

Universidade Estadual de Campinas

INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Dissertação de Mestrado Profissional em Matemática

**Modelos de processos difusivos e solução
aproximada usando volumes finitos**

por

Uilbiran Chaves Santos

Mestrado Profissional em Matemática - Campinas - SP

Orientador: Prof. Dra. Maria Cristina de Castro Cunha

**MODELOS DE PROCESSOS DIFUSIVOS E SOLUÇÃO
APROXIMADA USANDO VOLUMES FINITOS**

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por **Uilbiran Chaves Santos** e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 28 de agosto de 2008



Prof. Dra. Maria Cristina C. Cunha
Orientadora



Prof. Dr. Pécio Leister A. Barros
Co-orientador

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Maria Cristina C. Cunha
Prof. Dr. Fábio Antônio Dorini
Profa. Dra. Anamaria Gomide

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em **Matemática**.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP
Bibliotecária: Maria Júlia Milani Rodrigues – CRB8 /2116**

Santos, Uilbiran Chaves

Sa59m Modelos de processos difusivos e solução aproximada usando
volumes finitos / Uilbiran Chaves Santos -- Campinas, [S.P. :s.n.], 2008.

Orientadora : Maria Cristina de Castro Cunha

Trabalho final (mestrado profissional) - Universidade Estadual de
Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Modelos matemáticos. 2. Equações de calor. 3. Método de
volumes finitos. I. Cunha, Maria Cristina de Castro. II. Universidade
Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: Models of diffusive processes and approximate solution using finite volume.

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Mathematical models. 2. Equation of heat. 3. Finite
method volume.

Área de concentração: Matemática

Titulação: Mestre Profissional em Matemática

Banca examinadora:

Profª. Dra. Maria Cristina de Castro Cunha (IMECC/UNICAMP)

Profª. Anamaria Gomide (IC/UNICAMP)

Prof. Dr. Fabio Antonio Dorini (CEFET/PR)

Data da defesa: 28/08/2008

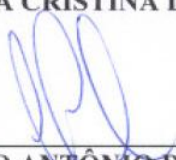
Programa de pós-graduação: Mestrado Profissional em Matemática

Dissertação de Mestrado defendida em 28 de agosto de 2008 e aprovada

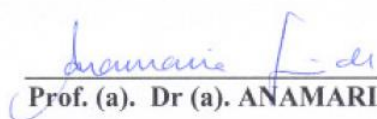
Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof. (a). Dr (a). MARIA CRISTINA DE CASTRO CUNHA



Prof. (a). Dr (a). FÁBIO ANTÔNIO DORINI



Prof. (a). Dr (a). ANAMARIA GOMIDE

*“Não há ramo da Matemática,
por mais abstrato que seja, que
não possa um dia vir a ser apli-
cado aos fenômenos do mundo
real.”*

Lobachevsky

Agradecimentos

- 1 *Agradeço a Deus, por sempre me acompanhar nos caminhos de minha vida guiando e ajudando nos momentos difíceis.*
- 2 *Agradeço à minha esposa Idaiana, pela minha filha e por me apoiar sempre.*
- 3 *Agradeço à professora Maria Cristina Cunha, pela paciência e orientação segura.*
- 4 *Agradeço aos amigos que me ajudaram neste trabalho, em especial ao Cristiano e ao João Luis pela ajuda com o MATLAB.*
- 5 *Agradeço a todos os professores do Mestrado Profissional em Matemática, pelos quais tenho grande admiração. Em especial à professora Sueli, pela serenidade com a qual coordenou os trabalhos, e por estar sempre disposta a ajudar.*
- 6 *Agradeço aos meus amigos, em especial ao Hilkias pelo incentivo e esclarecimentos das dúvidas.*
- 7 *Agradeço a todos que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.*

Resumo

Inicialmente é apresentado um capítulo sobre a modelagem matemática e sua importância nos dias atuais. Discutimos o papel das equações diferenciais, ordinárias e parciais, na representação matemática de processos reais que envolvam leis de conservação usadas na física dando enfoque às equações de difusão, que resultam do princípio de conservação de energia.

No segundo capítulo é apresentado o método dos volumes finitos, uma técnica atual e bastante útil usada na discretização de equações diferenciais parciais parabólicas e hiperbólicas.

A seguir o método dos volumes finitos é aplicado para encontrar aproximações para a solução da equação do calor transiente e espacialmente bidimensional.

Palavras-Chave: Modelos matemáticos, Equações de calor, Método de volumes finitos.

Abstract

Initially it presented a chapter on mathematical modeling and its relevance today. We discussed the role of differential equations, ordinary and partial, the mathematical representation of actual cases involving conservation laws of physics focusing used in the equations of delivery, that result from the principle of conservation of energy.

The second chapter is presented the method of finite volume, a current and very useful technique used in discretization of partial differential equations and parabolas hyperbolic.

Following the method finite volume is applied to find approaches to the solution of the equation of heat and spatially transient two-dimensional.

Keywords: Mathematical models, Equation of heat, Finite method volume.

Índice

Dedicatória	v
Agradecimentos	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
1 Modelos Matemáticos	1
1.1 Introdução	1
1.2 Modelagem Matemática	3
1.3 Modelos Usando Equações Diferenciais	4
1.4 Processos Difusivos: Equações Parabólicas	7
2 O Método dos Volumes Finitos	13
2.1 Introdução	13
2.2 Discretização Conservativa da Lei de Conservação	15
2.3 Malhas e Volumes de Controle	16
3 Uma aplicação: condução do calor	19
3.1 Desenvolvimento do termo transiente	21
3.2 Desenvolvimento do termo divergente	21
3.3 Equação (3.1) discretizada	24
3.4 Formulações Explícita, Implícita e de Crank-Nicolson	25

3.4.1	O Método Explícito	25
3.4.2	O Método Implícito	29
3.4.3	O Método de Crank-Nicolson	31
3.5	Inclusão das Condições de Contorno na Discretização	33
3.6	Experimento Computacional	36

Capítulo 1

Modelos Matemáticos

1.1 Introdução

Desde suas origens a matemática esteve ligada às soluções de problemas práticos: divisão de rebanhos de animais (teoria dos números), medição de terras (geometria) são os exemplos mais conhecidos. Gradualmente as idéias elementares foram sendo organizadas e evoluíram para estruturas lógicas. Neste processo de evolução sempre esteve presente a motivação do entendimento da natureza e predição do futuro. Hoje as mais diversas áreas do conhecimento humano, principalmente a ciência e a tecnologia, utilizam a matemática. Desta forma é natural que os Modelos Matemáticos desempenhem um papel importante na matemática.

Através de modelos matemáticos procuramos agrupar medições obtidas em experimentos, ou observações, em problemas matemáticos adequados. Mais adiante estes problemas devem ser encaminhados a compartimentos de uma estrutura de análise e resolução que já foram construídas por nossos antepassados ou que ainda esteja sendo desenvolvidas. O modelo matemático de um problema do mundo real é um conjunto de símbolos e relações matemáticas que de alguma forma representam o objeto em estudo. Em alguns casos o modelo pode ser uma simples equação, como, por exemplo, o modelo para cálculo de juros compostos: se um capital P é aplicado em n parcelas ao ano, a uma taxa de juros anual r , o montante acumulado em t anos será:

$$S(t) = P \left(1 + \frac{r}{n} \right)^{nt} \quad (1.1)$$

Esta expressão tem sido usada há séculos e é intrigante que no início do século XVII, antes até do surgimento do Cálculo, alguém percebeu que, se fazemos n crescer, os resultados se aproximam de um valor fixo; assim nasceu a função exponencial. Para citar outro exemplo mais recente, a teoria da relatividade nos diz que a massa de uma partícula com velocidade v , é dada pela função:

$$m(v) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.2)$$

onde m_0 é a massa da partícula e c é a velocidade da luz. A importância dos modelos matemáticos reside tanto na linguagem concisa e clara da matemática como expressão de idéias quanto na possível utilização de um arsenal de resultados desenvolvidos durante os últimos 2500 anos. Entretanto, o crescente desenvolvimento dos computadores, a partir da segunda guerra mundial do século XX, representou um novo estímulo na modelagem matemática posto que as calculadoras viabilizam o grande volume de cálculos numéricos que se tornaram necessários na simulação de processos mais complexos, com menos simplificações, e na otimização desses processos. Para ilustrar a importância dos modelos matemáticos lembremos que, como acontece em outras áreas do conhecimento, a história da ciência tem mostrado que a conexão entre fenômeno físico e sua representação matemática fez com que a física e a matemática caminhassem juntas na teoria da gravitação de Newton, nos trabalhos de Gauss, Euler e mais recentemente na teoria da relatividade, na mecânica estatística e no movimento Browniano.

Um modelo matemático é proveniente de simplificações do fenômeno, que tornam possível sua formulação em termos matemáticos; nem sempre estas simplificações condizem com a realidade. Assim, de modo geral um modelo matemático retrata uma visão idealizada da realidade, simplificada o bastante para permitir cálculos matemáticos, e tem como objetivo

o entendimento do fenômeno e possíveis predições do comportamento futuro. É importante entender as simplificações necessárias e as limitações dos modelos posto que a última palavra estará sempre com a natureza. Os caminhos para se chegar ao modelo para um processo que se quer estudar podem não ser simples pois trata-se de uma atividade criativa que depende de conhecimentos adquiridos previamente. A modelagem do mundo real é baseada no intercâmbio da linguagem usual da área específica com a linguagem usada na matemática. A tradução de leis da física ou de tabelas de dados coletados, por exemplo, em equações matemáticas é uma habilidade que se adquire com a experiência nas áreas envolvidas. As variáveis utilizadas no modelo, variáveis dependentes e independentes, devem ser escolhidas adequadamente respeitando sua importância prática e as relações entre elas que são conhecidas. É relevante que os esforços do profissional que desenvolve o modelo sejam no sentido da melhor representação matemática, dentro dos recursos matemáticos e computacionais disponíveis. Para se chegar ao modelo deve-se passar pela Modelagem Matemática descrita de forma resumida na seção seguinte.

1.2 Modelagem Matemática

Entende-se como modelagem matemática o processo de obtenção e validação de modelos matemáticos[1]. É, portanto, uma forma de abstração e generalização de situações do mundo real usando equações matemáticas. Inclui também a busca de solução destas equações matemáticas, interpretação destas soluções e alguma forma de validação do modelo.

Nesta definição, a modelagem matemática segue várias etapas. O esboço abaixo é uma tentativa de resumir os pontos principais.

(i) Entendimento da motivação científica do fenômeno que queremos estudar e das abordagens usadas previamente. Questionamento sobre a necessidade de novas abordagens e quais as possibilidades disponíveis nesta tarefa.

(ii) Formulação de problema real em termos matemáticos, isto é, usando funções, equações algébricas, equações não lineares, equações diferenciais, equações integro-diferenciais, sistemas de equações matemáticas, etc. Nesta etapa temos de escolher as variáveis que nos

interessam, selecionar os dados disponíveis, as leis que regem os fenômenos úteis na relação entre as variáveis, separar o todo nas partes importantes e checar as simplificações que não invalidam o modelo.

(iii) Solução do problema matemático. Aqui é importante conhecimento e habilidade de manipular os métodos matemáticos disponíveis. Talvez seja necessário voltar ao item anterior, com novas simplificações que viabilizem a solução matemática do modelo. Nesta etapa aparecem as conclusões matemáticas da modelagem.

(iv) Interpretação dos resultados obtidos. É possível a verificação experimental dos resultados? Pode-se comparar a solução obtida com as provenientes de outras abordagens? Existem outras formas de validação do modelo?

Na matemática é usual valorizar excessivamente a etapa (iii), inclusive como motivação para criação de novos métodos matemáticos. Mas quando o interesse está na modelagem, as etapas (i) a (iv) são igualmente importantes.

Quantidades que de alguma forma influenciam a dinâmica de um processo são denominadas variáveis ou parâmetros. Em geral as variáveis são quantidades que mudam com o tempo. Na representação do processo usamos variáveis independentes, por exemplo (x, y, z, t) é usado para representar uma posição no espaço (x, y, z) no tempo t . Também usamos variáveis dependentes, que, como o nome diz, podem depender de estados anteriores, das variáveis independentes e de outros dados. A relação entre estas variáveis é o próprio modelo. Os parâmetros são valores auxiliares que podem não mudar durante o processo. Em geral os parâmetros provêm de medidas experimentais, como por exemplo o coeficiente de difusão térmica usado no modelo da distribuição de temperatura num meio, a constante da mola e a porosidade de um meio poroso. Os parâmetros podem ainda surgir de observações de dados estatísticos disponíveis como, por exemplo, a taxa de crescimento de uma população.

1.3 Modelos Usando Equações Diferenciais

Como vimos, os modelos são representações, na linguagem matemática, das características relevantes de uma situação que queremos entender e usar para fazer predições. De um modo

geral os modelos são equações escritas usando símbolos matemáticos que resumem de forma simplificada parte de fatos que ocorrem no mundo real. Nesta formulação, as incógnitas que nos interessam e que, em geral são funções de outras variáveis.

Nas aplicações encontramos numerosos fenômenos nos quais a taxa de variação de algumas quantidades presentes no modelo estão relacionadas entre elas e às outras variáveis do modelo. Neste caso as incógnitas do modelo são funções que aparecem sob a operação de diferenciação e na matemática são catalogadas como **Equações Diferenciais**. As equações diferenciais representam um papel importante há mais de quatro séculos principalmente por que elas representam os princípios básicos da física que são usados na compreensão da natureza. Por exemplo, são equações diferenciais as representações dos princípios de conservação de massa, de energia e do momento do sistema. Vamos citar alguns exemplos de fenômenos cuja representação matemática envolve taxas de variação.

Exemplo 1. A taxa de decaimento de uma substância radioativa, e a quantidade de radiação que ela emite, é, em cada momento, proporcional a sua massa $m(t)$ naquele instante. Desta forma o processo de desintegração é a equação diferencial ordinária de primeira ordem:

$$\frac{dm(t)}{dt} = -am(t). \quad (1.3)$$

Nesta equação o parâmetro $a > 0$ representa o coeficiente de proporcionalidade, uma característica do material radioativo. O sinal negativo reflete o decaimento da radioatividade com o passar do tempo.

Exemplo 2. Num modelo bem simplificado podemos admitir que o crescimento de uma população é proporcional à população existente. Assim o modelo simplificado seria:

$$\frac{dp(t)}{dt} = ap(t). \quad (1.4)$$

Para melhorar o modelo precisamos considerar as restrições alimentares, a competição entre espécies, etc.

Exemplo 3. Quando um objeto quente, com temperatura T , é colocado em um ambiente com temperatura T_0 (que se presume constante), o objeto esfria a uma taxa que é proporcional à diferença entre sua temperatura no instante t e a temperatura circundante, $T - T_0$. Assim, o resfriamento do objeto tem como modelo a lei do resfriamento de Newton:

$$\frac{dT(t)}{dt} = -a[T(t) - T_0]. \quad (1.5)$$

Nos exemplos acima as funções incógnitas dependem apenas do tempo e suas taxas de variação são derivadas de funções de uma única variável. São exemplos de Equações Diferenciais Ordinárias, cuja expressão geral é:

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y), \quad y(0) = y_0 \quad (1.6)$$

na qual f representa a relação entre as variáveis e y_0 é a condição inicial.

No caso de mais de uma variável independente temos as Equações Diferenciais Parciais, mais realísticas quando representamos o mundo real, tridimensional e também a variação no tempo. Por exemplo, o princípio de conservação de massa numa região do espaço tridimensional, considerando que não há fonte de massa, é representado pela equação diferencial parcial, conhecida como equação da continuidade [9]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = 0 \quad (1.7)$$

Nesta equação a incógnita é a velocidade no ponto (x, y, z) no instante t , $\rho(x, y, z, t)$ a densidade e o vetor $u(x, y, z, t) = (u_x, u_y, u_z)$ representa a velocidade no meio.

O ideal da modelagem matemática é também encontrar métodos matemáticos que forneçam soluções exatas para os modelos, isto é, suas soluções analíticas. Por exemplo, o modelo apresentado no exemplo 1 tem como solução analítica a função $m(t) = m_0 \cdot \exp(-at)$, onde m_0 é a massa da substância radioativa no instante inicial. Entretanto em problemas mais

complexos, como por exemplo a equação da continuidade em regiões com geometria irregular, dificilmente conhecemos a solução analítica. A dificuldade em obter soluções analíticas favoreceu o desenvolvimento de métodos numéricos para calcular soluções aproximadas. Embora muitos métodos numéricos eficientes já fossem usados antes do século XX a questão do cálculo numérico restringia bastante sua utilização em modelos mais realísticos. O desenvolvimento dos computadores nos últimos sessenta anos ampliou de forma expressiva a gama de problemas que podem ser investigados usando aproximações fornecidas por métodos numéricos. Presenciamos um crescente desenvolvimento de programas computacionais, chamados simuladores em algumas áreas, que tem como modelo sistemas de equações diferenciais que incorporam mais e mais as complexidades dos fenômenos em estudo.

1.4 Processos Difusivos: Equações Parabólicas

Nesta seção vamos usar o **Princípio da conservação de Energia**, na forma de calor, para obter uma equação diferencial que representa matematicamente este princípio. Esta é a **Equação do Calor**, protótipo das equações parabólicas que são amplamente usadas no estudo de processos difusivos.

Para obter a versão bidimensional desta equação, consideremos uma placa homogênea fina $R = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; 0 < x < L \text{ e } 0 < y < M\}$, isolada de modo que nenhum calor flua através de suas faces, Fig. 1.1, isto é, que o fluxo de calor na placa se realiza apenas na direção dos eixos x e y . Além disso, suponhamos que a temperatura na placa seja uniforme em cada seção perpendicular aos eixos coordenados.

O **Princípio da Conservação do calor** nos diz que : *A quantidade de calor acumulado numa região R , por unidade de tempo, é igual à resultante do fluxo de calor que passa pela fronteira de R somado à quantidade de calor gerado no interior de R , por unidade de tempo.*

Os símbolos matemáticos podem ser usados para rescrever cada uma das três parcelas que estão presentes no balanço acima: termo de acumulação, termo do fluxo e o termo de geração. Esta é a forma de obter uma equação matemática que represente um princípio físico.

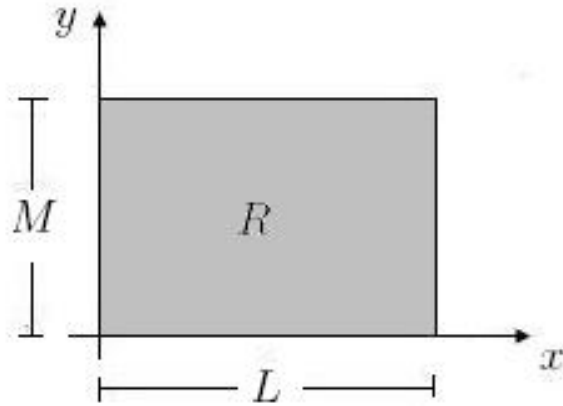


Fig. 1.1: **Placa retangular homogênea.**

Vamos detalhar cada uma das parcelas separadamente considerando uma porção arbitrária da placa R , definida por $R_p = \{(x, y) / \bar{x} \leq x \leq \bar{x} + \Delta x \text{ e } \bar{y} \leq y \leq \bar{y} + \Delta y\}$, conforme Fig. 1.2.

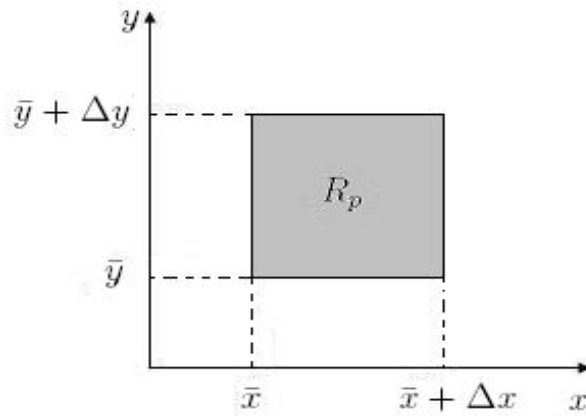


Fig. 1.2: **Porção da placa R .**

A quantidade de calor, ΔQ , que se acumula em qualquer porção de uma placa é proporcional ao produto de sua massa m pela taxa de variação da temperatura, aqui representada pela função $T(x, y, t)$:

$$\Delta Q = cm \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1.8)$$

para uma constante positiva c , conhecida como *calor específico* do material que compõe o corpo representado matematicamente por R . Dessa forma, se ρ designa a densidade do material (massa por unidade de área), então, em razão de (1.8) a quantidade de calor que se acumula em R_p por unidade de tempo, é :

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = c\rho\Delta x\Delta y\frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1.9)$$

sendo $\frac{\partial T}{\partial t}$ calculada em algum ponto de R_p .

Passemos ao cálculo do fluxo que atravessa a fronteira de R_p . A lei de Fourier nos diz que o fluxo de calor que passa através de uma superfície é proporcional à derivada normal da temperatura. No caso da placa R_p , Fig. 1.2, o fluxo de calor se dá nas seções retas localizadas na direção dos eixos coordenados e, portanto, a taxa de variação do fluxo de calor num ponto $(\bar{x}, \bar{y})$, por unidade de área e unidade de tempo pode ser escrito em termos do gradiente da temperatura neste ponto:

$$-k_x\frac{\partial T}{\partial x} - k_y\frac{\partial T}{\partial y}. \quad (1.10)$$

Esta é a **Equação Constitutiva** que informa como se difunde o calor no material que compõe a placa, e as constantes de proporcionalidades k_x e k_y são chamadas coeficientes de condutividade térmica, uma característica do material. Sendo k_x e k_y positivos, e como o fluxo ocorre na direção da diminuição da temperatura, o sinal negativo em (1.10) é necessário. Adotando a convenção de sinais dos eixos x e y , o calor que entra em R_p , na direção x é:

$$k_x\Delta y\frac{\partial T}{\partial x}(\bar{x}, y, t) \quad (1.11)$$

e o que sai:

$$-k_x\Delta y\frac{\partial T}{\partial x}(\bar{x} + \Delta x, y, t), \quad (1.12)$$

com $\bar{y} \leq y \leq \bar{y} + \Delta y$.

Analogamente, na direção y o calor que entra e que sai é, respectivamente:

$$k_y \Delta x \frac{\partial T}{\partial y} (x, \bar{y}, t) \quad e \quad -k_y \Delta x \frac{\partial T}{\partial y} (x, \bar{y} + \Delta y, t), \quad (1.13)$$

com $\bar{x} \leq x \leq \bar{x} + \Delta x$.

Assim, o fluxo de calor resultante (o calor que entra menos o calor que sai) é:

$$\begin{aligned} & k_x \Delta y \left[\frac{\partial T}{\partial x} (\bar{x} + \Delta x, y, t) - \frac{\partial T}{\partial x} (\bar{x}, y, t) \right] + \\ & k_y \Delta x \left[\frac{\partial T}{\partial y} (x, \bar{y} + \Delta y, t) - \frac{\partial T}{\partial y} (x, \bar{y}, t) \right]. \end{aligned} \quad (1.14)$$

O terceiro termo do balanço de energia, que representa o calor gerado, por unidade de área e unidade de tempo, no interior de R_p será escrito em termos de uma função $f(x, y, t)$. Assim, a quantidade de calor gerada em R_p , por unidade de tempo, será dada por :

$$\Delta x \Delta y f(x, y, t). \quad (1.15)$$

Usando (1.9), (1.14) e (1.15) no princípio de conservação de calor, teremos:

$$\begin{aligned} c\rho \frac{\partial T}{\partial t} &= k_x \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{\partial T}{\partial x} (\bar{x} + \Delta x, y, t) - \frac{\partial T}{\partial x} (\bar{x}, y, t) \right] + \\ & k_y \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{\partial T}{\partial y} (x, \bar{y} + \Delta y, t) - \frac{\partial T}{\partial y} (x, \bar{y}, t) \right] + f(x, y, t), \end{aligned} \quad (1.16)$$

e passando ao limite quando Δx e Δy tendem a zero, obtemos

$$a^2 \frac{\partial T}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + f(x, y, t), \quad (1.17)$$

onde a constante $c\rho$ foi substituída por a^2 para ressaltar que ela é positiva. Esta equação é conhecida também como a *equação da difusão bidimensional*.

Os problemas físicos têm **condições de contorno** que devem descrever matematicamente o que está acontecendo no contorno do corpo em estudo. Além da razão física, adicionar condições extras à equação diferencial é crucial na descrição do problema, do ponto de vista matemático. Em outras palavras, o conjunto **equação diferencial, condições de contorno e condições iniciais**, deve ser um problema bem posto: ter uma única solução e esta solução deve depender continuamente dos dados do problema (pequenas perturbações nos dados implicam em pequenas variações da solução).

Através da condição inicial informamos como é a solução no início do processo em estudo, $T(x, y, 0) = 0$. No caso da equação do calor (1.17), a condição inicial é uma função que traduz a distribuição da temperatura no tempo que consideramos inicial:

$$T(x, y, 0) = T_0(x, y), \quad 0 \leq x \leq L \quad e \quad 0 \leq y \leq M.$$

As condições de contornos devem ser usadas nas seções retas localizadas nos eixos coordenados, as quais podem ser dos seguintes tipos.

Se a temperatura é conhecida nos extremos, temos **condições do tipo Dirichlet**:

$$\begin{aligned} T(0, y, t) &= f_1(y, t) \quad e \quad T(L, y, t) = f_2(y, t); \\ T(x, 0, t) &= g_1(x, t) \quad e \quad T(x, M, t) = g_2(x, t), \quad t \geq 0. \end{aligned}$$

Se o fluxo de calor é conhecido, incluindo o caso de fronteiras isoladas:

$h_1(y, t) = h_2(y, t) = 0$ e $w_1(y, t) = w_2(y, t) = 0$, temos **Condições de Newmann**:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial x}(0, y, t) = h_1(y, t) \quad e \quad \frac{\partial T}{\partial x}(L, y, t) = h_2(y, t); \\ \frac{\partial T}{\partial y}(x, 0, t) = w_1(x, t) \quad e \quad \frac{\partial T}{\partial y}(x, M, t) = w_2(x, t), \quad t \geq 0. \end{aligned}$$

Se a temperatura da vizinhança da fronteira é conhecida, temos **Condições Mista**. Neste caso podemos utilizar a Lei de Fourier para obter as seguinte relações:[6]

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial x}(0, y, t) = \lambda_1[T(0, y, t) - f_1(y, t)] \quad e \quad \frac{\partial T}{\partial x}(L, y, t) = \lambda_2[T(L, y, t) - f_2(y, t)]; \\ \frac{\partial T}{\partial y}(x, 0, t) = \mu_1[T(x, 0, t) - g_1(x, t)] \quad e \quad \frac{\partial T}{\partial y}(x, M, t) = \mu_2[T(x, M, t) - g_2(x, t)], \quad t \geq 0. \end{aligned}$$

Capítulo 2

O Método dos Volumes Finitos

2.1 Introdução

O método dos volumes finitos é um método de discretização que é utilizado para obter a solução numérica de vários tipos de equações diferenciais, a partir da integração da equação diferencial em uma região, chamada *volume de controle*. Este método tem sido usado com sucesso na dinâmica dos fluidos, em particular para encontrar a aproximação da solução para problemas complexos em várias áreas da ciência e da engenharia, como por exemplo simulação para aumentar a eficiência da recuperação do petróleo disponível num reservatório[5].

Uma característica importante do método dos volumes finitos é que em cada volume discretizado, a grandeza física em questão, por exemplo a massa, obedece à uma lei de conservação, ou seja, sua quantidade permanece conservada a nível discreto. Esta característica torna o método dos volumes finitos muito útil quando se quer modelar problemas para os quais o fluxo é importante, como por exemplo, na mecânica dos fluidos.

O fluxo de uma grandeza, como massa ou energia, é definido pela quantidade dessa grandeza que atravessa uma região com área A , por unidade de tempo. Em geral, são os experimentos físicos que nos informam as características do fluxo da grandeza em estudo. Por exemplo, a lei de Fourier estabelece a relação entre o fluxo de calor e a derivada normal

da temperatura, conforme (1.10).

A quantidade de uma grandeza U que atravessa as fronteiras de um volume de controle V por unidade de tempo, é calculada pelo balanço na fronteira, isto é, pela diferença entre o fluxo que entra e o que sai de V . Os fluxos, de um modo geral, são classificados em [7]:

- **Fluxos convectivos**, que estão associados à velocidade do fluido. Por exemplo, se U for a temperatura, o fluxo convectivo seria o fluxo de calor devido ao escoamento de água quente de uma região mais quente para a região onde a água estivesse mais fria.
- **Fluxos difusivos**, que são causados pela não-uniformidade da distribuição espacial de U . Novamente, considerando U como temperatura, surge um fluxo de calor na direção x , por exemplo, quando há um gradiente de temperatura presente nessa direção. A componente do fluxo de calor na direção x , dada por $k \frac{\partial U}{\partial x}$, onde k é o coeficiente de condutividade térmica do meio, aparece no sentido da temperatura mais alta para a mais baixa. Como vemos, a natureza do fluxo difusivo é diferente do convectivo, pois mesmo sem movimento do fluxo pode ocorrer fluxo difusivo.

O resultado do balanço da grandeza que cruza a fronteira de V somado à produção de U em V , é proporcional à variação temporal de U dentro do volume de controle.

Dessa forma, considerando apenas fluxo difusivo, podemos escrever a lei de conservação de uma grandeza U em um volume de controle V :

$$\begin{aligned} & \text{Taxa de variação temporal elevado de } U \text{ em } V = \text{Entrada} \\ & \text{de } U \text{ em } V + \text{Produção de } U \text{ em } V. \end{aligned}$$

Na expressão acima consideramos produção positiva(geração) ou negativa(sumidouro).

A seguir vamos usar o método dos volumes finitos para obter equações discretizadas associadas a esta expressão, e que serão usadas na obtenção de soluções aproximadas para uma equação diferencial difusiva.

2.2 Discretização Conservativa da Lei de Conservação

Suponhamos que o fluxo de uma grandeza U seja representado pela função vetorial $\vec{F}$. O modelo matemático que representa uma lei de conservação de U , num domínio Ω , é a equação diferencial

$$U_t = \nabla \cdot \vec{F} + Q, \quad (2.1)$$

onde Q é o termo fonte, que representa a produção de U em Ω .

Como veremos adiante, devemos discretizar o domínio, isto é, gerar uma malha que será usada na divisão de Ω em volumes de controle Ω_j .

O método dos volumes finitos consiste em integrar a equação diferencial em cada volume de controle, isto é, transformar (2.1) na equação diferencial

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial U}{\partial t} d\Omega = \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \vec{F} d\Omega + \int_{\Omega_j} Q d\Omega. \quad (2.2)$$

A integral da divergência de um vetor de funções no volume de controle Ω_j é pelo teorema de Gauss igual à integral de superfície de $\vec{n} \cdot \vec{F}$:

$$\int_{\Omega_j} \nabla \cdot \vec{F} d\Omega = \oint_{\partial\Omega_j} \vec{n} \cdot \vec{F} ds, \quad (2.3)$$

onde $\partial\Omega_j$ é o contorno fechado de Ω_j e $\vec{n}$ o vetor unitário normal a $\partial\Omega_j$. Assim, teremos:

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial U}{\partial t} d\Omega = \oint_{\partial\Omega_j} \vec{n} \cdot \vec{F} ds + \int_{\Omega_j} Q d\Omega. \quad (2.4)$$

Esta é a equação básica do Método dos Volumes Finitos que tem como uma de suas principais vantagens trabalhar com as componentes dos fluxos sobre o contorno do domínio.

A partir de (2.4) devemos aproximar as integrais para se chegar na forma discretizada da lei de conservação.

Em resumo, o método consiste em 4 etapas:

- Divisão do domínio da equação diferencial em volumes de controle finitos;
- Integração da equação diferencial nos volumes de controle;
- Discretização de cada integral de modo a obter um conjunto de equações algébricas;
- Solução do sistema de equações resultantes, empregando métodos numéricos.

2.3 Malhas e Volumes de Controle

Uma malha é um conjunto de linhas que se intersectam em pontos que são os nós. Dessa forma, cada nó da malha pode ser conceptualizado como o ponto representativo do volume de controle que o rodeia. A malha deve abranger todo o domínio físico da solução e os seus nós são os pontos onde a variável dependente, temperatura para o caso da condução de calor, assumirá valores que são a solução da equação discretizada.

Dentre os possíveis tipos de malhas, podemos ter malhas estruturadas, que apresentam uma estrutura ou regularidade entre os pontos na distribuição espacial e malhas não-estruturadas, devido à ausência de regularidade na distribuição dos pontos.

Em malhas estruturadas, as fronteiras dos volumes de controle são definidas pelas mediatrizes dos segmentos que unem dois nós consecutivos, conforme Fig. 2.1.

Apesar dessa figura induzir tal raciocínio, uma malha estruturada não tem necessariamente que ter um espaçamento uniforme. No caso da malha ser uniforme, o nó que representa um determinado volume de controle se localizará no centro geométrico desse volume, tal como se pode observar na Fig. 2.2, que representa um volume de controle interno, isto é, que não possui nenhuma face no contorno.

A notação usada também é apresentada na Fig. 2.2. As interfaces dos volumes de controle são denotadas por e, w, n e s e suas dimensões são Δx na direção do eixo x e Δy na direção

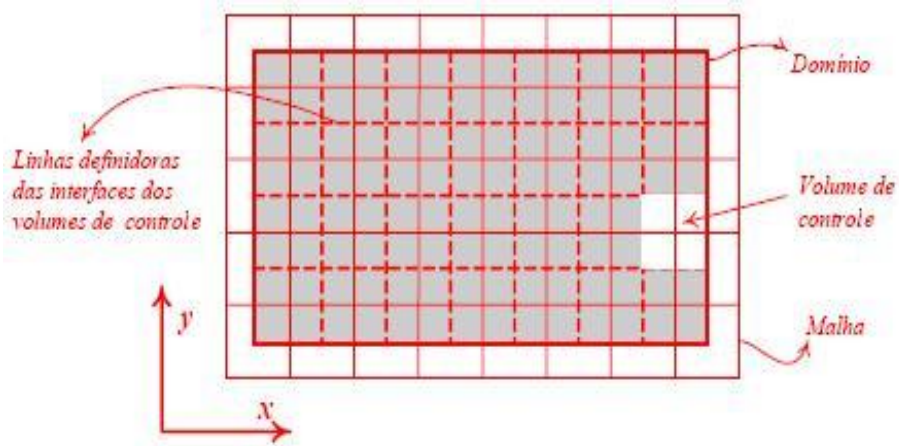


Fig. 2.1: Malha em coordenadas cartesianas (linhas cheias) e volumes de controle (linhas tracejadas).

do eixo y . As outras dimensões como por exemplo Δx_{EP} ou Δy_{PS} , são auto-explicativas. Neste caso, em que a malha é uniforme, $\Delta x_{EP} = \Delta x_{PW} = \Delta x$ e $\Delta y_{NP} = \Delta y_{PS} = \Delta y$. As variáveis q_e , q_w , q_n e q_s representam os fluxos nas interfaces dos volumes de controle.

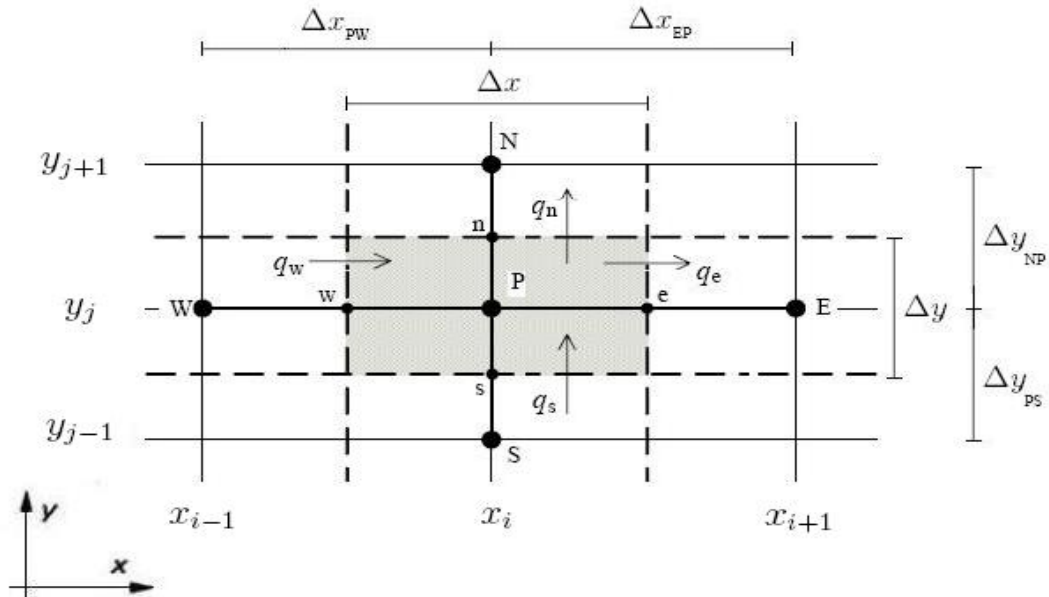


Fig. 2.2: Volume de controle interno

No próximo capítulo utilizaremos o método dos volumes finitos na discretização da

equação da condução de calor bidimensional utilizando uma malha estruturada com espaçamentos uniformes.

Capítulo 3

Uma aplicação: condução do calor

Consideremos a equação da condução térmica bidimensional, transiente e com termo fonte, deduzida no Capítulo 1. Assim sendo, procuramos a temperatura $T(x, y, t)$ que é governada por (1.17):

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + f, \quad (3.1)$$

onde $(x, y) \in R$, uma região do plano (x, y) , $t \geq 0$, $\rho(x, y, t) > 0$ é a densidade do meio, $c(x, y, t) > 0$ é o calor específico do material pelo qual o calor é conduzido, $k_x(x, y, t) > 0$ e $k_y(x, y, t) > 0$ são os coeficientes de condutividade térmica nas direções x e y , respectivamente, e $f(x, y, t)$ o termo fonte.

A equação (3.1) pode ser rescrita usando o operador divergente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (c\rho T) = \nabla \cdot \vec{F} + f, \quad (3.2)$$

onde

$$\vec{F} = k_x \frac{\partial T}{\partial x} \vec{i} + k_y \frac{\partial T}{\partial y} \vec{j} \quad (3.3)$$

denota o fluxo que passa através das faces.

No caso em que R é um retângulo

$$R = \{(x, y); 0 < x < l_1 \quad \text{e} \quad 0 < y < l_2\}, \quad (3.4)$$

a malha usada na discretização espacial será:

$$\begin{aligned} x_i &= \left(\frac{2i-1}{2} \right) \Delta x \quad i = 0 : m_1, \quad \text{onde} \quad (m_1 - 1)\Delta x = l_1 \\ y_j &= \left(\frac{2j-1}{2} \right) \Delta y \quad j = 0 : m_2, \quad \text{onde} \quad (m_2 - 1)\Delta y = l_2, \end{aligned}$$

Na variável tempo, tomaremos $t_n = n\Delta t$, $n = 0, 1, \dots$. Denotaremos por $T_{i,j}^n$ a aproximação de $T(x, y, t)$ no ponto da malha (x_i, y_j) no tempo t_n , isto é,

$$T_{i,j}^n \cong T(x_i, y_j, t_n). \quad (3.5)$$

A Fig. 2.1 ilustra os volumes de controle definidos pela malha.

Integrando (3.2) no volume de controle V de referência, Fig. 2.2, e no intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$, obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V \frac{\partial (c\rho T)}{\partial t} dV dt &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V \nabla \cdot \vec{F} dV dt + \\ &\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V f dV dt. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Considerando c e ρ constantes e supondo suavidade de $\frac{\partial T}{\partial t}$, podemos inverter a ordem de integração do lado esquerdo de (3.6):

$$\begin{aligned} c\rho \int_V \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial T}{\partial t} dt dV &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V \nabla \cdot \vec{F} dV dt + \\ &\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V f dV dt. \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.1 Desenvolvimento do termo transiente

Usando o teorema fundamental do cálculo, teremos:

$$\begin{aligned} c\rho \int_V \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial T}{\partial t} dt dV &= c\rho \int_V (T^{n+1} - T^n) dV \\ &\cong c\rho (T_P^{n+1} - T_P^n) \Delta V, \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde na última passagem usamos a fórmula de integração dos retângulos(ponto médio).

3.2 Desenvolvimento do termo divergente

Aplicando o teorema da Divergência de Gauss, podemos transformar a integral no volume em uma integral de linha:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V \nabla \cdot \vec{F} dV dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \oint_S \vec{n} \cdot \vec{F} dS, \quad (3.9)$$

sendo S o contorno fechado do volume V e $\vec{n}$ um vetor unitário normal a S que aponta para fora de S . Por outro lado:

$$\oint_S \vec{n} \cdot \vec{F} dS = \sum_q \int_{S_q} \vec{n} \cdot \vec{F} dS, \quad (3.10)$$

onde q representa as interfaces e, w, n, s, Fig. 2.2. Como mostra esta figura, $\vec{n} = (1, 0)$ na interface e , $\vec{n} = (-1, 0)$ na interface w , $\vec{n} = (0, 1)$ na interface n e $\vec{n} = (0, -1)$ na interface s . Assim, por (3.3):

$$\oint_S \vec{n} \cdot \vec{F} dS = \int_{S_e} k_x \frac{\partial T}{\partial x} dS - \int_{S_w} k_x \frac{\partial T}{\partial x} dS + \int_{S_n} k_y \frac{\partial T}{\partial y} dS - \int_{S_s} k_y \frac{\partial T}{\partial y} dS. \quad (3.11)$$

Utilizando a regra do ponto médio, aproximamos cada uma das integrais em (3.11) pelo produto do integrando no ponto médio de cada interface por seu comprimento. Por exemplo:

$$\int_{S_e} k_x \frac{\partial T}{\partial x} dS \cong \Delta y \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \bigg|_e, \quad (3.12)$$

onde $\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \bigg|_e$ é o valor do fluxo no ponto médio da interface e . Assim,

$$\oint_S \vec{n} \cdot \vec{F} dS \cong \left[\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \bigg|_e - \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \bigg|_w \right] \Delta y + \left[\left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) \bigg|_n - \left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) \bigg|_s \right] \Delta x. \quad (3.13)$$

Considerando k_x e k_y constantes e aproximando os termos difusivos por diferenças centrais, por exemplo,

$$\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \bigg|_e \cong k_x \left(\frac{T_E - T_P}{\Delta x} \right), \quad (3.14)$$

com erro de ordem $(\Delta x)^2$, teremos

$$\begin{aligned} \oint_S \vec{n} \cdot \vec{F} dS &\cong \left[k_x \left(\frac{T_E - T_P}{\Delta x} \right) - k_x \left(\frac{T_P - T_W}{\Delta x} \right) \right] \Delta y + \\ &\quad \left[k_y \left(\frac{T_N - T_P}{\Delta y} \right) - k_y \left(\frac{T_P - T_S}{\Delta y} \right) \right] \Delta x, \end{aligned} \quad (3.15)$$

com erro de truncamento de ordem $O [(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]$. Dessa forma, o lado direito de (3.15) fica:

$$\begin{aligned}
F(T(t)) = & -2 \left(k_x \frac{\Delta y}{\Delta x} + k_y \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) T_P(t) + \left(k_x \frac{\Delta y}{\Delta x} \right) T_E(t) + \\
& \left(k_x \frac{\Delta y}{\Delta x} \right) T_W(t) + \left(k_y \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) T_N(t) + \left(k_y \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) T_S(t).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Assim, obtemos a aproximação para (3.9):

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V \nabla \cdot \vec{F} dV dt \cong \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(T(t)) dt, \tag{3.17}$$

com erro de truncamento de ordem $O [(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]$.

O lado direito de (3.17) só pode ser integrado se fizermos alguma aproximação temporal para F , utilizando as regras usuais de integração numérica.

Vamos considerar as seguinte aproximações:

(i)

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(T(t)) dt \cong F(T^n) \Delta t, \tag{3.18}$$

com erro de ordem Δt .

(ii)

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(T(t)) dt \cong F(T^{n+1}) \Delta t, \tag{3.19}$$

com erro da ordem de Δt .

(iii)

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(T(t)) dt \cong \left[\frac{F(T^{n+1}) + F(T^n)}{2} \right] \Delta t, \tag{3.20}$$

com erro da ordem de $(\Delta t)^2$, pois esta aproximação é a regra dos trapézios.[7]

As três formulações anteriores podem ser generalizadas pela expressão

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(T(t)) dt \cong [\theta F(T^{n+1}) + (1 - \theta) F(T^n)] \Delta t, \quad (3.21)$$

em que θ é uma constante real que varia entre 0 e 1.

3.3 Equação (3.1) discretizada

Inicialmente discretizamos o termo fonte, usando a metodologia da seção anterior, isto é:

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_V f dV dt &\cong \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_P \Delta V dt \\ &\cong [\theta f_P^{n+1} + (1 - \theta) f_P^n] \Delta V \Delta t, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde θ varia entre 0 e 1 e f_P é valor de f no centro do volume de controle V de referência, Fig. 2.2.

Reunindo todos os termos de (3.7), na forma discretizada, obtemos:

$$\begin{aligned} c\rho (T_P^{n+1} - T_P^n) \Delta V &= [\theta F(T^{n+1}) + (1 - \theta) F(T^n)] \Delta t + \\ &[\theta f_P^{n+1} + (1 - \theta) f_P^n] \Delta V \Delta t. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dividindo por $\Delta V \Delta t$, teremos:

$$\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} = \frac{1}{c\rho} \left[\frac{\theta F(T^{n+1}) + (1 - \theta) F(T^n)}{\Delta V} + \theta f_P^{n+1} + (1 - \theta) f_P^n \right], \quad (3.24)$$

que é a forma discretizada de (3.1), utilizando o método dos volumes finitos.

3.4 Formulações Explícita, Implícita e de Crank-Nicolson

De acordo com os valores assumidos por θ em (3.24), obteremos métodos numéricos explícito, implícito e de Crank-Nicolson para (3.1). A seguir detalhamos estes métodos.

3.4.1 O Método Explícito

Fazendo $\theta = 0$ em (3.24), o método de discretização é o Método Explícito definido por

$$\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} = \frac{1}{c\rho} \left[\frac{F(T^n)}{\Delta V} + f_P^n \right]. \quad (3.25)$$

Levando em conta as expressões dos erros das discretizações no espaço, (3.15), e no tempo, (3.18), verificamos que o erro de truncamento da aproximação definida por (3.25) é de ordem $O[\Delta t + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]$.

Com este método, o valor de T_P no instante t_{n+1} , T_P^{n+1} , pode ser encontrado explicitamente em função dos valores da temperatura em P e nos nós vizinhos no instante t_n .

Substituindo os pontos nodais de (3.25) pelos seus respectivos índices, definidos na Fig. 2.2, obtemos:

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{1}{c\rho} \left[k_x \frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + k_y \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right] + \frac{1}{c\rho} f_{i,j}^n, \quad (3.26)$$

onde $T_{i,j}^n \cong T(x_i, y_j, t_n)$, $i = 2 : (m_1 - 1)$, $j = 2 : (m_2 - 1)$ e $n = 0, 1, \dots$

Explicitando $T_{i,j}^{n+1}$ em função dos demais termos, teremos:

$$T_{i,j}^{n+1} = [1 - 2(\alpha + \lambda)] T_{i,j}^n + \alpha (T_{i+1,j}^n + T_{i-1,j}^n) + \lambda (T_{i,j+1}^n + T_{i,j-1}^n) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{i,j}^n, \quad (3.27)$$

com $\alpha = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2}$ e $\lambda = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2}$.

Na Fig. 3.1, assinalamos os pontos envolvidos em cada passo do processo. Designamos por “X” os pontos nos quais T é conhecida e usada para as aproximações nos pontos assinalados por “O”.

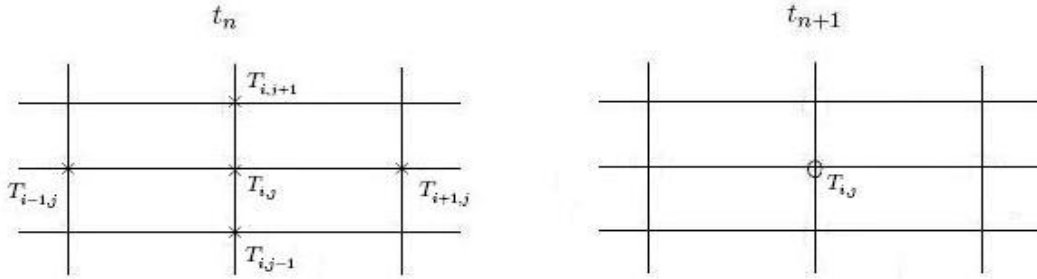


Fig. 3.1: Esquema para o Método Explícito.

A precisão da aproximação obtida em (3.27) pode ser melhorada com o refinamento da malha, isto é, pela diminuição dos valores de Δx , Δy e Δt , uma vez que o erro é $O[\Delta t + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]$. Neste caso, o número de pontos nodais aumenta com o decréscimo de Δx e Δy , e o número de intervalos de tempo necessários para calcular a aproximação até o tempo final também aumenta com a diminuição de Δt . Logo, o tempo de computação aumenta com o refinamento da malha.

Uma vez escolhidos Δx e Δy , o valor de Δt nem sempre pode ser escolhido arbitrariamente. De fato ele é determinado pelas exigências da *estabilidade*.

Uma maneira de analisar a estabilidade é escrevendo os valores $T_{i,j}^n = T(x_i, y_j, t_n)$ na forma

$$T_{i,j}^n = \Phi^n e^{IQx_i} e^{IRy_j}, \quad (3.28)$$

em que $I = \sqrt{-1}$, Φ^n sua amplitude no instante n , Q e R os números de onda nas direções x e y , respectivamente.

Para que $T_{i,j}$ não aumente sem limites, nenhuma das amplitudes Φ em (3.28) pode crescer arbitrariamente. Esta técnica é conhecida como *análise de estabilidade de von Neumann*. [16]

Como exemplo de aplicação, vamos obter o critério de estabilidade para a discretização (3.27), no caso particular em que $f(x, y, t) = 0$.

Dessa forma, devemos substituir cada termo de (3.27) usando (3.28), isto é, vamos substituir

$$\begin{aligned} T_{i,j}^{n+1} &= \Phi^{n+1} e^{IQx_i} e^{IRy_j} \\ T_{i\pm 1,j}^n &= \Phi^n e^{IQ(x_i \pm \Delta x)} e^{IRy_j} \\ T_{i,j\pm 1}^n &= \Phi^n e^{IQx_i} e^{IR(y_j \pm \Delta y)}. \end{aligned}$$

em (3.27). Assim, obtemos:

$$\begin{aligned} \Phi^{n+1} e^{IQx_i} e^{IRy_j} &= [1 - 2(\alpha + \lambda)] \Phi^n e^{IQx_i} e^{IRy_j} + \\ &\quad \alpha \Phi^n [e^{IQ(x_i + \Delta x)} e^{IRy_j} + e^{IQ(x_i - \Delta x)} e^{IRy_j}] + \\ &\quad \lambda \Phi^n [e^{IQx_i} e^{IR(y_j + \Delta y)} + e^{IQx_i} e^{IR(y_j - \Delta y)}]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Podemos dividir os dois lados dessa equação pelo fator comum $e^{IQx_i} e^{IRy_j}$ e agrupar termos, obtendo

$$\Phi^{n+1} = \Phi^n [1 - 2(\alpha + \lambda) + \alpha (e^{IQ\Delta x} + e^{-IQ\Delta x}) + \lambda (e^{IR\Delta y} + e^{-IR\Delta y})]. \quad (3.30)$$

Os termos que envolvem as exponenciais complexas podem ser simplificadas por meio das identidades

$$e^{IQ\Delta x} + e^{-IQ\Delta x} = 2\cos(Q\Delta x)$$

$$e^{IRy_j} + e^{-IRy_j} = 2\cos(R\Delta y)$$

que substituídas em (3.30), fatorando os termos comuns, fornece

$$\begin{aligned}\Phi^{n+1} &= \Phi^n [1 + 2\alpha (\cos(Q\Delta x) - 1) + 2\lambda (\cos(R\Delta y) - 1)] \\ &= G\Phi^n.\end{aligned}\tag{3.31}$$

O termo G ,

$$G = 1 + 2\alpha (\cos(Q\Delta x) - 1) + 2\lambda (\cos(R\Delta y) - 1)\tag{3.32}$$

é conhecido como *fator de amplificação*, pois ele controla a amplificação ou atenuação de Φ^n .

Para que a amplitude Φ^n não aumente a cada passo no tempo, a condição

$$\left| \frac{\Phi^{n+1}}{\Phi^n} \right| = |G| \leq 1\tag{3.33}$$

deve ser satisfeita. Isso implica que α e λ devem satisfazer à inequação

$$-1 \leq 1 + 2\alpha (\cos(Q\Delta x) - 1) + 2\lambda (\cos(R\Delta y) - 1) \leq 1.\tag{3.34}$$

Em função dos valores máximos e mínimos de $\cos(Q\Delta x)$ e $\cos(R\Delta y)$, o lado direito de (3.34) é satisfeito para quaisquer $Q\Delta x$, $R\Delta y$, α e λ . Já para o lado esquerdo, devemos ter, para os valores mínimos de $\cos(Q\Delta x) - 1 = -2$ e $\cos(R\Delta y) - 1 = -2$:

$$1 - 4(\alpha + \lambda) \geq -1\tag{3.35}$$

Lembrando que $\alpha = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2}$ e $\lambda = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2}$, a desigualdade (3.35) será:

$$\frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (3.36)$$

ou seja, o passo no tempo deve satisfazer a condição

$$\Delta t \leq \frac{c\rho}{2 [k_x (\Delta x)^{-2} + k_y (\Delta y)^{-2}]}. \quad (3.37)$$

Este é o critério de estabilidade para o método explícito (3.27).

Em resumo, (3.37) estabelece a relação entre o passo na discretização do tempo, Δt , e os espaçamentos na discretização em x e y , Δx e Δy respectivamente, de modo que o esquema numérico associado à discretização (3.27) seja estável.

Quando a estabilidade de um método depende de uma relação entre os tamanhos dos passos utilizados na discretização das variáveis independentes da equação, dizemos que ele é *condicionalmente estável*. Assim, a condição (3.37) está nos dizendo que o Método Explícito para a equação do calor (3.1) é condicionalmente estável. Observe que esta condição pode ser restritiva. Por exemplo, se $c\rho = 1$, $k_x = k_y = 5$ e $\Delta x = \Delta y = 10^{-2}$, a estabilidade estará garantida se $\Delta t \leq \frac{1}{2}10^{-5}$.

3.4.2 O Método Implícito

Para $\theta = 1$ em (3.24), o método de discretização é o Método Implícito. Com este método, o valor da temperatura em cada instante t_{n+1} , T_P^{n+1} , pode ser calculado implicitamente em função de alguns valores temperatura T no mesmo intervalo de tempo, conforme a equação

$$\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} = \frac{1}{c\rho} \left[\frac{F(T^{n+1})}{\Delta V} + f_P^{n+1} \right]. \quad (3.38)$$

Como o erro de truncamento na discretização de (3.38) é a soma dos erros de truncamento das discretizações (3.15) e (3.19) utilizadas, o erro do Método Implícito é de ordem $O [\Delta t + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]$.

Substituindo os pontos nodais pelos seus índices, teremos a equação que define o Método Implícito:

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{c\rho} \left[k_x \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + k_y \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right] = \frac{1}{c\rho} f_{i,j}^{n+1} \quad (3.39)$$

com $i = 2 : (m_1 - 1)$, $j = 2 : (m_2 - 1)$ e $n = 0, 1, \dots$

Separando as aproximações conhecidas, as do nível de tempo t_n , das não conhecidas, as do nível de tempo t_{n+1} , obtemos:

$$\lambda T_{i,j-1}^{n+1} + \alpha T_{i-1,j}^{n+1} + [1 - 2(\alpha + \lambda)] T_{i,j}^{n+1} + \alpha T_{i+1,j}^{n+1} + \lambda T_{i,j+1}^{n+1} = T_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{i,j}^{n+1}, \quad (3.40)$$

$$\text{com } \alpha = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2}.$$

Assim, teremos de resolver um sistema pentadiagonal a cada nível de tempo. Esta desvantagem de resolver o sistema é compensada pelo fato do Método Implícito ser incondicionalmente estável, como veremos a seguir.

Observe que, na discretização do Método Implícito, aparecem aproximações das soluções nos pontos da malha (x_i, y_j, t_{n+1}) , (x_{i-1}, y_j, t_{n+1}) , (x_i, y_j, t_n) , (x_{i+1}, y_j, t_{n+1}) , (x_i, y_{j-1}, t_{n+1}) e (x_i, y_{j+1}, t_{n+1}) , conforme Fig. 3.2, onde “X” representa os pontos nos quais T é conhecida e usada para as aproximações nos pontos assinalados por “O”.

Com relação à estabilidade do Método Implícito, procedendo de modo análogo à subseção anterior, isto é, utilizando a componente de Fourier dada por (3.28) e a análise de von

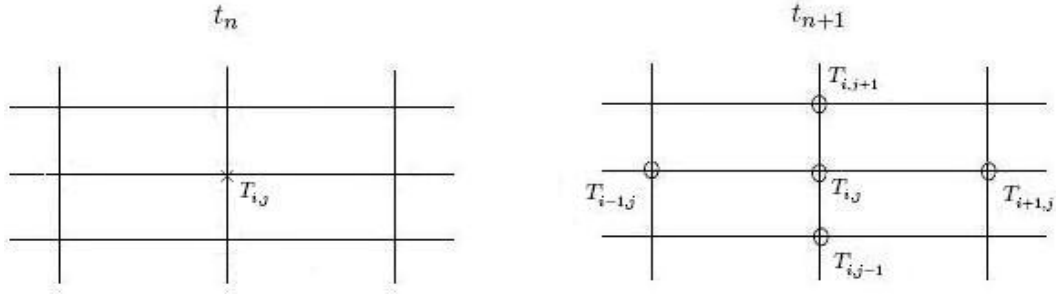


Fig. 3.2: **Esquema para o Método Implícito.**

Neumann, verificamos que o fator de amplificação do Método Implícito, na ausência de termo fonte, aplicado a (3.40) é dado por

$$G = \frac{1}{1 - 2\alpha (\cos(Q\Delta x) - 1) - 2\lambda (\cos(R\Delta y) - 1)}, \quad (3.41)$$

em que $\alpha = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2}$ e $\lambda = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2}$, Q e R os números de ondas nas direções x e y , respectivamente.

Em função dos valores máximos e mínimos de $\cos(Q\Delta x)$ e $\cos(R\Delta y)$, a inequação $|G| \leq 1$ é sempre satisfeita. Assim, concluímos que o Método Implícito é *incondicionalmente estável*, ou seja, o método permanece estável para qualquer escolha de Δx , Δy e Δt .

Dessa forma, uma vez que valores maiores de Δt podem ser usados com o Método Implícito, os tempos de cálculo podem ser reduzidos, com pouca perda de precisão. Todavia, para poder maximizar a precisão, Δt deverá ser suficientemente pequeno.

3.4.3 O Método de Crank-Nicolson

Fazendo $\theta = \frac{1}{2}$ em (3.24) chega-se ao Método de Crank-Nicolson, no qual os valores da temperatura são definidos pela uma média entre os valores das temperaturas nos instantes t_n e t_{n+1} . Assim sendo, (3.24) toma a forma:

$$\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} = \frac{1}{2c\rho} \left[\frac{F(T^{n+1}) + F(T^n)}{\Delta V} + f_P^{n+1} + f_P^n \right], \quad (3.42)$$

com erro de truncamento de ordem $O [(\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]$, que é a soma dos erros das discretizações (3.15) e (3.20).

Com a substituição dos pontos nodais pelos seus índices, o Método de Crank-Nicolson terá a forma

$$\begin{aligned} & \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2c\rho} \left[k_x \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + k_y \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right] - \\ & - \frac{1}{2c\rho} \left[k_x \frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + k_y \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right] = \frac{1}{2c\rho} f_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

com $i = 2 : (m_1 - 1)$, $j = 2 : (m_2 - 1)$ e $n = 0, 1, \dots$

Colocando T^{n+1} em função dos demais termos, teremos:

$$\begin{aligned} & \lambda T_{i,j-1}^{n+1} + \alpha T_{i-1,j}^{n+1} + 2[1 - (\alpha + \lambda)] T_{i,j}^{n+1} + \alpha T_{i+1,j}^{n+1} + \lambda T_{i,j+1}^{n+1} = \alpha T_{i-1,j}^n + \\ & + \lambda T_{i,j-1}^n + 2[1 - (\alpha + \lambda)] T_{i,j}^n + \alpha T_{i+1,j}^n + \lambda T_{i,j+1}^n + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\text{com } \alpha = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2}.$$

Na equação do Método de Crank-Nicolson (3.44), aparecem valores das aproximações em dez pontos da malha, como ilustrado na Fig. 3.3, onde “X” representa os pontos nos quais T é conhecida e usada para as aproximações nos pontos assinalados por “O”. Cinco destes pontos são conhecidos, pois correspondem às aproximações no nível de tempo t_n . Os outros cinco valores são calculados ao se resolver um sistema pentadiagonal. Por isso, o Método de Crank-Nicolson também é implícito. É possível mostrar que o método de Crank-Nicolson é incondicionalmente estável [16].

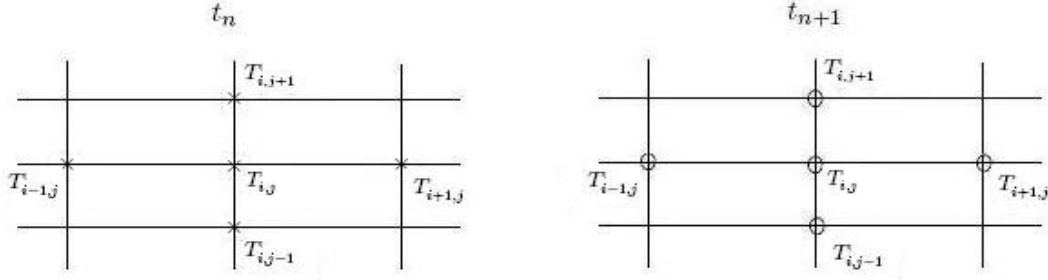


Fig. 3.3: Esquema para o Método Crank-Nicolson.

3.5 Inclusão das Condições de Contorno na Discretização

A equação (3.24) representa a equação discretizada para um volume de controle interno. Para se obter o sistema de equações algébricas completo, é também necessário obter as equações para os volumes que estão na fronteira.

Para isso, existem várias alternativas de implementação das condições de contorno do problema; os mais comuns são discretização com meio volume, volumes fictícios e balanços para volume de fronteira [10].

Neste texto, apresentaremos apenas a técnica de balanço para volumes de fronteira. Este é o procedimento considerado adequado por vários autores [Maliska (2004), por exemplo].

Esta técnica consiste em integrar, no espaço e no tempo a equação diferencial também nos volumes de fronteira, da mesma forma realizada para os volumes internos, respeitando as condições de contorno impostas. Assim, as condições de contorno ficam embutidas nas equações para os volumes de fronteira.

A seguir vamos detalhar o procedimento no caso do Método Explícito. De forma análoga podemos obter as equações discretizadas, referentes aos volumes na fronteira, nos Métodos Implícitos e Crank-Nicolson.

Dessa forma, integrando (3.1) no volume de referência, na fronteira, Fig. 3.4, teremos:

$$\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} = \frac{1}{c\rho} \left[\frac{\bar{F}(T^n)}{\Delta V} + f_P^n \right], \quad (3.45)$$

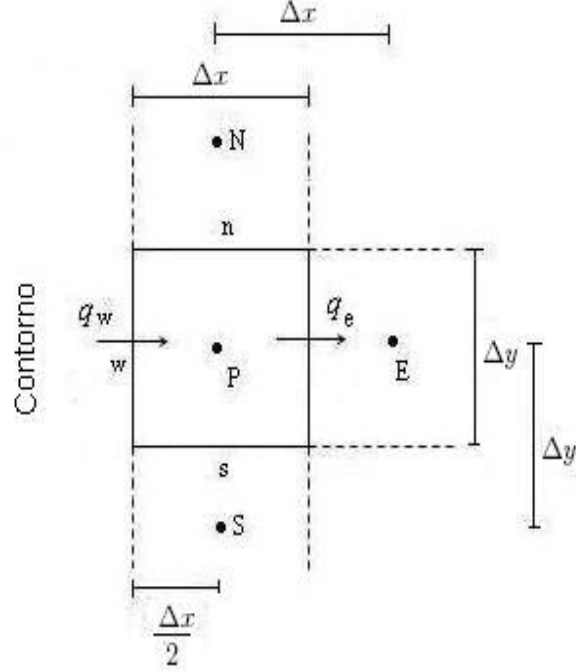


Fig. 3.4: Volume de fronteira-uma face na fronteira

onde

$$\bar{F}(T(t)) = \left[\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_e - \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{cw} \right] \Delta y + \left[\left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) \Big|_n - \left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) \Big|_s \right] \Delta x, \quad (3.46)$$

sendo $\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{cw}$ o fluxo no contorno w .

As derivadas que não estão na fronteira são avaliadas como em (3.15), e as que estão na fronteira são modificadas, ficando

$$\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{cw} = k_x \left(\frac{T_P - T_{cw}}{\Delta x/2} \right). \quad (3.47)$$

Substituindo em (3.45) os pontos nodais pelos seus índices, obtemos:

$$T_{1,j}^{n+1} = (1 - 3\alpha - 2\lambda) T_{1,j}^n + \alpha (T_{2,j}^n + 2T_{0,j}^n) + \lambda (T_{1,j+1}^n + T_{1,j-1}^n) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{1,j}^n, \quad (3.48)$$

com $j = 2 : (m_2 - 2)$, $\alpha = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_x}{\Delta x^2}$ e $\lambda = \frac{\Delta t}{c\rho} \frac{k_y}{\Delta y^2}$.

Esta é a discretização de (3.1), utilizando volumes de fronteira, com uma face na fronteira, no caso, face w .

Para volumes de fronteira com uma face em e , ou uma face em n , ou uma face em s , considerando α e λ como definidos em (3.48), as discretizações são respectivamente:

- Fronteira a Leste: face e

$$\begin{aligned} T_{m_1-1,j}^{n+1} = & (1 - 3\alpha - 2\lambda) T_{m_1-1,j}^n + \alpha \left(2T_{m_1-\frac{1}{2},j}^n + T_{m_1-2,j}^n \right) + \\ & \lambda \left(T_{m_1-1,j+1}^n + T_{m_1-1,j-1}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{m_1-1,j}^n, \end{aligned} \quad (3.49)$$

com $j = 2 : (m_2 - 2)$.

- Fronteira ao Norte: face n

$$\begin{aligned} T_{i,m_2-1}^{n+1} = & (1 - 2\alpha - 3\lambda) T_{i,m_2-1}^n + \alpha \left(T_{i+1,m_2-1}^n + T_{i-1,m_2-1}^n \right) + \\ & \lambda \left(2T_{i,m_2-\frac{1}{2}}^n + T_{i,m_2-2}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{i,m_2-1}^n, \end{aligned} \quad (3.50)$$

com $i = 2 : (m_1 - 2)$.

- Fronteira ao Sul: face s

$$T_{i,1}^{n+1} = (1 - 2\alpha - 3\lambda) T_{i,1}^n + \alpha \left(T_{i+1,1}^n + T_{i-1,1}^n \right) + \lambda \left(T_{i,2}^n + 2T_{i,0}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{i,1}^n, \quad (3.51)$$

com $i = 2 : (m_1 - 2)$.

No caso do volume de controle ter duas faces na fronteira, por exemplo, como o da Fig. 3.5, as condições de contorno são inseridas pelos termos $\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{cw}$ e $\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{cs}$, de maneira análoga à dos casos anteriores.

Assim, as discretizações para (3.1) são as seguintes:

- Volume de fronteira nas faces w e s

$$T_{1,1}^{n+1} = [1 - 3(\alpha + \lambda)] T_{1,1}^n + \alpha \left(T_{2,1}^n + 2T_{0,1}^n \right) + \lambda \left(T_{1,2}^n + 2T_{1,0}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{1,1}^n. \quad (3.52)$$

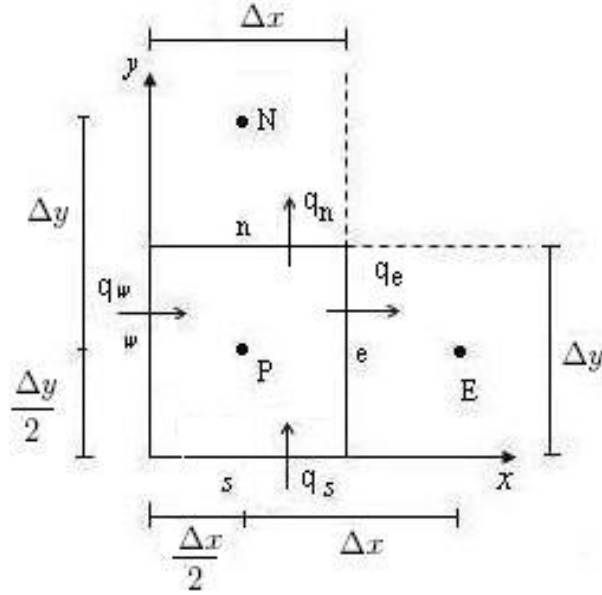


Fig. 3.5: Volume de fronteira-duas faces na fronteira

- Volume de fronteira nas faces e e s

$$T_{m_1-1,1}^{n+1} = [1 - 3(\alpha + \lambda)] T_{m_1-1,1}^n + \alpha \left(2T_{m_1-\frac{1}{2},1}^n + T_{m_1-2,1}^n \right) + \lambda \left(T_{m_1-1,2}^n + 2T_{m_1-1,0}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{m_1-1,1}^n. \quad (3.53)$$

- Volume de fronteira nas faces w e n

$$T_{1,m_2-1}^{n+1} = [1 - 3(\alpha + \lambda)] T_{1,m_2-1}^n + \alpha \left(T_{2,m_2-1}^n + 2T_{0,m_2-1}^n \right) + \lambda \left(2T_{1,m_2-\frac{1}{2}}^n + T_{1,m_2-2}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{1,m_2-1}^n. \quad (3.54)$$

- Volume de fronteira nas faces e e n

$$T_{m_1-1,m_2-1}^{n+1} = [1 - 3(\alpha + \lambda)] T_{m_1-1,m_2-1}^n + \alpha \left(2T_{m_1-\frac{1}{2},m_2-1}^n + T_{m_1-2,m_2-1}^n \right) + \lambda \left(2T_{m_1-1,m_2-\frac{1}{2}}^n + T_{m_1-1,m_2-2}^n \right) + \frac{\Delta t}{c\rho} f_{m_1-1,m_2-1}^n. \quad (3.55)$$

3.6 Experimento Computacional

Neste experimento vamos aplicar os métodos Explícito, Implícito e de Crank-Nicolson para encontrar aproximações para a equação do calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad \text{e} \quad t > 0, \quad (3.56)$$

à qual adicionamos as condições iniciais e de contorno:

$$\begin{aligned} T(0, y, t) &= T(1, y, t) = 0 \\ T(x, 0, t) &= T(x, 1, t) = 0 \\ T(x, y, 0) &= \sin(\pi x) \sin(2\pi y) \end{aligned}$$

Por derivação nas variáveis t , x e y pode-se verificar diretamente que

$$T_e(x, y, t) = e^{-5\pi^2 t} \sin(\pi x) \sin(2\pi y) \quad (3.57)$$

satisfaz à equação diferencial e as condições adicionais do problema. Para encontrar soluções aproximadas com os métodos Explícito, Implícito e de Crank-Nicolson, aplicadas neste caso em particular, utilizamos o software Matlab.

Na Tabela 3.1, apresentamos o erro correspondente ao método explícito no nível de tempo $t = 0.1$ para N pontos da malha nas direções x e y . Para obter este resultado usamos $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{N}$ e $\Delta t = 0,8 \cdot 10^{-4}$ para $N = 51$. A Tabela 3.2 indica os erros correspondentes aos métodos implícitos e de Crank-Nicolson, considerando $\Delta t = 0.005$ também para $N = 51$ e no nível de tempo $t = 0.1$.

Usamos o erro

$$Erro(T) = \left[\sum_{ij} (T_{ij} - T_e)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.58)$$

com medida de erro nas tabelas.

As figuras Fig. 3.6, Fig. 3.7 e Fig. 3.8 representam os gráficos das aproximações para (3.56) correspondentes aos métodos Explícitos, Implícitos e de Crank-Nicolson, respectivamente, para $N = 51$; para comparação apresentamos também na Fig. 3.9, o gráfico da solução exata.

t	N	N^o de passos no tempo	Explícito
0.1	51	1250	$0,4 \cdot 10^{-4}$

Tabela 3.1: **Erro da aproximação**

t	N	N^o de passos no tempo	Implícito	Crank-Nicolson
0.1	51	20	0.2004	0.0461

Tabela 3.2: **Erros das aproximações**

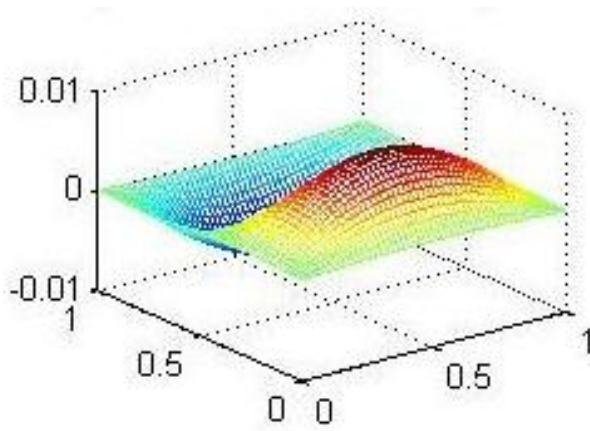


Fig. 3.6: Aproximação do método explícito

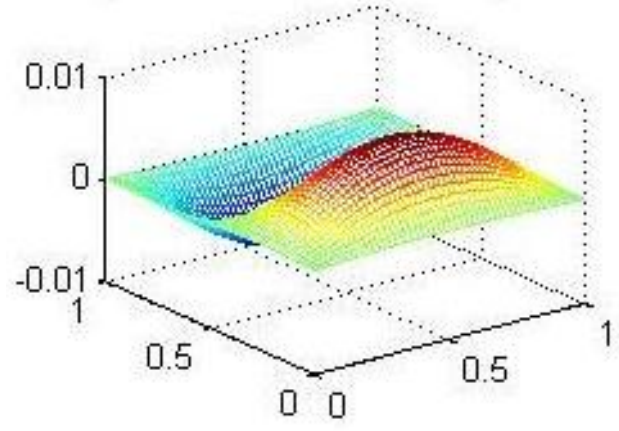


Fig. 3.7: Aproximação do método implícito

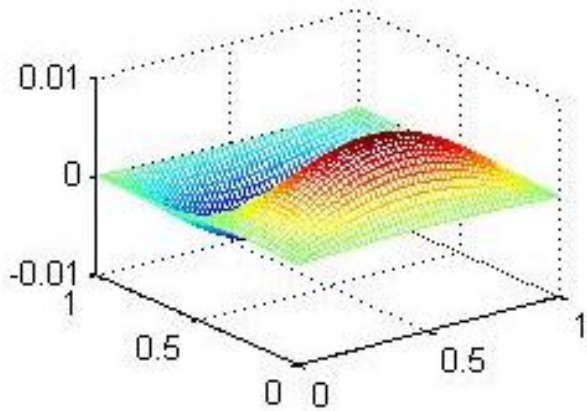


Fig. 3.8: Aproximação do método de Crank-Nicolson

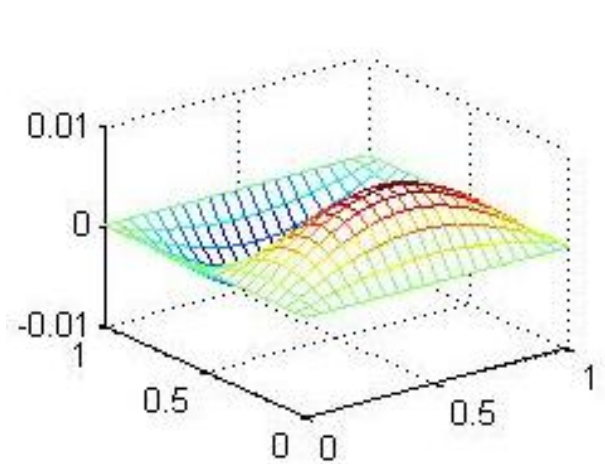


Fig. 3.9: Solução exata

Considerações Finais

Como vimos, muitas situações do mundo real podem apresentar problemas que requeiram soluções e decisões. Seja qual for o caso, a resolução de um problema, em geral quando quantificado, requer uma formulação matemática detalhada. Nessa perspectiva, um conjunto de símbolos e relações matemáticas que procura traduzir, de alguma forma, um fenômeno em questão ou problema de situação real, denomina-se modelo matemático e o processo que envolve a obtenção do modelo chamamos de modelagem matemática.

A utilização de modelos matemáticos no ensino seja na forma de apresentação, seja no processo de criação, é um meio que propicia ao aluno atingir melhores desempenhos, tornando-os um dos principais agentes de mudanças.[2]

Dessa forma, o ensino-aprendizagem da matemática será mais gratificante, uma vez que o aluno passa a aprender o que lhe desperta interesse, tornando-o então co-responsável pelo seu aprendizado. E o professor sai ganhando no sentido de que cada tema escolhido por seus alunos possibilita ampliar seu conhecimento.

Nesse sentido, utilizamos neste trabalho como modelo matemático a equação da condução do calor. Aproximações de volumes finitos foram discutidas para esse modelo.

Deve ser notado que para o desenvolvimento do método dos volumes finitos usou-se uma malha estruturada; a fronteira do domínio coincide com as linhas coordenadas, facilitando o trabalho de discretização e de aplicação das condições de contorno. Todavia, o método é aplicável em malhas não-estruturadas e em domínios com contornos arbitrários.[10]

Por fim, gostaríamos de ressaltar que neste trabalho tentamos mostrar que a matemática pode ser aplicada a várias situações reais, tornando possível aproximação da realidade de nossos alunos que, por muitas vezes, vêem a matemática de forma abstrata e sem interligações

com as demais ciências e com problemas reais que surgem diariamente.

Referências Bibliográficas

- [1] BASSANEZI, R. C., *Ensino Aprendizagem como Modelagem Matemática: Uma nova Abordagem*. São Paulo: Contexto, 2002.
- [2] BIEMBENGUT, M. S., e HEIN, N., *Modelagem Matemática no Ensino*. Contexto, 2007.
- [3] BURDEN, R. L., e FAIRES, J. D., *Análise Numérica*. Pioneira Thomson Learnig, 2003.
- [4] CUNHA, M. C., *Métodos Numéricos*. 2ªedição. Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2003.
- [5] ERTEKIN, T., ABOUR, J. H., e KING, G. R., *Basic Applied Reservoir Simulation*. Society of Petroleum Engineers, 2001.
- [6] FARLOW, S. J., *Partial Differential Equations for Scientists and Engineering*, John Wiley, 1982.
- [7] FORTUNA, A.O., *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. São Paulo-SP: edusp, 2000.
- [8] KREIDER, D. F., KULLER, R.C., *Introdução à Análise Linear*..Vol.3. Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico S.A., 1972.
- [9] LIN, C. C., and SEGEL, L. A., *Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences*. Macmillan Publishing Co, NY, 1974.
- [10] MALISKA, C. R., *Transferencia de calor e mecânica dos fluidos computacionais*. 2.ed. Florianópolis: Livros Técnicos e Científicos , 2004.

- [11] MARDONNY, N. B., *Introdução à modelagem em 3D para reatores airlift empregando o método dos volumes finitos na resolução da fluidodinâmica (CFD)*. Dissertação de mestrado. Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas, 2003.
- [12] NOVAIS, M. A., e CUNHA, M. C., *Métodos Numéricos para Equações Diferenciais*. Vol.4. São Carlos, SP: SBMAC, 2003.
- [13] PATANKAR, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1986.
- [14] SPERÂNDIO, D., e MENDES, J. T., *Cálculo Numérico: características matemáticas e computacionais dos métodos numéricos*. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2003.
- [15] STEWART, J., *Cálculo*. Vol.2, 5.ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learnig, 2006.
- [16] THOMAS, J. W., *Numerical Partial Differential Equation: Finite Difference Methods*. Springer, 1995, seção 4.3.1.

Anexo I

%Explicito.m: Solução Numérica da Equação de Difusão

%1 Entrada de Dados

tf=0.1; %tempo final

M=51; N=51; % número de pontos da malha direção x e y

lx=1; ly=1; %arestas nas direções x e y

%2 cálculo preliminares

hx=lx/(M-1); hy=ly/(N-1); % espaçamento da malha

h=hx*hy; k=hy*hy ; % para simplificar

w=(h*k/(2.5*(h+k))) % passo no tempo

alfa=w/h; lam=w/k; % dados da discretização

nt=floor(tf/w) %número de passos no tempo

for i=1:M;

 x(i)=((2*i-1)/2)*hx; %malha na direção x

end;

for j=1:N;

 y(j)=((2*j-1)/2)*hy ;%malha na direção y

end ;

for i=1:M-1;

 for j=1:N-1;

 ue2(i,j)=exp(-5*pi*pi*tf)*sin(pi*x(i)).*sin(2*pi*y(j)); %Solução Exata

 end

end

```

for i=1:M-1;
    for j=1:N-1;
        u(i,j,1)=sin(pi*x(i)).*sin(2*pi*y(j)); %condição inicial
    end
end;
for z=2:nt;    %volumes de controle internos
    for i=2:M-2 ;
        for j=2:N-2;
            u(i,j,z)=(1-2*(alfa+lam))*u(i,j,z-1)+alfa*(u(i+1,j,z-1)+u(i-1,j,z-1))+
            lam*(u(i,j+1,z-1)+u(i,j-1,z-1));
        end
    end;
    %Volumes de fronteiras
    % Face oeste
    for i=1;
        for j= 2:N-2;
            u(i,j,z)=(1-3*alfa-2*lam)*u(i,j,z-1)+alfa*(u(i+1,j,z-1)+2*0)+
            lam*(u(i,j+1,z-1)+u(i,j-1,z-1));
        end;
    end;
    %Face leste
    for i=M;
        for j= 2:N-2;
            u(i-1,j,z)=(1-3*alfa-2*lam)*u(i-1,j,z-1)+alfa*(2*0+u(i-2,j,z-1))+
            lam*(u(i-1,j+1,z-1)+u(i-1,j-1,z-1));
        end
    end;
    %Face sul
    for i=2:M-2;

```

```

    for j=1;
    u(i,j,z)=(1-2*alfa-3*lam)*u(i,j,z-1)+alfa*(u(i+1,j,z-1)+u(i-1,j,z-1))+
    lam*(u(i,j+1,z-1)+2*0);
    end
end;

    %Face norte
for i=2:M-2;
    for j= N;
    u(i,j-1,z)=(1-2*alfa-3*lam)*u(i,j-1,z-1)+alfa*(u(i+1,j-1,z-1)+u(i-1,j-1,z-1))+
    lam*(2*0+u(i,j-2,z-1));
    end
end;

    %Faces oeste\ sul
for i=1;
    for j=1;
    u(i,j,z)=(1-3*(alfa+lam))*u(i,j,z-1)+ alfa*(u(i+1,j,z-1)+2*0)+
    lam*(u(i,j+1,z-1)+2*0);
    end
end;

    % Faces leste\sul
for i=M;
    for j=1;
    u(i-1,j,z)=(1-3*(alfa+lam))*u(i-1,j,z-1)+alfa*(2*0+u(i-2,j,z-1))+
    lam*(u(i-1,j+1,z-1)+2*0);
    end
end;

    % Faces norte\oeste
for i=1;
    for j=N;

```

```

    u(i,j-1,z)=(1-3*(alfa+lam))*u(i,j-1,z-1)+alfa*(u(i+1,j-1,z-1)+2*0)+
    lam*(2*0+u(i,j-2,z-1));
    end
end;

    %Fases norte\leste
for i=M;
    for j=N;
        u(i-1,j-1,z)=(1-3*(alfa+lam))*u(i-1,j-1,z-1)+alfa*(2*0+u(i-2,j-1,z-1))+
        lam*(2*0+u(i-1,j-2,z-1));
        end
    end;
v=u(:, :, z);
end;
erro=norm(v-ue2)

    %Construção dos gráficos
    [xx,yy]=meshgrid(0:0.05:1,0:0.05:1);
    zz = exp(-5*pi*pi*tf).*sin(pi*xx).*sin(2*pi*yy);
    subplot(2,2,1);
    mesh(xx,yy,zz);
    title('Solução Exata')
    subplot(2,2,2);
    mesh(x(1:M-1),y(1:N-1), u(:, :, nt)');
    title('Aproximacao do Método Explícito ')
    subplot (2,2,3);
    mesh(x(1:M-1),y(1:N-1),(v - ue2)');
    title('Aproximacao - Analitica')

*****

    % FIM

*****

```

Anexo II

% Implicito.m: Solução numérica da equação de difusão

%1 Entrada de Dados

tf=0.1; %tempo final

M=51; N=51; % número de pontos da malha direção x e y

lx=1; ly=1; %arestas nas direções x e y

%2 cálculo preliminares

hx=lx/(M-1); hy=ly/(N-1); % espaçamento da malha

h=hx*hx; k=hy*hy ; % para simplificar

w=0.005 % passo no tempo

alfa=w/h; lam=w/k; % dados da discretização

nt=floor(tf/w) %numero de passos no tempo

for i=1:M;

 x(i)=((2*i-1)/2)*hx; %malha na direção x

end;

for j=1:N;

 y(j)=((2*j-1)/2)*hy ; %malha na direção y

end ;

ue(i,j)=exp(-5*pi*pi*tf).*sin(pi*x(i)).*sin(2*pi*y(j)); % solução analítica

for i=1:M-1;

```

    for j=1:N-1;
        u(i,j)=sin(pi*x(i)).*sin(2*pi*y(j)); %condição inicial
    end
end;

%Transforma a matriz de cond inicial em um vetor
for i=1:M-1;
    for j=1:N-1;
        T((i-1)*(N-1)+j,1)=u(i,j);
    end;
end;

% monta a matriz
dim=(M-1)*(N-1);

%diagonal superior afastada
for i=1:(M-2)*(N-1);
    A(i,i+N-1)=-lam;
end

%diagonal inferior afastada
for i=N:dim;
    A(i,i-N+1)=-lam;
end

%diagonal principal
for i=1:1;
    A(i,i)=1+3*(alfa+lam);
    A(i+M-2,i+M-2)=1+3*(alfa+lam);
end

for i=M-1:M-1;
    A(i*(N-1),i*(N-1))=1+3*(alfa+lam);
    A(i*(N-2)+1,i*(N-2)+1)=1+3*(alfa+lam);
end
end

```

```

for i=2:M-2;
    A(i,i)=1+2*alfa+3*lam;
    A(i+(M-1)*(N-2),i+(M-1)*(N-2))=1+2*alfa+3*lam;
end
for i=2:M-2;
    for j=1:(N-3);
        A(i+j*(M-1),i+j*(M-1))=1+2*(alfa+lam);
    end
end
for i=1:1;
    for j=1:(N-3);
        A(i+j*(M-1),i+j*(M-1))=1+3*alfa+2*lam;
    end
end
for i=1:(N-1)*(M-1)-1;
    A(i,i+1)=-alfa;
    A(i+1,i)=-alfa;
end
for i=1:N-2;
    A(i*(M-1),i*(M-1)+1)=0;
    A(i*(M-1)+1,i*(M-1))=0;
end
for i=M-1:M-1;
    for j=1:(N-3);
        A(i*(j+1),i*(j+1))=1+3*alfa+2*lam;
    end
end
%faz o loop no tempo
for i=1:nt;

```

```

T(:,i+1)=A\T(:,i);
end
%Transforma o vetor solucao em uma matriz
for i=1:M-1;
    for j=1:N-1;
        sol(i,j)= T((i-1)*(N-1)+j,nt);
    end
end
erro= norm(sol-ue2)
    % traçando graficos
        subplot(2,2,2);
        mesh(x(1:M-1),y(1:N-1), sol');
        title('Aproximacao do Método Implícito ')
        subplot (2,2,3);
        mesh(x(1:M-1),y(1:N-1),(sol - ue2)');
        title('Aproximacao - Analitica')
*****
                        FIM
*****

```

Anexo III

%Crank.m: Solução Numérica da Equação de Difusão

%1 Entrada de Dados

tf=0.1; %tempo final

M=51; N=51; % número de pontos da malha direção x e y

lx=1; ly=1; %arestas nas direções x e y

%2 cálculo preliminares

hx=lx/(M-1); hy=ly/(N-1); % espaçamento da malha

h=hx*hy; k=h/hx; % para simplificar

w=0.005 % passo no tempo

alfa=w/h; lam=w/k; % dados da discretização

nt=floor(tf/w) %numero de passos no tempo

for i=1:M;

 x(i)=((2*i-1)/2)*hx; %malha na direção x

end;

for j=1:N;

 y(j)=((2*j-1)/2)*hy ; %malha na direção y

end ;

for i=1:M-1;

 for j=1:N-1; %solução analítica

 ue2(i,j)=exp(-5*pi*pi*tf)*sin(pi*x(i)).*sin(2*pi*y(j));

 end

```

end
for i=1:M-1;
    for j=1:N-1;
        u(i,j)=sin(pi*x(i)).*sin(2*pi*y(j)); %condição inicial
    end
end;

%Transforma a matriz de cond inicial em um vetor
for i=1:M-1;
    for j=1:N-1;
        T((i-1)*(N-1)+j,1)=u(i,j);
    end
end

% monta a matriz em T(n+1)
dim=(M-1)*(N-1);

%diagonal superior afastada
for i=1:(M-2)*(N-1);
    A(i,i+N-1)=-lam/2;
end

%diagonal inferior afastada
for i=N:dim;
    A(i,i-N+1)=-lam/2;
end

%diagonal principal
for i=1:1;
    A(i,i)=1+(3/2)*(alfa+lam);A(i+M-2,i+M-2)=1+(3/2)*(alfa+lam);
end

for i=M-1:M-1;
    A(i*(N-1),i*(N-1))=1+(3/2)*(alfa+lam);
    A(i*(N-2)+1,i*(N-2)+1)=1+(3/2)*(alfa+lam);

```

```

end
for i=2:M-2;
    A(i,i)=1+alfa+(3/2)*lam;
    A(i+(M-1)*(N-2),i+(M-1)*(N-2))=1+alfa+(3/2)*lam;
end
for i=2:M-2;
    for j=1:(N-3);
        A(i+j*(M-1),i+j*(M-1))=1+(alfa+lam);
    end
end
for i=1:1;
    for j=1:(N-3);
        A(i+j*(M-1),i+j*(M-1))=1+(3/2)*alfa+lam;
    end
end
for i=1:(N-1)*(M-1)-1;
    A(i,i+1)=-alfa/2; (i+1,i)=-alfa/2;
end
for i=1:N-2;
    A(i*(M-1),i*(M-1)+1)=0; A(i*(M-1)+1,i*(M-1))=0;
end
for i=M-1:M-1;
    for j=1:(N-3);
        A(i*(j+1),i*(j+1))=1+(3/2)*alfa+lam;
    end
end
dim=(M-1)*(N-1); % monta a matriz em T(n)
for i=1:(M-2)*(N-1);
    C(i,i+N-1)=lam/2; %diagonal superior afastada

```

```

end
for i=N:dim;
    C(i,i-N+1)=lam/2; %diagonal inferior afastada
end
%diagonal principal
for i=1:1;
    C(i,i)=1-(3/2)*(alfa+lam);
    C(i+M-2,i+M-2)=1-(3/2)*(alfa+lam);
end
for i=M-1:M-1;
    c(i*(N-1),i*(N-1))=1-(3/2)*(alfa+lam);
    C(i*(N-2)+1,i*(N-2)+1)=1-(3/2)*(alfa+lam);
end
for i=2:M-2;
    C(i,i)=1-alfa-(3/2)*lam;
    C(i+(M-1)*(N-2),i+(M-1)*(N-2))=1-alfa-(3/2)*lam;
end
for i=2:M-2;
    for j=1:(N-3);
        C(i+j*(M-1),i+j*(M-1))=1-(alfa+lam);
    end
end
for i=1:1;
    for j=1:(N-3);
        C(i+j*(M-1),i+j*(M-1))=1-(3/2)*alfa-lam;
    end
end
for i=1:(N-1)*(M-1)-1;
    C(i,i+1)=alfa/2; C(i+1,i)=alfa/2;

```

```

end
for i=1:N-2;
    C(i*(M-1),i*(M-1)+1)=0; C(i*(M-1)+1,i*(M-1))=0;
end
for i=M-1:M-1;
    for j=1:(N-3);
        C(i*(j+1),i*(j+1))=1-(3/2)*alfa-lam;
    end
end
for i=1:nt; %faz o loop no tempo
T(:,i+1)=A\ (C*T(:,i));
end
for i=1:M-1;
    for j=1:N-1; %Transforma o vetor solucao em uma matriz
        sol(i,j)= T((i-1)*(N-1)+j,nt);
    end
end
erro= norm(sol-ue2)
% traçando graficos
subplot(2,2,2);
mesh(x(1:M-1),y(1:N-1), sol');
title('Aproximacao do Método Crank-Nicolson ')
subplot (2,2,3);
mesh(x(1:M-1),y(1:N-1),(sol - ue2)');
title('Aproximacao - Analitica')
*****
FIM
*****

```