

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

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

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.

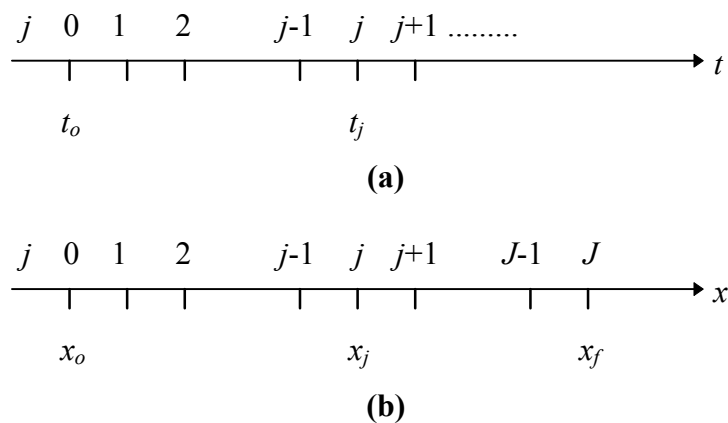


Figura 3.1 - Discretização de domínios unidimensionais: (a) semi-infinito, (b) finito.

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

$$f(y_j) = 0, \tag{3.3}$$

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 seqüência 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 \dot{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 $x_0 = 0$ e $x_J = X$. 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

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

ou, rearranjando os termos

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

As condições de contorno da Equação (3.15) entram naturalmente na solução do sistema dado pela Equação (3.18), pois, para $j = 1$, $\phi_{j-1} = \phi_0 = 0$ e, para $j = J-1$, $\phi_{j+1} = \phi_J = 1$. Assim, o sistema dado pela Equação (3.18) pode ser escrito na forma

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

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

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

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

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

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

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

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

$$x = x_c, \quad ay + by = c \quad (3.25)$$

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 ϕ_{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

$$-4(Nuh^2 + 1)\phi_1 + (2 + Pe h)\phi_2 = 0$$

$$(2 - Pe h)\phi_{j-1} - 4(Nu h^2 + 1)\phi_j + (2 + Pe h)\phi_{j+1} = 0, \quad j = 2, \dots, J-1 \quad (3.28)$$

$$4\phi_{J-1} - 4\left(Nu h^2 + 1 + hPe + \frac{1}{2}h^2 Pe^2\right)\phi_J = -2hPe(2 + Pe h)$$

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 $\phi = 0$ em $x = 0$ só é razoável neste problema físico para $X \geq 6$, quando esta aproximação leva a erros dentro da tolerância escolhida.

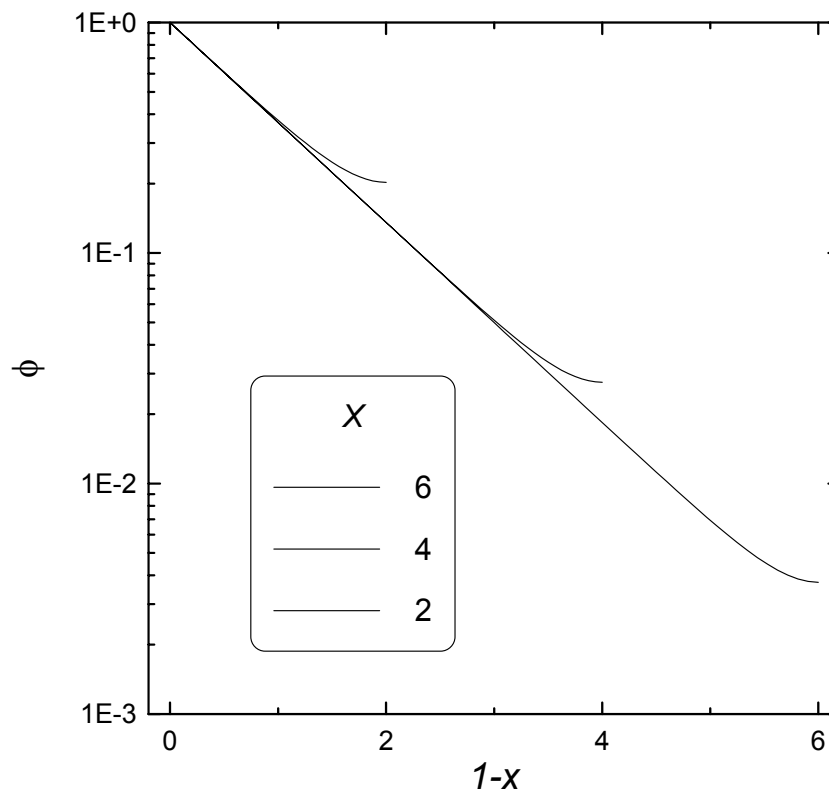


Figura 3.2 - Solução numérica do sistema dado pela Equação (3.24).

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

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

Estipulando um critério de tolerância absoluta (Equação 2.41), com $\varepsilon_a = 10^{-3}$, 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

$$\begin{aligned} & -4\left(h^2 b + 2h^2 a\phi_1^{(k-1)} + 1\right)\phi_1^{(k)} + (2 + Pe h)\phi_2^{(k)} = -4h^2 a\left(\phi_1^{(k-1)}\right)^2 \\ & (2 - Pe h)\phi_{j-1}^{(k)} - 4\left(h^2 b + 2h^2 a\phi_j^{(k-1)} + 1\right)\phi_j^{(k)} + (2 + Pe h)\phi_{j+1}^{(k)} = -4h^2 a\left(\phi_j^{(k-1)}\right)^2 \quad (3.34) \\ & \hspace{15em} j = 2, \dots, J-2 \\ & (2 - Pe h)\phi_{J-2}^{(k)} - 4\left(h^2 b + 2h^2 a\phi_{J-1}^{(k-1)} + 1\right)\phi_{J-1}^{(k)} = -4h^2 a\left(\phi_{J-1}^{(k-1)}\right)^2 - (2 + Pe h) \end{aligned}$$

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 ϕ_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 ϕ_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 $\varepsilon_a = 10^{-4}$, na norma Euclidiana do vetor ϕ_j . Utilizaram-se valores crescentes de J (4, 8, 16, 32, 64, 128, ...), até que uma tolerância absoluta ($\varepsilon_a = 10^{-4}$) 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.

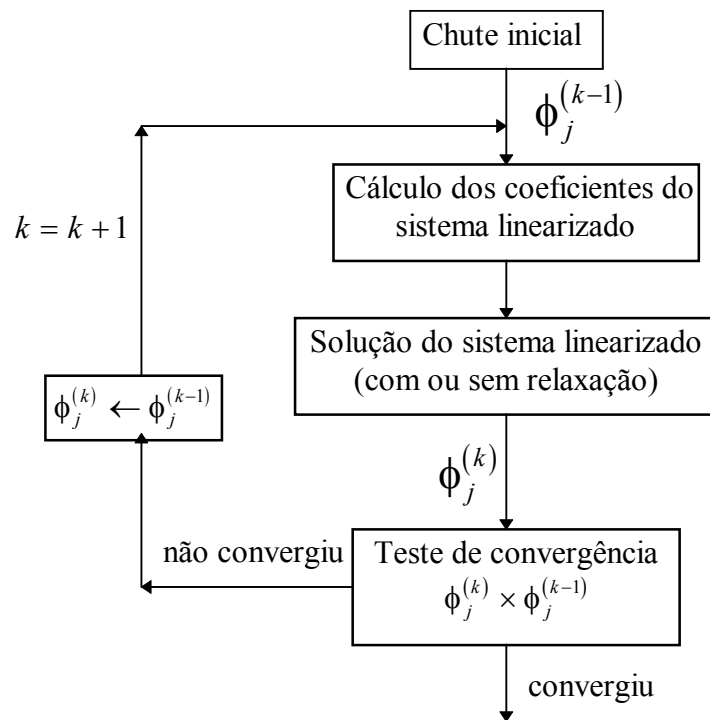


Figura 3.3 - Algoritmo de solução de sistemas linearizados.

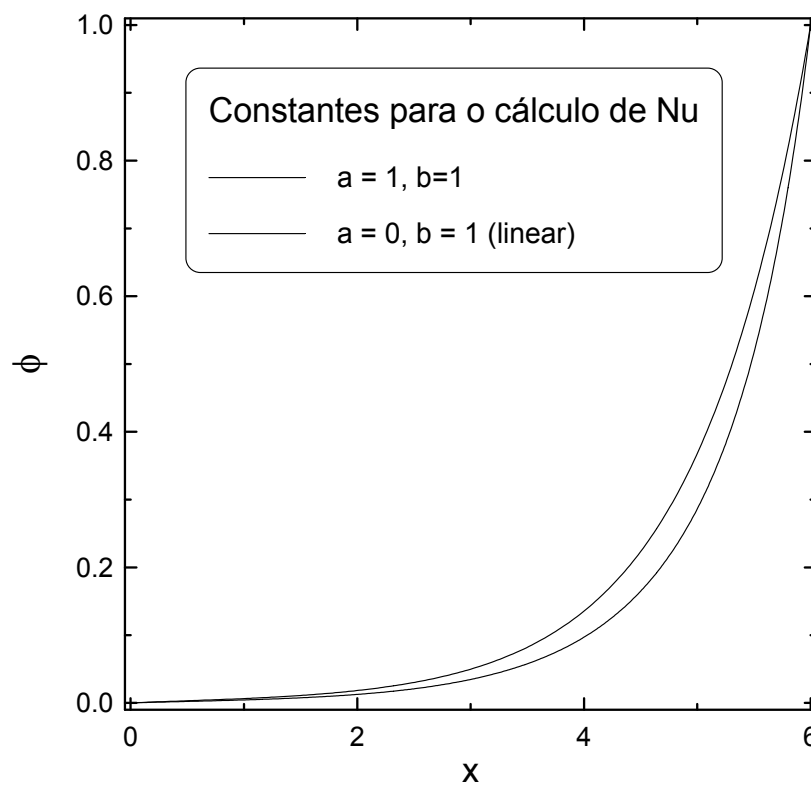


Figura 3.4 - Soluções numéricas do problema de valor inicial do Exemplo 3.2.

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

$$\begin{aligned}Pe &= a\phi + b \\Nu &= d \exp(-c\phi)\end{aligned}$$

- (a) Determine o sistema de equações algébricas linearizadas, incluindo as condições de contorno, que resolve numericamente este problema.
- (b) 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

$$\begin{aligned}\dot{y} &= f(t, y) \\t = 0, y &= y_0\end{aligned}\tag{3.35}$$

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

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

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

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

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 seqüência 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 predictor-corrector de Adams-Bashforth-Moulton*. A forma geral deste métodos é representada por

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

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

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 corrector 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, seqüencialmente, 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

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

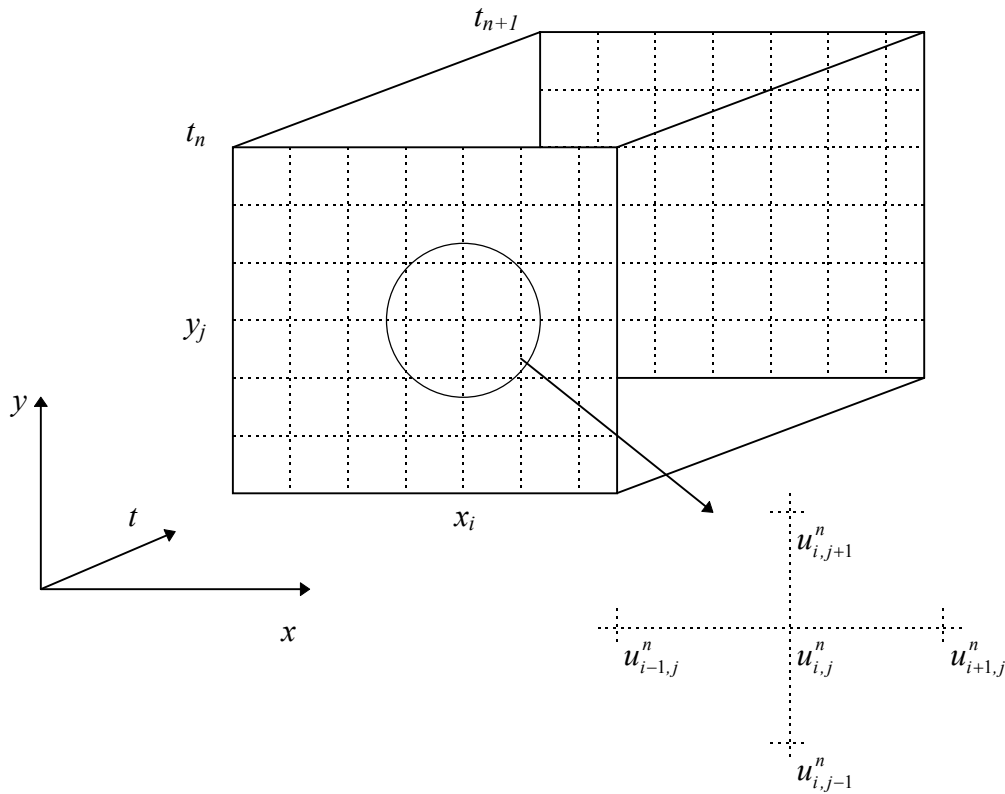


Figura 3.5 - Discretização em problemas multidimensionais.

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)

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

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

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

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

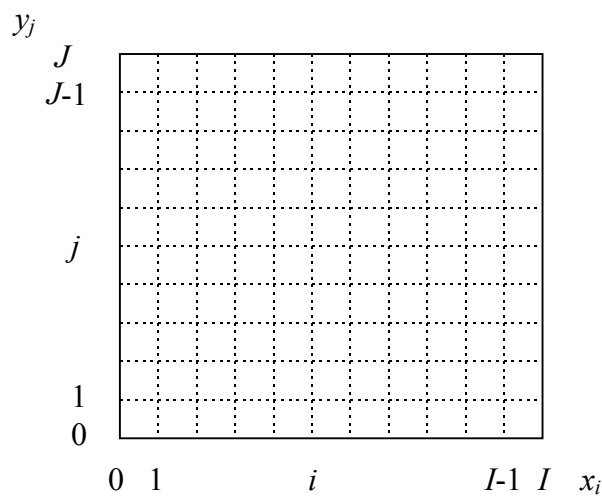


Figura 3.6 - Discretização bidimensional.

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.

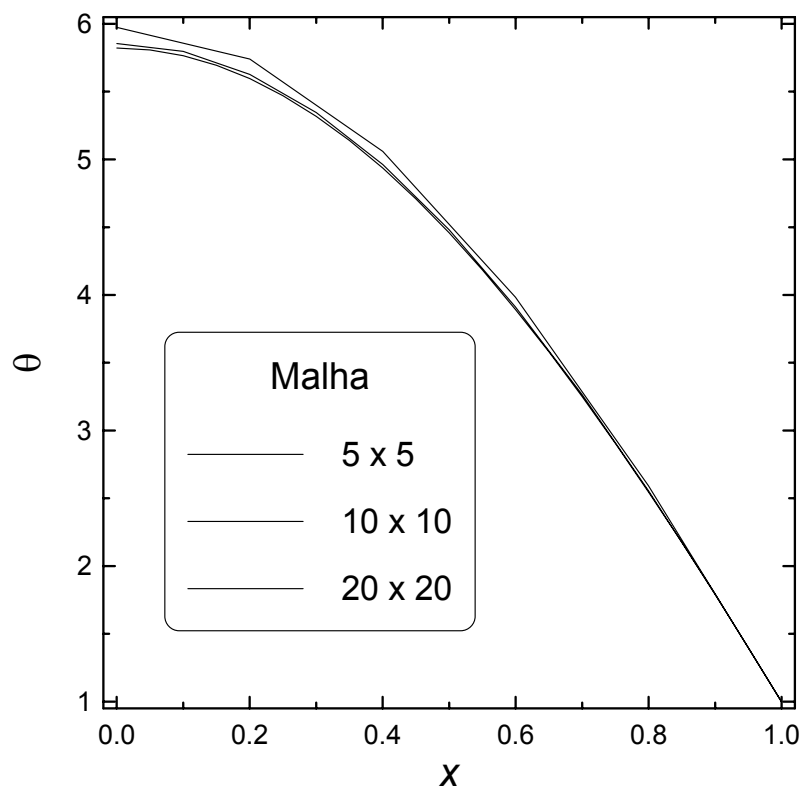


Figura 3.7 - Perfil de temperatura adimensional para $y = 0$.

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 $\eta_j, j = 0, 1, \dots, J-1$. 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

$$\frac{\Theta_{i,j} - \Theta_{i-1,j}}{\Delta \bar{\zeta}} = 2 \frac{\Theta_{i,j+1} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i,j-1}}{(\Delta \eta)^2}, \quad j = 0 \quad (3.94)$$

$$(1 - \eta_j^2) \frac{\Theta_{i,j} - \Theta_{i-1,j}}{\Delta \bar{\zeta}} = \frac{\Theta_{i,j+1} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i,j-1}}{(\Delta \eta)^2} + \frac{1}{\eta_j^2} \frac{\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j-1}}{2\Delta \eta}, \quad j = 1, \dots, J-1 \quad (3.95)$$

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

$$\left(\frac{1}{\Delta \bar{\zeta}} + \frac{4}{(\Delta \eta)^2} \right) \Theta_{i,0} - \frac{4}{(\Delta \eta)^2} \Theta_{i,1} = \frac{1}{\Delta \bar{\zeta}} \Theta_{i-1,0} \quad (3.96)$$

$$\begin{aligned} -\left(\frac{1}{(\Delta \eta)^2} - \frac{1}{2\eta_j \Delta \eta} \right) \Theta_{i,j-1} + \left(\frac{1-\eta_j^2}{\Delta \bar{\zeta}} + \frac{2}{(\Delta \eta)^2} \right) \Theta_{i,j} - \left(\frac{1}{(\Delta \eta)^2} + \frac{1}{2\eta_j \Delta \eta} \right) \Theta_{i,j+1} = \\ \frac{1-\eta_j^2}{\Delta \bar{\zeta}} \Theta_{i-1,j}, \quad j = 1, \dots, J-2 \end{aligned} \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} -\left(\frac{1}{(\Delta \eta)^2} - \frac{1}{2\eta_{J-1} \Delta \eta} \right) \Theta_{i,J-2} + \left(\frac{1-\eta_{J-1}^2}{\Delta \bar{\zeta}} + \frac{2}{(\Delta \eta)^2} \right) \Theta_{i,J-1} = \\ \frac{1-\eta_{J-1}^2}{\Delta \bar{\zeta}} \Theta_{i-1,J-1} + \frac{1}{(\Delta \eta)^2} + \frac{1}{2\eta_{J-1} \Delta \eta} \end{aligned} \quad (3.98)$$

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

$$Nu_D = \frac{2}{1-\bar{\Theta}} \left. \frac{\partial \Theta}{\partial \eta} \right|_{\eta=1}, \quad \bar{\Theta} = 4 \int_0^1 (1-\eta^2) \Theta \eta d\eta \quad (3.99)$$

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.

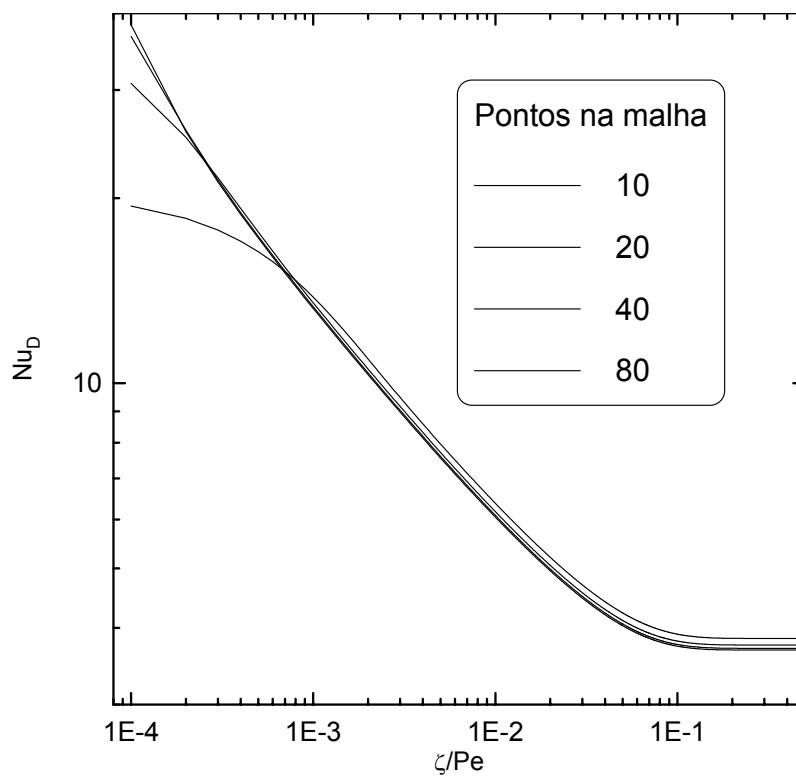


Figura 3.8 - Números de Nusselt local dentro do tubo.

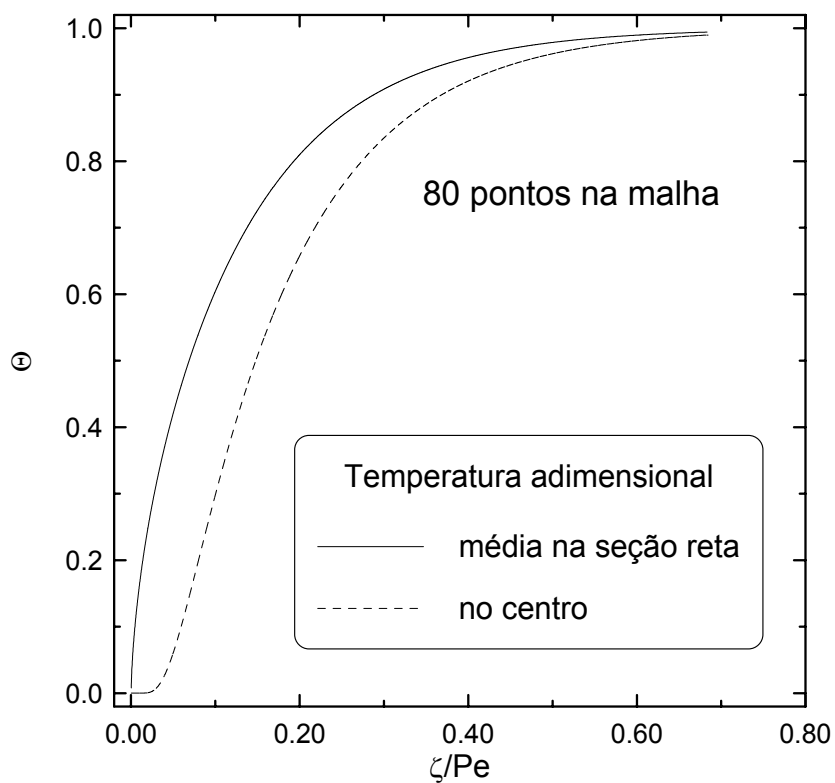


Figura 3.9 - Temperaturas adimensionais ao longo do tubo.

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/>).