

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

**SIMULAÇÕES NUMÉRICAS PARA A  
EQUAÇÃO CONVECCÃO-DIFUSÃO  
UNI-DIMENSIONAL**

Por: *CILON JOSÉ KIPPER*

Orientador: Prof. Dr. Júlio César Ruiz Claeysen

Dissertação submetida ao Curso de Pós-Graduação em Matemática da UFRGS como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre.

Porto Alegre, novembro de 1994.

#### Agradeço

ao professor Dr. Julio Cesar Ruiz Claeysen, pela orientação segura e incansável;  
à Universidade de Santa Cruz do Sul, especialmente aos professores e aos funcionários do Departamento de Matemática e Informática, pelo incentivo e apoio constantes.

## RESUMO

O objetivo deste trabalho é apresentar alguns métodos numéricos para resolver a equação da convecção-difusão, em um espaço uni-dimensional. Demonstrada a derivação desta equação, parte-se para a sua adaptação ao espaço uni-dimensional. A seguir, é considerado o fenômeno da difusão, isoladamente. Num segundo momento, é feito um estudo sobre o fenômeno da convecção, isoladamente. Posteriormente, considera-se o caso geral, em que os fenômenos da convecção e da difusão ocorrem simultaneamente. A importante questão da estabilidade em soluções numéricas também é analisada. Ao final de cada uma das três situações mencionadas, são apresentados resultados práticos dos programas computacionais aplicados a elas.

## ABSTRACT

The purpose of this work is show some numerical methods to solve diffusion-convection equation, in one dimension. Showed the deduction of this equation, discribing the problem, we present its adaptation to one dimension. After this, several steps are fulfill: first, the diffusion phenomenon is considered isolated; second, the convection phenomenon is studied isolated; third, the general case, where convection and diffusion phenomena happened together. The major question about stability is also analysed. At the end of the three above situations, we give some pratical results of computational programs applied to them.

## ÍNDICE

I - INTRODUÇÃO .....	06
II - DERIVAÇÃO DA EQUAÇÃO DO CALOR.....	07
1 Condução do calor em um sólido isotrópico.....	07
2 Condução do calor em fluidos.....	11
III - EQUAÇÃO DO CALOR EM UM ESPAÇO UNI-DIMENSIONAL.....	13
1 Equação convecção-difusão.....	13
2 Método semi-discreto.....	14
3 Equação do calor sem convecção .....	20
4 Método explícito.....	22
5 Método implícito.....	32
6 Método de Crank-Nicolson.....	35
IV - A POLUIÇÃO DO AR.....	38
1 Modelo matemático do problema.....	39
2 A equação da convecção .....	40
3 Método numérico .....	44
4 A equação geral da convecção.....	49
5 A equação convecção-difusão.....	51
6 Método numérico.....	51
7 Critério de von Neumann .....	54
8 Estabilidade, consistência e convergência.....	56
ANEXO 1: Determinação dos autovalores e autovetores associados à matriz tridiagonal descrita no método explícito, aplicada à equação da difusão.....	59
ANEXO 2: Programas computacionais.....	62
BIBLIOGRAFIA .....	69

*"A Matemática é a mais  
alta das ciências, o dom  
mais alto que os deuses  
deram aos homens."*

*Arquimedes  
287 a.C - 212 a.C*

## I - INTRODUÇÃO

O estudo e a busca da equação da difusão (considerando ou não o fenômeno da convecção) tem sido objeto de físicos e matemáticos, desde longo tempo.

A meta deste trabalho é o de apresentar simulações numéricas para as diversas formas daquela equação, no espaço uni-dimensional.

No Capítulo II, é apresentado a derivação da equação do calor. Num primeiro instante, é considerado um corpo sólido isotrópico, onde só há difusão do calor; e num segundo momento, é considerado um corpo ideal, só com convecção de calor. A seguir, é considerado o caso geral onde ocorrem os dois fenômenos simultaneamente, como acontece por exemplo com os fluidos.

No Capítulo III faz-se uma adaptação da equação geral, convecção-difusão, para o espaço uni-dimensional. É apresentado um método numérico (semi-discreto) para a solução desta equação, bem como os resultados computacionais obtidos com o método descrito. Mais tarde, considera-se um caso particular da equação do calor, sem o fenômeno da convecção; três métodos numéricos para sua solução são apresentados, bem como resultados computacionais obtidos.

Outra situação, onde ocorrem os fenômenos da difusão e da convecção, é o que diz respeito à poluição do ar. Esta questão é comentada, no Capítulo IV, a partir de uma história hipotética, mas muito próxima da realidade em vários pontos do planeta. Dela, parte-se para uma equação unicamente da convecção para, a seguir, entrar-se com a difusão. Dois métodos numéricos foram desenvolvidos, um para cada consideração; utilizando-se o esquema das diferenças finitas, foram elaborados dois programas computacionais, com auxílio dos quais

são apresentadas representações gráficas. Também é feita uma análise da estabilidade das soluções numéricas, utilizando-se o critério de von Neumann.

Ao final desta monografia, em um anexo, são apresentados os programas computacionais, elaborados com o aplicativo MATLAB, que proporcionaram os resultados apresentados ao longo deste trabalho.

## II - DERIVAÇÃO DA EQUAÇÃO DO CALOR

Nesta secção, considera-se a seguinte notação:

$\rho$  = densidade de um corpo (sólido ou fluido).

$c$  = calor específico de um corpo (sólido ou fluido).

$k$  = condutividade térmica de um corpo (sólido ou fluido).

$\Omega$  = espaço real a três dimensões  $(x,y,z)$ .

$q = q(x,y,z,t)$  = uma função representando a velocidade de um fluido no domínio  $\Omega$ .

$f = f(x,y,z)$  = fonte (externa) de calor.

$u = u(x,y,z,t)$  = temperatura em cada posição  $(x,y,z)$  do espaço e para cada tempo  $t$  subsequente.

### 1 Condução do calor em um sólido isotrópico

Suponhamos que  $\Omega$  representa um corpo sólido isotrópico (isto é, onde não se verifica o fenômeno da convecção). Suponhamos, também, que neste corpo haja fluxo de calor; este é descrito em cada ponto do sólido como um vetor de fluxo  $\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3)^T$ , (cuja direção coincide com a do fluxo e cuja magnitude é a taxa de calor), passando através de um elemento de superfície, normal a ele. Assim  $J_1$  tem uma unidade de calor por uma unidade de tempo, por uma unidade de área. Assume-se, também, que o fluxo de calor não tem uma direção preferencial. Também é natural assumir que a direção do vetor fluxo coincidirá com a direção de máxima temperatura  $u(x,y,z)$  no ponto. Tais condições são denominadas “hipóteses fundamentais da condução do calor”. Em consequência delas, se conclui que:

$$\mathbf{J} = -k(u_x, u_y, u_z)^T = -k\nabla u, \quad (2.1.1)$$

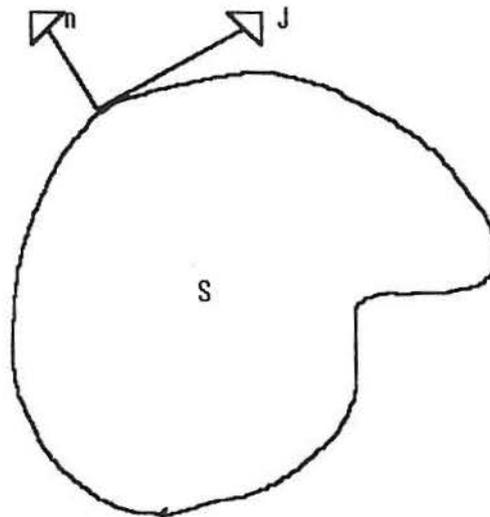
onde a constante de proporcionalidade  $k$  é chamada de condutividade térmica do sólido. Dita condutividade  $k$  possui uma unidade de calor por uma unidade de tempo, por uma unidade de comprimento, por uma unidade de temperatura. Se  $k$  possuir um valor alto, diz-se que o sólido é um bom condutor de calor (o que ocorre com os metais, em geral). Os maus

condutores de calor (ar, água, madeira, concreto) que possuem baixa condutividade térmica ( $k < 1$ ) são chamados de isolantes térmicos.

A quantidade de calor por unidade de tempo fluindo dentro de um volume elementar  $V$ , com superfície  $S$  é dado por

$$I_1 = \int_S \vec{J} \cdot (-\vec{n}) ds = \int k \cdot \nabla u \cdot \vec{n} ds \quad (2.1.2)$$

onde  $\vec{n}$  é um vetor exterior e normal à superfície  $S$ .



No caso de sólidos isotrópicos (ou seja, com propriedades constantes),  $k$  não depende de  $\vec{n}$ . Usando o teorema da divergência, obtém-se:

$$I_1 = \int_V \nabla \cdot k \nabla u dV \quad (2.1.3)$$

Também, se a razão instantânea de geração volumétrica de calor no ponto  $(x,y,z) \in V$  é dado por  $f(x,y,z)$ , a quantidade de calor produzida em  $V$ , por unidade de tempo é

$$I_2 = \int_V f dV \quad (2.1.4)$$

O calor específico  $c$  de um sólido é definido como sendo a quantidade de calor requerida para elevar de 1 grau a temperatura de uma unidade elementar de massa. O calor específico tem uma unidade de calor, por uma unidade de massa, por uma unidade de temperatura.

Se  $\Delta u$  expressa a mudança de temperatura que ocorre numa massa elementar  $m$ , num intervalo de tempo  $\Delta t$ , a correspondente quantidade de calor adicionada à massa deve ser  $c.m.\Delta u$ . Particularmente, se  $m$  é a massa de  $V$ , esta quantidade de calor é:

$$I_3 = \int_V \rho c \Delta u dV \quad (2.1.5)$$

onde  $\rho$  é a densidade do sólido, com unidade igual a uma unidade de massa por uma unidade de comprimento ao cubo, por exemplo:  $\text{Kg/m}^3$ .

Uma outra expressão para  $I_3$  é:

$$I_3 = \Delta t (I_1 + I_2). \text{ Daí segue que: } \int_V \rho c \Delta u dV = \Delta t \left[ \int_V (\nabla \cdot k \nabla u + f) dV \right]$$

$$\int_V \left( \rho c \frac{\Delta u}{\Delta t} - \nabla \cdot k \nabla u - f \right) dV = 0 \quad (2.1.6)$$

e, como  $\Delta t$  e  $V$  são arbitrários, segue-se que:

$$\rho c u_t - \nabla \cdot k \nabla u - f = 0 \quad (2.1.7)$$

ou

$$u_t = \nabla \cdot \frac{k}{\rho c} \nabla u + \frac{f}{\rho c} \quad (2.1.7')$$

Se  $\rho$  e  $c$  são constantes, faz-se  $k/\rho c = K$  (difusividade térmica), seguindo-se então

$$u_t - \nabla \cdot K \nabla u - f/\rho c = 0 \quad (2.1.8)$$

Se as funções acima não dependem de  $t$ , a equação (2.1.7) toma a forma elíptica:

$$-\nabla \cdot \nabla u = f \quad (2.1.9)$$

(denominada equação da condução de calor em estado estacionário).

Se  $k$  é uma constante, a equação (2.1.7) leva o nome de equação de Poisson e se, ainda,  $f=0$ , obtém-se a equação de Laplace  $\nabla^2 u = 0$  (2.1.10)

As apropriadas condições auxiliares para a equação da condução de calor, obtida por (2.1.7), serão do tipo condições iniciais, condições de contorno e condições de interfaces (estas surgem quando o sólido for constituído de dois materiais diferentes).

#### a) Condições iniciais

A equação (2.1.7) descreve a evolução da temperatura, ao longo do tempo, como uma função da posição. Inicializa-se o processo, especificando uma função  $u_0$ , denominada condição inicial, tal que:

$$u(x,y,z) = u_0(x,y,z) \quad (2.1.11)$$

b) Condições de contorno

Considerando que a equação (2.1.7) é válida para todo  $t > 0$  e  $(x,y,z) \in \Omega$ , um significado razoável para a situação de contorno  $\partial\Omega$  de  $\Omega$  é a seguinte: faz-se  $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 \cup \partial\Omega_3$ , onde alguns, mas não todos dos conjuntos disjuntos  $\partial\Omega_i$  podem ser vazios. Então é possível considerar três tipos de condições de contorno:

b.1 Especificação de temperatura (ou condição de Dirichlet). Neste caso:

$$u(x,y,z,t) = g(x,y,z) \quad (2.1.12)$$

onde  $(x,y,z) \in \partial\Omega_1$ , com  $t \geq 0$ , na qual  $g$  é alguma função apropriada.

b.2 Contorno isolado (ou condição de Neumann). Em tal situação:

$$-\nabla u \cdot \vec{n} = 0 \quad (2.1.13)$$

onde  $\vec{n}$  é um vetor unitário normal exterior à  $\partial\Omega_2$ ,  $(x,y,z) \in \partial\Omega_2$ . Esta condição informa que o fluxo térmico através de  $\partial\Omega_2$  é zero.

b.3 Radiação ou condição variada.

$$\text{Neste caso, } -k\nabla u \cdot \vec{n} = h(u - u_s) \quad (2.1.14)$$

onde  $(x,y,z) \in \partial\Omega_3$ , com  $t \geq 0$ , na qual  $\vec{n}$  é um vetor unitário normal à  $\partial\Omega_3$ , e dela para fora,  $h$  é o coeficiente da transferência de calor e  $u_s$  é a temperatura do meio circundante. Esta condição assegura que o fluxo térmico através de  $\partial\Omega_3$  é proporcional à diferença entre as temperaturas do meio circundante e da superfície.

É importante ainda lembrar que existem outras condições de contorno que são usadas, como, por exemplo, é possível fazer-se a função  $g$  depender do tempo  $t$ .

c) Condições de entre-faces (divisas)

Se  $\Omega$  é composto por mais do que um material, então ao longo das entre-faces entre dois materiais, o fluxo deve ser contínuo, ou seja:

$$k_1(\nabla u_1 \cdot \vec{n}) = k_2(\nabla u_2 \cdot \vec{n}) \quad (2.1.15)$$

onde  $k_i$  e  $u_i$  representam, respectivamente a condutividade térmica e a temperatura do material  $i = 1$  a  $2$  e  $\vec{n}$  é o vetor normal à entre-face. Esta condição é imposta pela equação (2.1.7) na qual o fluxo  $J = k\nabla u$  é assumido como diferenciável.

É importante observar que a equação (2.1.9) não encerra somente as aplicações de condução de calor, mas também se aplica em descrições de difusão de neutrons, fluxo de fluidos e outros.

## 2 Condução de Calor em Fluidos

No caso em que  $\Omega$  não é um corpo sólido, mas um meio líquido ou gasoso, há que se considerar a velocidade deste meio. Isto é devido ao fato de que os líquidos se movem; não são estáticos como os sólidos. Então, além da difusão do calor, também ocorre o transporte deste, mediante um processo conhecido como de convecção.

Consideremos somente a existência da convecção (sem a difusão). Seja  $u_0(x,y,z)$  o valor do gradiente de temperatura, no instante inicial ( $t=0$ ) de um fluido  $\Omega$  (com densidade  $\rho$  e calor específico  $c$ ). Sendo a velocidade do fluido  $\Omega$  uma função  $\vec{q} = (q_1, q_2, q_3)$  do espaço, tem-se a seguinte equação para o vetor gradiente de temperatura  $u(x,y,z,t)$ , aplicado a  $\Omega$ :

$$\begin{aligned} \rho c u(x,y,z,t) &= \rho c u_0[(x,y,z) - \vec{q}t] \\ &= \rho c u_0[(x,y,z) - (q_1t, q_2t, q_3t)] \\ &= \rho c u_0(x - q_1t, y - q_2t, z - q_3t) \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Derivando parcialmente (2.2.1), em relação a  $x$ ,  $y$ ,  $z$  e  $t$ , obtém-se:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u_0}{\partial (x - q_1t)} \quad (2.2.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u_0}{\partial (y - q_2t)} \quad (2.2.3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial u_0}{\partial (z - q_3t)} \quad (2.2.4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u_0}{\partial t}(x - q_1t, y - q_2t, z - q_3t) = \frac{\partial u_0}{\partial (x - q_1t)}(-q_1) + \frac{\partial u_0}{\partial (y - q_2t)}(-q_2) + \frac{\partial u_0}{\partial (z - q_3t)}(-q_3) \quad (2.2.5)$$

Substituindo (2.2.2), (2.2.3) e (2.2.4) em (2.2.5):

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial x}(-q_1) + \frac{\partial u}{\partial y}(-q_2) + \frac{\partial u}{\partial z}(-q_3)$$

$$u_t = (-q_1, -q_2, -q_3) \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

$$u_t = -\vec{q} \cdot \nabla u \quad (2.2.6)$$

equação que retrata o fenômeno da convecção de calor em um corpo  $\Omega$  ( fluido ), sem considerar o efeito da difusão.

Vimos em (2.1.7) que a variação da temperatura  $u$  em relação ao tempo,  $u_t$ , é dada por

$$u_t = \nabla \cdot \frac{k}{\rho c} \nabla u + \frac{f}{\rho c} \quad (2.1.7')$$

quando se considera somente o fenômeno da difusão (sem o efeito da convecção) e pela

$$u_t = -\vec{q} \cdot \nabla u \quad (2.2.6)$$

quando se considera somente o fenômeno da convecção sem o efeito da difusão.

Como os dois fenômenos são simultâneos, isto é convecção com difusão, segue que a equação que rege o caso geral, é:

$$u_t = \nabla \cdot \frac{k}{\rho c} \nabla u - \vec{q} \cdot \nabla u + \frac{f}{\rho c} \quad (2.2.7)$$

### III - EQUAÇÃO DO CALOR EM UM ESPAÇO UNI-DIMENSIONAL

#### 1 Problema que considera simultaneamente os fenômenos da difusão e da convecção, sem fonte externa de calor

Consideramos a equação (2.2.7)

$$u_t = \nabla \cdot \frac{k}{\rho c} \nabla u - \vec{q} \cdot \nabla u + \frac{1}{\rho c} f$$

isto é:

$$u_t = \frac{1}{\rho c} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) \left[ k \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) (u) \right] - \vec{q} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) (u) + \frac{f}{\rho c}$$

Suponha a inexistência de fonte externa de calor (isto é  $f=0$ ) e considere o problema unidimensional, (ou seja, fluxo somente na direção horizontal):

$$u_t = \frac{1}{\rho c} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \left[ k \frac{\partial u}{\partial x} \right] - \vec{q} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.1.1)$$

ou

$$u_t = \frac{1}{\rho c} \frac{\partial k}{\partial x} + \frac{k}{\rho c} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \vec{q} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.1.2)$$

Assumindo que a condutividade térmica  $k$  é constante, segue que  $\frac{\partial k}{\partial x} = 0$  e, portanto

$$u_t = \frac{k}{\rho c} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \vec{q} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.1.3)$$

Considerando a difusividade térmica do fluido  $\frac{k}{\rho c} = K$ , se obtém:

$$u_t = K u_{xx} - \vec{q} u_x \quad (3.1.4)$$

onde  $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$  e  $u_{xx} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

Esta equação diferencial parcial de 2ª ordem e do 1º grau, sujeita à condição inicial

$$u(x, 0) = 0, \quad \text{com } 0 \leq x \leq 1$$

e às condições de contorno

$$u(0,t) = u_0(t) \quad \text{e} \quad u(1,t) = u_1(t), \quad \text{com } t > 0$$

rege o fenômeno físico da temperatura de um fluido movendo-se a uma velocidade  $q$ , ao longo de um delgado tubo, ocupando o intervalo  $0 \leq x \leq 1$ . A temperatura é forçada a ser igual a  $u_0$  na entrada (isto é quando  $x = 0$ ), e  $u_1$  na saída (quando  $x = 1$ ). O fluxo está na temperatura zero, inicialmente (quando  $t = 0$ ).

## 2 Método Semi-discreto (ou Método de Colocação de Galerkin)

Consideremos a equação (3.1.4) (com  $-q=c$  e  $K=w$ ) que rege o processo de difusão, conjuntamente com convecção, de uma substância fluida, sem fonte externa de calor:

$$u_t = cu_x + wu_{xx} \quad 0 \leq x \leq 1 \text{ e } t > 0 \quad (3.2.1)$$

sujeita às condições de contorno  $u(t, 0) = u(t, 1) = 0$  e à condição inicial  $u(0, x) = f(x)$ .

Para cada  $i = 1, 2, \dots, n$ , seja  $\phi_i(x)$  que denote uma função base que satisfaz às condições iniciais,  $\phi_i(0) = \phi_i(1) = 0$ . O que se pretende é encontrar uma aproximação para a equação de difusão-convecção. Expressemos dita aproximação por:

$$u(t, x) = \sum \alpha_i(t) \phi_i(x) \quad (3.2.2)$$

com coeficientes  $\alpha_i(t)$  a determinar. Para tal, escolhemos  $n$  pontos na variável  $x$ , entre 0 e 1:  $0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n < 1$  (não necessariamente em igualdade de espaçamento), e exigimos que a solução aproximada (3.2.2), satisfaça (3.2.1) nestes pontos, isto é, se

$$\hat{u}_t(t, x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i'(t) \phi_i(x), \quad \hat{u}_x(t, x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(t) \phi_i'(x)$$

e

$$\hat{u}_{xx}(t, x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(t) \phi_i''(x),$$

vamos requerer que

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i'(t) \phi_i(x_j) = c \sum_{i=1}^n \alpha_i(t) \phi_i'(x_j) + w \sum_{i=1}^n \alpha_i(t) \phi_i''(x_j), \quad (3.2.3)$$

com  $j = 1, 2, \dots, n$ . Se nós introduzirmos as matrizes quadradas de ordem "n":

$$A(i,j) = (\phi_i(x_j)), \quad B(i,j) = (\phi_i'(x_j)) \text{ e } D(i,j) = (\phi_i''(x_j)), \quad (3.2.3')$$

bem como os  $n$  vetores  $\alpha_1(t), \alpha_2(t), \dots, \alpha_n(t)$  representados na matriz

$$\alpha(t) = (\alpha_1(t), \alpha_2(t), \dots, \alpha_n(t)),$$

então a equação (3.2.3) pode ser reescrita como

$$A \alpha'(t) = cB \alpha(t) + wD \alpha(t) \quad (3.2.4)$$

onde

$$\alpha'(t) = (\alpha'_1(t), \alpha'_2(t), \dots, \alpha'_n(t))$$

Agora evidenciando  $\alpha(t)$ , no 2º membro de (3.2.4), e fazendo  $E = cB + wD$ ,

obtemos

$$A \alpha'(t) = E \alpha(t) \quad (3.2.5)$$

Se assumirmos que a matriz  $A$  é não-singular:

$$\alpha'(t) = A^{-1} E \alpha(t) \quad (3.2.6)$$

A equação (3.2.6) gera um sistema de “n” equações diferenciais ordinárias relativamente aos coeficientes  $\alpha_j$ . Para resolver tal sistema, necessitamos uma condição inicial, que será dada pelo fato que a solução aproximada  $\hat{u}$  deve satisfazer a condição inicial  $u(0, x) = f(x)$  nos pontos  $x : x_1, \dots, x_n$ ; assim:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i(0) \phi_i(x_j) = f(x_j), \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, n$$

ou

$$A \alpha(0) = f, \quad \text{onde } f = (f(x_1), \dots, f(x_n)) \quad (3.2.7)$$

Assumindo que a matriz  $A$  é não-singular, temos

$$\alpha(0) = A^{-1} f = T \quad (3.2.8)$$

Em consequência a questão a resolver é solucionar o sistema de equações diferenciais ordinárias (3.2.6) com a condição inicial (3.2.8). Este método é chamado semi-discreto porque nós efetuamos uma discretização somente no espaço, utilizando as funções base e pontos de rede  $x$ , enquanto consideramos o tempo como uma variável contínua. Na prática, entretanto, o sistema de equações diferenciais (3.2.6) será resolvido numericamente. Assim a discretização do tempo é introduzida no processo, o que faz com que o termo semi-discreto seja irrelevante.

Para resolver a questão, consideraremos a aplicação da regra trapezoidal à equação (3.2.5), e usando  $\Delta t = h$ :

$$\alpha^{k+1} = \alpha^k + h/2 (A^{-1} E \alpha^{k+1} + A^{-1} E \alpha^k)$$

ou se multiplicarmos esta equação pela matriz  $A$ :

$$A \alpha^{k+1} = A \alpha^k + hE \alpha^{k+1} / 2 + hE \alpha^k / 2$$

e daí segue-se que  $(A - hE/2) \alpha^{k+1} = (A + hE/2) \alpha^k$ . Fazendo  $M = A - hE/2$ , e  $N = A + hE/2$  e, se considerarmos que a matriz  $M$  é não-singular, obtemos  $\alpha^{k+1} = M^{-1} N \alpha^k$ . Agora, definindo  $Y = M^{-1} N$  chegamos à  $\alpha^{k+1} = Y \alpha^k$ , com  $k = 0, 1, \dots, m$

Finalmente, a solução da equação (3.2.1), mediante o uso do esquema proposto em (3.2.2) será obtida, resolvendo-se o sistema:

$$\alpha(0) = T$$

$$\alpha(k) = Y \alpha(k-1)$$

Dita solução fornecerá os valores dos coeficientes  $\alpha_i$ , os quais multiplicados pela matriz  $A(i,j)$  nos dará a solução aproximada  $\hat{u} = A(i,j) \alpha_i$

Uma solução que pode ser obtida para a equação geral, convecção-difusão, utilizando-se o método semi-discreto, é usar senos como função base, a qual atende as condições de contorno  $u(t,0) = u(t,1) = 0$ . Assim, as matrizes em (3.2.3) serão:

$$A = \phi_i(x_j) = \text{sen}(i \pi x_j)$$

$$B = \phi_i'(x_j) = i \pi \cos(i \pi x_j)$$

$$D = \phi_i''(x_j) = -(i \pi)^2 \text{sen}(i \pi x_j)$$

Na página seguinte, é mostrado um resultado de distribuição da temperatura, usando-se o função seno como base.

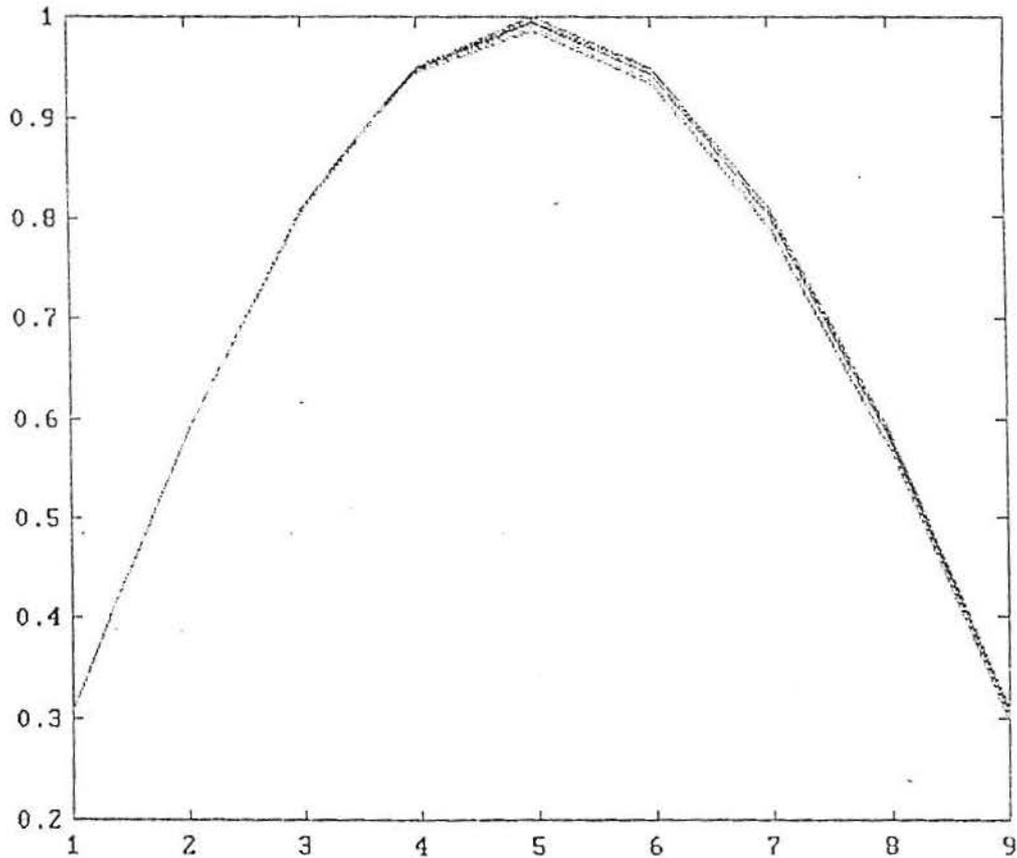


Figura 1. Resultado para a distribuição da temperatura  $u$ , usando-se o método semi-discreto e tendo a função seno como base. Valores usados:  $x_0 = 0$ ,  $c = w = 1$ , passo  $h = 0,00001$ ,  $n = 9$ ,  $m = 6$  e  $f(x) = \text{sen}(\pi x)$ .

Outra solução para a mesma equação geral, convecção-difusão, usando-se o método semi-discreto, é obtida utilizando-se como função base o polinômio  $\phi_i(x) = x^i(1-x)$ , a qual também atende as condições de contorno  $u(t,0)=u(t,1)=0$ . Deste modo, as matrizes em (3.2.3') serão:

$$\begin{aligned}
 A &= \phi_i(x_j) = x^i(1-x_j) \\
 B &= \phi_i'(x_j) = [i - (i+1)x_j] [x_j^{i-1}] \\
 D &= \phi_i''(x_j) = i[i-1 - (i+1)x_j] [x_j^{i-2}]
 \end{aligned}$$

A seguir é mostrado um resultado para distribuição da temperatura, usando-se polinômios como função base.

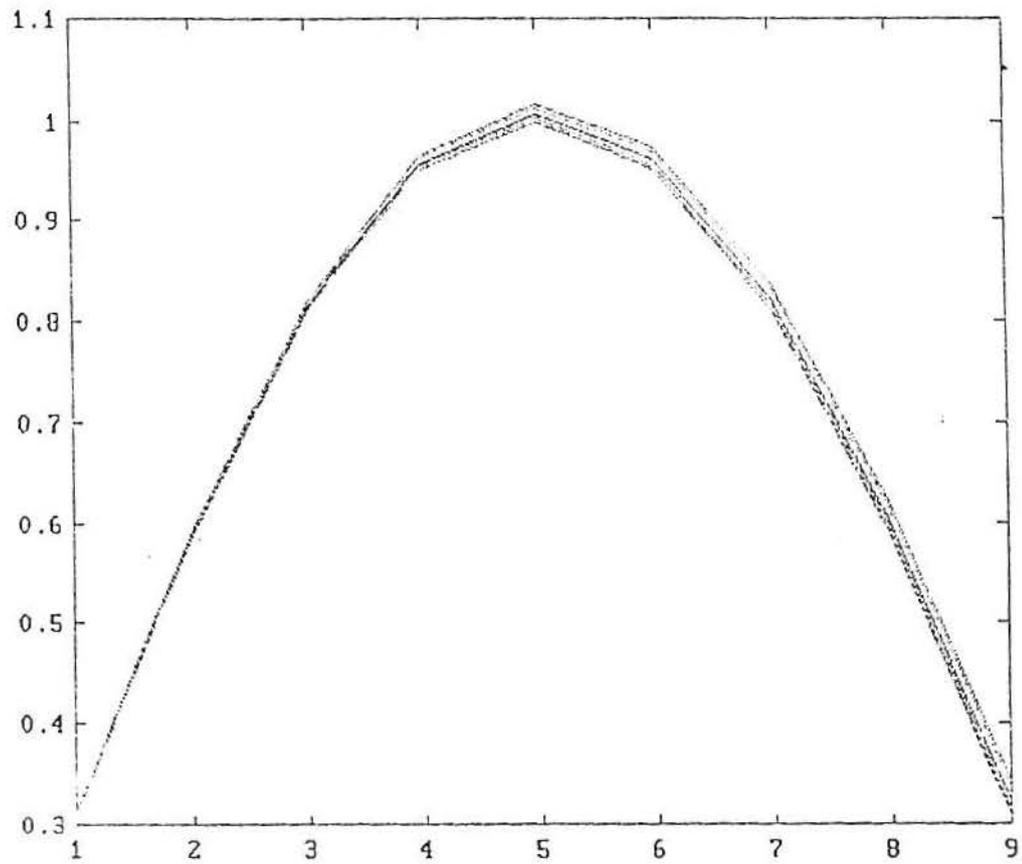


Figura 2. Resultado para a distribuição da temperatura  $u$ , usando-se o método semi-discreto e tendo polinômios como função base. Valores usados:  $x_0 = 0$ ,  $c = w = 1$ , passo  $h = 0,00001$ ,  $n = 9$ ,  $m = 6$  e  $f(x) = \text{sen}(\pi x)$ .

### 3 Equação do calor sem convecção

(Ou Difusão do calor em um espaço uni-dimensional)

Seja uma haste metálica, de comprimento razoável  $L$ , com um diâmetro bem menor (digamos  $L/100$ ), cuja superfície lateral consideraremos isolada, enquanto que as extremidades não. Com estas considerações, o calor pode fluir dentro e fora da haste, através das extremidades, mas não através da superfície lateral.

A seguir, coloca-se esta haste (ou tubo) em um meio ambiente cuja temperatura é conhecida:  $u_0$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) por um tempo suficientemente longo, tal que a temperatura em todo o tubo torne-se idêntica à do meio ambiente, ou seja, a haste passe a assumir a temperatura uniforme e igual à do ambiente:  $u_0$ .

Num momento posterior, retira-se o tubo do ambiente em um tempo que chamaremos  $t = 0$  e fixamos dois elementos de temperatura para as extremidades do tubo. A função destes elementos é manter as extremidades do tubo nas temperaturas especificadas (por exemplo  $u_0$  e  $u_1$ , à esquerda e à direita da haste, respectivamente). Em outras palavras, dois termostatos constantemente monitoram a temperatura nas extremidades do tubo, e se a temperatura diferir das fixadas anteriormente ( $u_0$  e  $u_1$ ) fortes elementos de aquecimento (ou de resfriamento) entram em ação para ajustar as temperaturas combinadas.

Após, monitora-se o perfil de temperatura ao longo do tubo, em alguns pontos destes.

Assumindo, pois, que a haste está perfeitamente isolada, exceto nas duas extremidades e que o fluxo de calor se verifica somente na direção horizontal (segundo o eixo  $x$ ), faremos  $u = u(t,x)$  a temperatura, no tempo  $t$  e num ponto  $x$  de haste, enquanto que  $A$  representará a área da secção transversal da haste. Mediante teorias físicas, a variação de calor em função do tempo, transversalmente a uma superfície perpendicular à direção da haste é dada por  $-kAu_x$ , onde  $k > 0$  é a condutividade térmica.

Assim, se o gradiente da temperatura  $u_x$ , transversalmente à superfície é negativo, então a temperatura é mais alta à esquerda do que à direita, daí que o calor flui transversalmente à superfície para a direita, de acordo com a nossa intuição. Deste modo, se

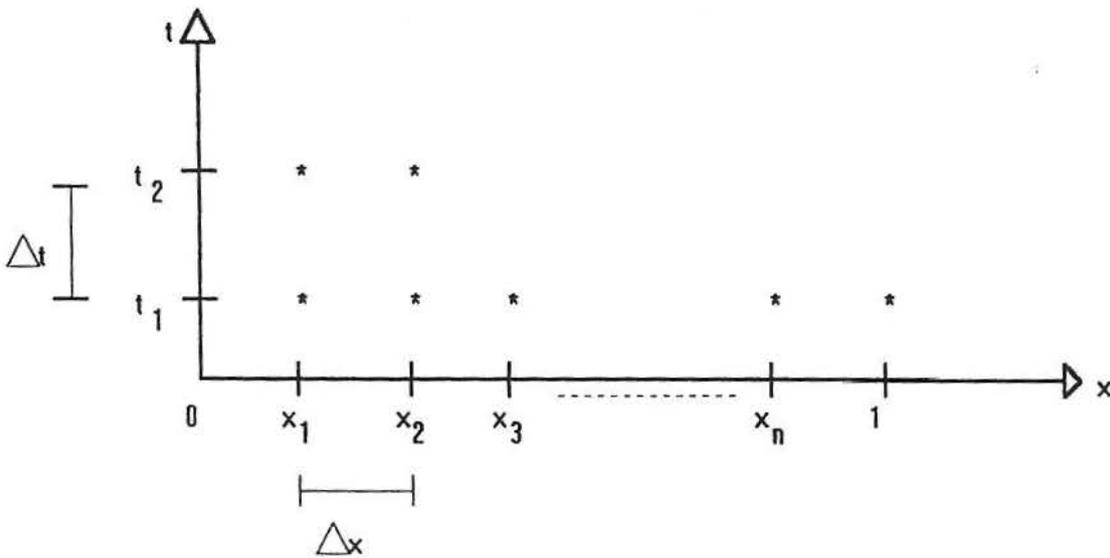
$$u_t = Ku_{xx} \quad (3.4.1)$$

com  $0 \leq x \leq 1$  e  $t \geq 0$ , com as condições inicial e de contorno

$$u(0,x) = g(x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

$$u(t,0) = u_0 \quad u(t,1) = u_1 \quad t \geq 0$$

Nós consideraremos um conjunto formado pelo plano  $x,t$  com uma rede de pontos espaçados entre si de  $\Delta x$  e  $\Delta t$  como ilustrado abaixo:



A base deste simples método de diferenças finitas, para a equação da difusão, está em substituir o cálculo das derivadas de segunda ordem em relação ao espaço por um quociente de diferenças em  $x$ , e substituir  $u_t$  por uma diferença “prá frente” com relação ao tempo. Então, um avanço na solução aproximada do tempo “prá frente”, leva de um tempo para outro. Mais precisamente, se nós considerarmos que  $u_j^m$  denota uma solução aproximada em  $x_j = j\Delta x$  e  $t_m = m\Delta t$ , então o método das diferenças finitas aplicado à equação (3.4.1) conduz a:

$$\frac{u_j^{m+1} - u_j^m}{\Delta t} = \frac{K}{(\Delta x)^2} (u_{j+1}^m - 2u_j^m + u_{j-1}^m) \quad (3.4.2)$$

ou

$$u_j^{m+1} = u_j^m + \mu(u_{j+1}^m - 2u_j^m + u_{j-1}^m) \quad (3.4.3)$$

com  $j = 1, 2, \dots$  onde

$$\mu = \frac{K\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad (3.4.4)$$

As condições de contorno são dadas por:

$$u_0^m = u_0 \quad u_{n+1}^m = u_1, \text{ com } m = 0, 1, 2, \dots \text{ e a condição inicial}$$

$$u_j^0 = g(x), \text{ com } j = 1, 2, \dots, n$$

Assim, a equação (3.4.3) corresponde à descrição da marcha para aproximar a solução “prá frente” um passo de tempo após outro: os valores  $u_j^1$ , com  $j = 1, 2, \dots, n$  são obtidos inicialmente e, uma vez conhecidos, nós podemos obter  $u_j^2$ , com  $j = 1, 2, \dots, n$ , e assim por diante.

Uma questão que surge, neste momento, é quão apurada será a solução aproximada obtida através deste procedimento. Uma resposta rigorosa a este questionamento é um problema difícil, o que foge ao escopo deste trabalho, mas há dois aspectos que podem ser considerados para analisar o erro cometido.

Consideramos que  $u(t,x)$  seja a solução exata do problema da difusão, dado pela equação  $u_t = K u_{xx}$ , em conjunto com as condições iniciais e de contorno. Se nós colocarmos esta solução exata na fórmula (3.4.2), a diferença entre o valor exato e o valor aproximado é denominada “erro local de discretização” ou “erro local de truncamento”; ou seja, no ponto  $(t,x)$ , o erro local de discretização, “e”, é dado por:

$$e = \frac{u(t + \Delta t, x) - u(t, x)}{\Delta t} - \frac{K}{(\Delta x)^2} [u(t, x + \Delta x) - 2u(t, x) + u(t, x - \Delta x)] \quad (3.4.5)$$

Isto é inteiramente análogo à definição prevista para o erro de discretização relativo às equações diferenciais ordinárias e goza de propriedades similares. Por exemplo, suponha que nós conhecemos a solução exata  $u(t, x)$  para algum tempo  $t$  e para todo  $x$  tal que  $0 \leq x \leq 1$ . Usemos a equação (3.4.5) para estimar uma solução  $\hat{u}(t + \Delta t, x)$  em  $t + \Delta t$ . Então, por definição:

$$\frac{\hat{u}(t + \Delta t, x) - u(t, x)}{\Delta t} - \frac{K}{(\Delta x)^2} [u(t, x + \Delta x) - 2u(t, x) + u(t, x - \Delta x)] = 0 \quad (3.4.6)$$

e assim, se subtrairmos esta equação da ( 3.4.5 ), obteremos:

$$\hat{u}(t + \Delta t, x) - u(t + \Delta t, x) = \Delta t e \quad (3.4.7)$$

Isto é, o erro causado por um passo no tempo, usando o esquema proposto pela ( 3.4.2 ) é  $\Delta t$  vezes o erro de discretização local.

É fácil estimar a quantidade “e” de ( 3.4.2 ) em termos de  $\Delta t$  e  $\Delta x$ . Assim, se considerarmos  $u$  como somente a expansão em série de Taylor

$$u(t + \Delta t, x) = u(t, x) + u_t(t, x)\Delta t + o[(\Delta t)^2]$$

concluimos que

$$\frac{u(t + \Delta t, x) - u(t, x)}{\Delta t} = u_t(t, x) + o(\Delta t) \quad (3.4.8)$$

Procedendo de uma forma similar, podemos obter uma aproximação para a derivada de segunda ordem, em relação ao espaço:

$$u(t, x + \Delta x) = u(t, x) + u_x(t, x)\Delta x + \frac{u_{xx}(t, x)(\Delta x)^2}{2} + \frac{u_{xxx}(t, x)(\Delta x)^3}{6} + o(\Delta x)^4 \quad (3.4.9)$$

$$u(t, x - \Delta x) = u(t, x) - u_x(t, x)\Delta x + \frac{u_{xx}(t, x)(\Delta x)^2}{2} - \frac{u_{xxx}(t, x)(\Delta x)^3}{6} + o(\Delta x)^4 \quad (3.4.10)$$

Somando as expressões (3.4.9) e (3.4.10), acima, se obtém:

$$\frac{u(t, x + \Delta x) - 2u(t, x) + u(t, x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} = u_{xx}(t, x) + o[(\Delta x)^2] \quad (3.4.11)$$

Se nós substituirmos as expressões (3.4.8) e (3.4.11) na equação ( 3.4.2 ) e usando  $u_t = Ku_{xx}$  uma vez que “u” é a solução exata da equação diferencial, nós obteremos:

$$e = u_t(t, x) + o(\Delta t) - K[u_{xx}(t, x)] + o[(\Delta x)^2]$$

daí

$$e = o(\Delta t) + o[(\Delta x)^2] \quad (3.4.12)$$

O fato de que  $\Delta t$  aparece com potência de 1º grau e que  $\Delta x$  surge com potência do 2º grau, na expressão para o erro de discretização local, é usualmente descrito como uma constatação de que o método das diferenças finitas é de uma precisão de 1ª ordem no tempo e de 2ª ordem no espaço.

É hora de examinar a conclusão que se pode tirar das equações ( 3.4.7 ) e (3.4.12), qual seja que o erro de discretização em  $u_j^m$ , como obtido em ( 3.4.3 ), converge para zero quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$  tendem para zero. Infelizmente, esta conclusão não é garantida uma vez que a equação ( 3.4.7 ) apresenta um erro na aproximação da solução somente por um passo simples do tempo. É difícil mostrar que o erro de discretização tende a zero num intervalo  $[0, T]$  e, em geral, isto requer condições adicionais sobre a maneira como  $\Delta t$  e  $\Delta x$  se aproximam de zero. A relação dada por (3.4.8) ou, mais generalizadamente, o conhecimento de que o erro de discretização local tende a zero com  $\Delta t$  e  $\Delta x$ , é essencialmente uma condição necessária para que o erro de discretização global, por sua vez, também tenda a zero. Este fato é chamado a consistência do esquema. A razão pela qual a consistência do método não implica, necessariamente, em convergência do erro de discretização é limitado pelo fenômeno conhecido como estabilidade do esquema, e nós discutiremos certos aspectos disto para o presente método.

Utilizando um caminho exatamente análogo ao método de separação de variáveis e com uso da séries de Fourier, aplicado à equação diferencial  $u_t = Ku_{xx}$ , nós podemos obter a solução exata da equação (3.4.3) em conjunto com as condições de contorno e as condições iniciais:

$$\begin{aligned} u_0^m = u_{n+1}^m &= 0, & \text{com } m = 1, 2, 3, \dots \\ u_j^0 &= g(x) \text{ dada,} & \text{para } j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (3.4.11')$$

Assumindo que a solução  $u_j^m$  pode ser escrita como

$$u_j^m = v_m w_j, \quad j = 1, \dots, n \text{ e } m = 0, 1, \dots \quad (3.4.12')$$

Este é o procedimento adotado na separação de variáveis para equações em diferenças. Substituindo (3.2.12') em (3.4.3) se obtém:

$$\frac{v_{m+1} w_j - v_m w_j}{\mu} = v_m w_{j+1} - 2v_m w_{j+1} + v_m w_{j-1}$$

$$\frac{v_{m+1} - v_m}{\mu v_m} = \frac{w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1}}{w_j} = -\lambda \quad ,$$

onde  $\lambda$  é uma constante,  $j = 1, \dots, n$  e  $m = 0, 1, \dots$

Assim

$$v_{m+1} - v_m = -\lambda \mu v_m, \quad m = 0, 1, \dots \quad (3.4.13)$$

$$w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1} = -\lambda w_j, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (3.4.14)$$

Usando as condições de contorno

$$u_0^m = v_m w_0 = 0$$

$$u_{n+1}^m = v_m w_{n+1} = 0, \text{ se obtém } w_0 = 0 \text{ e } w_{n+1} = 0$$

e multiplicando a equação (3.4.14) por (-1), resulta que, para cada  $j = 1, 2, 3, \dots, n$ :

$$-w_{j+1} + 2w_j - w_{j-1} = \lambda w_j$$

Isto conduz ao sistema de equações:

$$-w_2 + 2w_1 - w_0 = \lambda w_1$$

$$-w_3 + 2w_2 - w_1 = \lambda w_2$$

$$-w_4 + 2w_3 - w_2 = \lambda w_3$$

.....

$$-w_{n+1} + 2w_n - w_{n-1} = \lambda w_n$$

com  $w_{n+1} + 2w_n = \lambda w_n$  e  $w_0 = 0$ , e portanto:

$$2w_1 - w_2 = \lambda w_1$$

$$-w_1 + 2w_2 - w_3 = \lambda w_2$$

$$-w_2 + 2w_3 - w_4 = \lambda w_3$$

$$-w_3 + 2w_4 - w_5 = \lambda w_4$$

.....

$$-w_{n-1} + 2w_n = \lambda w_n$$

Forma-se, então, o seguinte sistema matricial:

considerarmos um pequeno elemento da haste de comprimento  $\Delta x$ , a razão com que o calor está entrando no elemento considerado, no ponto  $x$  é

$$-(kAu_x)|_x \quad (3.3.1)$$

e a razão com que o calor está saindo em  $x+\Delta x$  é

$$(-kAu_x)|_{x+\Delta x} \quad (3.3.2)$$

assim, a variação de calor no elemento é dada por

$$(-kAu_x)|_x - (-kAu_x)|_{x+\Delta x} \quad (3.3.3)$$

Por outro lado, novamente baseado nas teorias físicas, o calor em um comprimento elementar  $\Delta x$  é proporcional à massa deste elemento multiplicada pela temperatura:

$$cA\Delta x\rho u \quad (3.3.4)$$

incluindo-se ainda duas grandezas físicas:  $c$  e  $\rho$  (calor específico e densidade do material de que é constituído a haste, respectivamente).

Mas a derivada, em relação ao tempo, do calor em uma unidade elementar de comprimento é igual à variação de calor dada pela equação (3.3.3):

$$cA\Delta x\rho u_t = (kAu_x)|_{x+\Delta x} - (kAu_x)|_x$$

$$cA\rho u_t = \frac{(kAu_x)|_{x+\Delta x} - (kAu_x)|_x}{\Delta x}$$

Tomando o limite quando  $\Delta x \rightarrow 0$ , em ambos os membros:

$$\begin{aligned} cA\rho u_t &= (kAu_x)_x \\ u_t &= \frac{1}{c\rho} (ku_x)_x \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Se  $k$  é independente de  $x$ , então a equação (3.3.5) se reduz a

$$u_t = k/c\rho (u_x)_x$$

e, fazendo  $K = k/c\rho$  (difusividade térmica), resulta

$$u_t = Ku_{xx} \quad (3.3.6)$$

Esta equação mostra que a variação da temperatura em relação ao tempo, numa fina haste, é proporcional à derivada espacial de segunda ordem da temperatura, ao longo da haste.

Relativamente às equações diferenciais ordinárias, sabemos que uma solução das mesmas só é determinada, conhecendo-se condições iniciais e/ou de contorno, e esperamos que, da mesma forma, isto seja verdadeira para as equações diferenciais parciais. Então, suponhamos que em algum tempo, que chamaremos  $t = 0$ , a haste tenha uma distribuição de temperatura dada por uma função  $g(x)$ , onde assumiremos que a haste tenha comprimento igual à unidade ( $=1$ ), considerando-se que à esquerda seja  $x = 0$ . Vamos supor também que as extremidades da haste estejam controladas e com temperaturas fixadas em  $u_0$  e  $u_1$ , isto é:

$$u(t, 0) = u_0 \quad \text{e} \quad u(t, 1) = u_1 \quad (3.3.7)$$

as quais denominaremos condições de contorno, relativamente à variável espacial  $x$ . A distribuição de temperatura fornece a condição inicial:

$$u(0, x) = g(x), \quad \text{com} \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.3.8)$$

Assim, temos o problema físico: dada uma haste, cujas extremidades são controladas, e com temperaturas fixadas,  $u_0$  e  $u_1$ , e com distribuição inicial de temperatura dada por  $g(x)$ , pergunta-se: qual a temperatura em qualquer ponto  $x$  da haste em qualquer tempo  $t > 0$ ? Vimos que o modelo matemático para tal problema, é dado pela equação diferencial parcial  $u_t = K u_{xx}$ , onde  $K = \frac{k}{c\rho}$ ,  $0 \leq x \leq 1$ , juntamente com as condições de contorno (3.3.7) e a condição inicial (3.3.8).

A equação do calor, acima obtida, é também um modelo matemático de vários outros fenômenos físicos, sendo que de todos estes possíveis, trataremos especificamente do problema da difusão em um gás, sem considerar os efeitos da convecção no mesmo. A resolução destes problemas já foi estudada por diversos físicos-matemáticos, havendo vários métodos exatos de solução. Neste trabalho, apresentaremos alguns procedimentos de solução da equação da difusão, em meios gasosos, sem a consideração do processo da convecção, através de métodos numéricos.

#### 4 Método Explícito (Para a Equação da Difusão)

Este método é fundamentado no processo das diferenças finitas.

Considerando, pois a equação da difusão

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & -1 & \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \cdot \\ w_{n-1} \\ w_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \cdot \\ w_{n-1} \\ w_n \end{bmatrix}$$

A equação acima representa o problema de autovalores da matriz tridiagonal:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (3.4.15)$$

cujos autovalores são obtidos através da expressão

$$\lambda_k = 2 - 2 \cos(k\pi/n+1), \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, n \quad (3.4.16)$$

e cujos auto-vetores da forma

$$w_k = [\text{sen}(k\pi\Delta x), \text{sen}(2k\pi\Delta x), \dots, \text{sen}(nk\pi\Delta x)], \quad (3.4.17)$$

(onde  $\Delta x = 1/n+1$ ).

A determinação destes autovalores e autovetores é mostrada no anexo 1

Para cada  $\lambda = \lambda_k$ , tem-se:

$$W_j = \text{sen}(jk\pi\Delta x), \quad \text{com } j = 0, 1, \dots, n+1 \quad (3.4.18)$$

que dá a solução da equação (3.4.14).

A seqüência obtida a partir de (3.4.13) resulta:

$$\begin{aligned} v_1 &= v_0(1 - \lambda\mu) \\ v_2 &= v_1(1 - \lambda\mu) = v_0(1 - \lambda\mu)^2 \\ v_3 &= v_2(1 - \lambda\mu) = v_0(1 - \lambda\mu)^3 \\ v_m &= (1 - \lambda\mu)^m v_0, \quad \text{com } m = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

que é a solução da equação (3.4.13), para qualquer autovalor  $\lambda$ .

Substituindo em (3.4.12), se obtém:

$$u_j^m = (1 - \lambda_k\mu)^m \text{sen}(jk\pi\Delta x), \quad \text{com } m = 0, 1, \dots \text{ e } j = 0, 1, \dots, n+1$$

que é a solução da equação (3.4.3), para cada  $k$ . Sendo que para uma equação diferencial, qualquer combinação linear de suas soluções é também uma solução, tem-se que:

$$u_j^m = \sum_{k=1}^n a_k (1 - \lambda_k \mu)^m \text{sen}(jk\pi\Delta x), \quad (3.4.19)$$

com  $m = 0, 1, \dots$  e  $j = 0, 1, 2, \dots, n+1$  é também uma solução de (3.4.3) para quaisquer constantes  $a_k$ .

Se os coeficientes  $a_k$  são dados por

$$a_k = \sum_{l=1}^n g(x_l) \text{sen}(k\pi\Delta x), \quad (3.4.20)$$

então  $u_j^m$  também satisfaz a condição inicial

$$u_j^0 = g(x_j), \text{ com } j = 1, 2, \dots, n \quad (3.4.21)$$

Agora, nós usaremos a equação (3.4.19) da seguinte forma: para nossa discussão, conforme citado anteriormente, a equação  $u_t = K u_{xx}$ , juntamente com as condições de contorno  $u(t, 0) = u(t, 1) = 0$  é um modelo de distribuição de temperatura numa fina haste isolada, cujas extremidades são controladas em uma temperatura igual a zero. Assim, não há fonte de calor, e nós esperamos que a temperatura na haste vá decrescer até zero, isto é,  $u(t, x)$  deve tender a zero, quando  $t$  tender ao infinito. Como mencionamos anteriormente, esta conclusão também pode ser obtida matematicamente a partir das representações da solução exata, desde que os termos exponenciais tendam todos a zero. Ademais, é razoável aceitar que, para quaisquer condições iniciais, as aproximações por diferença finita  $u_j^m$  também tendam a zero quando  $m$  tende ao infinito. Conforme (3.4.19) este será o caso se, e somente se,

$$|1 - \mu\lambda_k| < 1, \text{ com } k = 1, 2, \dots, n \text{ ou} \\ \mu < \min_k \frac{2}{\lambda_k} = \frac{1}{1 - \cos \frac{\pi n}{n+1}} = \frac{1}{1 + \cos \frac{\pi n}{n+1}} \quad (3.4.23)$$

considerando que o maior autovalor  $\lambda_k$  é  $\lambda_n$ . Assim, com  $\mu = K\Delta t / (\Delta x)^2$  e combinando as expressões (3.4.4) e (3.4.23) se obtém:

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{K(1 + \cos(\pi/n+1))} \quad (3.4.24)$$

que fornece a restrição com relação aos “tamanhos” de  $\Delta t$  e  $\Delta x$  a qual, se não satisfeita, em geral, leva a que a solução aproximada de  $u_j^m$  do esquema em diferenças divergirá quando  $m$  tende ao infinito.

Em síntese, a condição de estabilidade do método requer que  $\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2K}$  o que

implica  $\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{K(1 + \cos \pi/n + 1)}$

A seguir são mostrados resultados para a distribuição da temperatura usando-se o método explícito:

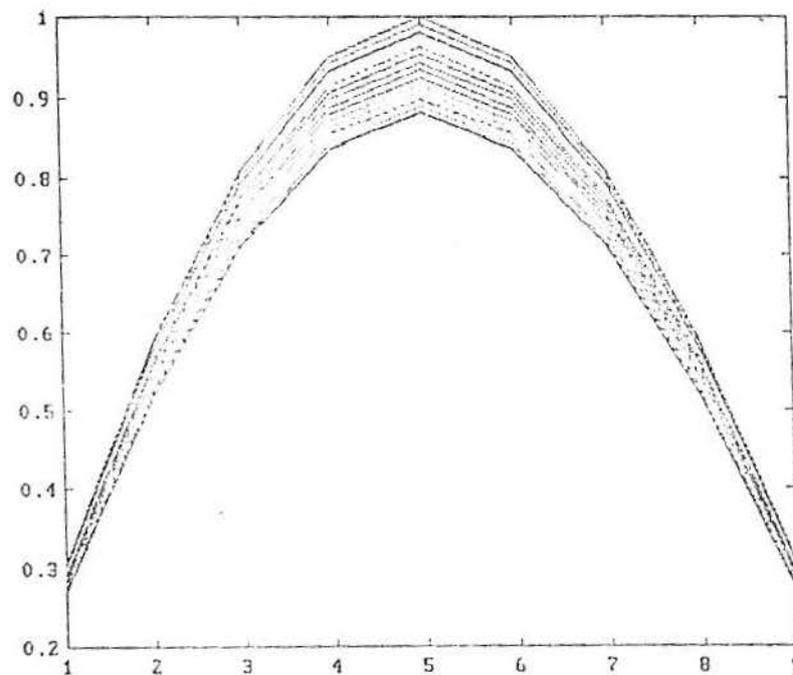


Figura 3. Resultado para a distribuição da temperatura (no processo sem convecção), usando o método explícito com os seguintes dados:  $x_0 = 0$ ,  $v_0 = .2$ ,  $\mu = .1$  (portanto, um passo igual a 0,001),  $n = 9$ ,  $d = 14$ ,  $g(x) = \text{sen}(\pi x)$ ,  $u_0 = u_1 = 0$  e  $k = 1$ .

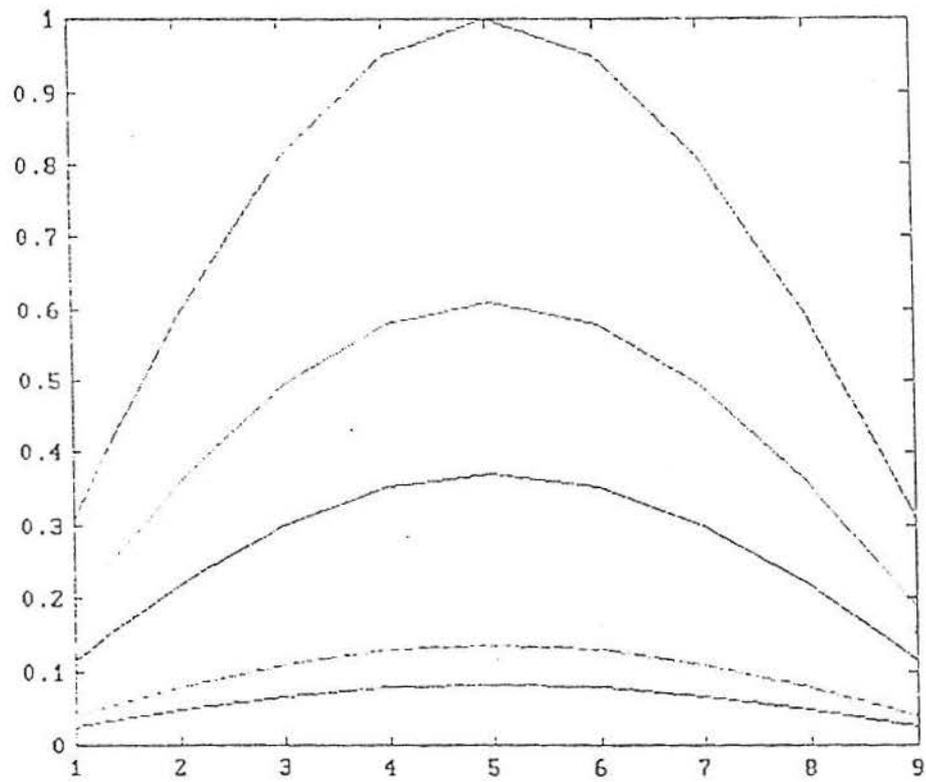


Figura 4. Resultado para a distribuição da temperatura, com os seguintes dados:  $x_0 = 0$ ,  $v_0 = .2$ ,  $\mu = 4$  (portanto, um passo igual a 0,04, não atendendo à condição de estabilidade, mas que não aparece devido ao número de passos = 6).

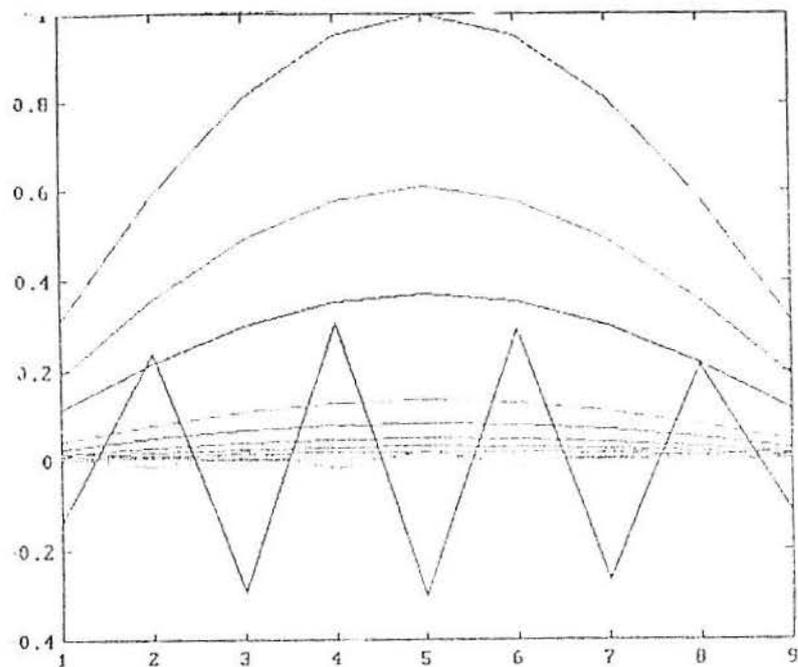


Figura 5. Resultado para distribuição da temperatura, com os mesmos dados da figura 4, porém com 14 passos de tempo. Observa-se que apareceu a instabilidade.

## 5. Método Implícito (para a equação da difusão)

O método descrito na secção anterior é denominado explícito porque os valores de  $u_j^{m+1}$  em cada plano de tempo seguinte são obtidos de uma forma explícita, ou seja, também em função de valores de planos de tempo imediatamente anteriores. Em contraste, consideraremos agora a equação da difusão.

$$u_t = Ku_{xx}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0 \quad (3.5.1)$$

e o esquema em diferenças análogo

$$\frac{u_j^{m+1} - u_j^m}{\Delta t} = \frac{K}{(\Delta x)^2} (u_{j+1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j-1}^{m+1}), \quad j = 1, \dots, n \quad (3.5.2)$$

Esta equação (3.5.2) é similar à equação (3.4.2), mas apresenta uma importante diferença que consiste no fato de que os valores de  $u_j$ , no 2º membro da equação, agora são calculados no instante de tempo  $(m+1)$ , em vez de ser calculados no instante de tempo  $(m)$ . Consequentemente, se nós conhecemos  $u_j^m, j = 1, 2, \dots, n$ , e queremos computar  $u_j$ , com  $j = 1, 2, \dots, n$ , nós verificamos que as variáveis  $u_j$ , no 2º membro da equação (3.5.2) são todas desconhecidas. Assim, nós formaremos um sistema de equações, a partir da aplicação da equação (3.5.2), o que implicitamente definirá os valores  $u_j^{m+1}$ , com  $j = 1, 2, \dots, n$ . A diferença básica entre os métodos implícito e explícito é a seguinte: no método explícito temos uma fórmula explícita para  $u_j^{m+1}$ , em termos de valores conhecidos de  $u_j$  enquanto que no método implícito, nós devemos resolver um sistema de equações para avançar no plano do instante seguinte.

A partir de (3.5.2), se continuarmos fazendo  $\mu = K\Delta t / (\Delta x)^2$  obteremos:

$$\begin{aligned} u_j^{m+1} - u_j^m &= \frac{K\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{j+1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j-1}^{m+1}) \\ u_j^{m+1} - u_j^m &= \mu (u_{j+1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j-1}^{m+1}) \\ u_j^{m+1} (1 + 2\mu) - \mu u_{j-1}^{m+1} - \mu u_{j+1}^{m+1} &= u_j^m, \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

onde  $j = 1, 2, \dots, n$ .

Desenvolvendo tal equação, para valores de  $j$  de 1 até  $n$ , forma-se o sistema de equações:

$$\begin{aligned}
-\mu u_0^{m+1} + u_1^{m+1}(1+2\mu) - \mu u_2^{m+1} &= u_1^m \\
-\mu u_1^{m+1} + u_2^{m+1}(1+2\mu) - \mu u_3^{m+1} &= u_2^m \\
-\mu u_2^{m+1} + u_3^{m+1}(1+2\mu) - \mu u_4^{m+1} &= u_3^m \\
&\dots\dots\dots \\
-\mu u_{n-1}^{m+1} + u_n^{m+1}(1+2\mu) - \mu u_{n+1}^{m+1} &= u_n^m
\end{aligned}$$

Considerando as condições de contorno  $u_0^{m+1} = u_0$  e  $u_{n+1}^{m+1} = u_1$ , obtem-se:

$$\begin{aligned}
(1+2\mu)u_1^{m+1} - \mu u_2^{m+1} &= u_1^m + \mu u_0 \\
-\mu u_1^{m+1} + (1+2\mu)u_2^{m+1} - \mu u_3^{m+1} &= u_2^m \\
&\dots\dots\dots \\
-\mu u_2^{m+1} + (1+2\mu)u_3^{m+1} - \mu u_4^{m+1} &= u_3^m \\
&\dots\dots\dots \\
-\mu u_{n-1}^{m+1} + (1+2\mu)u_n^{m+1} &= u_n^m + \mu u_1
\end{aligned}$$

junto com o esquema matricial:

$$\begin{bmatrix}
1+2\mu & -\mu & & & & \\
-\mu & 1+2\mu & -\mu & & & \\
& -\mu & 1+2\mu & -\mu & & \\
& & -\mu & 1+2\mu & -\mu & \\
& & & & & -\mu \\
& & & & & & 1+2\mu
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_1^{m+1} \\
u_2^{m+1} \\
u_3^{m+1} \\
\vdots \\
u_{n-1}^{m+1} \\
u_n^{m+1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
u_1^m + \mu u_0 \\
u_2^m \\
u_3^m \\
\vdots \\
u_{n-1}^m \\
u_n^m + \mu u_1
\end{bmatrix} \tag{3.5.4}$$

onde também assumimos que  $u(o, x) = g(x)$ ,  $0 \leq x \leq 1$ , assim, como antes,  $u_j^0 = g(x_j)$ , com  $j = 1, 2, \dots, n$ .

O método implícito, esquematizado no sistema matricial (3.5.4) é utilizado para calcular  $u_j^{m+1}$  a partir de  $u_j^m$ . A matriz do 1º membro da equação (3.5.4) é tridiagonal e também diagonal dominante, desde que  $K$  seja positivo e, assim,  $\mu$  também será. Constata-se que este método (implícito) é mais custoso, do ponto de vista computacional, mas apresenta substancial vantagem na estabilidade.

Assumindo, como no método anterior que  $u_0 = u_1 = 0$ , então teremos, como antes

$$u_j^m = \sum_{k=1}^m a_k \gamma_k^m \text{sen}(k \pi j \Delta x) \quad (3.5.5)$$

satisfazendo o esquema (3.5.3) para quaisquer constantes  $a_k$ , com autovalores

$$\lambda_k = 2 + 2 \cos\left(\frac{k \pi}{n+1}\right) \quad (3.5.6)$$

e

$$\gamma_k = \frac{1}{1 + \mu \lambda_k} \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, n$$

Aqui, também  $u_j^0$  satisfaz a condição inicial sempre que

$$a_k = \sum_{l=1}^n g(x_l) \text{sen}(K \pi l \Delta x) \quad (5.3.7)$$

Lembrando que o objetivo de uma solução através de qualquer método numérico é que a solução aproximada  $u$  tenda a zero, quando  $m$  tende ao infinito, observamos que isto ocorrerá se, e somente se,

$$|\gamma_k| < 1, \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, n \quad (3.5.8)$$

Mas, como  $\mu > 0$ , segue de (3.5.8) que

$$0 < \gamma_k < 1, \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, n \quad (3.5.9)$$

portanto a condição (3.5.8) está verificada. Mas, mais importante ainda é verificar que a condição dada em (3.5.9) é verdadeira para qualquer  $\mu > 0$ . Assim, considerando que fizemos  $\mu = K \Delta t / (\Delta x)^2$ , segue-se que (3.5.9) é verdadeiro para qualquer intervalo de  $\Delta t$  e  $\Delta x$ . Neste caso, diz-se que o método é incondicionalmente estável, ou seja, que ele é estável sem quaisquer restrições com relação aos “tamanhos” de  $\Delta t$  e  $\Delta x$ .

Mas, o fato de que o método implícito é incondicionalmente estável, não nos leva a garantir que tenhamos uma boa aproximação da solução para quaisquer  $\Delta t$  e  $\Delta x$ . Como é usual, eles devem ser escolhidos suficientemente pequenos a fim de controlar o erro de discretização. Como no método explícito, o erro é de primeira ordem de precisão no tempo e de segunda ordem de precisão no espaço; então

$$e(\Delta t, \Delta x) = o[(\Delta t), (\Delta x)^2]$$

Fazendo  $e(\Delta t, \Delta x) = c_1 \Delta t + c_2 (\Delta x)^2$ , e supondo que a contribuição dos erros de discretização no tempo e no espaço são iguais, na formação de erro global, é necessário que

$\Delta t = c_3(\Delta x)^2$ , o que é semelhante à condição de estabilidade do método explícito (3.4.24). Assim, constata-se que a estabilidade requerida pelo método implícito não impõe quaisquer restrições relativamente aos “tamanhos” de  $\Delta t$  e de  $\Delta x$ .

A seguir é mostrado o resultado para distribuição da temperatura, usando-se o método implícito.

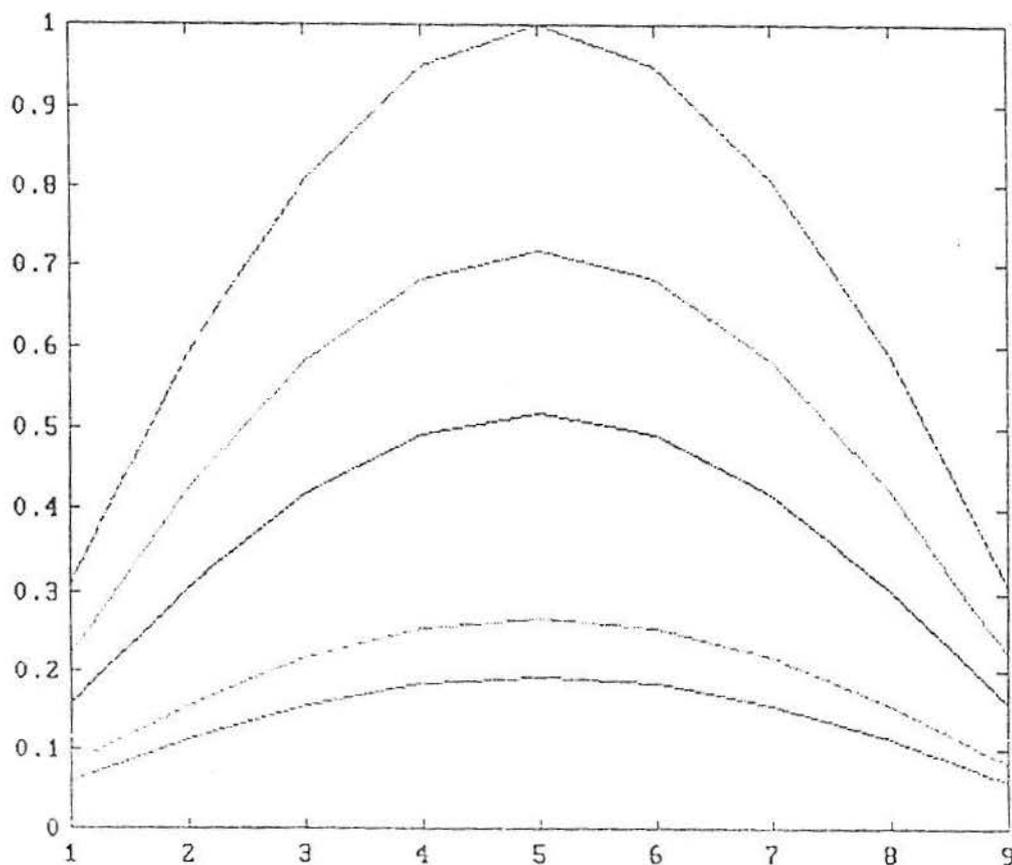


Figura 6. Resultado para a distribuição da temperatura (no processo sem convecção). Foi usado o método implícito, com os seguintes dados:  $x_0 = 0$ ,  $v_0 = .2$ ,  $\mu = .1$  (portanto um passo igual a 0,001),  $n = 9$ ,  $d = 6$ ,  $g(x) = \text{sen}(\pi x)$ ,  $u_0 = u_1 = 0$  e  $k = 1$ .

## 6 Método de Crank-Nicolson (Para a Equação da Difusão)

Este método numérico é potencialmente melhor que os métodos implícito e explícito, por ser, essencialmente, a “média” dos dois. De fato, se nós considerarmos a média entre os segundos membros das expressões (3.4.2) e (3.5.2), obteremos:

$$u_j^{m+1} - u_j^m = \frac{K\Delta t}{2(\Delta x)^2} (u_{j+1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j-1}^{m+1} + u_{j+1}^m - 2u_j^m + u_{j-1}^m) \quad (3.6.1)$$

onde  $\mu = K\Delta t / 2(\Delta x)^2$ . Desenvolvendo a equação acima, para valores de  $j$  desde 1 até  $n$  e, considerando as anteriores condições de contorno  $u_0^m = u_0$  e  $u_{m+1}^m = u_1$ , se obtém o sistema de equações:

$$\begin{aligned} (1+2)u_1^{m+1} - \mu u_2^{m+2} &= \mu u_2^m - (2\mu-1)u_1^m + 2\mu u_0 \\ \mu u_1^{m+1} + (1+2\mu)u_2^{m+1} - \mu u_3^{m+1} &= \mu u_1^m - (2\mu-1)u_2^m + \mu u_3^m \\ -\mu u_2^{m+1} + (1+2\mu)u_3^{m+1} - \mu u_4^{m+1} &= \mu u_2^m - (2\mu-1)u_3^m + \mu u_4^m \\ &\dots\dots\dots \\ -\mu u_{n-1}^{m+1} + (1+2\mu)u_n^{m+1} &= \mu u_{n-1}^m - (2\mu-1)u_n^m + 2\mu u_1 \end{aligned}$$

onde verifica-se que o 1º membro pode ser colocado na mesma forma matricial do método implícito (3.5.4) e onde o 2º membro fica da forma:

$$\begin{aligned} \mu u_2^m - (2\mu-1)u_1^m + 2\mu u_0 &\text{ para } j = 1 \\ \mu u_{j+1}^m - (2\mu-1)u_j^m + \mu u_{j-1}^m &\text{ para } j = 2, \dots, n-1 \\ 2\mu u_1 - (2\mu-1)u_n^m + \mu u_{n-1}^m &\text{ para } j = n \end{aligned} \quad (3.6.2)$$

Aqui, também o esquema proposto em (3.6.1) é desenvolvido, mediante um sistema tridiagonal de equações, o qual é resolvido em cada passo de tempo. A vantagem do uso do esquema proposto em (3.6.1) é que ele não somente é incondicionalmente estável, como no método implícito, mas é de 2ª ordem de precisão no tempo e no espaço. Estas propriedades levam este método a ser um dos mais usados para solução de equações na forma parabólica.

Aqui, também  $u$  satisfaz a condição inicial se

$$a_k = \sum_{l=1}^n g(x_l) \text{sen}(k \pi l \Delta x) \quad (3.6.3)$$

e cuja solução aproximada, apresentada pelo método, é dada por

$$u_j^m = \sum_{k=1}^n a_k \gamma_k^m \text{sen}(k \pi j \Delta x)$$

onde 
$$\lambda_k = 2 - 2 \cos\left(\frac{k \pi}{n+1}\right)$$

$$\gamma_k = \frac{(1 - \mu\lambda_k)}{(1 + \mu\lambda_k)}$$

$$\mu = \frac{K\Delta t}{2(\Delta x)^2}$$

A seguir é mostrado um resultado de aplicação do método de Crank-Nicolson.

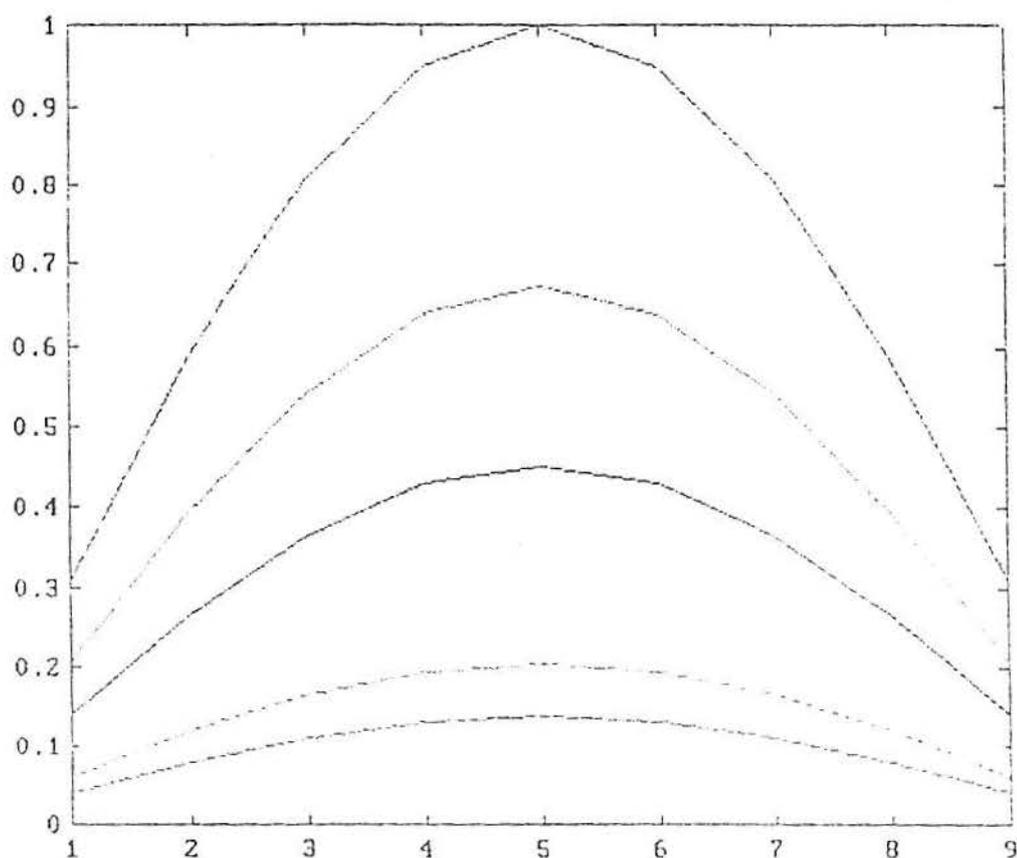


Figura 7. Resultado para a distribuição da temperatura (no processo sem convecção), usando o método de Crank-Nicolson, com os seguintes dados:  $x_0 = 0$ ,  $v_0 = .2$ ,  $\mu = 2$  (portanto, um passo igual a 0,04),  $n = 9$ ,  $d = 6$ ,  $g(x) = \text{sen}(\pi x)$ ,  $u_0 = u_1 = 0$  e  $k = 1$ .

#### IV - A POLUIÇÃO DO AR

Por todo o tempo, mas principalmente nos últimos anos, a qualidade do ar tem se constituído num importante tema de interesse social, ao longo de todo o globo terrestre. A chuva ácida, por exemplo, é um problema regional, causada por indústrias de produtos que geram gases tóxicos, lançados na atmosfera; eles poluem o ar e causam danos à flora e à fauna. Em áreas urbanas, a concentração de ozônio é considerada como o maior problema a afetar a saúde.

As modelagens relativas à qualidade do ar são descrições matemáticas do transporte atmosférico, da difusão e da reação química dos poluentes. As incógnitas são as concentrações de espécies químicas no ar. O propósito no desenvolvimento e no estudo de tais modelos é de encontrar uma maneira de prever como e quando ocorrerão picos de concentração responsáveis por mudanças na meteorologia e na fonte de poluição. O modelo matemático da qualidade do ar é de particular interesse da indústria automobilística e tem sido um dos mais discutidos em várias regiões do Mundo.

Consideremos o problema em um contexto mais particular. Suponhamos que uma fábrica está emitindo gases tóxicos. E suponhamos que uma vez em cada hora, como parte do processo industrial, a fábrica emite uma grande e concentrada gama destes fumos ofensivos, por alguns minutos e depois pára. Suponhamos, ainda, que a um quilômetro de distância da fábrica exista uma linda casa e que alguém está interessado em comprá-la. Se o vento está indo em direção a tal casa, qual a contribuição do fato para a aquisição ou não dessa “linda residência”? Ou seja, qual é o limite de concentração de tais gases que será admissível, se eles chegarem à moradia?

Se assumirmos que não há mudanças químicas no transporte dos gases tóxicos, então existem, basicamente, dois processos a considerar: a convecção e a difusão.

A convecção é, essencialmente, o efeito do vento “soprando” os gases numa determinada direção, com insignificante efeito de dispersão do mesmo. Um bom exemplo é o de uma nuvem distante, movendo-se com uma velocidade fixa, numa determinada direção, sem alterar, aparentemente, seu tamanho e sua forma.

Por outro lado, a difusão é o processo responsável pelo fato de que a concentração de gases tóxicos não se mantém constante, ao longo do “trajeto” desde a fábrica. É por causa da difusão que, mesmo sem a presença do vento, os odores tóxicos normalmente desaparecem após certo tempo. É o que ocorre, também, numa casa recentemente pintada, onde os odores causados pelas tintas cessam em poucas horas.

Evidentemente que, na prática, os dois fenômenos são simultâneos, com preponderância ora de um, ora de outro, mas seus efeitos se superpoem, podendo produzir consequências mais danosas do que se considerados isoladamente.

## 1 O Modelo Matemático

Vamos chamar de  $C$  a concentração de uma espécie química no ar, a qual é uma função da posição  $(x, y, z)$  e do tempo  $t$ . A espécie é transportada pelo vento, cuja velocidade, representada pelo vetor  $\vec{u} = \vec{u}(x, y, z, t)$  é assumida como conhecida. Partículas desta espécie química também são difundidas, localmente; elas têm a tendência de se moverem de áreas de alta concentração para áreas de baixa concentração. Se a difusão é ignorada, então a equação do transporte é:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) = 0 \quad (4.1.1)$$

Esta equação é denominada “Equação da Continuidade”. Se nós a integrarmos sobre um domínio  $D$ , contido em  $R^3$ , obteremos:

$$\frac{d}{dt} \iiint_D C(x, y, z, t) dx dy dz = - \iint_{\partial D} C \vec{u} \cdot \vec{n} dS \quad (4.1.2)$$

onde  $\partial D$  é a fronteira de  $D$  e  $\vec{n}$  é um vetor unitário normal a  $\partial D$  e saindo desta. A equação (4.1.2) diz que a taxa de acréscimo da espécie química no domínio  $D$  é igual ao fluxo da espécie através da fronteira. Reciprocamente, se a equação (4.1.2) é válida para qualquer domínio  $D$ , então tomando uma sequência de domínios  $D_j$ , convergentes ao ponto, nós podemos aplicar a relação (4.1.1) a este ponto.

Se a difusão é considerada, então (4.1.1) toma a forma de uma equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (4.1.3)$$

onde  $K_{ij}$  é uma matriz positiva definida, denominada “matriz difusão”.

Em qualquer dos casos, (4.1.1) ou (4.1.3), nós admitimos que a concentração inicial, digamos para  $t = 0$  seja:

$$c(x,y,z,0) = c_0(x,y,z) \quad (4.1.4)$$

e nós pretendemos computar a concentração  $C(x,y,z,t)$  para tempos subsequentes. Em particular, nós pretendemos determinar os valores máximos de concentração para tempos determinados, seguindo regulamentações governamentais sobre a poluição que estabelecem o máximo admissível de concentração de poluição, como um fator crítico.

## 2 A equação da convecção

Nesta secção, não consideraremos a difusão e assumiremos que a velocidade do vento é somente na direcção horizontal. Para maior simplicidade, também assumiremos que a velocidade do vento  $\vec{u}$  é fixada, digamos, na direcção do eixo dos  $x$ , isto é:  $\vec{u} = (U,0,0)$ . Assumindo que  $U = U(x)$  é continuamente diferenciável, a equação de transporte se reduz a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{d(uC)}{dx} = 0; \quad (4.2.1)$$

a qual é denominada “Equação da convecção”. Também assumiremos que, inicialmente,  $C$  depende somente de  $x$ , isto é,

$$C(x,0) = C_0(x), \quad -\infty < x < \infty \quad (4.2.2)$$

Para resolver (4.2.1) e (4.2.2), reescreveremos a equação (4.2.1) na forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) C + \frac{u \partial C}{\partial x} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{u \partial C}{\partial x} = f, \quad (4.2.3)$$

onde  $f = -u_x C$  e ( $u_x = du/dx$ )

Considere a equação diferencial

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = U(x), & t > 0 \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (4.2.4)$$

com solução  $x = (t ; x_0)$ .

Geometricamente,  $x(t ; x_0)$  determina uma única curva  $\gamma_{x_0}$  passando pelo ponto  $(x_0, 0)$ .

Podemos mostrar que  $x(t ; x_0)$  é derivável e que sua derivada

$$z(t) \equiv \frac{\partial x(t; x_0)}{\partial x_0} \quad \text{satisfaz} \quad \frac{dz}{dt} = U_x(x(t; x_0))z, \quad \text{com } z(0) = 1,$$

De fato:

sendo  $dx/dt = U(x)$ , para  $t \geq 0$  e  $x(0) = x_0$ , tem-se que  $x(t; x_0)$  é continuamente diferenciável no parâmetro  $x_0$ , e  $z(t) = \frac{\partial x}{\partial x_0}(t; x_0)$  (4.2.5)

satisfaz  $\frac{dz}{dt} = U_x(x(t; x_0))z, z(0) = 1$  (4.2.6)

Da equação (4.2.5), se obtém:

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial}{\partial x_0} (x(t, x_0)) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_0} \left( \frac{d}{dt} (x(t, x_0)) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_0} (U(x(t, x_0))) \\ &= \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x_0} (x(t, x_0)) \\ &= U_x(x(t, x_0))z, \end{aligned}$$

$$z(0) = \frac{\partial}{\partial x_0}(x(0, x_0))$$

onde 
$$= \frac{d}{dx_0}(x_0)$$

$$= 1.$$

Agora, vamos examinar a função  $C(x(t; x_0), t)$  como uma função da variável  $t$ . Nós encontramos que

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{U \partial C}{\partial x} = f - U_x(x(t; x_0)) C$$

Daí 
$$\left( \frac{d}{dt} \ln(C) = U_x(x(t; x_0)) \right)$$

Segue-se que

$$C(x(t; x_0), t) = C_0(x_0) \exp \left\{ \int_0^t U_x(x(s, x_0)) ds \right\} \quad (4.2.7)$$

Observe que  $d/dt$ , usada acima é simplesmente a diferenciação ao longo da curva  $\gamma_{x_0}$ , parametrizada com parâmetro  $t$ .

Reciprocamente, se as curvas  $(x(t; x_0), t)$  cobrem o semi-plano superior de  $(x, t)$  isto é  $t \geq 0$ , então  $C = C_0(x_0) \exp \left\{ - \int_0^t U_x(x(s, x_0)) ds \right\}$  é a solução do sistema (4.2.1) e (4.2.2). De

fato:

se as curvas  $(x(t; x_0), t)$  cobrem o semiplano superior de  $(x, t)$ , então

$C = C_0(x_0) \exp \left\{ - \int_0^t U_x(x(s, x_0)) ds \right\}$  é uma solução do sistema formado por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{d(C)}{dx} = 0 \quad (4.2.8)$$

com 
$$C(x, 0) = C_0(x) \quad (4.2.9)$$

onde 
$$\begin{cases} dx/dt = U(x), \\ x(0) = x_0 \end{cases} \text{ para } t > 0$$

Então usando (4.2.9) e

$$\frac{d}{dt} \int_{\alpha(t)}^{\beta(t)} f(s) ds = f(\beta(t)) \cdot \beta'(t) - f(\alpha(t)) \cdot \alpha'(t) - \int_{\alpha(t)}^{\beta(t)} \frac{d}{ds} f(s) ds$$

onde  $\alpha(t) = 0$ ,  $\alpha'(t) = 0$ ,  $\beta(t) = t$ ,  $\beta'(t) = 1$

e  $f(s) = U_x(x(s, x_0))$ .

Obtém-se  $C(x(0, x_0), 0) = C_0(x_0)$ .

Agora, se  $C = C_0(x_0) \exp \left[ - \int_0^t U_x(x(s, x_0)) ds \right]$  e se aplicarmos logaritmos a ambos os

membros dessa equação, obteremos:

$$\ln(C) = - \int_0^t U_x(x(s, x_0)) ds + \ln(C_0(x_0)).$$

Derivando, em relação à variável  $t$ , ambos os membros:

$$\frac{d}{dt} \ln(C) = \frac{d}{dt} \left( - \int_0^t U_x(x(s, x_0)) ds \right) + 0$$

$$\frac{d}{dt} \ln(C) = - \left[ U_x(x(t, x_0)) \cdot 1 - \int_0^t \frac{\partial U}{\partial x} x(x(t, x_0)) ds \right]$$

$$\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial t} = -U_x(x(t, x_0)) + \int_0^t U_{xx}(x(s, x_0)) \frac{dx}{ds} ds$$

e, portanto

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U(x(t, x_0))C + C \int_0^t U_{xx}(x(s, x_0)) \frac{dx}{ds} ds \quad (4.2.10)$$

As curvas determinadas pela equação (4.2.3), independente da função  $f$ , são denominadas “Curvas características”. Os métodos numéricos usados, para computar a solução para  $C$  são denominados “Métodos das Características”. Estes são descritos no seguinte parágrafo.

### 3 Método numérico

Embora a equação (4.2.7) proporcione uma bela fórmula matemática para a solução do problema proposto, ela não é muito prática do ponto de vista computacional.

Assim, em uma situação real, nós teremos um número finito de estações para testar a qualidade do ar, digamos  $X_1, X_2, \dots, X_n$ . Nós estamos interessados em avaliar  $C$  em cada estação  $X_j$  em determinados tempos  $T_1, T_2, \dots$ . Por exemplo para computar  $C$  em  $(X_1, T_1)$ , a equação (4.2.7) requer conhecer o ponto  $x_0$  tal que a característica através de  $(x_0, 0)$  passe através de  $(X_1, T_1)$ .

Se nós quisermos computar  $C$  em um tempo  $T_2$ , nós precisamos conhecer o correspondente novo ponto  $x_0$ . Para longos tempos  $T_N$ , a computação do correspondente ponto  $x_0$  pode acabar consumindo muito tempo.

Por conseguinte, necessitamos desenvolver um método computacional melhor.

Assim, para superar este problema, vamos dividir o espaço uni-dimensional  $X$  em intervalos de igual espaçamento  $\Delta x$  e o eixo de tempo positivo em intervalos de igual comprimento  $\Delta t$ . Procuraremos aproximar os valores  $C(j\Delta x, n\Delta t)$  por certas quantidade  $C_j^n$  satisfazendo certas equações aproximadas, com  $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  e  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Para maior simplicidade, vamos considerar o caso em que  $U$  independe de  $x$ . Assim as equações (4.1.1) e (4.1.2) tomam a forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad C(x, 0) = C_0(x) \quad (4.3.1)$$

Para facilitar a determinação da solução, do “problema de valor inicial”, acima, nós usaremos diferenças finitas para aproximar as derivadas. Mas, antes de podermos fazer isto, vamos introduzir os “pontos nodais” no plano  $x-t$ , dados por  $x = j\Delta x, t = n\Delta t$ , com  $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  e  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Aproximaremos a derivada parcial  $\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t}$  por

$$\frac{C(j\Delta x, (n+1)\Delta t) - C(j\Delta x, n\Delta t)}{\Delta t} \text{ ou } (C_j^{n+1} - C_j^n)/\Delta t \quad (4.3.2)$$

e a derivada  $\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x}$  por

$$\frac{C(j\Delta x, n\Delta t) - C((j-1)\Delta x, n\Delta t)}{\Delta x} \text{ ou } (C_j^n - C_{j-1}^n)/\Delta x \quad (4.3.3)$$

Então, a equação (4.3.1) pode ser escrita como

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + U \left[ \frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{\Delta x} \right] = 0$$

ou

$$C_j^{n+1} = C_j^n - U \left[ \frac{\Delta t}{\Delta x} (C_j^n - C_{j-1}^n) \right] \quad (4.3.4)$$

onde,  $C_j$  a cada “tempo”  $n+1$  é dada explicitamente por  $C_j$  no “tempo”  $n$ . Por isso a equação (4.3.4) se refere a uma esquema explícito de diferenças finitas, o qual é “para a frente” no tempo e “para trás” no espaço.

Da equação (4.3.4), está claro que se os valores dos  $C$ 's são conhecidos na coluna  $n=0$ , então eles são explicitamente calculados na coluna  $n=1$ . Repetindo este processo, nós podemos determinar todos os  $C_j^n$  a partir do valor inicial  $C_j^0$ .

Duas questões precisam ser examinadas. Em primeiro lugar, se  $\Delta x$  e  $\Delta t$  são suficientemente pequenos, podem os  $C_j^n$  aproximar valores de  $C(j\Delta x, n\Delta t)$  para pontos da malha, em qualquer sentido? Em segundo lugar, fixados  $\Delta x$  e  $\Delta t$ , os valores  $C_j^n$  distribuem-se uniformemente no sentido dos “j's”, ou em qualquer outro sentido, quando  $n$  tende a  $\infty$ ? Se a resposta à primeira questão é afirmativa, nós dizemos que o esquema de diferenças finitas é “convergente”, enquanto que se a resposta à 2ª questão for positiva, diremos que o esquema é “estável”.

Aparentemente, a questão da convergência seria a questão mais relevante, uma vez que a estabilidade é fácil de checar. Por sorte, há um teorema que, em palavras elementares,

diz que “se o problema de valor inicial de uma equação diferencial é bem formulado (por exemplo, se ela caracteriza uma boa representação da situação física), e se ela possui um razoável trabalho de substituição de derivadas por diferenças finitas, então a estabilidade implica convergência”.

A constante 
$$\sigma = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (4.3.5)$$

determina uma regra fundamental no esquema (4.3.4). Assim, se  $0 < \sigma \leq 1$ , o esquema numérico baseado na equação (4.3.4) converge. Por outro lado, se  $\sigma > 1$ , então o esquema não converge, isto é, quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$  tornam-se muito pequenos, o esquema das diferenças finitas apresenta soluções que oscilam. Portanto, o esquema é estável se, e somente se,  $0 < \sigma \leq 1$ .

O esquema explícito de diferenças finitas pode ser estendido, a partir da equação (4.1.1) para o caso geral em que  $U = U(x)$ :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(UC)}{\partial x} = 0 \quad (4.3.6)$$

isto é

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + C \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad (4.3.7)$$

Aproximando as derivadas parciais como antes, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{C_j^{\alpha+1} - C_j^\alpha}{\Delta t} + U_j \left[ \frac{C_j^\alpha - C_{j-1}^\alpha}{\Delta x} \right] + C_j^\alpha \left[ \frac{U_j - U_{j-1}}{\Delta x} \right] &= 0 \\ C_j^{\alpha+1} = C_j^\alpha - U_j \frac{\Delta t}{\Delta x} [C_j^\alpha - C_{j-1}^\alpha] - \frac{\Delta t}{\Delta x} [U_j - U_{j-1}] C_j^\alpha \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

onde  $U_j = U(j\Delta x)$ .

Nas páginas seguintes, são mostrados resultados computacionais.

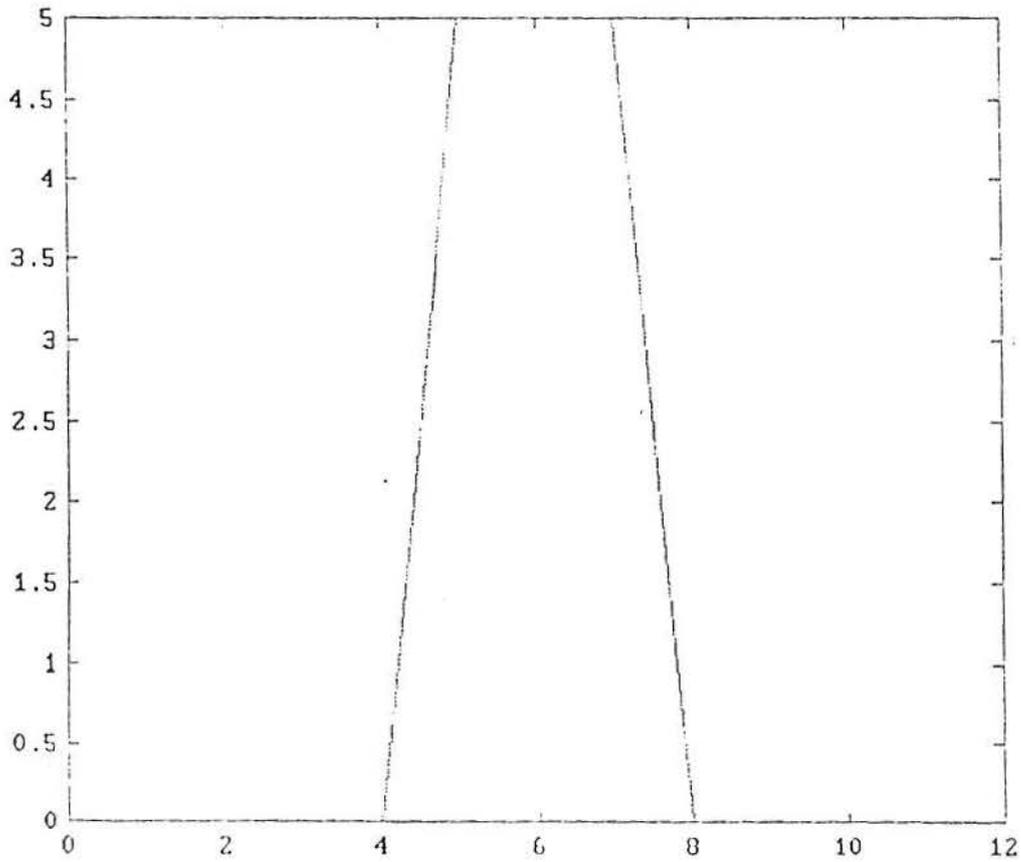


Figura 8. Resultado para o perfil da concentração inicial  $C_0(x)$ , obtido com os seguintes dados:

$$C_0(x) = \begin{cases} 5, & 5 \leq x \leq 7 \\ 5x - 20, & 4 < x < 5 \\ -5x + 40, & 7 < x < 8 \\ 0, & \text{outros} \end{cases}$$

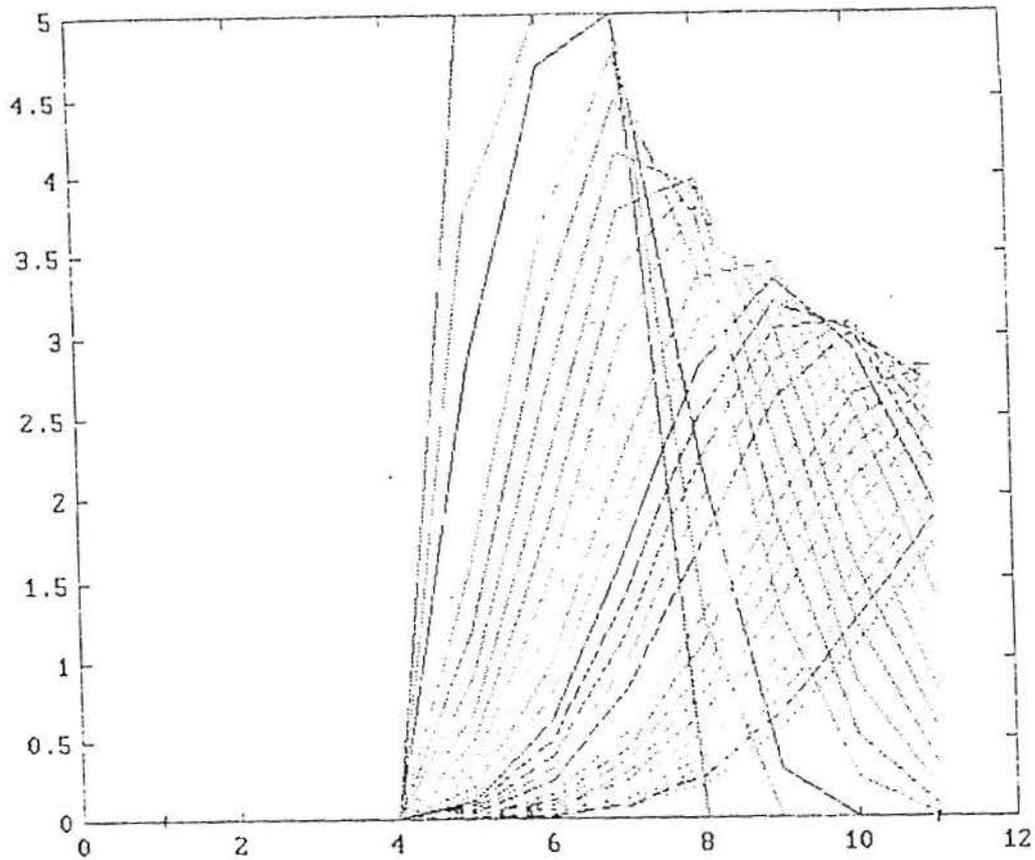


Figura 9. Gráfico que mostra o deslocamento da concentração inicial (considerado na figura 8) e a sua dissipação. Foi usado uma malha com 30 passos igualmente espaçados de 0,025 e a velocidade do vento expressa por  $U(x)=x$ , no esquema (4.3.8).

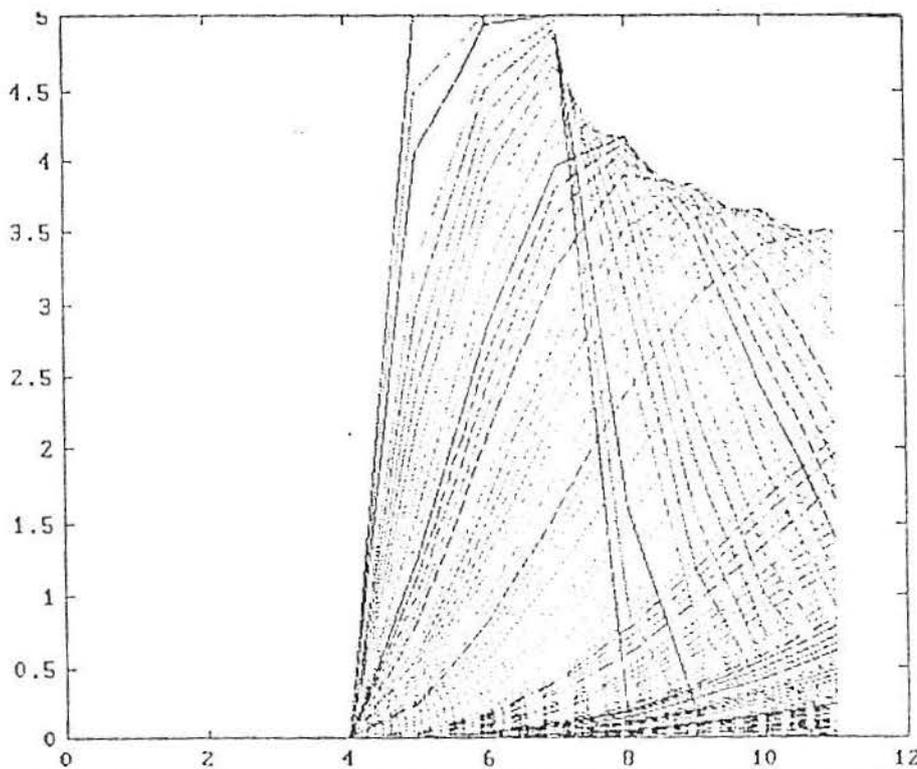


Figura 10. Gráfico obtido com uma malha com 120 passos de tempo igualmente espaçados de 0,025 e a velocidade do vento expressa por  $U(x) = x$ , mostrando o deslocamento da concentração inicial (considerada na figura 8), no esquema (4.3.8).

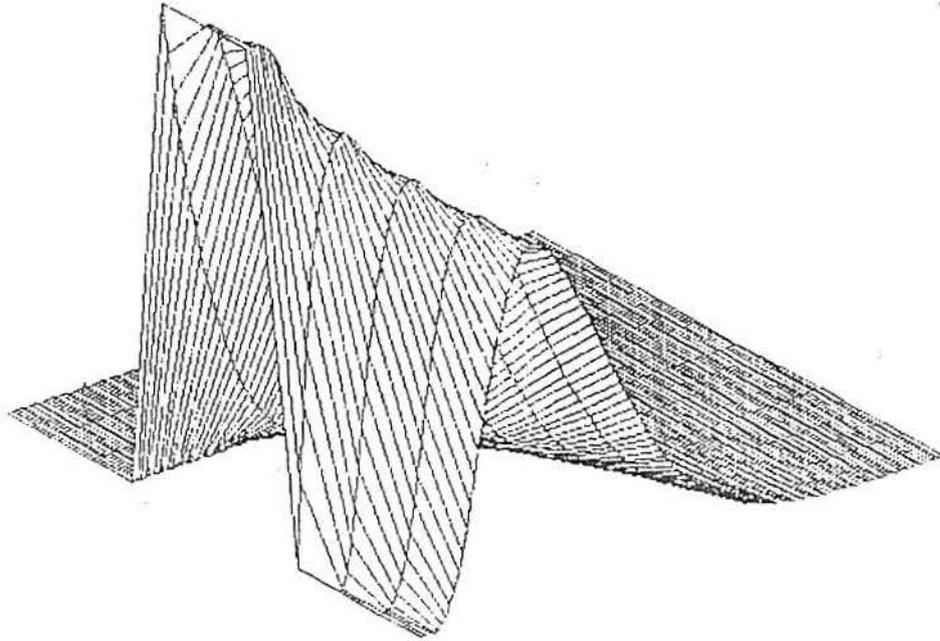


Figura 11. Distribuição espacial da concentração, usando-se uma malha com 120 passos de tempo igualmente espaçados de 0,025 e a velocidade do vento expressa por  $U(x) = x$ , no esquema (4.3.8).

#### 4 A Equação Geral da Convecção

Até aqui, assumimos que a velocidade do vento se dava ao longo de uma direção horizontal. Vamos considerar, agora, uma situação mais geral, onde o vetor velocidade do vento tem dois componentes

$$\vec{u} = (U, V, 0)$$

A equação da convecção então se torna

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (UC)}{\partial x} + \frac{\partial (VC)}{\partial y} = 0 \quad (4.4.1)$$

ou

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + C \frac{\partial U}{\partial x} + C \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad (4.4.2)$$

com as condições iniciais (independentes de  $z$ ):

$$C(x, y, 0) = C_0(x, y) \quad (4.4.3)$$

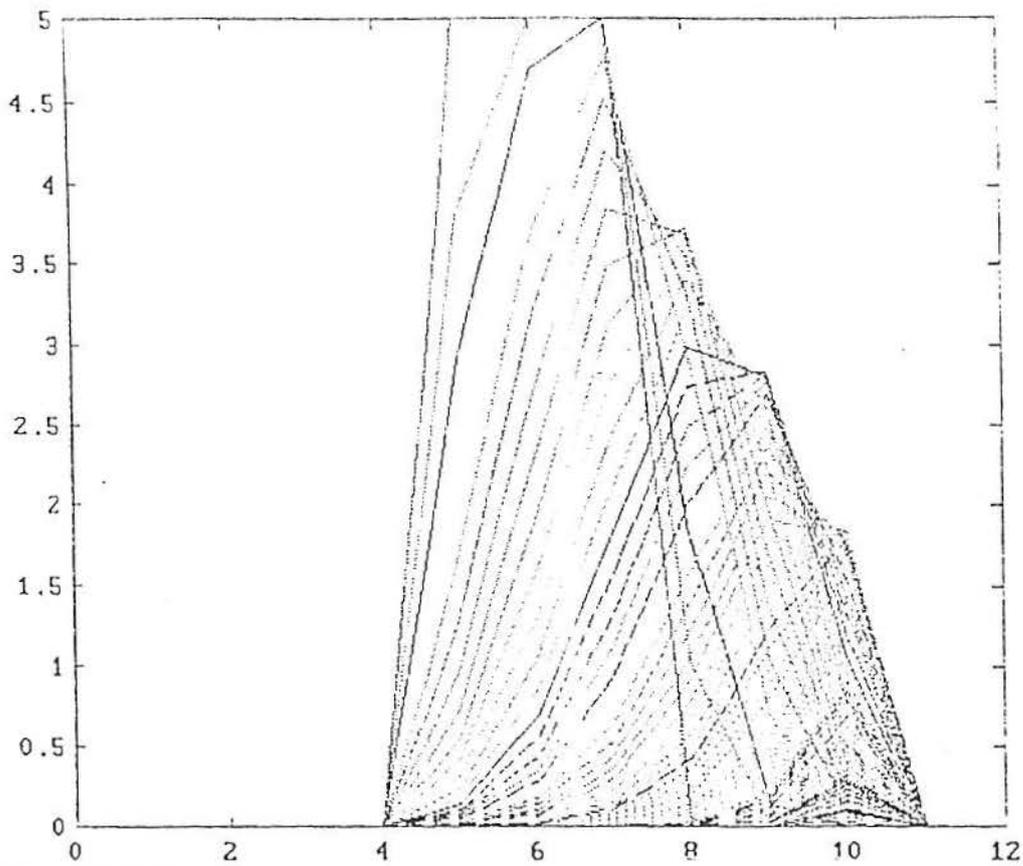


Figura 12. Gráfico que mostra o deslocamento da concentração inicial (a mesma mostrada na figura 8) e a sua dissipação. Foi usado uma malha com 120 passos de tempo igualmente espaçados de 0,025 e a velocidade do vento expressa por  $U(x)=\text{sen}(\pi x)$ .

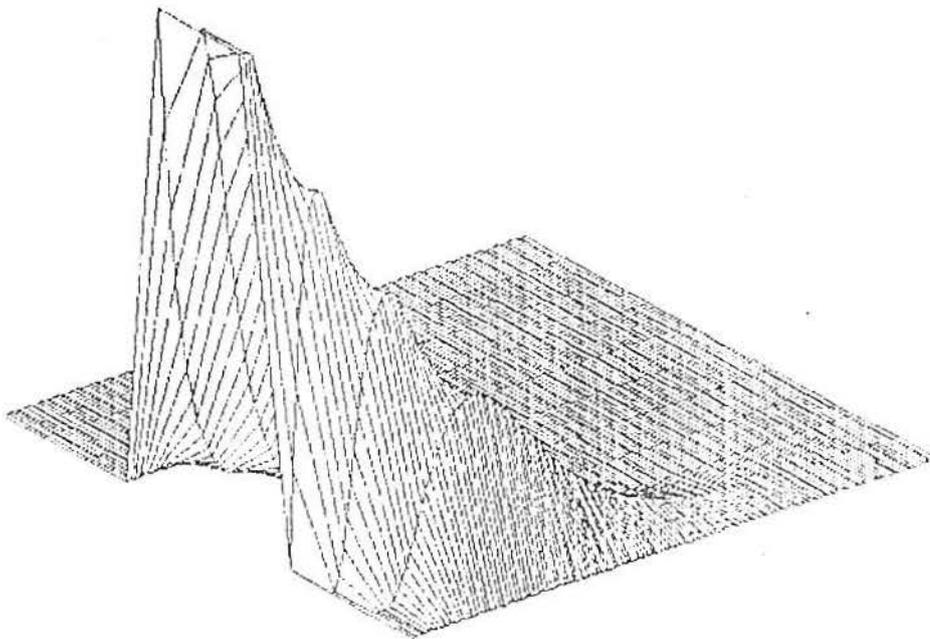


Figura 13. Distribuição espacial da concentração correspondente aos dados da figura 12 (malha com 120 passos de tempo igualmente espaçados de 0,025).

## 5 Equação Convecção-Difusão

Agora, vamos considerar o fenômeno da difusão, conjuntamente com o da convecção, de modo que a equação (4.2.1) se transforma em:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(UC)}{\partial x} = \frac{k\partial^2 C}{\partial x^2}, \text{ onde } k > 0 \quad (4.5.1)$$

Então, agora, tentaremos resolver a equação (4.5.1) com uma condição inicial

$$C(x,0) = C_0(x), \quad \text{com } -\infty < x < \infty \quad (4.5.2)$$

Neste caso, o método das características não é muito adequado. Entretanto, o esquema das diferenças finitas ainda é aplicável. Motivados pela fórmula de Taylor, nós aproximamos a derivada de 2ª ordem, da concentração em relação ao espaço  $\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)$  em  $(j\Delta x, n\Delta t)$  por:

$$\frac{1}{(\Delta x^2)} [C((j+1)\Delta x, n\Delta t) - 2C(j\Delta x, n\Delta t) + C((j-1)\Delta x, n\Delta t)]$$

e  $\partial C/\partial x$ ,  $\partial C/\partial x$  como em (4.3.2) e (4.3.3). Assim, obtemos de (4.5.1) que

$$C_j^{n+1} = C_j^n - U \frac{\Delta t}{\Delta x} (C_j^n - C_{j-1}^n) + k \left[ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n) \right] \quad (4.5.3)$$

## 6 Método numérico

Nas páginas seguintes são mostrados resultados computacionais a partir do esquema (4.5.3), onde a velocidade U é constante.

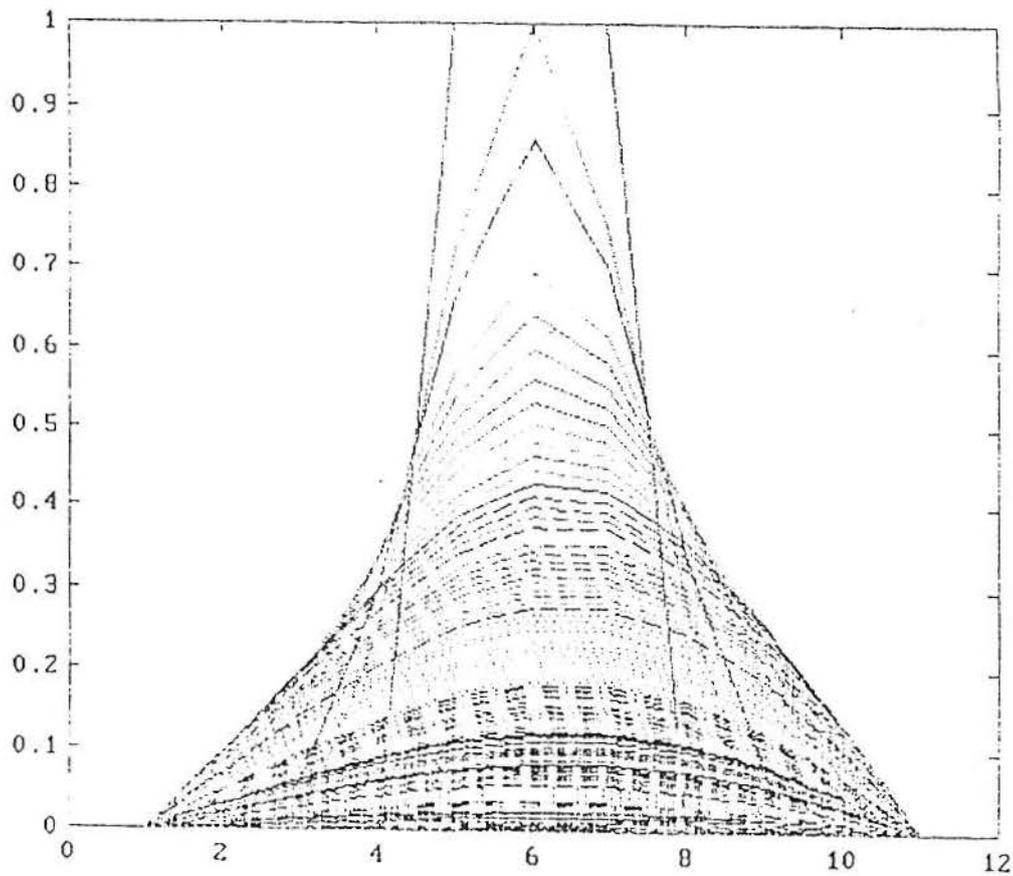


Figura 14. Gráfico que mostra a dissipação da concentração inicial. Foi usado uma malha com 400 passos de tempo igualmente espaçados de 0,0025 e a velocidade do vento expressa por  $U(x) = 1$ , no esquema (4.5.3).

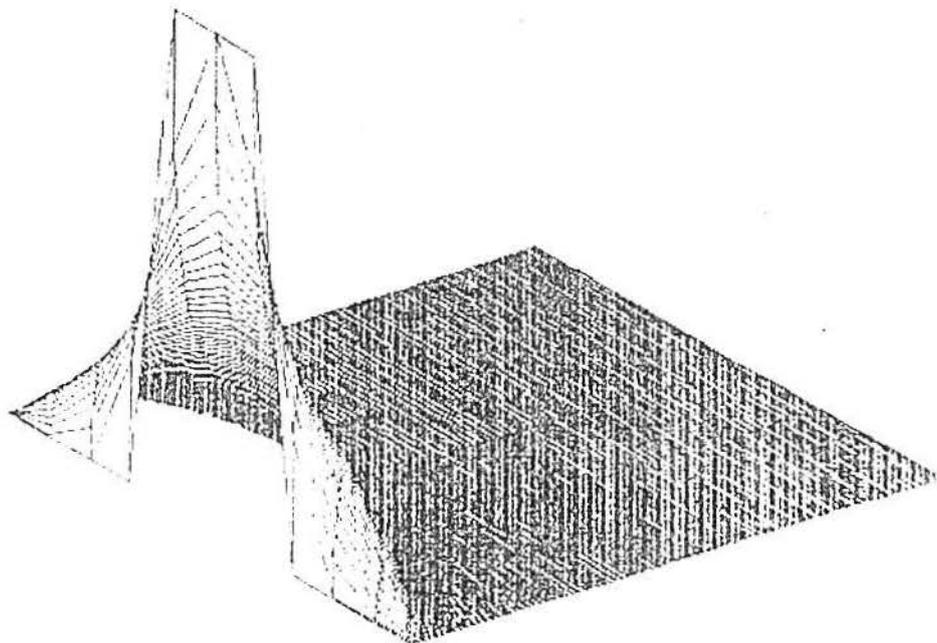


Figura 15. Distribuição espacial da concentração, correspondente aos dados da figura 14 (malha com 400 passos de tempo igualmente espaçados de 0,0025), no esquema (4.5.3).

Nas figuras abaixo, é mostrada a influência do vento na dissipação da concentração inicial. Foram usados 60 passos de tempo, com  $\Delta x = 0,1$  e  $\Delta t = 0,0025$ :

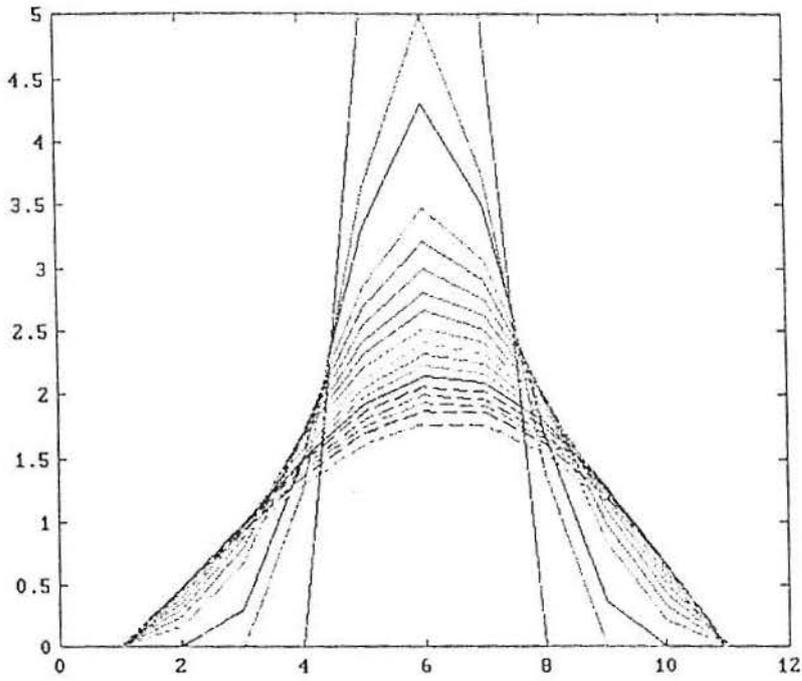


Figura 16. U=1

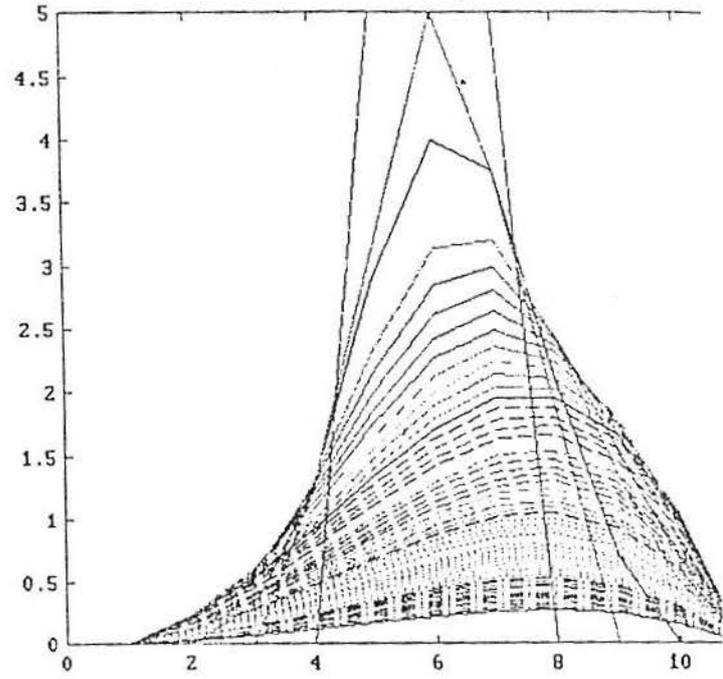


Figura 17. U=5

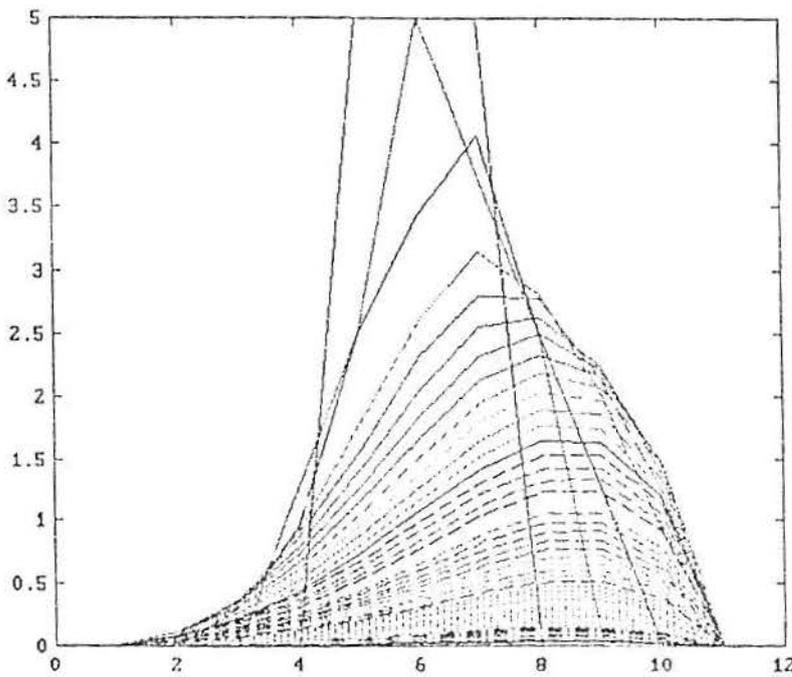


Figura 18. U=10

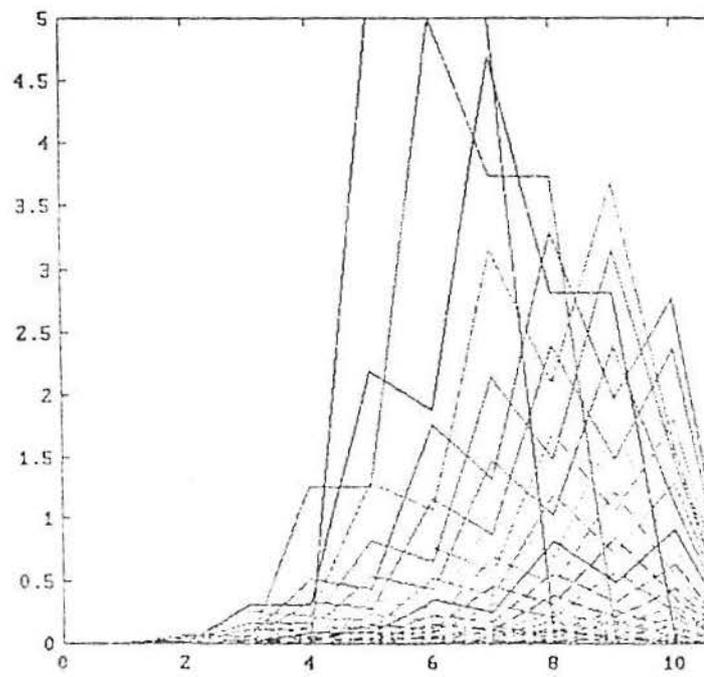


Figura 19. U=20

## 7 Critério de estabilidade de von Neumann

No parágrafo 3 deste Capítulo, nós definimos os conceitos de convergência e de estabilidade para os esquemas de diferenças finitas. É sabido que um esquema em diferenças é convergente se ele é, simultaneamente, estável e consistente. Os esquemas em diferenças finitas, motivados pela fórmula de Taylor são, usualmente, consistentes. A estabilidade, contudo, nem sempre é satisfeita e é um pouco difícil de checar diretamente. O critério de von Neumann para estabilidade é relativamente fácil de checar pois ele assume uma forma especial da solução do esquema das diferenças finitas.

O critério estabelece que “o método em diferenças finitas para um problema de valor inicial para uma equação diferencial com coeficientes constantes, com uma solução de contorno é estável se qualquer solução da equação em diferenças finitas, assumindo a forma

$$C_j^n = \xi^n e^{i\beta j} \quad ,$$

(onde  $\beta$  é um número real,  $\xi = \xi(\beta)$  é um número complexo e  $i = \sqrt{-1}$ ) tem a propriedade  $|\xi| \leq 1$ .”

Então, vamos aplicar o critério de von Neumann à equação (4.5.3). Fazendo

$$C_j^n = \xi^n e^{i\beta j} \quad , \quad R = \Delta t / (\Delta x)^2$$

nesta equação, obtemos:

$$\xi^{n+1} e^{i\beta j} = \xi^n e^{i\beta j} - UR \Delta x (\xi^n e^{i\beta j} - \xi^n e^{i\beta(j-1)}) + kR (\xi^n e^{i\beta(j+1)} - 2\xi^n e^{i\beta j} + \xi^n e^{i\beta(j-1)})$$

e então,

$$\xi = 1 - UR \Delta x (1 - e^{-i\beta}) + kR (e^{i\beta} - 2 + e^{-i\beta})$$

Lembrando que  $e^{-i\beta} = \cos \beta - i \sin \beta$

$$\text{e que } e^{i\beta} + e^{-i\beta} = 2 \cos \beta,$$

obtemos

$$\xi = 1 - UR \Delta x (1 - \cos \beta) - i UR \Delta x \sin \beta + 2kR (\cos \beta - 1)$$

Como  $|\xi|^2 = a^2 + b^2$ , para  $\xi = a + bi$ , segue que

$$|\xi|^2 = 1 - 2(2kR + UR \Delta x)(1 - \cos \beta) + (2kR + UR \Delta x)^2 (1 - \cos \beta)^2 + U^2 R^2 (\Delta x)^2 \sin^2 \beta$$

Daí:

$$|\xi|^2 - 1 = -2R(2k + U\Delta x)(1 - \cos\beta) + 4k^2 R^2(1 - \cos\beta)^2 + 4kUR^2\Delta x(1 - \cos\beta)^2 + U^2 R^2(\Delta x)^2(1 - 2\cos\beta + 1) \quad (4.7.1)$$

Supondo  $\beta$  tal que  $(1 - \cos\beta) > 0$ , então a condição  $|\xi|^2 \leq 1$  é equivalente a

$$-(2k + U\Delta x) + 2k^2 R(1 - \cos\beta) + 2kUR\Delta x(1 - \cos\beta) + U^2 R(\Delta x)^2 \leq 0 \quad \text{ou que}$$

$$R(U^2(\Delta x)^2 + (2k^2 + 2kU\Delta x)(1 - \cos\beta)) \leq 2k + U\Delta x$$

A condição com a qual isto é controlado para cada  $\beta$  (com  $1 - \cos\beta > 0$ ) é equivalente a  $R(U^2(\Delta x)^2 + 4kU\Delta x + 4k^2) = R(U\Delta x + 2k)^2 \leq U\Delta x + 2k$ , o que leva

$$a \quad R(2k + U\Delta x) \leq 1 \quad (4.7.2)$$

Esta desigualdade mostra que se o critério de von Neumann é verificado, isto é se  $|\xi| \leq 1$  para qualquer real  $\beta$  (com  $1 - \cos\beta > 0$ ), então (4.7.2) é verificada.

Reciprocamente, se (4.7.2) é válida sob a condição de que  $1 - \cos\beta > 0$ , então  $|\xi|^2 < 1$ . Contudo, a única maneira que  $1 - \cos\beta = 0$  pode acontecer em (4.7.1) é se  $|\xi| = 1$ , o que ainda atenderia o critério de von Neumann. Aplicada a condição acima ao problema apresentado, consegue-se C considerando  $\Delta x = 0,1$ ,  $K=U=1$  e  $R = \Delta t / (\Delta x)^2$ , leva:

$$\Delta t(2K + U\Delta x) \leq (\Delta x)^2$$

Daí

$$\Delta t \leq \frac{(0,1)^2}{2 + 0,1}$$

isto é

$$\Delta t \leq \frac{1}{210}$$

que fornece a condição de estabilidade para nosso problema.

## 8 Estabilidade, Consistência e Convergência

Um dos fatos mais usados no estudo dos métodos de diferenças finitas para problemas de valor inicial (para equações diferenciais com coeficientes constantes) é que ele pode ser estudado, considerando os valores iniciais na forma

$$C_0(x) = e^{iwx} \quad (4.8.1)$$

(somente para  $w$  real). Neste caso, a solução exata é da forma  $C(x,t) = e^{v t} e^{iwx}$  (4.8.2)

(para alguma constante complexa  $v$ ) e a solução dada pelo esquema em diferenças é da forma

$$C_j^n = \xi^n e^{i\beta j} \quad (4.8.3)$$

onde  $\beta = w\Delta x$ . Se substituirmos a equação (4.8.2) na (4.5.1), nós observamos que  $e^{v t} e^{iwx} \cdot v + iUw e^{v t} e^{iwx} = -kw^2 e^{v t} e^{iwx}$ ; daí  $v = -iUw - kw^2$  e, então, a solução do esquema (4.5.3) satisfazendo a condição inicial (4.8.1) para quaisquer pontos  $x = j \Delta x$  da malha, nós obteremos substituindo (4.8.3) em (4.5.1) e, fazendo  $R = \Delta t / (\Delta x)^2$ :

$$\xi^{n+1} e^{i\beta j} = \xi^n e^{i\beta j} - UR\Delta x (\xi^n e^{i\beta j} - \xi^n e^{i\beta(j-1)}) + k (\xi^n e^{i\beta(j+1)} - 2\xi^n e^{i\beta j} + \xi^n e^{i\beta(j-1)}), \text{ com } i = \sqrt{-1}.$$

Daí, como previsto, se encontra:

$$\xi = 1 - (2kR + UR\Delta x)(1 - \cos\beta) - iUR\Delta x \sin\beta.$$

Na solução geral, o erro cometido pelo uso de soluções dadas pelo esquema de diferenças em vez do uso de soluções exatas em  $(x,t) = (j\Delta x, n\Delta t)$  é

$$e_j^n = C(j\Delta x, n\Delta t) - C_j^n = e^{v\Delta t n} e^{iwx} - \xi^n e^{iwx} = \left[ (e^{v\Delta t})^n - (\xi^n) \right] e^{iwx} \text{ e, assim } |e_j^n| \leq \left| (e^{v\Delta t})^n - \xi^n \right|.$$

Então  $(e^{v\Delta t})^n - \xi^n = (e^{v\Delta t} - \xi) (e^{v\Delta t(n-1)} + e^{v\Delta t(n-2)} \xi + \dots + e^{v\Delta t} \xi^{n-2} + \xi^{n-1})$  encontrando-se

$$\left| (e^{v\Delta t})^n - \xi^n \right| \leq M_{v,n} M_{\xi,n} |e^{v\Delta t} - \xi| n,$$

$$\text{onde } M_{v,n} = \sup_{0 \leq l \leq n-1} |e^{(v\Delta t)^l}| \text{ e } M_{\xi,n} = \sup_{0 \leq l \leq n-1} |\xi^l|$$

Fazendo  $n = t / \Delta t$ , obtemos  $|e_j^n| \leq M_{v,n} M_{\xi^n} t \left| \frac{e^{v\Delta t} - \xi}{\Delta t} \right|$

Se a solução exata é válida para qualquer  $t$ , então devemos ter  $M_{v,n}$  tão pequeno quanto uma constante fixada  $M_v$  para qualquer número inteiro e positivo  $n$ . Nós temos, então

$$|e_j^n| \leq M_v M_{\xi^n} t \left| \frac{e^{v\Delta t} - \xi}{\Delta t} \right| \quad (4.8.4)$$

Um esquema numérico satisfaz o critério de estabilidade se  $M_{\xi^n}$  é uniformemente limitado com respeito a  $n$ , isto é, se  $|\xi^n| \leq M_\xi$  para todo  $n$  inteiro e positivo, ou seja se  $|\xi| \leq 1$ , que é precisamente o critério de von Neumann.

Um esquema numérico é dito “consistente” se  $\left| \frac{e^{v\Delta t} - \xi}{\Delta t} \right| \rightarrow 0$ , quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$ , ambos, tendem a zero.

Um esquema numérico é dito “convergente” se  $|e_j^n| \rightarrow 0$ , quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$ , ambos tendem a zero. Sabemos que quando o esquema é convergente, as soluções por diferenças finitas aproximam-se da solução exata, quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$  tendem a zero.

A inequação (4.8.4) resume as noções de estabilidade, consistência e convergência: “Um esquema numérico que é consistente, é convergente se ele for estável”.

Vejam os se o esquema (4.5.3) é consistente:

$$\text{Temos } e^{v\Delta t} = e^{-(iUw + kw^2)\Delta t} = 1 - (iUw + kw^2)\Delta t + o((\Delta t)^2), \quad e$$

$$\begin{aligned} \xi &= 1 - \left( 2k \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} + U \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) (1 - \cos(w\Delta x)) - iU \frac{\Delta t}{\Delta x} \sin(w\Delta x) \\ &= 1 - \left( 2k \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} + U \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \frac{w^2}{2} (\Delta x)^2 (1 + o(w^2(\Delta x)^2)) - iU \frac{\Delta t}{\Delta x} (w\Delta x) (1 + o(w^2(\Delta x)^2)) \\ &= 1 - (iUw + kw^2)\Delta t + \Delta t(o(\Delta x)), \end{aligned}$$

obtemos

$$\frac{1}{\Delta t} (e^{v\Delta t} - \xi) = o(\Delta t + \Delta x)$$

e assim o esquema é consistente e de precisão de primeira ordem. Assim o esquema é convergente se a condição de estabilidade do critério de Von Neumann é satisfeita. Como nós havíamos visto anteriormente, ele é válido se

$$R(2K + U\Delta x) \leq 1 \quad (4.8.5)$$

Observe que:

O esquema de diferenças finitas é dito “incondicionalmente estável” se alcançarmos estabilidade quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$ , ambos tendem a zero, sem requerer qualquer relação entre  $\Delta x$  e  $\Delta t$ .

O esquema é “condicionalmente estável” se a estabilidade é alcançada quando  $\Delta x$  e  $\Delta t$  tendem a zero de uma maneira específica ( por exemplo, como na condição (4.8.5)).

O esquema explícito das diferenças finitas, a partir da equação (4.3.4) se generaliza para:

$$C_{j,l}^{n+1} = C_{j,l}^n - U \frac{\Delta t}{\Delta x} [C_{j,l}^n - C_{j-1,l}^n] - V \frac{\Delta t}{\Delta y} [C_{j,l}^n - C_{j,l-1}^n] \quad (4.8.6)$$

se  $\vec{u} = (U, V, 0)$ , com  $C(x, y, 0) = C_0(x, y)$ , enquanto que a equação (4.3.8) também pode ser estendida, de forma similar, se  $U = U(x)$  e  $V = V(y)$ .

## ANEXO 1

Determinação dos autovalores da matriz tridiagonal

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & & \\ & & & & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Usando as conhecidas fórmulas trigonométricas do seno da adição e da subtração de dois arcos  $\alpha$  e  $\beta$ :

$$\operatorname{sen}(\alpha + \beta) = \operatorname{sen} \alpha \cos \beta + \operatorname{sen} \beta \cos \alpha$$

$$\operatorname{sen}(\alpha - \beta) = \operatorname{sen} \alpha \cos \beta - \operatorname{sen} \beta \cos \alpha$$

para  $\operatorname{sen}\left(\frac{(j+1)k\pi}{n+1}\right)$  e para  $\operatorname{sen}\left(\frac{(j-1)k\pi}{n+1}\right)$ , com  $j, k = 1, 2, \dots, n$  obtém-se:

$$(I) \operatorname{sen}\left[\frac{(j+1)k\pi}{n+1}\right] = \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) + \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right) \text{ e}$$

$$\operatorname{sen}\left(\frac{(j-1)k\pi}{n+1}\right) = \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{-k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right)$$

$$(II) \operatorname{sen}\left(\frac{(j-1)k\pi}{n+1}\right) = \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right)$$

Adicionando (I) e (II), membro a membro:

$$\operatorname{sen}\left[\frac{(j-1)k\pi}{n+1}\right] + \operatorname{sen}\left[\frac{(j+1)k\pi}{n+1}\right] = 2 \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right) \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)$$

Multiplicando ambos os membros e, usando a propriedade da multiplicação, no 2ª membro:

$$-\operatorname{sen}\left(\frac{(j-1)k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left[\frac{(j+1)k\pi}{n+1}\right] = -2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right)$$

Adicionando  $2 \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right)$  a ambos os membros da equação acima:

$$2 \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left[\frac{(j-1)k\pi}{n+1}\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{(j+1)k\pi}{n+1}\right] = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \operatorname{sen}\left(\frac{jk\pi}{n+1}\right)$$

equação que é válida para  $j, k = 1, 2, \dots, n$

Fixando  $k$  e, fazendo  $j = 1, 2, \dots, n$ ; para

$$j = 1: \quad 2 \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) - 0 - \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)$$

$$j = 2: \quad 2 \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{3k\pi}{n+1}\right) = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right)$$

$$j = 3: \quad 2 \operatorname{sen}\left(\frac{3k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{4k\pi}{n+1}\right) = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \operatorname{sen}\left(\frac{3k\pi}{n+1}\right)$$

$$j = n-1: \quad 2 \operatorname{sen}\left[\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{(n-2)k\pi}{n+1}\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{nk\pi}{n+1}\right] = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \operatorname{sen}\left[\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right]$$

$$j = n: \quad 2 \operatorname{sen}\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right) - \operatorname{sen}\left[\frac{(n-1)k\pi}{n+1}\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{(n+1)k\pi}{n+1}\right] = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \operatorname{sen}\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right)$$

que pode ser colocada na forma de uma equação matricial:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ & 2 & -1 & & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{3k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right) \end{bmatrix} = \left[2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right] \begin{bmatrix} \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{3k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right) \end{bmatrix}$$

a qual mostra que os autovalores da matriz  $A$  são do tipo:

$$\lambda_k = 2 - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n+1}\right)$$

e os correspondentes autovetores associados à mesma matriz são:

$$v_k = \begin{bmatrix} \operatorname{sen}\left(\frac{k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{2k\pi}{n+1}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{3k\pi}{n+1}\right) \\ \dots \\ \operatorname{sen}\left(\frac{nk\pi}{n+1}\right) \end{bmatrix} \quad \text{com} \quad k = 1, 2, \dots, n$$

Dáí se conclui que o maior autovalor da matriz A é:  $\lambda_k = 2 - 2\cos\left(\frac{n\pi}{n+1}\right)$  e o menor

$$\lambda_k = 2 - 2\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right) > 0.$$

## ANEXO 2

Nas 7 páginas seguintes, são apresentados os programas computacionais, usados nesta Monografia, e desenvolvidos com o aplicativo MATLAB.

```

function semi
%programa do método semi-discreto, usando polinômios como função base%
%para a equação  $u_t = c(u_x) + w(uxx)$ , onde  $n = n_0$  de pontos no eixo X%
%m =  $n_0$  de pontos no eixo t,  $h = dt =$  passo, segundo a variável t e  $f(x)$ %
%é a função que rege a distribuição da temperatura u, ao longo do eixo X%
clc;
c = input('c = ');
w = input('w = ');
n = input('n = ');
m = input('m = ');
h = input('h = ');
f = input('f(x) = ', 's');
x0 = input('x0 = ');
dx = 1/(n+1);
l=0;
u=0;
    for i=1:n;
        for j=1:n;
            x(j)=x0+j*dx
            A(i,j)=x(j)^i*(1-x(j))
            B(i,j)=(i-(i+1)*x(j))*x(j)^(i-1)
            D(i,j)=i*(i-1 - (i+1)*x(j))*x(j)^(i-2)
            F=eval(f)
        end
        end
        E=c*B + w*D
        M=A - (h/2)*E
        N=A +(h/2)*E
        P=F'
        Z=inv(M)
        Y=Z*N
        Q=inv(A)
        T=Q*P
        for k=1:m
            if k==1
                l=T
                V=zeros(n,m)
                V(:,k)=l
            else
                l=Y*l
                V(:,k)=l
            end
        end
    end
end
end
end
u=A*V;
u
pause
u'
pause
plot(u)
title('GRAFICO DA FUNÇÃO u')
pause
mesh(u)
title('DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA u')

```

```

function semi
%programa do método semi-discreto, usando senos como função base para%
%a equação  $u_t = c(u_x) + w(u_{xx})$ , onde  $n = n_0$  de pontos no eixo X,  $m = m_0$ %
%de pontos no eixo t,  $h = dt =$  passo, segundo a variável t e  $f(x)$  é a%
%função que rege a distribuição da temperatura u, ao longo do eixo X %
clc;
c= input ('c=');
w= input ('w=');
n= input ('n=');
m= input ('m=');
h= input ('h=');
f= input ('f(x)=','s');
x0= input ('x0=');
dx= 1/(n+1);
l=0;
u=0;
for i=1:n;
    for j=1:n;
        x(j)=x0 + j*dx;
        A(i,j)=sin(i*pi*x(j));
        B(i,j)=i*pi*cos(i*pi*x(j));
        D(i,j)=-i^2*pi^2*sin(i*pi*x(j));
        F=eval(f);
    end
    end
E=c*B +w*D;
M=A - (h/2)*E;
N=A + (h/2)*E;
P=F';
Z=inv(M);
Y=Z*N;
Q=inv(A);
T=Q*P;
    for k=1:m
        if k==1
            l=T;
            V=zeros(n,m);
            V(:,k)=1;
        else
            l=Y*l;
            V(:,k)=1;
        end
    end
end
end
end
u=A*V;
u'
pause
plot(u)
title ('GRÁFICO DA FUNÇÃO u')
pause
mesh(u)
title ('DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA u')

```

```

function tri
%Programa em diferenças finitas, utilizando o método explícito para %
%resolver a equação  $ut = c(uxx)$ , difusão sem convecção, onde n= nº de%
%pontos no eixo X, d= nº de pontos no eixo t, v0= auto-função inicial%
%para a variável t, g(x) é a função que rege a distribuição da tempe-%
%ratura ao longo do eixo X,  $p=c.dt/(dx)^2$  e x0 é a abscissa inicial %
clc;
n=input('n=');
v0=input('v0=');
p=input('p=');
d=input('d=');
g=input('g(x(1))=', 's');
x0=input('x0=');
dx=1/(n+1);
L=0;
W=0;
v=0;
A=2*diag(ones(1,n))+diag(-ones(1,n-1),1)+diag(-ones(1,n-1),-1);
for j=1:n;
for m=1:d;
t=0;
for k=1:n;
s=0;
for l=1:n;
L(k)=2-2*cos(k*pi*dx);
W(j,k)=sin(j*k*pi*dx);
v(k,m)=v0*(1-p*L(k))^(m-1);
x(l)=x0+l*dx;
EV=eval(g);
b(k)=EV*sin(l*k*pi*dx);
s=s+b(k);
a(k)=s;
end
r(j,m)=a(k)*v(k,m)*W(j,k);
t=t+r(j,m);
end
u(j,m)=t;
end
end
end
u
pause
u'
pause
plot(u)
title('GRÁFICO DA FUNÇÃO u')
pause
mesh(u)
title('GRÁFICO DA DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA u')

```

```

function tri
%Programa em diferenças finitas, utilizando o método implícito, para %
%resolver a equação  $u_t = c(u_{xx})$ , da difusão sem convecção, onde  $n=n_0$  de %
%pontos no eixo X,  $d= n_0$  de pontos no eixo t,  $v_0=$  auto-função inicial %
%para a variável t,  $g(x)$  é a função que rege a distribuição da tempera%
%tura ao longo do eixo X,  $p= c \cdot dt / (dx)^2$  e  $x_0$  é a abscissa inicial %
clc;
n = input ('n=');
v0 = input ('v0=');
p = input ('p=');
d = input ('d=');
g = input ('g(x(1))=', 's');
x0 = input ('x0=');
dx = 1/(n + 1);
W = 0;
v = 0;
for j= 1:n
    for m = 1:d
        t = 0;
        for k = 1:n
            s = 0;
            for l = 1:n
                W(j,k) = sin(j*k*pi*dx);
                v(k,m) = v0*(1/(1+2*p*(1+cos(k*pi*dx))))^(m-1);
                x(l) = x0+l*dx;
                b(k) = eval(g)*sin(l*k*pi*dx);
                s = s+b(k);
                a(k) =s;
            end
            r(j,m) =a(k)*v(k,m)*W(j,k);
            t = t+r(j,m);
        end
        u(j,m) =t;
    end
end
end
end
u
pause
u'
pause
plot(u)
title('GRÁFICO DA FUNÇÃO u')
pause
mesh(u)
title('GRAFICO DA DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA U')

```

```

function tri
%Programa em diferenças finitas, utilizando o método de Crank-Nicolson, %
%resolver a equação da difusão sem convecção,  $u_t = c(u_{xx})$ , onde  $n = n_0$  de %
%pontos no eixo X,  $d = n_0$  de pontos no eixo t,  $v_0 =$  auto-função inicial pa %
%ra a variável t,  $g(x)$  é a função que rege a distribuição da temperatura %
%ao longo do eixo X,  $p = c \cdot dt / 2(dx)^2$  e  $x_0$  é a abscissa inicial %
clc;
n = input('n=');
v0= input('v0=');
p = input('p=');
d = input('d=');
g = input('g(x(1))=', 's');
x0= input('x0=');
dx= 1/(n+1);
L=0;
W=0;
v=0;
for j=1:n
for m=1:d
t=0;
for k=1:n
s=0;
for l=1:n
L(k)=2-2*cos(k*pi*dx);
W(j,k)=sin(j*k*pi*dx);
v(k,m)=v0*((1-p*L(k))/(1+p*L(k)))^(m-1);
x(l)=x0+l*dx;
b(k)=eval(g)*sin(l*k*pi*dx);
s=s+b(k);
a(k)=s;
end
r(j,m)=a(k)*v(k,m)*W(j,k);
t=t+r(j,m);
end
u(j,m)=t;
end
end
end
u
pause
u'
pause
plot(u)
title('GRÁFICO DA FUNÇÃO u')
pause
mesh(u)
title('GRAFICO DA DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA TEMPERATURA u')

```

```

function difefi
%Programa em diferenças finitas, utilizando o método explícito%
%para a equação da convecção (sem difusão):  $C_t + U(C_x) + C(U_x)$ , on%
%de  $U(x(j))$  e  $U(x(j+1))$  representam as velocidades do vento em%
% $x(j)$  e  $x(j+1)$ , respectivamente,  $M = n^o$  de pontos no eixo X,  $e =$ %
% $n^o$  de pontos no eixo t,  $dt =$ passo, segundo a variável t,  $[a,b] =$ %
%intervalo contido no eixo X,  $[c,d] =$ intervalo contido em  $[a,b]$ %
%Foi usada a mesma concentração inicial representada na fig. 1%
clc;
U= input ('U(x(j))=', 's');
V= input ('U(x(j+1))=', 's');
a= input ('a=');
b= input ('b=');
c= input ('c=');
d= input ('d=');
M= input ('M=');
e= input ('e=');
dt= input ('dt=');
dx= (b - a)/M;
K =dt/dx;
for n=1:e
if n==1
for j=1:M+1
x(j)=a+(j-1)*dx
if x(j)>= c & x(j)< d+dx
C(j,n)= 5
else
C(j,n)=0
end
end
else
for j=1:M
F=eval(U)
G=eval(V)
C(1,n)=C(1,1)
C(j+1,n)=C(j+1,n-1)-K*G*(C(j+1,n-1)-C(j,n-1))...
-K*(G-F)*C(j+1,n-1)
end
end
end
end
end
C
pause
plot(C)
pause
mesh(C)

```

## BIBLIOGRAFIA

- AZIZ, A. K. e LIU, J. L. A Weighted Least Squares Method for the Backward-Forward Heat Equation. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1991.
- BECKENBACH, Edwin F. Modern Mathematics for the Engineers. Editora Mc Graw-Hill, New York, USA. 1956.
- BELLOUT, Hamid. A criterion for blow-up of solutions to semilinear heat equations. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 19887.
- BENZINGER, Harold. Strong resolvent convergence of diffusion operators. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1985.
- BERTSCH, M. e HILMORST, D. A density dependent diffusion equation in population dynamics: stabilization to equilibrium. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1986.
- BOOR, C. e HOOG, F. Stability of Finite Difference Schemes for Two-Point Boundary Value Problems. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1986.
- CANNON, John. A Galer kin Procedure for the Diffusion Equation. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1987.
- CARSLAW, H. S. e JAEGER, J. C. Conduction of Heat in Solid. Oxford University Press, Oxford, USA. 1959.
- COHN, Stephen e DEE, Dick. Observability of Discretized Partial Differential Equations. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1988.
- CRANK, J. The Mathematic of Diffusion. Oxford University Press, Oxford, USA. 1989.
- ERVIN, V. e LAYTON, W. Satbility of Singular Boundary Value Problems and their Discretization by Finit Differences. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1989.
- FARLOW, Stanley J. Partial Differential Equations for Scientists & Engineers. John Wiley & Sons Inc., New York, USA. 1982.
- FRIEDMAN, Avner e LITIMAN, Walter. A Course in Solving Red-World Problems. SIAM'S Report (Society for Industrial and Apllied Mathematics), Philadelphia, USA. 1994.
- FUNARO, Daniel. A New Scheme for the Approximation of Advection-Diffusion Equations by Collocation. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1993.

- HALL, Charles A. e PORSCHING, Thomas A. Numerical Analysis of Partial Differential Equations. Prentice-Hall Inc., New Jersey, USA. 1980.
- HILL, David R. Experiment in Computational Matrix Algebra. Random House, Inc. New York, USA. 1988.
- HOLLIS, Selwyn, MARTIN, Robert Jr. e PIERRE, Michel. Global existence and bouw deduess in reaction-diffusion systems. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1987.
- MACCAMY, Richard C. e MIZEL, Victor J. Linear Analysis and Differential Equations. The Mac Millan Company, London, England. 1969.
- MATHEWS, Jon e WALTER, R. L. Mathematical Methods of Physics W. A. Benjamin Inc., New York, USA. 1965.
- NOCHETTO, Ricardo e VERDI, Claudio. Approximation of Degenerate Parabolic Problems Using Numerical Integration. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1988.
- ORTEGA, James M. e POOLE JR., William G. An Introduction To Numerical Methods For Differential Equations. Pitman Publisching Inc., Marshfield, Masssachusetts, USA. 1981.
- OZISIK, M. Necati. Heat Conduction. John Wiley & Sons Inc., New York, USA. 1980.
- RAVEN, Francis H. Mathematics of Engineering Systems. Editora MC Graw-Hill, New York, USA. 1966.
- REDLINGER, Reinhard. On Volterra's population equation with diffusion. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1985.
- SCHELKUNOFF, S.A. Applied Mathematics for Engineers and Scientists. D. Van Nostrand Inc., Princeton, New Jersey, USA. 1957.
- SMITH, G. D. Numerical Solution of Partial Differential Equations. Oxford University Press, Oxford, USA. 1985.
- TADMOR, Eitan. Stability Analysis of Finite-Difference, Pseudospectral and Fourier-Galerkin Approximation for Time-Depend Problems. SIAM'S Review, Philadelphia, USA. 1987.
- TROY, William C. The existence of bounded solutions of a semilinear heat equation. SIAM'S Report, Philadelphia, USA. 1987.