# PDE parabólicas — condução de calor
# Métodos explícito e de Crank–Nicolson

Apresentação 5 — Aula Teórica 5 (T2) ou 6 (T1)

**Física Computacional**

Departamento de Física
Universidade de Aveiro

18 ou 19 de março de 2019

# Classificação de PDE de 2ª ordem de coeficientes constantes

Equações diferenciais às derivadas parciais, também conhecidas pela sigla PDE (partial differential equations), são equações diferenciais para uma função de várias variáveis.

As PDE de segunda ordem (ordem da derivada de maior ordem presente na equação) de coeficientes constantes são do tipo

$$A\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} + B\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x\mathrm{d}y} + C\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}y^2} + D\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + E\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y} + Fu = g(x, y)$$

e podem classificar-se da forma:

1. Equações **hiperbólicas** se $B^2 - 4AC > 0$.
2. Equações **parabólicas** se $B^2 - 4AC = 0$.
3. Equações **elípticas** se $B^2 - 4AC < 0$.

Habitualmente, uma das variáveis independentes é a posição e a outra o tempo.

# Exemplos de PDE

Nas situações que vamos estudar, generalizadas para 3 dimensões espaciais, as equações elípticas descrevem situações de equilíbrio e apenas têm condições fronteira. As equações parabólicas e hiperbólicas descrevem processos que evoluem no tempo e têm condições inicias e de fronteira.

1. A equação de onda é uma equação hiperbólica

$$\nabla^2 q - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = 0$$

2. A equação de condução de calor é uma equação parabólica

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k\nabla^2 T$$

3. A equação de Laplace é uma equações elíptica

$$\nabla^2 V = 0$$

# Problemas de valor inicial

As PDE estudadas nesta aula são **PDE parabólicas**. Vamos estudá-las como generalizações dos problemas de valor inicial encontrados no estudo de ODE.

- Equação de condução do calor:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}$$

  Conhecemos a temperatura em $t = 0$, ou seja, $T(x,0)$ e os valores da temperatura na fronteira de $x$ para todos os instantes.

- Equação paraxial (a ser também estudada na aula de transformadas de Fourier):

$$i\frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0$$

  Conhecemos a forma do feixe em $z = 0$, ou seja, $\phi(x,0)$ e o seu comportamento na fronteira de $x$ para todo os valores de $z$.

# Semi-discretização

Um dos métodos de resolução numérica deste tipo de PDE consiste em usar diferenças finitas para as derivadas referentes a uma das variáveis independentes, o que converte a PDE num sistema de ODE.

Seja a equação de condução de calor:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}$$

com as seguintes condições inicial e de fronteira

$$T(x,0) = g(x), \quad T(0,t) = T(L,t) = 0.$$

# Resolução pelo método de Euler

Aproximando a segunda derivada por diferenças finitas centradas, obtemos, para os pontos internos, um conjunto de $(N_x - 2)$ ODE:

$$\frac{\mathrm{d}T(i,t)}{\mathrm{d}t} = \frac{k}{c\rho}\frac{T(i-1,t) - 2T(i,t) + T(i+1,t)}{(\Delta x)^2} \tag{1}$$

que poderão ser resolvidas por um dos métodos de resolução de problemas de valor inicial para ODE, com os cuidados relativos à sua estabilidade.

## Método de Euler

$$T(i,n+1) = T(i,n) + \frac{k\Delta t}{c\rho(\Delta x)^2}\left[T(i-1,n) - 2T(i,n) + T(i+1,n)\right]$$

Note que, à medida que se avança no método, calcular $T(i,n+1)$ é muito simples, porque todos os elementos do membro da direita são conhecidos. No entanto, o método de Euler aplicado à equação de condução de calor é apenas condicionalmente estável.

# Estabilidade do método de Euler

No estudo de estabilidade apresentado na aula 3, considerámos uma linearização da equação diferencial. Neste caso já temos o sistema de $N_x - 1$ equações lineares (1), representado matricialmente da forma:

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = AT,$$

onde $A$ é uma matriz $(N_x - 2) \times (N_x - 2)$ com 3 diagonais não nulas de elementos constantes cujos valores próprios são

$$\lambda_l = \frac{2k}{c\rho(\Delta x)^2}\left[\cos\left(\frac{l}{N_x - 1}\pi\right) - 1\right], \qquad \text{com } l = 1, 2, \ldots, N_x - 2.$$

Todos estes valores próprios são reais negativos. Para que o método de Euler seja estável, todos os valores próprios $\lambda_l$, têm que satisfazer

$$\lambda_l \Delta t \geq -2$$

Se esta condição for satisfeita pelo menor dos valores próprios (o maior em termos absolutos), também será satisfeita por todos os outros.

# Estabilidade do método de Euler

Quanto mais pequeno for o valor do cosseno na expressão de $\lambda_l$, menor será o valor próprio. Quando $l$ se aproxima de $N_x - 1$, o cosseno aproxima-se de $-1$. Então, o menor dos valores próprios é

$$\begin{aligned}\lambda_{N_x-2} &= \frac{2k}{c\rho(\Delta x)^2}\left[\cos\left(\frac{N_x-2}{N_x-1}\pi\right)-1\right]\\ &\simeq -\frac{4k}{c\rho(\Delta x)^2}\end{aligned}$$

Substituindo no critério de estabilidade,

$$-\frac{4k}{c\rho(\Delta x)^2}\Delta t \geq -2 \tag{2}$$

Para este problema, o método de Euler é condicionalmente estável:

**Critério de estabilidade**

$$\frac{k\Delta t}{c\rho(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$$

# Método de Crank–Nicolson

Devido às exigências de passo para assegurar a estabilidade da solução numérica, opta-se muitas vezes pelo **método de Crank–Nicolson**.

$$T(i,n+1) = T(i,n) + \frac{k\Delta t}{2c\rho(\Delta x)^2}\Big[T(i-1,n+1) - 2T(i,n+1) + T(i+1,n+1) \\ + T(i-1,n) - 2T(i,n) + T(i+1,n)\Big]$$

# Método de Crank–Nicolson

Rearranjando, de forma a ter os termos que multiplicam por $T(\_, n+1)$ à esquerda e os termos que multiplicam por $T(\_, n)$ à direita, obtemos

## Método de Crank–Nicolson

$$
\begin{aligned}
-T(i-1, n+1) + \left(\frac{2}{\eta} + 2\right) T(i, n+1) - T(i+1, n+1) \\
= T(i-1, n) + \left(\frac{2}{\eta} - 2\right) T(i, n) + T(i+1, n)
\end{aligned}
$$

com

$$
\eta = \frac{k \Delta t}{c \rho (\Delta x)^2}
$$

# Método de Crank–Nicolson

Na forma matricial:

$$
\begin{bmatrix}
\left(\frac{2}{\eta}+2\right) & -1 & & & \\
-1 & \left(\frac{2}{\eta}+2\right) & -1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & -1 & \left(\frac{2}{\eta}+2\right) & -1 \\
 & & & -1 & \left(\frac{2}{\eta}+2\right)
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
T(2,n+1) \\
T(3,n+1) \\
\vdots \\
T(N_x-2,n+1) \\
T(N_x-1,n+1)
\end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix}
{\color{red}T(1,n+1)} + T(1,n) + \left(\frac{2}{\eta}-2\right)T(2,n) + T(3,n) \\
T(2,n) + \left(\frac{2}{\eta}-2\right)T(3,n) + T(4,n) \\
\vdots \\
T(N_x-3,n) + \left(\frac{2}{\eta}-2\right)T(N_x-2,n) + T(N_x-1,n) \\
T(N_x-2,n) + \left(\frac{2}{\eta}-2\right)T(N_x-1,n) + T(N_x,n) + {\color{red}T(N_x,n+1)}
\end{bmatrix}
$$

# Método de Crank–Nicolson

- Devido às condições fronteira, é preciso adicionar termos extra (a vermelho) ao primeiro e ao último elemento do vetor $\boldsymbol{b}$.
- A matriz é tridiagonal.
- O método consiste em resolver um sistema de equações algébricas cuja matriz é tridiagonal. Este processo é repetido para cada passo de tempo.
- O método de Crank–Nicolson, é **incondicionalmente estável** neste caso, pois os valores próprios são números reais negativos.