Métodos Numéricos
para
Equações Diferenciais

Helio Pedro Amaral Souto

Nova Friburgo, 13 de Maio de 2024

Graduação em Engenharia

1 Propagação de uma Frente de Temperatura

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

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

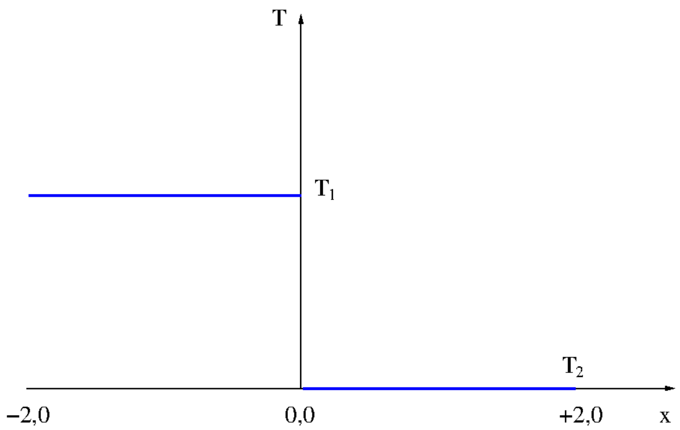

Figura 1: Perfil inicial da frente de temperatura.

Do balanço de energia, podemos mostrar que a transferência de calor é governada pela equação de advecção-condução de calor unidimensional [2]

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} = \alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \qquad u > 0 \tag{1}$$

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

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

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

enquanto que as condições de contorno impostas são

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

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

2 Solução Analítica

Para essa geometria simples e considerando o sistema de coordenadas cartesianas, sabemos que é possível obter uma solução analítica, para uma velocidade de advecção constante, a partir do Método de Separação de Variáveis [3], que pode ser aplicado à resolução de equações diferenciais parciais lineares e homogêneas, com condições de contorno homogêneas [3]. Portanto, a seguinte solução analítica é obtida para T_1=1,0 e T_2=0,0 [2]

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

onde as variáveis x, t, α, L e u já foram definidas anteriormente.

3 Solução Numérica

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

3.1 Esquema Geral a Três Níveis de Tempo

Aplicando o esquema geral a três níveis de tempo, para $\gamma = 0$, ao problema de advecção-condução de calor unidimensional, sabendo que as derivadas espaciais são aproximadas por diferenças centradas, ou *upwind* de primeira ordem em se tratando do termo advectivo, e a três pontos centrada para o termo difusivo, obtemos a sua forma final discretizada [2]

$$
\begin{aligned}
&\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\Delta t} + (1-\beta)\frac{u}{\Delta x}\left[(1-\delta)(\phi_j^n-\phi_{j-1}^n)+\delta(\phi_{j+1}^n-\phi_j^n)\right] \\
&\quad + \beta\frac{u}{\Delta x}\left[(1-\delta)(\phi_j^{n+1}-\phi_{j-1}^{n+1})+\delta(\phi_{j+1}^{n+1}-\phi_j^{n+1})\right] \\
&\quad - (1-\beta)\frac{\alpha}{\Delta x^2}(\phi_{j-1}^n-2\phi_j^n+\phi_{j+1}^n) \\
&\quad - \beta\frac{\alpha}{\Delta x^2}(\phi_{j-1}^{n+1}-2\phi_j^{n+1}+\phi_{j+1}^{n+1}) = 0
\end{aligned} \tag{5}
$$

ou ainda,

$$
\begin{aligned}
&-\beta[(1-\delta)C+s]\phi_{j-1}^{n+1}+\{1+\beta[(1-2\delta)C+2s]\}\phi_j^{n+1}-\beta(-\delta C+s)\phi_{j+1}^{n+1} \\
&=(1-\beta)[(1-\delta)C+s]\phi_{j-1}^n+\{1-(1-\beta)[(1-2\delta)C+2s]\}\phi_j^n+(1-\beta)(-\delta C+s)\phi_{j+1}^n
\end{aligned} \tag{6}
$$

onde $C = u\Delta t/\Delta x$ e $s = \alpha\Delta t/\Delta x^2$. Para $\beta = 0$ obtemos a formulação explícita, enquanto que para $\beta = 1/2$ recuperamos o esquema de Crank-Nicolson e, finalmente, para $\beta = 1$ temos a formulação totalmente implícita. Tomando $\delta = 0,5$ obtemos o esquema do tipo diferença centrada para o termo advectivo e o esquema *upwind*, de primeira ordem, é obtido fazendo $\delta = 0$. Além disso, para $\delta = 0,5(1-C)$ recuperamos o esquema de Lax-Wendroff [1].

Da análise de estabilidade de von Neumann, podemos mostrar quais são as condições necessárias para que esses diferentes métodos explícitos e implícitos convirjam. Os critérios resumidos são apresentados na Tabela 1 [1, 2].

3.2 O Algoritmo de Thomas

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

$$
-c_j\phi_{j-1}^{n+1}+a_j\phi_j^{n+1}-b_j\phi_{j+1}^{n+1}=d_j^n \tag{7}
$$

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

Método	β	δ	Condição
FTCS (Explícito)	0	0,5	$0 \leq C^2 \leq 2s \leq 1$
Upwind (Explícito)	0	0	$C + 2s \leq 1$
Lax-Wendroff (Explícito)	0	0,5(1-C)	$C^2 + 2s \leq 1$
Crank-Nicolson	0,5	todos	nenhuma
Totalmente Implícito	1	todos	nenhuma

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

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

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

e

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

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

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

No caso do método numérico utilizado, os valores dos coeficientes a_j, b_j, c_j e d_j podem ser facilmente identificados a partir da forma geral discretizada, Equação (6),

$$a_j = 1 + \beta[(1 - 2\delta)C + 2s] \tag{8}$$

$$b_j = \beta(-\delta C + s) \tag{9}$$

$$c_j = \beta[(1-\delta)C + s] \tag{10}$$

$$\begin{aligned} d_j &= (1-\beta)[(1-\delta)C + s]\phi_{j-1}^n + \{1-(1-\beta)[(1-2\delta)C + 2s]\}\phi_j^n \\ &+ (1-\beta)(-\delta C + s)\phi_{j+1}^n \end{aligned} \tag{11}$$

e vemos que o termo d_j deve ser atualizado a cada iteração no tempo.

3.3 Parâmetros Físicos

Na resolução numérica do problema de advecção-condução vamos empregar o conjunto de parâmetros apresentados na Tabela 2. O tempo máximo de simulação, t_{max}, irá variar em função dos casos.

Tabela 2: Parâmetros físicos.

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

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

Primeiro caso

$$\beta = 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} C &=& 0 \\ s &=& 1/6 \text{ e } 1 \\ t_{max} &=& 1,0 \end{array} \right. \tag{12}$$

Segundo caso

$$\beta = 0 \rightarrow \begin{cases} u &= \text{0,5 e 4,0} \\ \Delta t &= 0,05 \\ \Delta x &= 0,2 \\ \delta &= \text{0,0, 0,5 e 0,5(1-C)} \\ t_{max} &= 1,0 \end{cases} \tag{13}$$

Terceiro caso

$$\beta = 1 \rightarrow \begin{cases} u &= \text{1,0} \\ \Delta t &= 0,025 \\ \Delta x &= 0,2 \\ \delta &= \text{0,0, 0,5 e 0,5(1-C)} \\ t_{max} &= 0,5 \end{cases} \tag{14}$$

Quarto caso

$$\beta = 1/2 \rightarrow \begin{cases} u &= \text{1,0} \\ \Delta t &= 0,025 \\ \Delta x &= 0,2 \\ \delta &= \text{0,0, 0,5 e 0,5(1-C)} \\ t_{max} &= 0,5 \end{cases} \tag{15}$$

Para os últimos três casos, comparar a acurácia dos resultados obtidos com δ=0,0, 0,5 e 0,5(1-C). Caso seja possível, apresente um gráfico comparativo entre a solução exata e as soluções numéricas. Como regra geral, comente todos os resultados obtidos!

A título de ilustração, a Figura 2 mostra os resultados comparativos para os esquemas explícito ($\beta = 0$) e Crank-Nicolson ($\beta = 1/2$), empregando diferença centrada (DC), $\delta = 0,5$, e *upwind* (UPW), $\delta = 0,0$, na discretização do termo advectivo. Os valores da temperatura foram calculados considerando que $C = 0,125$, $s = 0,125$ e para um tempo final de simulação $t_{max} = 1,0$.

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

$$EMQ = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{J_{max}} \left[T_j^n - T(x_j, t^n)\right]^2}{J_{max}}} \tag{16}$$

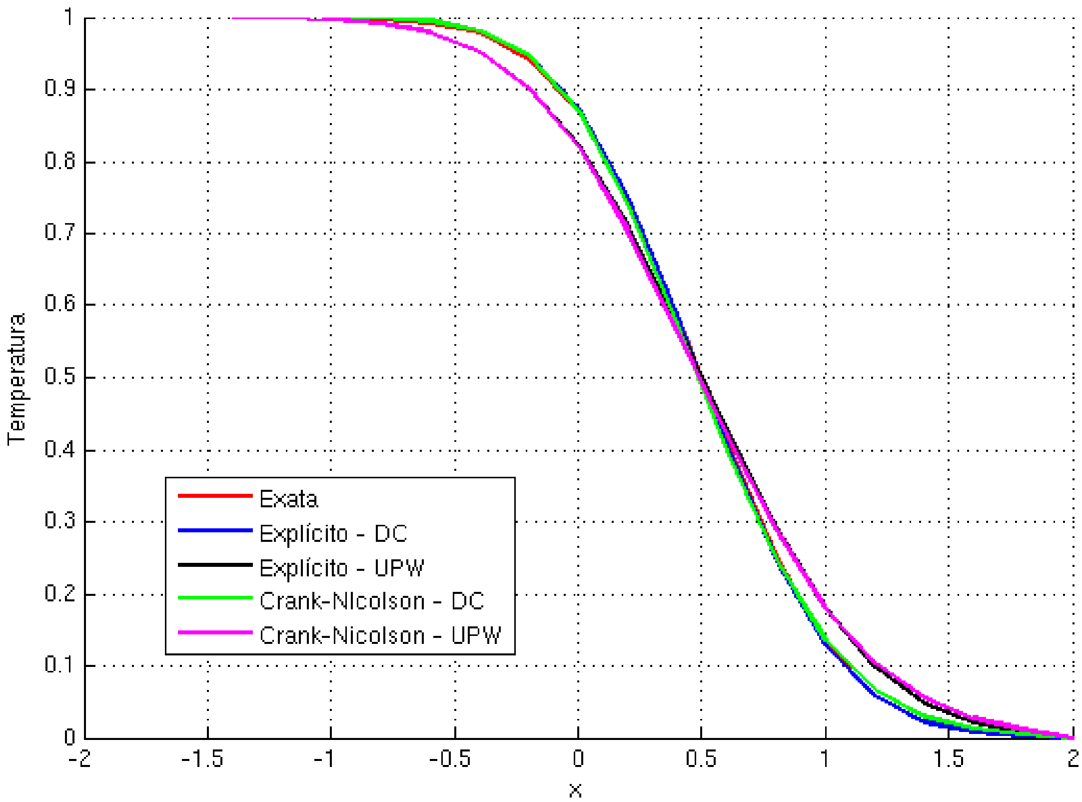

Figura 2: Comparação entre os perfis de temperatura para $C = 0,125$, $s = 0,125$ e $t = 1,0$.

A saída impressa dos resultados deve seguir, como exemplo, a formatação da listagem fornecida ao final deste documento. Nela, t é o tempo, TN é o valor numérico da temperatura, nos diferentes nós da malha, TE é o valor teórico da temperatura, determinado a partir da Equação (4), para o último valor do tempo calculado e para as posições correspondentes aos nós da malha, e EMQ representa o valor do erro médio quadrático.

```
EQUACAO DE ADVECCAO-DIFUSAO:  CRANK-NICOLSON
TERMO ADVECTIVO:  DIFERENCA CENTRADA

JMAX=   11 MAXEX=  100 NMAX=    1
TMAX=  1.00 T1=  1.00 T2=  0.00
BETA= 0.50000E+00 DELTA= 0.50000E+00
DELTA_T= 0.40000E-01 DELXTA_X= 0.40000E+00
S= 0.25000E-01 ALPHA= 0.10000E+00
U= 0.25000E+00 C= 0.25000E-01 RCEL= 0.10000E+01

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

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

 EMQ= 0.1119D-01
```

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

Referências

[1] A. R. Appadu. *Numerical Solution of the 1D Advection-Diffusion Equation Using Standard and Nonstandard Finite Difference Schemes*. Journal of Applied Mathematics, Article ID 734374, 2013.

[2] C. A. J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, Volume 1. Springer-Verlag, 1991.

[3] M. Necati Özisik. *Heat Conduction*. John Wiley & Sons, 1980.