

Método das diferenças finitas aplicadas para a equação do calor e a equação de advecção

Eduarda Veiga Carvalho ¹ Raphaella Tamyres Siqueira Gonçalves ²

Ilum Escola de Ciência

Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)

Campinas, Brasil

Palavras-chave. Diferenças finitas, equação do calor, equação de advecção.

1 Introdução

Análise numérica é o estudo de algoritmos de aproximação para a solução de problemas matemáticos. De acordo com PPGM UFPR [1] a linha de Análise Numérica, que é da área de Matemática Aplicada, envolve a análise, aprimoramento e aplicação de métodos numéricos para equações diferenciais parciais, assim como de algoritmos iterativos para sistemas lineares, problemas de autovalores, problemas inversos e processamento de sinais. Além disso, são desenvolvidos modelos matemáticos baseados nas leis físicas que regem diversos processos, criando um trabalho interdisciplinar entre a matemática e outros domínios da ciência.. Assim, foi aplicado um dos métodos discutidos na disciplina de análise numérica, método das diferenças finitas, para resolver dois problemas científicos e gerar os gráficos das soluções com interpretações de fenômenos diversas situações.

2 Objetivo

O objetivo deste trabalho é aplicar o método de diferenças finitas para resolver dois problemas, a equação do calor e a equação de advecção, desenvolvendo o algoritmo para processar os cálculos e gerar a representação gráfica para ambas as situações, a fim de interpretar cada fenômeno físico.

3 Metodologia

Para resolver o problema proposto, foi desenvolvido um algoritmo no Jupyter Notebook, interpretador da linguagem Python. Primeiramente, fez se necessário entender o comportamento dos fenômenos e como as equações modelam cada problema proposto. Em seguida, foi gerado o algoritmo, determinando as condições iniciais e estabelecendo parâmetros de discretização adequados. Na sequência, uma análise gráfica foi apresentada.

¹eduarda220054@ilum.cnpem.br

²raphaella220046@ilum.cnpem.br

4 Diferenças finitas

O método das diferenças finitas é uma técnica numérica utilizada para resolver equações diferenciais parciais (EDPs), aproximando as derivadas por diferenças finitas. Essa abordagem é aplicada em diversas áreas como física, química, biologia, engenharia, entre outras que envolvem equações diferenciais.

Soluções analíticas para problemas que envolvem derivadas em mais de uma variável, como o espaço e o tempo, são difíceis de serem aplicadas. De acordo com LEVEQUE (2007) [2], o método de diferenças finitas consiste em substituir as derivadas das equações diferenciais por aproximações de diferenças finitas, fornecendo um sistema algébrico de equações a serem resolvidas. Embora seja um sistema grande, é finito e pode ser resolvido no lugar da equação diferencial computacionalmente.

Nesse sentido, o método das diferenças finitas é um método numérico utilizado para resolver problemas de valor de contorno de EDPs. Ele consiste em aproximar as derivadas de uma função por diferenças finitas, ou seja, diferenças entre os valores da função em pontos discretos próximos. Essas diferenças são então usadas para formular um sistema de equações lineares que pode ser resolvido numericamente para obter uma solução aproximada da equação diferencial. O método das diferenças finitas é um método de derivação numérica utilizado para resolver problemas de valor de contorno com essa apresentação:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases}$$

Operacionalmente, o método das diferenças finitas consiste em discretizar o domínio do problema em uma grade de pontos, tanto no domínio espacial quanto no domínio temporal. O domínio espacial é dividido em intervalos igualmente espaçados, e o domínio temporal é discretizado em intervalos de tempo.

Existem diferentes tipos de esquemas de diferenças finitas que podem ser utilizados, como diferenças progressivas, diferenças regressivas e diferenças centradas, dependendo de como as derivadas são aproximadas. Esses esquemas diferem na precisão e estabilidade numérica.

Ao discretizar a EDP, as derivadas no problema são aproximadas por diferenças finitas nas equações resultantes. Essas equações discretas formam um sistema de equações algébricas, que podem ser resolvidas numericamente para obter a solução aproximada da EDP. TVEITO (1998)[3]

A escolha adequada do tamanho dos passos de discretização é importante para garantir a precisão e estabilidade numérica do método. Além disso, a escolha do esquema de diferenças finitas adequado depende das características do problema em questão, como o tipo de EDP, as condições de contorno e as propriedades físicas envolvidas.

Após a discretização e resolução do sistema de equações algébricas, a solução numérica da EDP pode ser obtida para os pontos da grade espacial-temporal. Essa solução pode ser visualizada em gráficos para melhor compreensão e análise do problema.

4.1 Esquemas numéricos explícito e implícito

Os esquemas numéricos explícito e implícito são comumente usados no método de diferenças finitas para resolver equações diferenciais parciais.

No esquema explícito de diferenças finitas, a solução numérica em um determinado ponto de grade é calculada explicitamente em termos dos valores conhecidos em pontos de grade anteriores. Isso significa que a solução em um determinado ponto de grade é atualizada usando apenas informações de pontos de grade no tempo anterior.

Isso torna o método relativamente simples de implementar, mas é necessário garantir que a condição de estabilidade seja atendida, ou seja, o tamanho do passo temporal (Δt) deve ser escolhido de forma a satisfazer certas restrições para evitar a instabilidade numérica.

Enquanto no método implícito de diferenças finitas, a solução numérica em um determinado ponto de grade é calculada implicitamente, envolvendo os valores desconhecidos da solução em pontos futuros e/ou presentes. Isso significa que a solução em um determinado ponto de grade é atualizada usando informações de pontos de grade em tempo presente e/ou futuro. Isso pode exigir a resolução de um sistema de equações lineares para determinar as soluções em tempo futuro.

O método implícito geralmente é mais estável numericamente do que o método explícito, permitindo passos de tempo maiores e relaxando as restrições de estabilidade. No entanto, ele pode ser mais computacionalmente intensivo, devido à necessidade de resolver sistemas de equações lineares em cada etapa temporal.

A seguir, serão solucionadas a equação do calor e a equação de advecção pelo método de diferenças finitas e esquemas explícitos.

5 Equação do Calor

O calor consiste em uma forma de transferência de energia entre corpos ou sistemas, devido a uma diferença de temperatura. Ele é uma manifestação da energia térmica em trânsito de um objeto para outro. A equação diferencial que descreve a distribuição de temperatura t em uma dimensão espacial representada por x pode ser descrita na forma

$$u_t = \kappa u_{xx}$$

Condições:

$$0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq 1$$

$$\kappa = 0.5$$

$$u(x, 0) = x(1 - x)^2$$

$$u(0, t) = 0$$

$$u(1, t) = 0$$

5.1 Uso do método das diferenças finitas para resolver o problema do calor

Discretização da equação utilizando o método das diferenças finitas:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \kappa \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

onde u_i^n representa o valor aproximado de $u(x_i, t_n)$, Δt é o passo de tempo e Δx é o passo espacial.

Aproximação da segunda derivada:

$$\frac{u_{xx}}{\Delta x^2} \approx \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

Condições de contorno:

$$\begin{aligned} u_0^n &= 0 \\ u_N^n &= 0 \end{aligned}$$

Condição inicial:

$$u_i^0 = x_i(1 - x_i)^2$$

Discretização da equação utilizando o método das diferenças finitas:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \kappa \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

onde u_i^n representa o valor aproximado de $u(x_i, t_n)$, Δt é o passo de tempo e Δx é o passo espacial.

Para aplicar o método explícito, podemos reorganizar a equação discretizada:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)$$

Elaborando a matriz tridiagonal para a discretização, temos:

$$\begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha & 1-2\alpha & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ u_3^n \\ \vdots \\ u_{N-1}^n \end{bmatrix} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde $\alpha = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}$ e N é o número de pontos na malha.

6 Equação de advecção

A advecção é um processo físico pelo qual uma substância ou propriedade é transportada pelo fluxo de um fluido. Esse transporte ocorre devido ao movimento do fluido em si, levando consigo a substância ou propriedade em questão. Para descrever essa dinâmica, a equação a seguir pode ser aplicada

$$u_t + \mu u_x = 0,$$

em que μ representa a constante de velocidade.

Condições:

$$\begin{aligned} 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq 1 \\ \mu = 0.25 \\ u(x, 0) = \eta(x) = x(1 - x) \\ u(x, t) = \eta(x - \mu t) \end{aligned}$$

6.1 Uso do método das diferenças finitas para resolver o problema da advecção

A solução para a equação de advecção é análoga a equação do calor.

O domínio espacial é dividido em pontos discretos igualmente espaçados. É definido um passo de discretização espacial, denotado por Δx , e um passo de discretização temporal, denotado por Δt . Isso resultará em uma grade ou malha espacial e temporal.

As derivadas parciais são aproximadas em relação ao tempo e à posição usando diferenças finitas. Na equação de advecção, tem-se

$$u_t \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t}$$

e

$$u_x \approx \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}.$$

Neste caso, u_i^n representa o valor da função u no ponto i da malha espacial no tempo n , onde i é o índice espacial e n é o índice temporal.

As aproximações das derivadas parciais são substituídas na equação de advecção original, obtendo

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \mu \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0.$$

A equação pode ser rearranjada para isolar o termo u_i^{n+1} , que é o valor desconhecido no próximo passo de tempo:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\mu \Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n)$$

Essa equação de recorrência permite calcular o valor de u_i^{n+1} em função dos valores atuais u_i^n e u_{i-1}^n , e é aplicada iterativamente para cada ponto da malha espacial, a partir das condições iniciais anteriormente definidas.

7 Resultado e discussões

Para a equação do calor foi obtido o gráfico de acordo com as variáveis tempo, posição e temperatura, apresentado na figura 1. Observa-se que a distribuição de calor varia ao longo do tempo em diferentes posições espaciais, da posição entre 2 e 4, se dissipando no meio.

A presença dessa região em amarelo aponta que nessa posição houve um aumento significativo na quantidade de calor em um momento em que $t = 0$. Isso pode ser causado por um evento ou condição particular que resultou em uma transferência intensa de calor naquela região. Como uma fonte de calor localizada, em que o pico pode indicar a presença de uma fonte de calor concentrada em uma posição específica. Isso poderia ser, por exemplo, uma fonte de calor artificial, como um aquecedor ou um processo industrial que libera calor em uma determinada área. Uma reação química ou processo físico específico, em que o pico pode representar uma reação química exotérmica ou um processo físico que libera calor em uma posição específica. Isso pode ser aplicado na termodinâmica, em máquinas térmicas, como o ciclo de Rankine, para uma reação de combustão ou em uma região onde ocorre atrito intenso entre os equipamentos.

Para a equação de advecção foi obtido o gráfico de acordo com as variáveis tempo, posição e concentração, apresentado na figura 2.

Nesse gráfico é analisada a distribuição da concentração de uma substância ao longo do tempo e da posição espacial. A formação de uma parábola hiperbólica, com um ponto de máximo, indica que entre as posições 4 e 6 há uma maior concentração da substância, com uma distribuição

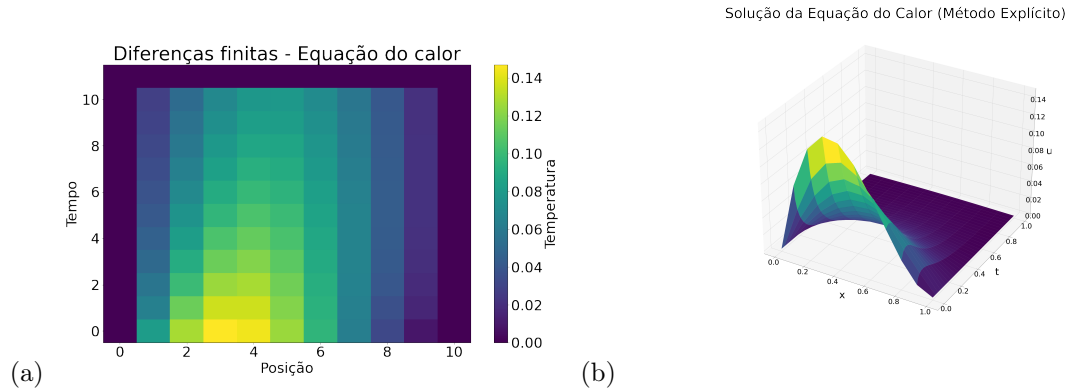


Figura 1: Método de diferenças finitas aplicado à equação do calor. A região em amarelo representa maior temperatura, havendo uma dissipação do calor sobre a superfície a medida que o tempo aumenta, em direção a região azul escuro. (a) Gráfico bidimensional (b) Gráfico tridimensional. Fonte: Autoras

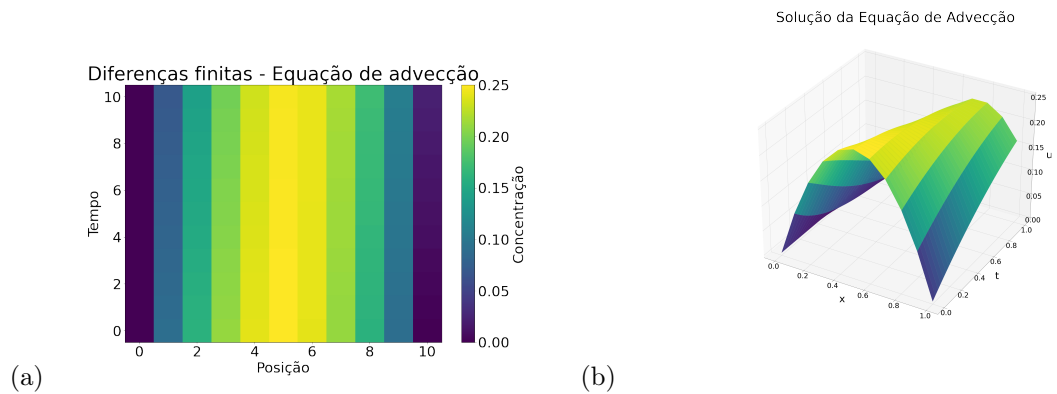


Figura 2: Método de diferenças finitas aplicado à equação de advecção. A região em amarelo indica maior concentração da substância, fluindo em direções opostas. (a) Gráfico bidimensional (b) Gráfico tridimensional. Fonte: Autoras

simétrica para as regiões circundantes a esse ponto de máximo. Esse pico indica o ponto de máxima concentração, e pode ser associado a uma fonte de liberação da substância em solução ou a uma área de maior acumulação, e pode ser aplicada, por exemplo, em estudos sobre assoreamento de rios e lagos.

A simetria da parábola significa que a concentração da substância pode diminuir de forma mais gradual em ambas as direção simultaneamente, não demonstrando que há uma direção preferencial de advecção da substância, onde ela se move ou se espalha mais rapidamente.

A forma da parábola e a taxa de variação da concentração ao longo do tempo e da posição podem fornecer informações sobre a taxa de dispersão da substância. Nota-se que a parábola é mais aberta, demonstrando uma dispersão mais rápida da substância, com a concentração diminuindo

rapidamente à medida em que se afasta do ponto de pico.

8 Considerações Finais

Diante do trabalho realizado, é possível concluir que a aplicação de diferenças finitas nas equações do calor e de advecção são viáveis ao estudo e interpretação de diversos fenômenos físicos, químicos ou biológicos.

Quanto ao erro cometido na aproximação, para o problema do calor, onde a equação diferencial parcial envolve a derivada segunda em relação ao tempo, para o esquema de diferenças finitas avançada (método explícito), a ordem do erro é tipicamente de segunda ordem em relação ao espaçamento espacial (Δx) e de primeira ordem em relação ao espaçamento temporal (Δt). Isso significa que, se o tamanho da malha espacial for reduzido pela metade, o erro será reduzido em um fator de aproximadamente 4, enquanto se o tamanho do passo temporal for reduzido pela metade, o erro será reduzido aproximadamente pela metade.

Já para a equação de advecção, onde a equação diferencial parcial envolve a derivada primeira em relação ao tempo, o esquema aplicado foi de diferenças progressivas no tempo (método explícito). A ordem do erro também é tipicamente de primeira ordem tanto em relação ao espaçamento espacial (Δx) quanto ao espaçamento temporal (Δt). Isso significa que, se o tamanho da malha espacial ou do passo temporal for reduzido pela metade, o erro será reduzido pela metade.

A aproximação para a função analítica pode ser considerada razoável ou não a depender do tipo de problema a ser analisado, da escala e precisão requerida quanto ao resultado esperado. Dependendo do estudo e das condições iniciais disponíveis, pode-se aplicar o esquema implícito ou explícito.

Para mais informações sobre o código e comparações complementares ao projeto, acesse o link do GitHub @veigaeduarda: <https://11nq.com/D75kP>

9 Contribuições dos autores

Eduarda Introdução, equações iniciais do problema em latex no documento, divisão de tópicos, descrição da equação do calor, implementação de código para a equação do calor e da advecção e plotagem dos gráficos dos problemas.

Raphaella Seções objetivo, metodologia, diferenças finitas, esquema explícito e implícito, descrição da equação da advecção, implementação do algoritmo com representação gráfica em 2D, resultado e discussões, e conclusão.

Referências

- [1] **Análise Numérica.** <https://ppgm.ufpr.br/portal/analise-numerica/>. 2023.
- [2] Randall J. LeVeque. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems.** Philadelphia, PA: Society for Industrial e Applied Mathematics, 2007. ISBN: 978-0-89871-629-0.
- [3] Aslak Tveito e Ragnar Winther. **Introduction to partial differential equations: a computational approach.** Texts in applied mathematics. New York: Springer, 1998. ISBN: 978-0-387-98327-1.