Trabalho Final da Disciplina de Análise Numérica
Turma 2022

Uso do método de diferenças finitas para resolver equações diferenciais parciais

Débora van Putten [1], Vitor E. G. Barelli[2]
Ilum Escola de Ciência
Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)
Campinas- SP, Brasil

Resumo. Este trabalho utiliza o método de diferenças finitas para abordar a equação do calor e a equação de advecção. Apresentando a explicação do ponto de vista físico e aplicando o método via algoritmos feitos em Python para processar as resoluções gráficas das equações.

Palavras-chave. Equação do calor, Equação de advecção, Método das Diferenças Finitas, transferência de calor, transporte de massas, análise numérica.

1 Introdução

Equações diferenciais, surgidas de modelagens de ventos estudados por diversos grupos de pessoas, são uma aplicação muito rica do cálculo. Elas se fazem presentes não só na Matemática, mas na Química, na Física e na Biologia também, por exemplo. Apesar de seu uso extenso, ainda é desafiador encontrar os resultados de tais equações ou até mesmo uma fórmula explícita para resolvê-los. Por essa razão, é muito comum trabalharmos com métodos de aproximação e abordagens gráficas e numéricas para entender matematicamente o comportamento dos fenômenos em questão [12].

Nesse sentido, para além de diferentes métodos estudados ao longo do semestre na disciplina de Análise Numérica (como Euler, Simpson, Trapézio), nos deparamos agora, também, com a técnica das Diferenças Finitas.

1.1 Diferenças Finitas

O método de Diferenças Finitas pode ser descrito, objetivamente, como um esforço numérico de se discretizar o contínuo e de se substituir derivadas por aproximações. Em outras palavras, consistiria em tornar uma função contínua em uma função que avalia partes discretas, finitas [4].

Para utilizar esse método, é possível trabalhar com um passo a passo: 1. entender a descrição do problema; 2. decompor o domínio, ou seja, transformar o domínio de contínuo para finito; 3. aproximar as derivadas pelas diferenças infinitas e integrar isso ao problema - é feita uma discretização para as derivadas, ou seja, elas são aproximadas por algum método, como uma série de Taylor; 4. construir um sistema linear com a aproximação por Diferenças Finitas, reescrevendo o problema anteriormente descrito (cada ponto deve ter sua própria equação); 5. resolver o sistema; 6. visualizar e analisar a solução depois dessas alterações [6], [11].

[1] debora2200??@ilum.cnpem.br
[2] vitor220072@ilum.cnpem.br

É fundamental que, depois deste trabalho, a pessoa de fato analise a solução do problema e a aproximação feita. Ademais, na Análise Numérica no geral, é sempre de bom tom também avaliar o erro feito.

De maneira geral, se trata de um método numérico baseado na aproximação das derivadas por diferenças finitas, ou melhor, na substituição das derivadas por diferenças entre os valores discretos da função, [13]. Diferenças Finitas são extremamente úteis, visto que podem auxiliar na compressnão de leis da Física, por exemplo, visto que elas são traduzidas em Equações Diferenciais, como as Leis de Newton para o resfriamento dos corpos ou como as Equações de Navier-Stokes [8].

1.2 Equação do calor

A equação do calor, (Eq. 1) é usada para descrever a alteração da temperatura de um corpo durante um instante de tempo, ou seja, é um modelo matemático que representa a difusão do calor em sólidos, [2][14]. Esse modelo pode ser representado por equações diferenciais parciais, ferramentas para resolver problemas amplos, como os propostos nesse trabalho.

$$u_t = \kappa \cdot u_{xx} \tag{1}$$

A equação do calor pode ser entendida como uma equação parabólica, onde u é uma temperatura, que depende da coordenada x e do instante t, o k é a constante de difusão térmica.

A partir disso iremos considerar condições de contorno para estudar esse fenômeno, [14].

1.3 Advecção

Segundo Equer (2017) [4], "advecção é o movimento provocado por agentes externos, como o campo de velocidades do meio... Se o agente externo que provoca o movimento da substância é definido por um campo de velocidades V, em geral a variável tanto na posição como no tempo, então o fluxo advectivo será proporcional à concentração".

De maneira mais simplificada, a advecção costuma ser descrita como o transporte de uma substância ou de uma massa que envolve a conservação das propriedades dela e que acontece por conta de correntes. Em um contexto mais ecológico, por exemplo, poluentes no leito de um rio pode sofrer advecção. Em um contexto mais Físico, por outro lado, podemos falar de entalpia de um fluido. Metereologicamente, a advecção está relacionada com a manutenção de uma propriedade da atmosfera ou do corpo líquido (oceano, rio), como umidade, salinidades e influi diretamente no ciclo hidrológico e na formação de nuvens [1]

O transporte de uma quantidade ou de um material é feito a partir do transporte de massas. O movimento do fluido é descrito por um campo vetorial e o material transportado é representado por um campo escalar, que mostra sua distribuição no espaço.

De maneira geral, a equação de advecção pode ser representada da seguinte forma, sendo ela uma equação linear.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_0 \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Figura 1: Equação de Advecção. Fonte: [9].

Na Figura 01, 'a' corresponde à velocidade, 't' corresponde a tempo e 'u' corresponde à quantidade a ser transportada. Essa equação corresponde à equação de advecção de uma dimensão (1D). Contudo, também podemos representar tal equação diferencial parcial hiperbólica da advecção da seguinte forma:

$$u_t + \mu \cdot u_x = 0. \tag{2}$$

Nessa equação, 'x' corresponde ao domínio do espaço; 't' é tempo; 'u' corresponde à concentração de uma substância no tempo 't' em um ponto 'x', e 'mi' corresponde à velocidade com a qual a substância se movimenta no domínio.

Enquanto isso, seu resultado aproximado é dado por:

$$u = u(t, x). \tag{3}$$

Cabe também comentar que a solução analítica para tal problema, caso a condições seguintes sejam cumpridas:

1. $t = 0$
2. $u(0, x) = f(x)$,

é

$$u(t, x) = f(x + \mu t). \tag{4}$$

2 Metodologia

No presente trabalho, a parte prática de redação do código para a resolução das equações diferenciais não foi feita pelo grupo, estaremos, na realidade, fazendo uso do trabalho desenvolvido por Maecos de Cerqueira Leite. O que ele fez pode ser encontrado em seu repositório "TrabalhoAnalise-Numerica"no GitHub [9]. Em contrapartida, discutiremos a resolução e as soluções, aproximações encontradas.

O código foi desenvolvido no JupyterLab, por meio do uso da linguagem de programação Python. Foram utilizadas também as bibliotecas NumPy, que permite a realização de análises algébricas, estatísticas, matemáticas e lógicas; e Matplotlib, que permite a criação de visualizações interativas, animadas ou estáticas das informações trabalhadas.

2.1 Equação do calor

A partir da equação de calor, Eq. 1, e as condições de contorno definidas pelo professor da disciplina de Análise Numérica, podemos iniciar.

Primeiro é necessário definir os valores das seguintes variáveis: 1. Condutividade térmica - K; 2. Intervalo de tempo - t; 3. Número de pontos no eixo do x - Nx; 4. Número de pontos no eixo do t - Nt; 5. Tamanho da barra que será aquecida - L. Logo, podemos definir os espaçamentos de X e de t, usando as Eq. 5 e 6;

$$Hx = \frac{L}{Nx - 1} \tag{5}$$

$$Ht = \frac{T}{Nt} \tag{6}$$

Agora podemos criar a matriz U que é composta de x * t e devemos aplicar as condições de contorno. As condições de contorno definitas pelo professor são: 1.0 $\leq x \leq 1$; 2.0 $\leq t \leq 1$; 3. k = 0.5; 4; 4.$u(x, 0) = x(1 - x)^2$; 5.$u(0, t) = 0$; 6. $u(1, t) = 0$. Por fim vamos operar essa matriz com o método das diferenças finitas, utilizaremos em específico a diferença finita adiantada, mas para isso precisamos definir a segunda derivada de U em função de x pelas diferenças finitas, Eq. 7.

$$u_{xx} = \frac{u[i+1, n] - 2 \cdot u[i, n] + u[i-1, n]}{Hx^2} \tag{7}$$

Agora que sabemos a segunda derivada de U em função de x pelas diferenças finitas, podemos apresentar a equação do calor resolvida pelo método de diferenças finitas, Eq. 8.

$$du = Ht \cdot k \cdot u_{xx} \tag{8}$$

Por fim, basta apenas utilizar a Eq. 8 aplicada ao número de pontos nos eixos t e x para produzir um gráfico que demonstre a solução.

2.2 Equação de advecção

A solução numérica da equação diferencial parcial que representa a advecção por meio do método de Diferenças Finitas acaba envolvendo a formação de uma malha. A discretização dos pontos, nós, dessa malha acontecem no tempo e no espaço, envolvendo duas matrizes.

Aqui, nesta atividade, vamos resolver a equação apresentada em 9 e aqui repetida, que foi indicada pelo professor no enunciado do exercício:

$$u_t + \mu \cdot u_x = 0 \tag{9}$$

Considerando as seguintes condições iniciais,
1. $0 \leq x \leq 1$;
2.$0 \leq t \leq 1$;
3. $\mu = 0.25$;
4. $u(x, 0) = \eta(x) = x(1 - x)$;
5. $u(x, t) = \eta(x - \mu t)$.

Como comentado anteriormente, a discretização dos dados acontece em dois domínios: tempo e espaço. No caso do primeiro dos domínios, a diferença é `forward`, enquanto para o espaço a diferença seria `backwards` (sendo possível observar uma subtração na equação a seguir).

A equação em 9, então, sujeita a aplicação das diferenças finitas, passa a ser escrita da maneira demonstrada em 10 [5].

$$\frac{u_i^{(n+1)} - u_i^{(n)}}{\Delta t} + v \cdot \frac{u_i^{(n)} - u_{i-1}^{(n)}}{\Delta x} = 0 \tag{10}$$

Colocando o Ui, com expoente n+1 em evidência, temos:

$$u_i^{(n+1)} = u_i^{(n)} - \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot (u_i^{(n)} - u_{i-1}^{(n)}) \tag{11}$$

Porém, no código, para de fato se resolver o problema, optou-se por usar a `backforward difference` ou diferença atrasada, porque ele oferece um resultado com maior acurácia (já que considera também a direção do fluxo do fluido) e mais estabilidade do que se optássemos por utilizar o método no seu estado mais simples [3]. Sendo assim, a equaçao final utilizada é:

$$u(t + h) = u(t) + h \cdot \mu \cdot \frac{u(x - h) - u(x)}{h} \tag{12}$$

3 Resultados

3.1 Equação do calor

O gráfico 3D da equação do calor resolvido pelo método de diferenças finitas, (Figura 2), pode descrever como a distribuição de temperatura ocorrerá com as condições de contorno definidas.

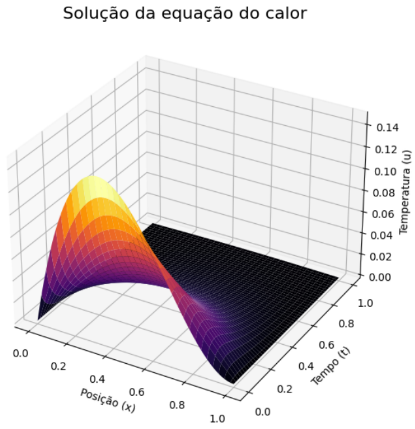

Figura 2: Plot da solução da equação do calor. Fonte: [9].

3.2 Equação de advecção

O método de Difrenças Finitas guarda as soluções em pontos específicos do espaço e tempo. Cada ponto da malha é assoviada a uma função e as derivadas são substituidas pela diferença entre pontos vizinhos.

O plot visto na Figura 03 abaixo nos dá uma ideia de como seria o comportamento da advecção através da formação da malha supramencionada. De acordo com a fórmula dada e as condições iniciais definidas, vemos que o transporte de massas é feito ao longo do tempo e do espaço/posição.

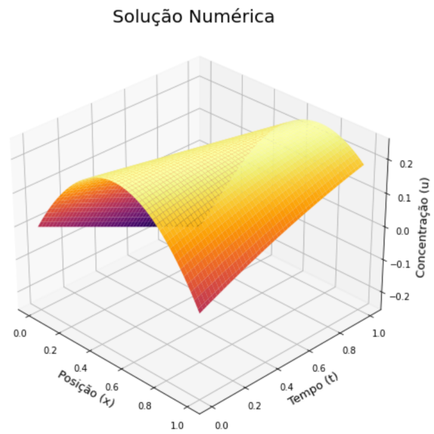

Figura 3: Plot da solução da equação de advecção. Fonte: [9].

Pesquisando, encontramos outro código [7] que considerava o mesmo problema, com a equação definida em 2, mas agora fazendo uso das diferenças finitas centralizadas e considerando o erro de cada medição. Ademais, o autor também o Método de Lax–Wendroff. Sinceramente, eu não consigo explicar muito bem o que ele fez e o significado do `plot` dele, porque não tinha qualquer contextualização no GitHub, no código e nem havia qualquer indicação do que cada eixo se refere, mas vamos ver se conseguimos tirar alguma informação útil para esse trabalho.

Contudo, basicamente, as informações que podem ser obtidas é que o `plot` apresenta diferentes aproximações comparadas com o que seria a resolução analítica e são avaliados também os erros para cada aproximação [7], [10].

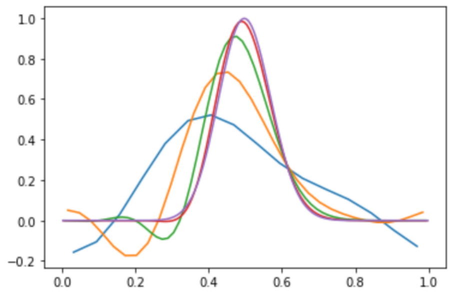

Figura 4: Plot da solução da equação de advecção centralizada. Fonte: [7].

4 Conclusão

Esse exercício permitiu percebermos que o método das Diferenças Finitas é uma boa ferramenta para aproximar soluções para equações diferenciais e aqui testamos isso em dois contextos distintos: equação do calor e equação de advecção. A visualização das aproximações é muito interessante também por ela assumir um caráter 3D. Quando de maneira animada, como o `gif` disponível na página da Wikipedia referente à Advecção [1] por exemplo, fica mais interessante porque relembra de fato o movimento de um fluido transportando massa, como o transporte de sedimento em um rio.

É valido falar também que, apesar de interessante, foi uma atividade difícil, isso porque desde o início usamos o código de outras pessoas (caso contrário seria ainda pior). Entender o método já é difícil, mas entender ele de forma contextualizada foi ainda mais.

5 Contribuições dos autores

Débora van Putten: Introdução e Diferenças Finitas; Equação de Advecção - introdução, metodologia, resultados; Revisão; Conclusão.
Vitor E. G. Barelli: Resumo; Diferenças Finitas; Equação do Calor - introdução, metodologia, resultados; Conclusão.

Referências

[1] **Advectionoldid=1149607641**. en. Page Version ID: 1149607641. Abr. de 2023. URL: `https://en.wikipedia.org/wiki/Advection`.

[2] Jordana Fernandes Costa e Diogo Gonçalves Dias. "Equação do Calor: uma comparação entre soluções analítica e computacional para uma barra de cobre finita e isolada termicamente". Em: **REMAT, Bento Gonçalves, RS, Brasil** 1 (2018), pp. 27–37.

[3] Michele Cotrufo. **Advection equation with finite difference: importance of forward, backward or centered difference formula for the first derivative**. Forum post. Ago. de 2017. URL: `https://scicomp.stackexchange.com/q/27737`.

[4] Danuza Bermond EQUER. **"Modelagem, Aproximação e Simulações Computacionais de Impacto Ambiental com Difusibilidade Variável: Um Estudo de Caso"**. URL: https://ime.unicamp.br/pos-graduacao/modelagem-aproximacao-simulacoes-computacionais-impacto-ambiental-com-difusibilidade.

[5] **Finite Difference Methods for PDEs**. pt-BR. URL: https://www.youtube.com/watch?v=0JL981rs808.

[6] **Finite Differences**. pt-BR. URL: https://www.youtube.com/watch?v=YotrBNLFen0.

[7] GitHub Hao Zhang. **Numerical-Methods-for-Physics, note = Acessado em 27/06/2023,** https://github.com/hbcbh1999/Numerical-Methods-for-Physics/tree/master.

[8] Yves-Garnard Irilan e RevistaFT Paul André. **Aplicação de método matemático para soluções numéricas de equações diferenciais parciais através de um problema prático.** Acessado em 25/06/2023, https://revistaft.com.br/aplicacao-de-metodo-matematico-para-solucoes-numericas-de-equacoes-diferenciais-parciais-atraves-de-um-problema-pratico/.

[9] GitHub Marcos Cerqueira Leite Pimentel. **TrabalhoAnaliseNumerica, note = Acessado em 25/06/2023,** https://github.com/Karl-Marcos/Trabalho_Analise_Numerica/.

[10] Olusegun Adeyemi Olaiju et al. "Achieving a Sustainable Environment using Numerical Method for the Solution of Advection Equation in Fluid Dynamics". en. Em: **Chemical Engineering Transactions** 63 (mai. de 2018), pp. 631–636. ISSN: 2283-9216. DOI: 10.3303/CET1863106. URL: https://www.cetjournal.it/index.php/cet/article/view/CET1863106.

[11] **PDE | Finite differences: introduction**. Inglês. URL: https://www.youtube.com/watch?v=g3Xw1r7QGOE.

[12] James Stewart. **Calculus: early transcendentals**. 8th ed. Belmont, CA: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2016. ISBN: 9780538497909.

[13] ViniciusAlmada. **Introducao Ao Metodo Das Diferencas Finitas, note = Acessado em 25/06/2023,** https://pt.scribd.com/document/415766983/AULA-2-INTRODUCAO-AO-METODO-DAS-DIFERENCAS-FINITAS-PDF.

[14] wikipedia. **Equação do calor = Online, note = Acessado em 25/06/2023,** https://pt.wikipedia.org/wiki/Equacao_do_calor.