



Análise numérica da equação da difusão bidimensional em regime transiente pelo método explícito

Felipe José Oliveira Ribeiro^{*1}, Ítalo Augusto Magalhães de Ávila Ribeiro^{†1}, Hélio Ribeiro Neto^{‡1} e Aristeu da Silveira Neto^{§1}

¹FEMEC - Universidade Federal de Uberlândia

Palavras-chave: *Análise numérica. Difusão bidimensional transiente. Diferenças finitas.*

Resumo

No presente trabalho realizar-se-á um estudo de caso do erro numérico na solução da EDP que modela o processo de difusão bidimensional de uma dada informação.

Introdução

Muitos fenômenos físicos podem ser modelados, isto é, representados matematicamente, por meio de Equações Diferenciais Parciais (EDPs). A sua solução por métodos analíticos, no entanto, é limitada a casos lineares e simples, que não representam de maneira satisfatória a maioria dos fenômenos físicos. O método numérico é empregado como alternativa para a solução de problemas de maior complexidade. Um exemplo é a solução da equação da energia térmica em regime transiente. Na literatura da área, existem vários métodos de solução numérica de equações diferenciais. São exemplos o Método dos Elementos Finitos, Método dos Volumes Finitos e Método de Diferenças Finitas. Em tais métodos, o domínio é discretizado e as relações diferenciais são aproximadas por um sistema algébrico de equações. Tal aproximação implica em um erro em relação à solução exata, o qual pode ser quantificado sob determinadas condições. No presente trabalho, procura-se apresentar um estudo de caso para a análise de erro envolvendo a resolução da EDP que modela a equação da energia térmica em um domínio bidimensional.

Método numérico

Na equação da difusão, para o caso bidimensional (indicada abaixo), aparecem duas parcelas diferenciais [1].

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

Na qual ϕ é a variável a ser transportada, função do tempo t e das variáveis espaciais x e y , α é uma constante, a qual pode representar o coeficiente de difusividade de uma dada informação. Utilizando a expansão em série de Taylor (equação 2), é possível discretizar os termos no tempo e no espaço para a resolução numérica do problema.

$$\phi(t + \Delta t, x, y) = \phi(t, x, y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{\partial^n \phi(t, x, y)}{\partial t^n}. \quad (2)$$

Para a discretização do termo diferencial de primeira ordem, faz-se uso da equação acima para a expansão da função no domínio do tempo:

$$\frac{\phi(t + \Delta t, x, y) - \phi(t, x, y)}{\Delta t} = \frac{\partial \phi(t, x, y)}{\partial t} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta t^{n-1}}{n!} \frac{\partial^n \phi(t, x, y)}{\partial t^n}. \quad (3)$$

Truncando a equação 3 no termo de primeira ordem ($\mathcal{O}(\Delta t)$), obtém-se o método de Euler explícito. Analogamente, a discretização para os termos de segunda ordem é obtida, fazendo uso de um incremento e um decremento no espaço, enquanto o tempo é fixado.

^{*}feliperibeiro.ufu@gmail.com

[†]italo.ufuracing@gmail.com

[‡]helio.ribeiro@ufu.br

[§]aristeus@ufu.br

$$\phi(t, x + \Delta x, y) = \phi(t, x, y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta x^{(2n-1)}}{(2n-1)!} \frac{\partial^{(2n-1)} \phi(t, x, y)}{\partial x^{(2n-1)}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta x^{(2n)}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} \phi(t, x, y)}{\partial x^{(2n)}}, \quad (4)$$

$$\phi(t, x - \Delta x, y) = \phi(t, x, y) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta x^{(2n-1)}}{(2n-1)!} \frac{\partial^{(2n-1)} \phi(t, x, y)}{\partial x^{(2n-1)}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta x^{(2n)}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} \phi(t, x, y)}{\partial x^{(2n)}}. \quad (5)$$

Somando as equações 4 e 5, obtém-se a discretização para a derivada segunda em uma das direções.

$$\frac{\phi(t, x + \Delta x, y) - 2\phi(t, x, y) + \phi(t, x - \Delta x, y)}{\Delta x^2} = \frac{\partial^2 \phi(t, x, y)}{\partial x^2} + 2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta x^{(2(n-1))}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} \phi(t, x, y)}{\partial x^{(2n)}}. \quad (6)$$

A mesma metodologia empregada em x é estendida à dimensão y . Substituindo as relações truncadas na equação 1 tem-se a equação 7.

$$\begin{aligned} \frac{\phi(t + \Delta t, x, y) - \phi(t, x, y)}{\Delta t} - \alpha \left(\frac{\phi(t, x + \Delta x, y) - 2\phi(t, x, y) + \phi(t, x - \Delta x, y)}{\Delta x^2} \right) - \\ \alpha \left(\frac{\phi(t, x, y + \Delta y) - 2\phi(t, x, y) + \phi(t, x, y - \Delta y)}{\Delta y^2} \right) \approx 0. \end{aligned} \quad (7)$$

A solução numérica requer a discretização dos domínios espacial e temporal. Ou seja, deve-se traduzir um conjunto contínuo e infinito de informações em um conjunto discreto e finito, no qual é empregada a metodologia numérica. Os domínios espacial e temporal são discretizados uniformemente. Assim, para $(t, x, y) \in [a, b] \times [c, d] \times [e, f]$, tem-se:

$$t^N = N\Delta t, \quad N = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (8)$$

$$x_I = I\Delta x, \quad I = 0, 1, 2, \dots, L, \quad (9)$$

$$y_J = J\Delta y, \quad J = 0, 1, 2, \dots, O, \quad (10)$$

onde M , L e O são o número de divisões nos intervalos $[a, b]$, $[c, d]$ e $[e, f]$, respectivamente.

É conveniente definir a solução numérica para os pontos discretos $\Phi_{I,J}^N$, que não é idêntica à solução analítica de $\phi(x, y, t)$. Assim, é possível reescrever a equação 7 como indicado à seguir.

$$\frac{\Phi_{I,J}^{N+1} - \Phi_{I,J}^N}{\Delta t} - \alpha \left(\frac{\Phi_{I+1,J}^N - 2\Phi_{I,J}^N + \Phi_{I-1,J}^N}{\Delta x^2} \right) - \alpha \left(\frac{\Phi_{I,J+1}^N - 2\Phi_{I,J}^N + \Phi_{I,J-1}^N}{\Delta y^2} \right) = 0. \quad (11)$$

Para a análise do erro, parte-se para a formulação de uma equação modificada, que descreve qual equação contínua a equação 11 modela sem erros. Define-se uma função $\psi(t, x, y)$ que é contínua e coincidente com a solução no ponto discreto (N, I, J) e é diferente da solução exata $\phi(t, x, y)$. Em outras palavras, $\phi(t, x, y)$ é a solução exata, $\Phi_{I,J}^N$ é a solução aproximada, obtida do sistema discreto, e $\psi(t, x, y)$ é a solução contínua que está de acordo com a obtida por Φ no ponto (respectivos N , I e J) e que é diferente de $\phi(t, x, y)$. Substituindo $\Phi_{I,J}^N$ na equação 11 por $\psi(t, x, y)$ e expandindo os termos em série de Taylor ao redor do ponto (t, x, y) , obtém-se a equação apresentada à seguir.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = 2\alpha \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta x^{(2(n-1))}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} \psi(t, x, y)}{\partial x^{(2n)}} + 2\alpha \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta y^{(2(n-1))}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} \psi(t, x, y)}{\partial y^{(2n)}} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta t^{n-1}}{n!} \frac{\partial^n \psi(t, x, y)}{\partial t^n}. \quad (12)$$

O lado direito da equação 12 expressa o erro numérico da discretização segundo a metodologia explícita. Tal relação é apresentada em função de termos espaciais e temporais. Visando facilitar a análise, procura-se reescrever a relação em função apenas de termos do domínio espacial. A equação 1 não pode ser empregada, no entanto, para suprimir termos de ordens elevadas [2], já que a relação dada em (12) descreve a solução discretizada, que se difere da exata. Assim, deve-se empregar sistematicamente a equação 12 na simplificação dos termos desejados.

Truncando termos de ordem superior a 4 tem-se:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3} - \alpha \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} - \alpha \frac{\Delta x^4}{60} \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6} - \alpha \frac{\Delta y^2}{12} \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} - \alpha \frac{\Delta y^4}{60} \frac{\partial^6 \psi}{\partial y^6} + \dots = 0. \quad (13)$$

Derivando parcialmente a equação 13 no domínio do tempo, multiplicando a equação resultante por $(-\Delta t/2)$ e somando-a à primeira, tem-se a equação indicada abaixo.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) - \frac{\Delta t^2}{12} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3} + \alpha \Delta t \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^2 \partial t} + \alpha \Delta t \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^2 \partial t} + \alpha \frac{\Delta x^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^5 \psi}{\partial x^4 \partial t} + \alpha \frac{\Delta y^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^5 \psi}{\partial y^4 \partial t} \dots = 0. \quad (14)$$

O mesmo procedimento é aplicado até a segunda ordem para a dimensão t , multiplicando o resultado por $(\Delta t^2/12)$ e somando-o à equação 14, de forma a suprimir o termo $\frac{\Delta t^2}{12} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3}$. A resultante é indicada à seguir.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + \frac{\Delta t^3}{12} \frac{\partial^4 \psi}{\partial t^4} + \frac{\Delta t^4}{2(6!)} \frac{\partial^5 \psi}{\partial t^5} - 2 \frac{\alpha \Delta x^2}{4!} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} - 2 \frac{\alpha \Delta y^2}{4!} \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} - 2 \frac{\alpha \Delta x^4}{6!} \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6} - \\ 2 \frac{\alpha \Delta y^4}{6!} \frac{\partial^6 \psi}{\partial y^6} - \alpha \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^2 \partial t} + \alpha \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^2 \partial t} - \frac{\Delta x^2 \Delta t}{48} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4 \partial t} - \frac{\Delta y^2 \Delta t}{48} \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4 \partial t} + \dots = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Para cancelar as derivadas parciais nas duas dimensões, faz-se uso do teorema de Clairaut-Schwarz (inversão da ordem de derivação). Essa metodologia deve ser empregada até que todas as derivadas parciais no tempo sejam suprimidas da equação truncada. Por fim, chega-se a equação modificada, que é apresentada abaixo.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = 2\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{4!} + \frac{\alpha \Delta t}{4} \right) \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + 2\alpha \left(\frac{\Delta y^2}{4!} + \frac{\alpha \Delta t}{4} \right) \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} + 2\alpha \left(\frac{\Delta x^4}{6!} - \frac{\alpha \Delta x^2 \Delta t}{2(4!)} + \frac{\alpha \Delta x^4 \Delta t}{48} \right) \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6} + \\ 2\alpha \left(\frac{\Delta y^4}{6!} - \frac{\alpha \Delta y^2 \Delta t}{2(4!)} + \frac{\alpha \Delta y^4 \Delta t}{48} \right) \frac{\partial^6 \psi}{\partial y^6} + 2\alpha \left(\frac{\Delta x^6}{8!} - \frac{\alpha \Delta x^4 \Delta t}{2(6!)} + \frac{\alpha \Delta x^6 \Delta t}{48(4!)} \right) \frac{\partial^8 \psi}{\partial x^8} + 2\alpha \left(\frac{\Delta y^6}{8!} - \frac{\alpha \Delta y^4 \Delta t}{2(6!)} + \frac{\alpha \Delta y^6 \Delta t}{48(4!)} \right) \frac{\partial^8 \psi}{\partial y^8} + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

Ainda, é possível substituir o passo temporal pelo passo espacial. Define-se uma constante CFL [3], que relaciona o passo temporal aos passos espaciais.

$$\Delta t = \frac{CFL}{\alpha} \min[\Delta x^2, \Delta y^2] \quad (17)$$

Substituindo tal condição na equação 16, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = 2\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{4!} + \frac{CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)]}{4} \right) \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + 2\alpha \left(\frac{\Delta y^2}{4!} + \frac{CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)]}{4} \right) \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} + \\ 2\alpha \left(\frac{\Delta x^4}{6!} - \frac{CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)] \Delta x^2}{2(4!)} + \frac{CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)] \Delta x^4}{2(4!)} \right) \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6} + \\ 2\alpha \left(\frac{\Delta y^4}{6!} - \frac{CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)] \Delta y^2}{2(4!)} + \frac{CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)] \Delta y^4}{48} \right) \frac{\partial^6 \psi}{\partial y^6} + \dots \end{aligned} \quad (18)$$

Reescrevendo a equação acima de forma conveniente, truncando os termos de ordem superior à quatro, chega-se a equação modificada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = \frac{\alpha \Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + \frac{\alpha \Delta y^2}{12} \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} + \alpha CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)] \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + \frac{1}{2} \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} + \frac{1}{4} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^2 \partial x^2} \right) + \\ \frac{2\alpha \Delta x^4}{6!} \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6} + \frac{2\alpha \Delta y^4}{6!} \frac{\partial^6 \psi}{\partial y^6} + \alpha CFL [\min(\Delta x^2, \Delta y^2)] \left(\frac{\Delta x^2}{4!} \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^6} + \frac{\Delta y^2}{4!} \frac{\partial^6 \psi}{\partial y^6} + \frac{\Delta x^2}{2(4!)} \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^4 \partial y^2} + \frac{\Delta y^2}{2(4!)} \frac{\partial^6 \psi}{\partial x^2 \partial y^4} \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Analisando a equação 19, que apresenta os termos de menores (e mais significativas) ordens do erro numérico, pode-se inferir que o erro é proporcional à condição de CFL . Ou seja, o erro é ampliado em função do aumento de tal parâmetro.

Estudo de caso

Para a solução da equação 11 é necessário definir o domínio, condições inicial e de contorno e tempo final de simulação. O domínio espacial escolhido foi de $x = [0, 2\pi]$ e $y = [0, 2\pi]$ e o tempo final de simulação foi de 10 segundos. Para esse estudo de caso, a condição inicial imposta foi:

$$\Phi(0, x, y) = U_0 \sin(\theta x) \sin(\theta y), \quad (20)$$

na qual U_0 é a amplitude da função e θ é o número de onda. As condições de contorno foram:

$$\Phi(t, 0, y) = 0, \quad \Phi(t, 2\pi, y) = 0, \quad \Phi(t, x, 0) = 0, \quad \Phi(t, x, 2\pi) = 0. \quad (21)$$

Para determinar o erro e a convergência do método, comparou-se a solução numérica com a solução analítica:

$$\phi(t, x) = U_0 \sin(\theta x) \sin(\theta y) e^{-2\alpha\theta^2 t}. \quad (22)$$

Os valores das variáveis U_0 , θ e α devem ser escolhidos em função do problema que se deseja resolver. No presente trabalho, o valor escolhido para as três variáveis foi 1,0. A determinação do erro numérico foi feita, inicialmente, variando o número de divisões espaciais para a condição $CFL = 0,1$. O domínio foi dividido uniformemente nas duas direções ($\Delta x = \Delta y$, com $\Delta x = 2\pi/L = 2\pi/O$). Observa-se na tabela 1 que o erro é reduzido de quatro vezes para o dobro de divisões espaciais em cada direção, comportamento característico de um sistema de segunda ordem, como esperado da análise da equação 19.

Tabela 1: Erro do método numérico para $CFL = 0,1$.

Divisões por direção	L_∞	Razão	Ordem	L_1	Razão	Ordem	L_2	Razão	Ordem
25	$3,08 \cdot 10^{-3}$	---	---	$1,48 \cdot 10^{-3}$	---	---	$1,14 \cdot 10^{-3}$	---	---
50	$7,38 \cdot 10^{-4}$	4,17	2,09	$3,62 \cdot 10^{-4}$	4,09	2,04	$2,87 \cdot 10^{-4}$	3,97	1,99
100	$1,81 \cdot 10^{-4}$	4,07	2,04	$8,96 \cdot 10^{-5}$	4,04	2,02	$7,19 \cdot 10^{-5}$	3,99	2,00
200	$4,48 \cdot 10^{-5}$	4,04	2,02	$2,23 \cdot 10^{-5}$	4,02	2,01	$1,80 \cdot 10^{-5}$	3,99	2,00

Segue ainda a avaliação do erro variando-se o CFL . O número de divisões para cada direção no domínio espacial foi mantido constante em 50 para o intervalo $CFL \in [2,5 \cdot 10^{-3}, 2,5 \cdot 10^{-1}]$. O resultado obtido é ilustrado à seguir.

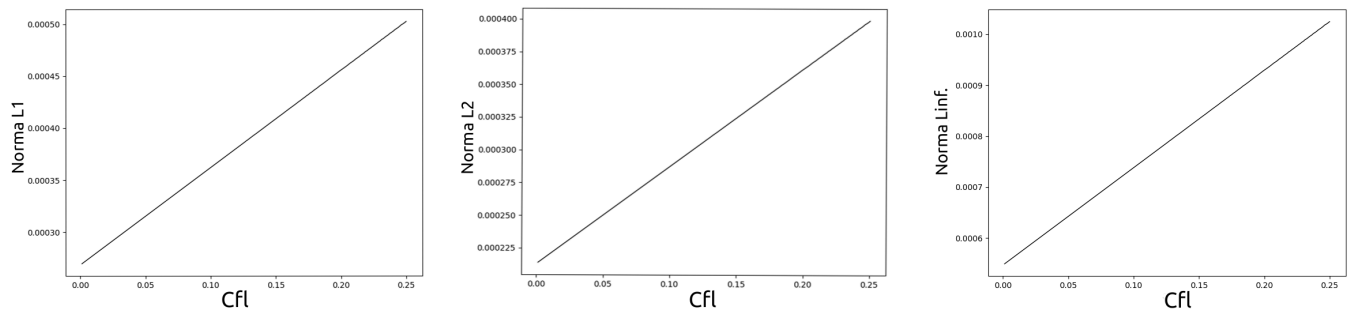


Figura 1: Erro numérico das simulações em função do CFL .

Observa-se na figura 1 que o erro numérico é proporcional ao CFL , como esperado pela análise da equação 19.

Conclusão

Propôs-se a avaliação de erro para a solução numérica da equação diferencial parcial parabólica que modela o fenômeno da difusão bidimensional em regime transiente. Utilizou-se o método de Euler explícito para a derivada parcial temporal e diferenças centradas para a espacial. Foram feitas a análise numérica do método de discretização e simulações computacionais para avaliar o erro numérico. A solução numérica foi comparada com a solução analítica. Por fim, conclui-se que a parcela de maior representatividade no erro retornado é a do termo de segunda ordem. Ainda, o erro é ampliado em função do aumento da entre os passos espacial e temporal (definição de CFL).

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à Petrobras, CAPES, FAPEMIG, CNPq, MFLab e à FEMEC/UFU pelo suporte no desenvolvimento do presente trabalho.

Referências

- [1] LEVEQUE, R. J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problem**. 1. ed. Philadelphia: SIAM, 2007.
- [2] WARMING, R., HYETT, B. The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods. **Journal of Computational Physics**, California, v. 14, n. 2, p. 159 – 179, 1974.
- [3] Courant, R., Friedrichs, K., Lewy, H. On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics. **IBM Journal of Research and Development**, New York, v. 11, i. 2, 1967