Mecânica dos Fluidos Computacional

Métodos de Diferenças Finitas para Problemas Unidimensionais

Iury Igreja

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional
Departamento de Ciência da Computação
Universidade Federal de Juiz de Fora
iuryigreja@ice.ufjf.br

Conteúdo

- Problema Difusivo ou Elíptico
- Condições de Contorno
- Problema Difusivo-Convectivo
- Problema Difusivo Transiente

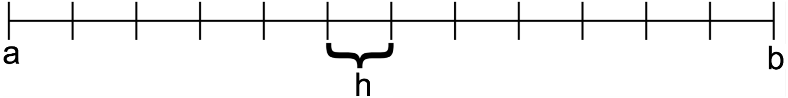
Problema Difusivo ou Elíptico

Seja o domínio $\Omega = [a, b]$*, dado* α*,* β *e* $f(x)$*, encontrar* $u(x)$*, com* $x \in [a, b]$*, tal que:*

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = f(x) \tag{1}$$
$$u(a) = \alpha \qquad u(b) = \beta$$

Discretização do problema

Particionando o domínio $\Omega = [a, b]$ em partes iguais h, onde $h = (b - a)/Nel$ é a dimensão do elemento, $Nel = J - 1$ o número de elementos da malha e J o número de nós da malha que podem ser localizados por $x_j = jh$, com $j = 1, 2, ..., J - 1$, $x_0 = a$ e $x_J = b$.



Aproximação por diferenças finitas central:

$$\frac{d^2u}{dx^2} \approx \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2}$$

ou ainda, para o problema elíptico (1):

$$-\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = f(x_j)$$

com $u_0 = \alpha$ e $u_J = \beta$.

Consistência

Expandindo em série de Taylor os termos $u(x_j + h)$ e $u(x_j - h)$ e truncando no termo de derivada quarta:

$$u(x_j+h) = u(x_j)+h\frac{du}{dx}(x_j)+\frac{h^2}{2!}\frac{d^2u}{dx^2}(x_j)+\frac{h^3}{3!}\frac{d^3u}{dx^3}(x_j)+\frac{h^4}{4!}\frac{d^4u}{dx^4}(\xi_j^1)$$

$$u(x_j-h) = u(x_j)-h\frac{du}{dx}(x_j)+\frac{h^2}{2!}\frac{d^2u}{dx^2}(x_j)-\frac{h^3}{3!}\frac{d^3u}{dx^3}(x_j)+\frac{h^4}{4!}\frac{d^4u}{dx^4}(\xi_j^2)$$

com $\xi_j^1 \in (x_j, x_j + h)$ e $\xi_j^2 \in (x_j - h, x_j)$. Somando as expansões e rearrumando os termos, geramos:

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x_j) = \frac{u(x_j + h) - 2u(x_j) + u(x_j - h)}{h^2} + \tau_j$$

onde

$$\tau_j = -\frac{h^2}{4!}\left(\frac{d^4u}{dx^4}(\xi_j^1) + \frac{d^4u}{dx^4}(\xi_j^2)\right)$$

De acordo com o erro de truncamento, este método apresenta convergência de ordem 2.

Estratégia de Resolução

Problema: *achar* u_j*, com* $j = 1, 2, ..., J - 1$*, tal que:*

$$-\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = f(x_j)$$

com condições de contorno

$$u_0 = \alpha \qquad u_J = \beta$$

O sistema de equações para cada j pode ser montado como:
para $j = 1$*,*

$$-\frac{u_2 - 2u_1 + \alpha}{h^2} = f(x_1)$$

ou ainda

$$-\frac{u_2 - 2u_1}{h^2} = f(x_1) + \frac{\alpha}{h^2}$$

para $j = 2$*,*

$$-\frac{u_3 - 2u_2 + u_1}{h^2} = f(x_2)$$

Cont....

para $j = 3$,

$$-\frac{u_4 - 2u_3 + u_2}{h^2} = f(x_3)$$

$$\vdots$$

para $j = J - 1$,

$$-\frac{\beta - 2u_{J-1} + u_{J-2}}{h^2} = f(x_{J-1})$$

ou ainda

$$-\frac{-2u_{J-1} + u_{J-2}}{h^2} = f(x_{J-1}) + \frac{\beta}{h^2}$$

Cont....

A partir das equações para cada indice j, podemos gerar o seguinte sistema linear:

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ \vdots \\ u_{J-2} \\ u_{J-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) + \frac{\alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \\ \vdots \\ f(x_{J-2}) \\ f(x_{J-1}) + \frac{\beta}{h^2} \end{bmatrix}$$

Obs.: Por se tratar de um sistema linear tridiagonal, podemos utilizar além das metodologias clássicas de resolução de sistemas lineares ,eliminação de Gauss, LU, Cholesky..., o método direto de Thomas ou **algoritmo de Thomas**.

Resultados Numéricos

Em um domínio $\Omega = [a, b] = [0, 1]$, escolhendo $f(x) = \pi^2 \sin(\pi x)$, estamos interessados em resolver o seguinte problema:

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} = \pi^2 \sin(\pi x)$$
$$u(0) = u(1) = 0$$

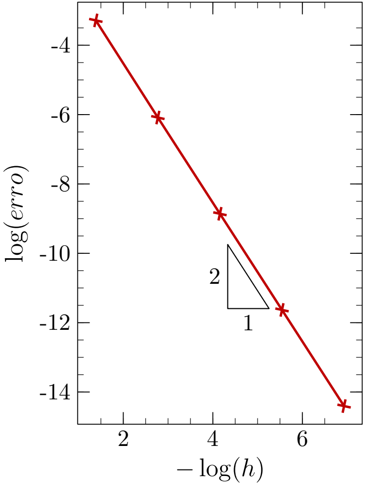
O problema em questão apresenta a seguinte solução exata:

$$u(x) = \sin(\pi x)$$

que satisfaz as condições de contorno $u(0) = u(1) = 0$. Adotando refinamentos sucessivos de malha com $Nel = 4^i$ $(i = 1, 2, 3, 4, 5)$, são gerados resultados comparando solução exata com aproximada e testes de convergência com o intuito de validar a metodologia e o código computacional.

Taxa de convergência

Resultados para $Nel = 4, 16, 64, 256, 1024$ elementos.



Observação: erro obtido na norma do máximo, ou seja,

$$\|u_j - u(x_j)\|_\infty = \max_{0\leq j\leq J} |u_j - u(x_j)|.$$

Método de alta ordem

Uma aproximação de quarta ordem para o problema diferencial de segunda ordem que estamos abordando pode ser escrito como:

$$\frac{d^2u}{dx^2} \approx -\frac{1}{12h^2}(u_{j-2} - 16u_{j-1} + 30u_j - 16u_{j+1} + u_{j+2}).$$

Assim, o problema modelo abordado pode ser aproximado como segue:

$$\frac{1}{12h^2}(u_{j-2} - 16u_{j-1} + 30u_j - 16u_{j+1} + u_{j+2}) = f(x_j).$$

Para mais detalhes sobre este método e sua implementação, ver página 34 da seguinte referência:
https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/41896/mod_resource/content/1/LeVeque%20Finite%20Diff.pdf

Condições de Contorno

As condições de contorno mais comuns são as de Dirichlet e Neumann.

- Condição de Dirichlet
  Especifica os valores que uma solução necessita tomar no contorno do domínio.
- Condição de Neumann
  Especifica os valores que a derivada de uma solução deve tomar no contorno do domínio. Esta condição necessita de um tratamento especial, que pode se dar de 2 formas:
  - através da aproximação da derivada usando um método de Euler de primeira ordem. Para mais detalhes consulte a página 22 do livro[1];
  - através da criação de um ponto fantasma fora do domínio, para aproximar a derivada usando um método de segunda ordem, como o método de diferença central. Detalhes na página 23 do livro[1]

[1] https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/41896/mod_resource/content/1/LeVeque%20Finite%20Diff.pdf

Problema Difusivo-Convectivo

Seja o domínio $\Omega = [a, b]$*, dado* α*,* β*,* $\varepsilon > 0$*,* $\kappa > 0$ *e* $f(x)$*, encontrar* $u(x)$*, com* $x \in [a, b]$*, tal que:*

$$
\begin{aligned}
-\varepsilon \frac{d^2u}{dx^2} + \kappa \frac{du}{dx} &= f(x) \qquad (2) \\
u(a) = \alpha \qquad & u(b) = \beta
\end{aligned}
$$

Problema 1 (convecção - diferença regressiva): *achar* u_j, *com* $j = 1, 2, ..., J-1$, *tal que:*

$$-\varepsilon \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + \kappa \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = f(x_j)$$

com condições de contorno

$$u_0 = \alpha \qquad u_J = \beta$$

O sistema de equações para esta discretização pode ser montado como:

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 2\varepsilon + \kappa h & -\varepsilon & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\varepsilon - \kappa h & 2\varepsilon + \kappa h & -\varepsilon & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\varepsilon - \kappa h & 2\varepsilon + \kappa h & -\varepsilon & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\varepsilon - \kappa h & 2\varepsilon + \kappa h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{J-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) + \frac{\varepsilon\alpha}{h^2} + \frac{\kappa\alpha}{h} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_{J-1}) + \frac{\varepsilon\beta}{h^2} \end{bmatrix}$$

Formas discretas para a Difusão-Convecção

Problema 2 (convecção - diferença progressiva): *achar* u_j, *com* $j = 1, 2, ..., J-1$, *tal que:*

$$-\varepsilon \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + \kappa \frac{u_{j+1} - u_j}{h} = f(x_j)$$

com condições de contorno

$$u_0 = \alpha \qquad u_J = \beta$$

O sistema de equações para esta discretização pode ser montado como:

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 2\varepsilon - \kappa h & \kappa h - \varepsilon & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\varepsilon & 2\varepsilon - \kappa h & \kappa h - \varepsilon & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\varepsilon & 2\varepsilon - \kappa h & \kappa h - \varepsilon & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\varepsilon & 2\varepsilon - \kappa h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{J-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) + \frac{\varepsilon \alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_{J-1}) + \frac{\varepsilon \beta}{h^2} - \frac{\kappa \beta}{h} \end{bmatrix}$$

Formas discretas para a Difusão-Convecção

Problema 3 (convecção - diferença central): *achar* u_j, *com* $j = 1, 2, ..., J-1$, *tal que:*

$$-\varepsilon \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + \kappa \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} = f(x_j)$$

com condições de contorno

$$u_0 = \alpha \qquad u_J = \beta$$

O sistema de equações

$$\mathbf{AU} = \mathbf{F}$$

para esta discretização pode ser montado como:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 2\varepsilon & \kappa h/2 - \varepsilon & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\varepsilon - \kappa h/2 & 2\varepsilon & \kappa h/2 - \varepsilon & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\varepsilon - \kappa h/2 & 2\varepsilon & \kappa h/2 - \varepsilon & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\varepsilon - \kappa h/2 & 2\varepsilon \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U} = (u_1; u_2; u_3; \dots; u_{J-1})^T$$

$$\mathbf{F} = \left(f(x_1) + \frac{\varepsilon\alpha}{h^2} + \frac{\kappa\alpha}{2h}; f(x_2); f(x_3); \dots; f(x_{J-1}) + \frac{\varepsilon\beta}{h^2} - \frac{\kappa\beta}{2h} \right)^T$$

Resultados Numéricos

Em um domínio $\Omega = [a, b] = [0, 1]$, escolhendo $f(x) = \pi^2 \sin(\pi x)$, estamos interessados em resolver o seguinte problema:

$$
\begin{aligned}
-\varepsilon \frac{d^2 u}{dx^2} + \kappa \frac{du}{dx} &= \varepsilon \pi^2 \sin(\pi x) + \kappa \pi \cos(\pi x) \\
u(0) = u(1) &= 0
\end{aligned}
$$

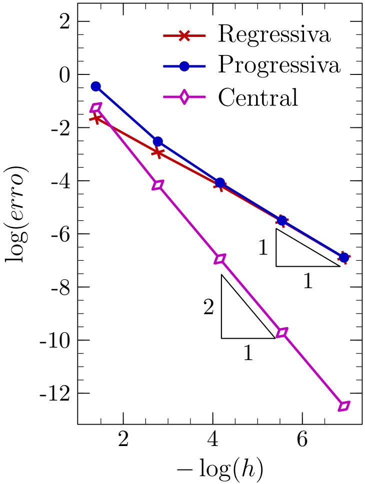
O problema em questão apresenta a seguinte solução exata:

$$u(x) = \sin(\pi x)$$

que satisfaz as condições de contorno $u(0) = u(1) = 0$. Adotando refinamentos sucessivos de malha com $Nel = 4^i$ ($i = 1, 2, 3, 4, 5$), são gerados resultados comparando solução exata com aproximada e testes de convergência com o intuito de validar a metodologia e o código computacional.

Taxa de convergência

Resultados para $Nel = 4, 16, 64, 256, 1024$ elementos.



Observação: erro obtido na norma do máximo, ou seja,

$$\|u_j - u(x_j)\|_\infty = \max_{0 \le j \le J} |u_j - u(x_j)|.$$

Problema Modelo - Equação do Calor (Difusão Transiente)

Seja o domínio espacial $\Omega = [a, b]$ *e o domínio temporal* $I = [0, T]$, *dada as funções* $f(x, t) : \Omega \times I \to \mathbb{R}$, α, β, $\varphi(x) : \Omega \to \mathbb{R}$ *e* $\varepsilon > 0$, *encontrar* $u(x, t) : \Omega \times I \to \mathbb{R}$, *tal que:*

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \times I$$

com condições de contorno

$$u(a, t) = \alpha \quad \text{e} \quad u(b, t) = \beta,$$

e a condição inicial

$$u(x, 0) = \varphi(x).$$

Discretização

Definindo $\Delta t = T/(N-1)$, $h = (b-a)/(J-1)$ e uma malha de pontos (x_j, t_n) com $x_j = jh$; $j = 1, 2, ..., J-1$, $x_0 = a$ e $x_J = b$ e $t_n = n\Delta t$; $n = 0, 1, 2, ..., N$, onde J e N são inteiros positivos.
achar u_j^n, com $j = 1, 2, ..., J-1$ e $n = 0, 1, 2, ..., N$, tal que:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \varepsilon \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} = f(x_j, t_n)$$

com condições de contorno

$$u_0^n = \alpha \qquad u_J^n = \beta$$

e condição inicial

$$u_j^0 = \varphi(x_j)$$

A consistência deste método fornece os erros de truncamento da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t, h^2)$

Validação Numérica

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in [0, \pi] \quad \text{e} \quad t \in [0, 1]$$

com condições de contorno

$$u(0, t) = 0 \quad \text{e} \quad u(\pi, t) = 0,$$

e a condição inicial

$$u(x, 0) = \sin(x).$$

O problema em questão apresenta a seguinte solução exata:

$$u(x, t) = e^{-\varepsilon t} \sin(x).$$

Resultados Numéricos

Tabela: $\Delta t = h$

J	N	$\|e^n\|_\infty$	Ordem	$\|e^n\|_2$	Ordem
4	1	0.117E+00	–	0.146E+00	–
16	5	0.345E-01	0.88	0.432E-01	0.88
64	20	0.892E-02	0.98	0.112E-01	0.98
256	81	0.225E-02	0.99	0.282E-02	0.99
1024	326	0.564E-03	1.00	0.707E-03	1.00

Tabela: $\Delta t = h^2$

J	N	$\|e^n\|_\infty$	Ordem	$\|e^n\|_2$	Ordem
4	2	0.106E+00	–	0.133E+00	–
16	26	0.814E-02	1.85	0.102E-01	1.85
64	415	0.517E-03	1.99	0.647E-03	1.99
256	6640	0.323E-04	2.00	0.405E-04	2.00
1024	106243	0.202E-05	2.00	0.253E-05	2.00