

Métodos Numéricos Para Resolução de EDOs

Alunos: Lucas Carvalho de Borba (18104094) e Anna Luíza Lima Zortéa (18104091)

Professor: Diogo Nardelli Siebert ; Séries e Equações Diferenciais

1. Resumo

Este texto relata a aplicação de diferentes métodos numéricos para a resolução de um modelo matemático, fazendo a comparação entre os métodos e os parâmetros necessários para conseguir modelar o problema com precisão. A equação utilizada como referência para o estudo dos métodos vem da modelagem da dinâmica de bolhas de cavitação na água, um fenômeno de grande interesse de cientistas e engenheiros, pois seus efeitos, quando controlados, possuem aplicações nas mais diversas áreas de conhecimento. A equação conhecida como Equação de Rayleigh-Plesset, é obtida da Equação de Navier-Stokes, que é a base para o estudo da dinâmica de fluidos.

Os métodos numéricos utilizados neste trabalho foram introduzidos na disciplina de Séries e Equações Diferenciais, e são, nomeadamente, os métodos de Euler, Heun (ou Euler Melhorado), Runge-Kutta, e Runge-Kutta-Fehlberg. Estes métodos, ferramentas já bem estabelecidas para a resolução numérica de EDOs, foram implementados em Python possuem diferentes parâmetros e ajustes a serem feitos a fim de atingir o resultado desejado, que são explorados também neste texto.

2. Introdução

A cavitação é um fenômeno que ocorre quando um fluido no estado líquido em alta velocidade gera zonas de pressão baixas o suficiente para que este evapore a temperatura ambiente, formando pequenas bolhas que rapidamente colapsam. Ao colapsarem, as bolhas dissipam energia na forma de ondas de choque, que acabam por danificar equipamentos.

O estudo das cavitações tem aplicações nas mais variadas áreas: desde o projeto de sistemas hidráulicos até a biologia e medicina. As ondas de choque geradas por essas bolhas causam o desgaste acelerado de peças, e podem levar a falhas catastróficas de sistemas inteiros, e por isso engenheiros otimizam os seus sistemas de forma a minimizar a ocorrência deste fenômeno. Avanços na medicina moderna trouxeram técnicas inovadoras para o tratamento de diversas doenças, e as ondas de choque se provaram eficazes em tratamentos como a litotripsia extracorpórea e a histotripsia, utilizadas para tratar cálculos renais e tumores respectivamente. Essas técnicas trouxeram a necessidade de estudos do comportamento de cavitações em um meio viscoelástico, como os tecidos do corpo.

Crustáceos marinhos da classe *Stomatopoda* possuem um incrível mecanismo de defesa que utilizam para caçar suas presas. Seus apêndices são capazes de desferir golpes com aceleração equivalente a uma bala de calibre 22, causando cavitações na água, cuja onda de choque o auxilia a quebrar conchas e atordoar outros animais de pequeno porte. O colapso violento da pequena bolha leva um aumento de temperatura que chega se equiparar à superfície solar, e reações químicas que ocorrem no interior da bolha causam um fenômeno que ainda não é completamente compreendido pelos cientistas denominado sonoluminescência.

A dinâmica dos parâmetros como pressão, velocidade e viscosidade de fluidos é regida pela equação de Navier-Stokes, cuja derivação assumindo uma simetria esférica (considerando apenas o fluxo na direção radial) para as bolhas resultam no modelo matemático para a dinâmica de uma bolha de cavitação, representado pela Equação de Rayleigh-Plesset:

$$\rho \left(R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2 \right) = p_{gas} - p_0 - p(t) - 4\mu \frac{\dot{R}}{R} - \frac{2S}{R}$$

Em que $R(t)$ representa o raio da bolha, $p_{gas}(t)$ é a pressão variável do gás dentro da bolha, p_0 é a pressão medida em qualquer ponto fora da bolha (aproximado para 1 atm), $p(t)$ é a pressão acústica a que a bolha está submetida, μ é a viscosidade cinemática do fluido, ρ é a sua densidade, e S é a tensão superficial na interface entre o gás interno e o fluido externo. O termo p_{gas} é representado pela equação de estado de Van Der Waals:

$$p_{gas}(t) = \left(p_0 + \frac{2S}{R_0} \right) \left(\frac{R_0^3 - h^3}{R^3(t) - h^3} \right)^\gamma$$

Em que h é o raio característico de Van Der Waals para o gás contido na bolha (neste caso considerado o Argônio, uma vez que é um gás inerte normalmente presente na água marinha e não participa das reações químicas que ocorrem nas condições internas da bolha, sendo apontado como o principal componente do fenômeno de sonoluminescência), γ é o índice adiabático (razão de calores específicos) do gás, e R_0 é o raio de equilíbrio da bolha. O termo $p(t)$ é representado por uma senoide dada por:

$$p(t) = -p_a \sin(\omega t)$$

Em que p_a é amplitude da oscilação da pressão acústica, e ω é a frequência angular ultrassônica natural de ressonância do recipiente, responsável pela vibração acústica a que a bolha está submetida.

A equação RP anterior assume que o fluido em questão é incompressível, e portanto é um modelo simplificado. Um modelo mais preciso leva em consideração a pequena compressibilidade do fluido, responsável pela propagação da onda de choque no colapso da bolha, que age como um fator de amortecimento por ser uma forma de dissipação da energia acústica absorvida pela bolha.

$$\rho \left(R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2 \right) = p_{gas} - p_0 - p(t) - 4\mu \frac{\dot{R}}{R} - \frac{2S}{R} + \frac{R}{c} \frac{d}{dt} p_{gas}$$

$$\frac{d}{dt} p_{gas} = -3\gamma p_{gas} \frac{R^2 \dot{R}}{R^3 - h^3}$$

3. Metodologia

Para possibilitar a resolução da equação diferencial ordinária de segunda ordem não homogênea referente ao modelo matemático através de métodos numéricos, algumas manipulações foram necessárias. Primeiramente, foi necessário reescrever a equação na forma geral $\ddot{y} = F(t, y, \dot{y})$, chegando ao resultado a seguir:

$$\ddot{R} = \left(p_{gas} - p_0 - p(t) - 4\mu \frac{\dot{R}}{R} - \frac{2S}{R} + \frac{R}{c} \frac{d}{dt} p_{gas} \right) \frac{1}{\rho R} - \frac{3}{2} \frac{\dot{R}^2}{R}$$

Os métodos numéricos utilizados neste trabalho se limitam a resolução de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem somente, portanto para que fosse possível a resolução deste problema, foi realizada a substituição de variáveis $u = \dot{R}$, $\dot{u} = \ddot{R}$, e então conseguimos reescrever a equação na forma de um sistema de duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem:

$$\begin{cases} \dot{R} = u \\ \dot{u} = \left(p_{gas} - p_0 - p(t) - 4\mu \frac{u}{R} - \frac{2S}{R} + \frac{R}{c} \frac{d}{dt} p_{gas} \right) \frac{1}{\rho R} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{R} \end{cases}$$

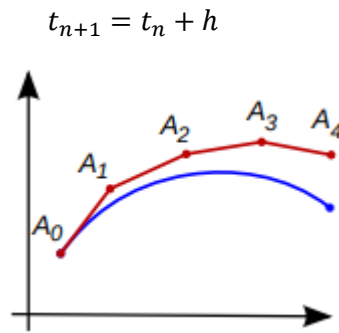
Para fins de simulação, os parâmetros da equação foram estipulados com base nas propriedades físicas da água, obtidos através dos estudos práticos referenciados.

Tensão Superficial (S)	72.87×10^3	N/m
Densidade (ρ)	998.2	kg/m^3
Índice Adiabático (γ)	5/3	-
Velocidade do Som (c)	1481	m/s
Viscosidade Cinemática (μ)	0.89×10^{-3}	$Pa.s$
Pressão Ambiente (p_0)	101.325	kPa
Raio Estático (Equilíbrio) (R_0)	2.0×10^{-6}	m
Raio do Gás (h)	$R_0/8.86$	m
Frequência Ultrassônica (ω)	$2\pi f$; $f = 26.5$	kHz

O primeiro método utilizado para a resolução de sistemas de EDOs é o Método de Euler. Ele consiste em utilizar a reta tangente a um ponto da função para calcular o próximo ponto, distante do ponto inicial em um valor $\Delta t = h = t_{n+1} - t_n$. A fórmula iterativa do método de Euler é dada pela seguinte expressão:

$$y_{n+1} = y_n + y'(t_n)h$$

$$y_{n+1} = y_n + f(t_n, y_n)h$$

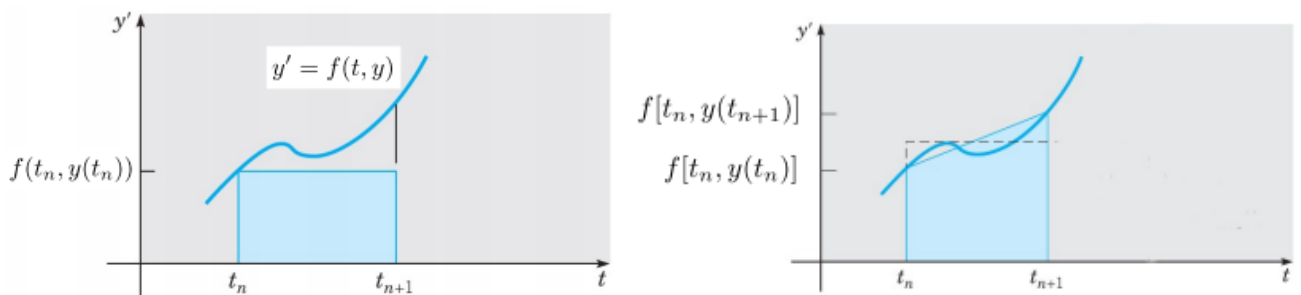


O erro local do método de Euler calculado através da diferença entre o valor real da função em determinado ponto, e o valor aproximado através do método numérico, é proporcional ao valor de h^2 , e o erro acumulado é proporcional ao valor de h . Inferimos então, que o valor de h (denominado “passo” do método) é uma referência da precisão da resolução utilizando este método. Quanto menor o valor de h , menor será o erro deste método.

A fórmula iterativa do método de Euler pode ser entendida como a integração dos dois lados de uma equação diferencial, que possui como resultado a seguinte expressão:

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y) dt \approx f(t_n, y_n)h$$

A integral do lado direito da equação é aproximada pela área do retângulo de base $\Delta t = h$ e altura $f(t_n, y_n)$, e portanto possui um erro referente a diferença entre as alturas nos pontos $f(t_n, y_n)$ e $f(t_{n+1} = t_n + h, y_{n+1})$. Visando uma melhor aproximação desta área e consequentemente da integral, podemos aproximar a integral pela área do trapézio formado quando também se considera o valor da função no instante de tempo $t_{n+1} = t_n + h$.



Essa é a definição do método de Euler melhorado, ou método de Heun, cuja fórmula iterativa é dada pela seguinte expressão:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(K1 + K2)$$

$$K1 \equiv f(t_n, y_n)$$

$$K2 \equiv f(t_{n+1}, y_n + hK1)$$

Como mencionado anteriormente, o método de Euler possui erro local proporcional a h^2 , sendo portanto um método com erro de segunda ordem. O método de Heun possui um erro de terceira ordem, seguindo esta mesma lógica. Esses dois métodos pertencem a uma classe chamada de métodos de Runge-Kutta. Esses métodos são obtidos através da expansão por série de Taylor exigindo um erro local de determinada ordem. Os métodos já citados são exemplos de métodos de Runge-Kutta com erros de segunda e terceira ordem respectivamente.

O método clássico de Runge-Kutta possui erro local de quinta ordem, e sua fórmula iterativa é muito similar à do método de Heun, sendo feita a média ponderada de 4 coeficientes $K1, K2, K3$ e $K4$:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K1 + 2K2 + 2K3 + K4)$$

$$K1 \equiv f(t_n, y_n)$$

$$K2 \equiv f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K1h)$$

$$K3 \equiv f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K2h)$$

$$K4 \equiv f(t_n + h, y_n + K3h)$$

Em determinados casos, seria útil poder variar o passo h em determinados pontos da função para conseguir medir pequenas variações no seu valor. O método de Runge-Kutta-Fehlberg é um método de Runge-Kutta que calcula a diferença entre um valor calculado com erro de sexta ordem e outro calculado com erro de quinta ordem. Essa diferença é utilizada para estimar o erro local a cada iteração, e se esse valor ultrapassar uma determinada tolerância previamente estipulada, a função tem seu passo h multiplicado por um fator q dado por:

$$q = \alpha \left(\frac{\epsilon h}{|y_{n+1}^k - y_{n+1}^{k+1}|} \right)^{1/k}$$

Em que ϵ é a tolerância e k é a ordem do erro local. O método de Runge-Kutta-Fehlberg é um método chamado de “Adaptativo”, pois sua precisão se adapta automaticamente de acordo com a necessidade ao decorrer do cálculo. Esse método é muito útil para equações que possuam variações bruscas em seu valor em espaços curtos de tempo. As fórmulas iterativas e seus coeficientes utilizados no código são os seguintes:

$$y_{n+1}^5 = y_n + \left(\frac{16}{135}K1 + \frac{6656}{12825}K3 + \frac{28561}{56430}K4 - \frac{9}{50}K5 + \frac{2}{55}K6 \right)h$$

$$y_{n+1}^4 = y_n + \left(\frac{25}{216}K1 + \frac{1408}{2565}K3 + \frac{2197}{4104}K4 - \frac{1}{5}K5 \right)h$$

$$K1 \equiv f(t_n, y_n)$$

$$K2 \equiv f(t_n + \frac{1}{4}h, y_n + \frac{1}{4}K1h)$$

$$K3 \equiv f(t_n + \frac{3}{8}h, y_n + h \left(\frac{3K1 + 9K2}{32} \right))$$

$$K4 \equiv f(t_n + \frac{12}{13}h, y_n + h \left(\frac{1932K1 - 7200K2 + 7296K3}{2197} \right))$$

$$K5 \equiv f(t_n + h, y_n + h \left(\frac{439}{216}K1 - 8K2 + \frac{3680}{513}K3 - \frac{845}{4104}K4 \right))$$

$$K6 \equiv f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + h \left(-\frac{8}{27}K1 + 2K2 - \frac{3544}{2565}K3 + \frac{1859}{4104}K4 - \frac{11}{40}K5 \right))$$

4. Resultados

Diversos testes do código foram realizados ao longo do trabalho. As funções implementadas para cada método foram testadas utilizando um sistema de equações simples proposto pelo professor em aula, e todos os resultados saíram como o esperado. Entretanto, ao utilizar as funções para a resolução da equação RP, ocorriam erros ou os resultados eram incoerentes. Durante a depuração do código, foi identificada a causa provável do problema.

O fenômeno da cavitação acontece em uma escala muito reduzida. Em certos momentos, com o raio da bolha suficientemente próximo de zero, esse valor era utilizado em partes da equação elevado à terceira potência e subtraído de um número de ordem de grandeza semelhante, e o resultado muitas vezes é interpretado pelo programa como 0. Quando isso acontece em um denominador qualquer, o cálculo retorna o valor NaN (*Not a Number*), invalidando todo o processo a partir daquele ponto. A representação numérica deste fenômeno, portanto, necessita de uma ferramenta de alta precisão como MATLAB para que a simulação ocorra da forma correta.

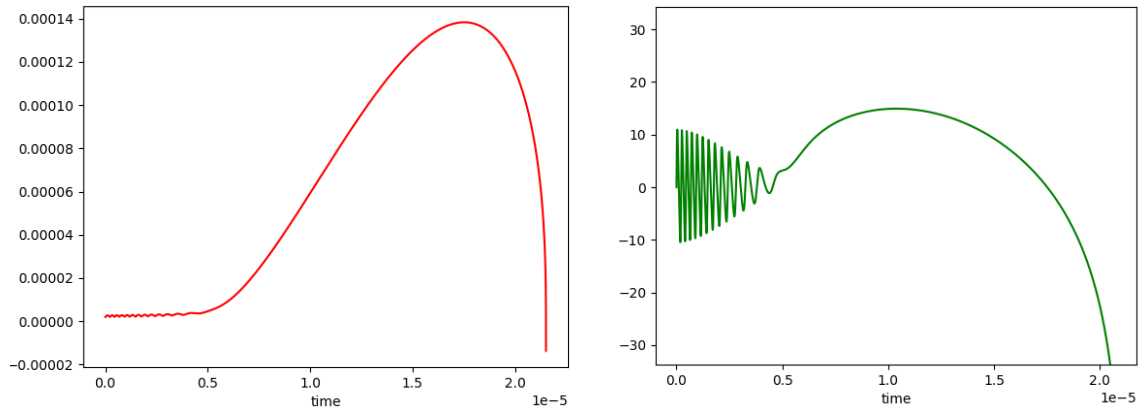
Considerando isso, foram necessárias algumas simplificações à equação utilizada. O termo referente à compressibilidade do fluido foi substituído por um modelo simplificado a fim de reduzir a ocorrência de problemas de truncamento. O sistema simplificado utilizado foi o seguinte:

$$\begin{cases} \dot{R} = u \\ \dot{u} = \left(p_{gas} - p_0 - p(t) - 4\mu \frac{u}{R} - \frac{2S}{R} + \left(\frac{2S}{R_0} + p_0 \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3k} \right) \frac{1}{\rho R} - \frac{3u^2}{2R} \end{cases}$$

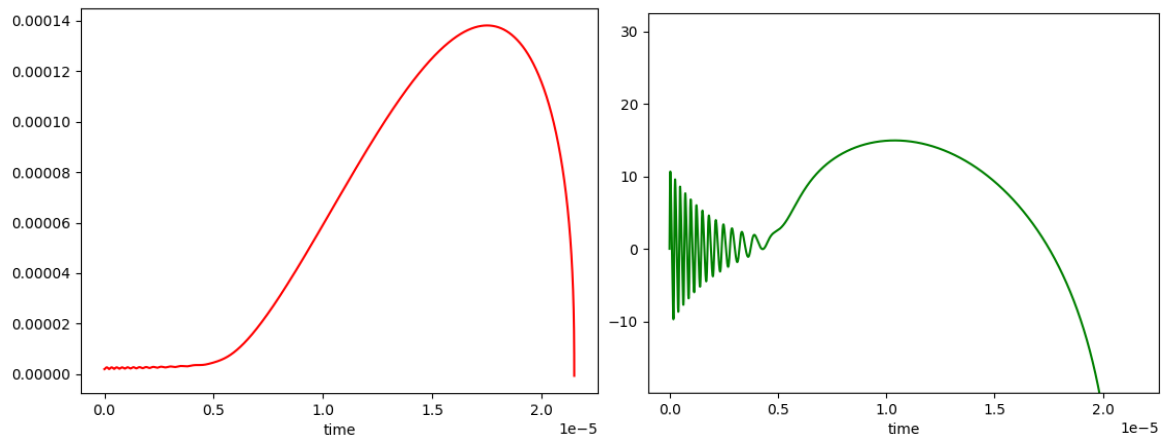
A resolução foi feita utilizando os parâmetros descritos na tabela abaixo:

Tensão Superficial (S)	72.87×10^3	N/m
Densidade (ρ)	998.2	kg/m^3
Índice Adiabático (γ)	5/3	-
Velocidade do Som (c)	1481	m/s
Viscosidade Cinemática (μ)	8.9×10^{-4}	$Pa.s$
Pressão Ambiente (p_0)	10.1325×10^5	Pa
Raio Estático (Equilíbrio) (R_0)	2.0×10^{-6}	m
Raio do Gás (h)	$R_0/8.86$	m
Frequência Ultrassônica (ω)	$2\pi f; f = 26500$	Hz
Amplitude da pressão (p_a)	1367900	Hz
k	1.33	-

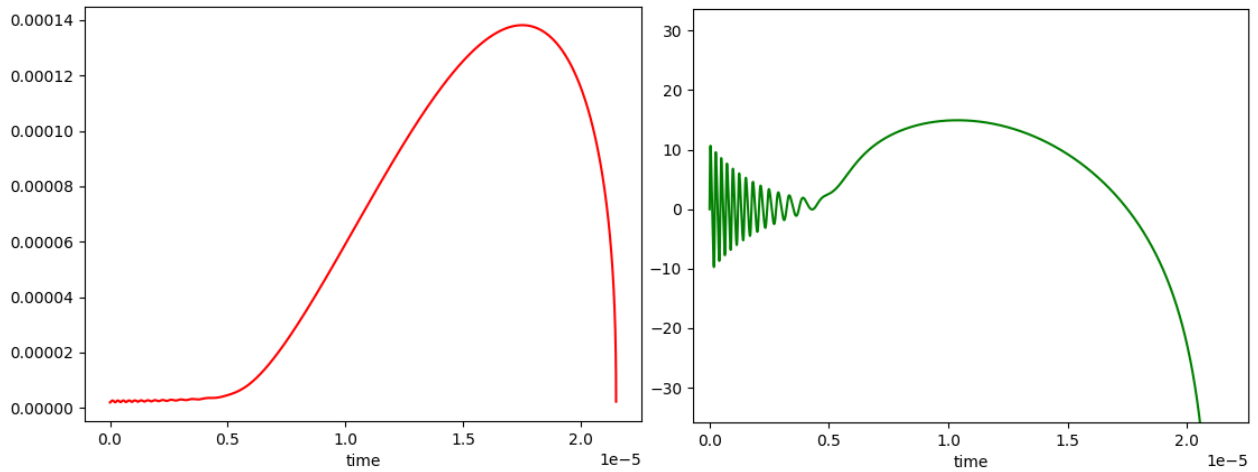
Ao utilizar o método de Euler para a resolução do sistema, cujas condições iniciais são $R(0) = 2,0 \times 10^{-6} m$, $R'(0) = 0$, com 100.000 iterações e com um passo $h = 1,0 \times 10^{-9}$, foi obtido o seguinte resultado:



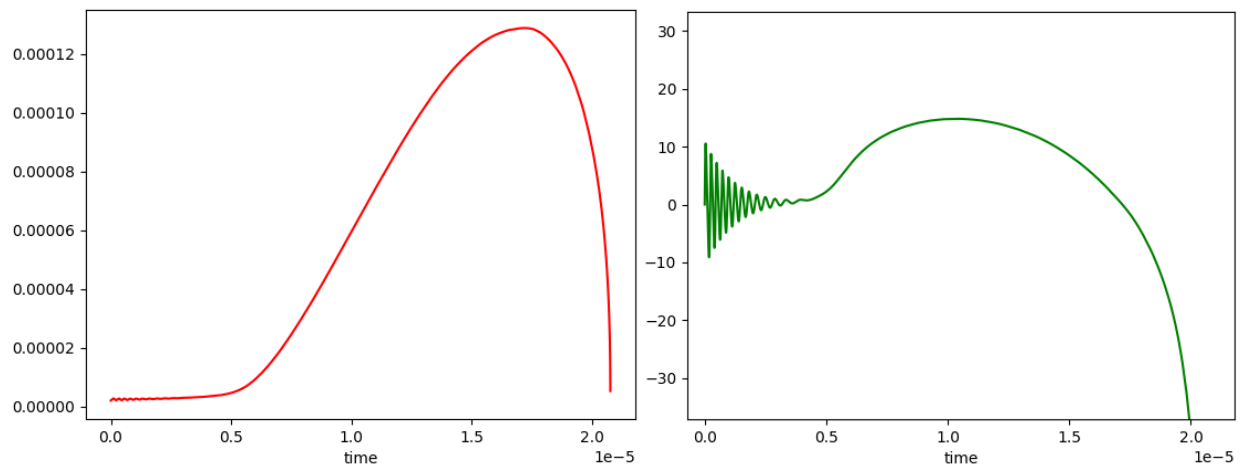
Em vermelho, o gráfico da função $R(t)$, que mede o tamanho do raio da bolha em função do tempo. Em verde, o gráfico da primeira derivada de $R(t)$, representando a velocidade radial das paredes da bolha em função do tempo. No método de Heun sob as mesmas condições:



No método de Runge-Kutta sob as mesmas condições:



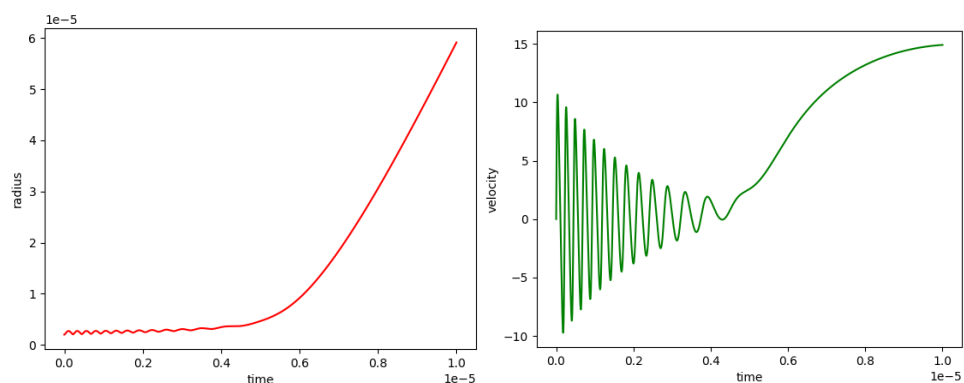
No método de Runge-Kutta-Fehlberg, sob as mesmas condições e a tolerância $\epsilon = 1,0 \times 10^{-7}$:



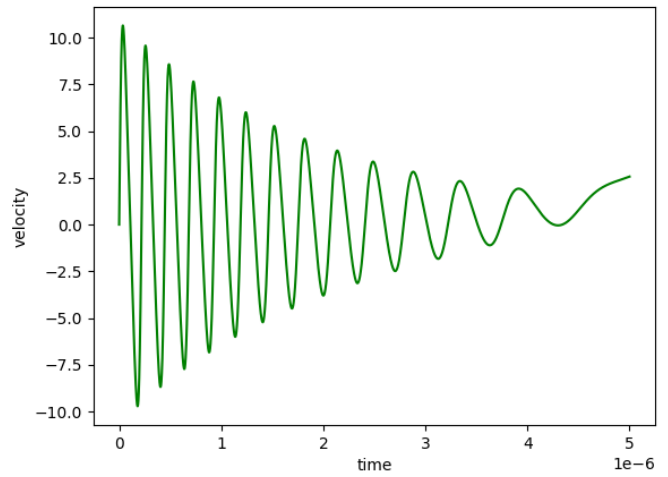
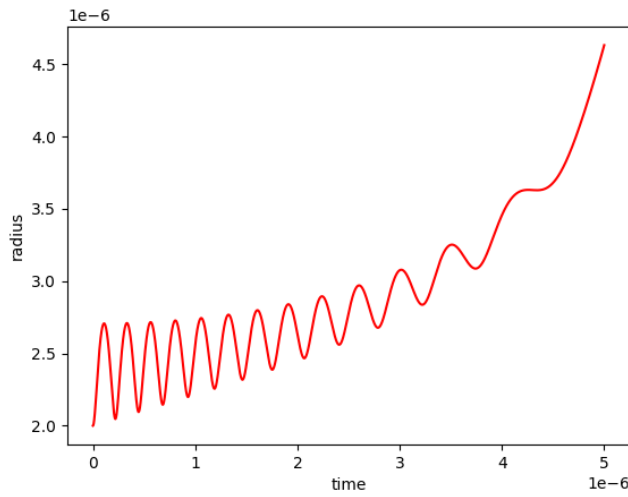
Percebe-se uma leve diferença no resultado dos métodos aplicados. A função que utiliza o método de Euler produziu o resultado mais discrepante entre as quatro. No gráfico da velocidade radial, nota-se que o decaimento da amplitude de oscilação acontece em um ritmo diferente dos outros resultados. Isso se deve à baixa precisão do método, que é o mais simples entre os quatro analisados. Além dele, o gráfico do raio em função do tempo obtido pelo método de Runge-Kutta-Fehlberg possui um pico cerca de 0,00002 m mais baixo que nos outros gráficos. Muito provavelmente isso ocorre pois ao se aproximar do pico, o passo h do método diminui, aumentando então a precisão da aproximação numérica naquela região.

Para comparar o efeito da variação do passo h no gráfico obtido, foi utilizada apenas a função que resolve a EDO por Runge-Kutta, por se mostrar a mais precisa e estável entre as quatro durante os testes. A quantidade de iterações permaneceu a mesma (100.000) a menos que especificado.

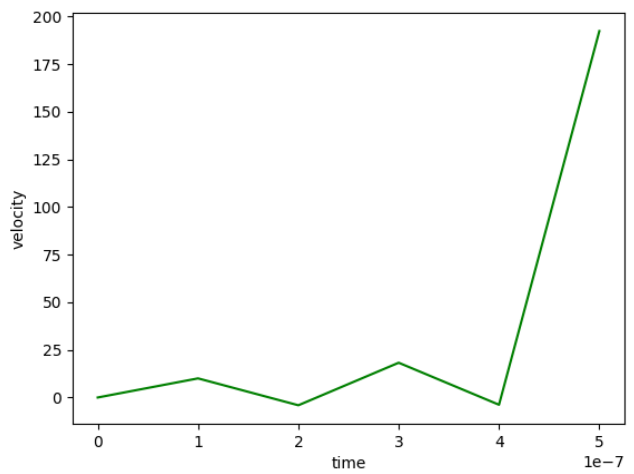
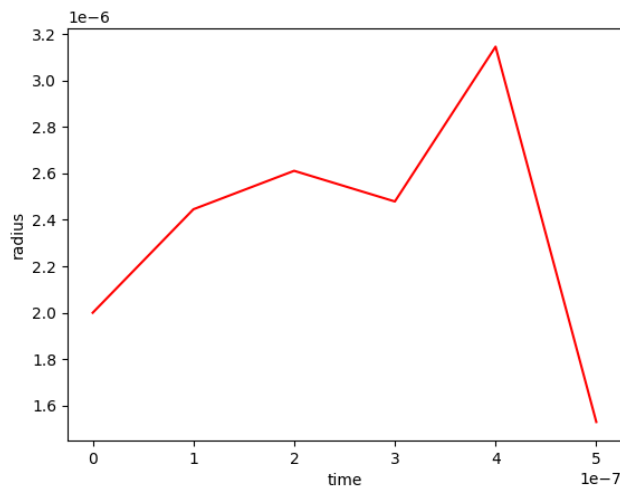
Com $h = 1,0 \times 10^{-10}$, não se percebem mudanças drásticas, apenas o período total do fenômeno calculado é reduzido à metade. Com isso conseguimos visualizar o período inicial da bolha com mais detalhes.



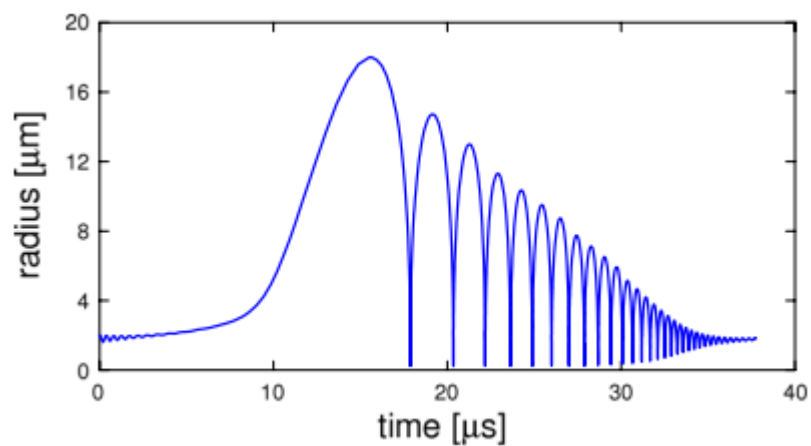
Com $h = 1,0 \times 10^{-11}$ e 500.000 iterações, os detalhes ficam ainda mais nítidos.

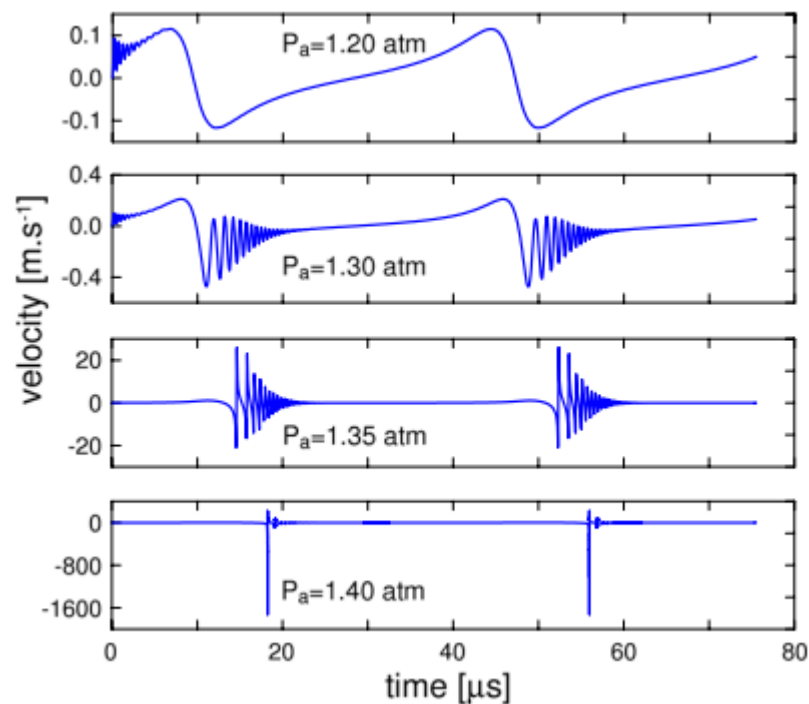


Reduzindo o passo para $h = 1,0 \times 10^{-7}$ e retornando o número de iterações a 100.000, o método não é capaz de representar com clareza o comportamento da função, e o resultado já não faz mais sentido.



Como mencionado anteriormente, quando o raio da bolha chega muito próximo de zero, a função “quebra” por não conseguir representar os números com a precisão necessária. Apesar disso, os resultados obtidos se assemelham à primeira oscilação de uma bolha de cavitação apresentada na literatura disponível sobre o assunto.





Entretanto, o pico da oscilação parece estar duas ordens de grandeza maior na simulação realizada neste trabalho, e isso provavelmente se deve à simplificação da equação utilizada, e também à diferença dos parâmetros iniciais da equação. Apesar disso, a solução foi satisfatória em conseguir representar os momentos iniciais do fenômeno com uma boa semelhança aos estudos já publicados sobre o tema.

5. Conclusão

Equações diferenciais são uma ferramenta muito poderosa para modelar fenômenos reais com extrema precisão. Suas aplicações vão muito além da engenharia, e os modelos matemáticos que as utilizam fizeram grande diferença no corpo de conhecimento das mais diversas áreas. Esses modelos na maioria das vezes não possuem solução analítica, acabam por necessitar de soluções numéricas, e por isso os métodos analisados neste trabalho são ferramentas muito importantes para entender os mais diversos fenômenos.

Apesar de não conseguir simular o fenômeno da cavitação por inteiro, devido à limitações da própria plataforma utilizada para análise, este estudo foi eficaz em mostrar o funcionamento dos métodos, as diferenças entre elas, as suas limitações, e o efeito dos diferentes parâmetros no resultado final.

6. Referências Bibliográficas

- [1]. https://en.wikipedia.org/wiki/Rayleigh%E2%80%93Plesset_equation
- [2]. https://www.researchgate.net/publication/340741680_Numerical_Integration_of_the_Rayleigh-Plesset_Equation
- [3]. https://pt.wikipedia.org/wiki/Tens%C3%A3o_superficial
- [4]. <http://mineralis.cetem.gov.br/bitstream/cetem/1072/1/Cap%2027%20Tens%C3%A3o%20Superficial.pdf>
- [5]. <https://www.materiais.gelsonluz.com/2018/12/viscosidade-cinematica-da-agua.html>
- [6]. <https://de.mathworks.com/matlabcentral/answers/311160-rayleigh-plesset-equation-problem-with-ode45>
- [7]. <https://scicomp.stackexchange.com/questions/34084/numerical-solution-to-rayleigh-plesset-equation-in-python>
- [8]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/34/3/679>
- [9]. https://www.youtube.com/watch?v=m78_sOEadC8
- [10]. <https://www.youtube.com/watch?v=wTNbsKX4OV0>

[11]. https://www.youtube.com/watch?v=puVxGnl_3y8

[12]. <https://www.youtube.com/watch?v=OubvTOHWTms&t=229s>