocando-se a norma do vetor pelo valor absoluto do componente i e testando se o critério é válido para todo i .

Exemplo 2.5: Utilizando a definição Euclidiana de norma de um vetor (a definição que está à esquerda, na Equação 2.40), vamos comparar agora a convergência dos métodos iterativos usados nos Exemplos 2.3 e 2.4. A Tabela 2.3 contém as normas do vetor \mathbf{x} para cada iteração k , a distância entre o valor atual deste vetor e o seu valor anterior na iteração $k-1$, e a variação relativa do vetor \mathbf{x} .

De acordo com a Tabela 2.3, podemos agora comparar, quantitativamente, a taxa de convergência dos dois métodos iterativos. Aquele que utiliza a relaxação atingiu melhores valores tanto na medida do erro absoluto, $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|$, quanto na medida do erro relativo, $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\| / \|\mathbf{x}^{(k)}\|$, em 4 iterações, do que os valores obtidos pelo método que não usa a relaxação em 5 iterações.

Caso ε_a tivesse sido escolhido como 0,01, nenhum dos dois métodos teria satisfeito o critério dado pela Equação (2.41), porém, o que usa a relaxação está bem perto disto. Por outro lado, para $\varepsilon_r = 0,01$, o critério dado pela Equação (2.42) é satisfeito por ambos os métodos nas suas últimas iterações. Já o critério dado pela Equação (2.43), com $\varepsilon_a = \varepsilon_r = 0,01$, é satisfeito por ambos os métodos para $k = 4$. Entretanto, os valores do erro absoluto, $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(4)}\|$, é de 0,001 para o método com relaxação, mas de apenas 0,017 para o método de Gauss-Seidel. Isto é resultado da menor taxa de convergência do método sem relaxação, que diminui o grau de confiança da aproximação do erro absoluto por $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|$. Deve-se, portanto, tomar cuidado na especificação de valores muito altos para tolerâncias quando se utilizam métodos com baixa taxa de convergência.

Tabela 2.3 - Convergência dos métodos iterativos.

k	1	2	3	4	5
Gauss-Seidel sem relaxação					
$\ \mathbf{x}^{(k)}\ $	3,803	3,747	3,742	3,742	3,742
$\ \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\ $	2,386	0,533	0,145	0,0453	0,0131
$\ \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\ / \ \mathbf{x}^{(k)}\ $	0,627	0,142	0,0389	0,0121	0,00349
Gauss-Seidel com relaxação ($\omega = 1,3$)					
$\ \mathbf{x}^{(k)}\ $	3,781	3,742	3,742	3,742	—
$\ \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\ $	3,102	0,530	0,0653	0,0104	—
$\ \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\ / \ \mathbf{x}^{(k)}\ $	0,821	0,142	0,0175	0,00278	—

Exercício 2.5: Resolva o sistema linear dado no Exercício 2.3 usando SOR, utilizando $\omega = 1,27$, e um critério de tolerância relativa com $\varepsilon_r = 10^{-4}$.

2.1.8- Rotinas Disponíveis

Existem inúmeras bibliotecas matemáticas que têm diversas rotinas de solução de sistemas lineares, as quais são altamente otimizadas. Para a comodidade dos alunos deste curso, estão incluídas abaixo para *download* rotinas que implementam o método da eliminação Gaussiana e o algoritmo de Thomas, tanto em linguagem C como em FORTRAN. Instruções sobre a utilização das rotinas são encontradas nelas próprias na forma de comentários.

2.2- Solução de Sistemas Não-Lineares de Equações Algébricas

De forma pragmática, equações algébricas não-lineares são aquelas que não podem ser colocadas na forma da Equação (2.6). Como regra geral, estas equações não possuem solução analítica e algum tipo de procedimento numérico tem que ser usado para que uma solução seja obtida. É conveniente classificar estes métodos numéricos em dois grupos:

1- Métodos Diretos - não fazem uso de cálculo de derivadas de $f(x)$ nem de aproximações destas derivadas;

2- Métodos Indiretos - fazem uso das derivadas de $f(x)$ ou de aproximações destas derivadas para acelerar a convergência do método numérico.

Apresentam-se a seguir alguns métodos diretos e indiretos comumente utilizados para a solução de problemas de engenharia. A maior parte dos exemplos será aplicada sobre o modelo desenvolvido na Seção 1.3 para o tanque agitado exotérmico, em estado estacionário. Este modelo encontra-se representado pelas Equações (1.58-61), que podem ainda ser representadas na forma:

$$x_A = \frac{1}{1 + \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right)} \quad (2.44)$$

$$x_B = \frac{\Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right)}{1 + \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right)} \quad (2.45)$$

$$x_{Se} - x_S = \frac{(1 - x_A) W_A - x_B W_B}{W_S} \quad (2.46)$$

$$0 = (1 - \gamma) + \beta (\gamma_c - \gamma) + \Delta h_R \frac{\Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right)}{1 + \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right)} \quad (2.47)$$

de forma que a resolução da Equação (2.47) permite obter a solução do problema. Nos exemplos numéricos analisados, considera-se que

$$\beta = 1, \gamma_c = 1, \Theta_R = 50, \Delta E_R = 10, \Delta h_R = 10$$

que representa um conjunto típico de valores em problemas de reação.

2.2.1- Método de Monte Carlo

Seja $f(x)$ uma função, cuja raiz é procurada num certo intervalo $[a,b]$, onde $f(x)$ troca de sinal (ver Figura 2.2 abaixo).

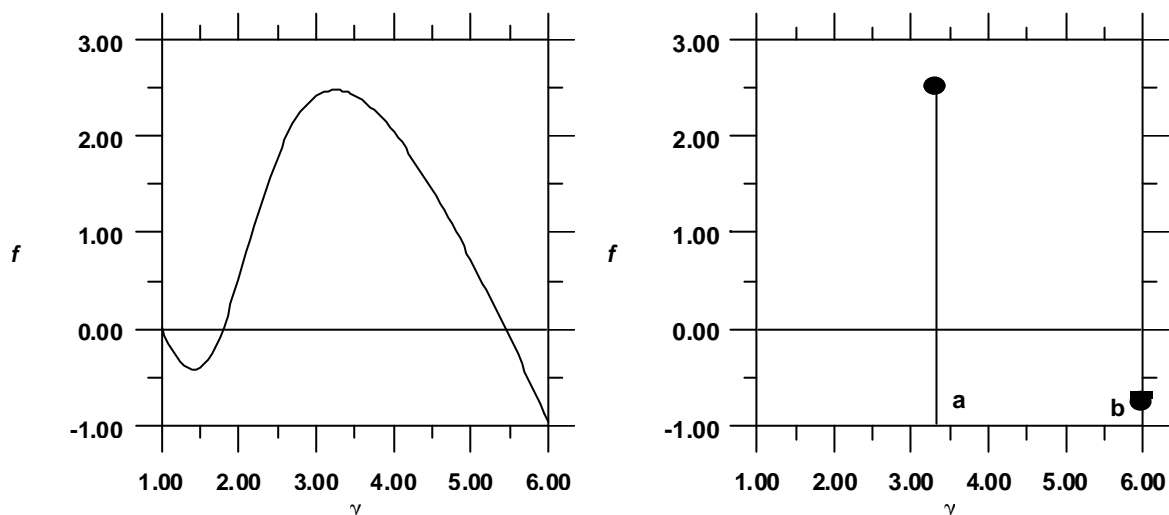


Figura 2.2- Função $f(g)$ (Equação 2.47) e intervalo conhecido onde se encontra a raiz.

O método consiste em gerar pontos aleatoriamente no intervalo $[a,b]$, onde testes numéricos devem ser efetuados; ou seja, onde a função deve ser computada. Seleciona-se então o novo intervalo $[a',b']$ onde a função troca de sinal e onde novos testes serão realizados. O procedimento deve ser repetido até que o tamanho do intervalo $[a',b']$ e/ou $f(a')$ e $f(b')$ sejam menores que uma tolerância especificada.

Vantagens:

1- O método sempre funciona e sempre converge para a solução procurada, qualquer que seja a tolerância especificada.

2- O método é facilmente implementável, já que tabelas de números aleatórios estão disponíveis em qualquer livro de Estatística e rotinas de geração de números aleatórios estão disponíveis na maior parte das bibliotecas de rotinas científicas.

Desvantagens:

- 1- O método é lento e requer o cálculo de $f(x)$ um número elevado de vezes.
- 2- O método exige o conhecimento prévio de uma região onde a raiz se encontra, o que nem sempre é possível.
- 3- A extensão do método para problemas multi-variáveis é complexa.

2.2.2- Método da Bissecção

Dadas as mesmas condições da Figura 2.2, o método consiste em verificar o valor da função no ponto médio do intervalo; ou seja, $c=(a+b)/2$. Se o valor de $f(c)$ tem o mesmo sinal de $f(a)$, o novo intervalo de busca será $[c,b]$; caso contrário, o novo intervalo de busca será $[a,c]$ (ver Figura 2.3). O procedimento é repetido até que o tamanho do intervalo de busca e/ou $f(a)$ e $f(b)$ sejam menores que uma tolerância especificada.

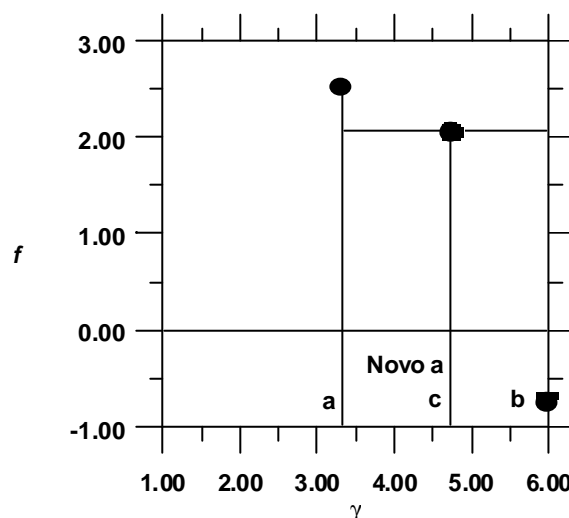


Figura 2.3- Técnica da bissecção

Vantagens:

- 1- O método sempre funciona e sempre converge para a solução procurada, qualquer que seja a tolerância especificada.
- 2- O método é facilmente implementável.
- 3- O método tem desempenho regular e previsível. Após n testes, a incerteza ou tamanho do intervalo remanescente é

$$\varepsilon = \left(\frac{1}{2}\right)^n [b_o - a_o] \Rightarrow n = \frac{\ln\left(\frac{[b_o - a_o]}{\varepsilon}\right)}{\ln 2} \quad (2.48)$$

Sabendo, portanto, que a raiz do problema analisado se encontra no intervalo [3,6], para atingir a precisão de 10^{-4} são necessários 15 passos. A Tabela 2.4 apresenta os resultados obtidos.

Desvantagens:

- 1- O método é lento e requer o cálculo de $f(x)$ um número elevado de vezes.
- 2- O método exige o conhecimento prévio de uma região onde a raiz se encontra, o que nem sempre é possível.
- 3- A extensão do método para problemas multi-variáveis é complexa.

A técnica da bissecção pode ter seu desempenho bastante melhorado se os pontos de avaliação interna (c) são escolhidos de forma apropriada. Algumas destas técnicas melhoradas são conhecidas pelos nomes de Seção Áurea, Técnicas de Fibonacci, etc., mas não serão aqui analisadas por não introduzirem aspectos significativamente novos na análise do problema.

Tabela 2.4- Resultados obtidos com o método da bissecção

a	b	f(a)	f(b)
.300000E+01	.600000E+01	.240766E+01	-.957508E+00
.450000E+01	.600000E+01	.144198E+01	-.957508E+00
.525000E+01	.600000E+01	.315573E+00	-.957508E+00
.525000E+01	.562500E+01	.315573E+00	-.308127E+00
.543750E+01	.562500E+01	.745389E-02	-.308127E+00
.543750E+01	.553125E+01	.745389E-02	-.149477E+00
.543750E+01	.548438E+01	.745389E-02	-.707879E-01
.543750E+01	.546094E+01	.745389E-02	-.316100E-01
.543750E+01	.544922E+01	.745389E-02	-.120637E-01
.543750E+01	.544336E+01	.745389E-02	-.230128E-02
.544043E+01	.544336E+01	.257721E-02	-.230128E-02
.544189E+01	.544336E+01	.138192E-03	-.230128E-02
.544189E+01	.544263E+01	.138192E-03	-.108149E-02
.544189E+01	.544226E+01	.138192E-03	-.471634E-03
.544189E+01	.544208E+01	.138192E-03	-.166718E-03

2.2.3- Método “Regula-Falsi”

Dadas as mesmas condições da Figura 2.2, o método consiste em verificar o valor da função num ponto intermediário do intervalo, obtido por interpolação linear dos dados conhecidos previamente.

$$c = \frac{a f(b) - b f(a)}{f(b) - f(a)} \quad (2.49)$$

Se o valor de $f(c)$ tem o mesmo sinal de $f(a)$, o novo intervalo de busca será $[c,b]$; caso contrário, o novo intervalo de busca será $[a,c]$ (ver Figura 2.4). Note que, neste caso, não é possível garantir que o intervalo $[a,b]$ vai sempre convergir para zero. Por isto, é conveniente modificar o critério de convergência para

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \epsilon_x, \quad |f(x_{k+1})| \leq \epsilon_f \quad (2.50)$$

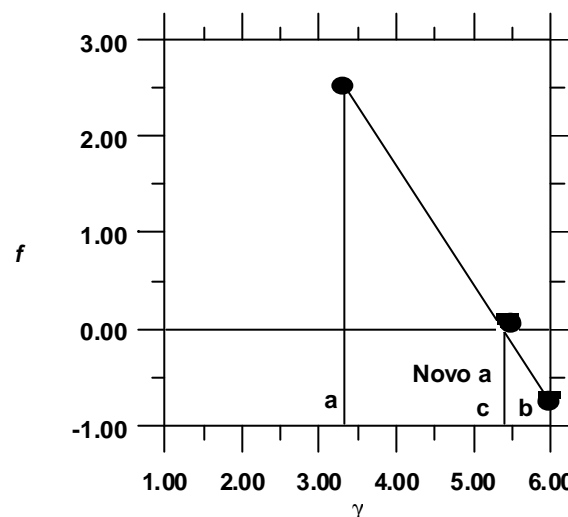


Figura 2.4- Método “Regula-Falsi”

Vantagens:

- 1- O método sempre funciona e sempre converge para a solução procurada, qualquer que seja a tolerância especificada.
- 2- O método é facilmente implementável.
- 3- O método tem desempenho melhor que o da bissecção, muitas vezes comparável ao desempenho dos métodos indiretos. Para fins de comparação, resultados obtidos com o método “Regula-Falsi” são apresentados na Tabela 2.5.

Desvantagens:

- 1- O método exige o conhecimento prévio de uma região onde a raiz se encontra, o que nem sempre é possível.
- 2- A extensão do método para problemas multi-variáveis é complexa.

Tabela 2.5- Resultados obtidos com o método “Regula-Falsi”

a	b	c	f(a)	f(b)	f(c)
.300000E+01	.600000E+01	.514639E+01	.240766E+01	-.957508E+00	.482156E+00
.514639E+01	.600000E+01	.543227E+01	.482156E+00	-.957508E+00	.161474E-01
.543227E+01	.600000E+01	.544169E+01	.161474E-01	-.957508E+00	.478850E-03
.544169E+01	.600000E+01	.544197E+01	.478850E-03	-.957508E+00	.141465E-04
.544197E+01	.600000E+01	.544198E+01	.141465E-04	-.957508E+00	.417877E-06
.544198E+01	.600000E+01	.544198E+01	.417877E-06	-.957508E+00	.123437E-07

2.2.4- Método da Substituição Sucessiva

Seja $f(x)$ uma função cuja raiz é procurada. Imaginemos que é possível colocar a função $f(x)=0$ na forma $x= g(x)$. A idéia fundamental é dar uma interpretação iterativa a esta forma alternativa de representar a função $f(x)=0$, para a busca da raiz. Assim, a partir de uma aproximação inicial, podem ser obtidas aproximações melhoradas da raiz de forma iterativa.

Exemplo 2.6: Seja a Equação (2.47), cuja raiz é procurada

$$0 = 2(1 - \gamma) + 500 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)}{1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)} \quad (2.51)$$

Esta mesma função pode ser escrita na forma

$$\gamma = 1 + 250 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)}{1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)} \quad (2.52)$$

que ganha a forma iterativa

$$\gamma_{k+1} = 1 + 250 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma_k}\right)}{1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma_k}\right)} \quad (2.53)$$

Partindo da estimativa inicial $\gamma_0=6$, obtêm-se os resultados apresentados na Tabela 2.6.

Tabela 2.6- Resultados obtidos com substituição sucessiva - $g_0=6$.

γ_k	γ_{k+1}
.600000E+01	.552125E+01
.552125E+01	.545492E+01
.545492E+01	.544414E+01
.544414E+01	.544234E+01
.544234E+01	.544204E+01
.544204E+01	.544199E+01
.544199E+01	.544198E+01

É importante observar que a definição da forma recursiva não é única. Por exemplo, a Equação (2.51) poderia também ser colocada na forma

$$\gamma = 2 - \gamma + 500 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)}{1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)} \quad (2.54)$$

$$\gamma_{k+1} = 2 - \gamma_k + 500 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma_k}\right)}{1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma_k}\right)} \quad (2.55)$$

cujo desempenho está mostrado na Tabela 2.7 abaixo.

Tabela 2.7- Resultados obtidos com substituição sucessiva - $g_0=6$.

γ_k	γ_{k+1}
.600000E+01	.504249E+01
.504249E+01	.568876E+01

.568876E+01	.527182E+01
.527182E+01	.555196E+01
.555196E+01	.536758E+01
.536758E+01	.549087E+01
.549087E+01	.540920E+01
.540920E+01	.546366E+01
.546366E+01	.542750E+01
.542750E+01	.545158E+01
.545158E+01	.543558E+01
.543558E+01	.544623E+01
.544623E+01	.543915E+01
.543915E+01	.544386E+01
.544386E+01	.544072E+01
.544072E+01	.544281E+01
.544281E+01	.544142E+01
.544142E+01	.544235E+01
.544235E+01	.544173E+01
.544173E+01	.544214E+01
.544214E+01	.544187E+01
.544187E+01	.544205E+01
.544205E+01	.544193E+01
.544193E+01	.544201E+01
.544201E+01	.544196E+01
.544196E+01	.544199E+01
.544199E+01	.544197E+01
.544197E+01	.544198E+01
.544198E+01	.544197E+01
.544197E+01	.544198E+01

Portanto, é óbvio que a forma escolhida para a recursão influencia o desempenho da técnica. A depender da forma recursiva, a técnica pode levar a convergência rápida, lenta ou nem mesmo convergir. Para que possamos compreender estes resultados, é conveniente perceber que a técnica da substituição sucessiva procura o ponto no qual a curva de iteração $y=g(x)$ se iguala à reta $y=x$, rebatendo os valores obtidos na curva $g(x)$ continuamente sobre a reta de 45 graus. O procedimento está ilustrado nas Figuras 2.5-8 abaixo.

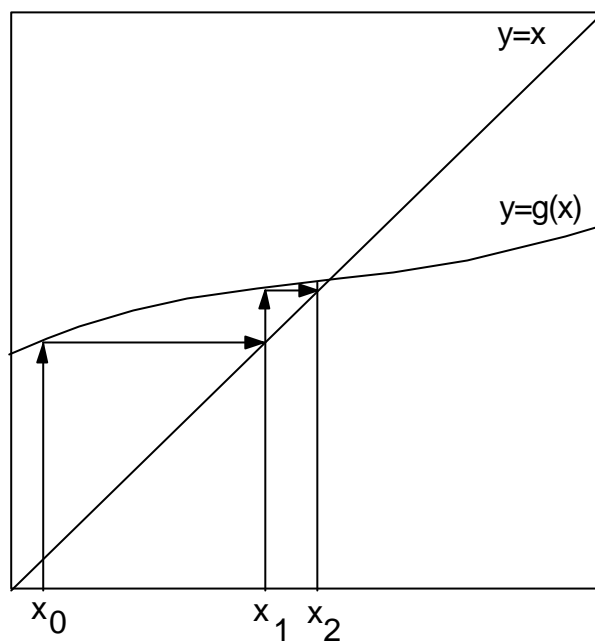


Figura 2.5 - Convergência uniforme do método da substituição sucessiva.

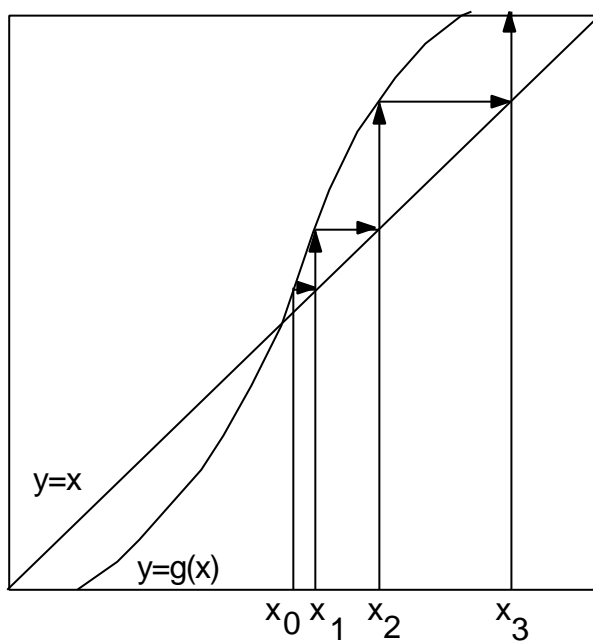


Figura 2.6 - Divergência uniforme do método da substituição sucessiva.

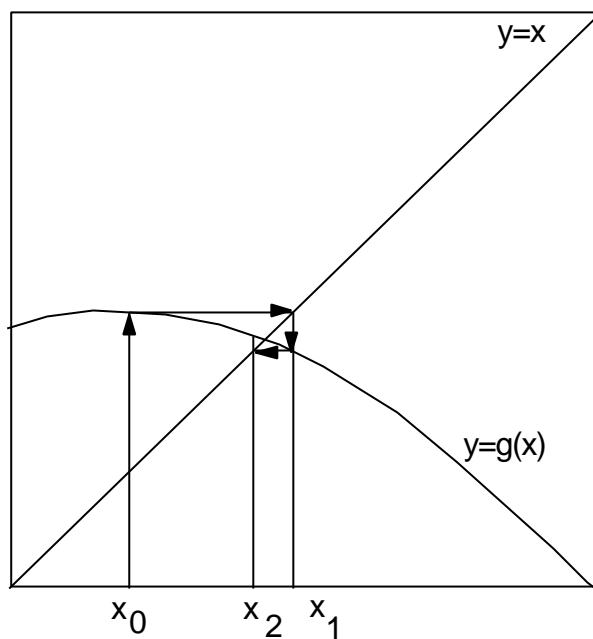


Figura 2.7 - Convergência oscilatória do método da substituição sucessiva.

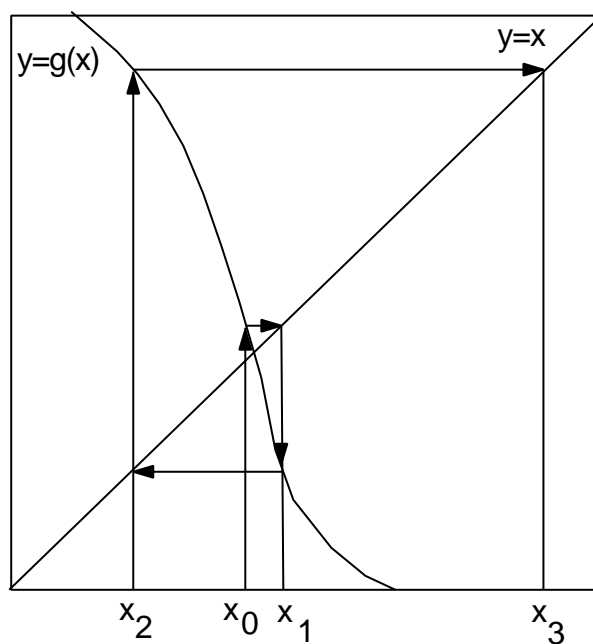


Figura 2.8 - Divergência oscilatória do método da substituição sucessiva.

As questões que se colocam, então, são: Quando o método da substituição sucessiva converge? Como podemos compreender se uma formulação iterativa do problema é melhor do que uma outra?

Para respondermos estas perguntas, é conveniente admitir que conhecemos a raiz do problema (x^*) e que começamos o procedimento iterativo nas proximidades desta raiz. Neste caso, pode-se utilizar a expansão em série de Taylor nas proximidades de x^* para escrever:

$$x_{k+1} = g(x_k) \quad (2.56)$$

$$x_{k+1} \approx g(x^*) + \left. \frac{dg}{dx} \right|_{x^*} (x_k - x^*) + \dots \quad (2.57)$$

$$x_{k+1} \approx x^* + \left. \frac{dg}{dx} \right|_{x^*} (x_k - x^*) + \dots \quad (2.58)$$

$$\varepsilon_{k+1} \approx \left. \frac{dg}{dx} \right|_{x^*} \varepsilon_k \quad (2.59)$$

onde ε_k é o desvio em relação à raiz x^* na iteração k ($\varepsilon_k = x_k - x^*$). Como o desvio na iteração posterior é uma mera transformação linear do desvio da iteração anterior, diz-se que o método da substituição sucessiva converge linearmente ou que é de ordem 1.

Olhando a Equação (2.59), observa-se facilmente que o desvio na iteração seguinte diminui se

$$\left| \left. \frac{dg}{dx} \right|_{x^*} \right| < 1 \quad (2.60)$$

que é o critério de convergência do método da substituição sucessiva. Quanto mais próximo de zero for a derivada de g em relação a x , calculada na raiz do problema, mais rapidamente converge a técnica proposta. Além disto, se a derivada for negativa, os desvios absolutos obtidos em iterações sucessivas ficam trocando de sinal, o que significa que o procedimento iterativo apresenta comportamento oscilatório.

Exemplo 2.7: No Exemplo 2.6, a fórmula de recursão utilizada tem como derivada

$$\frac{dg}{d\gamma} = 250 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right) \left(\frac{10}{\gamma^2}\right)}{\left(1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)\right)^2} \quad (2.61)$$

que na raiz $\gamma = 5.44197$ assume o valor 0.167. Logo, como já visto, a técnica converge. Já a função de iteração mostrada na Equação (2.55) tem como derivada

$$\frac{dg}{d\gamma} = -1 + 500 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right) \left(\frac{10}{\gamma^2}\right)}{\left(1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)\right)^2} \quad (2.62)$$

que na raiz assume o valor -0.666. Por isto, o procedimento iterativo oscila e converge mais lentamente.

Como nunca sabemos de ante-mão qual é a raiz procurada, em problemas práticos torna-se necessário calcular a derivada da função de iteração em todo o intervalo de busca da raiz, para que se garanta que o procedimento converge.

Para estimarmos o erro da aproximação, podemos utilizar as relações já desenvolvidas da seguinte forma:

$$x_{k-1} - x^* = x_{k-1} - x_k + x_k - x^* \quad (2.63)$$

$$|x_{k-1} - x^*| \leq |x_{k-1} - x_k| + |x_k - x^*| \quad (2.64)$$

$$|x_{k-1} - x^*| \leq |x_{k-1} - x_k| + \left| \frac{dg}{dx} \right|_{x^*} |x_{k-1} - x^*| \quad (2.65)$$

$$|x_{k-1} - x^*| \leq \frac{1}{1 - \left| \frac{dg}{dx} \right|_{x^*}} |x_{k-1} - x_k| \quad (2.66)$$

$$|x_k - x^*| \leq \frac{\left| \frac{dg}{dx} \right|_{x^*}}{1 - \left| \frac{dg}{dx} \right|_{x^*}} |x_{k-1} - x_k| \quad (2.67)$$

ou seja, é possível estimar o erro máximo cometido a partir das sucessivas aproximações obtidas durante o esquema iterativo.

Finalmente, não é difícil compreender que o método pode ser facilmente estendido a problemas multi-variáveis. Neste caso, as transformações ficam na forma:

$$f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ g_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ g_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix} \quad (2.68)$$

de forma que a Equação (2.59) passa a ter a seguinte forma vetorial:

$$\mathbf{e}_{k+1} \approx \mathbf{J}_g^* \mathbf{e}_k \quad (2.69)$$

onde \mathbf{J}_g^* é a matriz de derivadas de $\mathbf{g}(\mathbf{x})$, ou matriz Jacobiana de $\mathbf{g}(\mathbf{x})$, que contém todas as derivadas de \mathbf{g} em relação a todas as variáveis x_i , definida como:

$$\mathbf{J}_g^* = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (2.70)$$

Para garantir a convergência do esquema iterativo, agora, condições mais restritivas resultam da Equação (2.69). Para tanto, a matriz Jacobiana precisa ser diagonalizada, como feito algumas vezes na Seção anterior sobre resolução de sistemas lineares. Neste caso, prova-se que, para que haja convergência, é necessário que todos os valores característicos de \mathbf{J}_g^* tenham módulo menor do que 1. Apenas para lembrar, valores característicos são as raízes λ_i da Equação (2.71) mostrada abaixo

$$\det (\mathbf{J}_g^* - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (2.71)$$

Além disto, a Equação (2.67) pode ser reescrita na forma:

$$|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*| \leq (\mathbf{I} - \mathbf{J}_g^*)^{-1} \mathbf{J}_g^* |\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}_k| \quad (2.72)$$

Vantagens:

- 1- O método é facilmente implementável em problemas mono e multi-variáveis;
- 2- O método não necessita da definição prévia de onde a raiz se encontra;
- 3- O erro pode ser facilmente estimado.

Desvantagens:

- 1- Não há garantia de convergência do método sem a análise prévia da função $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ e a convergência é tanto mais difícil quanto maior a dimensão do problema.

2.2.5- Método de Newton-Raphson

Seja $f(x)$ uma função cuja raiz é procurada. Admitamos, como na Seção anterior, que $f(x)$ pode ser expandida em série de Taylor nas proximidades de um certo ponto x_k . Neste caso,

$$f(x^*) \approx f(x_k) + \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_k} (x - x_k) + \dots \quad (2.73)$$

Admitindo-se que estamos suficientemente próximo da raiz e que a aproximação linear é boa, a Equação (2.73) pode ser utilizada para se estimar o valor da raiz

$$f(x^*) = 0 \approx f(x_k) + \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_k} (x^* - x_k) + \dots \quad (2.74)$$

$$x^* = x_k - \frac{f(x_k)}{\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_k}} \quad (2.75)$$

que pode ser obviamente colocada numa forma recursiva como

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_k}} \quad (2.76)$$

A Equação (2.76) é a essência do método de Newton-Raphson. Esta técnica iterativa recebe comumente o nome de Newton-Raphson clássico porque aproximações de $f(x)$ com mais termos podem também ser utilizadas, embora o sejam raramente, em virtude da necessidade de se computar derivadas de ordem superior e de não apresentarem desempenho significativamente melhor do que aquele obtido com a Equação (2.76).

O método de Newton-Raphson pode ser ilustrado como na Figura 2.9. Vê-se que a aproximação da raiz é obtida recursivamente como extrapolações lineares da função, a partir de pontos prévios estimados.

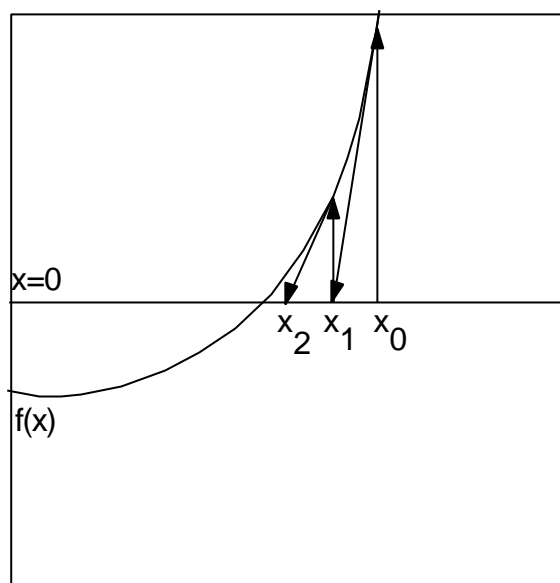


Figura 2.9 - Interpretação geométrica do método de Newton-Raphson.

Exemplo 2.7: Seja a Equação (2.47), cuja raiz é procurada

$$f(\gamma) = 0 = 2(1 - \gamma) + 500 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)}{1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)} \quad (2.77)$$

$$\frac{df}{d\gamma} = 0 = -2\gamma + 500 \frac{\exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right) \left(\frac{10}{\gamma^2}\right)}{\left(1 + 50 \exp\left(\frac{-10}{\gamma}\right)\right)^2} \quad (2.79)$$

Partindo-se de $\gamma_0=6$ e aplicando o algoritmo de Newton-Raphson, obtêm-se os resultados apresentados na Tabela 2.8.

Tabela 2.8 - Resultados obtidos com Newton-Raphson - $\gamma_0=6$

γ_k	f_k	$(df/d\gamma)_k$	γ_{k+1}
.600000E+01	-.957508E+00	-.175949E+01	.545580E+01
.545580E+01	-.230453E-01	-.166811E+01	.544199E+01
.544199E+01	-.199642E-04	-.166521E+01	.544198E+01
.544198E+01	-.151540E-10	-.166521E+01	.544198E+01

Do exemplo anterior, vê-se que a técnica de Newton-Raphson converge usualmente de forma muito mais rápida que no caso anterior. Para que isso possa ser colocado num contexto mais rigoroso, é conveniente fazer uma análise de erros mais detalhada. Vejamos primeiramente que a técnica obedece a fórmula geral:

$$(x_{k+1} - x_k) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_k} + f(x_k) = 0 \quad (2.80)$$

Fazendo a expansão em série de Taylor nas proximidades da raiz até os termos de segunda ordem (em virtude da derivada):

$$(x_{k+1} - x_k) \left(\left. \frac{df}{dx} \right|_{x^*} + \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x^*} (x_k - x^*) \right) + \left(f(x^*) + \left. \frac{df}{dx} \right|_{x^*} (x_k - x^*) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x^*} (x_k - x^*)^2 \right) = 0 \quad (2.81)$$

Lembrando que $f(x^*)=0$ e utilizando a variável desvio $\epsilon = x - x^*$, chega-se a:

$$\epsilon_{k+1} = \frac{\left(\left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x^*} \right)}{2 \left(\left. \frac{df}{dx} \right|_{x^*} \right)} \epsilon_k^2 \quad (2.82)$$

o que significa dizer que o método de Newton-Raphson SEMPRE converge (a não ser que a derivada de $f(x)$ na raiz seja identicamente igual a zero) se a aproximação está SUFICIENTEMENTE próxima da raiz. Isto porque, quando ϵ_k é pequeno, ϵ_{k+1} é muito menor que ϵ_k . (Diz a Lei de Murphy do chute inicial que a sua estimativa inicial não estará suficientemente próxima da solução, de forma que não há garantia na prática de que o método convergirá !!!!) Devido à forma da Equação (2.82), diz-se que o método de Newton-Raphson apresenta convergência quadrática.

O método de Newton-Raphson pode ser facilmente estendido para problemas multi-dimensionais na forma:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{J}_f^{-1} \mathbf{f}_k \quad (2.83)$$

onde \mathbf{J}_f é a matriz Jacobiana da função $\mathbf{f}(\mathbf{x})$.

Exemplo 2.8: Seja o modelo do tanque com reação, descrito originalmente na forma:

$$f_1(x_A, \gamma) = 1 - x_A \left(1 + \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \right) \quad (2.84)$$

$$f_2(x_A, \gamma) = (1 - \gamma) + \beta (\gamma_c - \gamma) + \Delta h_R x_A \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \quad (2.85)$$

cujas matrizes Jacobiana é dada por:

$$\mathbf{J}_f = \begin{bmatrix} -\left(1 + \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right)\right) & -x_A \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \left(\frac{\Delta E_R}{\gamma^2}\right) \\ \Delta h_R \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) & -1 - \beta + \Delta h_R x_A \Theta_R \exp\left(\frac{-\Delta E_R}{\gamma}\right) \left(\frac{\Delta E_R}{\gamma^2}\right) \end{bmatrix} \quad (2.86)$$

Partindo-se de $x_A=0$ e $\gamma_0=6$ e aplicando o algoritmo de Newton-Raphson, obtêm-se os resultados apresentados na Tabela 2.9.

Vantagens:

- 1- O método não necessita da definição prévia de onde a raiz se encontra;
- 2- O método sempre converge, se a estimativa inicial da raiz for boa.

Tabela 2.9 - Resultados obtidos com o método de Newton-Raphson - $x_{A0}=0$ e $\gamma_0=6$

x_{Ak}	g_k	f_{1k}	f_{2k}	x_{Ak+1}	g_{k+1}
.000000E+00	.600000E+01	.100000E+01	-.100000E+02	.957508E-01	.552125E+01
.957508E-01	.552125E+01	.121677E+00	-.121677E+01	.111174E+00	.544413E+01
.111174E+00	.544413E+01	.321771E-02	-.321771E-01	.111604E+00	.544198E+01
.111604E+00	.544198E+01	.251297E-05	-.251297E-04	.111604E+00	.544198E+01

Desvantagens:

- 1- O método requer o cálculo das derivadas da função, o que pode inviabilizar sua implementação em muitos casos;
- 2- O método requer a inversão da matriz Jacobiana em cada iteração, o que consome bastante tempo computacional e pode tornar o método lento, a despeito da redução sensível do número total de iterações.

Visando manter as características do método de Newton-Raphson e eliminar a sua principal desvantagem, que é o de exigir o cálculo e inversão da matriz de derivadas, uma ampla família de técnicas numéricas foi desenvolvida, mas não será aqui discutida. Textos de métodos numéricos devem ser consultados para estudos adicionais. Fica como exemplo apenas o conhecido método da secante, para problemas uni-variáveis, onde a derivada é substituída por uma aproximação numérica na forma:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k) \quad (2.87)$$

Repare, no entanto, que a extensão do método da secante para problemas multi-variáveis não é trivial.

2.2.6- Multiplicidades

Ao contrário de sistemas lineares de equações, que admitem apenas uma única solução, sistemas não lineares de equações podem apresentar soluções diferentes para um mesmo conjunto de equações. Vejamos, por exemplo, os resultados obtidos para o tanque de reação quando utilizamos as estimativas iniciais $x_{A0}=1$, $\gamma_0=1$ e $x_{A0}=0.5$, $\gamma_0=2$.

É impressionante descobrir que o tanque de reação possa operar de até três formas distintas, mantidas as mesmas condições de operação e o mesmo conjunto de parâmetros!!!! Este fenômeno é extremamente relevante para o engenheiro, haja visto que certamente se deseja que o tanque real atinja uma das três possíveis soluções do problema (a que leva ao maior lucro da operação). Para que isto seja feito, é necessário desenvolver uma estratégia apropriada de partida do equipamento. O estudo de fenômenos relacionados à existência de multiplicidades e às consequências disto no projeto e operação de equipamentos é uma das áreas de pesquisa de maior interesse do Laboratório de Modelagem, Simulação e Controle de Processos do Programa de Engenharia Química da COPPE.

Tabela 2.10 - Resultados obtidos com o método de Newton-Raphson - $x_{A0}=1$ e $g_0=1$

x_{Ak}	g_k	f_{1k}	f_{2k}	x_{Ak+1}	g_{k+1}
.100000E+01	.100000E+01	-.227000E-02	.227000E-01	.997446E+00	.101277E+01
.997446E+00	.101277E+01	-.143947E-04	.143947E-03	.997430E+00	.101285E+01
.997430E+00	.101285E+01	-.621365E-09	.621365E-08	.997430E+00	.101285E+01

Tabela 2.11 - Resultados obtidos com o método de Newton-Raphson - $x_{A0}=0.5$ e $g_0=2$

x_{Ak}	g_k	f_{1k}	f_{2k}	x_{Ak+1}	g_{k+1}
.500000E+00	.200000E+01	.331551E+00	-.315513E+00	.890434E+00	.154783E+01
.890434E+00	.154783E+01	.399446E-01	-.399446E+00	.783862E+00	.208069E+01
.783862E+00	.208069E+01	-.104451E+00	.104451E+01	.829402E+00	.185299E+01
.829402E+00	.185299E+01	-.173270E-01	.173270E+00	.840877E+00	.179561E+01
.840877E+00	.179561E+01	-.122486E-02	.122486E-01	.841822E+00	.179089E+01
.841822E+00	.179089E+01	-.839945E-05	.839945E-04	.841829E+00	.179086E+01
.841829E+00	.179086E+01	-.406291E-09	.406291E-08	.841829E+00	.179086E+01

Exercício 2.6: Seja a função não linear descrita abaixo

$$2x - 1 - 2 \sin \alpha = 0 \quad (2.88)$$

Calcule a raiz do problema usando cada uma das técnicas apresentadas anteriormente.

Exercício 2.7: Reconstrua o modelo do reator supondo que a reação é de segunda ordem, como na equação abaixo:

$$R_A = -K_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right) C_A^2 \quad (2.89)$$

Para o mesmo conjunto de parâmetros utilizado nos exemplos anteriores, calcule as condições de operação no estado estacionário.

Capítulo 3

O Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas pode ser utilizado para resolver problemas de valor de contorno ou valor inicial, envolvendo equações diferenciais ordinárias ou parciais. Assim, este método pode ser usado para solucionar as equações de modelos a parâmetros concentrados ou distribuídos.

Neste capítulo, será vista uma introdução ao método das diferenças finitas que permitirá a solução de problemas de valor inicial e de alguns problemas de valor de contorno. A solução de problemas com convecção dominante ou a própria solução de um escoamento estão fora do escopo deste curso.

3.1- Introdução

Considere, primeiramente, o problema formado por equações diferenciais ordinárias (EDO's). Como já vimos, existem dois tipos de problema. Um deles é o *problema de valor inicial*, que foi exemplificado através dos sistemas formados pelas Equações (1.54) a (1.57) e pelas Equações (1.78) a (1.80), e que assume a forma geral abaixo

$$\begin{aligned} F(t, y(t), \dot{y}(t)) &= 0, \quad t > 0 \\ t = t_o, \quad y &= y_o, \quad \dot{y} = \dot{y}_o \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde t é a variável independente, usualmente o tempo, y é um vetor de variáveis dependentes, \dot{y} é a sua derivada em relação a t , F é um vetor de funções de t , y e \dot{y} , e y_o e \dot{y}_o são vetores que representam as condições iniciais do problema. Note que o domínio da variável t é semi-infinito, e que a solução deste problema deverá ser obtida marchando-se no tempo a partir da condição inicial. Caso exista pelo menos uma função dentro do vetor F que não dependa de nenhum elemento do vetor \dot{y} , a Equação (3.1) representa um sistema de equações algébrico-diferenciais (sistema de EAD).

O outro tipo de problema é o *de valor de contorno*, que foi exemplificado pelas Equações (1.96) a (1.98), e que assume a seguinte forma geral

$$\begin{aligned} F(x, y(x), \dot{y}(x), \ddot{y}(x)) &= 0, \quad x_o < x < x_f \\ x = x_o, \quad g_o(x, y, \dot{y}) &= 0 \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$x = x_f, \quad g_f(x, y, \dot{y}) = 0$$

onde x é a variável independente, usualmente uma coordenada espacial, y é o vetor de variáveis dependentes, \dot{y} e \ddot{y} são as suas derivadas primeira e segunda, respectivamente, em relação a x , F é um vetor de funções e g_o e g_f são vetores de funções que representam as condições de contorno nos limites do domínio do sistema de equações.

O objetivo do *método das diferenças finitas* é transformar um problema composto por equações diferenciais em um problema formado por equações algébricas. O primeiro passo nesta direção é a chamada *discretização* do domínio da variável independente. A discretização consiste em dividir o domínio de cálculo em um certo número de subdomínios. Para um domínio semi-infinito, existem infinitos subdomínios, como mostra a Figura 3.1(a). Quando o domínio é finito, o número de subdomínios também o é, digamos que seja J , como mostra a Figura 3.1(b). Em qualquer caso, estipulam-se os pontos que delimitem os subdomínios, que, no caso de um domínio finito, são iguais a $(J+1)$ em número.

Note que os subdomínios podem ter a mesma dimensão, gerando uma *malha uniforme*, ou não, formando uma *malha não-uniforme*. Embora as discretizações baseadas no primeiro tipo de malha sejam mais simples, existem vantagens numéricas, em muitos casos, no uso de malhas não-uniformes.

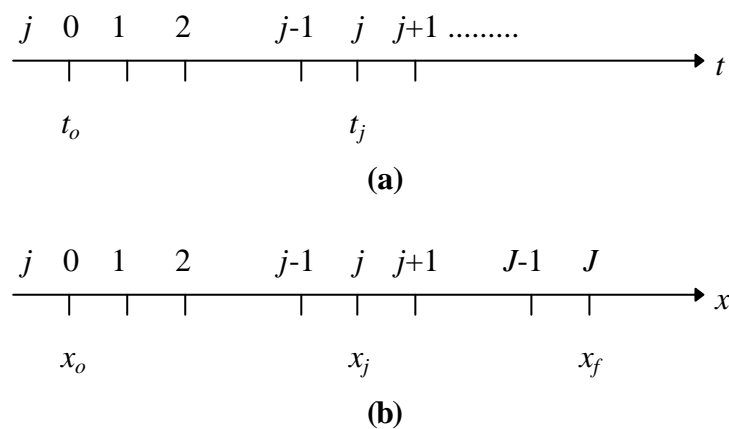


Figura 3.1 - Discretização de domínios unidimensionais: (a) semi-infinito, (b) finito.

O segundo passo é gerar aproximações para as derivadas das variáveis dependentes que aparecem nas equações diferenciais, nos pontos discretos x_j (ou t_j), isto é, obter \dot{y}_j e \ddot{y}_j , utilizando apenas os valores de y nestes pontos discretos, y_j . Estas aproximações das derivadas de uma função por diferenças finitas serão vistas na próxima seção.

Finalmente, aplicam-se as equações diferenciais ordinárias, Equação (3.1) ou (3.2), aos pontos discretos x_j , substituindo as aproximações obtidas para \dot{y}_j e \ddot{y}_j . Isto gera sistemas de equações algébricas na forma

$$f(y_j) = 0, \quad (3.3)$$

onde f é um vetor de equações algébricas que depende dos valores desconhecidos y_j , sendo que esta dependência varia conforme o tipo de problema, de contorno ou inicial. Este sistema de equações, quer seja ele linear ou não-linear, pode ter a sua solução obtida pelos métodos descritos no capítulo anterior. Note que a solução assim obtida para o problema consistirá em uma sequência de pontos, x_j (ou t_j), onde se conhecem os valores de y , y_j .

Ficam claras, agora, duas características do método de diferenças finitas: a aplicação das equações diferenciais é local, isto é, em cada ponto x_j (ou t_j), e a solução obtida é composta por um conjunto enumerável de pontos onde os valores da solução são conhecidos.

O método das diferenças finitas é o primeiro dos métodos numéricos que veremos aqui que é baseado na discretização do domínio da equação diferencial. Os métodos de volumes finitos e de elementos finitos também se baseiam em uma discretização do domínio, mas com diferentes características na obtenção de uma solução aproximada das equações diferenciais. Já o método dos resíduos ponderados, utilizando aproximação polinomial, tem um caráter global e não utiliza uma discretização do domínio.

3.2- Aproximação de Derivadas por Diferenças Finitas

Como visto acima, um dos passos necessários na solução de equações diferenciais por diferenças finitas é a aproximação das derivadas presentes nestas equações, aplicadas a um dado ponto arbitrário, x_j ou t_j . Uma maneira simples de se obter estas aproximações é através do uso da expansão de uma função em *série de Taylor* em torno de um dado ponto. Seja x_j este ponto base, podemos escrever o valor de $y(x_{j+1}) = y_{j+1}$, pela seguinte série infinita

$$y_{j+1} = y_j + \dot{y}_j (x_{j+1} - x_j) + \ddot{y}_j \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{2} + \ddot{\ddot{y}}_j \frac{(x_{j+1} - x_j)^3}{3!} + y_j^{(4)} \frac{(x_{j+1} - x_j)^4}{4!} + \dots \quad (3.4)$$

enquanto que o valor de $y(x_{j-1}) = y_{j-1}$ é dado por

$$y_{j-1} = y_j - \dot{y}_j (x_j - x_{j-1}) + \ddot{y}_j \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2} - \ddot{\ddot{y}}_j \frac{(x_j - x_{j-1})^3}{3!} + y_j^{(4)} \frac{(x_j - x_{j-1})^4}{4!} - \dots \quad (3.5)$$

Considere, agora, a necessidade de se aproximar o valor de \dot{y}_j , o que será feito utilizando as Equações (3.4) e (3.5). Estas equações podem ser escritas de forma mais compacta através da definição do comprimento do domínio j

$$h_j = x_j - x_{j-1} \quad (3.6)$$

Desta forma, multiplicando a Equação (3.5) por h_{j+1}^2 e diminuindo o resultado da Equação (3.4) multiplicada por h_j^2 , obtemos a seguinte expressão, onde \ddot{y}_j foi eliminado

$$h_j^2 y_{j+1} - h_{j+1}^2 y_{j-1} = (h_j^2 - h_{j+1}^2) y_j + (h_j^2 h_{j+1} + h_j h_{j+1}^2) \dot{y}_j + \ddot{y}_j \frac{h_j^2 h_{j+1}^3 + h_j^3 h_{j+1}^2}{3!} + y_j^{(4)} \frac{h_j^2 h_{j+1}^4 - h_j^4 h_{j+1}^2}{4!} + \dots \quad (3.7)$$

que permite escrever uma aproximação para \dot{y}_j por

$$\dot{y}_j = \frac{h_j^2 y_{j+1} + (h_{j+1}^2 - h_j^2) y_j - h_{j+1}^2 y_{j-1}}{h_j^2 h_{j+1} + h_j h_{j+1}^2} + O\left(\frac{h_j^2 h_{j+1}^3 + h_j^3 h_{j+1}^2}{h_j^2 h_{j+1} + h_j h_{j+1}^2}\right) \quad (3.8)$$

onde $O(z)$ indica que a aproximação tem ordem de grandeza de z , isto é, o valor exato da derivada da função no ponto considerado é obtido a partir da expressão aproximada, no limite quando $z \rightarrow 0$. Esta ordem de grandeza é oriunda do termo de menor ordem (ou primeiro termo) entre aqueles que envolvem as derivadas de maior ordem. O conjunto destes termos, ou a sua forma simplificada de representação por ordem de grandeza, é denominado de erro de truncamento.

Para uma malha uniforme

$$h_j = h, \quad \forall j \quad (3.9)$$

de modo que a aproximação dada pela Equação (3.8) simplifica para

$$\dot{y}_j = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} + O(h^2) \quad (3.10)$$

que é a chamada aproximação por *diferença central* da derivada primeira de y .

Podemos, ainda, usar as Equações (3.4) e (3.5), para obter mais duas aproximações para a derivada primeira de y , que para uma malha uniforme são dadas por

$$\dot{y}_j = \frac{y_j - y_{j-1}}{h} + O(h) \quad (3.11)$$

que é obtida a partir da Equação (3.5), sendo chamada de aproximação por *diferença para trás* (“*backward differentiation*”), e

$$\dot{y}_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} + O(h) \quad (3.12)$$

que é obtida a partir da Equação (3.4), sendo chamada de aproximação por *diferença para frente* (“*forward differentiation*”).

Note que as Equações (3.11) e (3.12) são obtidas a partir de apenas uma expansão em série de Taylor, envolvendo, pois, valores da função em somente dois pontos. Por outro lado, a Equação (3.10) foi obtida a partir de duas expansões da função em série de Taylor, aparecendo três valores funcionais na Equação (3.8), muito embora um deles não apareça na Equação (3.10), devido ao seu coeficiente ser nulo para malhas uniformes. Isto se reflete na ordem de aproximação das três equações, pois as Equações (3.11) e (3.12) são de primeira ordem, enquanto que a Equação (3.10) é de segunda ordem.

Do exposto, fica claro que quanto maior o número de valores funcionais utilizados na obtenção de uma expressão aproximada, maior tenderá a ser a ordem de aproximação da mesma. Isto era esperado, pois a ordem de aproximação deve aumentar com o aumento da informação utilizada na construção da aproximação. Por exemplo, a utilização das Equações (3.4) e (3.5) para obter a Equação (3.8) foi feita de modo a eliminar o primeiro termo do erro de truncamento, isto é, o termo em \ddot{y}_j , resultando daí a maior ordem de aproximação.

As Equações (3.4) e (3.5) podem ser utilizadas para obter uma aproximação para \ddot{y}_j se as mesmas forem combinadas de modo a eliminar o termo em \dot{y}_j . Assim, multiplicando a Equação (3.4) por h_j e somando o resultado à Equação (3.5) multiplicada por h_{j+1} , obtém-se

$$\ddot{y}_j = \frac{h_j y_{j+1} - (h_j + h_{j+1}) y_j + h_{j+1} y_{j-1}}{h_{j+1} h_j \frac{h_{j+1} + h_j}{2}} - \ddot{y}_j \frac{2 h_{j+1}^2 - h_j^2}{3! h_{j+1} + h_j} - y_j^{(4)} \frac{2 h_{j+1}^3 + h_j^3}{4! h_{j+1} + h_j} + \dots \quad (3.13)$$

O segundo termo do lado esquerdo da Equação (3.13) é da ordem de $h_{j+1} - h_j$, que se anula para malhas uniformes, para as quais a aproximação simplifica para

$$\ddot{y}_j = \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (3.14)$$

que é a chamada aproximação por *diferenças centrais* da derivada segunda de y .

Note que a aproximação dada pela Equação (3.14) é de segunda ordem devido a um cancelamento fortuito do primeiro termo do erro de truncamento. Para malhas não-uniformes, isto não acontece e a expressão da derivada segunda dada pela Equação (3.13) é de segunda ordem apenas de forma aproximada.

A Equação (3.14) envolve três valores funcionais para descrever uma aproximação da derivada segunda da função, o que é o mínimo necessário para isto, já que a derivada primeira tem que ser eliminada da forma final e, portanto, pelo menos duas expansões em série de Taylor têm que ser consideradas.

Nada impede que seja utilizada uma outra expansão em série de Taylor para melhorar a ordem de aproximação das equações acima. Por exemplo, poder-se-ia utilizar a expansão para o valor funcional y_{j-2} (ou y_{j+2}) para eliminar o primeiro termo do erro de truncamento da Equação (3.14), obtendo-se, assim, uma aproximação de ordem h^3 . Entretanto, como veremos mais adiante, aproximações envolvendo mais de três valores funcionais em pontos adjacentes apresentam uma maior dificuldade de solução das equações algébricas obtidas pelo processo de discretização. Devido a isto, restringimo-nos aqui às aproximações vistas acima.

3.3- Solução de EDO's por Diferenças Finitas

A substituição das derivadas existentes nas equações diferenciais pelas suas aproximações por diferenças finitas leva a sistemas de equações algébricas, que solucionam a EDO, ou sistema de EDO's, de forma aproximada.

Nesta seção, este procedimento será visto para problemas de valor de contorno através de exemplos, onde será introduzido o tratamento necessário à incorporação das condições de contorno do problema, comentando-se, brevemente, o método de solução das equações discretizadas.

Veremos, também, a aplicação das diferenças finitas ao problema geral de valor inicial com uma equação diferencial ordinária na sua forma normal. Diversos métodos de integração numérica de baixa ordem serão, então, desenvolvidos. Em seguida, serão vistos métodos de integração mais precisos: os de Runge-Kutta, os de múltiplos pontos e os BDF (*"Backward Differentiation Formula"*). Finalmente, o conceito de sistemas rígidos será abordado.

3.3.1- Problemas de valor de contorno

Considere o problema de valor de contorno dado pelas Equações (1.96) a (1.98), reproduzidas abaixo.

$$\begin{aligned} Pe \frac{d\phi}{dx} + \frac{d^2\phi}{dx^2} - 2Nu\phi &= 0 \\ x=0, \quad \phi &= 0 \\ x=X, \quad \phi &= 1 \end{aligned} \quad (3.15)$$

Seja o domínio discretizado por uma malha uniforme com J subdomínios de comprimento $h = X/J$, conforme a Figura 3.1(b), com $x_o = 0$ e $x_f = X$. Aplicando a equação diferencial acima nos pontos onde não se conhecem os valores funcionais de ϕ , temos

$$Pe \dot{\phi}_j + \ddot{\phi}_j - 2Nu\phi_j = 0, \quad j = 1, \dots, J-1 \quad (3.16)$$

Utilizando as aproximações das derivadas primeira e segunda por diferenças centrais, conforme as Equações (3.10) e (3.14), a Equação (3.16) pode ser escrita por

$$Pe h(\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) + 2(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) - 4Nu h^2 \phi_j = 0, \quad j = 1, \dots, J-1 \quad (3.17)$$

ou, rearranjando os termos

$$(2 - Pe h)\phi_{j-1} - 4(Nu h^2 + 1)\phi_j + (2 + Pe h)\phi_{j+1} = 0, \quad j = 1, \dots, J-1 \quad (3.18)$$

As condições de contorno da Equação (3.15) entram naturalmente na solução do sistema dado pela Equação (3.18), pois, para $j = 1$, $\mathbf{f}_{j-1} = \mathbf{f}_0 = 0$ e, para $j = J-1$, $\mathbf{f}_{j+1} = \mathbf{f}_J = 1$. Assim, o sistema dado pela Equação (3.18) pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} -4(Nu h^2 + 1)\phi_1 + (2 + Pe h)\phi_2 &= 0 \\ (2 - Pe h)\phi_{j-1} - 4(Nu h^2 + 1)\phi_j + (2 + Pe h)\phi_{j+1} &= 0, \quad j = 2, \dots, J-2 \\ (2 - Pe h)\phi_{J-2} - 4(Nu h^2 + 1)\phi_{J-1} &= -(2 + Pe h) \end{aligned} \quad (3.19)$$

que é um sistema linear de equações algébricas com matriz de coeficientes tridiagonal. Este tipo de sistema é facilmente solucionável através do algoritmo de Thomas, como visto no Capítulo 2.

Vê-se, então, a vantagem de se utilizar fórmulas de discretização contendo, no máximo, até três pontos, que geram uma matriz de coeficientes na forma tridiagonal, permitindo a utilização do algoritmo de Thomas, que é uma versão bem eficiente do método da eliminação. Vantagens similares existem nos problemas multidimensionais.

As condições de contorno do problema dado pela Equação (3.15) são chamadas de *primeiro tipo*, isto é, definem o valor da variável no contorno, sendo facilmente incorporadas ao sistema algébrico das equações discretizadas. Diversos outros tipos de condição de contorno são possíveis, sendo que a sua utilização no sistema de equações algébricas discretizadas um pouco mais elaborada.

Em geral, a condição de contorno pode ser não-linear, como mostra a Equação (3.2), onde g_o e g_f são funções arbitrárias de x , y e \dot{y} . Entretanto, são três os tipos existentes de *condições de contorno lineares*, que descreveremos a seguir.

Diz-se que a condição contorno é de *primeiro tipo* quando o valor da variável dependente é dado no contorno, sendo facilmente utilizada nas equações discretizadas. O problema acima serve de exemplo e a forma geral é dada por

$$x = x_c, \quad y = y_c \quad (3.20)$$

Quando a condição de contorno é de *segundo tipo*, o valor da derivada da variável dependente é dado no contorno, isto é

$$x = x_c, \quad \dot{y} = \dot{y}_c \quad (3.21)$$

Esta condição de contorno tem que ser discretizada para ser combinada com o sistema algébrico discretizado. Por exemplo, considere o seguinte problema de valor de contorno, que é similar ao dado pela Equação (3.15):

$$\begin{aligned} Pe \frac{d\phi}{dx} + \frac{d^2\phi}{dx^2} - 2Nu\phi &= 0 \\ x = 0, \quad \dot{\phi} &= 0 \\ x = X, \quad \phi &= 1 \end{aligned} \quad (3.22)$$

A condição de contorno em $x = 0$ tem o significado físico de que a temperatura de saída do fluido não varia mais com a coordenada axial, isto é, o fluido já atingiu o equilíbrio térmico. Esta condição de contorno é equivalente àquela dada pela Equação (1.87).

A discretização da equação diferencial do problema dado pela Equação (3.22) é a mesma já obtida acima, Equação (3.18). A única diferença é que, agora, a equação discretizada tem que ser também aplicada ao ponto $x = 0$, pois o valor da variável dependente neste ponto não é conhecido. Entretanto, a Equação (3.18) aplicada a $j = 0$ tem o valor fictício ϕ_{-1} , que é eliminado através da condição de contorno em $x = 0$, discretizada por diferença central:

$$\frac{\phi_1 - \phi_{-1}}{2h} = 0 \Rightarrow \phi_{-1} = \phi_1 \quad (3.23)$$

Utilizando a Equação (3.23), podemos escrever o sistema de J equações algébricas que resolve, numericamente, o problema dado pela Equação (3.22) como

$$\begin{aligned} -4(Nu h^2 + 1)\phi_0 + 4\phi_1 &= 0 \\ (2 - Pe h)\phi_{j-1} - 4(Nu h^2 + 1)\phi_j + (2 + Pe h)\phi_{j+1} &= 0, \quad j = 1, \dots, J-2 \\ (2 - Pe h)\phi_{J-2} - 4(Nu h^2 + 1)\phi_{J-1} &= -(2 + Pe h) \end{aligned} \quad (3.24)$$

A condição de contorno é dita de *terceiro tipo* quando tem a seguinte forma geral

$$x = x_c, \quad a\dot{y} + by = c \quad (3.25)$$

onde a , b e c são constantes conhecidas. O seu tratamento é similar ao dado às condições de contorno de segundo tipo. Por exemplo considere o problema de valor de contorno abaixo

$$\begin{aligned} Pe \frac{d\phi}{dx} + \frac{d^2\phi}{dx^2} - 2Nu\phi &= 0 \\ x = 0, \quad \phi &= 0 \\ x = X, \quad Pe^{-1}\dot{\phi} + \phi &= 1 \end{aligned} \quad (3.26)$$

que é similar ao problema dado pela Equação (3.15), diferindo apenas em relação à condição de contorno em $x = X$. Esta condição de contorno inclui o efeito da difusão na condição de entrada do fluido no tubo do trocador de calor, sendo obtida pela integração da própria equação diferencial em

um volume em torno do ponto $x = X$, seguida por um processo de limite no qual este volume tende a zero.

A discretização da equação diferencial do problema dado pela Equação (3.26) é a mesma já obtida acima, Equação (3.18), com a diferença de que, agora, a equação discretizada deve ser aplicada também ao ponto $x = X$. O valor fictício f_{J+1} que surge na Equação (3.18) para $j = J$ é eliminado com o auxílio da condição de contorno discretizada por diferença central

$$\frac{1}{Pe} \frac{\phi_{J+1} - \phi_{J-1}}{2h} + \phi_J = 1 \Rightarrow \phi_{J+1} = 2hPe(1 - \phi_J) + \phi_{J-1} \quad (3.27)$$

Assim, utilizando a Equação (3.27), pode-se escrever o sistema de J equações algébricas que soluciona o problema discreto correspondente ao problema dado pela Equação (3.26) como

$$\begin{aligned} -4(Nuh^2 + 1)\phi_1 + (2 + Pe h)\phi_2 &= 0 \\ (2 - Pe h)\phi_{j-1} - 4(Nuh^2 + 1)\phi_j + (2 + Pe h)\phi_{j+1} &= 0, \quad j = 2, \dots, J-1 \\ 4\phi_{J-1} - 4\left(Nuh^2 + 1 + hPe + \frac{1}{2}h^2Pe^2\right)\phi_J &= -2hPe(2 + Pe h) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Embora uma mudança na condição de contorno afete apenas umas poucas equações discretas do sistema, a solução é, geralmente, altamente influenciada por estes efeitos.

Os sistemas gerados pela discretização dos problemas descritos acima são lineares porque a equação diferencial original e as condições de contorno utilizadas, Equação (3.15), (3.22) e (3.26), também são lineares. Existindo uma não-linearidade no problema original, o sistema de equações discretizadas será não-linear, sendo, então, necessário utilizar as técnicas de solução de sistemas não-lineares vistas no Capítulo 2.

Exemplo 3.1: Considere a solução do problema de valor de contorno dado pela Equação (3.22), com $Nu = 1$, $Pe = 1$ e vários valores de X , obtida da solução do sistema dado pela Equação (3.24), utilizando o algoritmo de Thomas (Seção 2.1.4). Para cada valor de X , diversas soluções numéricas foram obtidas, utilizando malhas com 4, 8, 16, 32 e 64 pontos, verificando-se quando a convergência era atingida, através de um critério de tolerância absoluta, com $\epsilon_a = 10^{-3}$, na norma Euclidiana entre aproximações sucessivas. A Figura 3.2 apresenta as soluções numéricas obtidas após convergência (com 32 pontos na malha), para diversos valores do parâmetro X . Fica claro, a partir destes resultados, que considerar a condição de contorno $f = 0$ em $x = 0$ só é razoável neste problema físico para $X \geq 6$, quando esta aproximação leva a erros dentro da tolerância escolhida.

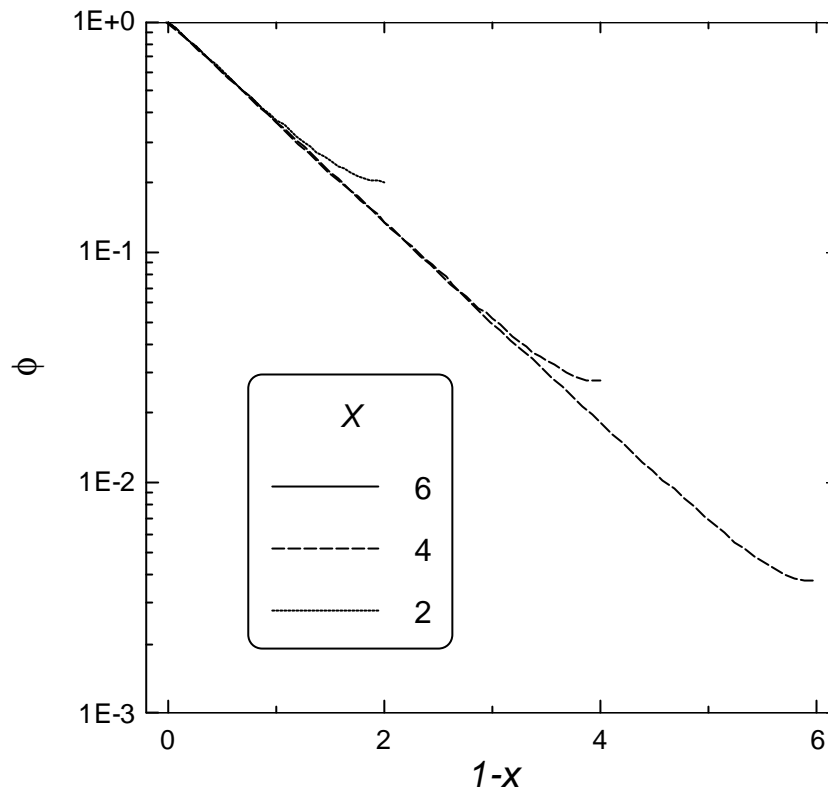


Figura 3.2 - Solução numérica do sistema dado pela Equação (3.24).

Exercício 3.1: Construa um programa computacional para resolver o problema de valor de contorno dado pela Equação (3.15) com $X = 4$, $Nu = 1$, $Pe = 1$ e $J = 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 , utilizando uma rotina que implemente o algoritmo de Thomas. Calcule, para cada uma das soluções com $J > 4$, a norma Euclidiana (Equação 2.40) do erro absoluto do vetor solução, apenas nos pontos onde $x = 1, 2$ e 3 , entre aproximações sucessivas, isto é

$$\|f^{(k+1)} - f^{(k)}\|, \quad \text{com } f^{(k)} = [\phi^{(k)}(1), \phi^{(k)}(2), \phi^{(k)}(3)]^T$$

Estipulando um critério de tolerância absoluta (Equação 2.41), com $\epsilon_a = 10^{-3}$, determine qual o menor valor de J , J_{min} , que satisfaz este critério. Utilizando a solução analítica do problema acima, dada pelas Equações (1.99) e (1.100), calcule, para a solução obtida para J_{min} , qual o valor da norma Euclidiana do erro absoluto em relação à solução exata, utilizando todos os $J_{min} - 1$ pontos da solução.

3.3.2- Linearização em problemas de valor de contorno

Outra possibilidade para a solução de problemas não-lineares, muito usual para problemas multidimensionais, é recorrer a um processo iterativo com linearização dos termos não-lineares. Este procedimento ficará claro com o seguinte exemplo. Considere o problema de valor de contorno dado pela Equação (3.15), mas onde o número de Nusselt não é constante, podendo ser considerado, dentro do intervalo de interesse, como sendo linearmente dependente da variável ϕ , isto é:

$$Nu = a\phi + b \quad (3.29)$$

onde a e b são constantes conhecidas. Inserindo a Equação (3.29) na Equação (3.15) e aplicando as equações a cada ponto $x_j, j = 1, \dots, J-1$, tem-se:

$$Pe \dot{\phi}_j + \ddot{\phi}_j - 2(a\phi_j + b)\phi_j = 0, \quad j = 1, \dots, J-1 \quad (3.30)$$

O último termo do lado esquerdo da Equação (3.30) é não-linear e deve ser linearizado. A linearização será efetuada em relação a um índice de iteração k , isto é, admite-se que existirá um processo iterativo que corrigirá o valor das variáveis ϕ_j . Utilizando a expansão em série de Taylor de ϕ_j^2 , na iteração k , e truncando após o termo de primeira ordem, obtém-se

$$\left(\phi_j^{(k)}\right)^2 \approx \left(\phi_j^{(k-1)}\right)^2 + 2\phi_j^{(k-1)}\left(\phi_j^{(k)} - \phi_j^{(k-1)}\right) = 2\phi_j^{(k-1)}\phi_j^{(k)} - \left(\phi_j^{(k-1)}\right)^2 \quad (3.31)$$

Substituindo as Equações (3.31), (3.10) e (3.14) na Equação (3.30), vem

$$Pe h \left(\phi_{j+1}^{(k)} - \phi_{j-1}^{(k)}\right) + 2 \left(\phi_{j+1}^{(k)} - 2\phi_j^{(k)} + \phi_{j-1}^{(k)}\right) - 4h^2 b \phi_j^{(k)} - 4h^2 a \left(2\phi_j^{(k-1)}\phi_j^{(k)} - \left(\phi_j^{(k-1)}\right)^2\right) = 0 \quad (3.32)$$

$j = 1, \dots, J-1$

ou, rearranjando os termos

$$(2 - Pe h)\phi_{j-1}^{(k)} - 4 \left(h^2 b + 2h^2 a \phi_j^{(k-1)} + 1\right)\phi_j^{(k)} + (2 + Pe h)\phi_{j+1}^{(k)} = -4h^2 a \left(\phi_j^{(k-1)}\right)^2 \quad (3.33)$$

$j = 1, \dots, J-1$

onde as condições de contorno dadas pela Equação (3.15) entram naturalmente, como visto na seção anterior, para gerar o sistema

$$\begin{aligned} & -4 \left(h^2 b + 2h^2 a \phi_1^{(k-1)} + 1\right)\phi_1^{(k)} + (2 + Pe h)\phi_2^{(k)} = -4h^2 a \left(\phi_1^{(k-1)}\right)^2 \\ & (2 - Pe h)\phi_{j-1}^{(k)} - 4 \left(h^2 b + 2h^2 a \phi_j^{(k-1)} + 1\right)\phi_j^{(k)} + (2 + Pe h)\phi_{j+1}^{(k)} = -4h^2 a \left(\phi_j^{(k-1)}\right)^2 \\ & (2 - Pe h)\phi_{J-2}^{(k)} - 4 \left(h^2 b + 2h^2 a \phi_{J-1}^{(k-1)} + 1\right)\phi_{J-1}^{(k)} = -4h^2 a \left(\phi_{J-1}^{(k-1)}\right)^2 - (2 + Pe h) \end{aligned} \quad (3.34)$$

$j = 2, \dots, J-2$

A diferença entre a solução de um problema linear e de um não-linear pode ser discernida, claramente, comparando os métodos de solução dos sistemas dados pelas Equações (3.19) e (3.34). O sistema linear, dado pela Equação (3.19), é resolvido diretamente por eliminação usando o algoritmo de Thomas. Já o sistema linearizado, dado pela Equação (3.34), é resolvido iterativamente de acordo com o algoritmo esquematizado na Figura 3.3. Como mostra esta figura, a partir do “chute inicial” para f_j ou dos seus valores da iteração anterior, os coeficientes são calculados, o sistema linearizado é resolvido pelo algoritmo de Thomas e a solução para a iteração corrente é obtida, com ou sem relaxação (vide Seção 2.1.6). O resultado é comparado com o da

iteração anterior, dentro de um certo critério de tolerância. Caso não haja convergência, o valor de f_j é atualizado, o índice de iteração k é incrementado e o processo repetido até se obter convergência.

Este método iterativo poderá ser ou não convergente, dependendo do “chute inicial” escolhido e do fator de relaxação, além do próprio problema em questão.

Exemplo 3.2: Considere o problema não-linear dado pelas Equações (3.15) e (3.29), cuja forma discretizada é dada pelo sistema representado na Equação (3.34). A solução deste sistema foi obtida, iterativamente, segundo o algoritmo representado na Figura 3.3, para $X = 6$, $Pe = 1$, $b = 1$ e $a = 0$ e 1. Note que o caso $a = 0$ corresponde à solução do problema linear correspondente, Equação (3.15), para $Nu = 1$. O teste de convergência do processo iterativo da Figura 3.3 foi feito, utilizando um critério de tolerância absoluta, com $\epsilon_a = 10^{-4}$, na norma Euclidiana do vetor ϕ_j . Utilizaram-se valores crescentes de J (4, 8, 16, 32, 64, 128, ...), até que uma tolerância absoluta ($\epsilon_a = 10^{-4}$) da norma Euclidiana do vetor formado pelos valores de ϕ_j nas posições $x = 1,5, 3$ e $4,5$ fosse satisfeita para valores consecutivos de J . As soluções numéricas convergidas são mostradas na Figura 3.4, onde é claro o efeito na não-linearidade na solução.

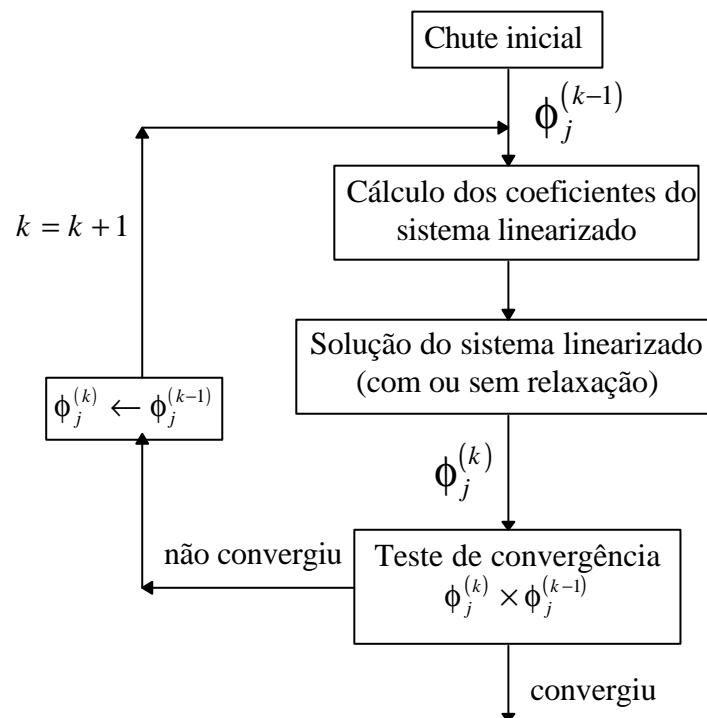


Figura 3.3 - Algoritmo de solução de sistemas linearizados.

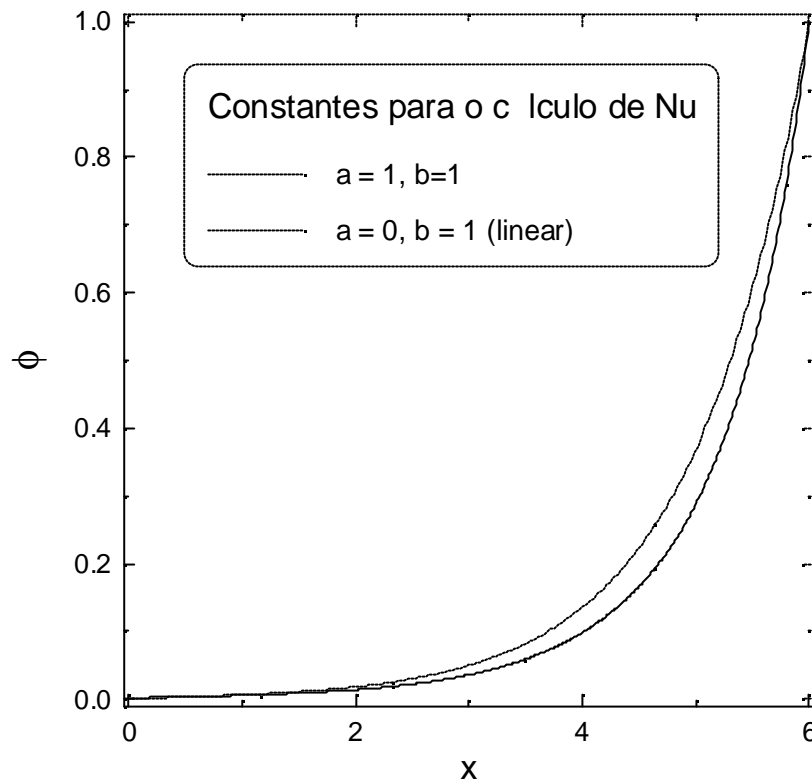


Figura 3.4 - Soluções numéricas do problema de valor inicial do Exemplo 3.2.

Exercício 3.2: Considere o problema dado pela Equação (3.15), mas onde Pe e Nu dependem de ϕ do seguinte modo

$$Pe = a\phi + b$$

$$Nu = d \exp(-c\phi)$$

- Determine o sistema de equações algébricas linearizadas, incluindo as condições de contorno, que resolve numericamente este problema.
- Construa um programa de computador que solucione o problema acima e utilize-o para obter a solução convergida na norma Euclidiana do vetor ϕ_j , com tolerância absoluta de 10^{-3} entre soluções obtidas para valores consecutivos de J (4, 8, 16, 32, 64, 128, ...), para $X = 6$, $a = 0,5$, $b = 1$, $c = 0,2$ e $d = 1$. Faça um gráfico da solução obtida.

3.3.3- Problemas de valor inicial

Considere o seguinte problema de valor inicial que envolve apenas uma equação diferencial ordinária na sua forma normal

$$\dot{y} = f(t, y) \quad (3.35)$$

$$t = 0, y = y_0$$

Seja o intervalo genérico entre t_j e t_{j+1} , conforme mostra a Figura 3.1(a), e considere diferentes formas de aproximar a derivada primeira da Equação (3.35), utilizando como informação conhecida apenas o ponto j , isto é $y(t_j) = y_j$.

Utilizando a aproximação de diferenças finitas para frente para \dot{y}_j , Equação (3.12), podemos aplicar a Equação (3.35) no ponto t_j , para obter

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_j, y_j) + O(h^2), \quad h = t_{j+1} - t_j \quad (3.36)$$

que permite calcular y_{j+1} a partir de y_j , com erro da ordem de h^2 . A Equação (3.36) é explícita no valor desconhecido de y_{j+1} , sendo, pois, o método denominado de *explícito*. Especificamente, a Equação (3.36) representa o *método explícito de Euler*.

Caso, por outro lado, resolvemos utilizar a aproximação de diferenças finitas para trás de \dot{y}_{j+1} , dada pela Equação (3.11) com $j+1$ no lugar de j , podemos aplicar a Equação (3.35) no ponto t_{j+1} , e escrever

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_{j+1}, y_{j+1}) + O(h^2), \quad h = t_{j+1} - t_j \quad (3.37)$$

que calcula y_{j+1} a partir de y_j , com erro da ordem de h^2 . Note que, no caso geral, a Equação (3.37) é não-linear no valor desconhecido de y_{j+1} , sendo, pois, necessário utilizar um método adequado à solução de problemas não-lineares para se obter o valor de y_{j+1} . Assim, como y_{j+1} não pode ser explicitado a partir da Equação (3.37), o método é denominado de *implícito*. Mais especificamente, este é o chamado *método implícito de Euler*.

Além dos dois métodos acima, podemos ainda obter um terceiro a partir da aproximação por diferença central de $\dot{y}_{j+1/2}$ no intervalo considerado. Aplicando a Equação (3.35) ao meio do intervalo e utilizando a Equação (3.10) no intervalo entre y_{j+1} e y_j , temos

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_j + h/2, y_{j+1/2}) + O(h^3), \quad h = t_{j+1} - t_j \quad (3.38)$$

que ainda não pode ser usada para obter y_{j+1} porque o valor de f no ponto considerado não é conhecido. Entretanto, expandindo $f_j = f(t_j, y_j)$ e $f_{j+1} = f(t_{j+1}, y_{j+1})$ em séries de Taylor, pode-se facilmente mostrar que

$$f_{j+1/2} = f(t_j + h/2, y_{j+1/2}) = \frac{1}{2}(f_j + f_{j+1}) + O(h^2) \quad (3.39)$$

de forma que a Equação (3.38) pode ser escrita na forma

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}[f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1})] + O(h^3), \quad h = t_{j+1} - t_j \quad (3.40)$$

que permite calcular y_{j+1} , ainda que de forma implícita. Este método é ainda implícito, sendo denominado de método trapezoidal (ou de *Crank-Nicholson*). Novamente, uma equação não-linear tem que ser resolvida para se determinar o valor de y_{j+1} .

Uma variante do método acima consiste em se utilizar uma estimativa de f_{j+1} na Equação (3.40), utilizando o valor de y_{j+1} como dado pelo método explícito de Euler, isto é,

$$y_{j+1}^P = y_j + hf(t_j, y_j), \quad h = t_{j+1} - t_j \quad (3.41)$$

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} [f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1}^P)] \quad (3.42)$$

Isto origina um método a dois estágios do tipo preditor-corretor que é denominado de método *preditor-corretor modificado de Euler*. Note que, neste caso, o valor de y_{j+1} é obtido de forma explícita.

A ordem de aproximação apresentada nas equações acima é válida localmente, isto é, é o *erro local* para cada um dos intervalos individuais. Considere agora a integração desde y_o até y_N , em N intervalos iguais, utilizando o método explícito de Euler. Podemos escrever o valor final, y_N , como

$$y_N = y_o + \sum_{n=0}^{N-1} (y_{n+1} - y_n) = y_o + \sum_{n=0}^{N-1} hf(t_n, y_n) + NO(h^2) \quad (3.43)$$

Como $Nh = t_N - t_o$, temos que

$$y_N = y_o + \sum_{n=0}^{N-1} hf(t_n, y_n) + (t_N - t_o)h^{-1}O(h^2) = y_o + \sum_{n=0}^{N-1} hf(t_n, y_n) + O(h) \quad (3.44)$$

e, portanto, o *erro global* da integração é da ordem de h . Para todos os métodos de integração baseados em aproximações por diferenças finitas, pode-se, facilmente, mostrar que a *ordem do erro global* será sempre igual à ordem do erro local menos um, sendo igual a ordem de aproximação da fórmula de diferenças finitas utilizada para aproximar a derivada primeira da equação diferencial.

Todos os métodos de integração de EDO's vistos nesta seção são de um único ponto e de um único estágio, à exceção do preditor-corretor de Euler, que tem dois estágios. Como veremos no Exemplo 3.3 abaixo, existe muita vantagem, em termos de precisão da solução numérica, em se utilizar métodos com uma maior ordem de aproximação. Existem muitos outros métodos de integração de equações diferenciais ordinárias, explícitos ou implícitos, com diversas ordens de aproximação e um ou mais estágios. Mais adiante, veremos alguns destes métodos.

Exemplo 3.3: Considere a solução numérica do problema de valor inicial abaixo

$$\begin{aligned} \dot{y} &= -y^2, \quad t > 0 \\ t &= 0, y = 1 \end{aligned}$$

utilizando os métodos de Euler explícito, Euler implícito, trapezoidal e preditor-corretor de Euler, até o ponto $t = 1$, com passos uniformes de integração de 0,2. A solução analítica deste problema é

$$y(t) = \frac{1}{1+t}$$

As soluções numéricas pelos métodos acima, bem como a solução analítica nos pontos considerados, estão listadas na Tabela 3.1. Vê-se, claramente, a superioridade dos métodos de segunda ordem (trapezoidal e Euler preditor-corretor) sobre os de primeira ordem (Euler explícito e implícito). Nota-se, também, pouca diferença entre a qualidade da solução obtida usando os dois métodos de segunda ordem. Isto é, a aproximação introduzida na Equação (3.40) para gerar as Equações (3.41) e (3.42) não é muito relevante.

Tabela 3.1 - Comparação entre os métodos de integração.

t	Euler explícito	Euler implícito	Trapezoidal	Euler preditor-corretor	Solução analítica
0,0	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
0,2	0,8000	0,8541	0,8310	0,8360	0,8333
0,4	0,6720	0,7435	0,7113	0,7176	0,7143
0,6	0,5817	0,6572	0,6220	0,6284	0,6250
0,8	0,5140	0,5880	0,5528	0,5587	0,5556
1,0	0,4612	0,5315	0,4975	0,5029	0,5000

Exercício 3.3: Escreva um programa de computador para resolver o mesmo problema de valor inicial dado no Exemplo 3.3, de $t = 0$ até $t = 9$, utilizando os métodos de Euler explícito, Euler implícito, trapezoidal e preditor-corretor de Euler, utilizando passos uniformes. Para a seguinte seqüência de passos uniformes $h^k = \{0,5, 0,2, 0,1, 0,05, 0,025, 0,0125, 0,00625\}$ e para cada um dos métodos de integração, calcule qual o passo necessário para que

$$|y^k(9) - y^{k-1}(9)| < 10^{-3} |y^k(9)| + 10^{-4}$$

onde y^k é a solução numérica obtida com o passo h^k .

3.3.4- Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta são de ponto simples, explícitos, mas com diversos estágios, de modo a se obter uma maior ordem de aproximação. A idéia básica deste tipo de método é

definir que a variação da variável dependente no passo em questão é dada por uma média ponderada de variações desta variável calculadas com avaliações diferentes da função derivada, isto é:

$$y_{j+1} - y_j = \sum_{i=1}^n C_i \Delta y_i \quad (3.45)$$

$$\Delta y_1 = \Delta t f(t_j, y_j) \quad (3.46)$$

$$\Delta y_i = \Delta t f(t_j + \alpha_i, y_j + \beta_i) \quad i > 1 \quad (3.47)$$

onde C_i , α_i e β_i são coeficientes a serem determinados. Note que a Equação (3.46) corresponde ao método de Euler explícito. Normalmente, $t_j + \alpha_i$ é escolhido dentro do intervalo $[t_j, t_{j+1}]$ e β_i é uma combinação linear dos Δy_k anteriores, $k = 1, 2, \dots, i-1$. As constantes C_i , α_i e β_i são obtidas impondo-se que a Equação (3.45) concorde com a série de Taylor de y_{j+1} até os termos de uma ordem especificada, que será a ordem de aproximação do método.

Como exemplo, vamos derivar os métodos de Runge-Kutta de segunda ordem. Neste caso particular as Equações (3.45), (3.46) e (3.47) podem ser escritas como

$$y_{j+1} = y_j + C_1 \Delta y_1 + C_2 \Delta y_2 \quad (3.48)$$

$$\Delta y_1 = h f(t_j, y_j) = h f_j \quad (3.49)$$

$$\Delta y_2 = h f(t_j + \alpha h, y_j + \beta \Delta y_1) \quad (3.50)$$

onde C_i , α e β são constantes a serem determinadas. Pode-se expandir a função f em série de Taylor de duas variáveis

$$f(t, y) = f_j + f_t|_j \Delta t + f_y|_j \Delta y + \dots \quad (3.51)$$

de forma que, para a função f da Equação (3.50), tem-se

$$f(t_j + \alpha h, y_j + \beta \Delta y_1) = f_j + f_t|_j \alpha h + f_y|_j \beta h f_j + \dots \quad (3.52)$$

Truncando a Equação (3.52) após os termos de primeira ordem e substituindo o resultado, juntamente com as Equações (3.49) e (3.50), na Equação (3.48), obtém-se

$$y_{j+1} = y_j + (C_1 + C_2) h f_j + h^2 \left(\alpha C_2 f_t|_j + \beta C_2 f_j f_y|_j \right) + O(h^3) \quad (3.53)$$

Comparando a Equação (3.48) com a expansão em série de Taylor de y_{j+1} , dada abaixo pela Equação (3.54)

$$y_{j+1} = y_j + h f_j + \frac{1}{2} h^2 \left(f_t|_j + f_j f_y|_j \right) + O(h^3) \quad (3.54)$$

chega-se a que as constantes do método satisfazem as relações

$$C_1 + C_2 = 1, \quad \alpha C_2 = \frac{1}{2}, \quad \beta C_2 = \frac{1}{2} \quad (3.55)$$

Note que existem 3 relações para as 4 constantes, havendo, portanto, um grau de liberdade na escolha do método de Runge-Kutta, desde que $C_2 \neq 0$. Repare, ainda, que os métodos obtidos são de segunda ordem, pois concordam com a série de Taylor de y_{j+1} até os termos de segunda ordem. Considere os possíveis métodos abaixo:

- (1) $C_1 = C_2 = 0,5$ e $\alpha = \beta = 1$: neste caso o método preditor-corretor modificado de Euler é obtido, pois

$$\Delta y_1 = h f(t_j, y_j) \quad (3.56)$$

$$\Delta y_2 = h f(t_j + h, y_j + \Delta y_1) = h f(t_{j+1}, y_{j+1}^P) \quad (3.57)$$

levando a

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2} \left(f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1}^P) \right) \quad (3.58)$$

- (2) $C_1 = 0$, $C_2 = 1$ e $\alpha = \beta = 0,5$: neste caso, obtém-se um método chamado de preditor-corretor de Euler de meio-intervalo:

$$\Delta y_1 = h f(t_j, y_j) = h f_j \quad (3.59)$$

$$\Delta y_2 = h f\left(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{\Delta y_1}{2}\right) = h f_{j+1/2} \quad (3.60)$$

$$y_{j+1} = y_j + h f_{j+1/2} \quad (3.61)$$

Note que os métodos de Runge-Kutta conseguem um aumento da ordem de aproximação através da informação obtida com várias avaliações de função derivada, f , dentro do intervalo de cálculo. Entretanto, o número de avaliações desta função cresce muito com a ordem de aproximação do método, aumentando o custo computacional por passo de integração.

Talvez os métodos de Runge-Kutta mais conhecidos sejam os de quarta ordem, que representam um compromisso entre ordem de aproximação e número de avaliações da derivada da

variável dependente. Um destes métodos é dado pelas Equações (3.45), (3.46) e (3.47) com $n = 4$ e

$$\begin{aligned} C_1 = C_4 = \frac{1}{6}, \quad C_2 = C_3 = \frac{1}{3} \\ \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{h}{2}, \quad \alpha_4 = h \\ \beta_2 = \frac{\Delta y_1}{2}, \quad \beta_3 = \frac{\Delta y_2}{2}, \quad \beta_4 = \Delta y_3 \end{aligned} \quad (3.62)$$

Exemplo 3.4: Considere o mesmo problema de valor inicial dado no Exemplo 3.3. A sua solução numérica até $t = 1$, com $h = 0,2$, utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem dado acima está representada na Tabela 3.2, juntamente com o método predictor-corretor modificado de Euler, que é um Runge-Kutta de segunda ordem. Note que ambos os métodos são explícitos, mas o primeiro precisa de 4 avaliações de f por passo, enquanto o segundo só necessita de 2 avaliações. É evidente que o método de quarta ordem tem uma excelente precisão, da ordem de 10^{-5} , em todos os pontos.

Tabela 3.2 - Comparação entre os métodos de integração de Runge-Kutta.

t	Euler predictor-corretor (Runge-Kutta de 2ª ordem)	Runge-Kutta de quarta ordem	Solução analítica
0,0	1,00000	1,00000	1,00000
0,2	0,83600	0,83334	0,83333
0,4	0,71764	0,71429	0,71429
0,6	0,62836	0,62501	0,62500
0,8	0,55869	0,55556	0,55556
1,0	0,50285	0,50000	0,50000

Exercício 3.4: Resolva, numericamente, o mesmo problema de valor inicial dado no Exercício 3.3, mas utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem dado acima. Compare o valor obtido para o passo necessário para satisfazer o critério dado no Exercício 3.3 com os obtidos para os métodos de integração lá utilizados. Compare, também, o número de avaliações necessárias da função derivada para cada um dos métodos.

3.3.5- Métodos de múltiplos pontos

Os métodos de integração vistos acima podem ter a sua ordem de aproximação melhorada através de um maior número de avaliações da função derivada, dentro do intervalo de integração. Por outro lado, os métodos de múltiplos pontos utilizam a informação dada pelos valores funcionais já obtidos, em um certo número de pontos anteriores, para aumentar a ordem do método. Desta forma, obtém-se um método mais preciso com basicamente nenhum esforço extra, já que a função derivada é avaliada apenas uma vez a cada passo da integração.

Considere uma equação diferencial ordinária na forma normal, como dada pela Equação (3.35), que pode ser escrita na seguinte forma integral

$$\int_{y_{j+1-q}}^{y_{j+1}} dy = \int_{t_{j+1-q}}^{t_{j+1}} f(t, y(t)) dt \quad (3.63)$$

onde q é um número inteiro que estabelece o ponto base de integração. A idéia básica dos métodos de múltiplos pontos é aproximar a função $f(t, y(t))$ por um polinômio, utilizando os valores anteriores de $f_k = f(t_k, y_k)$, $k = j+1, j, j-1, j-2, \dots$, de acordo com a ordem desejada para o polinômio. Para integrações a passo constante, a forma polinomial pode ser facilmente obtida a partir da *fórmula do polinômio de Newton usando diferenças para trás*.

Caso o ponto atual $j+1$ seja utilizado como ponto base do polinômio, isto é, o polinômio é dado em potências de $(t - t_{j+1})$, o método será *implícito*, pois f_{j+1} não é conhecida. O método é *explícito* quando o ponto $j+1$ não é utilizado e o ponto j é o ponto base do polinômio.

Quando $q = 1$ na Equação (3.63), isto é, a integração é efetuada entre t_j e t_{j+1} , o método é dito de *Adams*. Quando um método de Adams é explícito, recebe o nome de método de *Adams-Bashforth*, enquanto que um método de Adams implícito é chamado de método de *Adams-Moulton*. A forma geral destes métodos é dada por

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{B} (\alpha_1 f_{j+1} + \alpha_0 f_j + \alpha_{-1} f_{j-1} + \alpha_{-2} f_{j-2} + \alpha_{-3} f_{j-3} + \dots) + O(h^{n+1}) \quad (3.64)$$

onde as constantes B , α_i e n são dadas na Tabela 3.3 para os métodos Adams-Bashforth e Adams-Moulton de ordem 1 até 4. Note que o grau do polinômio de Newton é sempre igual à ordem de aproximação do método, n , menos um. Isto é facilmente entendido a partir da Equação (3.63), pois um polinômio de ordem $n-1$ aproxima a função f com um erro de truncamento de ordem n , que integrado no intervalo $[t_j, t_{j+1}]$ se transforma em um erro local do método de integração da ordem de $n+1$. A integração ao longo de vários intervalos tem, como sabemos, ordem de aproximação igual ao erro local menos um, isto é, n neste caso.

Os métodos de múltiplos passos têm uma dificuldade de inicialização, que é causada pela necessidade do conhecimento da solução em alguns pontos anteriores. Esta dificuldade é contornada através da inicialização do algoritmo através de um método de Runge-Kutta de mesma ordem de aproximação, ou a utilização de uma sequência de métodos de múltiplos pontos para gerar as soluções nestes pontos.

Os métodos de múltiplos pontos explícitos têm região de estabilidade limitada (ver Seção 3.5), o que impede a sua utilização prática. Já os métodos implícitos têm regiões de estabilidade uma ordem de magnitude maior que as dos métodos explícitos, tendo maior emprego prático. Entretanto, é comum combinar os métodos de Adams explícito e implícito de mesma ordem para gerar um *método preditor-corretor de Adams-Bashforth-Moulton*. A forma geral deste métodos é representada por

$$y_{j+1}^p = y_j + \frac{h}{B} (\alpha_0 f_j + \alpha_{-1} f_{j-1} + \alpha_{-2} f_{j-2} + \alpha_{-3} f_{j-3} + \dots) + O(h^{n+1}), \text{ preditor} \quad (3.65)$$

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{B} (\alpha_1 f_{j+1}^p + \alpha_0 f_j + \alpha_{-1} f_{j-1} + \alpha_{-2} f_{j-2} + \dots) + O(h^{n+1}), \text{ corretor} \quad (3.66)$$

onde a Equação (3.65) é um método de Adams-Bashforth e a Equação (3.66) é um método de Adams-Moulton. Note que o corretor pode ser utilizado um ou mais vezes, embora a realimentação não seja, usualmente, mais eficiente que a redução do passo de integração.

A dificuldade de inicialização dos métodos de múltiplos pontos também ocorre cada vez que se deseja trocar o intervalo de integração. É possível derivar fórmulas de aproximação polinomial para pontos em malhas não-uniformes, eliminando esta dificuldade na troca de passo.

Tabela 3.3 - Parâmetros dos métodos de múltiplos pontos de Adams.

B	α_1	α_0	α_{-1}	α_{-2}	α_{-3}	n
Adams-Bashforth						
1	0	1				1
2	0	3	-1			2
12	0	23	-16	5		3
24	0	55	-59	37	-9	4
Adams-Moulton						
1	1					1
2	1	1				2
12	5	8	-1			3
24	9	19	-5	1		4

Exemplo 3.5: Considere o problema de valor inicial resolvido no Exemplo 3.3. Os métodos de Adams-Bashforth foram utilizados para integrar este problema até $t = 1$, com $h = 0,2$, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 3.4. Note que a ordem do método empregado vai aumentando progressivamente durante a integração, até atingir a quarta ordem, conforme valores em pontos anteriores ficam disponíveis. Comparando com os valores obtidos para o método de Euler explícito (que é o de Adams-Bashforth de ordem 1), dados na Tabela 3.1, verifica-se uma expressiva melhora na acurácia da integração. Atente para o grande erro inicial causado pela utilização dos métodos explícitos de menor ordem durante a inicialização da integração. Grande parte do erro no valor de $y(1)$ provém desta etapa de inicialização.

Tabela 3.4 - Integração usando os métodos de Adams-Bashforth.

t	$y(t)$
-----	--------

0	1,0000
0,2	0,8000
0,4	0,7080
0,6	0,6032
0,8	0,5605
1,0	0,4889

Exercício 3.5: Resolva o problema de valor inicial do Exercício 3.3, de acordo com as instruções ali apresentadas, utilizando o método preditor-corretor de Adams-Bashforth-Moulton de quarta ordem. Utilize os métodos tipo preditor-corretor de menor ordem para a inicialização e apenas uma iteração do corretor por passo.

3.3.6- Métodos BDF

Os métodos BDF (“*Backward Differentiation Formula*”) são métodos de múltiplos pontos, pois procuram aumentar a ordem da aproximação através de informação obtida em pontos anteriores, utilizando, também, fórmulas de diferenças finitas para trás. Entretanto, diferentemente dos métodos vistos na seção anterior, que necessitam que a equação diferencial esteja na forma normal para aproximar a função f por diferenças finitas e proceder sua posterior integração, os métodos BDF aproximam o próprio valor de \dot{y}_{j+1} na forma geral de uma equação (ou sistema) algébrico-diferencial, Equação (3.1), obtendo-se

$$F(t_{j+1}, y_{j+1}, \dot{y}_{j+1}^{(k)}) = 0 \quad (3.67)$$

onde $\dot{y}_{j+1}^{(k)}$ é uma aproximação de ordem k para \dot{y}_{j+1} , que utiliza k pontos anteriores, sendo obtida a partir dos valores de y_i , $i = j+1, j, \dots, j-k+1$. A presença do valor de y_{j+1} torna o método implícito.

A aproximação de primeira ordem é dada pela Equação (3.11), com $j+1$ no lugar de j , isto é

$$\dot{y}_{j+1}^{(1)} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} + O(h) \quad (3.68)$$

Outras aproximações podem ser facilmente obtidas através do uso de séries de Taylor baseadas no ponto y_{j+1} . Por exemplo, considere as seguintes expansões em série dos pontos y_j e y_{j-1} , para uma malha não-uniforme

$$y_j = y_{j+1} - h_{j+1} \dot{y}_{j+1} + \frac{h_{j+1}^2}{2} \ddot{y}_{j+1} - \frac{h_{j+1}^3}{6} \dddot{y}_{j+1} + \frac{h_{j+1}^4}{24} y_{j+1}^{(4)} + O(h^5) \quad (3.69)$$

$$y_{j-1} = y_{j+1} - (h_{j+1} + h_j) \dot{y}_{j+1} + \frac{(h_{j+1} + h_j)^2}{2} \ddot{y}_{j+1} - \frac{(h_{j+1} + h_j)^3}{6} \dddot{y}_{j+1} + \frac{(h_{j+1} + h_j)^4}{24} y_{j+1}^{(4)} +$$

$$O(h^5) \quad (3.70)$$

Combinando as Equações (3.69) e (3.70) de modo a eliminar o termo em \ddot{y}_{j+1} , obtém-se a seguinte aproximação de segunda ordem

$$\dot{y}_{j+1}^{(2)} = \frac{h_j(2h_{j+1} + h_j)y_{j+1} - (h_{j+1} + h_j)^2 y_j + h_{j+1}^2 y_{j-1}}{h_j h_{j+1} (h_{j+1} + h_j)} + O(h_{j+1}(h_{j+1} + h_j)) \quad (3.71)$$

que, para malhas uniformes, simplifica para

$$\dot{y}_{j+1}^{(2)} = \frac{3y_{j+1} - 4y_j + y_{j-1}}{2h} + O(h^2) \quad (3.72)$$

Assim, sucessivamente, podem-se obter aproximações de diferentes ordens para a derivada primeira de y , que apresentam a seguinte forma geral

$$\dot{y}_{j+1}^{(k)} = \frac{\alpha_1 y_{j+1} + \alpha_0 y_j + \alpha_{-1} y_{j-1} + \alpha_{-2} y_{j-2} + \dots}{\beta} = c_k y_{j+1} + d \quad (3.73)$$

onde α_i e β dependem dos valores dos passos h_i entre os pontos considerados e c_k e d são os coeficientes angular e linear, respectivamente, da aproximação da derivada, vista como uma função linear de y_{j+1} . Para malhas uniformes, podemos escrever a equação (3.73) na forma

$$\dot{y}_{j+1}^{(k)} = \frac{\alpha_1 y_{j+1} + \alpha_0 y_j + \alpha_{-1} y_{j-1} + \alpha_{-2} y_{j-2} + \dots}{\gamma h} = c_k y_{j+1} + d \quad (3.74)$$

onde α_i e γ são constantes para cada ordem de aproximação, cujos valores, para as cinco primeiras aproximações de mais baixa ordem, estão representadas na Tabela 3.5.

A substituição da Equação (3.73) na Equação (3.67) gera uma equação algébrica, ou um sistema de equações algébricas, que é, em geral, não-linear, devendo ser resolvida(o) por métodos adequados. Recomenda-se, usualmente, que o método de Newton-Raphson seja utilizado. Neste caso, o jacobiano do sistema de equações em relação à variável desconhecida, y_{j+1} , para a aproximação de ordem k , pode ser obtido das Equações (3.67) e (3.73) como

$$\frac{\partial F}{\partial y_{j+1}} + c_k \frac{\partial F}{\partial \dot{y}_{j+1}} \quad (3.75)$$

que é, por vezes, chamada de matriz de iteração do sistema.

Os métodos BDF tem boa estabilidade podendo ser utilizados para sistemas com rigidez numérica (ver Seção 3.5). Devido a isto, são, usualmente, preferidos aos métodos de múltiplos pontos de Adams expostos na seção anterior. Tal como estes últimos, os métodos BDF têm

problemas de inicialização, devendo-se utilizar ordens crescentes, sequencialmente, para gerar os valores de y_j nos pontos anteriores necessários à cada um dos métodos..

Tabela 3.5 - Coeficientes dos métodos BDF em malha uniforme.

k	γ	α_1	α_0	α_{-1}	α_{-2}	α_{-3}	α_{-4}
1	1	1	-1				
2	2	3	-4	1			
3	6	11	-18	9	-2		
4	12	25	-48	36	-16	3	
5	60	137	-300	300	-200	75	-12

Exemplo 3.6: Considere o problema de valor inicial resolvido no Exemplo 3.3. Os métodos BDF até a quinta ordem foram utilizados para integrar este problema até o ponto $t = 1$, com $h = 0,2$, obtendo-se os resultados apresentados na Tabela 3.6. Note que a ordem do método empregado vai aumentando progressivamente durante a integração, até atingir a ordem estipulada em cada caso. Comparando os valores obtidos para os métodos de primeira, segunda, terceira e quinta ordens, verifica-se uma melhora na acurácia da integração da primeira para a segunda ordem mas uma pequena deterioração da acurácia a partir desta ordem. Isto se deve ao grande erro inicial causado pela utilização dos métodos de menor ordem durante a inicialização da integração. A melhor acurácia para o método de segunda ordem é, pois, fortuita.

Tabela 3.6 - Comparação entre os métodos BDF.

t	Primeira ordem	Segunda ordem	Terceira ordem	Quinta ordem	Solução analítica
0,0	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
0,2	0,8541	0,8541	0,8541	0,8541	0,8333
0,4	0,7435	0,7337	0,7337	0,7337	0,7143
0,6	0,6572	0,6391	0,6390	0,6390	0,6250
0,8	0,5880	0,5650	0,5658	0,5663	0,5556
1,0	0,5315	0,5061	0,5082	0,5091	0,5000

Exercício 3.6: Resolva o problema de valor inicial do Exercício 3.3, de acordo com as instruções ali apresentadas, utilizando o método BDF de terceira ordem. Utilize os métodos de menor ordem para a inicialização.

3.4- Solução de Equações Diferenciais Parciais

Os problemas matemáticos descritos anteriormente neste capítulo correspondem a modelos mais simples, onde existe apenas uma variável independente, seja ela o tempo ou uma coordenada espacial. Entretanto, modelos físicos mais elaborados originam equações diferenciais parciais (EDP's), com duas ou mais variáveis independentes. As equações diferenciais parciais com suas condições auxiliares, formam tanto problemas de valor inicial quanto problemas de valor de contorno.

Nesta seção, veremos a aplicação do método de diferenças finitas a equações diferenciais parciais, formando problemas de valor de contorno ou valor inicial, através de exemplos.

3.4.1- Discretização em duas ou mais variáveis independentes

A discretização de problemas em mais de uma variável dependente segue um procedimento similar ao visto para problemas unidimensionais. O primeiro passo aqui é, como antes, a discretização do domínio de cálculo. Vai-se considerar aqui problemas com, no máximo, duas coordenadas espaciais, já que estes apresentam todas as características dos problemas multidimensionais. A extensão do que será visto a problemas tridimensionais é facilmente obtida.

Considere uma função $u(t, x, y)$ definida em um domínio $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ e $t \geq 0$, que podem ser coordenadas adimensionais ou não. A discretização do domínio pode ser feita com malhas uniformes ou não-uniformes. Como não há nenhuma característica fundamental do procedimento de discretização que seja dependente do tipo da malha, analisar-se-á aqui apenas o caso de malhas uniformes. A Figura 3.5 mostra o esquema de discretização empregado dentro do domínio em questão. A variável dependente é discretizada conforme a malha mostrada na Figura 3.5, sendo representada por

$$u_{i,j}^n = u(t_n, x_i, y_j) \quad (3.76)$$

onde t_n , x_i e y_j representam cada ponto da malha de discretização.

O segundo passo é, também, a aproximação por diferenças finitas das derivadas que aparecem na equação diferencial parcial, que podem ser obtidas das expansões da variável dependente em série de Taylor em relação a uma ou mais variáveis independentes. Por, exemplo, para uma derivada parcial de primeira ordem em relação a x , utiliza-se a expansão

$$u_{i+1,j}^n = u_{i,j}^n + h \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j}^n + \frac{h^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j}^n + O(h^3) \quad (3.77)$$

para obter

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j}^n = \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}{h} + O(h) \quad (3.78)$$

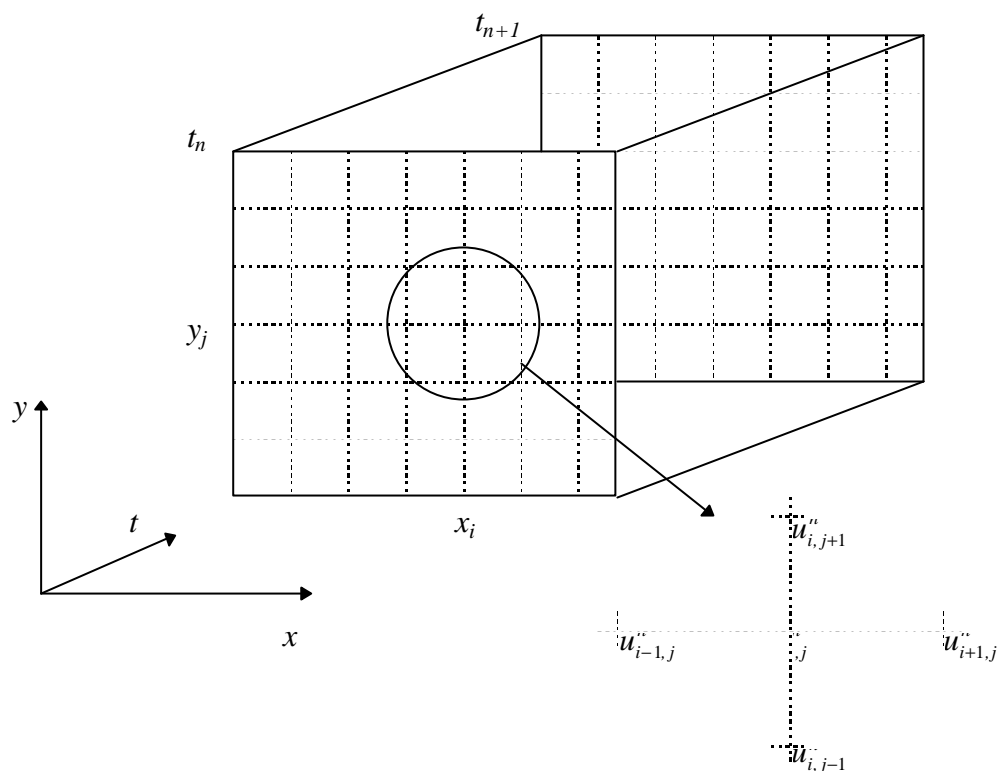


Figura 3.5 - Discretização em problemas multidimensionais.

que é, basicamente, idêntica à Equação (3.12), obtida para o caso unidimensional. Assim, o mesmo procedimento adotado para um problema unidimensional pode ser usado para a obtenção das aproximações por diferenças finitas de derivadas parciais em relação a apenas uma das variáveis independentes.

Apenas quando se deseja uma aproximação para uma derivada parcial mista, isto é, envolvendo mais de uma das variáveis independentes, é que é necessário utilizar a expansão em série de Taylor nas várias variáveis envolvidas. Isto é necessário porque a derivada mista só aparece neste tipo de expansão. Como a grande maioria dos problemas não envolve derivadas mistas, não desenvolveremos aproximações para as mesmas. Convém ressaltar, apenas, que na solução de problemas envolvendo escoamentos bidimensionais, a formulação por função fluxo e vorticidade apresenta derivadas parciais mistas.

Note que, tal como no caso unidimensional, procura-se utilizar, sempre que possível, apenas três pontos adjacentes, em cada direção coordenada no espaço, nas aproximações das derivadas de primeira e segunda ordem. Obtém-se, assim, a estrutura em cruz, com cinco pontos adjacentes, para o caso bidimensional, ilustrado na Figura 3.5, e uma estrutura de 7 pontos, no caso tridimensional. Esta configuração dos pontos utilizados na discretização da equação diferencial parcial é chamada de *célula de discretização*.

A última etapa para a solução de uma equação diferencial parcial por diferenças finitas é substituir as aproximações das derivadas na equação e nas suas condições de contorno, gerando um

sistema algébrico, cuja solução fornece a solução aproximada do problema original. Nas próximas seções, esta etapa será vista através de exemplos.

3.4.2- Problema de valor de contorno - Equações elípticas

Considere a solução do problema de transferência de calor em um domínio bidimensional onde existe uma geração de calor que é linear com a temperatura. Este problema é dado pela equação de conservação da energia, podendo o problema, com suas condições de contorno, ser escrito, em variáveis adimensionais adequadas, por

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + G\theta = 0, \quad 0 < x, y < 1, \quad t > 0 \quad (3.79)$$

$$x = 0, \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad (3.80)$$

$$y = 0, \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0 \quad (3.81)$$

$$y = 1, \frac{\partial \theta}{\partial x} + Bi\theta = 0 \quad (3.82)$$

$$x = 1, \theta = 1 \quad (3.83)$$

A Equação (3.79) é uma equação diferencial parcial de segunda ordem, formando, juntamente com as suas condições de contorno, dadas pelas Equações (3.80) a (3.83), um problema de valor de contorno. A Equação (3.79) é do tipo elíptico, pois apresenta derivadas de segunda ordem em relação a todas as coordenadas.

Uma malha bidimensional uniforme com I subdomínios na direção x e J subdomínios na direção y é utilizada para a discretização da Equação (3.79), que é aplicada em todos os pontos onde θ_{ij} não é conhecida, isto é, para (x_i, y_j) , $i = 0, 1, \dots, I-1$ e $j = 0, 1, \dots, J$, conforme mostra a Figura 3.6.

Aproximando as derivadas de segunda ordem por diferenças centrais, de acordo com as Equação (3.14), a Equação (3.79) é discretizada na forma

$$\frac{\theta_{i+1,j} - 2\theta_{i,j} + \theta_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{\theta_{i,j+1} - 2\theta_{i,j} + \theta_{i,j-1}}{h_y^2} + G\theta_{i,j} = 0, \quad i = 0, \dots, I-1, \quad j = 0, \dots, J \quad (3.84)$$

onde $h_x = 1/I$ e $h_y = 1/J$. A discretização das condições de contorno, aproximando as derivadas de primeira ordem também por diferenças centrais, Equação (3.10), permite calcular os valores da variável dependente nos pontos fictícios que aparecem na Equação (3.84)

$$\theta_{-1,j} = \theta_{1,j}, \quad \forall j \quad (3.85)$$

$$\theta_{i,-1} = \theta_{i,1}, \quad \forall i \quad (3.86)$$

$$\theta_{I,j} = 1, \quad \forall j \quad (3.87)$$

$$\theta_{i,J+1} = \theta_{i,J-1} - Bi h_x \theta_{i,J}, \quad \forall i \quad (3.88)$$

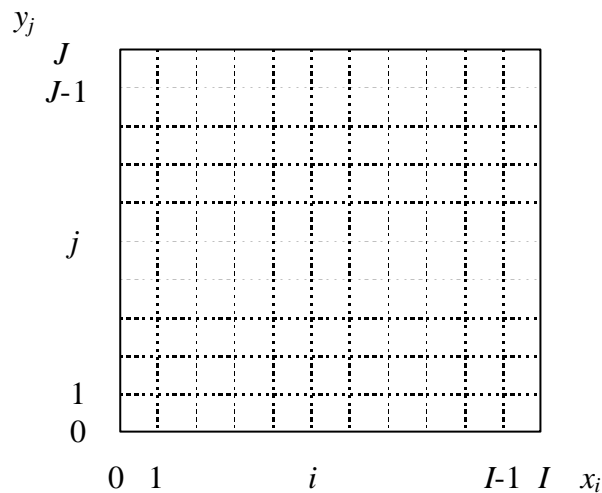


Figura 3.6 - Discretização bidimensional.

Com a substituição das Equações (3.85) a (3.88) na Equação (3.84), obtém-se um sistema algébrico de $I \times (J+1)$ equações lineares. A solução deste sistema pelos métodos diretos de solução vistos no Capítulo 2 só é computacionalmente eficiente se o número de equações do sistema for relativamente pequeno (até cerca de 100 equações). Para sistemas grandes (500 ou mais equações), os métodos iterativos são, usualmente, mais eficientes. Para um sistema cuja matriz dos coeficientes é pentadiagonal, como é o caso presente, o método mais indicado é o fortemente implícito modificado (“Modified Strong Implicit Procedure”).

A acurácia de uma solução numérica de um problema multidimensional é avaliada através da comparação de perfis da variável dependente, obtidos com diferentes malhas. Embora possa se estabelecer um critério de tolerância para o valor de variável em alguns pontos, usualmente é suficiente detectar a convergência visualmente através de um gráfico. Isto garante uma convergência dentro de uma tolerância relativa de cerca de 10^{-2} para valores diferentes de zero e dentro de uma tolerância absoluta da ordem de 10^{-2} para valores próximos a zero.

Exemplo 3.7: O sistema formado pelas Equações (3.84) a (3.88), com $Bi = 0,1$, $G = 2$ e $I = J = 5, 10, 20$ e 40 ($h_x = h_y = h$), foi resolvido através do método SOR (Seção 2.1.6), utilizando um critério de tolerância absoluta na norma do vetor solução de 10^{-4} . Os resultados convergidos para o perfil da variável θ ao longo de x , para $y = 0$, obtidos para as diversas malhas, são mostrados na Figura 3.7. Note a convergência da solução com o aumento do número de pontos na malha. A solução para $I = J = 40$ já é visualmente

coincidente com a solução para a malha de 20×20 , não tendo sido, pois, representada na Figura 3.7. A malha de 20×20 pode ser utilizada na obtenção de outros resultados relevantes ao problema.

Exercício 3.7: Implemente a solução numérica do problema descrito pelas Equações (3.84) a (3.88), pelo método SOR. Utilizando uma malha 20×20 , calcule o perfil da variável θ ao longo de y , para $x = 0$, para os mesmos valores de Bi e G dados no Exemplo 3.7.

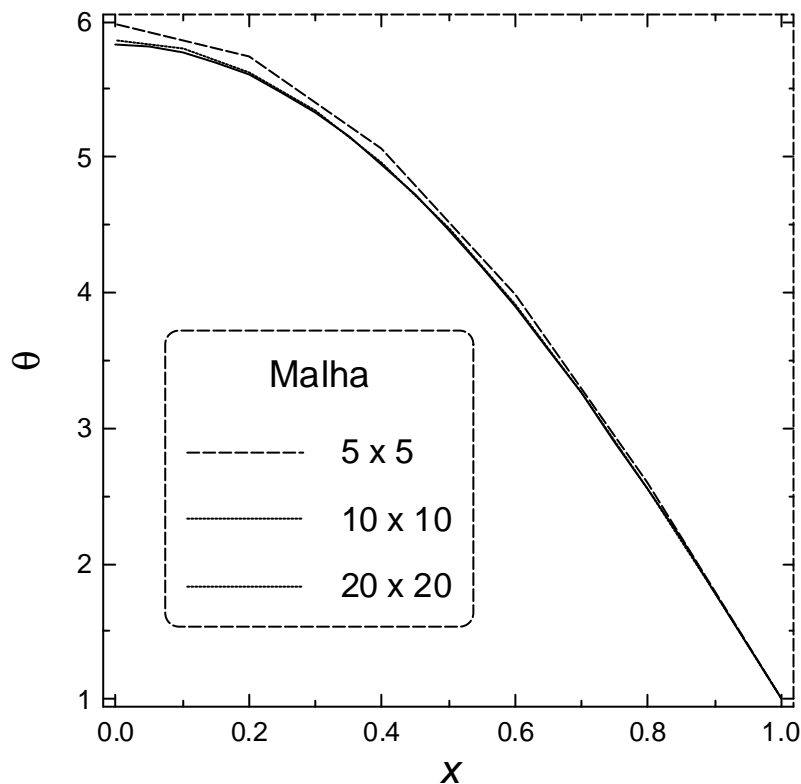


Figura 3.7 - Perfil de temperatura adimensional para $y = 0$.

3.4.3- Problema de valor inicial - Equações parabólicas

Para exemplificar a solução por diferenças finitas de um problema de valor inicial, vamos utilizar o modelo do tubo de um trocador de calor com parâmetros totalmente distribuídos, visto no Capítulo 1. Este modelo servirá, ainda, para mostrar o tratamento que é necessário empregar para coordenadas não-cartesianas e quando existe uma singularidade na aplicação da equação diferencial parcial.

Utilizando as Equações (1.111) a (1.115), além da definição de $\bar{\zeta} = \zeta / Pe$, pode-se escrever o problema em questão como:

$$(1 - \eta^2) \frac{\partial \Theta}{\partial \bar{\zeta}} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \quad (3.89)$$

$$\bar{\zeta} = 0, \quad \Theta = 0 \quad (3.90)$$

$$\eta = 1, \quad \Theta = 1 \quad (3.91)$$

$$\eta = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} = 0, \quad (\text{por simetria}) \quad (3.92)$$

Note que a Equação (3.89) é do tipo parabólico, pois apresenta, em relação a uma das coordenadas, apenas uma derivada de primeira ordem.

A Equação (3.89) será discretizada em uma malha uniforme para a coordenada η similar à representada na Figura 3.1(b). Note que, como o valor de Θ não é conhecido em $\eta = 0$, será necessário aplicar a Equação (3.89) aos pontos discretos η_j , $j = 0, 1, \dots, J-1$. Entretanto, a Equação (3.89) apresenta uma singularidade em $\eta = 0$, devido ao termo que tem o fator $1/\eta$.

O levantamento desta singularidade se faz através de um processo de limite, utilizando a regra de L'Hopital, pois a derivada primeira que multiplica o fator $1/\eta$ também tende para zero quando $\eta \rightarrow 0$. Assim, a seguinte equação é obtida para o eixo de simetria

$$\left. \frac{\partial \Theta}{\partial \bar{\zeta}} \right|_{\eta=0} = 2 \left. \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \eta^2} \right|_{\eta=0} \quad (3.93)$$

Deste modo, utilizando diferenças centrais para as derivadas primeira e segunda em η , e diferença para trás para a derivada primeira em $\bar{\zeta}$, o que corresponde ao método de Euler implícito para integração ao longo de $\bar{\zeta}$, a discretização das Equações (3.89) e (3.93) leva a

$$\frac{\Theta_{i,j} - \Theta_{i-1,j}}{\Delta \bar{\zeta}} = 2 \frac{\Theta_{i,j+1} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i,j-1}}{(\Delta \eta)^2}, \quad j = 0 \quad (3.94)$$

$$(1 - \eta_j^2) \frac{\Theta_{i,j} - \Theta_{i-1,j}}{\Delta \bar{\zeta}} = \frac{\Theta_{i,j+1} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i,j-1}}{(\Delta \eta)^2} + \frac{1}{\eta_i^2} \frac{\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j-1}}{2\Delta \eta}, \quad j = 1, \dots, J-1 \quad (3.95)$$

onde o índice i corresponde aos pontos discretos ao longo da coordenada $\bar{\zeta}$.

Lembrando que a condição de contorno em $\eta = 0$ implica que $\Theta_{i,-1} = \Theta_{i,1}$, e que a condição de contorno em $\eta = 1$ fornece $\Theta_{i,J} = 1$, as Equações (3.94) e (3.95) formam o seguinte sistema de equações algébricas

$$\left(\frac{1}{\Delta \bar{\zeta}} + \frac{4}{(\Delta \eta)^2} \right) \Theta_{i,0} - \frac{4}{(\Delta \eta)^2} \Theta_{i,1} = \frac{1}{\Delta \bar{\zeta}} \Theta_{i-1,0} \quad (3.96)$$

$$-\left(\frac{1}{(\Delta\eta)^2} - \frac{1}{2\eta_j\Delta\eta}\right)\Theta_{i,j-1} + \left(\frac{1-\eta_j^2}{\Delta\bar{\zeta}} + \frac{2}{(\Delta\eta)^2}\right)\Theta_{i,j} - \left(\frac{1}{(\Delta\eta)^2} + \frac{1}{2\eta_j\Delta\eta}\right)\Theta_{i,j+1} = \frac{1-\eta_j^2}{\Delta\bar{\zeta}}\Theta_{i-1,j}, \quad j = 1, \dots, J-2 \quad (3.97)$$

$$-\left(\frac{1}{(\Delta\eta)^2} - \frac{1}{2\eta_{J-1}\Delta\eta}\right)\Theta_{i,J-2} + \left(\frac{1-\eta_{J-1}^2}{\Delta\bar{\zeta}} + \frac{2}{(\Delta\eta)^2}\right)\Theta_{i,J-1} = \frac{1-\eta_J^2}{\Delta\bar{\zeta}}\Theta_{i-1,J-1} + \frac{1}{(\Delta\eta)^2} + \frac{1}{2\eta_J\Delta\eta} \quad (3.98)$$

que permite calcular o perfil de Θ em relação a η em uma dada posição $\bar{\zeta}$, se o perfil em uma posição anterior for conhecida. Partindo-se da condição inicial, em $\bar{\zeta} = 0$, podemos resolver o sistema acima, utilizando o algoritmo de Thomas, quantas vezes forem necessárias para se atingir o regime desenvolvido na transferência de calor dentro do duto.

Por exemplo, é de interesse o cálculo do número de Nusselt, baseado no diâmetro, Nu_D , ao longo do tubo. Utilizando a definição de número de Nusselt local e as variáveis adimensionais definidas na Equação (1.110), obtém-se

$$Nu_D = \frac{2}{1-\bar{\Theta}} \frac{\partial\Theta}{\partial\eta} \bigg|_{\eta=1}, \quad \bar{\Theta} = 4 \int_0^1 (1-\eta^2)\Theta\eta d\eta \quad (3.99)$$

Exemplo 3.8: O sistema formado pelas Equações (3.96) a (3.98) foi resolvido para diversas malhas, $J = 10, 20, 40$ e 80 , e para $\Delta\bar{\zeta} = 10^{-4}$. Os resultados obtidos para Nu_D e para $\bar{\Theta}$ e $\Theta(\eta = 0)$ são mostrados nas Figuras 3.8 e 3.9, respectivamente. Note a boa convergência obtida para os perfis de Nu_D , que tende, para grandes valores de $\bar{\zeta}$ ao limite de 3,66.

Exercício 3.8: Resolva o sistema formado pelas Equações (3.96) a (3.98), para $J = 80$, determinando os perfis de $\Theta(\eta)$ para $\bar{\zeta} = 10^{-3}, 10^{-2}$ e 10^{-1} . Apresente o resultado em um único gráfico.

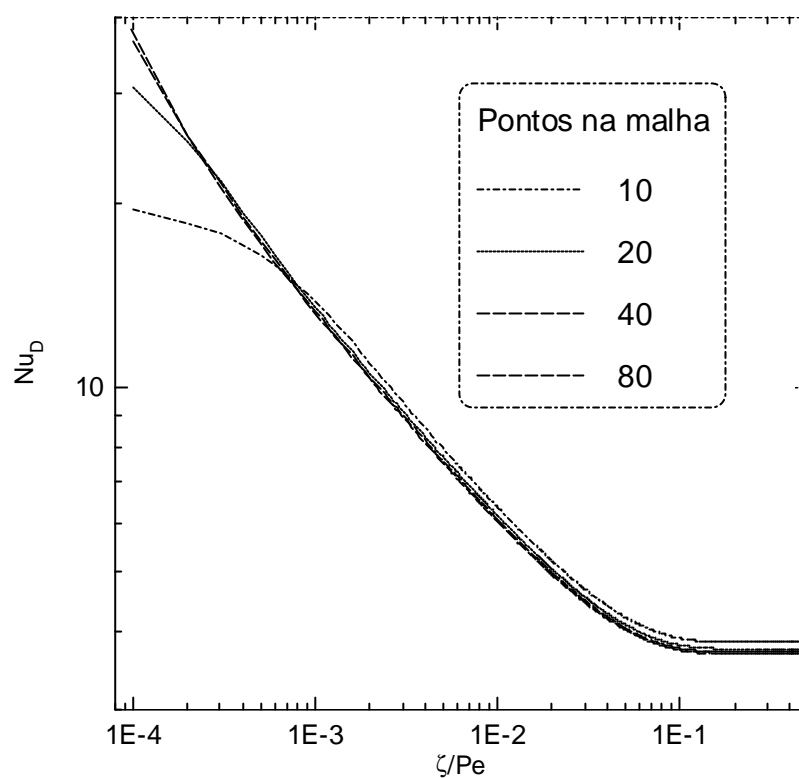


Figura 3.8 - Números de Nusselt local dentro do tubo.

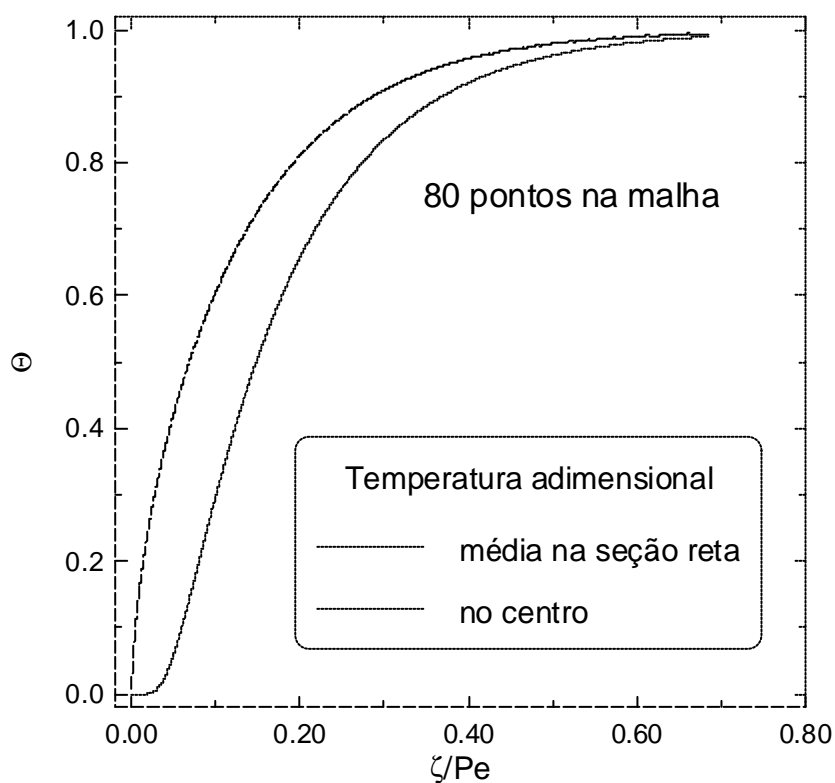


Figura 3.9 - Temperaturas adimensionais ao longo do tubo.

3.4.4- Método das linhas

O método das linhas consiste na discretização parcial de uma equação diferencial parcial, na qual todas as coordenadas menos uma são discretizadas. A coordenada que não é discretizada deve aparecer apenas como uma derivada primeira, isto é, a equação diferencial parcial é de primeira ordem em relação à esta coordenada. Assim, um sistema de equações diferenciais ordinárias é o resultado da discretização parcial.

A solução deste sistema de EDO's pode ser feita por qualquer um dos métodos de solução de problemas de valor inicial já vistos. Entretanto, a grande vantagem deste método está na utilização de rotinas computacionais já existentes para a integração do sistemas de EDO's, que já foram extensivamente testadas, são confiáveis e permitem a integração com controle automático do erro local. Na Seção 3.6, algumas desta rotinas serão citadas.

Como exemplo do emprego da técnica, voltemos ao problema representado pelas Equações (3.89) a (3.92), cuja discretização parcial leva a

$$\frac{d\Theta_0}{d\bar{\zeta}} = 4 \frac{\Theta_1 - \Theta_0}{(\Delta\eta)^2} \quad (3.100)$$

$$(1 - \eta_j^2) \frac{d\Theta_j}{d\bar{\zeta}} = \frac{\Theta_{j+1} - 2\Theta_j + \Theta_{j-1}}{(\Delta\eta)^2} + \frac{1}{\eta_j^2} \frac{\Theta_{j+1} - \Theta_{j-1}}{2\Delta\eta}, \quad j = 1, \dots, J-2 \quad (3.101)$$

$$(1 - \eta_{J-1}^2) \frac{d\Theta_{J-1}}{d\bar{\zeta}} = \frac{1 - 2\Theta_{J-1} + \Theta_{J-2}}{(\Delta\eta)^2} + \frac{1}{\eta_{J-1}^2} \frac{1 - \Theta_{J-2}}{2\Delta\eta} \quad (3.102)$$

que pode ser facilmente resolvido pelas rotinas de integração de sistemas de EDO's, a partir da condição inicial $\Theta_j = 0, j = 0, 1, \dots, J-1$, para obter $\Theta_j(\bar{\zeta}) = 0, j = 0, 1, \dots, J-1$, para $\bar{\zeta} > 0$.

Exercício 3.9: Resolva as Equações (3.100) a (3.102), para $J = 80$, obtendo os perfis de Nu_D , $\bar{\Theta}$ e $\Theta(\eta = 0)$ ao longo $\bar{\zeta}$, utilizando uma das rotinas dadas na Seção 3.6. Compare com os resultados do Exemplo 3.8.

3.5- Propriedades da Solução Aproximada por Diferenças Finitas

Existem diversas propriedades das aproximações por diferenças finitas de derivadas e equações diferenciais que são importantes na caracterização da solução numérica. Dentro do escopo introdutório deste curso, veremos aqui pouco mais do que suas definições.

3.5.1- Erros da solução aproximada

Existem, basicamente, três tipos de erro em uma solução numérica por diferenças finitas: o erro de truncamento, o erro de arredondamento e o erro herdado. O primeiro é o erro total oriundo do truncamento das diversas derivadas que foram aproximadas por diferenças finitas. Este é, no fundo, o erro existente no processo de discretização.

O erro de arredondamento é devido à inabilidade dos computadores representarem os números reais com precisão infinita. Como a maioria dos números em um computador não é exato, devemos estar sempre atentos ao erro de arredondamento. Entretanto, este erro é usualmente muito pequeno e, a não ser que o algoritmo provoque o seu acúmulo ou crescimento, ele é desprezível.

O erro herdado é aquele erro que é advindo de passos anteriores do processo de solução de um problema por diferenças finitas. Este erro é característico da integração de problemas de valor inicial e pode chegar a valores bastante apreciáveis, pois ele é o resultado do acúmulo do erro local.

3.5.2- Consistência

Diz-se que uma equação de diferenças é consistente com uma equação diferencial se a diferença entre as duas equações (erro de truncamento) tende a zero quando o tamanho do maior elemento da malha de discretização tende a zero. Note que o erro de truncamento é o da equação de diferenças e não o da aproximação de cada uma das derivadas por diferenças finitas. Muito embora, em muitos casos, o erro de truncamento da equação de diferenças corresponda ao das aproximações das derivadas, existem casos onde isto não é verdade.

3.5.3- Estabilidade

Estabilidade é uma propriedade usualmente associada às aproximações por diferenças finitas de equações diferenciais que formam um problema de valor inicial. Uma equação de diferenças é dita estável se ela produz uma solução limitada quando a solução exata é limitada, sendo instável quando produz uma solução ilimitada para uma solução exata limitada.

O conceito de estabilidade também pode ser estendido aos problemas de valor de contorno, onde assume uma interpretação diferente. Neste caso, diz-se que uma equação de diferenças é instável quando ela produz uma solução oscilatória ou fisicamente incorreta para um problema físico cuja solução é não-oscilatória.

A estabilidade pode ser investigada para equações lineares ou linearizadas, resultando, usualmente, em uma restrição no valor do tamanho do elemento da malha usada na discretização, tanto para problemas de valor inicial quanto para problemas de valor de contorno. Este intervalo de tamanhos de malha onde o método é estável é a chamada região de estabilidade. Quando um método é tal que não existe nenhuma restrição imposta pelo critério de estabilidade ele é dito incondicionalmente estável. Os métodos BDF têm esta característica, sendo, pois, altamente eficientes, já que se pode variar o passo de integração sem nenhuma restrição. O critério de estabilidade também norteia a construção de outros tipos de aproximação por discretização, como veremos para o Método de Volumes Finitos.

Maiores detalhes sobre os métodos de predição da estabilidade de um esquema numérico estão fora do escopo deste curso.

3.5.4- Convergência

Diz-se que um método é convergente se a solução da equação discretizada se aproxima da solução exata da equação diferencial quando o tamanho do maior elemento da malha tende a zero. Vê-se, então, que a convergência é a propriedade desejada para todos os esquemas numéricos de soluções de equações diferenciais, pois é ela que garante que uma solução aproximada do problema original será obtida.

Para um problema linear de valor inicial e a sua aproximação por diferenças finitas, existe um teorema que garante que, se a aproximação é consistente, a estabilidade é a condição necessária e suficiente para a convergência.

3.5.5- Rigidez numérica

A chamada rigidez numérica ocorre em equações diferenciais ordinárias ou sistemas de equações diferenciais ordinárias e tem diversas definições, como veremos abaixo.

1. Uma EDO é rígida se o passo necessário para estabilidade é muito menor que o passo necessário para acurácia ou tão pequeno que o erro de arredondamento se torna significativo.
2. Uma EDO é rígida se ela contém termos transientes que decaem com rapidez bem diferentes.
3. Um sistema de EDO's é rígido se ele contém variáveis com comportamentos transientes bem diferentes, tendo pelo menos um autovalor da matriz jacobiana do sistema de equações (Equação 3.72) com parte real negativa cujo valor absoluto é muito maior que os outros autovalores da matriz.

A definição (3) é a mais comum. Para que haja estabilidade, os autovalores, λ_i , do sistema devem satisfazer $|\lambda_i| \leq 1, \forall i$. Pode-se definir o grau de rigidez numérica como sendo a razão entre o maior e o menor autovalor em módulo, isto é

$$\text{grau de rigidez} = \frac{\max |Re(\lambda_i)|}{\min |Re(\lambda_i)|} \quad (3.103)$$

Um sistema com grau de rigidez da ordem de 10 não é rígido, enquanto que se a ordem for de 10^3 ele é rígido, e se o grau de rigidez chegar a 10^6 ele é muito rígido.

3.6- Rotinas disponíveis

Várias rotinas de integração de sistemas de equações diferenciais ordinárias existem no mercado, tanto incluídas em “softwares” comerciais quanto na forma de rotinas de uso acadêmico livre. Dando preferência a este último grupo, estão disponíveis abaixo para “download” as rotinas

DASSL e DASSLC, desenvolvidas por Linda Petzold e Argimiro R. Secchi, respectivamente. Ambas utilizam métodos BDF até quinta ordem para integrar sistemas de equações diferenciais e algébricas. Vale também fazer uma visita ao “site” do grupo de pesquisa da Linda Petzold (<http://www.cs.umn.edu/~petzold/>).

Capítulo 4

O Método dos Volumes Finitos

O método dos volumes finitos pode ser utilizado para resolver problemas que tenham pelo menos uma coordenada espacial, isto é, é um método desenvolvido basicamente para resolver problemas de valor de contorno. Isto não exclui a solução de determinados problemas de valor inicial que são compostos pela solução de sucessivos problemas de valor de contorno, um para cada “instante de tempo”.

Assim, o método dos volumes finitos é utilizado para resolver modelos que sejam, parcial ou totalmente, a parâmetros distribuídos. Os modelos podem ser formados por equações diferenciais ordinárias ou parciais. Neste capítulo, será vista uma introdução ao método dos volumes finitos que permitirá a solução de qualquer problema de valor de contorno difusivo ou convectivo-difusivo. A solução do campo de velocidade de um dado escoamento está fora do escopo deste curso.

4.1 - Introdução

O método de volumes finitos é por vezes confundido com o método das diferenças finitas pelo fato de que, em vários casos, as equações discretizadas obtidas por ambos os métodos são iguais. Entretanto, os dois métodos têm bases de formulação bastante diferentes. Enquanto o método de diferenças finitas tem uma dedução puramente matemática, a partir das aproximações de derivadas usando séries de Taylor, a formulação do método de volumes finitos tem base física.

Conforme vimos no Capítulo 1, a maioria dos modelos matemáticos utilizados em problemas de Engenharia Química são baseados nos *princípios de conservação*, que representam uma dada lei física de preservação da integridade de uma dada grandeza, ao longo de um processo. A expressão deste princípio em palavras foi dada pela Equação (1.5), para a totalidade de uma dada grandeza, ou pela Equação (1.6), para apenas uma parte da grandeza considerada.

Quando as Equações (1.5) e (1.6) são expressas de forma matemática para uma região infinitesimal de um dado meio, obtém-se uma equação diferencial ordinária ou parcial, que é a chamada *equação de conservação* da grandeza envolvida. Por exemplo, quando a Equação (1.5) é expressa matematicamente para a conservação de massa no escoamento de um fluido, a *equação da continuidade* é obtida, que, em geometria cartesiana, é representada pela seguinte equação diferencial parcial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \quad (4.1)$$

onde ρ é a densidade do fluido, t é o tempo, (x, y, z) são as três coordenadas cartesianas e (u, v, w) são as três componentes do vetor velocidade correspondentes às direções x , y e z , respectivamente. Outro exemplo pode ser dado pela equação de conservação da energia térmica para um meio fluido, que é obtida da aplicação da Equação (1.6) à conservação da energia térmica, originando uma das formas da *equação da energia*. Sob determinadas aproximações e em coordenadas cartesianas, esta equação de conservação pode ser escrita na forma abaixo

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u T) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v T) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w T) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{k}{c} \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{k}{c} \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{k}{c} \frac{\partial T}{\partial z}\right) + \frac{Q}{c} \quad (4.2)$$

onde c é o calor específico a pressão constante, k é a condutividade térmica, T é a temperatura e Q é a taxa de geração de calor no meio por unidade de volume. A Equação (4.2) é válida para um fluido puro ou para uma mistura não-reacional, com c constante e efeitos de compressão e dissipação viscosa desprezíveis. Maiores detalhes sobre estas e outras equações de conservação comuns aos problemas de Engenharia Química podem ser encontradas nos textos clássicos de *Fenômenos de Transporte*.

Em geral, as equações de conservação apresentam termos que representam o acúmulo, o transporte convectivo, o transporte difusivo e a geração de uma dada grandeza. Veja, por exemplo, a Equação (4.2). O primeiro termo do membro esquerdo é o termo de acúmulo, enquanto que os outros termos deste lado da equação são termos de transporte por convecção. No membro direito da Equação (4.2), os três primeiros termos correspondem ao transporte difusivo, sendo o último o termo de geração. Por esta similaridade, as equações de conservação podem ser escritas na seguinte forma geral

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w \phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) + S \quad (4.3)$$

onde ϕ é a grandeza conservada, Γ é a difusividade desta grandeza e S é o termo de geração. Note que a Equação (4.3) é válida também para outros sistemas de coordenadas além do cartesiano, bastando para isto interpretar as variáveis (x, y, z) como sendo as coordenadas do outro sistema, e considerando S como sendo a soma do termo de geração com todos os outros termos existentes na equação de conservação original que não se enquadram nem na forma de termos de transporte e nem na de termo de acúmulo. Por isso, o termo S é, por vezes, chamado de “lixreira” da equação de conservação, na forma dada pela Equação (4.3).

A forma dada pela Equação (4.3) para a equação de conservação é chamada de *forma conservativa* ou *forma divergente*, na qual os termos relativos aos fluxos convectivos, $\rho u \phi$, $\rho v \phi$ e $\rho w \phi$, aparecem dentro das derivadas em relação às coordenadas espaciais, x , y , z . Qualquer outra forma é dita *não-conservativa*. A forma conservativa é a forma da equação obtida diretamente da forma integral da lei de conservação. Por exemplo, considere a equação da continuidade, cuja forma integral, válida para um volume finito fixo no espaço, é dada por

$$\frac{d}{dt} \left[\int_V \rho dV \right] + \oint_A \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = 0 \quad (4.4)$$

onde \mathbf{v} é o vetor velocidade, de componentes (u, v, w) , V é o volume finito no qual a conservação de massa está sendo aplicada, A é a superfície deste volume, $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor unitário normal externo à superfície A e o ponto entre o vetor velocidade e o vetor normal à superfície indica o produto escalar. A Equação (4.4) diz, simplesmente, que a variação da massa contida no volume é causada pela taxa líquida de massa que é transferida através da superfície do corpo.

Utilizando o teorema integral de Gauss (ou da divergência), que pode ser encontrado nas referências clássicas de Fenômenos de Transporte, a Equação (4.4) pode ser escrita na forma

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0 \quad (4.5)$$

onde $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})$ é o divergente do fluxo mássico que, em geometria cartesiana, é expresso por

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) \quad (4.6)$$

A Equação (4.5) é válida para qualquer volume V , de forma que o integrando deve ser nulo, o que origina a equação diferencial parcial na forma conservativa, dada pela Equação (4.1).

A aproximação discreta de uma equação de conservação pelo método dos volumes finitos tem por objetivo dividir o domínio de cálculo em um certo número de subdomínios, nos quais a lei física de conservação seja feita válida, dentro de um certo grau de aproximação. Esta aproximação pode ser obtida de duas formas. A primeira forma é a utilização do balanço da propriedade conservada para cada um dos subdomínios. O segundo modo é a integração da equação de conservação, na forma conservativa, no volume do subdomínio. Evidentemente, ambos os métodos levam ao mesmo resultado, pois a equação de conservação se originou através de um balanço da propriedade em um volume finito, como mostra a Equação (4.4), para a conservação de massa.

Considere, por exemplo, a equação da continuidade em duas dimensões espaciais, usando a geometria cartesiana. A Figura 4.1 mostra um subdomínio do domínio bidimensional da equação e onde está representada a nomenclatura de determinados pontos dentro ou na superfície deste subdomínio ou volume finito, bem como os fluxos mássicos que atravessam cada face no intervalo de tempo Δt . Assim a variação da massa dentro deste volume, no intervalo Δt , é dada pelo balanço

$$(\rho \Delta x \Delta y)_{t+\Delta t} - (\rho \Delta x \Delta y)_t = (\rho u \Delta t \Delta y)_w - (\rho u \Delta t \Delta y)_e + (\rho v \Delta t \Delta x)_s - (\rho v \Delta t \Delta x)_n \quad (4.7)$$

que dividindo por $\Delta t \Delta x \Delta y$ leva a

$$\frac{\rho_{t+\Delta t} - \rho_t}{\Delta t} + \frac{(\rho u)_e - (\rho u)_w}{\Delta x} + \frac{(\rho v)_n - (\rho v)_s}{\Delta y} = 0 \quad (4.8)$$

que é a equação discretizada para o volume finito em questão.

A Equação (4.7) também pode ser obtida através da integração da Equação (4.1), sem o termo em ρw , utilizando o operador integral abaixo

$$\int_t^{t+\Delta t} dt \int_w^e dx \int_s^n dy \quad (4.9)$$

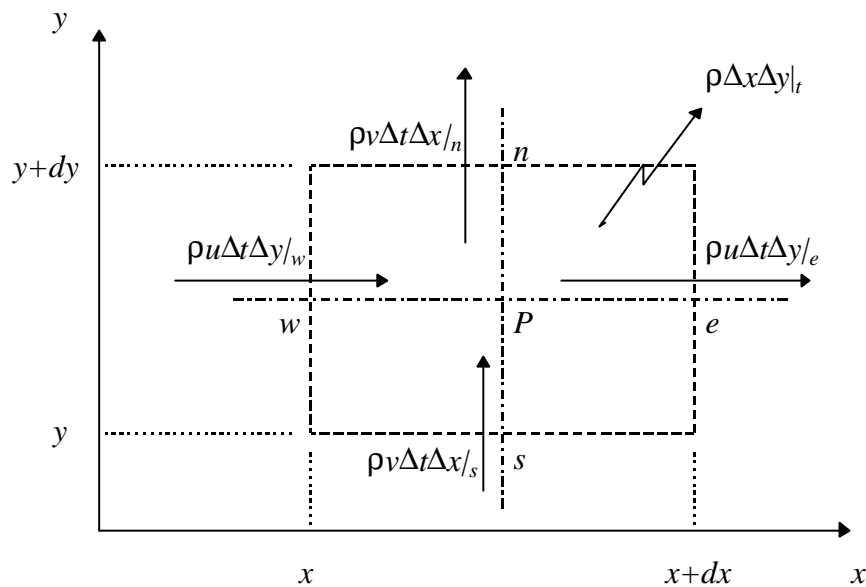


Figura 4.1 - Balanço de massa em um volume finito.

Assim, a aproximação discreta, dada pela Equação (4.8), é obtida pelos dois procedimentos. Usualmente, é mais fácil obter a equação aproximada através da integração da equação de conservação na forma divergente, já que muitas grandezas têm balanços bem complexos.

Note que a Equação (4.8) ainda é uma expressão *exata* para a conservação de massa no volume em questão, pois a forma de cálculo dos fluxos médios através das faces e das densidades médias no volume ainda não foi especificada. A aproximação destas grandezas utilizando seus valores em pontos discretos da malha é que introduz o erro da aproximação numérica.

As Figuras 4.2 e 4.3 mostram a estrutura básica de uma malha unidimensional e bidimensional de volumes finitos, respectivamente. Usualmente, os valores das variáveis dependentes são armazenados nos centros dos volumes (P , N , S , W , E) ou nos centros de determinadas faces (n , s , w , e). Os valores necessários destas variáveis em outras posições são obtidos por processos convenientes de interpolação. Em um mesmo problema, algumas das variáveis dependentes podem ser armazenadas nos centros dos volumes, enquanto que outras ficam armazenadas em pontos sobre as faces. Assim, o método de volumes finitos pode utilizar várias malhas para um mesmo problema

(malhas entrelaçadas).

Do que foi exposto acima, ficam bem claras as diferenças entre o método das diferenças finitas e o método dos volumes finitos. O primeiro se baseia na aplicação da equação diferencial em pontos discretos de uma malha e na utilização de aproximações das derivadas utilizando séries de Taylor. O segundo aplica a equação diferencial de conservação a subdomínios de uma determinada malha através da sua integração em cada volume.

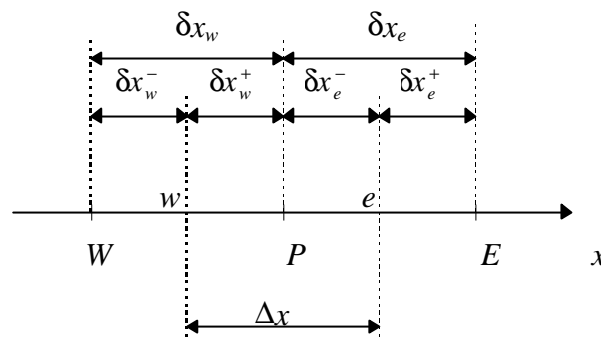


Figura 4.2 - Estrutura de uma malha unidimensional de volumes finitos.

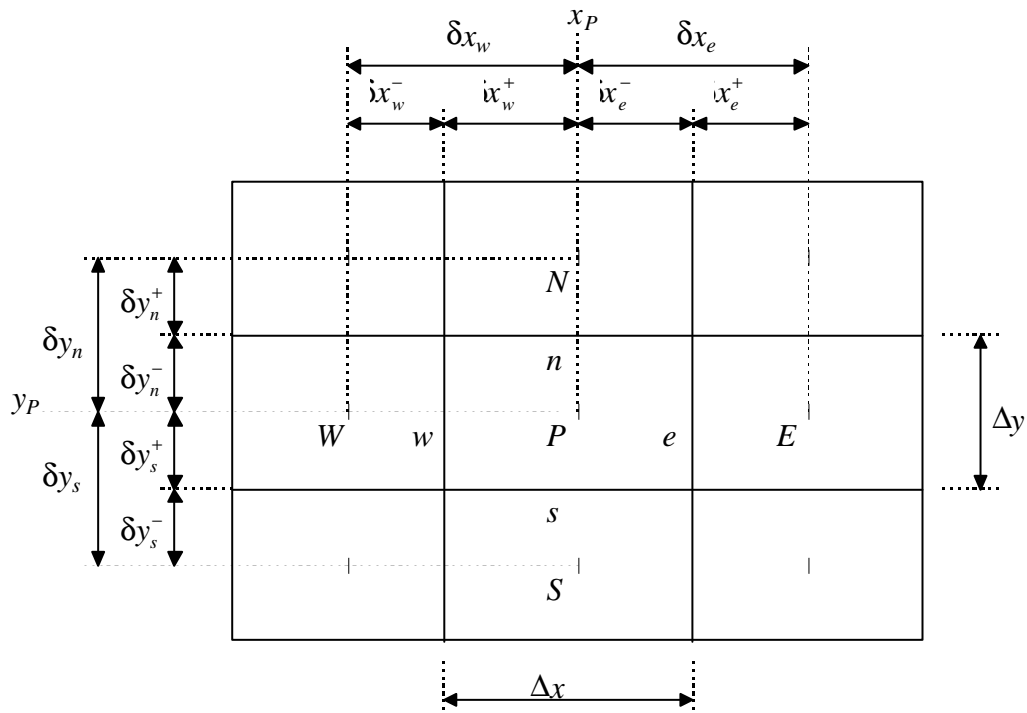


Figura 4.3 - Estrutura de uma malha bidimensional de volumes finitos.

Como será visto mais adiante, os termos de transporte convectivo são os responsáveis pelas maiores dificuldades numéricas na solução de equações diferenciais parciais na forma da Equação

(4.3). Deste modo, serão analisados, primeiramente, os problemas puramente difusivos, que permitem considerar a maior parte dos aspectos característicos da solução de uma equação diferencial ordinária ou parcial pelo método dos volumes finitos.

4.2- Solução de Problemas Difusivos

A forma geral de um problema difusivo tridimensional transiente, em geometria cartesiana, é dado pela Equação (4.10) abaixo.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + S \quad (4.10)$$

Nesta seção, serão vistos os cuidados necessários à discretização da Equação (4.10) pelo método de volumes finitos. Inicialmente, será abordado o problema bem mais simples da difusão unidimensional, mas que fornece a base para o entendimento da maior parte dos aspectos da discretização deste tipo de problema. A extensão para problemas multidimensionais e a aplicação do método a coordenadas não-cartesianas serão vistas posteriormente.

4.2.1- Difusão unidimensional

A difusão unidimensional é regida pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + S \quad (4.11)$$

que deve ser discretizada segundo a malha unidimensional apresentada na Figura 4.2. Note que, uma vez realizada a integração desta equação na direção x , um sistema de EDO's é obtido, o qual pode ser resolvido diretamente por rotinas computacionais, como aquelas dadas no Capítulo 3. Neste caso, tem-se o *método das linhas com discretização por volumes finitos*.

Com o aumento do número de pontos de discretização, a exigência de memória e tempo computacional das rotinas de solução de EDO's se torna muito elevada, de modo que é comum a utilização da chamada *discretização completa*, isto é, realiza-se a discretização de todas as variáveis independentes, incluindo o tempo. Nos diversos exemplos que serão vistos dentro deste capítulo, será utilizada sempre a discretização completa, que inclui a discretização parcial, a qual gera o método das linhas, como uma parte de seu procedimento.

Assim, considere a aplicação do operador

$$\int_t^{t+\Delta t} dt \int_w^e dx \quad (4.12)$$

à Equação (4.11). As integrações do primeiro termo no tempo e a do segundo em x são exatas, levando a

$$\int_w^e (\rho\phi)_t^{t+\Delta t} dx = \int_t^{t+\Delta t} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_w^e dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e S dx dt \quad (4.13)$$

onde $(F)_a^b = F(b) - F(a)$. Neste momento, para obter a equação discretizada é necessário introduzir aproximações para os diversos termos da Equação (4.13), de acordo com a malha da Figura 4.2, isto é, utilizando os valores da variável dependente apenas nos pontos P , W e E .

O integrando do primeiro termo da Equação (4.13) pode ser aproximado pelo seu valor no centro do volume finito, ponto P , o mesmo acontecendo para a integração de S em relação à variável x . Isto feito, restam, ainda, as integrações no tempo dos termos do membro direito da Equação (4.13). Diversas aproximações podem ser empregadas, que correspondem a diferentes métodos de integração de EDO's, como os vistos no Capítulo 3. É muito comum a escolha do método de Euler implícito, devido a sua estabilidade incondicional e a sua baixa necessidade de armazenamento de dados. O método de Euler implícito é implementado pela consideração de que os integrandos dos dois termos do membro direito da Equação (4.13) tem valores constantes no intervalo de tempo entre t e $t+\Delta t$, sendo avaliados no instante final do intervalo, $t+\Delta t$. Deste modo, a Equação (4.13) fica na forma

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \Delta x = \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_w^e \Delta t + S(\phi_P) \Delta x \Delta t \quad (4.14)$$

onde o sobrescrito 0 indica que o termo é avaliado no instante t , enquanto que os termos sem este sobrescrito são avaliados no instante $t+\Delta t$.

A única aproximação possível para os termos de fluxo difusivo na Equação (4.14), utilizando apenas os pontos P , W e E , é via diferenças finitas. Note que estes termos são avaliados nas faces do volume de centro P , podendo ser aproximados por diferenças centrais na forma

$$\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_w = \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w}, \quad \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} \quad (4.15)$$

Deve-se notar que S , ρ e Γ são também avaliados no instante final do intervalo, o que leva à chamada *discretização completamente implícita*. Para completar a discretização, deve-se lembrar que, em geral, S , ρ e Γ são funções de ϕ , sendo necessária a linearização dos termos correspondentes.

Para as propriedades físicas, cuja dependência com ϕ é usualmente fraca embora, por vezes, complexa, é comum o uso de uma técnica simples de iteração, onde os valores de ρ e Γ são inicialmente calculados com o valor de ϕ^0 , isto é, no instante inicial do intervalo de tempo, e posteriormente corrigidos com a própria solução obtida para ϕ no final do intervalo de tempo. Como ϕ^0 e ϕ não devem ser muito diferentes para a precisão da integração no tempo ser boa, o “chute” inicial de ρ e Γ é, usualmente, muito bom. Desta forma, este procedimento iterativo converge rapidamente. Este algoritmo de iteração foi ilustrado na Figura 3.3.

Por outro lado, o termo fonte pode ser fortemente não-linear, e deve ser linearizado de uma forma mais cuidadosa, como veremos mais adiante. De um modo geral, sua linearização pode ser escrita na forma

$$S(\phi_P) = S_C + S_P \phi_P \quad (4.16)$$

Substituindo as Equações (4.15) e (4.16) na Equação (4.14), a equação discretizada é finalmente obtida na forma

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \quad (4.17)$$

onde

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} \quad (4.18)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} \quad (4.19)$$

$$a_P = a_E + a_W + \rho_P \frac{\Delta x}{\Delta t} - S_P \Delta x \quad (4.20)$$

$$b = a_P^0 \phi_P^0 + S_C \Delta x \quad (4.21)$$

$$a_P^0 = \rho_P^0 \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.22)$$

Para cada ponto da malha unidimensional em x , será obtida uma equação algébrica na forma da Equação (4.17). O sistema formado por todas estas equações tem uma estrutura tridiagonal, podendo ser resolvido pelo algoritmo de Thomas. Note que, nas Equações (4.18) e (4.19), a difusividade Γ é avaliada sobre as faces do volume finito de centro P . O modo de se calcular corretamente estes valores será visto mais adiante. Além disso, estes valores de Γ , bem como o valor de ρ_P na Equação (4.20), são avaliados no final do intervalo de integração no tempo, originando o processo de iteração descrito acima.

Alternativamente, a não-linearidade devida à dependência com ϕ das propriedades físicas pode ser tratada pela técnica chamada de “*lagging*”, que consiste em se utilizar o valor de ρ e Γ calculados com o valor de ϕ^0 , sem nenhuma correção posterior. Desta forma, não há a necessidade do processo iterativo e, neste caso, a Equação (4.20) pode ser escrita como

$$a_P = a_E + a_W + a_P^0 - S_P \Delta x \quad (4.23)$$

A Equação (4.23), para $S_P = 0$, mostra que o coeficiente a_P é o somatório dos coeficientes dos seus pontos vizinhos a_E e a_W , no espaço, e a_P^0 no tempo. Este fato, somado ao sinal de S_P ,

quando $S_P \neq 0$, é fundamental na estabilidade da solução das equações discretizadas, como veremos mais adiante.

Para exemplificar a aplicação do método de volumes finitos antes do estudo dos detalhes relacionados ao cálculo da difusividade nas faces e à linearização do termo fonte, considere o problema difusivo unidimensional transiente, sem geração e com propriedades físicas constantes, apresentado no exemplo abaixo.

Exemplo: Seja o problema de estabelecimento do perfil de temperatura em uma parede plana infinita, subitamente submetida a uma temperatura mais elevada em uma das suas faces. Este problema de Transferência de Calor pode ser representado, após um processo de adimensionalização, na forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1$$

$$t = 0, \phi = 0$$

$$x = 0, \phi = 0$$

$$x = 1, \phi = 1$$

A equação diferencial parcial acima é discretizada na malha representada na Figura 4.2, levando às Equações (4.17) a (4.22). Para simplificar a análise, a malha será considerada uniforme ($\Delta x = \delta x_e = \delta x_w$). Neste caso, $a_E = a_W = 1/\Delta x$, $a_P^0 = \Delta x/\Delta t$, $a_P = 2/\Delta x + \Delta x/\Delta t$ e $b = a_P^0 \phi_P^0$.

Como o valor da variável dependente é conhecida em $x = 0$ e $x = 1$, pode-se gerar equações discretizadas apenas para os chamados volumes internos, isto é, para volumes que começam em $x = \Delta x/2$ e vão até $x = 1 - \Delta x/2$. Numerando os volumes internos a partir de um, as incógnitas do problema são ϕ_i , $i = 1, \dots, N$, onde N é o número de volumes internos e as condições de contorno entram na formulação do problema através de $\phi_0 = \phi(0) = 0$ e $\phi_{N+1} = \phi(1) = 1$. Utilizando apenas quatro volumes internos, isto é, $\Delta x = 0,2$, e $\Delta t = \Delta x/2 = 0,1$, a discretização resulta em um sistema de apenas quatro equações algébricas, dado pela Equação (4.17), que é representado abaixo na forma matricial

$$\begin{bmatrix} 12 & -5 & 0 & 0 \\ -5 & 12 & -5 & 0 \\ 0 & -5 & 12 & -5 \\ 0 & 0 & -5 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\phi_1^0 \\ 2\phi_2^0 \\ 2\phi_3^0 \\ 2\phi_4^0 + 5 \end{bmatrix}$$

Note como a condição de contorno em $x = 1$ aparece na última linha do termo independente deste sistema linear. Resolvendo este sistema pelo algoritmo de Thomas (Seção 2.1.4) para cada Δt , o comportamento transiente do perfil adimensional da

temperatura da parede é obtido, como mostra a Tabela 4.1. Evidentemente, um número maior de volumes internos e um menor passo de integração do tempo são necessários para a solução ser obtida com um bom grau de convergência espacial e temporal. Entretanto, o comportamento básico da solução transiente, bem como a solução correta para o estado estacionário são obtidas.

Tabela 4.1 - Evolução do perfil de temperatura adimensional na parede plana.

t	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,8	1,1
ϕ_0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
ϕ_1	0.000	0.059	0.116	0.154	0.176	0.187	0.194	0.198	0.200
ϕ_2	0.000	0.142	0.256	0.324	0.360	0.380	0.390	0.397	0.400
ϕ_3	0.000	0.282	0.441	0.520	0.560	0.579	0.589	0.597	0.600
ϕ_4	0.000	0.534	0.689	0.748	0.775	0.787	0.793	0.798	0.800
ϕ_5	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

4.2.2- O cálculo da difusividade nas faces

Como foi visto acima, os valores da difusividade Γ precisam ser avaliados nas faces e e w nas Equações (4.18) e (4.19). Note que estes coeficientes entram diretamente no cálculo dos fluxos discretizados, dados pela Equação (4.15). Isto implica que os valores de Γ nas faces devem ser convenientemente calculados para que a conservação da propriedade no meio seja respeitada.

Considere a aproximação de que $\Gamma_e = \Gamma_w = \Gamma_p$; isto é, os valores nas faces são aproximados pelo valor no centro do volume finito. Este procedimento *viola a conservação da grandeza* no meio, pois o fluxo em qualquer uma destas faces tem que ser calculado pela mesma expressão no balanço de volumes vizinhos da malha. Nesta aproximação, isto não é verdade, pois na face entre os volumes de índice j e $j+1$ os fluxos seriam obtidos por

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{j+1/2} = \Gamma_j \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\delta x_{j+1}}, \quad \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{j+1/2} = \Gamma_{j+1} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\delta x_{j+1}} \quad (4.24)$$

para a expressão da face e do volume j e a para a face w do volume $j+1$, respectivamente. Nestas expressões $\delta x_{j+1} = x_{j+1} - x_j$. Note que os fluxos calculados pelas expressões dadas acima são diferentes, pois $\Gamma_j \neq \Gamma_{j+1}$, em geral. A utilização da Equação (4.24) implica que o fluxo que entra em um volume por uma de suas faces é diferente do fluxo que sai do volume adjacente a esta face, isto é, a grandeza foi artificialmente criada ou consumida.

Qualquer expressão que calcule Γ_j como uma média entre volumes vizinhos é suficiente para que a conservação da grandeza ϕ seja válida para todos os volumes finitos. Poder-se-ia, por exemplo, utilizar uma média ponderada entre os valores de Γ nos centros de volumes adjacentes,

utilizando a distância da face aos centros dos volumes como pesos. No caso da face e , utilizando a nomenclatura da Figura 4.2, este procedimento levaria a

$$\Gamma_e = \frac{\delta x_e^+}{\delta x_e} \Gamma_P + \frac{\delta x_e^-}{\delta x_e} \Gamma_E \quad (4.25)$$

Entretanto, a Equação (4.25) não é fisicamente correta em determinadas situações. Para verificar isto, basta considerar o caso limite quando um dos valores de Γ tende a zero, digamos o valor de Γ_e . O fluxo real tende a zero, pois há uma barreira ao transporte difusivo desta grandeza, enquanto que o fluxo calculado pelas Equações (4.15) e (4.25) é diferente de zero.

Portanto, o cálculo de Γ nas faces deve ser feito de modo a fornecer uma boa aproximação para o fluxo difusivo da grandeza, qualquer que seja a situação. Considere, pois, a seguinte idealização da situação física. Seja um meio composto de duas partes homogêneas, onde o meio entre os pontos P e e tem difusividade Γ_P , enquanto que o meio entre os pontos e e E tem difusividade Γ_E . Dentro da ordem de aproximação das derivadas por diferenças centrais, o fluxo na face e seria calculado por

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_P \frac{\phi_e - \phi_P}{\delta x_e^-} = \Gamma_E \frac{\phi_E - \phi_e}{\delta x_e^+} \quad (4.26)$$

O valor de ϕ_e pode ser calculado da igualdade entre as duas expressões para o fluxo e substituído de volta em qualquer das duas expressões para calcular o fluxo na face e , obtendo-se

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e}, \quad \Gamma_e = \left[\frac{(\delta x_e^- / \delta x_e)}{\Gamma_P} + \frac{(\delta x_e^+ / \delta x_e)}{\Gamma_E} \right]^{-1} \quad (4.27)$$

que está na forma da Equação (4.15), e a média adequada ao cálculo do valor de Γ_e surge naturalmente.

Note que a Equação (4.27) calcula corretamente o fluxo nulo tanto no limite quando Γ_P , ou Γ_E , tende a zero, quanto no limite onde uma das difusividade, Γ_E , por exemplo, tende a infinito. Neste último caso,

$$\phi_e \rightarrow \phi_E, \quad \Gamma_e \rightarrow \frac{\Gamma_P}{(\delta x_e^- / \delta x_e)} \quad (4.28)$$

e a primeira igualdade da Equação (4.26) é regenerada.

Uma expressão similar pode ser obtida para Γ_w , na forma

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w}, \quad \Gamma_w = \left[\frac{(\delta x_w^- / \delta x_w)}{\Gamma_W} + \frac{(\delta x_w^+ / \delta x_w)}{\Gamma_P} \right]^{-1} \quad (4.29)$$

ou para a difusividade em qualquer face de um volume finito multidimensional.

4.2.3- Linearização do termo fonte

A linearização do termo fonte já foi apresentada informalmente pela Equação (4.16). Entretanto, nada foi dito em relação à determinação de S_C e S_P . Por uma questão de estabilidade do esquema numérico obtido é necessário que

$$S_P \leq 0 \quad (4.30)$$

o que garante que a_P é positivo, conforme as Equações (4.20) e (4.23). Esta restrição pode ser interpretada fisicamente pois, se o valor do termo fonte aumenta com ϕ , isto causa um novo aumento de ϕ que, por sua vez, leva a um aumento do termo fonte e, assim, sucessivamente, teríamos um processo com ϕ tendendo a infinito.

Usualmente, para as equações de um modelo físico, o termo fonte S decresce com ϕ . Neste caso, a linearização via série de Taylor pode ser usada, já que o valor de S_P será negativo

$$S(\phi_P) \cong S(\phi_P^*) + \left. \frac{dS}{d\phi_P} \right|_{\phi_P^*} (\phi_P - \phi_P^*) \quad (4.31)$$

$$S_C = S(\phi_P^*) - \phi_P^* \left. \frac{dS}{d\phi_P} \right|_{\phi_P^*}, \quad S_P = \left. \frac{dS}{d\phi_P} \right|_{\phi_P^*} < 0 \quad (4.32)$$

Entretanto, no processo de modelagem de alguns problemas físicos, algumas hipóteses são empregadas que levam a termos fonte S cujos valores crescem com ϕ . Neste caso, a escolha mais adequada é, usualmente, fazer

$$S_C = S(\phi_P^*), \quad S_P = 0 \quad (4.33)$$

É também possível introduzir uma linearização artificial com S_P negativo, mas isto, normalmente, diminui a convergência. Por exemplo, considere que $S = 10 + \phi$, que pode ser linearizado na forma $S = (10 + 2\phi^*) - \phi$, isto é, $S_C = 10 + 2\phi^*$ e $S_P = -1$.

4.2.4- Condições de contorno

As Equações (4.17) a (4.22) foram obtidas para um volume interno ao domínio de cálculo. Considerações especiais são necessárias para incorporar as condições de contorno ao problema. Serão aqui analisadas as três condições de contorno lineares possíveis, como vistas no Capítulo 3, Equações (3.20), (3.21) e (3.25), para o contorno a esquerda de problemas unidimensionais. Procedimento similar pode ser utilizado para incorporar a condição de contorno na fronteira à direita do domínio de cálculo. Tanto as condições de contorno não-lineares quanto as condições de

contorno em problemas multidimensionais são tratadas por óbvias extensões do que será visto adiante.

Existem três formas de incluir as condições de contorno na solução do problema, que serão vistas nas seções seguintes.

4.2.4.1- Adequação da malha à condição de contorno

Esta primeira forma de consideração de uma condição de contorno implica em se utilizar, no contorno, os volumes que sejam os mais adequados para representar as suas condições de contorno.

Para uma *condição de contorno de primeiro tipo*, pode-se localizar o centro de um volume no próprio contorno, como mostra a Figura 4.4, para o volume relativo ao ponto P , surgindo o que se chama de meio-volume ($\Delta x = \delta x_e^-$). Em duas e três dimensões, surgem também os quarto e oitavo de volume.

Como o valor da função é conhecido no contorno, não existe a necessidade de se fazer o balanço de conservação da grandeza nestes volumes do contorno. A equação discretizada do volume interno adjacente ao contorno, volume de centro em E na Figura 4.4, utiliza diretamente o valor conhecido de ϕ_P . Note que, embora pareça inicialmente ser uma vantagem, a não realização de um balanço no meio-volume do contorno implica que a lei de conservação não é imposta neste volume.

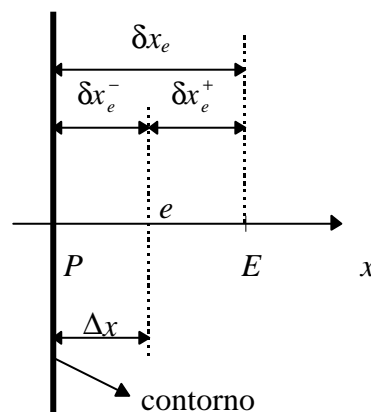


Figura 4.4 - Malha utilizando o meio-volume no contorno.

Para uma *condição de contorno de segundo tipo*, onde o fluxo difusivo da grandeza no contorno é conhecido, é mais conveniente se utilizar de um volume inteiro no contorno, conforme mostra a Figura 4.5. A discretização da Equação (4.11) pode ser obtida a partir da Equação (4.14), utilizando o fluxo na face e como dado na Equação (4.15) e o valor conhecido de

(4.34)



Figura 4.5 - Malha utilizando um volume inteiro no contorno.

para se obter

(4.35)

onde

(4.36)

(4.37)

e as outras variáveis foram definidas anteriormente.

No caso de uma *condição de contorno de terceiro tipo*, onde o fluxo difusivo da grandeza no contorno é dado através de uma relação linear com o valor de ϕ no contorno, é usual a utilização do meio-volume, conforme a Figura 4.4, já que o valor da variável no contorno é necessária ao cálculo deste fluxo. De acordo com a Figura 4.4, o fluxo na interface situada em P será dado por uma equação na forma

(4.38)

onde ϕ_∞ é o valor da grandeza no meio externo ao contorno. A equação discretizada deste meio-volume é obtida a partir das Equações (4.14), (4.15) e (4.34), na forma dada pela Equação (4.35) mas com os seguintes valores para os coeficientes a_p e b

$$a_P = a_E + \rho_P \frac{\Delta x}{\Delta t} - S_P \Delta x + h \quad (4.39)$$

$$b = a_P^0 \phi_P^0 + S_C \Delta x + h \phi_\infty \quad (4.40)$$

onde as outras variáveis são como definidas anteriormente.

Deve-se ter muito cuidado na utilização dos meio-volumes, cuja dimensão é diferente da dos demais volumes da malha, requerendo um cuidado todo especial na implementação computacional da solução do sistema de equações discretizadas. Esta é a principal desvantagem deste tipo de tratamento das condições de contorno.

4.2.4.2- Utilização de volumes fictícios

Uma maneira de se considerar uma malha somente com volumes inteiros é a utilização de volumes fictícios para impor as condições de contorno ao problema, como mostra a Figura 4.6. A idéia de condições fictícias, fora do domínio de cálculo, já apareceu no método das diferenças finitas, para condições de contorno de segundo e terceiro tipo.

Considerando a Figura 4.6, fica claro que a lei de conservação será imposta em todo o domínio de cálculo, enquanto que a equação relativa ao volume fictício dependerá, exclusivamente, da condição de contorno. Para uma *condição de contorno de primeiro tipo*, basta fazer

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (4.41)$$

ou $a_P = 1$, $a_E = -1$ e $b = 2\phi_e$ na Equação (4.35). Já para uma *condição de contorno de segundo tipo*, tem-se que

$$q_e = \left(-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = -\Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{2\delta x_e^+} \quad (4.42)$$

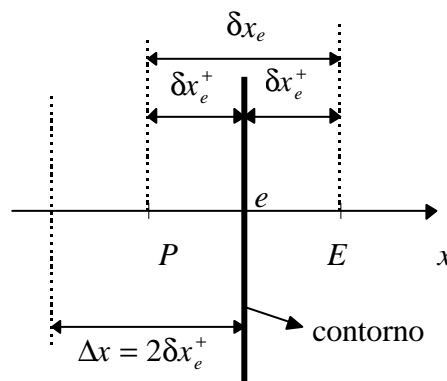


Figura 4.6 - Condição de contorno com volume fictício.

ou $a_P = 1$, $a_E = 1$ e $b = 2\delta x_e^+ q_e / \Gamma_e$ na Equação (4.35). Finalmente, para uma *condição de contorno de terceiro tipo*, a relação da interface fica

$$q_e = \left(-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = -\Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{2\delta x_e^+} = h \left(\phi_\infty - \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \right) \quad (4.43)$$

onde a Equação (4.41) foi utilizada para expressar o valor de ϕ_e . Isto equivale, na forma da Equação (4.35), a $a_P = \Gamma_e / 2\delta x_e^+ + h/2$, $a_E = \Gamma_e / 2\delta x_e^+ - h/2$ e $b = h\phi_\infty$.

A utilização de volumes fictícios aumenta o número de equações discretizadas a serem resolvidas e é válida apenas para coordenadas ortogonais. Devido a isto, seu uso não é recomendado.

4.2.4.3- Utilização de balanços para volumes inteiros no contorno

A idéia aqui é utilizar uma malha sempre com volumes inteiros, inclusive no contorno, conforme mostra a Figura 4.5, e aplicando a lei de conservação da grandeza em todo o domínio de cálculo. A partir das Equações (4.14) e (4.15), a equação discretizada do volume do contorno apresentado na Figura 4.5 pode ser escrita como

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \frac{\Delta x}{\Delta t} = \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} + q_w + (S_C + S_P \phi_P) \Delta x \quad (4.44)$$

onde o valor do fluxo no contorno, q_w , será calculado conforme a condição de contorno.

Para uma *condição de contorno de primeiro tipo*, o valor da variável dependente na fronteira, ϕ_w , é conhecido e o valor do fluxo pode ser calculado por

$$q_w = \left(-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = -\Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_w}{\delta x_w^+} \quad (4.45)$$

de modo que a equação do contorno fica na forma da Equação (4.35) com a_E dado pela Equação (4.18), a_P^0 dado pela Equação (4.22) e

$$a_P = a_E + \frac{\Gamma_w}{\delta x_w^+} + \rho_P \frac{\Delta x}{\Delta t} - S_P \Delta x \quad (4.46)$$

$$b = a_P^0 \phi_P^0 + S_C \Delta x + \frac{\Gamma_w}{\delta x_w^+} \phi_w \quad (4.47)$$

No caso de uma *condição de contorno de segundo tipo*, o valor do fluxo na fronteira, q_w , é conhecido, sendo o procedimento idêntico ao visto na Seção 4.2.4.1. Desta forma, a Equação

(4.44) fica na forma da Equação (4.35) com a_E dado pela Equação (4.18) e a_P e b dados pelas equações (4.36) e (4.37), respectivamente.

Finalmente, para uma *condição de contorno de terceiro tipo*, temos que

$$q_w = \left(-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = -\Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_w}{\delta x_w^+} = h(\phi_\infty - \phi_w) \quad (4.48)$$

e, portanto, o valor da variável dependente no contorno é dado por

$$\phi_w = \frac{h\phi_\infty + (\Gamma_w / \delta x_w^+) \phi_P}{h + (\Gamma_w / \delta x_w^+)} \quad (4.49)$$

podendo-se, então, expressar o fluxo q_w na forma

$$q_w = \frac{h(\Gamma_w / \delta x_w^+)}{h + (\Gamma_w / \delta x_w^+)} (\phi_\infty - \phi_P) \quad (4.50)$$

Utilizando a Equação (4.50), a Equação (4.44) fica na forma da Equação (4.35) com a_E dado pela Equação (4.18), a_P^0 dado pela Equação (4.22) e

$$a_P = a_E + \frac{h(\Gamma_w / \delta x_w^+)}{h + (\Gamma_w / \delta x_w^+)} + \rho_P \frac{\Delta x}{\Delta t} - S_P \Delta x \quad (4.51)$$

$$b = a_P^0 \phi_P^0 + S_C \Delta x + \frac{h(\Gamma_w / \delta x_w^+)}{h + (\Gamma_w / \delta x_w^+)} \phi_\infty \quad (4.52)$$

Esta forma de tratamento das condições de contorno tem como vantagem a uniformidade dos volumes dentro da malha, o que facilita a sua implementação computacional, principalmente para malhas não-ortogonais.

4.2.5- Difusão multidimensional

Nesta seção, os métodos de discretização vistos anteriormente serão estendidos aos problemas multidimensionais. Como o problema difusivo bidimensional ilustra todas as características dos problemas multidimensionais, a análise será restrita a este caso.

O problema difusivo bidimensional transiente, em geometria cartesiana, é dado pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S \quad (4.53)$$

que deve ser discretizada segundo a malha da Figura 4.3. A aplicação do operador dado pela Equação (4.9) à Equação (4.53), somada a utilização do método de Euler implícito para a integração em relação ao tempo, leva a seguinte equação discreta

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} = \int_s^n \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w^e dy + \int_w^e \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s^n dx + (S_C + S_P \phi_P) \Delta V \quad (4.54)$$

onde $\Delta V = \Delta x \Delta y$. As derivadas parciais de primeira ordem em relação a x devem ser aproximadas nas faces designadas por e e w , enquanto que as derivadas parciais em relação a y tem que ser calculadas nas faces n e s . Para que a equação discretizada inclua apenas os pontos P , W , E , S e N , a única maneira de se aproximar esta derivadas é ao longo das curvas que passam pelo ponto P , $x = x_P$ e $y = y_P$, obtendo-se o resultado expresso pela Equação (4.15) e por

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s = \Gamma_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_s}, \quad \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n = \Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_n} \quad (4.55)$$

Note que estas aproximações para as derivadas se referem a apenas um ponto sobre cada uma das faces, ponto obtido pela interseção da curva $x = x_P$ ou $y = y_P$ com a face. Estes valores serão considerados como representativos sobre as faces correspondentes, de modo que os integrandos da Equação (4.54) passam a ser considerados constantes. Assim, a seguinte equação discretizada é obtida

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.56)$$

onde

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} \Delta y \quad (4.57)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} \Delta y \quad (4.58)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n}{\delta y_n} \Delta x \quad (4.59)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s}{\delta y_s} \Delta x \quad (4.60)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + \rho_P \frac{\Delta V}{\Delta t} - S_P \Delta V \quad (4.61)$$

$$b = a_P^0 \phi_P^0 + S_C \Delta V \quad (4.62)$$

$$a_p^0 = \rho_p^0 \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.63)$$

Caso o “lagging” seja usado para p , a Equação (4.61) torna-se

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_p^0 - S_p \Delta V \quad (4.64)$$

mostrando novamente que, para $S_p = 0$, coeficiente a_p é o somatório dos coeficientes dos seus pontos vizinhos no espaço e no tempo.

A implementação das condições de contorno para o problema difusivo bidimensional segue as mesmas considerações apresentadas para o caso unidimensional.

A Equação (4.56) representa um sistema de equações com estrutura pentadiagonal. Devido ao grande número de equações, a solução deste sistema deve ser obtida através de métodos iterativos, dos quais o método fortemente implícito modificado (“Modified Strong Implicit Procedure”) é o mais apropriado. Note que, pela Equação (4.61) com S_p negativo, o sistema de equações tem dominância diagonal, de modo que o método SOR é convergente.

4.2.6- Regras básicas para a aproximação por volumes finitos

No desenvolvimento visto acima para a solução de problemas difusivos, diversos cuidados foram tomados para que as equações discretizadas tivessem as propriedades de estabilidade e consistência. O completo entendimento do motivo que levou a uma determinada etapa deste procedimento necessita de conhecimentos fora do escopo deste curso introdutório.

Assim, vamos aqui apenas resumir estes cuidados especiais na forma de algumas *regras*, que são suficientes para garantir a propriedade conservativa, a estabilidade e a consistência do esquema numérico e, portanto, a convergência da solução numérica. Estas regras tem também uma base física e valem igualmente para problemas convectivo-difusivos.

Regra 1. *O fluxo que cruza uma determinada face entre dois volumes da malha deve ser calculado pela mesma expressão nas equações discretizadas correspondentes a estes dois volumes.* Caso isto não ocorra a conservação global da grandeza é violada. Para respeitar esta regra, deve-se sempre utilizar a equação diferencial na sua forma conservativa, juntamente com aproximações para as derivadas e funções de interpolação adequadas.

Regra 2. *Todos os coeficientes da variável dependente na equação discretizada (a_p , a_E , a_W , etc.) devem ser sempre positivos.* Esta regra é fundamental para a consistência física de um problema, pois se a grandeza conservada aumenta em um ponto, é esperado que ela tenda a aumentar nos seus pontos vizinhos. Isto fica garantido se todos os coeficientes tiverem o mesmo sinal, positivo, por definição. Note que esta regra é suficiente mas não necessária para a consistência do esquema numérico, isto é, é possível existir discretizações consistentes com alguns coeficientes com sinais diferentes.

Regra 3. *Linearização do termo fonte com inclinação negativa.* Esta regra, que implica que $S_p \leq 0$, pode ser facilmente entendida pela Equação (4.61), pois ela garante que o coeficiente a_p será sempre positivo. Note que esta regra também contribui para a dominância diagonal do sistema de equações discretizadas.

Regra 4. *Quando a equação diferencial é constituída apenas por derivadas da variável dependente, o valor de a_p tem que ser igual à soma dos coeficientes dos pontos vizinhos no espaço e no tempo.* Neste caso, não existe o termo de geração e a solução da equação diferencial é obtida a menos de uma constante. Assim, para que a equação discretizada seja válida também para a solução mais uma constante, a regra é obtida, como mostra a Equação (4.65).

$$a_p(\phi_p + c) = \sum_{\text{vizinhos}} a_{\text{viz}}(\phi_{\text{viz}} + c) \Rightarrow a_p = \sum_{\text{vizinhos}} a_{\text{viz}} \quad (4.65)$$

Note que, nas Equações (4.17) e (4.56), este princípio só é estritamente válido após a aplicação do “lagging” à propriedade ρ . Isto se deve aos erros inerentes à integração no tempo, não sendo muito grave a violação desta regra nestes casos.

4.3- Solução de Problemas Convectivo-Difusivos

Os problemas convectivo-difusivos são descritos, na sua forma geral, pela Equação (4.3). A diferença em relação aos problemas puramente difusivos, que acabaram de ser vistos, é a presença dos termos de transporte convectivo da grandeza conservada. Estes termos, ao serem discretizados, impõem a necessidade da especificação dos valores da grandeza conservada nas faces dos volumes finitos. Esta interpolação do valor da variável dependente necessita de cuidados especiais, ou o esquema numérico será instável.

Nas seções subseqüentes, veremos, primeiramente, o surgimento do problema de estabilidade e, posteriormente, a cuidadosa construção de uma função de interpolação que seja acurada e leve a um esquema estável.

4.3.1- O problema de estabilidade

Considere o problema de convecção-difusão estacionário unidimensional e sem geração. Com estas aproximações, as equações da continuidade e da conservação da grandeza ϕ simplificam para

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0, \quad \rightarrow \quad \rho u = \text{constante} \quad (4.66)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (4.67)$$

A discretização da Equação (4.67), na malha dada pela Figura 4.2, requer a aplicação do operador

$$\int_w^e \cdot dx \quad (4.68)$$

levando a

$$(\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_w = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \quad (4.69)$$

Os termos difusivos da Equação (4.69) podem ser tratados como visto anteriormente, resultando as aproximações dadas pela Equação (4.15). Nos termos convectivos, apenas o valor de ϕ deve ser calculado, devido à Equação (4.66). Entretanto, mesmo sendo ρu constante, o fluxo mássico continuará a receber o subscrito e e w , por uma questão de generalidade. Definindo

$$F = \rho u \quad (4.70)$$

e utilizando a Equação (4.15), podemos escrever

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} - \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w} \quad (4.71)$$

Os valores de ϕ interpolados nas faces precisam ser agora determinados. Utilizando a mesma hipótese de variação linear de ϕ com x , que originou a aproximação dos termos difusivos, pode-se interpolar estes valores através de uma média ponderada, isto é

$$\phi_e = \frac{\delta x_e^+ \phi_P + \delta x_e^- \phi_E}{\delta x_e}, \quad \phi_w = \frac{\delta x_w^+ \phi_W + \delta x_w^- \phi_P}{\delta x_w} \quad (4.72)$$

Substituindo a Equação (4.72), obtém-se uma equação na forma da Equação (4.17) com $b = 0$, que é a chamada aproximação por *diferenças centrais*

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (4.73)$$

onde

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} - F_e \frac{\delta x_e^-}{\delta x_e} = D_e \left(1 - P_e \frac{\delta x_e^-}{\delta x_e} \right) \quad (4.74)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} + F_w \frac{\delta x_w^+}{\delta x_w} = D_w \left(1 + P_w \frac{\delta x_w^+}{\delta x_w} \right) \quad (4.75)$$

$$a_p = a_E + a_W + (F_e - F_w) \quad (4.76)$$

e as seguintes variáveis foram definidas

$$D = \frac{\Gamma}{\delta x} \quad (4.77)$$

$$P = \frac{F}{D} = \frac{\rho u \delta x}{\Gamma} \quad (4.78)$$

sendo que P é o número de Péclet da malha, sendo calculado localmente.

Já que a Equação (4.67) não tem termo de geração, apenas as regras 1, 2 e 4 da Seção 4.2.6 devem ser consideradas. Como $F_e = F_w$, a regra 4 é satisfeita. A regra 1 também é satisfeita pois as difusividades e os valores de ϕ nas faces são calculados da mesma forma para volumes adjacentes. Entretanto, a regra 2 *não* será satisfeita para todos os valores dos parâmetros do problema. Isto pode ser constatado a partir das Equações (4.74) e (4.75), já que a_E ou a_W podem se tornar negativos, caso o módulo da velocidade, e portanto, do fluxo mássico, F , seja suficientemente elevado. A violação da regra 2 causa a instabilidade da solução.

Para malhas uniformes, $\delta x_w = \delta x_e = \delta x$ e $\delta x_w^+ = \delta x_w^- = \delta x_e^+ = \delta x_e^- = \delta x/2$. Neste caso, pode-se obter a condição de estabilidade impondo que a_E e a_W sejam maiores que zero nas Equações (4.74) e (4.75), de onde vem que

$$-2 < P < 2 \quad (4.79)$$

A Equação (4.79) é efetivamente uma restrição ao tamanho da malha que pode ser usada para resolver o problema através da Equação (4.73). Na medida que u aumenta, o tamanho da malha tem que diminuir para que a restrição seja satisfeita. Isto leva a malhas excessivamente grandes para problemas que são dominados pela convecção. Note que a malha não é grande devido à complexidade do problema, e sim à restrição de estabilidade. Assim, o uso da discretização obtida usando a Equação (4.72) tem limitações práticas, e outra forma de interpolação de ϕ nas faces deve ser utilizada.

A interpretação física da dificuldade da discretização anterior em representar corretamente a solução do problema pode ser obtida da própria Equação (4.72), onde o valor interpolado de ϕ nas faces não depende do valor da velocidade u . Entretanto, sabemos que quando a convecção domina, o valor de ϕ em uma dada face tem uma dependência maior com o valor da variável a montante do que com o valor a jusante, tendendo a ser igual ao valor a montante quando a velocidade tende a infinito.

Do exposto, pode-se pensar na seguinte forma de interpolar os valores de ϕ nas faces para os problemas dominados pela convecção: o valor de ϕ na face é igual ao valor de ϕ no volume a montante. Este esquema numérico é chamado de “upwind”, “upstream differentiation” ou “donor-cell method”. Aplicando este método ao problema dado pela Equação (4.67), tem-se, a partir da Equação (4.69), que

$$F_e \phi_P - F_w \phi_W = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \quad (4.80)$$

se $u > 0$, e

$$F_e \phi_E - F_w \phi_P = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \quad (4.81)$$

se $u < 0$. Substituindo as aproximações dadas pela Equação (4.15), obtém-se uma equação na forma da Equação (4.73) com

$$a_E = \begin{cases} \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} = D_e, & P_e > 0 \\ \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} - F_e = D_e(1 - P_e), & P_e < 0 \end{cases} \quad (4.82)$$

$$a_W = \begin{cases} \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} + F_w = D_w(1 + P_w), & P_w > 0 \\ \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} = D_w, & P_w < 0 \end{cases} \quad (4.83)$$

onde ainda temos que $a_P = a_E + a_W + (F_e - F_w)$.

O método “upwind”, conforme mostra as Equações (4.82) e (4.83), terá sempre os coeficientes positivos na equação discretizada. Isto resolve o problema de estabilidade, mas introduz um problema de acurácia, pois fazer o valor de ϕ na face igual ao valor de ϕ no volume a montante só é uma boa aproximação para os problemas onde a convecção domina. Para problemas predominantemente difusivos, este tipo de interpolação é uma aproximação muito ruim para o valor de ϕ nas faces do volume finito.

Do exposto acima, fica clara a necessidade de se desenvolver um esquema de interpolação das variáveis dependentes para as faces dos volumes da malha que seja, ao mesmo tempo, estável e acurado. Esquemas com estas propriedades serão descritos na seção seguinte.

4.3.2- Funções de interpolação

Na seção anterior, foi visto que o valor da variável dependente em cada face de um volume finito tem uma dependência muito forte com o número de Péclet da malha. Para dar suporte físico a um esquema de interpolação adequado a este tipo de problema, será desenvolvida a solução da Equação (4.67) para uma região entre pontos adjacentes de uma malha unidimensional, como mostra a Figura 4.7. Como condições de contorno, serão utilizados os valores de ϕ nos pontos i e $(i + 1)$, ϕ_i e ϕ_{i+1} , respectivamente.

No elemento da Figura 4.7, os valores de Γ e $F = \rho u$ serão considerados constantes e iguais aos valores interpolados para a face em $(i + 1/2)$. Na realidade, no problema unidimensional em questão, F é realmente constante. Desta forma o valor do número de Péclet da malha será também constante dentro do intervalo considerado. Assim, podem ser definidas as seguintes variáveis adimensionais

$$\eta = \frac{x - x_i}{\delta x}, \quad \psi = \frac{\phi - \phi_i}{\phi_{i+1} - \phi_i} \quad (4.84)$$

de modo a se obter o seguinte problema de valor de contorno

$$P \frac{\partial \psi}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} \quad (4.85)$$

$$\eta = 0, \psi = 0 \quad (4.86)$$

$$\eta = 1, \psi = 1 \quad (4.87)$$

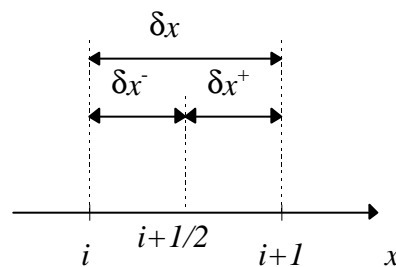


Figura 4.7 - Elemento genérico de uma malha unidimensional de volumes finitos.

A solução analítica do problema formado pelas Equações (4.85), (4.86) e (4.87) é facilmente obtida, sendo dada por

$$\psi(\eta) = \frac{\phi(\eta) - \phi_i}{\phi_{i+1} - \phi_i} = \frac{e^{P\eta} - 1}{e^P - 1} \quad (4.88)$$

cujo comportamento é exemplificado na Figura 4.8. Vê-se, claramente, que a solução atende as expectativas do comportamento físico da solução. Assim, para $P = 0$, o problema é difusivo e o perfil é linear, enquanto que, para valores elevados do módulo de P , o perfil é tal que o valor de ψ na região central do intervalo, onde a face entre os volumes deve ser encontrada, assume praticamente o valor da variável a montante.

A Equação (4.88) foi utilizada no desenvolvimento de vários esquemas de interpolação, como por exemplo, o exponencial, o de potências, o WUDS (“*Weighted Upstream Differencing Scheme*”), etc. Podemos dividir estes esquemas de interpolação em dois grupos. No primeiro

grupo, os fluxos difusivo e convectivo são determinados isoladamente, enquanto que, no segundo grupo, estes fluxos são calculadas apenas na forma combinada de um fluxo convectivo-difusivo.

A aproximação via fluxo combinado convectivo-difusivo tem por base a expressão da Equação (4.67) na forma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \Rightarrow J = \text{constante} \quad (4.89)$$

onde J é o fluxo convectivo-difusivo, definido por

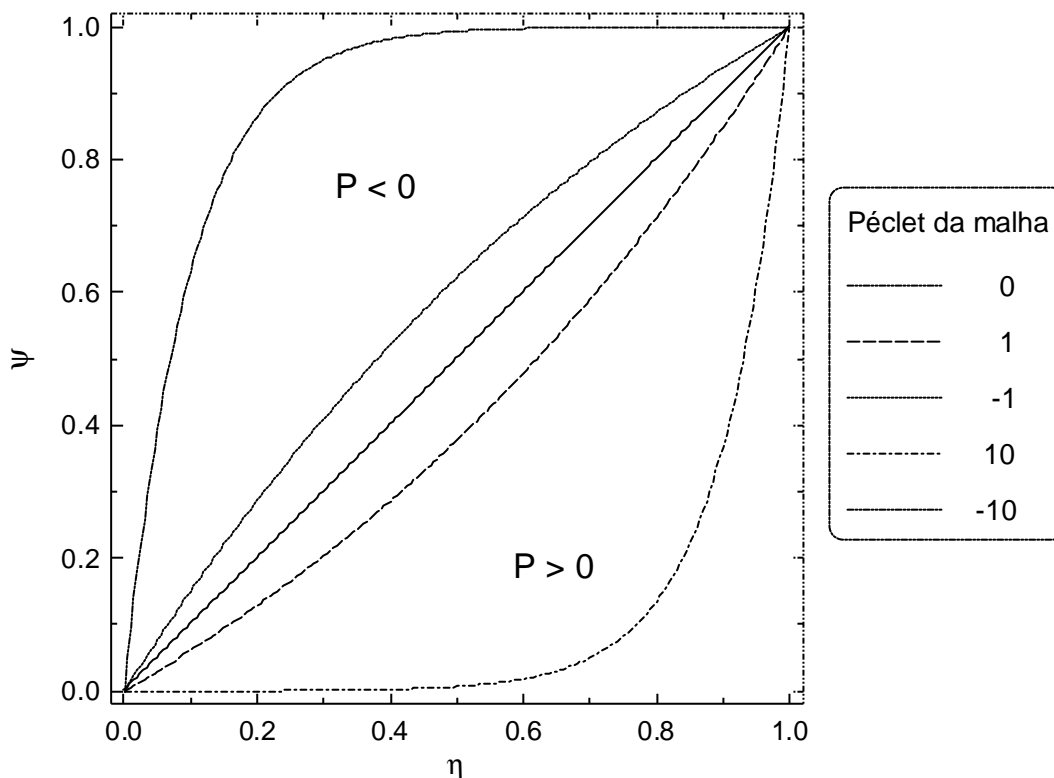


Figura 4.8 - Solução do problema convectivo-difusivo em um elemento da malha.

$$J = \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (4.90)$$

Aplicando o operador dado pela Equação (4.68) à Equação (4.89), obtém-se a seguinte equação discretizada para o volume P da Figura 4.2

$$J_e - J_w = 0 \quad (4.91)$$

Para completar a discretização, devemos calcular os valores dos fluxos convectivo-difusivos, nas duas faces do volume P , em termos dos valores de ϕ em W , P e E , o que deve ser feito a partir da solução analítica dada pela Equação (4.88).

Pode-se definir um fluxo convectivo difusivo, J^* , que será adimensional se ϕ for adimensional, por

$$J^* = \frac{J\delta x}{\Gamma} = \frac{J}{D} = P\phi - \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \quad (4.92)$$

Utilizando a solução analítica para $\phi(\eta)$, dada pela Equação (4.88), para os intervalos entre W e P e entre P e E , podemos escrever, de modo genérico, que

$$J^* = B(P)\phi_i - A(P)\phi_{i+1} \quad (4.93)$$

onde

$$B(P) = \frac{Pe^P}{e^P - 1}, \quad A(P) = \frac{P}{e^P - 1} \quad (4.94)$$

Note como $A(P)$ e $B(P)$ são sempre positivos, para qualquer valor de P . Além disso, repare que o valor do fluxo convectivo-difusivo, dado pela Equação (4.93), *não* depende da posição da face.

Os coeficientes A e B da Equação (4.93) devem satisfazer determinadas condições físicas, independentemente de suas expressões dadas pela Equação (4.94). Desta forma, duas propriedades podem ser obtidas para estes coeficientes. Considere, primeiramente, que $\phi_i = \phi_{i+1}$, de modo que não há difusão e $J^* = P\phi = B\phi - A\phi$, ou seja

$$B(P) = A(P) + P \quad (4.95)$$

Em seguida, considere que o valor absoluto do fluxo independe da orientação dada ao eixo coordenado x . Trocando o sentido do eixo x , $J^* \rightarrow -J^*$, $P \rightarrow -P$, $\phi_i \rightarrow \phi_{i+1}$, $\phi_{i+1} \rightarrow \phi_i$, e comparando os fluxos obtidos da Equação (4.93) para os dois sentidos do eixo, vem

$$B(-P) = A(P), \quad A(-P) = B(P) \quad (4.96)$$

Das Equações (4.95) e (4.96), é evidente que apenas um dos dois coeficientes, A ou B , precisa ser conhecido e, unicamente, para valores positivos de P . É fácil verificar que as expressões para A e B dadas pela Equação (4.94) satisfazem as propriedades dadas pelas Equações (4.95) e (4.96).

Voltando à equação discretizada do problema unidimensional, dada pela Equação (4.91), pode-se usar a Equação (4.93) aplicada aos dois intervalos entre W e P e entre P e E , para transformá-la em

$$D_e [B(P_e)\phi_P - A(P_e)\phi_E] - D_w [B(P_w)\phi_W - A(P_w)\phi_P] = 0 \quad (4.97)$$

ou, coletando os termos, obtém-se uma equação na forma da Equação (4.73) com

$$a_E = D_e A(P_e) \quad (4.98)$$

$$a_W = D_w B(P_w) \quad (4.99)$$

$$a_P = D_e B(P_e) + D_w A(P_w) \quad (4.100)$$

Utilizando a propriedade dada pela Equação (4.95), pode-se transformar a Equação (4.100) na mesma forma dada pela Equação (4.76), isto é, $a_P = a_E + a_W + (F_e - F_w)$.

A equação discretizada com coeficientes dados pelas Equações (4.98), (4.99) e (4.100), com A e B calculados a partir da Equação (4.94), satisfazem às regras 1, 4 e, principalmente, 2, já que os coeficientes a_E e a_W serão sempre positivos, sendo, pois, estável. Este é o chamado *esquema exponencial* de discretização para um problema convectivo-difusivo.

O esquema exponencial tem a desvantagem de ter que calcular valores de funções exponenciais, o que é computacionalmente bem mais trabalhoso do que as operações simples de soma e multiplicação. Para eliminar este problema, foram desenvolvidas aproximações para a função $A(P)$, $P \geq 0$, que fossem mais facilmente calculadas. Estas aproximações encontram-se listadas na Tabela 4.2, sendo que o *esquema de potência* (“power-law”) é aquele que apresenta o melhor compromisso entre rapidez de cálculo e acurácia da aproximação.

Note que a função $A(P)$, para P negativo e a função $B(P)$, podem ser obtidas de $A(P)$, $P \geq 0$, de acordo com as Equações (4.95) e (4.96), o que leva às seguintes expressões

Tabela 4.2 - Esquemas de interpolação usando o fluxo convectivo-difusivo.

Esquema numérico	$A(P), P \geq 0$
diferenças centrais	$1 - 0.5 P$
“upwind”	1
híbrido	$\max(0, 1 - 0.5 P)$
de potência	$\max(0, [1 - 0.1 P]^5)$
exponencial	$P/[\exp(P) - 1]$

$$A(P) = A(|P|) + \max(-P, 0) \quad (4.101)$$

$$B(P) = A(|P|) + \max(P, 0) \quad (4.102)$$

onde o operador $\max(a, b)$, também presente na Tabela 4.2, é igual a a , se $a > b$, ou igual a b , em caso contrário, isto é, é o maior valor entre eles.

A grande vantagem dos métodos baseados no fluxo convectivo-difusivo é que a interpolação obtida para este fluxo *independe* da posição da face entre os volumes da malha, isto é, serve igualmente a malhas uniformes e não-uniformes. Os métodos onde os fluxos difusivo e convectivo são determinados isoladamente não têm esta vantagem.

Um exemplo de método que determina isoladamente os fluxos difusivo e convectivo é o WUDS, onde se define que o valor de ϕ e de seu fluxo difusivo em uma dada face são dados por

$$\phi_{i+1/2} = \left(\frac{1}{2} + \alpha_{i+1/2}\right)\phi_i + \left(\frac{1}{2} - \alpha_{i+1/2}\right)\phi_{i+1} \quad (4.103)$$

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i+1/2} = \beta_{i+1/2} \Gamma_{i+1/2} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\delta x_{i+1/2}}\right) \quad (4.104)$$

onde os valores de $\alpha_{i+1/2}$ e $\beta_{i+1/2}$ na referida face são obtidos a partir da solução analítica dada pela Equação (4.88). Entretanto, é necessário especificar a *posição da face*. Admitindo que a face esteja a meio caminho entre os centros dos volumes adjacentes, obtém-se que

$$\alpha_{i+1/2} = \frac{1}{2} - \frac{\exp(0.5P_{i+1/2}) - 1}{\exp(P_{i+1/2}) - 1} \quad (4.105)$$

$$\beta_{i+1/2} = P_{i+1/2} \frac{\exp(0.5P_{i+1/2})}{\exp(P_{i+1/2}) - 1} \quad (4.106)$$

Tal como antes, a avaliação das exponenciais das Equações (4.105) e (4.106) é dispendiosa, de modo que aproximações para estas funções foram determinadas. Uma forma usualmente utilizada é dada por

$$\alpha_{i+1/2} = \text{sgn}(P_{i+1/2}) \frac{P_{i+1/2}^2}{10 + 2P_{i+1/2}^2} \quad (4.107)$$

$$\beta_{i+1/2} = \frac{1 + 0,005P_{i+1/2}^2}{1 + 0,05P_{i+1/2}^2} \quad (4.108)$$

onde $\text{sgn}(a)$ é igual a 1 se $a \geq 0$ e igual a -1, se $a < 0$.

Utilizando as Equações (4.103) e (4.104), podemos continuar a discretização a partir da Equação (4.69), para obter

$$F_e \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \phi_E \right] - F_w \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \phi_P \right] = \Gamma_e \beta_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} \right) - \Gamma_w \beta_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w} \right) \quad (4.109)$$

que pode ser colocada na forma da Equação (4.73) com

$$a_E = -F_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \frac{\Gamma_e \beta_e}{\delta x_e} \quad (4.110)$$

$$a_W = F_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \frac{\Gamma_w \beta_w}{\delta x_w} \quad (4.111)$$

e com a_P dado na forma da Equação (4.76), isto é, $a_P = a_E + a_W + (F_e - F_w)$.

Os coeficientes dados pelas Equações (4.110) e (4.111) são sempre positivos, de modo que o sistema também é estável (satisfaz a regra 2). Quando $P \rightarrow 0$, $\alpha \rightarrow 0$ e $\beta \rightarrow 1$, recuperando-se a aproximação para o problema puramente difusivo. Já para $P \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow 1/2$ e $\beta \rightarrow 0$ levando a $a_E \rightarrow 0$ e $a_W \rightarrow F_w$, enquanto que para $P \rightarrow -\infty$, $\alpha \rightarrow -1/2$ e $\beta \rightarrow 0$ levando a $a_E \rightarrow F_e$ e $a_W \rightarrow 0$, que são os resultados fisicamente esperados para transporte puramente convectivo.

A utilização dos esquemas de interpolação vistos acima evita o aparecimento de oscilações sem base física na solução numérica do problema. Entretanto, com o aumento da velocidade do escoamento, a aproximação tende a ser do tipo “upwind”, que gera a chamada difusão numérica, tópico da seção seguinte.

Os esquemas de interpolação vistos acima são ditos unidimensionais, pois utilizam apenas a informação existente na direção da coordenada em questão para determinar os componentes dos fluxos nesta coordenada. Existem esquemas de interpolação multidimensionais, mas este assunto não está no escopo do presente curso.

4.3.3- Difusão numérica

As aproximações numéricas obtidas por volumes finitos envolvem os valores da variável dependente nos pontos de uma dada malha. Portanto, a equação discretizada obtida por volumes finitos é similar à obtida por diferenças finitas, sendo também possível associar um erro de truncamento com a primeira, tal qual como é feito para a segunda. A característica do erro de truncamento da equação discretizada fornece qual o tipo de comportamento que a solução numérica pode apresentar.

Considere a aproximação por diferenças centrais da Equação (4.67), dada pelas Equações (4.73) a (4.76) e a aproximação pelo esquema “upwind”, dado pelas Equações (4.73), (4.76), (4.82) e (4.83). Para simplificar a análise, será admitido que a malha é uniforme, Γ é constante e F

> 0 , de forma que D e P são constantes. Neste caso, as equações discretizadas ficam, após simplificação do valor de D , na forma

$$2\phi_p = (1 - 0.5P)\phi_E + (1 + 0.5P)\phi_W \quad (4.112)$$

para o esquema de diferenças centrais, e

$$(2 + P)\phi_p = \phi_E + (1 + P)\phi_W \quad (4.113)$$

para o esquema “upwind”.

Lembrando que $\phi_p = \phi_j$, $\phi_E = \phi_{j+1}$ e $\phi_W = \phi_{j-1}$, e usando séries de Taylor para ϕ_E e ϕ_W similares às apresentadas pelas Equações (3.4) e (3.5), pode-se escrever a Equação (4.112) na forma

$$F \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_p + \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_p \frac{(\Delta x)^2}{6} + O(\Delta x)^3 \right] = \Gamma \left[\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_p + \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right)_p \frac{(\Delta x)^2}{48} + O(\Delta x)^3 \right] \quad (4.114)$$

e a Equação (4.113) como

$$F \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_p - \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_p \frac{\Delta x}{2} + O(\Delta x)^2 \right] = \Gamma \left[\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_p + \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right)_p \frac{(\Delta x)^2}{48} + O(\Delta x)^3 \right] \quad (4.115)$$

As Equações (4.114) e (4.115) são as chamadas *equações modificadas* da Equação (4.67) para cada um dos dois esquemas numéricos. Uma equação modificada representa a aproximação da equação diferencial original através de um esquema numérico de discretização, onde o erro de truncamento do esquema numérico é explicitado.

Nas Equações (4.114) e (4.115), apenas o primeiro termo do erro de truncamento de cada uma das aproximações das derivadas foi explicitado. Na aproximação por diferenças centrais, Equação (4.114), o erro de truncamento das derivadas primeira e segunda tem a mesma ordem, envolvem derivadas de ordem superior a segunda. Já na equação modificada do esquema “upwind”, Equação (4.115), a derivada primeira tem um erro de primeira ordem, envolvendo a derivada segunda da função. Assim, dentro da ordem de aproximação de $(\Delta x)^2$, a Equação (4.115) pode ser escrita na forma

$$F \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_p = \left(\Gamma + F \frac{\Delta x}{2} \right) \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_p + O(\Delta x)^2 \quad (4.116)$$

onde se vê, claramente, o surgimento de um termo difusivo extra devido a discretização, isto é, a *difusão numérica*. O coeficiente deste termo difusivo extra é chamado de *difusividade numérica* ($F\Delta x/2$, neste caso). Note que a difusividade numérica tende a zero com o refinamento da malha.

O comportamento da solução numérica utilizando os esquemas de diferenças centrais e “upwind” serão completamente diferentes, devido a existência de difusão numérica no segundo. Os termos do erro de truncamento na Equação (4.114) levam, dependendo do número de Péclet da malha, à presença das chamadas *oscilações numéricas* na solução por diferenças centrais.

Por exemplo, a Equação (4.67) com Γ constante e $F/\Gamma = 20$, foi resolvida no domínio $0 < x < 1$, com condições de contorno $\phi(0) = 0$ e $\phi(1) = 1$, utilizando o esquema de diferenças centrais e “upwind”. Os resultados obtidos para 8 divisões do intervalo, isto é, $\Delta x = 0,125$, são mostrados na Figura 4.9. Neste caso, o número de Péclet físico é igual a 20, enquanto que o número de Péclet da malha é igual a 2,5. Da Figura 4.9, fica patente tanto o fenômeno das oscilações numéricas, quanto o efeito da difusão numérica na redução do gradiente da variável dependente. Cabe ressaltar que, para qualquer um dos dois esquemas numéricos utilizados, a solução correta do problema pode ser obtida, dentro de qualquer grau de tolerância, pela redução do tamanho do volume finito da malha.

4.3.4- Problemas convectivo-difusivos multidimensionais

A generalização do uso dos esquemas de interpolação para problemas convectivo-difusivos multidimensionais é facilmente obtida. Considere o problema bidimensional de convecção-difusão dado pelas equações da continuidade e da conservação da grandeza ϕ escritas na forma

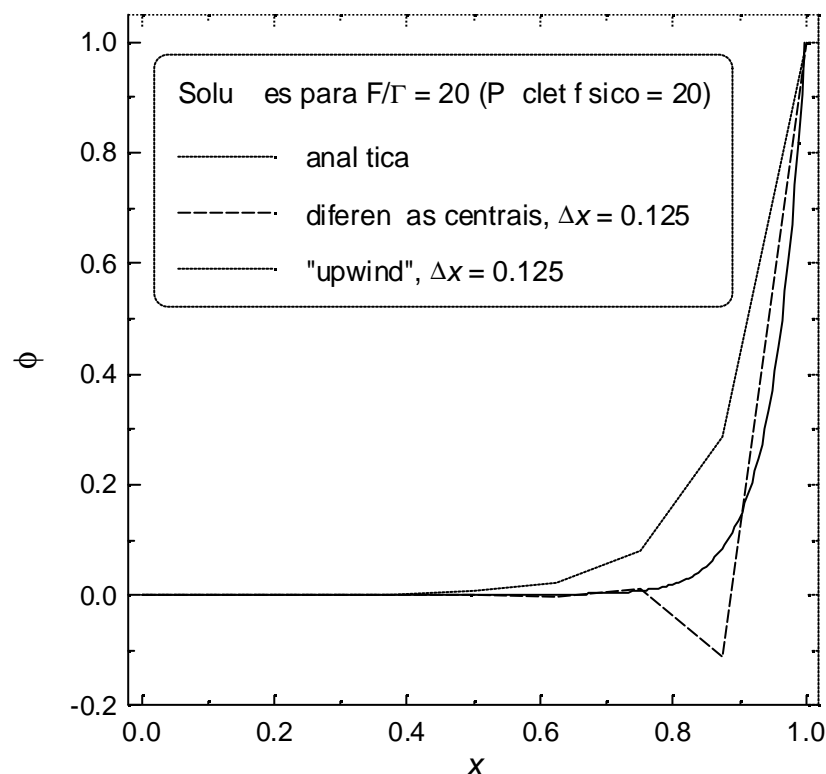


Figura 4.9 - Difusão e oscilações numéricas.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} = 0 \quad (4.117)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = S \quad (4.118)$$

onde foram definidos os fluxos convectivos, F_x e F_y , e os fluxos convectivo-difusivos, J_x e J_y , em cada direção coordenada, por

$$F_x = \rho u, \quad F_y = \rho v \quad (4.119)$$

$$J_x = \rho u\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad J_y = \rho v\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (4.120)$$

A discretização das Equações (4.117) e (4.118) na malha apresentada na Figura 4.3, usando o operador dado pela Equação (4.9), leva a

$$(\rho_P - \rho_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} = \int_s^n (F_x)_w^e dy + \int_w^e (F_y)_s^n dx \quad (4.121)$$

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} = \int_s^n (J_x)_w^e dy + \int_w^e (J_y)_s^n dx + (S_C + S_P \phi_P) \Delta V \quad (4.122)$$

Definindo os fluxos totais nas faces através de

$$F_e = \int_s^n (F_x)_e^e dy, \quad F_w = \int_s^n (F_x)_w^e dy, \quad F_n = \int_w^e (F_y)_n^e dx, \quad F_s = \int_w^e (F_y)_s^e dx \quad (4.123)$$

$$J_e = \int_s^n (J_x)_e^e dy, \quad J_w = \int_s^n (J_x)_w^e dy, \quad J_n = \int_w^e (J_y)_n^e dx, \quad J_s = \int_w^e (J_y)_s^e dx \quad (4.124)$$

pode-se escrever as Equações (4.121) e (4.122) na forma

$$(\rho_P - \rho_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} = F_e - F_w + F_n - F_s \quad (4.125)$$

$$(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \frac{\Delta V}{\Delta t} = J_e - J_w + J_n - J_s + (S_C + S_P \phi_P) \Delta V \quad (4.126)$$

Multiplicando-se a Equação (4.125) por ϕ_P e diminuindo o resultado da Equação (4.126), obtém-se

$$(\phi_P - \phi_P^0) \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t} + (J_e - \phi_P F_e) - (J_w - \phi_P F_w) + (J_n - \phi_P F_n) - (J_s - \phi_P F_s) = (S_C + S_P \phi_P) \Delta V \quad (4.127)$$

Tal como no problema puramente difusivo, os valores de todos os fluxos só podem ser aproximados em um ponto sobre cada uma das faces, ponto obtido pela interseção da curva $x = x_P$ ou $y = y_P$ com a face. Estes valores serão considerados como representativos sobre as faces correspondentes, de modo que os integrandos das Equações (4.123) e (4.124) são considerados constantes, resultando em

$$F_e = \Delta y (F_x)_e, \quad F_w = \Delta y (F_x)_w, \quad F_n = \Delta x (F_y)_n, \quad F_s = \Delta x (F_y)_s \quad (4.128)$$

$$J_e = \Delta y (J_x)_e, \quad J_w = \Delta y (J_x)_w, \quad J_n = \Delta x (J_y)_n, \quad J_s = \Delta x (J_y)_s \quad (4.129)$$

onde $(F_x)_e$ e $(F_x)_w$ são avaliados sobre a curva $y = y_P$ e $(F_y)_n$ e $(F_y)_s$ são avaliados sobre a curva $x = x_P$.

Analisaremos, primeiramente, os esquemas de interpolação baseados nos fluxos convectivo-difusivos. A partir das Equações (4.92) e (4.93), para o problema unidimensional, pode-se escrever os fluxos convectivo-difusivos unidimensionais, em cada direção coordenada, como

$$J = D[B(P)\phi_i - A(P)\phi_{i+1}] \quad (4.130)$$

Utilizando ainda a propriedade dada pela Equação (4.95), obtém-se as expressões envolvendo os fluxos da Equação (4.127) na forma

$$J_e - \phi_P F_e = \Delta y D_e A(P_e)(\phi_P - \phi_E), \quad J_w - \phi_P F_w = \Delta y D_w B(P_w)(\phi_W - \phi_P) \quad (4.131)$$

$$J_n - \phi_P F_n = \Delta x D_n A(P_n)(\phi_P - \phi_N), \quad J_s - \phi_P F_s = \Delta x D_s B(P_s)(\phi_S - \phi_P) \quad (4.132)$$

onde

$$P_e = \frac{(F_x)_e \delta x_e}{\Gamma_e}, \quad P_w = \frac{(F_x)_w \delta x_w}{\Gamma_w}, \quad P_n = \frac{(F_y)_n \delta y_n}{\Gamma_n}, \quad P_s = \frac{(F_y)_s \delta y_s}{\Gamma_s} \quad (4.133)$$

Substituindo as Equações (4.131) e (4.132) na Equação (4.127), obtém-se a equação discretizada na forma da Equação (4.56), repetida abaixo

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.56)$$

onde

$$a_E = \Delta y D_e A(P_e) \quad (4.134)$$

$$a_W = \Delta y D_w B(P_w) \quad (4.135)$$

$$a_N = \Delta x D_n A(P_n) \quad (4.136)$$

$$a_S = \Delta x D_s B(P_s) \quad (4.137)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta V \quad (4.138)$$

e os coeficientes b e a_P^0 são definidos pelas Equações (4.62) e (4.63), repetidas abaixo.

$$b = a_P^0 \phi_P^0 + S_C \Delta V \quad (4.62)$$

$$a_P^0 = \rho_P^0 \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.63)$$

Comparando as equações acima com a discretização do problema bidimensional puramente difusivo com “lagging” de ρ , Equações (4.56) a (4.60) e (4.62) a (4.64), vê-se, claramente, que as equações discretizadas para os dois problemas são diferentes apenas em relação aos coeficientes das variáveis nos volumes vizinhos no espaço do volume finito de centro P .

A aplicação do esquema de interpolação WUDS, Equações (4.103) e (4.104), à Equação (4.127) leva a uma equação discretizada na forma da Equação (4.56), com coeficientes a_P , b e a_P^0 definidos pelas Equações (4.138), (4.62) e (4.63), respectivamente, e com os outros coeficientes dados por

$$a_E = \Delta y \left[-(F_x)_e \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \frac{\beta_e \Gamma_e}{\delta x_e} \right] \quad (4.134)$$

$$a_W = \Delta y \left[(F_x)_w \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \frac{\beta_w \Gamma_w}{\delta x_w} \right] \quad (4.135)$$

$$a_N = \Delta x \left[-(F_y)_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) + \frac{\beta_n \Gamma_n}{\delta y_n} \right] \quad (4.136)$$

$$a_S = \Delta x \left[(F_y)_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \frac{\beta_s \Gamma_s}{\delta y_s} \right] \quad (4.137)$$

onde os pares de coeficientes (α_e, β_e) , (α_w, β_w) , (α_n, β_n) e (α_s, β_s) são calculados pelas Equações (4.107) e (4.108), utilizando os valores de P_e , P_w , P_n e P_s , respectivamente.

4.4- Aplicações

Nesta seção vamos aplicar o método dos volumes finitos a dois exemplos, um para um problema puramente difusivo e outro para um problema convectivo-difusivo. O problema difusivo é o do desenvolvimento do perfil radial de temperatura na entrada de um tubo de um trocador de calor, cujo modelo de parâmetros distribuídos foi desenvolvido na Seção 1.6 e resolvido pelo método das diferenças finitas na Seção 3.4.3. Isto permitirá a visualização das semelhanças e diferenças entre os métodos de diferenças finitas e volumes finitos.

O problema convectivo-difusivo que será analisado corresponde ao problema transiente do desenvolvimento do perfil axial de temperatura média em um tubo de um trocador de calor, cujo modelo a parâmetros parcialmente distribuídos foi desenvolvido na Seção 1.5. A solução deste problema no estado estacionário foi objeto de diversos exemplos ao longo da Seção 3.3, utilizando o método das diferenças finitas.

4.4.1- Problema difusivo

O desenvolvimento do perfil radial de temperatura na entrada de um tubo mantido a uma temperatura constante e superior à de entrada do fluido é, fisicamente, um problema de convecção. Entretanto, a sua solução tem caráter puramente difusivo.

As Equações (1.111) a (1.115) descrevem o modelo para o problema em questão, que foi colocado em uma forma independente do número de Péclet físico, Pe , através das Equações (3.89) a (3.92), que são aqui representadas na sua forma conservativa

$$(1 - \eta^2) \frac{\partial \Theta}{\partial \bar{\zeta}} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right) \quad (4.138)$$

$$\bar{\zeta} = 0, \quad \Theta = 0 \quad (4.139)$$

$$\eta = 1, \quad \Theta = 1 \quad (4.140)$$

$$\eta = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} = 0, \text{ (por simetria)} \quad (4.141)$$

Um dos resultados mais relevantes do modelo é a determinação do número de Nusselt baseado no diâmetro, Nu_D , que é obtido pela Equação (3.99), reproduzida abaixo

$$Nu_D = \frac{2}{1 - \bar{\Theta}} \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \bigg|_{\eta=1}, \quad \bar{\Theta} = 4 \int_0^1 (1 - \eta^2) \Theta \eta d\eta \quad (3.99)$$

A discretização da Equação (4.138), será feita em uma malha similar à da Figura 4.2, com volumes inteiros no contorno, utilizando balanços para incorporar as condições de contorno ao problema (ver Seção 4.2.4.3). O primeiro passo é aplicar o operador

$$\int_{\zeta^0}^{\bar{\zeta}} d\bar{\zeta} \int_w^e \eta d\eta \quad (4.142)$$

à Equação (4.138), que, após a utilização do método de Euler implícito e a hipótese que Θ dentro do volume pode ser representado por Θ_P , leva a

$$(\Theta_P - \Theta_P^0) \int_{\eta_w}^{\eta_e} \eta(1 - \eta^2) d\eta = \Delta\bar{\zeta} \left(\eta \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right)_w^e \quad (4.143)$$

Aproximando os termos de fluxo difusivo similarmente à Equação (4.15), isto é

$$\left(\eta \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right)_w = \eta_w \frac{\Theta_P - \Theta_W}{\delta\eta_w}, \quad \left(\eta \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right)_e = \eta_e \frac{\Theta_E - \Theta_P}{\delta\eta_e} \quad (4.144)$$

pode-se escrever a equação discretizada na seguinte forma final

$$a_P \Theta_P = a_E \Theta_E + a_W \Theta_W + b \quad (4.145)$$

onde

$$a_E = \frac{\eta_e}{\delta\eta_e} \quad (4.146)$$

$$a_W = \frac{\eta_w}{\delta\eta_w} \quad (4.147)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^0 \quad (4.148)$$

$$b = a_P^0 \Theta_P^0 \quad (4.149)$$

$$a_P^0 = \frac{1}{\Delta\bar{\zeta}} \int_{\eta_w}^{\eta_e} \eta(1 - \eta^2) d\eta = \frac{\eta_e^2 - \eta_w^2}{2\Delta\bar{\zeta}} \left(1 - \frac{\eta_e^2 + \eta_w^2}{2} \right) \quad (4.150)$$

A aplicação da condição de contorno dada pela Equação (4.141) no primeiro volume da malha ($\eta_w = 0$) é bem fácil, pois, já que o fluxo em η_w será nulo, valem as Equações (4.145) a (4.150) com $a_W = 0$. No caso da condição de contorno dada pela Equação (4.140), utilizada no último volume da malha ($\eta_e = 1$, $\Theta_e = 1$), o fluxo difusivo em η_e deve ser calculado a partir de

$$\left(\eta \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right)_e = \eta_e \frac{\Theta_e - \Theta_p}{\delta \eta_e^-} = \frac{1 - \Theta_p}{\delta \eta_e^-} \quad (4.151)$$

levando à Equação (4.145) com $a_E = 0$, e modificando as Equações (4.148) e (4.149) para

$$a_p = \frac{1}{\delta \eta_e^-} + a_w + a_p^0 \quad (4.152)$$

$$b = a_p^0 \Theta_p^0 + \frac{1}{\delta \eta_e^-} \quad (4.153)$$

O sistema de equações algébricas assim formado é um sistema tridiagonal, podendo ser resolvido pelo algoritmo de Thomas (Seção 2.1.4), para cada passo de integração ao longo de $\bar{\zeta}$. O valor do número de Nusselt pode ser calculado, a partir da solução, por

$$Nu_D = \frac{2}{1 - \bar{\Theta}} \left(\frac{1 - \Theta_{p_N}}{\delta \eta_{e_N}^-} \right) \quad (4.154)$$

onde o subscrito N indica o no último volume finito da malha e o valor da temperatura adimensional média é calculada pela seguinte aproximação

$$\bar{\Theta} = 4 \sum_{i=1}^N \Theta_i a_{p_i}^0 \Delta \bar{\zeta} = 2 \sum_{i=1}^N \Theta_i (\eta_e^2 - \eta_w^2) \left(1 - \frac{\eta_e^2 + \eta_w^2}{2} \right) \quad (4.155)$$

Utilizando um passo de integração de $\Delta \bar{\zeta} = 10^{-4}$, a solução numérica do problema acima foi determinada para diversas malhas uniformes. Os resultados obtidos para Nu_D se encontram na Figura 4.10, onde se vê que a convergência espacial é obtida para cerca de 20 volumes na malha.

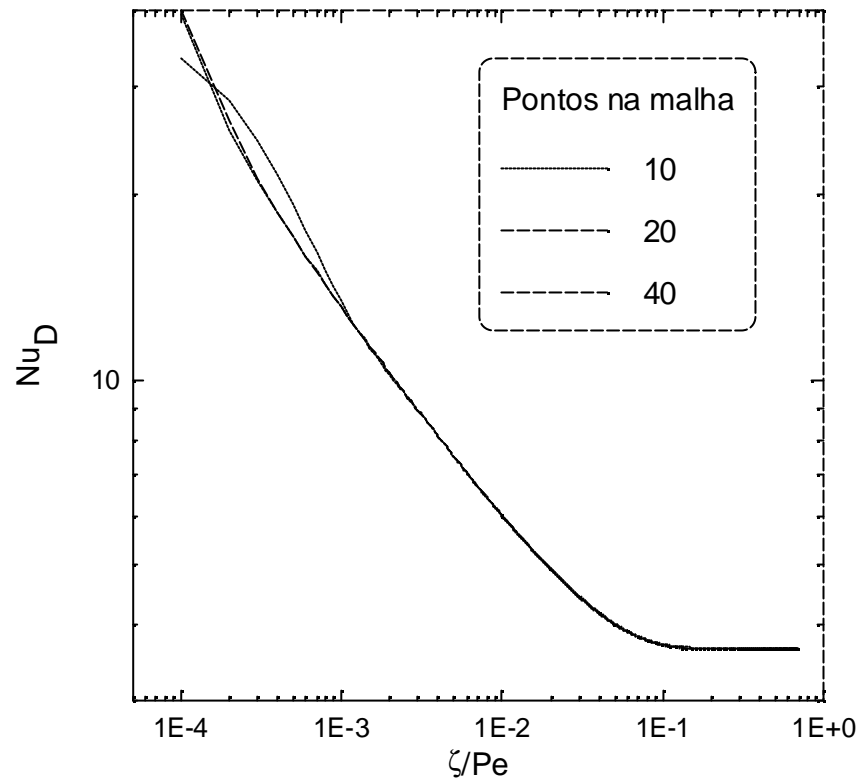


Figura 4.10 - Número de Nusselt obtido da solução por volumes finitos.

Comparando as soluções deste problema por volumes finitos e diferenças finitas (Seção 3.4.3), pode-se verificar que não surge uma singularidade no eixo de simetria do tubo para o método de volumes finitos, devido à utilização da forma divergente da equação de conservação. Como vimos na Seção 3.4.3, a aplicação do método de diferenças finitas ao problema requer o tratamento de uma singularidade no eixo de simetria, já que o mesmo utiliza a forma não-divergente da equação conservativa.

Além disso, comparando os resultados obtidos para Nu_D , representados nas Figuras 3.8 e 4.10, para os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, respectivamente, vê-se que o método de volumes finitos atingiu convergência com um número de volumes que é cerca da metade do número de pontos da malha usada no método de diferenças finitas. Esta maior eficiência do método de volumes finitos é usual e ocorre devido à sua propriedade de manter a conservação da grandeza, mesmo em malhas grosseiras.

4.4.2- Problema convectivo-difusivo

O problema convectivo-difusivo do desenvolvimento do perfil axial de temperatura em um tubo de calor será aqui resolvido. O modelo para este problema foi desenvolvido na Seção 1.5, consistindo nas Equações (1.92) a (1.95), reproduzidas abaixo

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = Pe \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 2Nu\phi \quad (1.92)$$

$$\tau = 0, \quad \phi = \phi(x) \quad (1.93)$$

$$x = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (1.94)$$

$$x = X, \quad \phi = 1 \quad (1.95)$$

Como no exemplo anterior, a discretização da Equação (1.92), será feita na malha representada na Figura 4.2, com volumes inteiros no contorno, utilizando balanços para incorporar as condições de contorno ao problema (ver Seção 4.2.4.3). O primeiro passo consiste na aplicação do operador

$$\int_{\tau^0}^{\tau} d\tau \int_w^e dx \quad (4.156)$$

à Equação (1.92). Utilizando o método de Euler implícito para a integração em τ , a hipótese que ϕ dentro do volume pode ser representado por ϕ_P e a utilização do conceito de fluxo convectivo-difusivo, obtém-se

$$(\phi_P - \phi_P^0) \frac{\Delta x}{\Delta \tau} + (J)_w^e = -2Nu\Delta x \phi_P \quad (4.157)$$

onde o fluxo convectivo-difusivo, J , é definido por

$$J = -Pe\phi - \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (4.158)$$

Note que o sinal negativo em frente ao número de Péclet físico é originário da hipótese de que a velocidade do fluido é positiva no sentido contrário ao do eixo x . Além disso, repare que o termo fonte foi linearizado com $S_C = 0$ e $S_P = -2Nu$, satisfazendo a regra 3 da Seção 4.2.6. Comparando as definições dadas pelas Equações (4.90) e (4.158), pode-se concluir que

$$F = -Pe, \quad \Gamma = 1 \quad (4.159)$$

que, juntamente com as definições de P e D , vistas nas Equações (4.84) e (4.92), respectivamente, obtém-se que

$$D = \frac{1}{\delta x}, \quad P = -Pe \delta x \quad (4.160)$$

Utilizando as Equações (4.92), (4.93) e (4.95), podemos escrever que

$$J = D(B(P)\phi_i - A(P)\phi_{i+1}) = DA(P)(\phi_i - \phi_{i+1}) + F\phi_i = DB(P)(\phi_i - \phi_{i+1}) + F\phi_{i+1} \quad (4.161)$$

pois $DP = F$. Aplicando as relações dadas pela Equação (4.161) aos fluxos J_e e J_w , obtém-se que

$$J_e = D_e A(P_e)(\phi_P - \phi_E) + F_e \phi_P \quad (4.162)$$

$$J_w = D_w B(P_w)(\phi_W - \phi_P) + F_w \phi_P \quad (4.163)$$

Substituindo as Equações (4.162) e (4.163) na Equação (4.157), e considerando ainda que $F_e = F_w$, pelo balanço de massa, a seguinte equação discretizada é obtida

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \quad (4.164)$$

onde

$$a_E = D_e A(P_e) \quad (4.165)$$

$$a_W = D_w B(P_w) \quad (4.166)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^0 + 2Nu\Delta x \quad (4.167)$$

$$b = a_P^0 \phi_P^0 \quad (4.168)$$

$$a_P^0 = \frac{\Delta x}{\Delta \tau} \quad (4.169)$$

A aplicação da condição de contorno dada pela Equação (1.94) no primeiro volume da malha ($x_w = 0$) implica, utilizando a Equação (4.158), que

$$J_w = F_w \phi_w \cong F_w \phi_P = -Pe \phi_P \quad (4.170)$$

onde a aproximação de que $\phi_w \cong \phi_P$ está de acordo com a condição de contorno de não existir fluxo difusivo em $x_w = 0$. Assim, a equação discretizada do volume do contorno com $x_w = 0$ é representada pelas Equações (4.164), (4.165), (4.167), (4.168) e (4.169) com $a_W = 0$.

No caso da condição de contorno dada pela Equação (1.95), utilizada no último volume da malha ($x_e = X$, $\phi_e = 1$), o fluxo convectivo-difusivo em x_e deve ser calculado para a região entre ϕ_P e ϕ_e , o qual, utilizando as Equações (4.159) e (4.161), pode ser escrito na forma

$$J_e - F_e^- \phi_P = J_e + Pe \phi_P = D_e^- A(P_e^-)(\phi_P - \phi_e) \quad (4.171)$$

onde o sobrescrito (-) indica que se está utilizando o intervalo δx_e^- nas definições de F , D e P . Desta forma, utilizando a condição de contorno, obtém-se

$$J_e + Pe\phi_p = D_e^- A(P_e^-)(\phi_p - 1), \quad D_e^- = \frac{1}{\delta x_e^-}, \quad P_e^- = -Pe\delta x_e^- \quad (4.172)$$

Desta forma, a equação discretizada do último volume da malha ($x_e = X$, $\phi_e = 1$) é representada pelas Equações (4.164), (4.166) e (4.169), com $a_E = 0$, e pelas equações

$$a_p = D_e^- A(P_e^-) + a_w + a_p^0 + 2Nu\Delta x \quad (4.173)$$

$$b = a_p^0 \phi_p^0 + D_e^- A(P_e^-) \quad (4.174)$$

Assim, o sistema de equações algébricas formado é um sistema com matriz de coeficientes tridiagonal, podendo ser resolvido pelo algoritmo de Thomas (Seção 2.1.4), para cada passo de integração ao longo do tempo adimensional τ . Note que, se for usada uma malha uniforme, $P_e = P_w = -Pe\delta x = \text{constante}$, para todos os volumes da malha. Desta forma, $A(P_e)$ e $B(P_w)$ precisam ser calculados apenas uma única vez para toda a malha.

O problema dado pela Equações (1.92) a (1.95), com a condição de que todo o fluido está, inicialmente, na temperatura de entrada, isto é, $\phi(x) = 1$, $\forall x$, foi resolvido numericamente para diversas malhas uniformes. Os valores dos parâmetros do problema foram estabelecidos como $X = 6$, $Pe = 5$ e $Nu = 1$. Os resultados que serão apresentados foram obtidos com um passo de integração $\Delta\tau = 10^{-3}$.

Os resultados obtidos para $\tau = 1$ e para o estado estacionário, usando malhas com 10, 20 e 40 volumes estão representados na Figura 4.11. Vê-se, claramente, que a convergência foi obtida com cerca de 20 volumes na malha. As maiores discrepâncias ocorrem no estado estacionário para valores de x próximos a zero, onde a variável ϕ assume valores muito baixos, sendo, efetivamente, igual a zero.

O comportamento do perfil de temperatura adimensional ao longo do tempo é dado na Figura 4.12, utilizando os resultados do cálculo com 40 volumes finitos. Percebe-se o rápido transiente do processo, levando a temperatura ao perfil estacionário em pouco tempo. Note, também, o elevado gradiente de temperatura, que se estabelece no regime estacionário, próximo à entrada do fluido.

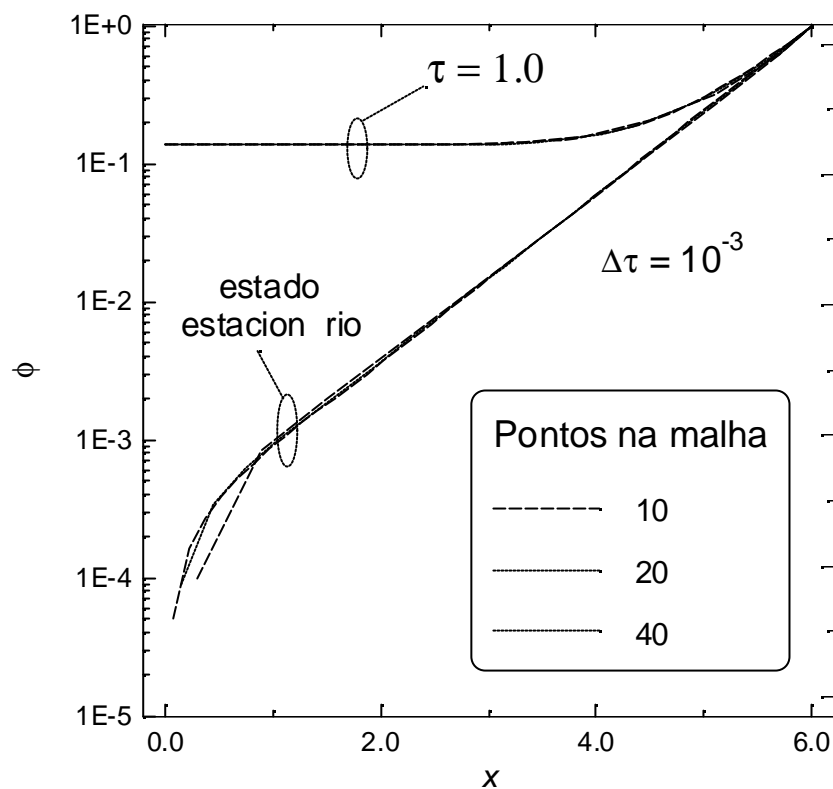


Figura 4.11 - Convergência espacial da solução numérica.

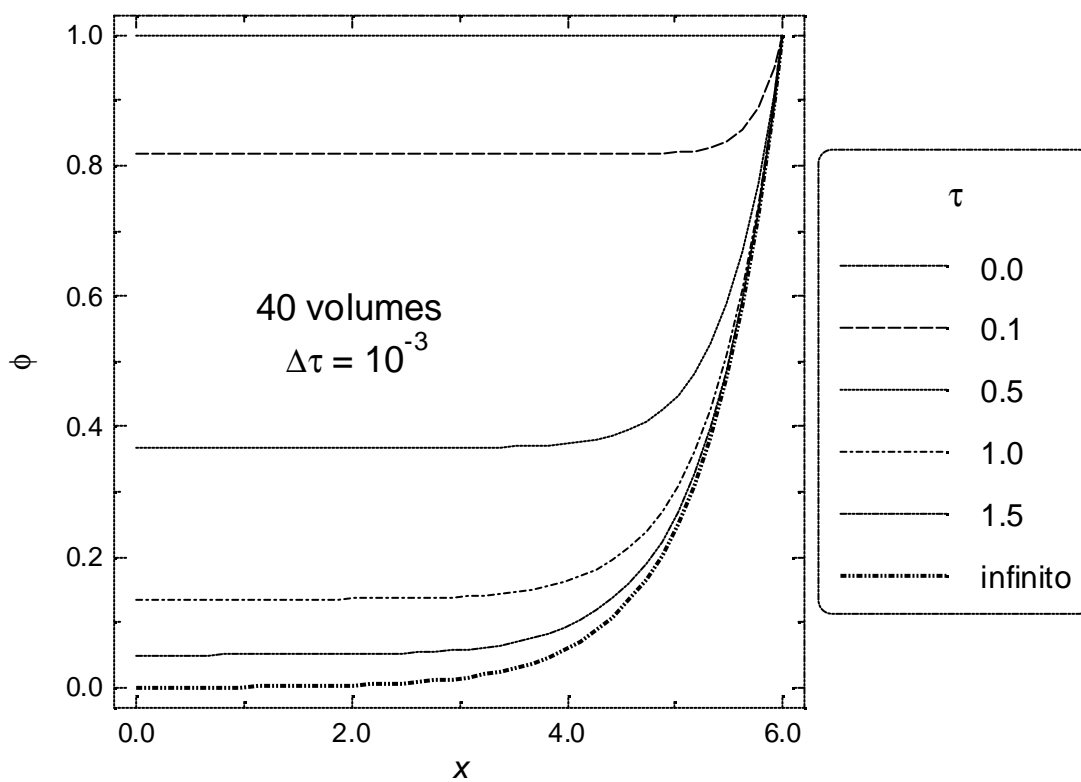


Figura 4.12 - Comportamento temporal do perfil de temperatura adimensional.

4.5- Exercícios

Exercício 4.1: Construa um programa computacional para resolver o problema de valor de contorno dado por

$$Pe \frac{d\phi}{dx} + \frac{d^2\phi}{dx^2} - 2Nu\phi = 0$$

$$x = 0, \quad \phi = 0$$

$$x = X, \quad \phi = 1$$

com $X = 6$, $Nu = 1$, $Pe = 1$ e malhas uniformes com 5, 10, 20, 40, 80 e 160 volumes finitos, utilizando uma rotina que implemente o algoritmo de Thomas. Calcule, para cada uma das soluções com mais de 5 volumes, a norma Euclidiana (Equação 2.40) do erro absoluto do vetor solução entre aproximações sucessivas, usando apenas os pontos correspondentes aos centros dos volumes da malha de 5 volumes. Utilize uma função de interpolação adequada, quando necessário. Estipulando um critério de tolerância absoluta (Equação 2.41), com $\epsilon_a = 10^{-3}$, determine qual é a menor malha que satisfaz este critério. Compare o resultado obtido com o do Exercício 3.1.

Exercício 4.2: Implemente a solução numérica do problema descrito abaixo utilizando o método dos volumes finitos, com $Bi = 0,1$ e $G = 2$.

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial y^2} + G\theta = 0, \quad 0 < x, y < 1$$

$$x = 0, \quad \frac{\partial\theta}{\partial x} = 0$$

$$y = 0, \quad \frac{\partial\theta}{\partial y} = 0$$

$$y = 1, \quad \frac{\partial\theta}{\partial x} + Bi\theta = 0$$

$$x = 1, \theta = 1$$

Use malhas uniformes com volumes inteiros no contorno e com 5, 10 e 20 volumes em cada direção coordenada. Resolva o sistema de equações algébricas obtido pela discretização através do método SOR (Seção 2.1.6). Compare a convergência obtida com a do método das diferenças finitas, obtida no Exemplo 3.8. Utilizando a malha 20×20 , calcule o perfil da variável θ ao longo de y , para $x = 0$, e compare o resultado com o obtido no Exercício 3.7.

Exercício 4.3: Implemente a solução numérica do problema difusivo descrito na Seção 4.4.1, utilizando as equações discretizadas lá obtidas. Utilizando uma malha de 40 volumes finitos e um

passo de integração de $\Delta \bar{\zeta} = 10^{-4}$, calcule o perfil da temperatura adimensional média ao longo de $\bar{\zeta}$ e o represente graficamente.

Exercício 4.4: Construa um programa computacional para resolver o problema descrito na Seção 4.4.2, para malhas de 10, 20, 40 e 80 volumes finitos, utilizando as equações discretizadas lá obtidas. Com os seguintes valores para os parâmetros do problema: $\phi(x) = 1, \forall x, X = 6, Pe = 1$ e $Nu = 1$, calcule e represente graficamente a evolução do perfil de temperatura no tempo, determinando qual é a menor malha para a qual a convergência é visualmente atingida. Compare o resultado obtido com o do Exemplo 3.1, resolvido por diferenças finitas (com $X = 4$) e com o do Exercício 4.1, que resolve o problema estacionário correspondente. Determine também qual é o tempo adimensional necessário para se atingir o regime estacionário em todos os pontos, utilizando como critério que a norma Euclidiana da diferença entre os vetores solução no início e final do passo de integração deve satisfazer à tolerância absoluta de 10^{-3} .

Capítulo 5

Técnicas de Resíduos Ponderados

Neste capítulo serão estudadas técnicas adequadas para resolução de equações diferenciais ordinárias e parciais, como nos modelos a parâmetros distribuídos desenvolvidos no Capítulo 1. As técnicas que serão aqui apresentadas são usualmente utilizadas para resolver problemas com domínios finitos e bem definidos, sendo por isto de uso mais comum em problemas que envolvem variações espaciais.

5.1- Introdução

Todas as técnicas de discretização e resolução das equações diferenciais apresentadas nos Capítulos 3 e 4 fazem uso de aproximações localizadas da solução procurada. Ou seja, as derivadas e os balanços são aproximados localmente na malha por aproximações baseadas em técnicas de diferenças. Em muitos problemas pode ser conveniente dar um enfoque global ao esquema numérico proposto. Por exemplo, por que não dizer que a solução do problema pode ser aproximada por uma soma de exponenciais ou por um polinômio de um certo grau ? Embora esta pergunta possa parecer a princípio um tanto arbitrária, o fato é que problemas simples e lineares apresentam frequentemente soluções na forma de somatórios infinitos de funções polinomiais, exponenciais, trigonométricas, etc. Além disto, sabe-se que funções matemáticas¹ podem ser aproximadas com grau arbitrário de precisão por polinômios de grau variável ou por somas de senos e cossenos. Desta forma, por que não admitir que a solução procurada tem uma forma adequada, que depende de certos parâmetros que precisam ser determinados a partir das equações que descrevem o modelo do processo ? Esta é a idéia básica que permeia todo este Capítulo.

5.2- Bases e Ortogonalidade

Para que as aproximações propostas não sejam completamente arbitrárias, é conveniente introduzirmos o conceito de base. Para tanto, seja um conjunto de elementos com propriedades especificadas, a qual chamaremos aqui de Espaço. Por exemplo, chama-se de

¹ As funções têm que satisfazer certos requisitos matemáticos que são discutidos intensivamente em livros de Análise Funcional. Tais aspectos técnicos são omitidos propositalmente destas notas de aula.

Espaço Euclidiano ao conjunto de n-tuplas (vetores de dimensão n) reais, com tamanho ou norma definido na forma:

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2} \quad (5.1)$$

onde x_i é a componente i do vetor x . Uma base do espaço é um conjunto linearmente independente de elementos (vetores) do espaço capaz de gerar todos os demais vetores do espaço como combinações lineares. Por exemplo, seja o vetor arbitrário do Espaço Euclidiano tri-dimensional, $z^T = (a, b, c)$. É fácil perceber que o conjunto de vetores do espaço $B = \{ (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1) \}$ é uma base, pois, qualquer que seja z , é possível escrever:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

Da mesma forma, é impossível escrever quaisquer dos vetores da base como combinação linear dos demais, de maneira que o conjunto B é de fato uma base do Espaço Euclidiano tri-dimensional.

É importante enfatizar que um espaço pode ser descrito por infinitas bases diferentes. Por exemplo, o Espaço Euclidiano tri-dimensional pode ser descrito em termos de muitas outras bases, dentre as quais podemos citar a base $C = \{ (1, 0, 0), (0, 1, 0), (1, 1, 1) \}$. De acordo com esta base, o vetor arbitrário z pode ser representado por:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = (a - c) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + (b - c) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

Nem sempre é tão fácil achar bases para um certo espaço, mas, uma vez que uma base tenha sido encontrada, o estudo dos elementos do espaço fica extremamente mais simples, pois o estudo pode ser decomposto em termos da base do espaço.

Uma operação que é usualmente definida em um espaço qualquer é o produto interno². O produto interno permite generalizar a noção de ângulo, tão comum no nosso dia a dia. Por exemplo, uma definição conveniente de produto interno para o Espaço Euclidiano é da forma:

$$\langle z, x \rangle = z_1 x_1 + \dots + z_n x_n \quad (5.4)$$

² Para definir o produto interno, é necessário satisfazer certos axiomas que permitem fazer a analogia com o mundo real em que vivemos. Estes axiomas são discutidos intensivamente em livros de Análise Funcional.

e diz-se que os vetores são mutuamente ortogonais quando o produto interno entre eles é igual a zero.

Todos estes conceitos podem ser estendidos para o espaço de funções. Por exemplo, seja o conjunto de funções limitadas e integráveis ao quadrado na forma:

$$\int_0^l W(x) f^2(x) dx < \infty \quad (5.5)$$

onde $W(x)$, chamada de função peso, é estritamente positiva (não troca de sinal). As soluções dos modelos matemáticos de engenharia usualmente são membros deste conjunto particular de funções, onde $W(x)$ depende da geometria do problema. A Equação (5.5) garante que a solução não “explode” no intervalo analisado. Pode-se mostrar (depois de muito trabalho !!!!!!!) que a sequência polinomial infinita $\mathbf{B} = \{ 1, x, x^2, x^3, \dots, x^n, \dots \}$ é uma base deste espaço de funções, o que significa dizer que qualquer elemento (função limitada e integrável ao quadrado) pode ser descrito como uma soma infinita de termos polinomiais no intervalo $[0,1]$. Não é bonito ??? Se $W(x) = 1$ (geometria cartesiana), o conjunto $\mathbf{C} = \{ 1, \sin(\mathbf{p} x), \sin(2 \mathbf{p} x), \dots, \sin(n \mathbf{p} x), \dots, \cos(\mathbf{p} x), \cos(2 \mathbf{p} x), \dots, \cos(n \mathbf{p} x), \dots \}$ também é uma base do espaço, o que confirma o fato de que as bases não são únicas. A sequência de funções exponenciais de x , no entanto, NÃO FORMAM UMA BASE DESTES ESPAÇO DE FUNÇÕES, como podemos ser tentados a acreditar. É importante também salientar que o fato de usarmos o intervalo $[0,1]$ como referência não prejudica em nada a generalidade das afirmações feitas aqui, já que sempre podemos adimensionalizar as nossas equações (vide Capítulo 1).

Por tudo o que foi descrito, conclui-se que representar as soluções buscadas como somas finitas de funções polinomiais ou funções trigonométricas, com ordem crescente a depender do grau desejado para a aproximação, é uma estratégia inteligente, pois a sequência convergirá eventualmente para a solução real. O mesmo não se pode dizer das séries de funções exponenciais. Devido à simplicidade da manipulação, funções polinomiais costumam ser as escolhidas para estudos como os apresentados neste Capítulo.

Os conceitos de tamanho ou norma e produto interno podem ser também generalizados para o espaço de funções na forma:

$$\|f(x)\| = \sqrt{\int_0^l W(x) f^2(x) dx} \quad (5.6)$$

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^l W(x) f(x) g(x) dx \quad (5.7)$$

de maneira que duas funções são ditas ortogonais se

$$f \perp g = \langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^l W(x) f(x) g(x) dx = 0 \quad (5.8)$$

A base constituída pela sequência de monômios x^n não é ortogonal no espaço cartesiano, pois

$$\langle x^n, x^m \rangle = \int_0^l x^n x^m dx = \frac{x^{n+m+1}}{n+m+1} \Big|_0^l = \frac{l}{n+m+1} \neq 0 \quad (5.9)$$

5.3- Definição de Resíduo

Define-se como resíduo a função obtida quando se substitui a aproximação proposta na equação que se quer resolver. Por exemplo, seja o modelo de transferência de calor desenvolvido no Capítulo 1 e apresentado na Equação (1.96).

$$Pe \frac{d\mathbf{f}}{dx} + \frac{d^2\mathbf{f}}{dx^2} - 2Nu \mathbf{f} = 0 \quad (1.96)$$

Seja ainda a aproximação proposta na forma:

$$\mathbf{f}(x) = a + b x + c x^2 \quad (5.10)$$

O resíduo da aproximação tem a forma

$$Res(x) = Pe (b + 2 c x) + (2 c) - 2 Nu (a + b x + c x^2) \quad (5.11)$$

Se a aproximação fosse exata, o resíduo seria identicamente nulo em todos os pontos do intervalo considerado. Isto, no entanto, não é verdade, de maneira que o resíduo assume valores distintos do zero no intervalo e a aproximação não satisfaz a equação. Quanto melhor a aproximação, no entanto, mais próximo do zero está o resíduo da equação.

Como a aproximação proposta deve também satisfazer as condições de contorno, descritas pelas Equações (1.97) e (1.98), pode-se concluir que

$$\mathbf{f}(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$f(0) = a + b \cdot 0 + c \cdot 0^2 = a = 0 \quad (5.12)$$

$$f(1) = 1 \quad (1.98)$$

$$f(1) = a + b \cdot 1 + c \cdot 1^2 = b + c = 1 \quad (5.13)$$

de maneira que a Equação (5.11) pode ser reescrita na forma:

$$\begin{aligned} Res(x) = & Pe (1 - c + 2 c x) + (2 c) - 2 Nu \left((1 - c) x + c x^2 \right) = \\ & (Pe - 2 Nu x) + \left(2 x Pe - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2 \right) c \end{aligned} \quad (5.14)$$

que só depende do valor de c , já que os demais coeficientes são determinados pela obrigatoriedade de se satisfazer as condições de contorno.

De forma geral, podemos utilizar o exemplo para definir o que chamaremos de resíduo neste texto. Resíduo é a expressão resultante da substituição da aproximação proposta na equação que se quer resolver, após satisfazer as condições de contorno.

5.4- Técnicas de Ponderação de Resíduos

A idéia básica da técnica de ponderação dos resíduos é fazer com que a aproximação proposta represente da melhor forma possível a solução procurada, fazendo com que a aproximação minimize de alguma forma o resíduo da equação que se tenta resolver. Várias maneiras diferentes de interpretar a expressão “minimizar o resíduo” dão origem a diferentes técnicas de ponderação. Veremos abaixo algumas das propostas usuais de minimização encontradas na literatura.

5.4.1- Técnica de Mínimos Quadrados

Uma idéia bastante simples é a de procurar minimizar o resíduo quadrático da equação, de forma similar ao procedimento utilizado para estimar parâmetros a partir de dados experimentais. Neste caso, a técnica de ponderação pode ser escrita na forma:

$$\int_0^1 W(x) Res^2(x) dx \text{ deve ser mínimo} \quad (5.15)$$

Repare que, de acordo com o linguajar introduzido na Seção 5.2, procura-se fazer com que a norma do vetor $Res(x)$ seja o menor possível.

Procurar o mínimo de uma função é equivalente a procurar os pontos nos quais as derivadas em relação às variáveis a serem determinadas são iguais a zero. Desta forma, a Equação (5.15) pode ser colocada na forma genérica

$$\int_0^1 W(x) \text{Res}(x) \frac{\mathcal{I} \text{Res}(x)}{\mathcal{I} \mathbf{a}_i} dx = 0 \quad (5.16)$$

onde \mathbf{a}_i são os parâmetros a serem determinados. (Em geral, o número de parâmetros a serem determinados é igual ao número de parâmetros da aproximação menos o número de condições de contorno.)

Substituindo a Equação (5.14) na Equação (5.16), para resolver o problema proposto

$$\int_0^1 \left\{ \left((Pe - 2 Nu x) + (2 x Pe - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2) c \right) \right. \\ \left. (2 x Pe - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2) \right\} dx = 0 \quad (5.17)$$

$$c = - \frac{\int_0^1 (Pe - 2 Nu x) (2 x Pe - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2) dx}{\int_0^1 (2 x Pe - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2)^2 dx} \quad (5.18)$$

$$c = - \frac{30 Pe - 30 Nu - 5 Nu^2}{60 + 5 Pe^2 + 20 Nu + 2 Nu^2} \quad (5.19)$$

Comparando a solução aproximada com a solução teórica apresentada na Equação (1.99), para valores de $Pe=1$ e $Nu=1$, obtêm-se os resultados abaixo:

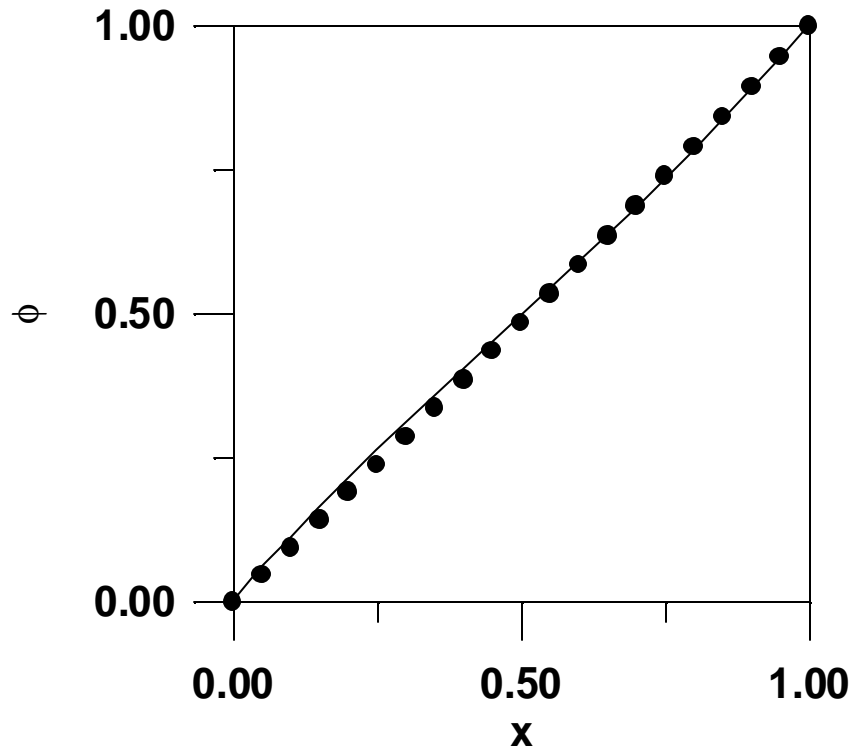


Figura 5.1 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximação Polinomial de 2ª Ordem (●) por Minimização dos Resíduos Quadráticos. ($Pe=1$, $Nu=1$)

Os resultados podem ser certamente considerados excelentes. Isto, contudo, nem sempre é verdade. Quando as condições de transferência de calor favorecem o aparecimento de gradientes de temperatura pronunciados (Nu muito baixo e Pe muito alto), veja o que acontece:

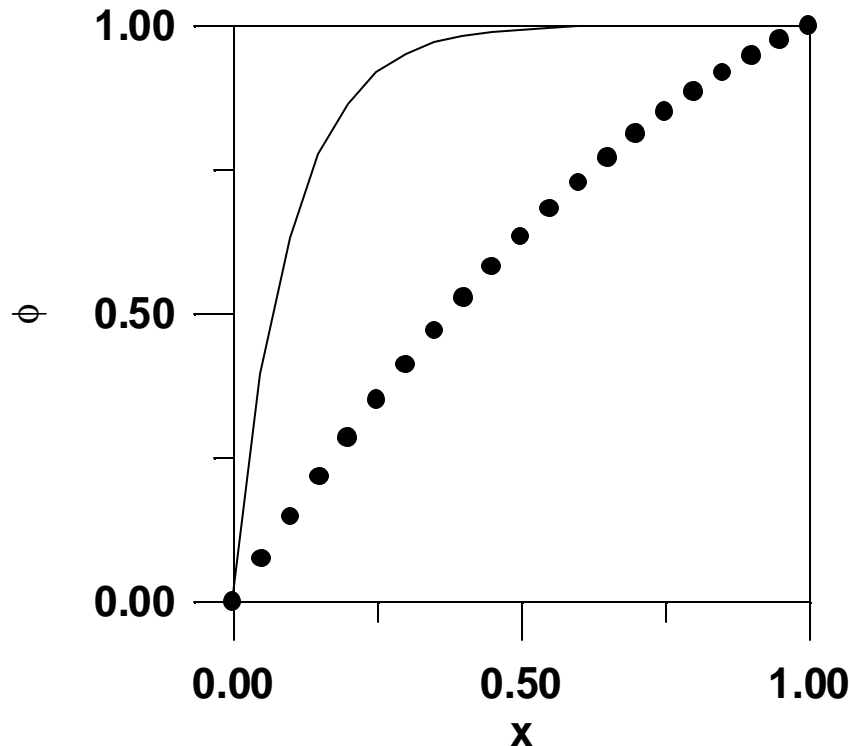


Figura 5.2 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximação Polinomial de 2ª Ordem (●) por Minimização dos Resíduos Quadráticos. ($Pe=10$, $Nu=0$)

Neste caso, verifica-se que aproximações de maior ordem teriam que ser tentadas, o que torna o procedimento analítico extremamente árduo.

É importante salientar que a solução exata nunca é conhecida em problemas reais (caso contrário, não haveria a necessidade de calcular a solução aproximada). Por isto, aproximações de maior ordem devem sempre ser obtidas e comparadas com aquelas de menor ordem, até que uma diferença inferior a uma certa tolerância especificada seja atingida.

A técnica de ponderação de mínimos quadrados é muito fácil de compreender, mas muito difícil de implementar em linguagem de programação científica, pois requer o cômputo de muitas integrais, nem sempre simples. Além disto, o problema final pode ganhar a forma de um conjunto complexo de equações algébricas não lineares, de difícil solução numérica. Por este motivo, outras técnicas de ponderação dos resíduos são usualmente utilizadas.

5.4.2- Técnica dos Momentos

Define-se como momento de ordem k de uma certa distribuição estatística a grandeza m_k :

$$\mathbf{m}_k = \int_0^l W(x) x^k f(x) dx \quad (5.20)$$

Esta definição é conveniente porque permite escrever vários parâmetros importantes da curva de distribuição em termos dos momentos e porque torna possível a interpretação física de algumas integrais da função de distribuição analisada. Por exemplo, o valor médio de x é dado por:

$$\bar{x} = \frac{\mathbf{m}_1}{\mathbf{m}_0} \quad (5.21)$$

a variância de x é dada por:

$$s^2 = \frac{\mathbf{m}_2 \mathbf{m}_0 - \mathbf{m}_1^2}{\mathbf{m}_0^2} \quad (5.22)$$

o valor total da distribuição no intervalo é

$$F = \int_0^l W(x) f(x) dx = \mathbf{m}_0 \quad (5.23)$$

Substituindo agora a função $f(x)$ pela função $Res(x)$, fica fácil concordar que gostaríamos que esta função fosse tão próxima da função zero quanto possível. Além disto, idealmente gostaríamos que esta função estivesse homogeneamente distribuída em todo o intervalo; ou seja, gostaríamos que a aproximação fosse igualmente boa em todo o domínio estudado. Mais ainda, como as equações de onde são obtidos os resíduos são equações de balanço, gostaríamos que, mesmo que o balanço local não fosse exatamente satisfeito pela solução aproximada, que o balanço global (integrado) ainda assim o fosse. Todas estas questões nos induzem a concluir que gostaríamos idealmente que todos os momentos das curvas de distribuição de resíduos ($Res(x)$) fossem iguais a zero. Não sendo isto possível, porque assim teríamos a solução verdadeira, então podemos pelo menos obrigar os primeiros momentos da curva de distribuição de resíduos a serem iguais a zero. Em outras palavras,

$$\mathbf{m}_k = \int_0^l W(x) x^k Res(x) dx = 0, \quad k = 0 \dots N-1 \quad (5.24)$$

onde N é o número de parâmetros livres da aproximação (como já comentado, usualmente da ordem do número de parâmetros da aproximação menos o número de condições de contorno a serem satisfeitas).

No exemplo que estamos trabalhando até aqui, $N=1$, de forma que apenas o momento de ordem 0 pode ser anulado. No entanto, não devemos desprezar este fato, pois isto significa dizer que o balanço global de energia está sendo satisfeito.

Substituindo-se a Equação (5.14) na Equação (5.24) e fazendo-se $k=0$, chega-se a:

$$\int_0^1 \left((Pe - 2 Nu x) + (2 x Pe - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2) c \right) dx = 0 \quad (5.25)$$

ou seja

$$c = \frac{3 Nu - 3 Pe}{6 + Nu} \quad (5.26)$$

As Figuras 5.3 e 5.4 mostram a qualidade das aproximações obtidas. Verifica-se uma vez mais a dificuldade de se obterem boas aproximações quando os perfis de temperatura são muito acentuados. É importante observar que técnicas de ponderação diferentes levam a aproximações distintas, como pode ser facilmente identificado comparando-se as Figuras 5.2 e 5.4.

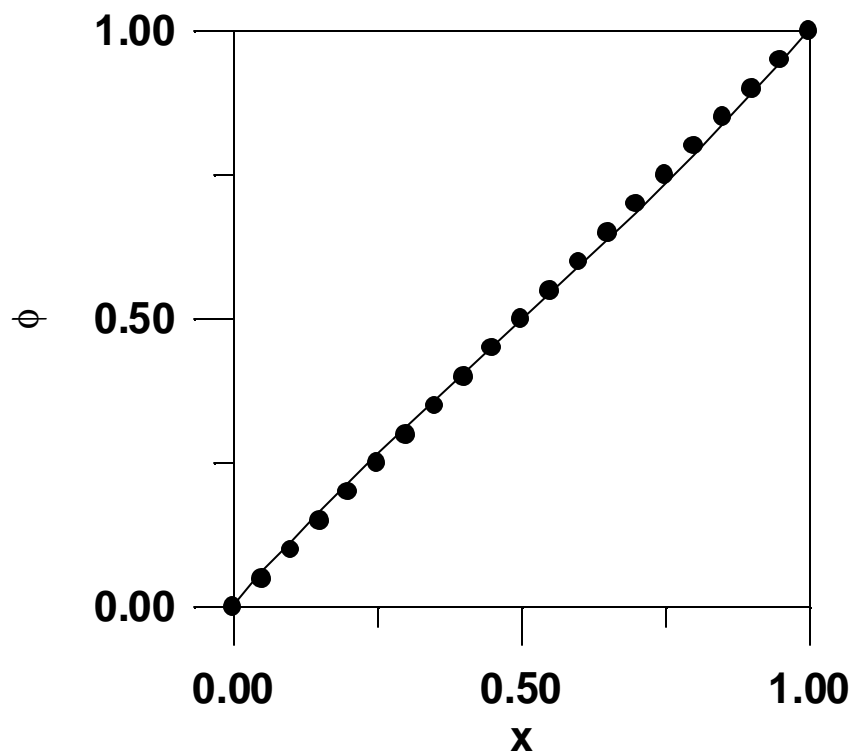


Figura 5.3 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximação Polinomial de 2ª Ordem (●) por Anulação do Momento de Ordem Zero. ($Pe=1$, $Nu=1$)

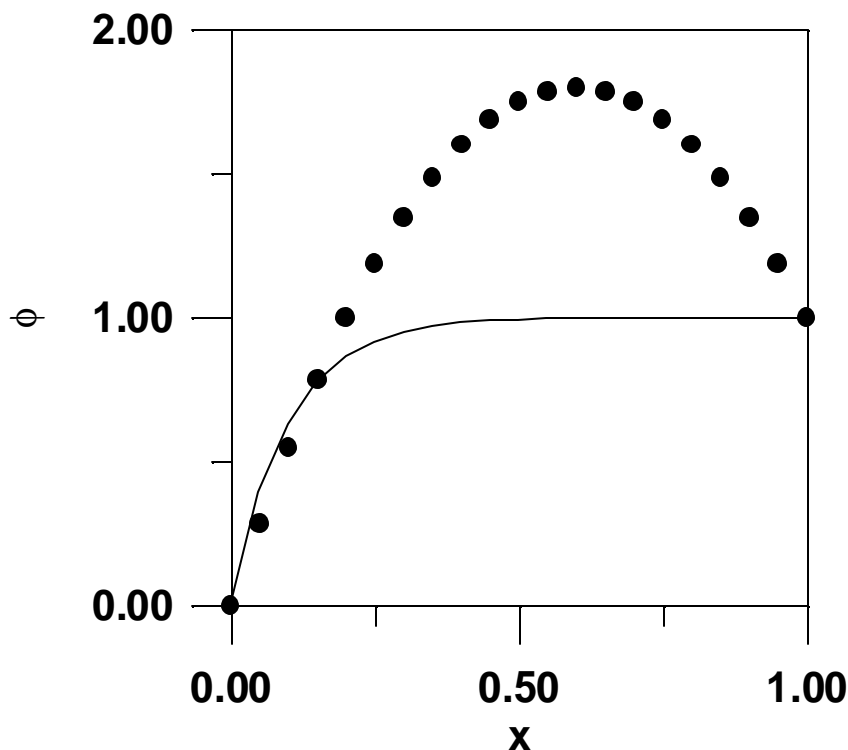


Figura 5.4 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximação Polinomial de 2ª Ordem (●) por Anulação do Momento de Ordem Zero. ($Pe=10$, $Nu=0$)

A técnica de ponderação dos momentos leva usualmente a expressões mais simples do que no caso da ponderação de mínimos quadrados. No entanto, o cômputo de várias integrais durante o processo de geração das equações que definem os parâmetros da aproximação não pode ser evitado. Por isto, a não ser quando o tratamento analítico da expressão do resíduo é fácil, esta técnica não é muito utilizada.

5.4.3- Técnica de Galerkin

A técnica de Galerkin foi desenvolvida por este célebre matemático russo de maneira bastante engenhosa. A idéia básica de Galerkin segue a seguinte linha de argumentação:

“Estamos aproximando a solução real por uma aproximada, constituída pela soma ponderada de um certo número de elementos de uma base infinita do espaço de funções. Portanto, a solução aproximada está inserida em uma pequena parte do espaço original (subespaço), formada por todas aquelas funções que podem ser obtidas pela combinação linear dos elementos da base tomados para construir a aproximação. Portanto, parece lógico tentar resolver a equação neste subespaço; ou seja, zerar as componentes do vetor resíduo neste subespaço. Em outras palavras, o resíduo deve ser ortogonal aos elementos do subespaço. De

forma análoga, isto significa dizer que o produto interno do resíduo com os vetores tomados como base da aproximação devem ser zerados.”

Portanto, seja a base do espaço de funções $\mathbf{B} = \{ z_1, \dots, z_n, \dots \}$, utilizada para construir a aproximação de grau n na forma $z = a_1 z_1 + \dots + a_n z_n$. O método de ponderação de Galerkin propõe que:

$$\langle \text{Res}(x), z_i(x) \rangle = 0$$

$$\int_0^1 W(x) \text{Res}(x) z_i(x) dx = 0, \quad i = 1 \dots N \quad (5.27)$$

onde N é o número de parâmetros livres da aproximação.

Repare que, se a base polinomial usual for tomada, o método dos momentos e o método de Galerkin coincidem. Isto garante também uma base mais aprofundada à técnica de ponderação dos momentos. No entanto, o método de Galerkin é muito mais genérico e pode ser aplicado a qualquer tipo de aproximação proposta. Por exemplo, tomemos a base trigonométrica e os elementos $\{ 1, \sin(\mathbf{p} x), \cos(\mathbf{p} x) \}$ para gerarmos a aproximação desejada no problema até aqui estudado. Neste caso, a aproximação tem a forma:

$$f(x) = a + b \sin(\mathbf{p} x) + c \cos(\mathbf{p} x) \quad (5.28)$$

e o resíduo da aproximação tem a forma:

$$\begin{aligned} \text{Res}(x) = & Pe \left(b \mathbf{p} \cos(\mathbf{p} x) - c \mathbf{p} \sin(\mathbf{p} x) \right) + \\ & \left(-b \mathbf{p}^2 \sin(\mathbf{p} x) - c \mathbf{p}^2 \cos(\mathbf{p} x) \right) - \\ & 2 Nu \left(a + b \sin(\mathbf{p} x) + c \cos(\mathbf{p} x) \right) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Como a aproximação proposta deve também satisfazer as condições de contorno, descritas pelas Equações (1.97) e (1.98), pode-se concluir que

$$f(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$f(0) = a + b \cdot 0 + c \cdot 1 = a + c = 0 \quad (5.30)$$

$$f(1) = 1 \quad (1.98)$$

$$f(1) = a + b \cdot 0 + c \cdot (-1) = a - c = 1 \quad (5.31)$$

Conclui-se, portanto, que $a = 0.5$ e $c = -0.5$. Obrigando-se o vetor resíduo a ser ortogonal ao primeiro elemento da base tomada para construir a aproximação:

$$\int_0^1 \left(\frac{Pe (b p \cos(px) - c p \sin(px)) + (-b p^2 \sin(px) - c p^2 \cos(px))}{2 Nu (a + b \sin(px) + c \cos(px))} \right) dx = 0 \quad (5.32)$$

$$b = \frac{Pe - Nu}{2 p + \frac{4 Nu}{p}} \quad (5.33)$$

As Figuras 5.5 e 5.6 abaixo mostram a qualidade das aproximações nos dois casos até aqui estudados. Primeiramente, a Figura 5.5 mostra que, neste caso, a qualidade da aproximação obtida com a base trigonométrica, com a mesma quantidade de parâmetros livres ($N=1$), é significativamente pior que a da solução obtida com a base polinomial usual. Em parte isto já podia ser esperado, pois a solução real não apresenta modos oscilatórios. No entanto, à medida que for aumentado o grau da aproximação, melhores serão os dados obtidos.

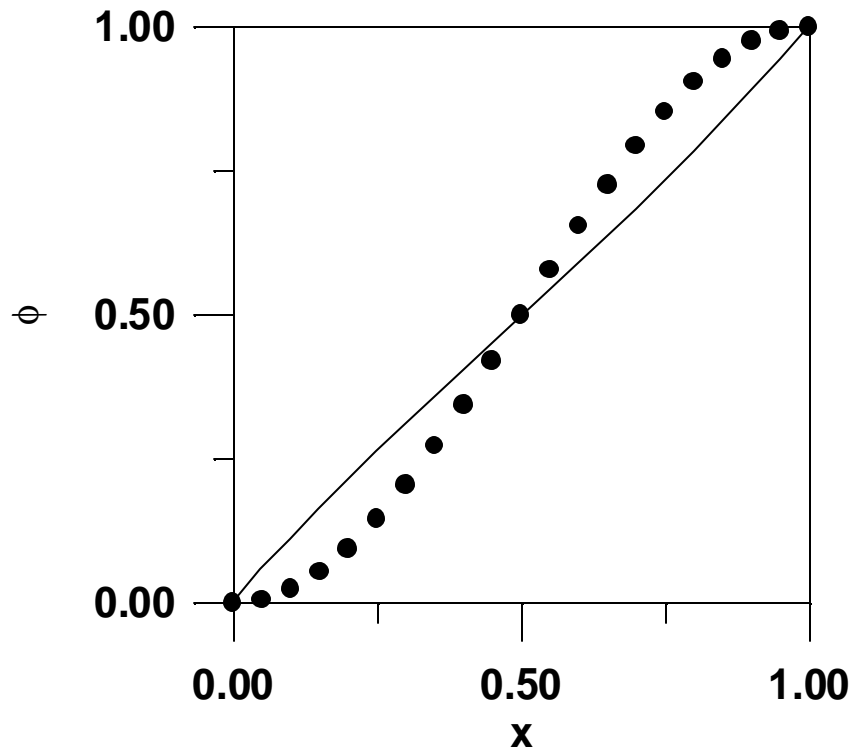


Figura 5.5 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximação Trigonômica de 1ª Ordem (●) por Galerkin. ($Pe=1$, $Nu=1$)

A Figura 5.6 abaixo mostra que a qualidade da aproximação piora bastante quando os gradientes de temperatura experimentam variações mais pronunciadas.

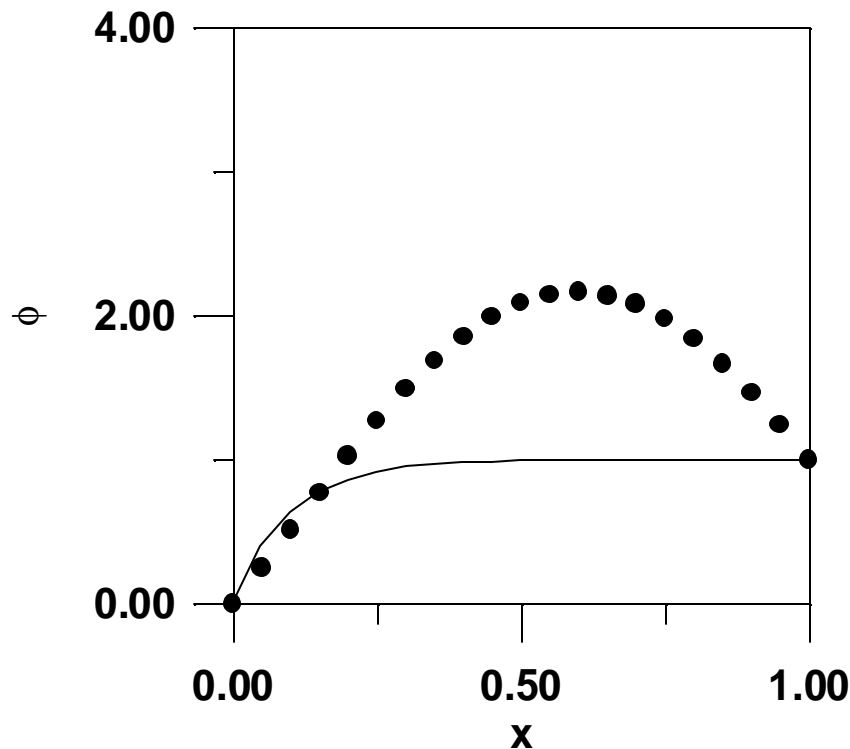


Figura 5.6 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximação Trigonométrica de 1ª Ordem (●) por Galerkin. ($Pe=10$, $Nu=0$)

A técnica de Galerkin não elimina a necessidade de se computar um número elevado de integrais durante o procedimento de geração dos parâmetros livres da aproximação. Por isto, a despeito da elegante significação desta técnica de ponderação de resíduos, seu uso é quase sempre limitado a problemas onde é possível calcular com facilidade os termos resultantes da integração do resíduo.

5.4.4- Técnica de Colocação

A técnica de colocação é talvez a mais simples, do ponto de vista filosófico, e a que resulta nas expressões de manipulação mais fácil. A técnica de ponderação de colocação propõe simplesmente que o vetor resíduo seja anulado em alguns pontos do intervalo de definição do problema, o que é equivalente a obrigar que a equação original seja satisfeita nestes pontos com a solução aproximada. A escolha destes pontos, a princípio, será considerada arbitrária. Nas próximas seções discutiremos com mais detalhe este aspecto do método.

Por exemplo, obrigando-se a expressão do resíduo (Equação (5.14)) a ser igual a zero no ponto médio do intervalo de definição

$$\left(Pe - 2 Nu \frac{1}{2} \right) + \left(2 \frac{1}{2} Pe - Pe + 2 + 2 Nu \frac{1}{2} - 2 Nu \left(\frac{1}{2} \right)^2 \right) c = 0 \quad (5.34)$$

conclui-se que

$$c = \frac{2 Nu - 2 Pe}{4 + Nu} \quad (5.35)$$

Devido à simplicidade da manipulação do resíduo, neste caso, vamos construir a aproximação polinomial de grau 3 para o problema.

$$f(x) = a + b x + c x^2 + d x^3 \quad (5.36)$$

O resíduo da aproximação tem a forma

$$Res(x) = Pe \left(b + 2 c x + 3 d x^2 \right) + (2 c + 6 d x) - 2 Nu \left(a + b x + c x^2 + d x^3 \right) \quad (5.37)$$

Como a aproximação proposta deve também satisfazer as condições de contorno, descritas pelas Equações (1.97) e (1.98), pode-se concluir que

$$f(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$f(0) = a + b 0 + c 0^2 + d 0^3 = a = 0 \quad (5.38)$$

$$f(1) = 1 \quad (1.98)$$

$$f(1) = a + b 1 + c 1^2 + d 1^3 = b + c + d = 1 \quad (5.39)$$

de maneira que a Equação (5.37) pode ser reescrita na forma:

$$Res(x) = Pe \left(1 - c - d + 2 c x + 3 d x^2 \right) + (2 c + 6 d x) - 2 Nu \left((1 - c - d) x + c x^2 + d x^3 \right) \quad (5.40)$$

$$Res(x) = (Pe - 2 Nu x) + (2 Pe x - Pe + 2 + 2 Nu x - 2 Nu x^2) c + (3 Pe x^2 - Pe + 6 x + 2 Nu x - 2 Nu x^3) d \quad (5.41)$$

Obrigando o resíduo a se anular nos pontos $x = 1/3$ e $x = 2/3$, chega-se a:

$$0 = \left(Pe - \frac{2}{3} Nu \right) + \left(-\frac{1}{3} Pe + 2 + \frac{2}{9} Nu \right) c + \left(-\frac{2}{3} Pe + 2 + \frac{16}{27} Nu \right) d \quad (5.42)$$

$$0 = \left(Pe - \frac{4}{3} Nu \right) + \left(\frac{1}{3} Pe + 2 + \frac{4}{9} Nu \right) c + \left(\frac{1}{3} Pe + 4 - \frac{4}{27} Nu \right) d \quad (5.43)$$

O sistema linear de equações apresentado acima pode ser resolvido com técnicas numéricas apresentadas no Capítulo 2. Se $Pe = Nu = 1$, então $c = -0.573891$ e $d = 0.447665$. Se $Pe = 10$ e $Nu = 0$, então $c = -7.941176$ e $d = 4.411764$.

Vê-se na Figura 5.7 que a qualidade da aproximação é excelente e pouco ganho se obtém com o incremento do grau da aproximação. Na Figura 5.8, no entanto, vê-se que melhora significativa da qualidade da aproximação é obtida quando o grau do polinômio aumenta. Vê-se também uma outra característica bastante peculiar de técnicas de aproximação global, como estas analisadas aqui - o comportamento oscilatório nas proximidades de regiões onde a solução não experimenta variações pronunciadas, aproximando-se de um patamar.

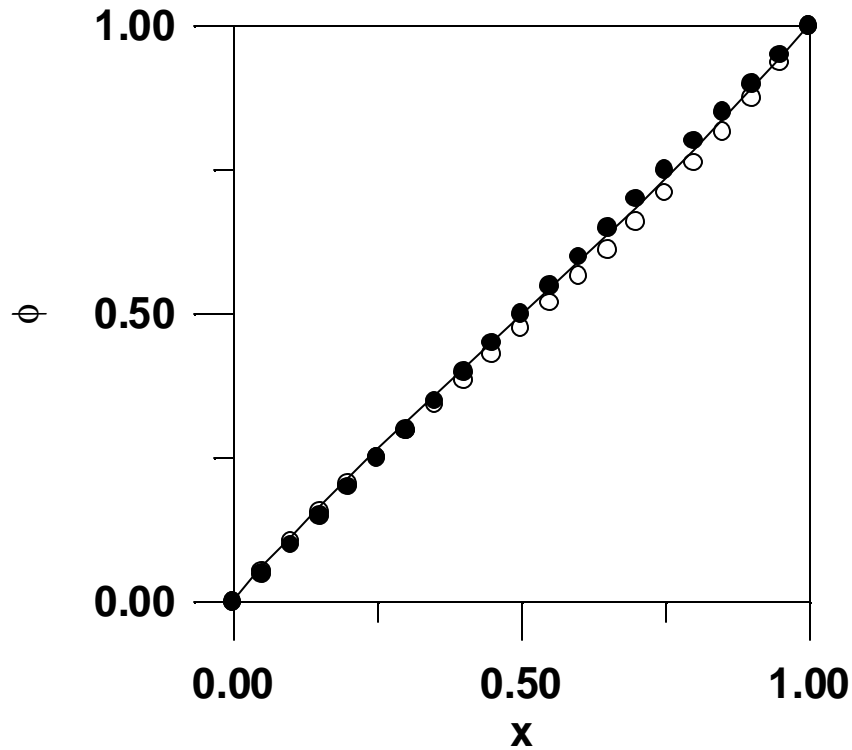


Figura 5.7 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximações Polinomiais de 2ª Ordem (●) e de 3ª Ordem (○) por Colocação. ($Pe=1$, $Nu=1$)

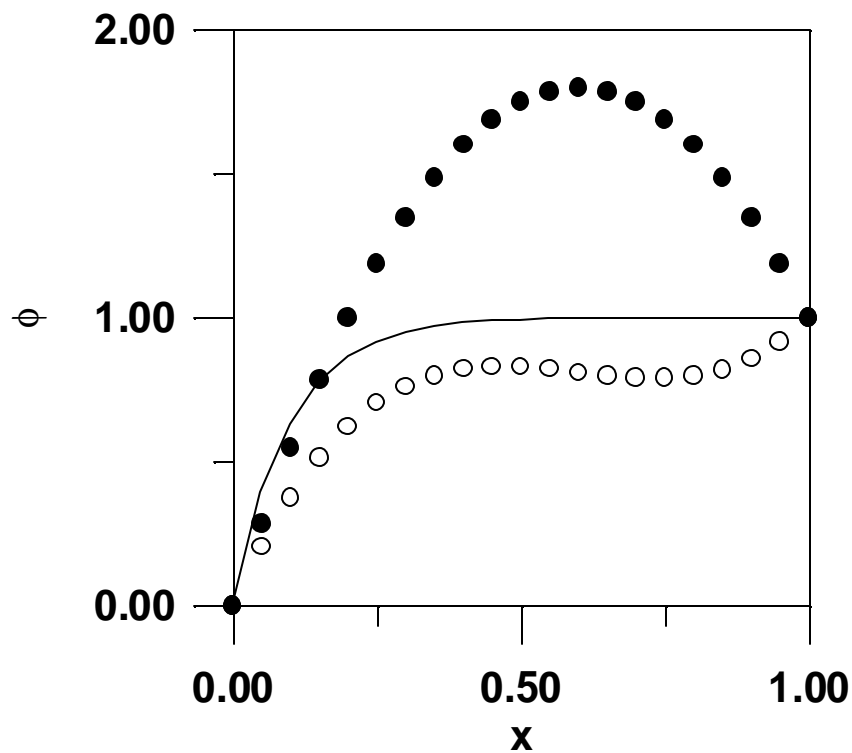


Figura 5.8 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximações Polinomiais de 2ª Ordem (●) e de 3ª Ordem (○) por Colocação. ($Pe=10$, $Nu=0$)

Ao contrário das técnicas de ponderação apresentadas anteriormente, técnicas de colocação são facilmente implementáveis e, por isto, são as mais difundidas e utilizadas para resolver problemas de Engenharia.

5.4.4.1- A Aproximação Polinomial de Lagrange

Quando comparada às técnicas apresentadas nos Capítulos 3 e 4, os sistemas de equações resultantes da ponderação do resíduo no intervalo analisado apresenta uma característica bastante marcante: as matrizes Jacobianas são cheias. Isto faz com que a solução numérica dos sistemas de equações neste caso sejam mais trabalhosas e demoradas que no caso de técnicas de diferenças finitas e volumes finitos, quando utilizados os mesmos níveis de discretização. Felizmente, respostas mais precisas são usualmente obtidas com técnicas de aproximação global, o que permite utilizar níveis de discretização bastante menores que nos outros casos.

Uma forma eficiente de simplificar e permitir implementação mais adequada dos métodos de aproximação polinomial é utilizar a fórmula interpoladora de Lagrange para representar a solução procurada. Dados n pares de pontos (x_i, f_i) através dos quais se deseja passar um polinômio de grau $n-1$, a fórmula interpoladora de Lagrange ganha a forma:

$$p_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^n l_i(x) f_i \quad (5.44)$$

onde

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \quad (5.45)$$

são os chamados polinômios interpoladores de Lagrange.

É fácil verificar que os polinômios interpoladores de Lagrange satisfazem a seguinte propriedade:

$$l_i(x_j) = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (5.46)$$

Esta propriedade torna a fórmula interpoladora de Lagrange extremamente conveniente para uso conjunto com a técnica de ponderação de resíduos por colocação. Por exemplo,

admitamos que uma malha foi escolhida com N pontos internos e os dois contornos (o 0 e o 1). Neste caso, para o problema exemplo estudado até aqui, é possível propor a seguinte aproximação polinomial

$$f(x) = \sum_{i=0}^{N+1} l_i(x) f_i \quad (5.47)$$

onde a aproximação tem grau $N+1$, já que a malha contém $N+2$ pontos de interpolação. Substituindo a aproximação na Equação (1.96) que se pretende resolver, chega-se à expressão do resíduo na forma:

$$Res(x) = Pe \sum_{i=0}^{N+1} \frac{dl_i(x)}{dx} f_i + \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d^2 l_i(x)}{dx^2} f_i - 2Nu \sum_{i=0}^{N+1} l_i(x) f_i \quad (5.48)$$

Obrigando-se que o resíduo seja anulado nos N pontos internos (lembramos que os pontos extremos serão usados para satisfazer as condições de contorno):

$$Res(x_j) = Pe \sum_{i=0}^{N+1} \frac{dl_i(x)}{dx} \Big|_{x=x_j} f_i + \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d^2 l_i(x)}{dx^2} \Big|_{x=x_j} f_i - 2Nu \sum_{i=0}^{N+1} l_i(x_j) f_i = 0, \quad j = 1 \dots N \quad (5.49)$$

As derivadas primeira e segunda dos polinômios interpoladores de Lagrange podem ser calculadas a partir da Equação (5.45) na forma:

$$\frac{dl_i(x)}{dx} \Big|_{x=x_j} = \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^{N+1} \frac{1}{(x_i - x_l)} \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i \\ k \neq l}}^{N+1} \frac{(x_j - x_k)}{(x_i - x_k)} = A_{ji} \quad (5.50)$$

$$\frac{d^2 l_i(x)}{dx^2} \Big|_{x=x_j} = \sum_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^{N+1} \frac{1}{(x_i - x_l)} \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq i \\ k \neq l}}^{N+1} \frac{1}{(x_i - x_k)} \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i \\ m \neq l \\ m \neq k}}^{N+1} \frac{(x_j - x_m)}{(x_i - x_m)} = B_{ji} \quad (5.51)$$

de forma que a Equação (5.49) pode ser reescrita como:

$$Res(x_j) = Pe \sum_{i=0}^{N+1} A_{ji} f_i + \sum_{i=0}^{N+1} B_{ji} f_i - 2Nu f_j = 0, \quad j = 1 \dots N \quad (5.52)$$

onde a Equação (5.46) já foi utilizada.

Lembrando que as condições de contorno precisam ser satisfeitas,

$$f(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} l_i(x_0=0) f_i = 0 \Rightarrow f_0 = 0 \quad (5.53)$$

$$f(1) = 1 \quad (1.98)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} l_i(x_{N+1}=1) f_i = 1 \Rightarrow f_{N+1} = 1 \quad (5.54)$$

o problema pode ser finalmente escrito na forma de um sistema de equações algébricas lineares, que pode ser resolvido com quaisquer dos métodos apresentados no Capítulo 2 para matrizes cheias.

$$L f = r \quad (5.55)$$

onde

$$L_{00} = 1, \quad L_{0j} = 0, \quad j = 1 \dots N+1 \quad (5.56)$$

$$L_{ij} = Pe A_{ij} + B_{ij} - 2 Nu d_{ij}, \quad i = 1 \dots N, \quad j = 0 \dots N+1 \quad (5.57)$$

$$L_{N+1j} = 0, \quad j = 0 \dots N, \quad L_{N+1N+1} = 1 \quad (5.58)$$

$$r_j = 0, \quad j = 0 \dots N, \quad r_{N+1} = 1 \quad (5.59)$$

Repare que a aplicação do método em outros problemas é extremamente similar. As mudanças são observadas apenas na forma final das equações a serem resolvidas, em virtude obviamente das diferentes equações diferenciais e condições de contorno. Por exemplo, condições de contorno de 2º e 3º tipos ficam na forma:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0=0} = a \Rightarrow \sum_{i=0}^{N+1} A_{0i} f_i = a \quad (5.60)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_{N+1}=1} = a \Rightarrow \sum_{i=0}^{N+1} A_{N+1i} f_i = a \quad (5.61)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0=0} + h \mathbf{f}|_{x_0=0} = a \Rightarrow \sum_{i=0}^{N+1} (A_{0i} + \mathbf{d}_{00} h) \mathbf{f}_i = a \quad (5.62)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_{N+1}=1} + h \mathbf{f}|_{x_{N+1}=1} = a \Rightarrow \sum_{i=0}^{N+1} (A_{N+1i} + \mathbf{d}_{N+1N+1} h) \mathbf{f}_i = a \quad (5.63)$$

5.4.4.2- O Polinômio Ortogonal e os Pontos de Colocação

O último ponto obscuro da técnica de colocação é a escolha dos pontos de colocação. Para colocar o problema de uma forma mais consistente, vamos tentar compreender melhor o procedimento de aproximação. Suponhamos, portanto, que conhecemos os valores de uma certa função $f(x)$ e de suas derivadas $f'(x)$ em certos pontos discretos de um domínio finito (sem perda de generalização $[0,1]$). Em outras palavras, é conhecido o conjunto

$$\begin{bmatrix} x_1 & f_1 & f'_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_N & f_N & f'_N \end{bmatrix} \quad (5.64)$$

Baseado na discussão anterior, é possível propor a seguinte aproximação polinomial para a função $f(x)$

$$f(x) \approx P_{2N-1}(x) = \sum_{i=1}^N l_i(x) f_i + PNT(x) \sum_{i=1}^N l_i(x) \mathbf{g}_i \quad (5.65)$$

onde $PNT(x)$ é o polinômio nodal, definido como

$$PNT(x) = \prod_{i=1}^N (x - x_i) \quad (5.66)$$

Como o polinômio nodal é identicamente nulo nos pontos nodais (pontos da malha onde o valor da função e de sua derivada são conhecidos) e devido à propriedade mostrada na Equação (5.46), conclui-se que a aproximação é adequada para representar os valores de $f(x)$ conhecidos. Para que a aproximação satisfaça também as derivadas nos pontos nodais, é necessário que

$$P'_{2N-1}(x_j) = \sum_{i=1}^N A_{ji} f_i + PNT'(x_j) \mathbf{g}_j = f'_j \quad (5.67)$$

ou ainda

$$g_j = \frac{f_j' - \sum_{i=1}^N A_{ji} f_i}{PNT'(x_j)} \quad (5.68)$$

onde

$$PNT'(x_j) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N (x_j - x_k) \quad (5.69)$$

Suponhamos que é necessário calcular a integral de um polinômio $f(x)$ de grau $2N-1$ na forma:

$$I = \int_0^1 W(x) f(x) dx \quad (5.70)$$

e que a aproximação polinomial proposta vai ser usada para tal fim. Neste caso, como o polinômio $f(x)$ tem grau $2N-1$, a aproximação representa exatamente a função aproximada, sem qualquer erro. Neste caso,

$$I = \sum_{i=1}^N f_i \int_0^1 W(x) l_i(x) dx + \sum_{i=1}^N g_i \int_0^1 W(x) PNT(x) l_i(x) dx \quad (5.71)$$

Repare que o segundo termo da direita contém informações sobre as derivadas nos pontos nodais, enquanto o primeiro termo da direita contém apenas informações sobre o valor da função aproximada $f(x)$. Se conseguíssemos anular o segundo termo da direita, conseguiríamos calcular exatamente a integral procurada com apenas N informações, ao invés dos $2N$ valores inicialmente admitidos. Como é possível fazer esta mágica de sonegar informações e fazer cálculos precisos? A resposta está dada na Equação (5.8): basta escolher $PNT(x)$ de forma que ele seja um membro da família de polinômios ortogonais no intervalo $[0,1]$, com peso $W(x)$. Neste caso, os pontos nodais da malha seriam as raízes do polinômio $PNT(x)$ e seria possível integrar exatamente polinômios de grau até $2N-1$ com apenas N pares de dados. Lindo, não? Mas como fazer isto?

Primeiramente, definimos como uma família de polinômios ortogonais a polinômios de grau diferente que satisfazem a relação

$$\int_0^1 W(x) p_i(x) p_j(x) dx = 0, \quad \text{para } i \neq j \quad (5.72)$$

Exemplo 5.1- Os polinômios de grau zero $p_0(x) = 1$, grau um $p_1(x) = 2x - 1$ e grau dois $p_2(x) = 6x^2 - 6x + 1$ são ortogonais no intervalo $[0,1]$ com peso $W(x)=1$, pois

$$\int_0^1 (1)(1)(2x-1) dx = \left. \frac{2x^2}{2} \right|_0^1 - x \Big|_0^1 = 0 \quad (5.73)$$

$$\int_0^1 (1)(1)(6x^2-6x+1) dx = \left. \frac{6x^3}{3} \right|_0^1 - \left. \frac{6x^2}{2} \right|_0^1 + x \Big|_0^1 = 0 \quad (5.74)$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 (1)(2x-1)(6x^2-6x+1) dx = \\ \left. \frac{12x^4}{4} \right|_0^1 - \left. \frac{12x^3}{3} \right|_0^1 + \left. \frac{2x^2}{2} \right|_0^1 - \left. \frac{6x^3}{3} \right|_0^1 + \left. \frac{6x^2}{2} \right|_0^1 - x \Big|_0^1 = 0 \end{aligned} \quad (5.75)$$

Além disto, é fácil mostrar que um polinômio de grau N da família de polinômios ortogonais é ortogonal a qualquer outro polinômio resultante da combinação linear dos demais membros da família, com grau menor que N .

$$\int_0^1 W(x) p_N(x) \left(\sum_{j=1}^{N-1} a_j p_j(x) \right) dx = \sum_{j=1}^{N-1} a_j \int_0^1 W(x) p_N(x) p_j(x) dx = 0 \quad (5.76)$$

Logo, como qualquer polinômio de grau $N-1$ pode ser escrito como uma combinação linear dos polinômios de grau 0 até $N-1$ da família de polinômios ortogonais, conclui-se que o membro de grau N da família de polinômios ortogonais é ortogonal a QUALQUER polinômio de grau menor que N .

Exemplo 5.2- O polinômio qualquer de grau um $p_1(x) = ax + b$, pode ser escrito na forma:

$$ax + b = \frac{a}{2} (2x - 1) + \left(b + \frac{a}{2} \right) \quad (5.77)$$

de maneira que o polinômio de grau 2 do Exemplo 5.1 é ortogonal a qualquer outro polinômio de grau zero ou um.

Como na Equação (5.71) $PNT(x)$ tem grau N e $l_i(x)$ tem grau $N-1$, basta garantir que $PNT(x)$ seja um membro da família de polinômios ortogonais no intervalo $[0,1]$, com peso $W(x)$, para que o segundo membro do lado direito da equação seja anulado. Não é fantástico ?

Voltando ao contexto das equações diferenciais, suponhamos que uma equação linear do tipo

$$a \frac{d^2 \mathbf{f}}{dx^2} + b \frac{d\mathbf{f}}{dx} + c \mathbf{f} + d = 0 \quad (5.78)$$

tem que ser resolvida. Neste caso, se uma aproximação polinomial de grau $N+1$ é proposta para $\mathbf{f}(x)$, é claro que o resíduo também tem a forma polinomial, com grau $N+1$. Como a técnica de colocação obriga que o resíduo seja anulado em N pontos internos do intervalo, além de satisfazer as condições de contorno, é possível escrever

$$Res(x) = (\mathbf{a}x + \mathbf{b}) PNT(x) \quad (5.79)$$

Se os pontos nodais são as raízes do polinômio ortogonal de grau N da família de polinômios ortogonais no intervalo $[0,1]$, com peso $W(x)$, então as primeiras $N-1$ condições de Galerkin são automaticamente satisfeitas,

$$\int_0^1 W(x) (\mathbf{a}x + \mathbf{b}) PNT(x) x^i dx = 0, \quad i = 0 \dots N-2 \quad (5.80)$$

o que significa dizer que a solução aproximada é exata no subespaço de dimensão $N-1$. A solução, portanto, é “quase” Galerkin, já que a solução de Galerkin é exata no subespaço de dimensão N .

5.4.4.3- Calculando Famílias de Polinômios Ortogonais

Para finalizar então o procedimento de obtenção dos pontos de colocação, é necessário obter as famílias de polinômios ortogonais, dados o intervalo de ortogonalidade (admitido sem perda de generalidade como o intervalo $[0,1]$) e o peso $W(x)$. A técnica apresentada a seguir é bastante simples e pressupõe a validade da seguinte recursão:

$$p_i(x) = (x + \mathbf{a}_i) p_{i-1}(x) + \mathbf{b}_i p_{i-2}(x) \quad (5.81)$$

Multiplicando a Equação (5.81) por $p_{i-2}(x)$ e integrando, chega-se a:

$$\int_0^1 W(x) p_i(x) p_{i-2}(x) dx = \int_0^1 W(x) (x + \mathbf{a}_i) p_{i-1}(x) p_{i-2}(x) dx + \int_0^1 W(x) \mathbf{b}_i p_{i-2}(x) p_{i-2}(x) dx \quad (5.82)$$

$$\mathbf{b}_i = - \frac{\int_0^1 W(x) x p_{i-1}(x) p_{i-2}(x) dx}{\int_0^1 W(x) p_{i-2}^2(x) dx} \quad (5.83)$$

Da mesma forma, multiplicando a Equação (5.81) por $p_{i-1}(x)$ e integrando, chega-se a:

$$\int_0^1 W(x) p_i(x) p_{i-1}(x) dx = \int_0^1 W(x) (x + \mathbf{a}_i) p_{i-1}(x) p_{i-1}(x) dx + \int_0^1 W(x) \mathbf{b}_i p_{i-2}(x) p_{i-1}(x) dx \quad (5.84)$$

$$\mathbf{a}_i = - \frac{\int_0^1 W(x) x p_{i-1}^2(x) dx}{\int_0^1 W(x) p_{i-1}^2(x) dx} \quad (5.85)$$

O procedimento iterativo pode ser inicializado fazendo-se $p_{-1}(x) = 0$ e $p_0(x) = 1$.

Exemplo 5.3- Os quatro primeiros membros da família de polinômios ortogonais no intervalo $[0,1]$, com peso $W(x)=1$, são:

$$p_0(x) = 1 \quad (5.86)$$

$$p_1(x) = (x + \mathbf{a}_1) (1) \quad (5.87)$$

onde

$$\mathbf{a}_1 = - \frac{\int_0^l (l) x (l)^2 dx}{\int_0^l (l) (l)^2 dx} = - \frac{l}{2} \quad (5.88)$$

de forma que

$$p_1(x) = x - \frac{l}{2}, \quad \text{cuja raiz é } x_l = \frac{l}{2} \quad (5.89)$$

$$p_2(x) = (x + \mathbf{a}_2) \left(x - \frac{l}{2} \right) + \mathbf{b}_2 (l) \quad (5.90)$$

onde

$$\mathbf{a}_2 = - \frac{\int_0^l (l) x \left(x - \frac{l}{2} \right)^2 dx}{\int_0^l (l) \left(x - \frac{l}{2} \right)^2 dx} = - \frac{l}{2} \quad (5.91)$$

$$\mathbf{b}_2 = - \frac{\int_0^l (l) x \left(x - \frac{l}{2} \right) (l) dx}{\int_0^l (l) (l)^2 dx} = - \frac{l}{12} \quad (5.92)$$

de forma que

$$p_2(x) = x^2 - x + \frac{l}{6}, \quad \text{cujas raízes são} \quad (5.93)$$

$$x_1 = \frac{3 - \sqrt{3}}{6} = 0.21132 \text{ e } x_2 = \frac{3 + \sqrt{3}}{6} = 0.78868$$

$$p_3(x) = (x + \mathbf{a}_3) \left(x^2 - x + \frac{l}{6} \right) + \mathbf{b}_3 \left(x - \frac{l}{2} \right) \quad (5.94)$$

onde

$$a_3 = - \frac{\int_0^1 (1) x \left(x - x + \frac{1}{6} \right)^2 dx}{\int_0^1 (1) \left(x - x + \frac{1}{6} \right)^2 dx} = - \frac{1}{2} \quad (5.95)$$

$$b_3 = - \frac{\int_0^1 (1) x \left(x^2 - x + \frac{1}{6} \right) \left(x - \frac{1}{2} \right) dx}{\int_0^1 (1) \left(x - \frac{1}{2} \right)^2 dx} = - \frac{1}{15} \quad (5.96)$$

de forma que

$$p_3(x) = x^3 - \frac{3x^2}{2} + \frac{3x}{5} - \frac{1}{20}, \quad \text{cujas raízes são}$$

$$x_1 = \frac{5 - \sqrt{15}}{10} = 0.11270 ; x_2 = \frac{1}{2} ; x_3 = \frac{5 + \sqrt{15}}{10} = 0.88730 \quad (5.97)$$

5.4.4.4- O Algoritmo da Colocação Ortogonal

Baseando-se em tudo o que foi discutido até aqui, é possível então propor um algoritmo para a aplicação computacional do método da colocação ortogonal. Os passos do algoritmo são esquematizados a seguir:

1. Definir o intervalo de solução e a função peso do problema;
2. Definir o grau N da aproximação (o polinômio tem $N+1$ coeficientes);
3. Calcular o polinômio ortogonal de grau $N+1-NCC$, onde NCC é o número de condições de contorno que precisam ser satisfeitas;
4. Calcular as $N+1-NCC$ raízes (pontos de colocação) do polinômio ortogonal;
5. Calcular as matrizes A e B das derivadas primeiras e segundas dos polinômios interpoladores de Lagrange nos pontos de colocação;
6. Escrever as equações do resíduo nos pontos de colocação e as equações derivadas das condições de contorno;
7. Resolver o sistema de equações resultantes;
8. Aumentar o grau da aproximação até não observar mais mudança significativa da solução, dentro de um certo critério de tolerância.

5.5- O Método das Linhas em Problemas Dinâmicos

Como já discutido na Seção 3.4.4, equações diferenciais parciais resultantes de modelos dinâmicos a parâmetros distribuídos podem ser discretizadas e transformadas em um conjunto de equações diferenciais ordinárias, que pode então ser integrado por métodos de integração discutidos no Capítulo 3, como as técnicas Runge-Kutta e BDF. Esta técnica de solução é conhecida como técnica das linhas. A utilização desta técnica em conjunto com aproximações polinomiais e as técnicas de colocação resulta em expressões bastante simples de serem manipuladas.

Seja, por exemplo, o problema dinâmico de transferência de calor, associado ao problema estacionário utilizado até aqui como exemplo neste capítulo. O modelo é apresentado pela Equação (1.92), no Capítulo 1, e tem a forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Pe \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2 Nu f \quad (1.92)$$

Como a função agora varia no tempo, não é mais possível propor uma aproximação na forma da Equação (5.47). No entanto, parece perfeitamente razoável dizer que a aproximação polinomial continua válida, mas que os coeficientes polinomiais variam no tempo. Isto equivale a propor a seguinte aproximação:

$$f(x, t) = \sum_{i=1}^n l_i(x) f_i(t) \quad (5.98)$$

Substituindo a aproximação na equação original, para gerar a expressão do resíduo, resulta

$$\begin{aligned} Res(x, t) = & \sum_{i=0}^{N+1} l_i(x) \frac{df_i(t)}{dt} - Pe \sum_{i=0}^{N+1} \frac{dl_i(x)}{dx} f_i(t) - \\ & \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d^2 l_i(x)}{dx^2} f_i(t) + 2 Nu \sum_{i=0}^{N+1} l_i(x) f_i(t) \end{aligned} \quad (5.99)$$

Obrigando-se o resíduo a ser identicamente nulo nos pontos de colocação, resulta:

$$\frac{df_j}{dt} = Pe \sum_{i=0}^{N+1} A_{ji} f_i + \sum_{i=0}^{N+1} B_{ji} f_i - 2 Nu f_j, \quad j = 1 \dots N \quad (5.100)$$

As duas equações adicionais são dadas pelas condições de contorno

$$f(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} l_i(x_0=0) f_i(t) = 0 \Rightarrow f_0(t) = 0 \quad (5.101)$$

$$f(1) = 1 \quad (1.98)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} l_i(x_{N+1}=1) f_i(t) = 1 \Rightarrow f_{N+1}(t) = 1 \quad (5.102)$$

que neste caso mostram que os coeficientes associados aos pontos extremos do intervalo não variam com o tempo. Isto nem sempre é verdade, como demonstram as expressões das demais condições de contorno lineares apresentadas nas Equações (5.60-63). Assim, dado o perfil inicial de temperaturas (ou seja, o valor dos coeficientes no instante $t=0$), é possível integrar o sistema de equações (5.100) para obter a evolução temporal do perfil aproximado de temperaturas.

5.6- Aplicações como Técnica de Integração

O método de resíduos ponderados, em particular da colocação, é muito utilizado para aproximar soluções periódicas no tempo em modelos a parâmetros concentrados, descritos por equações diferenciais ordinárias. Estas técnicas de integração de EDOs costumam resultar em resultados extremamente simples e precisos, com uso de poucos pontos de discretização. Para exemplificar a aplicação da técnica, vamos propor a solução do problema abaixo,

$$\frac{df}{dt} = 2p \operatorname{sen}(2pt) \quad (5.103)$$

$$f(0) = 0 \quad (5.104)$$

que tem solução

$$f(t) = -\cos(2pt) + 1 \quad (5.105)$$

e período

$$T = 1 \quad (5.106)$$

É proposta então a solução

$$f(t) = a + bt + ct^2 + dt^3 \quad (5.107)$$

que deve obedecer a condição inicial

$$f(0) = a + b0 + c0^2 + d0^3 = a = 0 \quad (5.108)$$

e a condição de periodicidade

$$f(1) = f(0) = a + b1 + c1^2 + d1^3 = b + c + d = 0 \quad (5.109)$$

Repare que o formalismo dos multiplicadores de Lagrange não é utilizado aqui, apenas para facilitar a compreensão e manipulação dos números em aproximações de pequena ordem. Em aplicações reais, colocar a aproximação na forma dos multiplicadores de Lagrange deve ser o procedimento escolhido. Da mesma maneira, os pontos de colocação escolhidos deveriam ser idealmente as raízes do polinômio ortogonal de grau 2 no intervalo [0,1] considerado, com peso $W(x)=1$. No entanto, preferimos aqui uma distribuição uniforme de pontos, para facilitar a manipulação dos números. Por isto, obrigamos que a expressão do resíduo seja anulada nos pontos $x_1 = \frac{1}{3}$ e $x_2 = \frac{2}{3}$. Os resultados podem então ser obtidos de:

$$(-c - d) + 2c\frac{1}{3} + 3d\frac{1}{9} = 2p \operatorname{sen}\left(\frac{2p}{3}\right) \quad (5.110)$$

$$(-c - d) + 2c\frac{2}{3} + 3d\frac{4}{9} = 2p \operatorname{sen}\left(\frac{4p}{3}\right) \quad (5.111)$$

ou ainda

$$-\frac{c}{3} - \frac{2d}{3} = \sqrt{3} p \quad (5.112)$$

$$\frac{c}{3} + \frac{d}{3} = -\sqrt{3} p \quad (5.113)$$

que admite a solução $c = -3\sqrt{3} p$ e $d = 0$.

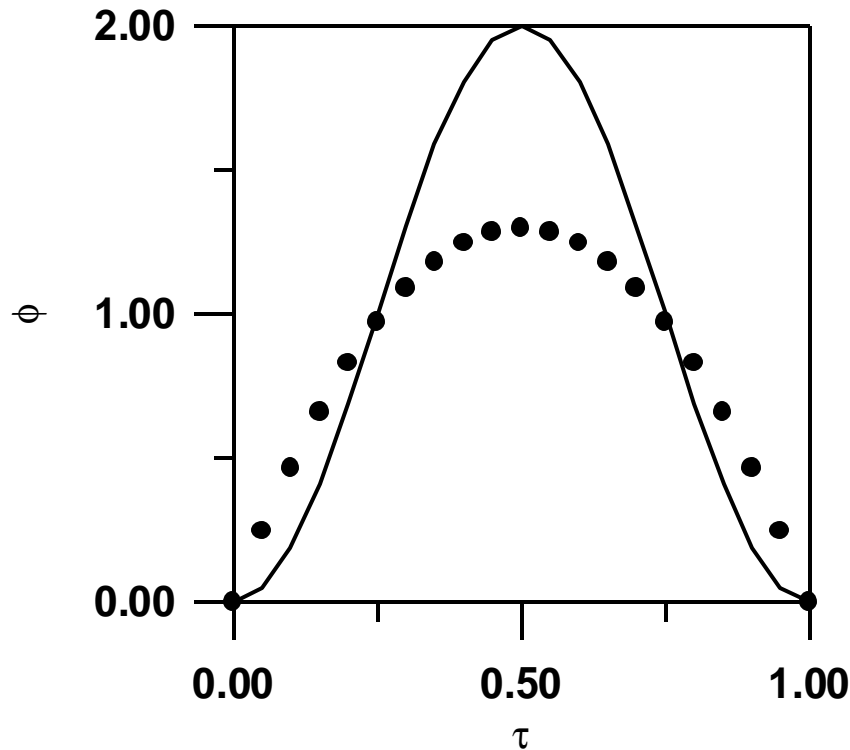


Figura 5.9 - Comparação Entre Resultado Exato (—) e Aproximação Polinomial de 3ª Ordem (•) por Colocação.

É certo que aproximações muito melhores podem ser obtidas incrementando-se a ordem da aproximação.

Em problemas genéricos de integração, é possível aplicar o método dos resíduos ponderados com fronteiras de tempo livre, mas os resultados não são usualmente muito bons. Neste caso poderiam ser definidos intervalos (ou passos) de integração, nos quais seria escrita e ponderada a expressão do resíduo da equação. A única diferença em relação à discussão apresentada anteriormente é que não seria escrita a condição de periodicidade (Equação (5.109)), que seria substituída pela expressão que obriga o resíduo a ser nulo na extremidade superior do intervalo de integração. A aplicação sucessiva do método a intervalos subsequentes gera a resposta dinâmica procurada.

5.7- Aplicações em Problemas Espaciais Bi-Dimensionais

O método dos resíduos ponderados pode ser também utilizado em modelos distribuídos em mais de uma direção espacial, descritos por equações diferenciais em duas ou mais variáveis independentes. Nestes casos, o desempenho do método depende muito da estrutura do modelo diferencial. Em problemas hiperbólicos (ver Seção 3.4), descritos por equações diferenciais de primeira ordem (problemas puramente convectivos), o método dos

resíduos ponderados geralmente não funciona muito bem. A razão é simples de entender: em problemas convectivos, as mudanças se propagam na forma de ondas, com fortes descontinuidades (pense no que acontece num reator do tipo PFR quando a alimentação é modificada). Nestes casos, as aproximações por funções contínuas de caráter global são inadequadas, pois estas são incapazes de descrever o comportamento real do sistema, mesmo quando o grau da aproximação é elevado. Em problemas parabólicos, do tipo difusão transiente ou convecção numa direção do espaço e difusão na outra (ver Seção 3.4.3), descritos por equações diferenciais parciais de primeira ordem numa variável (usualmente tempo ou a direção principal do escoamento) e de segunda ordem numa outra variável espacial (ao longo da qual ocorre difusão), o método das linhas, na forma apresentada na Seção 5.5, é o mais recomendado. Entretanto, em problemas elípticos (ver Seção 3.4.2), descritos por equações diferenciais parciais de segunda ordem em mais de uma variável do espaço, pode ser utilizada a técnica de discretização simultânea em todas as direções espaciais do problema. (Esta solução pode ser também adotada nos outros casos, onde seu uso não é muito recomendado, em virtude de transformar um sistema de equações diferenciais parciais num sistema de equações algébricas, como será visto abaixo. Nestes casos, no entanto, o uso das técnicas apresentadas nos Capítulos 3 e 4 é incentivado.)

Seja, por exemplo, o problema análogo ao problema de transferência de calor descrito na Seção 1.6, mas onde ocorre difusão ao longo de duas dimensões espaciais (r e z) e não há escoamento. Este é o caso clássico da condução em uma peça cilíndrica que dissipa calor (resistência elétrica) mergulhada em um banho de temperatura constante e diferente da temperatura da peça. Neste caso, pode-se escrever a seguinte equação de conservação:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = g \quad (5.114)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{(0,z)} = 0, \quad T(R,z) = T(r,0) = T(r,L) = T_b \quad (5.115)$$

Adimensiolizando as variáveis do problema na forma

$$\mathbf{x} = \frac{r}{R}, \quad \mathbf{h} = \frac{z}{L}, \quad \mathbf{f} = \frac{T - T_b}{T_b} \quad (5.116)$$

é possível reescrever

$$\frac{1}{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{x} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right) + \left(\frac{R}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial \mathbf{h}^2} = \frac{g R^2}{T_b} \quad (5.117)$$

$$\left. \frac{\mathcal{I}f}{\mathcal{I}x} \right|_{(0,h)} = 0, \quad f(l,h) = f(x,0) = f(x,l) = 0 \quad (5.118)$$

Para simplificar a notação sem comprometer a generalidade, supomos aqui que os adimensionais geométrico ($\frac{R}{L}$) e de geração ($\frac{gR^2}{T_b}$) são iguais a 1. Neste caso, propondo-se a seguinte aproximação para o perfil de temperaturas

$$f(x,h) = \sum_{i=0}^{N+1} \sum_{j=0}^{N+1} f_{ij} (l_i^x(x)) (l_j^h(h)) \quad (5.119)$$

e definindo-se uma malha de pontos de colocação a partir da família de polinômios ortogonais

$$\int_0^l x p_n(x) p_m(x) dx = 0, \quad n \neq m \quad (5.120)$$

$$\int_0^l p_n(h) p_m(h) dh = 0, \quad n \neq m \quad (5.121)$$

pode-se então aplicar o mesmo procedimento já estudado ao problema. Repare que, por conta das condições de contorno, conclui-se que:

$$\left. \frac{\mathcal{I}f}{\mathcal{I}x} \right|_{(0,h_k)} = \sum_{i=0}^{N+1} f_{ik} A_{0i}^x = 0, \quad k = 1 \dots N \quad (5.122)$$

$$f(l,h_k) = f_{N+1,k} = 1, \quad k = 1 \dots N \quad (5.123)$$

$$f(x_k,0) = f_{k,0} = 1, \quad k = 0 \dots N+1 \quad (5.124)$$

$$f(x_k,l) = f_{k,N+1} = 1, \quad k = 0 \dots N+1 \quad (5.125)$$

Note que nas Equações (5.122-125) acima, as condições de contorno no raio foram aplicadas de 1 a N, para evitar redundância e duplicação das equações. Nos pontos internos de colocação, é possível escrever:

$$\frac{\mathcal{I}^2 f}{\mathcal{I} x^2} + \frac{1}{x} \frac{\mathcal{I} f}{\mathcal{I} x} + \frac{\mathcal{I}^2 f}{\mathcal{I} h^2} = 1 \quad (5.126)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} f_{im} B_{ni}^x + \frac{1}{x_n} \sum_{i=0}^{N+1} f_{im} A_{ni}^x + \sum_{i=0}^{N+1} f_{ni} B_{mi}^h = 1 \quad (5.127)$$

$$n = 1 \dots N, \quad m = 1 \dots N$$

O sistema algébrico de Equações (5.122-127) pode então ser resolvido, fornecendo como resultado o perfil desejado de temperaturas. Neste caso, a solução analítica do sistema resultante de equações pode ser facilmente obtida com quaisquer dos métodos de resolução de sistemas lineares de equações apresentados no Capítulo 2.

5.8- Rotinas Para Download

O arquivo ORTOG.FOR, contendo as rotinas para cálculo de polinômios ortogonais e suas raízes, dados intervalos arbitrários de definição e funções pesos quaisquer, além de rotinas para o cálculo dos multiplicadores de Lagrange e suas derivadas, estão disponíveis para download em FORTRAN.

Capítulo 6

Técnicas de Elementos Finitos

Neste capítulo serão estudadas técnicas adequadas para resolução de equações diferenciais ordinárias e parciais, como nos modelos a parâmetros distribuídos desenvolvidos no Capítulo 1. As técnicas que serão aqui apresentadas são utilizadas para resolver problemas com domínios finitos e infinitos, com geometria simples ou complexa, sendo seu uso mais comum em problemas que envolvem variações espaciais.

6.1- Introdução

As técnicas de solução de equações diferenciais apresentadas nos Capítulos anteriores têm natureza local (Capítulos 3 e 4) ou global (Capítulo 5). Como discutido anteriormente e mostrado através de exemplos, técnicas de natureza local usualmente requerem um grande número de pontos de discretização, para que a solução final obtida aproxime bem a solução real procurada. Isto, em geral, significa que sistemas de dezenas ou centenas de equações têm que ser resolvidas simultaneamente. O processo de geração das equações, no entanto, é simples e pode ser automatizado com certa facilidade. Por sua vez, as técnicas de natureza global podem permitir considerável redução do tamanho da malha de discretização, embora o processo de geração das equações discretizadas seja significativamente mais complexo que no caso anterior. Contudo, como visto em exemplos no Capítulo 5, as técnicas globais de aproximação apresentam dificuldades de aproximar soluções quando variações pronunciadas do gradiente estão presentes.

Os motivos apresentados acima são suficientes para induzir o desenvolvimento de um conjunto de técnicas que mantenha a simplicidade de implementação e flexibilidade de representação das técnicas de natureza local e permita a redução do tamanho da malha propiciada pelas técnicas de natureza global. Esta espécie de mistura é que dá origem a um conjunto de técnicas conhecidas como *Técnicas de Elementos Finitos*.

6.1.1- Problemas da Aproximação Global e Definição de Elemento Finito

Voltemos à Seção 5.4 do Capítulo anterior e verifiquemos o que acontece quando os perfis da solução procurada variam significativamente ao longo do domínio de definição do problema. A Figura 5.8, por exemplo, mostra que desvios pronunciados podem

aparecer entre a solução numérica e a solução real do problema, quando a aproximação tem grau reduzido. Mais ainda, a Figura 5.8 mostra que é possível que a solução aproximada apresente comportamento oscilatório, em virtude das bruscas variações apresentadas pela solução real. Este tipo de comportamento é absolutamente genérico e constitui o principal problema na aplicação de técnicas de aproximação de natureza local. O problema pode ser facilmente compreendido se você pensar que um polinômio, que tem natureza oscilatória, é “obrigado” a mudar bruscamente a sua direção, à medida que a variável espacial cresce.

Em tese, este problema poderia ser bastante minimizado se a solução real não tivesse que ser aproximada por uma única função polinomial (ou outra função qualquer capaz de gerar a solução real, à medida que o grau da aproximação cresce) em todo o domínio de definição, mas sim por um conjunto de polinômios, limitados a sub-intervalos do domínio de interesse. Desta forma, diferentes aproximações poderiam ser utilizadas em diferentes intervalos em que a solução real apresentasse comportamento distinto. Esta idéia está apresentada pictoricamente na Figura 6.1.

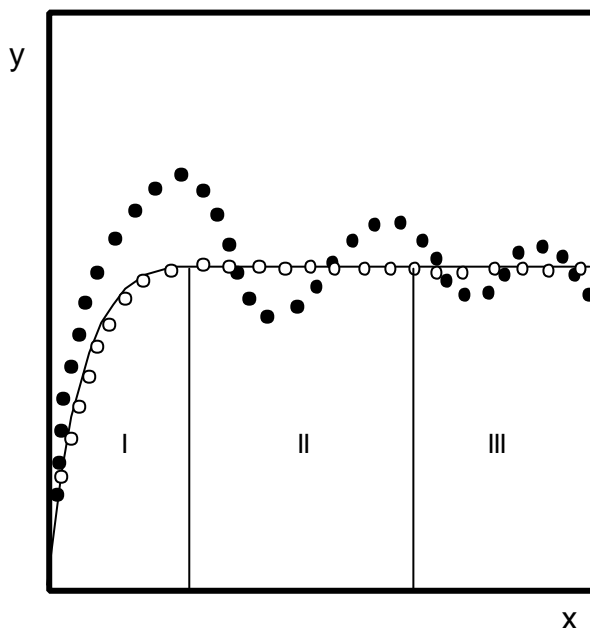


Figura 6.1 - Comparação Pictórica Entre Resultados Exatos (■) e Aproximação Polinomial Global de Ordem Elevada (●) e Aproximação Polinomial por Partes de Grau 2 (○)

Na Figura 6.1 fica claro que, embora a aproximação global da função por uma parábola seja muito ruim, tornando necessária a utilização de aproximações de ordem superior que apresentam comportamento oscilatório, a aproximação da função por parábolas nos sub-intervalos I, II e III pode ser feita de forma excelente. Esta é a idéia básica da técnica de elementos finitos. Dado um domínio arbitrário de definição da solução, este domínio é dividido em sub-intervalos (ou elementos finitos) nos quais a função experimenta variações bem menos pronunciadas e onde aproximações globais (no interior do elemento !) de pequena ordem podem ser feitas com sucesso. Desta forma, a solução

final obtida é uma coletânea de aproximações de pequena ordem, válidas em pequenos sub-intervalos do domínio original.

6.1.2- Definição de Spline e Ponderação de Resíduos em Elementos Finitos

A questão fundamental que se coloca, então, é a de implementação da idéia básica apresentada. Para tanto, retomemos o problema analisado no Capítulo 5, sobre a transferência de calor em um tubo:

$$Pe \frac{d\phi}{dx} + \frac{d^2\phi}{dx^2} - 2 Nu \phi = 0 \quad (1.96)$$

$$\phi(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$\phi(1) = 1 \quad (1.98)$$

e procuremos aproximações polinomiais de segunda ordem para os sub-intervalos (elementos finitos) $I = \{0 \leq x \leq 0.5\}$ e $II = \{0.5 \leq x \leq 1\}$. Neste caso, a solução aproximada tem a forma:

$$\phi^I(x) = a^I + b^I x + c^I x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.5 \quad (6.1)$$

$$\phi^{II}(x) = a^{II} + b^{II} x + c^{II} x^2, \quad 0.5 \leq x \leq 1 \quad (6.2)$$

Para satisfazer a primeira condição de contorno, conclui-se que

$$\phi^I(0) = a^I + b^I 0 + c^I 0^2 = a^I = 0 \quad (6.3)$$

Da mesma forma, para satisfazer a segunda condição de contorno, conclui-se que

$$\phi^{II}(1) = a^{II} + b^{II} 1 + c^{II} 1^2 = a^{II} + b^{II} + c^{II} = 1 \quad (6.4)$$

Para determinar o valor das demais constantes, o procedimento adotado poderia ser idêntico ao procedimento de resíduos ponderados apresentado no Capítulo 5. Neste caso, o número de condições adicionais necessárias seria igual a quatro, já que as condições de contorno impõem duas condições algébricas para a determinação dos seis parâmetros da aproximação proposta. Antes de fazermos isto, no entanto, é importante verificar que a solução real do problema satisfaz requisitos básicos de continuidade e diferenciabilidade, de forma que seria conveniente resguardar estas propriedades originais da solução. Para fazer isto, introduzimos aqui condições adicionais de continuidade e diferenciabilidade (SPLINE) na fronteira dos elementos, na forma:

$$\begin{aligned}\phi'(0.5) &= \phi''(0.5) \\ a' + b' 0.5 + c' 0.5^2 &= a'' + b'' 0.5 + c'' 0.5^2\end{aligned}\quad (6.5)$$

$$\begin{aligned}\left. \frac{d\phi'}{dx} \right|_{0.5} &= \left. \frac{d\phi''}{dx} \right|_{0.5} \\ b' + 2 c' 0.5 &= b'' + 2 c'' 0.5\end{aligned}\quad (6.6)$$

de forma que as condições de continuidade e diferenciabilidade impõem duas restrições algébricas adicionais. Para que as constantes possam ser determinadas, utilizamos aqui a técnica de colocação, impondo os pontos $x_1 = 0.25$ e $x_2 = 0.75$ como pontos de colocação. (Sabemos, no entanto, que esta escolha pode ser otimizada, utilizando-se para tanto dos polinômios ortogonais.) Neste caso, é possível escrever,

$$Pe (b' + 2 c' 0.25) + 2 c' - 2 Nu (a' + b' 0.25 + c' 0.25^2) = 0 \quad (6.7)$$

$$Pe (b'' + 2 c'' 0.75) + 2 c'' - 2 Nu (a'' + b'' 0.75 + c'' 0.75^2) = 0 \quad (6.8)$$

Para $Pe=10$ e $Nu=0$, a resolução das Equações (6.3-8), leva aos seguintes valores:

$$\begin{aligned}a' &= 0, b' = 29.75, c' = -42.5, \\ a'' &= 13.75, b'' = -25.25, c'' = 12.5\end{aligned}\quad (6.9)$$

A Figura 6.2 mostra que a aproximação obtida não é de boa qualidade. Isto se deve ao fato das modificações de inclinação ocorrerem na fronteira ao redor de $x = 0.25$. As contas podem ser refeitas, definindo-se os elementos como $I = \{0 \leq x \leq 0.25\}$ e $II = \{0.25 \leq x \leq 1\}$. Neste caso, as Equações (6.5-8) devem ser reescritas como

$$\begin{aligned}\phi'(0.25) &= \phi''(0.25) \\ a' + b' 0.25 + c' 0.25^2 &= a'' + b'' 0.25 + c'' 0.25^2\end{aligned}\quad (6.10)$$

$$\begin{aligned}\left. \frac{d\phi'}{dx} \right|_{0.25} &= \left. \frac{d\phi''}{dx} \right|_{0.25} \\ b' + 2 c' 0.25 &= b'' + 2 c'' 0.25\end{aligned}\quad (6.11)$$

$$Pe (b' + 2 c' 0.125) + 2 c' - 2 Nu (a' + b' 0.125 + c' 0.125^2) = 0 \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned}Pe (b'' + 2 c'' 0.625) + 2 c'' - \\ 2 Nu (a'' + b'' 0.625 + c'' 0.625^2) &= 0\end{aligned}\quad (6.13)$$

onde os pontos intermediários dos elementos I e II foram escolhidos uma vez mais como pontos de colocação. Para $Pe=10$ e $Nu=0$, a resolução das Equações (6.3-4, 6.10-13), leva aos seguintes valores:

$$\begin{aligned} a^I &= 0, b^I = 171/16, c^I = -23.75, \\ a^{II} &= 25/16, b^{II} = -29/16, c^{II} = 1.25 \end{aligned} \quad (6.14)$$

Repare na significativa melhora da aproximação. Repare ainda que a solução obtida neste caso é a melhor dentre todas as apresentadas nos Capítulos 5 e 6 para o mesmo problema. Vê-se que as oscilações ficam bastante amortecidas neste caso.

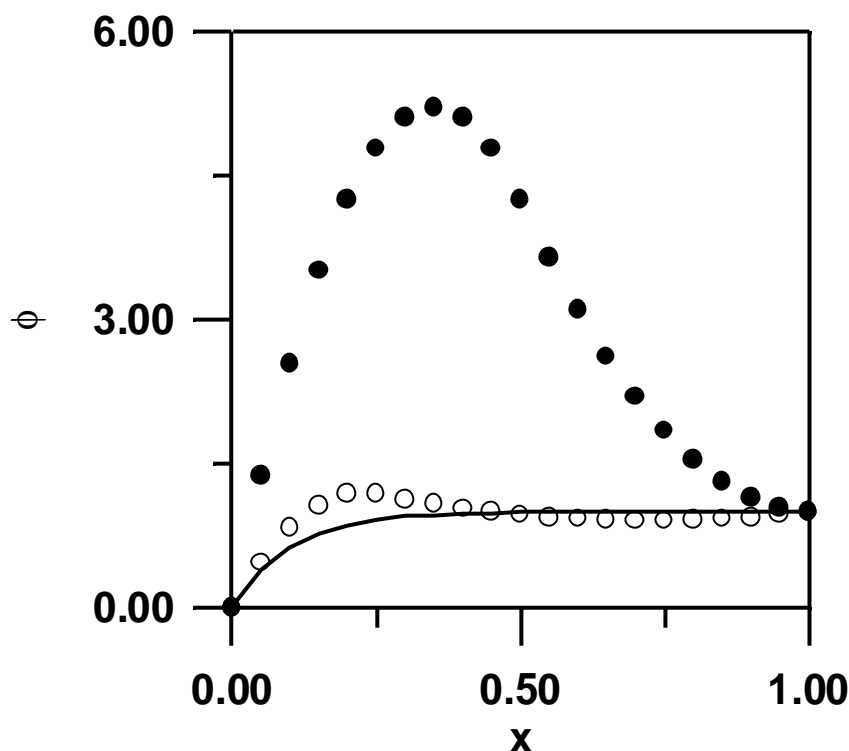


Figura 6.2 - Comparação Entre Resultados Exatos (—) e Aproximações Polinomiais de 2ª Ordem Obtidas em Dois Elementos. Fronteira em $x=0.5$ (●). Fronteira em $x=0.25$ (○). Técnica de Ponderação por Colocação. ($Pe=10, Nu=0$)

Não devemos tomar aqui como lei geral a necessidade de obrigar continuidade e diferenciabilidade nas fronteiras dos elementos. Muitas vezes, o usuário pode se satisfazer apenas com a continuidade da solução, independentemente da diferenciabilidade da função aproximada na fronteira. Neste caso, o número de relações algébricas impostas ao sistema diminui, havendo a necessidade de aumentar o número de ponderações do resíduo. Por exemplo, admitamos que soluções lineares do tipo

$$\phi^I(x) = a^I + b^I x, \quad 0 \leq x \leq 0.25 \quad (6.15)$$

$$\phi^{II}(x) = a^{II} + b^{II} x, \quad 0.25 \leq x \leq 1 \quad (6.16)$$

são procuradas. Das condições de contorno, conclui-se que

$$\phi'(0) = a' + b' 0 = a' = 0 \quad (6.17)$$

$$\phi''(1) = a'' + b'' 1 = a'' + b'' = 1 \quad (6.18)$$

A condição de continuidade implica em

$$\begin{aligned} \phi'(0.25) &= \phi''(0.25) \\ a' + b' 0.25 &= a'' + b'' 0.25 \end{aligned} \quad (6.19)$$

Para escrevermos a restrição adicional, apliquemos a técnica dos momentos em todo o domínio de definição do problema. Desta forma,

$$\int_0^1 Re s(x) dx = \int_0^{0.25} Re s_1(x) dx + \int_{0.25}^1 Re s_2(x) dx = 0 \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 Re s(x) dx &= \int_0^{0.25} [Pe b' - 2 Nu (a' + b' x)] dx + \\ &\int_{0.25}^1 [Pe b'' - 2 Nu (a'' + b'' x)] dx = 0 \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\frac{Pe b'}{4} - \frac{Nu a'}{2} - \frac{Nu b'}{16} + \frac{3 Pe b''}{4} - \frac{3 Nu a''}{2} - \frac{15 Nu b''}{16} = 0 \quad (6.22)$$

As Equações (6.17-19, 6.22) podem então ser resolvidas, resultando em:

$$a' = 0, b' = 4 - 3 b'', a'' = 1 - b'', b'' = \frac{4 Pe - 7 Nu}{3 Nu} \quad (6.23)$$

É curioso observar que, neste caso, a solução aproximada não pode ser obtida quando $Nu=0$.

De forma geral, portanto, quando apenas a continuidade da função aproximada é exigida num problema unidimensional, pode ser dito que

$$NPond = NPar - NCont - Nelem + 1 \quad (6.24)$$

onde $NPond$ é o número de ponderações necessárias, $Npar$ é o número de parâmetros da aproximação a serem determinados, $Ncont$ é o número de condições de contorno a serem satisfeitas e $Nelem$ é o número de elementos finitos da malha de discretização. Quando a continuidade e a diferenciabilidade da função precisam ser garantidas nas fronteiras dos elementos, chega-se a:

$$NPond = NPar - NCont - 2 Nelem + 2 \quad (6.25)$$

6.2- O Método das Linhas em Problemas Dinâmicos e a Normalização dos Elementos

A extensão destes conceitos para problemas dinâmicos é imediata. Por exemplo, analisemos o problema dinâmico da Seção 5.5, onde foi aplicado o método das linhas para transformar um sistema dinâmico descrito por equações diferenciais parciais em um conjunto de equações diferenciais ordinárias, passível de ser integrado por técnicas numéricas de integração descritas no Capítulo 3. O modelo é apresentado pela Equação (1.92), no Capítulo 1, e tem a forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = Pe \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 2 Nu \phi \quad (1.92)$$

Como a função agora varia no tempo, não é mais possível propor uma aproximação na forma das Equações (6.1-2). No entanto, parece perfeitamente razoável dizer que a aproximação polinomial continua válida, mas que os coeficientes polinomiais variam no tempo. Seguindo a nomenclatura proposta no Capítulo 5, isto equivale a propor a seguinte aproximação:

$$\phi^i(\xi, \tau) = \sum_{j=0}^{N+1} l_j^i(\xi) \phi_j^i(\tau) \quad (6.26)$$

onde $\phi^i(\xi, \tau)$ é a aproximação utilizada no elemento i do domínio, x é a variável x normalizada no domínio de definição do elemento i e $\phi_j^i(\tau)$ é o valor da função no ponto j da malha discretizada do elemento i . Veja a Figura 6.3 para esclarecer a nomenclatura utilizada.

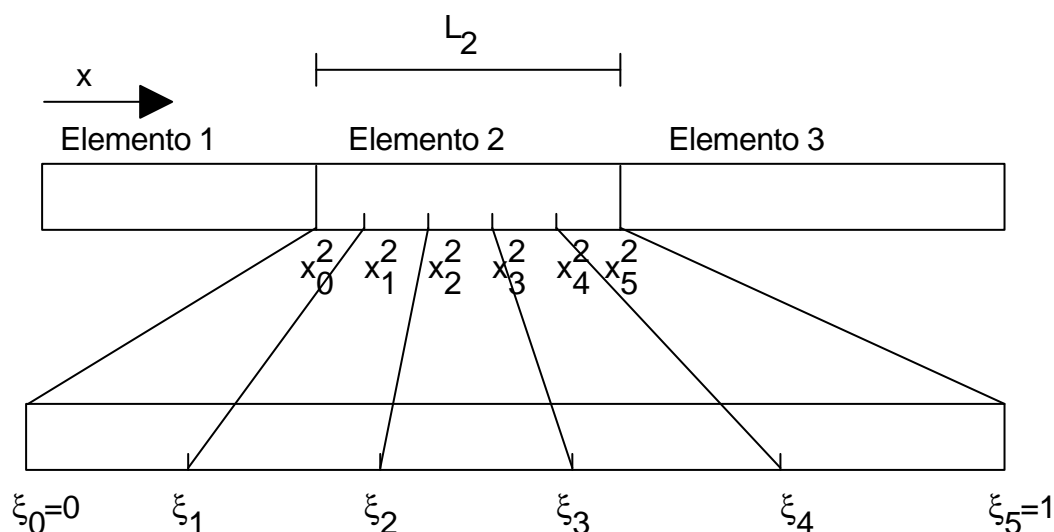


Figura 6.3 - Normalização dos Elementos Finitos

Desta forma, as variáveis x e \mathbf{x} estão relacionadas dentro do elemento da seguinte forma:

$$\xi_j = \frac{x_j^i - x_0^i}{L_i} \quad (6.27)$$

de maneira que os operadores diferenciais assumem a forma:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{L_i} \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (6.28)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{L_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \quad (6.29)$$

No interior de cada elemento finito i , é possível substituir a aproximação na equação original, para gerar a expressão do resíduo

$$\begin{aligned} Res_i(\xi, \tau) = & \sum_{j=0}^{N+1} l_j^i(\xi) \frac{d\phi_j^i(\tau)}{d\tau} - \frac{Pe}{L_i} \sum_{j=0}^{N+1} \frac{dl_j^i(\xi)}{d\xi} \phi_j^i(\tau) - \\ & \frac{1}{L_i^2} \sum_{j=0}^{N+1} \frac{d^2 l_j^i(\xi)}{d\xi^2} \phi_j^i(\tau) + 2 Nu \sum_{j=0}^{N+1} l_j^i(\xi) \phi_j^i(\tau) \end{aligned} \quad (6.30)$$

$i = 1 \dots Nelem$

Obrigando-se o resíduo a ser identicamente nulo nos pontos de colocação internos do elemento, resulta:

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_k^i}{d\tau} = & \frac{Pe}{L_i} \sum_{j=0}^{N+1} A_{kj}^i \phi_j^i + \frac{1}{L_i^2} \sum_{j=0}^{N+1} B_{kj}^i \phi_j^i - 2 Nu \phi_k^i \end{aligned} \quad (6.31)$$

$i = 1 \dots Nelem, \quad k = 1 \dots N$

onde os pontos de colocação devem ser as raízes de um certo polinômio ortogonal de grau N , conforme discussão apresentada no Capítulo 5. O sistema de equações descrito na Equação (6.31) contém $N*Nelem$ equações, para $(N+2)*Nelem$ coeficientes polinomiais. Lembremos, contudo, que as condições de continuidade e diferenciabilidade na fronteira impõem mais $2*(Nelem-1)$ restrições algébricas na forma:

$$\phi^i(x_{N+1}^i, \tau) = \phi^{i+1}(x_0^{i+1}, \tau), \quad i = 1 \dots Nelem-1 \quad (6.32)$$

$$\left. \frac{\partial \phi^i(x, \tau)}{\partial x} \right|_{x_{N+1}^i} = \left. \frac{\partial \phi^{i+1}(x, \tau)}{\partial x} \right|_{x_0^{i+1}}, \quad i = 1 \dots Nelem - 1 \quad (6.33)$$

de maneira que

$$\phi_{N+1}^i = \phi_0^{i+1}, \quad i = 1 \dots Nelem - 1 \quad (6.34)$$

$$\sum_{j=0}^{N+1} A_{N+1,j}^i \phi_j^i = \sum_{j=0}^{N+1} A_{0,j}^{i+1} \phi_j^{i+1}, \quad i = 1 \dots Nelem - 1 \quad (6.35)$$

Finalmente, as condições de contorno impõem duas restrições algébricas adicionais. No caso estudado, as restrições ficam como

$$\phi(0) = 0 \quad (1.97)$$

$$\phi_0^I = 0 \quad (6.36)$$

$$\phi(I) = 1 \quad (1.98)$$

$$\phi_{N+1}^{Nelem} = 1 \quad (6.37)$$

de maneira que o balanço final de equações e incógnitas fecha no valor de $Nelem*(N+2)$.

A normalização dos elementos é muito útil porque, caso a mesma função peso e aproximações do mesmo grau sejam utilizados em todos os elementos, torna-se possível escrever

$$A^1 = A^2 = \dots = A^{Nelem} = A \quad (6.38)$$

$$B^1 = B^2 = \dots = B^{Nelem} = B \quad (6.39)$$

de maneira que os pontos de colocação normalizados e as matrizes de ponderação associadas à derivada primeira e à derivada segunda dos polinômios interpoladores de Lagrange só precisam ser calculados uma única vez.

6.3- Aplicações em Problemas Espaciais Bi-Dimensionais

Quando o modelo matemático é descrito por equações diferenciais parciais em mais de uma direção espacial, é conveniente utilizar elementos finitos distribuídos ao longo de todas as direções espaciais do problema original. Por exemplo, retomemos o problema da Seção 5.7, que descreve a troca de calor numa peça cilíndrica com geração uniforme de energia por unidade de volume. O modelo é descrito pelo seguinte sistema de equações:

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial \left(\xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} = 1 \quad (6.40)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_{(0,\eta)} = 0, \quad \phi(1,\eta) = \phi(\xi,0) = \phi(\xi,1) = 0 \quad (6.41)$$

Este sistema bidimensional pode ser convenientemente descrito por elementos geométricos definidos como na Figura 6.4 abaixo.

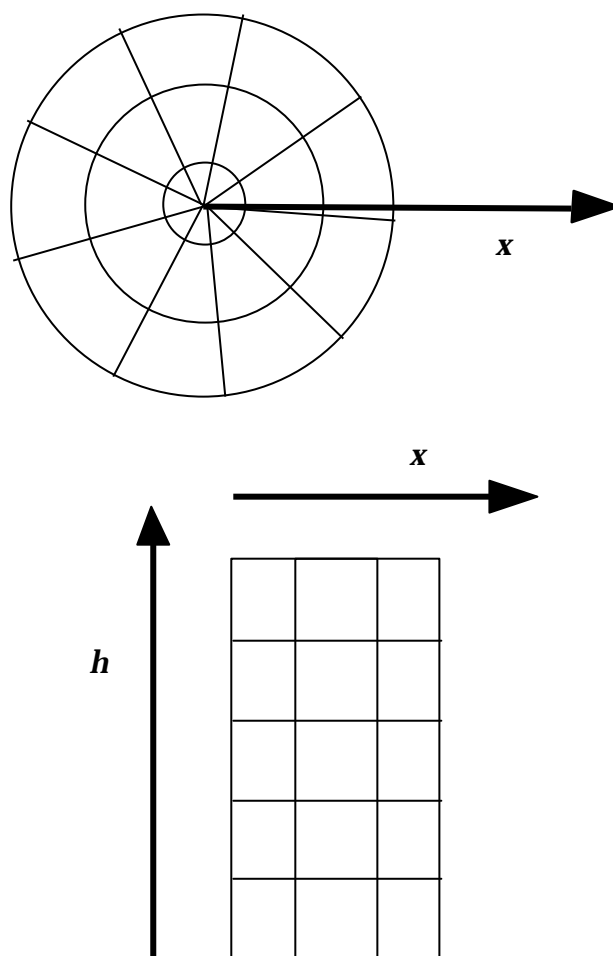


Figura 6.4 - Elementos Finitos Usuais Para a Geometria Cilíndrica.

Não devemos confundir a malha de elementos com os pontos de interpolação, haja visto que cada elemento finito pode conter muitos nós internos, além de muitos outros pontos de interpolação contidos ao longo da fronteira de dois ou mais elementos. A situação mais simples, no entanto, é aquela em que os únicos pontos de interpolação propostos são aqueles contidos formados pelos vértices dos elementos. Por exemplo, se ambas as direções radial e axial são discretizadas apenas em duas camadas, os vértices dos elementos são os mostrados na Figura 6.5 abaixo.

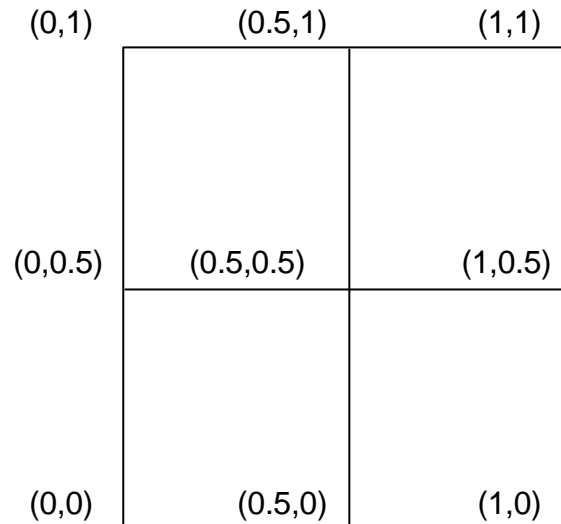


Figura 6.5 - Coordenadas dos Vértices dos Elementos Para Discretização em Dois Níveis de Ambas as Direções Espaciais.

Dentro de cada elemento, a função pode ser aproximada na forma:

$$\phi^i(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^{NPi} h_j^i(\xi, \eta) \phi_j^i \quad (6.42)$$

onde NPi é o número de pontos de interpolação do elemento i e $h_j^i(\xi, \eta)$ é a função de interpolação, que pode ser definida convenientemente como uma extensão dos polinômios interpoladores de Lagrange na forma:

$$h_j^i(\xi, \eta) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{NPi} \frac{(\xi - \xi_k^i)}{(\xi_j^i - \xi_k^i)} \frac{(\eta - \eta_k^i)}{(\eta_j^i - \eta_k^i)} \quad (6.43)$$

onde (ξ_k^i, η_k^i) são as coordenadas do k -ésimo ponto de interpolação do elemento i . É fácil mostrar que, assim como no caso dos polinômios interpoladores de Lagrange,

$$h_j^i(\xi_k^i, \eta_k^i) = \begin{cases} 0, & k \neq j \\ 1, & k = j \end{cases} \quad (6.44)$$

Da mesma forma feita anteriormente, as derivadas da função interpoladora nos pontos nodais podem ser calculadas como:

$$\left. \frac{\partial h_j^i(\xi, \eta)}{\partial \xi} \right|_{\left(\xi_k^i, \eta_k^i \right)} = A_{\xi_{kj}}^i = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{NPi} \frac{I}{(\xi_j^i - \xi_m^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_m^i)}{(\eta_j^i - \eta_m^i)} \prod_{\substack{n=1 \\ n \neq j \\ n \neq m}}^{NPi} \frac{(\xi_k^i - \xi_n^i)}{(\xi_j^i - \xi_n^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_n^i)}{(\eta_j^i - \eta_n^i)} \quad (6.45)$$

$$\left. \frac{\partial h_j^i(\xi, \eta)}{\partial \eta} \right|_{\left(\xi_k^i, \eta_k^i \right)} = A_{\eta_{kj}}^i = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{NPi} \frac{(\xi_k^i - \xi_m^i)}{(\xi_j^i - \xi_m^i)} \frac{I}{(\eta_j^i - \eta_m^i)} \prod_{\substack{n=1 \\ n \neq j \\ n \neq m}}^{NPi} \frac{(\xi_k^i - \xi_n^i)}{(\xi_j^i - \xi_n^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_n^i)}{(\eta_j^i - \eta_n^i)} \quad (6.46)$$

$$\left. \frac{\partial \phi^i(\xi, \eta)}{\partial \xi} \right|_{\left(\xi_k^i, \eta_k^i \right)} = \sum_{j=1}^{NPi} A_{\xi_{kj}}^i \phi_j^i \quad (6.47)$$

$$\left. \frac{\partial \phi^i(\xi, \eta)}{\partial \eta} \right|_{\left(\xi_k^i, \eta_k^i \right)} = \sum_{j=1}^{NPi} A_{\eta_{kj}}^i \phi_j^i \quad (6.48)$$

$$\left. \frac{\partial^2 h_j^i(\xi, \eta)}{\partial \xi^2} \right|_{\left(\xi_k^i, \eta_k^i \right)} = B_{\xi_{kj}}^i = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{NPi} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq j \\ n \neq m}}^{NPi} \left\{ \frac{I}{(\xi_j^i - \xi_m^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_m^i)}{(\eta_j^i - \eta_m^i)} \frac{I}{(\xi_j^i - \xi_n^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_n^i)}{(\eta_j^i - \eta_n^i)} \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq j \\ p \neq m \\ p \neq n}}^{NPi} \frac{(\xi_k^i - \xi_p^i)}{(\xi_j^i - \xi_p^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_p^i)}{(\eta_j^i - \eta_p^i)} \right\} \quad (6.49)$$

$$\left. \frac{\partial^2 h_j^i(\xi, \eta)}{\partial \eta^2} \right|_{(\xi_k^i, \eta_k^i)} = B_{\eta \eta_{kj}}^i = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{NP_i} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq j \\ n \neq m}}^{NP_i} \left\{ \frac{(\xi_k^i - \xi_m^i)}{(\xi_j^i - \xi_m^i)} \frac{1}{(\eta_j^i - \eta_m^i)} \frac{(\xi_k^i - \xi_n^i)}{(\xi_j^i - \xi_n^i)} \frac{1}{(\eta_j^i - \eta_n^i)} \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq j \\ p \neq m \\ p \neq n}}^{NP_i} \frac{(\xi_k^i - \xi_p^i)}{(\xi_j^i - \xi_p^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_p^i)}{(\eta_j^i - \eta_p^i)} \right\} \quad (6.50)$$

$$\left. \frac{\partial^2 h_j^i(\xi, \eta)}{\partial \xi \partial \eta} \right|_{(\xi_k^i, \eta_k^i)} = B_{\xi \eta_{kj}}^i = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{NP_i} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq j \\ n \neq m}}^{NP_i} \left\{ \frac{1}{(\xi_j^i - \xi_m^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_m^i)}{(\eta_j^i - \eta_m^i)} \frac{(\xi_k^i - \xi_n^i)}{(\xi_j^i - \xi_n^i)} \frac{1}{(\eta_j^i - \eta_n^i)} \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq j \\ p \neq m \\ p \neq n}}^{NP_i} \frac{(\xi_k^i - \xi_p^i)}{(\xi_j^i - \xi_p^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_p^i)}{(\eta_j^i - \eta_p^i)} \right\} + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{NP_i} \frac{1}{(\xi_j^i - \xi_m^i)} \frac{1}{(\eta_j^i - \eta_m^i)} \prod_{\substack{p=1 \\ p \neq j \\ p \neq m}}^{NP_i} \frac{(\xi_k^i - \xi_p^i)}{(\xi_j^i - \xi_p^i)} \frac{(\eta_k^i - \eta_p^i)}{(\eta_j^i - \eta_p^i)} \quad (6.51)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi^i(\xi, \eta)}{\partial \xi^2} \right|_{(\xi_k^i, \eta_k^i)} = \sum_{j=1}^{NP_i} B_{\xi \xi_{kj}}^i \phi_j^i \quad (6.52)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi^i(\xi, \eta)}{\partial \eta^2} \right|_{(\xi_k^i, \eta_k^i)} = \sum_{j=1}^{NP_i} B_{\eta \eta_{kj}}^i \phi_j^i \quad (6.53)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi^i(\xi, \eta)}{\partial \xi \partial \eta} \right|_{(\xi_k^i, \eta_k^i)} = \sum_{j=1}^{NP_i} B_{\xi \eta_{kj}}^i \phi_j^i \quad (6.54)$$

Voltando ao nosso problema, supondo que não há pontos internos de interpolação, é possível então dizer que há nove pontos de interpolação no total, sendo que cada elemento é descrito por quatro destes pontos. Numerando os pontos da esquerda para a direita e de baixo para cima, é possível dizer:

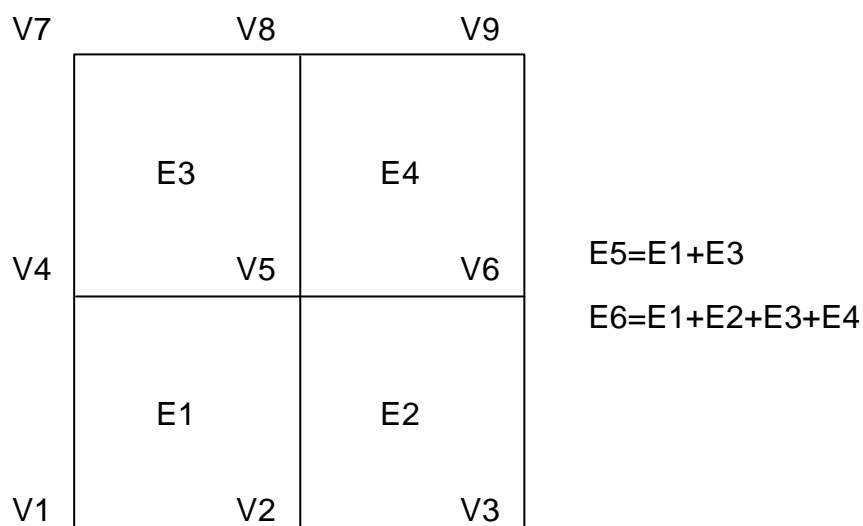


Figura 6.6 - Numeração dos Vértices e dos Elementos.

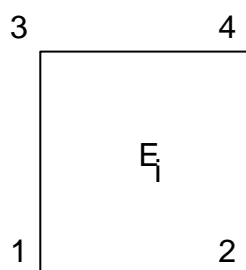


Figura 6.7 - Numeração dos Vértices de um Elemento Genérico.

Condição de contorno inferior -

$$\phi_1^I = \phi_1 = 0 \quad (6.55)$$

$$\phi_2^I = \phi_1^2 = \phi_2 = 0 \quad (6.56)$$

$$\phi_2^2 = \phi_3 = 0 \quad (6.57)$$

Condição de contorno superior -

$$\phi_3^3 = \phi_7 = 0 \quad (6.58)$$

$$\phi_4^3 = \phi_3^4 = \phi_8 = 0 \quad (6.59)$$

$$\phi_4^4 = \phi_9 = 0 \quad (6.60)$$

Condição de contorno lateral direita -

$$\phi_4^2 = \phi_2^4 = \phi_6 = 0 \quad (6.61)$$

Como só é possível escrever mais duas equações, e uma delas deve ser usada para satisfazer o contorno lateral esquerdo, os elementos 1 e 3 serão “fundidos” num único elemento 5, composto pelos vértices 1, 2, 4, 5, 7 e 8 (chamados de pontos nodais 1, 2, 3, 4, 5 e 6 do elemento finito 5), para descrever melhor a derivada no contorno e garantir a continuidade da solução.

Condição de contorno lateral esquerda -

$$A_{\xi 33}^5 \phi_3^5 + A_{\xi 34}^5 \phi_4^5 = A_{\xi 33}^5 \phi_4 + A_{\xi 34}^5 \phi_5 = 0 \quad (6.62)$$

Finalmente, resta escrever uma equação de ponderação para determinar o valor do ponto central. Neste caso, como o ponto central faz parte de quatro elementos distintos, para garantir a continuidade da função fundimos os vértices dos quatro elementos vizinhos em um único elemento 6, composto pelos pontos nodais 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 e 9. Aplicando, por exemplo, uma técnica de colocação como ponderação:

$$\begin{aligned} B_{\xi \xi 54}^6 \phi_4^6 + B_{\xi \xi 55}^6 \phi_5^6 + \frac{I}{\xi_5^6} \left(A_{\xi 54}^6 \phi_4^6 + A_{\xi 55}^6 \phi_5^6 \right) + B_{\eta \eta 54}^6 \phi_4^6 + B_{\eta \eta 55}^6 \phi_5^6 &= I \\ B_{\xi \xi 54}^6 \phi_4 + B_{\xi \xi 55}^6 \phi_5 + \frac{I}{\xi_5^6} \left(A_{\xi 54}^6 \phi_4 + A_{\xi 55}^6 \phi_5 \right) + B_{\eta \eta 54}^6 \phi_4 + B_{\eta \eta 55}^6 \phi_5 &= I \end{aligned} \quad (6.63)$$

O sistema de equações pode agora ser resolvido, levando à obtenção das coordenadas dos pontos de interpolação.

É importante salientar que esta necessidade de “fundir” elementos só apareceu porque a inexistência de pontos internos de interpolação provoca uma diminuição do número de graus de liberdade do problema. À medida que o número de pontos internos de interpolação cresce, aumenta o grau de liberdade do sistema e vai se tornando desnecessária esta operação de “fusão” dos elementos. Se cada elemento tivesse mais um ponto central de interpolação, por exemplo, a primeira ponderação do método dos momentos poderia ser aplicada em cada um dos elementos individualmente (resultando em quatro equações adicionais) e simultaneamente seria possível satisfazer a continuidade e a condição de contorno no vértice lateral esquerdo que une os elementos 1 e 3 (resultando em duas equações adicionais), que permitiriam o cômputo das coordenadas desconhecidas (nos quatro pontos internos e nos vértices 4 e 5).

6.4- Um Sistema Genérico de Coordenadas

Como visto na Figura 6.4, a forma do elemento finito pode mudar bastante em cada problema e mesmo em subdomínios distintos no mesmo problema. Por isto, é comum dentro de cada elemento fazer uma mudança de coordenadas, de forma a padronizar a

representação do elemento e de certos operadores matemáticos. Por exemplo, sejam os quadriláteros da Figura 6.8 abaixo:

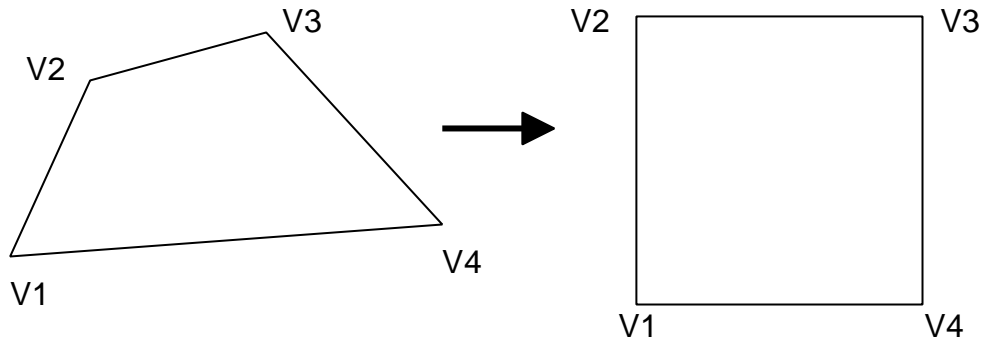


Figura 6.8 - Normalização e Mudança de Variáveis

Suponha que os vértices do quadrilátero original tenham coordenadas (u_1, v_1) , (u_2, v_2) , (u_3, v_3) e (u_4, v_4) , que devem ser mapeadas nos vértices do quadrado $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,1)$ e $(1,0)$. Isto pode ser feito, fazendo-se uma interpolação polinomial semelhante à que foi feita anteriormente, na forma:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{NPi} h_j^{uv}(u, v) \begin{pmatrix} x_j \\ y_j \end{pmatrix} \quad (6.64)$$

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{NPi} h_j^{xy}(x, y) \begin{pmatrix} u_j \\ v_j \end{pmatrix} \quad (6.65)$$

onde

$$h_j^{uv}(u, v) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{NPi} \frac{(u - u_k)}{(u_j - u_k)} \frac{(v - v_k)}{(v_j - v_k)} \quad (6.66)$$

$$h_j^{xy}(x, y) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{NPi} \frac{(x - x_k)}{(x_j - x_k)} \frac{(y - y_k)}{(y_j - y_k)} \quad (6.67)$$

de forma que toda função de u e v num domínio de geometria complexa pode ser transformada numa função de x e y num domínio de geometria muito mais simples. Por isto, os procedimentos de integração neste domínios padronizados, necessários quando se utilizam ponderações do tipo Galerkin ou dos momentos, são muito mais diretos e fáceis de executar. Obviamente, este tipo de procedimento pode ser estendido a problemas de quaisquer dimensões e a elementos de forma geométrica bastante variada. Por razões que não cabem ser discutidas neste curso, no entanto, os elementos devem ter formato convexo;

ou seja, qualquer reta que uma pontos no interior do elemento deve estar contida integralmente no interior do elemento.

Normalmente, o problema mais trabalhoso na implementação da técnica de elementos finitos é a escolha apropriada dos elementos e a distribuição dos elementos no domínio espacial onde se pretende resolver o problema. Estes detalhes, no entanto, fogem aos objetivos deste curso e não serão aqui discutidos.

Exemplo 6.1- Suponha que os vértices do quadrilátero da Figura 6.8 sejam $V_1 = (-1, -1)$, $V_2 = (0, 2)$, $V_3 = (3, 1)$ e $V_4 = (3, 0)$. Neste caso, as funções interpoladoras seriam:

$$h_1^{uv}(u, v) = \frac{(u - 0)}{(-1 - 0)} \frac{(v - 2)}{(-1 - 2)} \frac{(u - 3)}{(-1 - 3)} \frac{(v - 0)}{(-1 - 0)} \quad (6.68)$$

$$h_2^{uv}(u, v) = \frac{(u + 1)}{(0 + 1)} \frac{(v + 1)}{(2 + 1)} \frac{(u - 3)}{(0 - 3)} \frac{(v - 1)}{(2 - 1)} \frac{(u - 3)}{(0 - 3)} \frac{(v - 0)}{(2 - 0)} \quad (6.69)$$

$$h_3^{uv}(u, v) = \frac{(u + 1)}{(3 + 1)} \frac{(v + 1)}{(1 + 1)} \frac{(u - 0)}{(3 - 0)} \frac{(v - 2)}{(3 - 2)} \frac{(u - 3)}{(3 - 3)} \frac{(v - 0)}{(3 - 0)} \quad (6.70)$$

$$h_4^{uv}(u, v) = \frac{(u + 1)}{(3 + 1)} \frac{(v + 1)}{(0 + 1)} \frac{(u - 0)}{(3 - 0)} \frac{(v - 2)}{(0 - 2)} \frac{(u - 3)}{(3 - 3)} \frac{(v - 0)}{(0 - 1)} \quad (6.71)$$

Repare que o fato do valor $u=3$ aparecer duas vezes provoca o aparecimento do termo $(3-3)$ no denominador, o que é um absurdo. Além disto, a interpolação gera uma indeterminação quando $u=3$ ($0/0$). Por isto, uma interpolação de menor ordem deve ser utilizada neste caso, simplesmente na forma:

$$h_3^{uv}(u, v) = \frac{(u + 1)}{(3 + 1)} \frac{(v + 1)}{(1 + 1)} \frac{(u - 0)}{(3 - 0)} \frac{(v - 2)}{(3 - 2)} \frac{(v - 0)}{(3 - 0)} \quad (6.70a)$$

$$h_4^{uv}(u,v) = \frac{(u+1)}{(3+1)} \frac{(v+1)}{(0+1)} \frac{(u-0)}{(3-0)} \frac{(v-2)}{(0-2)} \frac{(v-0)}{(0-1)} \quad (6.71a)$$

que mantêm todas as propriedades dos interpoladores originais: são iguais a um no ponto nodal gerador e são iguais a zero nos demais pontos nodais.

As demais funções interpoladoras seriam:

$$h_1^{xy}(x,y) = \frac{(x-0)}{(0-0)} \frac{(y-1)}{(0-1)} \frac{(x-1)}{(0-1)} \frac{(y-0)}{(0-0)} \quad (6.72)$$

$$h_1^{xy}(x,y) = \frac{(y-1)}{(0-1)} \frac{(x-1)}{(0-1)} \frac{(y-1)}{(0-1)} \frac{(x-1)}{(0-1)} \quad (6.72a)$$

$$h_2^{xy}(x,y) = \frac{(x-0)}{(0-0)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \frac{(x-1)}{(0-1)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \quad (6.73)$$

$$h_2^{xy}(x,y) = \frac{(y-0)}{(1-0)} \frac{(x-1)}{(0-1)} \frac{(x-1)}{(0-1)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \quad (6.73a)$$

$$h_3^{xy}(x,y) = \frac{(x-0)}{(1-0)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \frac{(x-0)}{(1-0)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \quad (6.74)$$

$$h_3^{xy}(x,y) = \frac{(x-0)}{(1-0)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \frac{(x-0)}{(1-0)} \frac{(y-0)}{(1-0)} \quad (6.74a)$$

$$h_4^{xy}(x,y) = \frac{(x-0)}{(1-0)} \frac{(y-0)}{(0-0)} \frac{(x-0)}{(1-0)} \frac{(y-1)}{(0-1)} \quad (6.75)$$

$$h_4^{xy}(x, y) = \frac{(x - 0)}{(1 - 0)} \frac{(x - 0)}{(1 - 0)} \frac{(y - 1)}{(0 - 1)} \frac{(y - 1)}{(0 - 1)} \quad (6.75a)$$

As funções interpoladoras descritas pelas fórmulas de interpolação (6.72a-75a) são conhecidas classicamente como as funções interpoladoras quadráticas para geometria plana e ganham a forma:

$$h_1^{xy}(x, y) = (x - 1)^2 (y - 1)^2 \quad (6.72b)$$

$$h_2^{xy}(x, y) = (x - 1)^2 y^2 \quad (6.73b)$$

$$h_3^{xy}(x, y) = x^2 y^2 \quad (6.74b)$$

$$h_4^{xy}(x, y) = x^2 (y - 1)^2 \quad (6.75b)$$