AGG0012 – Problemas Integrados em Ciências da Terra II

Bloco I - aula 3

Equação de Difusão (solução numérica)

Victor Sacek

Equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

tempo

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

tempo

difusividade

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

tempo

difusividade

espaço (posição)

Aproximação em diferenças finitas

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

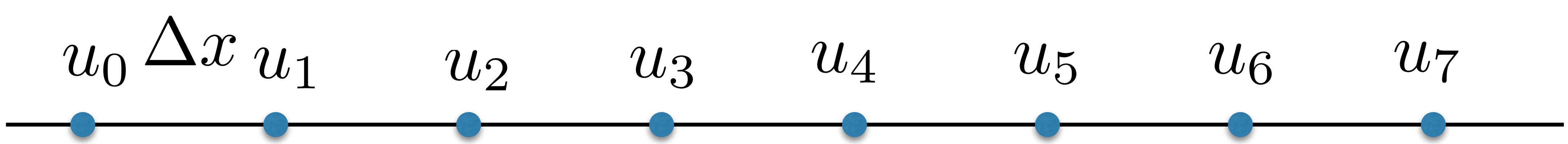
$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

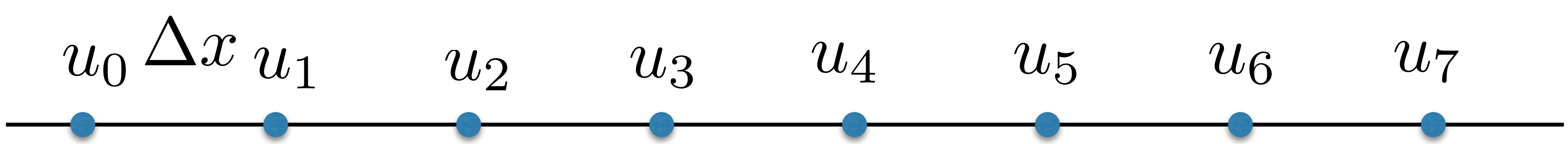
Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



Aproximação em diferenças finitas

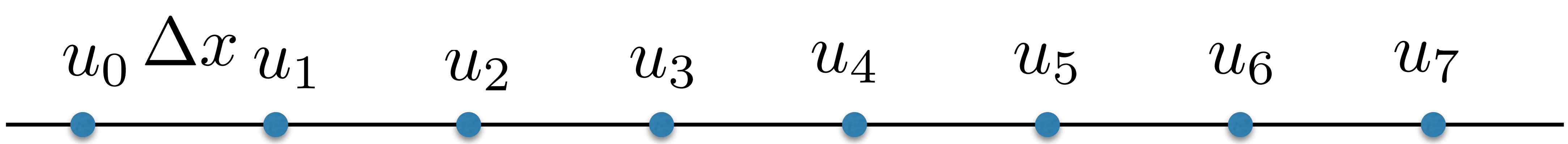
$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

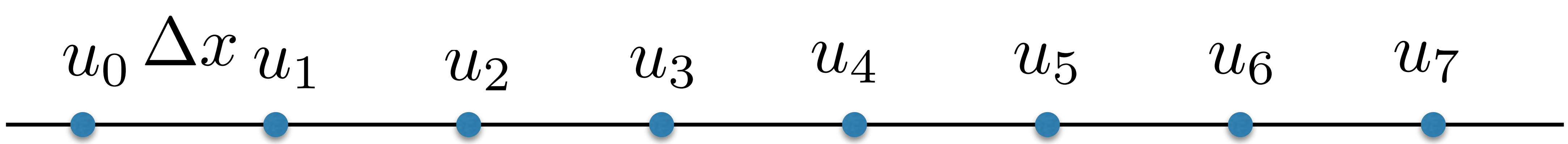


$\frac{\partial u}{\partial x} \approx$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

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

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

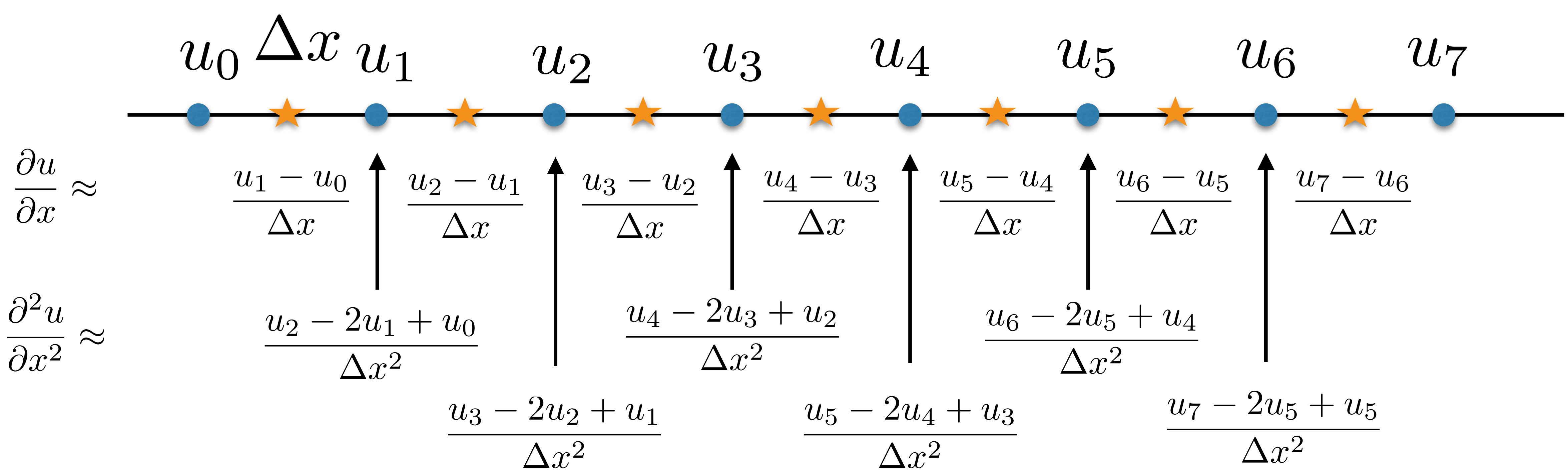
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Condição de contorno

Condição de contorno

Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

Condição de contorno

Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

A forma mais simples é assumir um valor fixo para a grandeza estudada.

Condição de contorno

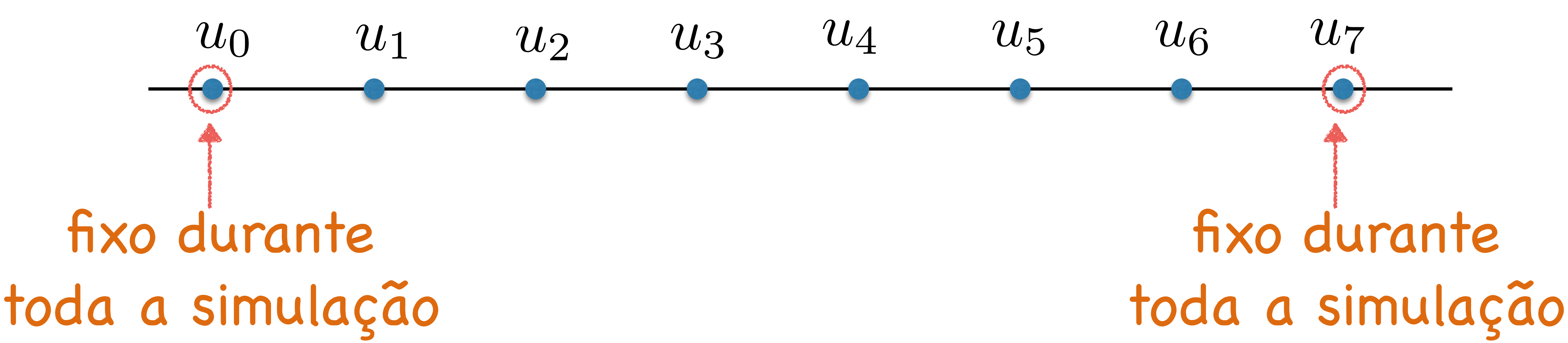
Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

A forma mais simples é assumir um valor fixo para a grandeza estudada.

Condição de contorno

Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

A forma mais simples é assumir um valor fixo para a grandeza estudada.



Condição inicial

É o estado inicial do nosso problema.

No nosso caso da equação de difusão, representa o valor atribuído para cada ponto do nosso domínio.

Condição inicial

É o estado inicial do nosso problema.

No nosso caso da equação de difusão, representa o valor atribuído para cada ponto do nosso domínio.

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

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

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx$$

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

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

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

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

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

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

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

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas esses *u's* são [*presente*] ou [*futuro*]?

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

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

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas esses *u's* são [*presente*] ou [*futuro*]?

Depende da formulação!!!

Formulação explícita

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{[u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}]^{[presente]}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

Essa formulação é chamada de explícita

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{\left[u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}\right]^{[presente]}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

Essa formulação é chamada de explícita

Assim fica fácil isolar o valor de u no futuro, que eu não conheço a priori:

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left[\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right]^{[presente]}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

Essa formulação é chamada de explícita

Assim fica fácil isolar o valor de u no futuro, que eu não conheço a priori:

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left[\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$$

$$u_i^{[futuro]} = \left[u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$$

Evolução de u ao longo do tempo

Para estudar o modelo ao longo do tempo basta aplicar a expressão recursivamente:

```
t = 0

while t < t_max:
```

$$u_i^{[futuro]} = \left[u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$$

$$u_i^{[presente]} = u_i^{[futuro]}$$

```
    t = t + dt
```

Evolução de u ao longo do tempo

Para estudar o modelo ao longo do tempo basta aplicar a expressão recursivamente:

```
t = 0

while t < t_max:
```

`u_aux` $= \left[u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$

$u_i^{[presente]} =$ `u_aux`

```
    t = t + dt
```

Evolução de u ao longo do tempo

Para estudar o modelo ao longo do tempo basta aplicar a expressão recursivamente:

```
t = 0

while t < t_max:
```

u_aux $= \quad u_i + \alpha\Delta t \dfrac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$

$u_i = $ u_aux

```
    t = t + dt
```

Exercício

- Escreva um script python para simular a equação de difusão numericamente.

- Assuma que o seu domínio x esteja entre -100 e 100, com espaçamento dx = 1, alfa = 0.1 e dt = 1. Assuma que a condição inicial para u é:

```
u = np.exp(-x*x/200)
```

- Rode o modelo até t = 2000 e plote a configuração final juntamente com a original.

- Envie o código juntamente com a figura gerada (título da figura com nome e número USP) para Janine.

Extra

- Tente plotar no mesmo gráfico a função u em intervalos intermediários para ver a evolução temporal da difusão.
- No problema anterior, tente rodar com dt = 10. O que aconteceu?
- E se rodar com dt = 0.1?