Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais

Ilum Escola de Ciência

João Pedro Aroucha de Brito - 220047

Monyque Karoline de Paula Silva - 220063

Sophia Figueiredo Michel - 220059

# Método das Diferenças finitas aplicado para Equações Diferenciais

Feito sob orientação do professor:

*Vinicius Francisco Wasques*

Campinas

26 de junho de 2023

# Conteúdo

# 1 Introdução

Equações diferenciais são um tipo de relação traçada entre uma função desconhecida de representação quantitativa e suas derivadas, as quais apresentam a taxa de variação dessa função. Deste modo, essas equações possuem um papel muito importante na descrição e modelagem de fenômenos complexos de diferentes áreas da ciência, permitindo a sua compreensão. Porém, em muitos casos, equações diferenciais se mostram muito difíceis, até mesmo impossíveis, de serem resolvidas em sua forma analítica e é por esse motivo que métodos numéricos são utilizados como ferramenta para encontrar aproximações de soluções para as equações.[1][2]

No presente trabalho, portanto, temos como objetivo explorar um desses métodos, chamado de Método das Diferenças Finitas (MDF), aplicando-o para a resolução de equações diferenciais parciais (EDPs). Este tipo específico de equação diferencial é muito utilizado para descrever relações em que temos duas ou mais variáveis independentes, como é o caso apresentado aqui. Com isso, iremos abordar os conceitos básicos sobre técnica, sua implementação computacional e uma análise de erro das aproximações feitas com ela.

Ao final, buscamos apresentar exemplos de aplicações desse método para problemas reais que envolvem, especificamente, as equações de calor e de advecção, aplicando as condições de contorno. O esperado é que este trabalho permita uma compreensão quanto ao MDF e quanto ao seu potencial de uso como boa ferramenta numérica para encontrar soluções de EDPs em um conjunto de aplicações científicas e tecnológicas.

# 2 Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas (MDF) é uma técnica de análise de equações diferenciais para encontrar soluções aproximadas para essas relações. A ideia de aplicação desse método envolve a discretização do domínio da equação em um intervalo definido, dividido em uma quantidade finita de subintervalos. Em cada um destes, as derivadas da equação diferencial que descrevem cada um dos pontos são aproximadas através das fórmulas de diferenças finitas. [3][4] Tais expressões possuem uma forma específica dada por uma função $f(x)$ que está sendo analisada:

$$f(x+b) - f(x+a). \tag{1}$$

[5][6][7]

Mapeando essa função a partir de um operador de diferença, o qual é uma equação funcional definida por:

$$\Delta[f](x) = f(x+1) - f(x). \tag{2}$$

[5][6][7]

Para entender melhor o método de diferenças finitas, podemos considerá-la em sua forma mais simples, ao ser aplicada para uma função qualquer $u(x)$, com apenas uma variável. Querendo, assim, aproximar $u'(\overline{x})$ pelo método para valores de $u$ em um número de finito de pontos próximos a $\overline{x}$, devamos usar a seguinte fórmula de diferenças finitas:

$$D_+u(\overline{x}) \equiv \frac{u(\overline{x}+h)-u(\overline{x})}{h} \tag{3}$$

em que $h$ é a ordem da derivada e $D_+$ é a aproximação de apenas um dos lados da função $u(\overline{x})$, nesse caso, a diferença finita à direita. Essa diferença é uma inclinação à direita da função, interpolando $u$ nos pontos $\overline{x}$ e $\overline{x}+h$.[8]

Importante ressaltar que $\overline{x}$ é o ponto máximo da função $u(\overline{x})$, a qual é parabólica com concavidade para baixo. Por esse motivo, que temos aproximações de inclinações diferentes, sendo à direita, à esquerda ou central. Como já vimos, $D_+x(\overline{x})$ é a aproximação unilateral pela direita, enquanto que $D_-x(\overline{x})$ é a aproximação pela esquerda, interpolando a função nos pontos $\overline{x}$ e $\overline{x}-h$,

$$D_-u(\overline{x}) \equiv \frac{u(\overline{x})-u(\overline{x}-h)}{h}. \tag{4}$$

Já a inclinação de aproximação central, que interpola a função nos valores de $\overline{x}-h$ e $\overline{x}+h$, é dada por:

$$D_0u(\overline{x}) \equiv \frac{u(\overline{x}+h)-u(\overline{x}-h)}{2h} = \frac{1}{2}(D_+u(\overline{x})+D_-u(\overline{x})). \tag{5}$$

[8]

Essas aproximações, assim como em qualquer outro método, possuem um erro determinado a partir da notação de *Big-Oh*, que pode ser observada quando expandimos cada um dos valores da função $u$ em uma série de Taylor, permitindo computar que:

$$D_+u(\overline{x}) - u'(\overline{x}) = \frac{1}{2!}hu''(\overline{x}) + \frac{1}{3!}h^2u'''(\overline{x}) + O(h^3) \tag{6}$$

$$D_-u(\overline{x}) - u'(\overline{x}) = -\frac{1}{2!}hu''(\overline{x}) + \frac{1}{3!}h^2u'''(\overline{x}) + O(h^3) \tag{7}$$

No caso especial da inclinação central, seu erro é dado pela combinação de ambas as expansões para $\overline{x}+h$ e $\overline{x}-h$:

$$D_-u(\overline{x}) - u'(\overline{x}) = -+\frac{1}{3!}h^2u'''(\overline{x}) + O(h^4) \tag{8}$$

em que os termos da ordem de número ímpar colapsam, gerando um erro de ordem maior, típico de aproximações centrais.[8]

Dessa forma, não é mais necessário tentar resolver analiticamente uma equação diferencial que é muito complexa de se calcular. Agora podemos trabalhar com um sistema de equações algébricas muito mais simples, que pode ser resolvido numericamente. O resultado é uma aproximação dos pontos discretos do domínio da função analisada com erros de ordem 3 e 4.

## 2.1 Equação de Advecção

A advecção, também conhecida como difusão, é um conceito empregado nas áreas da física e da engenharia que está associado a um determinado transporte de massa dado por um movimento de substâncias que possuem as propriedades de um fluido, sendo gás ou líquido. Esse tipo de movimento tem direção horizontal, que ocorre em sistemas em quais existem gradientes de concentração, como tinta diluindo na água ou o cheiro de um perfume se espelhando por um lugar. Entretanto, também é possível observar esse comportamento no interior de sólidos a partir do mecanismo de movimentação atômica, como é o caso dos metais.

Observando um esquema idealizado desse fenômeno, em um Par de Difusão, torna-se possível compreender melhor como funciona esse transporte nos sólidos. O sistema que recebe o nome de par de difusão é composto por duas estruturas metálicas diferentes postas em contato de superfície. Podemos observar, na Figura 1, um exemplo dessa configuração com cobre e níquel, e na Figura 2, a representação da localização dos átomos nesse par.[9]

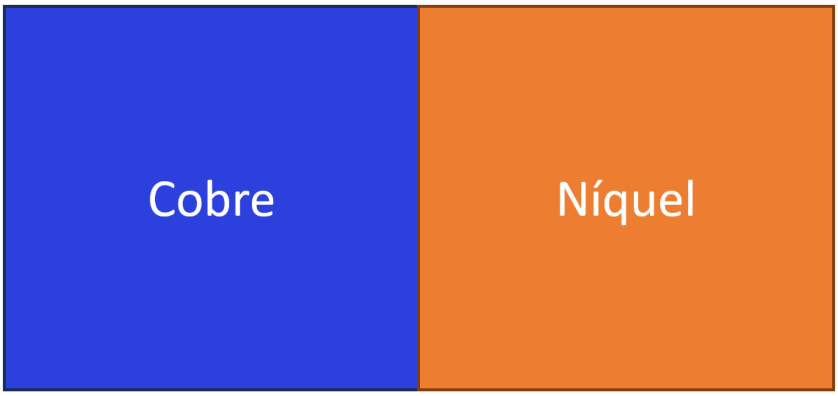


Figura 1: Par de Difusão metálico de cobre-níquel antes do tratamento térmico

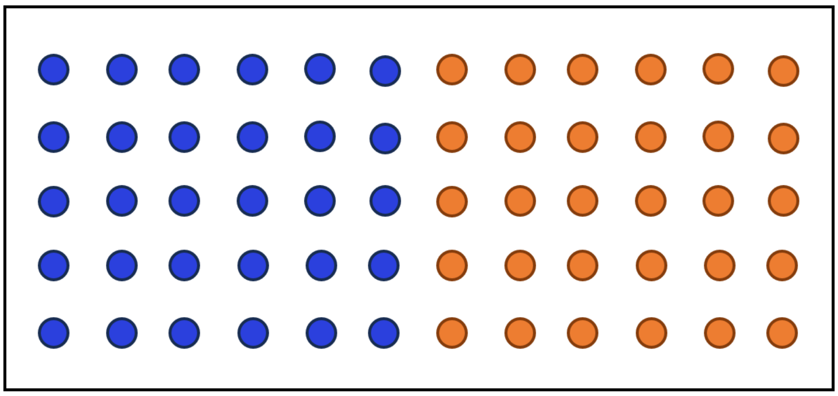

Figura 2: Representação dos átomos do par metálico de cobre-níquel antes do tratamento térmico

Ambas as figuras expressam um sistema de cobre-níquel a momentos antes de submetermos ele à uma temperatura elevada, de forma que os átomos possam se mover. Isso ocorre pois esse fenômeno é consequência da aplicação de um tratamento térmico que aumenta a energia cinética de modo vibracional dos átomos, chegando a um ponto em que as interações com átomos vizinhos sejam quebradas.[9] Para que o fenômeno possa ocorrer, então, deve haver uma energia grande o suficiente no átomo para que seja causada uma distorção no metal quando se desloca. Além disso, também é preciso haver uma posição vazia adjacente ao átomo para onde ele possa se transportar, característica essa que diz respeito a uma difusão substitucional, ou por lacunas.[10]

Abaixo, nas figuras 3 e 4 é possível ver, de maneira simples, como fica o par de metais depois de ser aplicado o tratamento por aumento de temperatura:

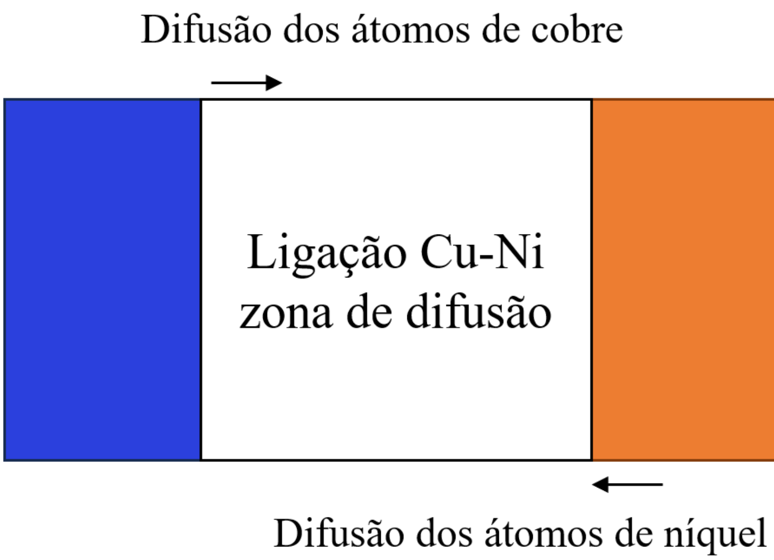


Figura 3: Par de Difusão metálico de cobre (em azul) e níquel (em laranja) depois do tratamento térmico.

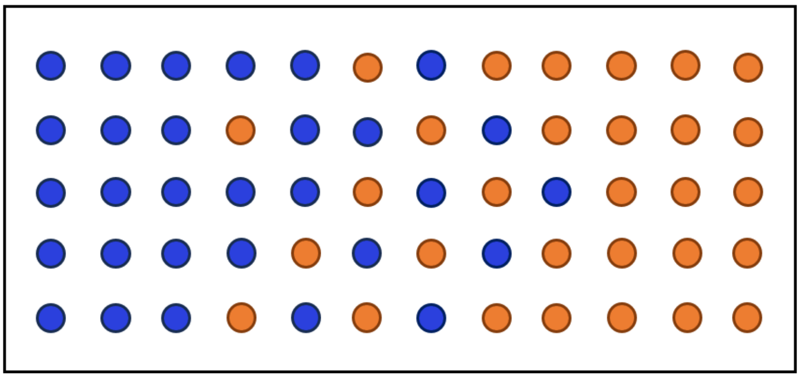

Figura 4: Representação dos átomos do par metálico de cobre-níquel que se moveram após o tratamento térmico.

Buscando uma descrição matemática desse fenômeno, temos o modelo de função que reflete esse transporte através de duas variáveis, posição e tempo, as quais caracterizam a equação diferencial que relaciona essas quantidades com sua razão de variação. Esse modelo é identificado como uma EDP, equação diferencial parcial. Para solucionar essa equação analiticamente, percebemos que é necessário utilizar o MDF pelo fato da variação da posição ao longo de um tempo $t$ possuir um caráter hiperbólico, mostrando a dependência da posição pelo tempo.

A descrição desse fenômeno, portanto, se encontra em uma equação chamada de Equação de Advecção, apresentada abaixo:

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

em que seus termos descrevem o comportamento da equação:

- $x$ é o domínio espacial;
- $t$ é o tempo;
- $u = u(x,t)$ é a concentração da substância no tempo $t$ para o ponto $x$;
- $\mu$ é a velocidade de transporte;
- $u_t$ é a primeira derivada parcial de $u$ em função do tempo, que descreve a variação de concentração ao longo do tempo;
- $u_x$ é a primeira derivada parcial de $u$ em função da posição, que descreve a variação da concentração conforme a mudança de posição dos átomos.

A equação diferencial parcial que descreve as relações de variações, portanto, é dada como [11]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mu \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{10}$$

Sendo os valores de $x$ e $t$ variam das formas: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1$; seguimos as seguintes condições de contorno para aplicar o método: $\mu = 0.25$; $u(x,0) = \eta(x) = x(1-x)$; $u(x,t) = \eta(x - \mu t)$.

### 2.1.1 Aplicando o Método de Diferenças Finitas

Discretiza-se a equação diferencial e substitui-se as derivadas presentes nesta equação por aproximações contendo apenas valores numéricos. Logo, sabendo disso, vamos considerar a Diferença Finita de 1ª Ordem.

O primeiro passo é considerar a aproximação das derivadas parciais da equação de advecção a seguir, utilizando as diferenças finitas atrasadas, para posição, e adiantadas para o tempo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lim_{h \to 0} \frac{u(x,t+h) - u(x,t)}{h} \approx \frac{u(x,t+h) - u(x,t)}{h}, \tag{11}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{p \to 0} \frac{u(x,t) - u(x-p,t)}{p} \approx \frac{u(x,t) - u(x-p,t)}{p}. \tag{12}$$

Substituindo estes na equação, obtêm-se

$$\frac{u(x,t+h) - u(x,t)}{h} + \mu \frac{u(x,t) - u(x-p,t)}{p} = 0. \tag{13}$$

Substituindo os termos pela notação: $u_{ij}$ tem-se:

$$\frac{u_{ij+1} - u_{ij}}{h} + \mu \frac{u_{ij} - u_{i-1j}}{p} = 0. \tag{14}$$

Agora, basta isolar o termo $u_{ij+1}$

$$\begin{aligned} \frac{u_{ij+1} - u_{ij}}{h} &= -\mu \left( \frac{u_{ij} - u_{i-1j}}{p} \right) \\ u_{ij+1} - u_{ij} &= -\frac{\mu h}{p} \left( u_{ij} - u_{i-1j} \right) \\ u_{ij+1} &= u_{ij} - \frac{\mu h}{p} \left( u_{ij} - u_{i-1j} \right) \end{aligned} \tag{15}$$

Esta equação pode ser utilizada para se iterar em uma série de passos finitos definidos, onde as condições iniciais da equação tenham sido determinadas, para que se obtenha a solução numérica da equação de advecção. O resultado obtido através do código em anexo pode ser observado na figura 5

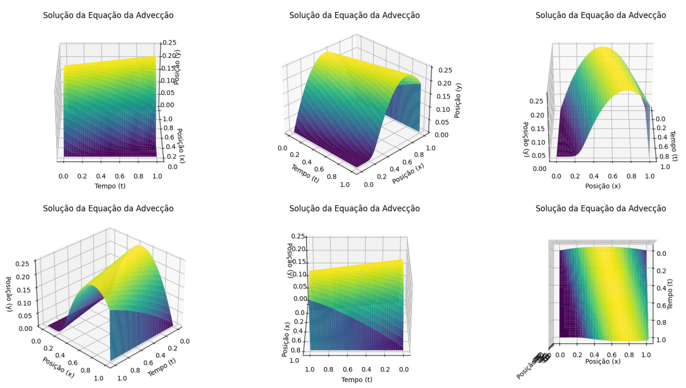


Figura 5: Gráfico obtido da resolução do problema da equação de advecção com diferenças finitas atrasadas.

## 2.2 Equação do Calor

De acordo com Figueiredo (1977), a equação do calor, pode ser considerada uma Equação Diferencia Parcial Clássica devido o seu valor histórico, visto que esse foi um dos primeiros problemas modelados pelas Equações Diferenciais a aparecer aos matemáticos. Ela é muito discutida para aplicação de modelagem do fluxo de calor de uma barra de ferro, visto que essa equação diz respeito ao processo de transporte da energia térmica ao longo do tempo com uma capacidade específica de calor.

De modo a compreender essa aplicação física, vamos pensar em uma barra de material condutor de calor, homogênea e finita, em que a superfície lateral esta isolada, de tal modo que o calor só pode ser adicionado de forma externa pelas extremidades, um exemplo do esquemático pode ser observado na Figura 6.

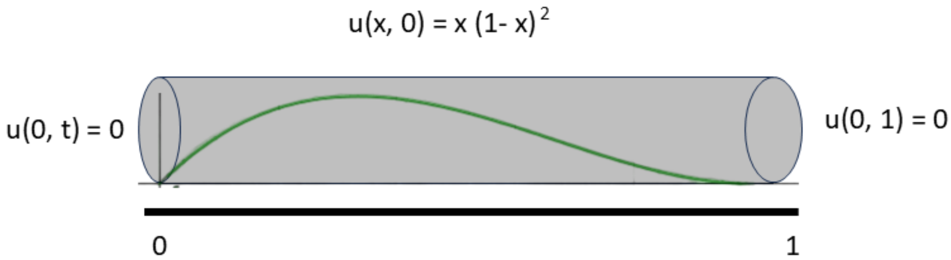


Figura 6: Esquemático da Barra condutora de calor para compreensão da aplicação física da Equação de Calor

Nesse exemplo, simula-se uma barra condutora com as condições de contorno $u(x, 0) = x(1-x)^2, u(0,t) = 0$ e $u(1,t) = 0$. De modo a modelar o fluxo de calor dessa barra, utiliza-se de deduções empíricas da física, as quais são: 1ª Lei da Calorimetria e a Lei de Difusão de Fourier.

A 1ª Lei da Calorimetria descreve um comportamento de conservação de energia, isto é, o princípio contempla a transferência de calor entre corpos e a variação de temperatura resultante. Por sua vez, a Lei de Difusão de Fourier, aborda sobre a taxa de transferência de calor por condução em um meio.

Esses dois princípios ao serem abordados juntos, de acordo com a dedução de ZILL e CULLEN (2001) [12], além da abordagem de OLIVEIRA (2020) [13], fazem com que a Equação do Calor, seja expressa matematicamente por:

$$u_t = K \cdot u_{xx} \tag{16}$$

em que cada termo descreve o comportamento da equação:

- $u(x, t)$ é a temperatura na posição $x$ e no instante de tempo $t$, ela é responsável por descrever a mudança de temperatura no espaço e no tempo.
- $K$ é a constante de condutividade térmica do material.
- $u_{xx}$ é a segunda derivada parcial de $u$ em relação a $x$, que descreve a curvatura da distribuição de temperatura no espaço.

- $u_t$ é a primeira derivada parcial de $u$ em relação a $t$, que descreve como a temperatura muda ao longo do tempo.

Seguimos as seguintes condições de contorno para aplicar o método: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1$, em que $K = 0.5, u(x,0) = x(1-x)^2, u(0,t) = 0$ e $u(1,t) = 0$.

### 2.2.1 Aplicando o Método de Diferenças Finitas

Para modelar uma barra de ferro na equação do calor com o método de diferenças finitas dada as condições de contorno, discretiza-se a equação diferencial e substitui-se as derivadas presentes nesta equação por aproximações contendo apenas valores numéricos.

Logo, sabendo disso, vamos considerar a Diferença Finita de 1ª Ordem e a Diferença Finita de 2ª Ordem. A Diferença Finita de 1ª Ordem é dada por:

$$V'(t) = \frac{V(t+h) - V(t-h)}{2 \cdot h} \tag{17}$$

Por sua vez, a Diferença Finita de 2ª Ordem é dada por:

$$V''(t) = \frac{V(t+h) - 2 \cdot V(t) + V(t-h)}{h^2} \tag{18}$$

Utiliza-se essas duas equações para realizar a aproximação pela Equação do Calor $u_t = K \cdot u_{xx}$, de modo a termos:

$$\frac{u(x,t+h) - u(x,t-h)}{2h} = K \cdot \frac{u(x+p,t) - 2u(x,t) + u(x-p,t)}{p^2} \tag{19}$$

Podemos representa a função u(x, t) discretizada em pontos no espaço e no tempo, pelo nome da variável U. Logo:

$$\begin{gathered} u(x,t) = Uij; assim: \\ u(x+h,t) \to U_{i+1} \to U_{ij+1} \\ u(x-h,t) \to U_{i-1} \to U_{ij-1} \end{gathered} \tag{20}$$

Em seguida, dada as determinações, substitui-se na equação:

$$\frac{U_{ij+1} - U_{ij-1}}{2h} = K \cdot \frac{U_{i+1j} - 2U_{ij} + U_{i-1j}}{p^2} \tag{21}$$

De modo com que nos tenhamos:

$$U_{ij+1} = \frac{U_{ij-1} + 2hK}{p^2} \cdot U_{i+1j} - 2U_{ij} + U_{i-1j} \tag{22}$$

Obtido essa resposta, aplica-se essa equação no código em Python, de modo com que o termo $\frac{2hK}{p^2}$ seja substituído pelo coeficiente $\frac{dt}{dx^2}$ que representa a razão entre o passo de tempo e o quadrado do passo no espaço, correspondendo à discretização temporal e espacial utilizada. O resultado obtido através do código em anexo pode ser observado na figura 7

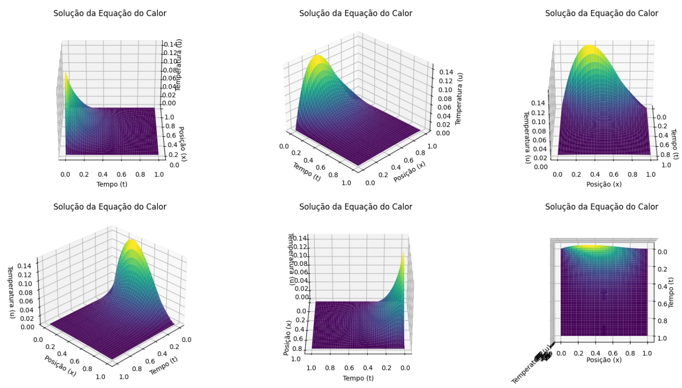


Figura 7: Gráfico obtido da resolução do problema da equação de calor com diferenças finitas centradas.

# 3 Conclusão

O presente trabalho abordou o Método de Diferenças Finitas que se mostrou uma ótima alternativa para a resolução de Equações Diferenciais Parciais ao realizarem a discretização e substituição das derivadas. É um método muito versátil, como visto pela abordagem de duas EDP's Clássicas: Advecção e Calor, além de não ser computacionalmente tão custoso ao se pensar em suas propriedades de aplicação, também apresentando uma boa eficiência devido suas partições em pequenas regiões.

# 4 Contribuições

Nesta seção, destaca-se as contribuições dos autores no presente trabalho:

- João Pedro de Aroucha Brito: Código da Equação de Calor e de Advecção, Aplicação da Equação de Advecção no Método de Diferenças Finitas.
- Monyque Karoline de Paula Silva: Introdução teórica sobre Equação de Calor, Aplicação da Equação de Calor no Método de Diferenças Finitas, Código da Equação de Calor e Conclusão.
- Sophia Figueiredo Michel: Introdução geral, Introdução teórica sobre Equação de Advecção e Descrição Geral do Método de Diferenças Finitas.

# Referências


[1] I. KANWAL. *Differential Equation(Definition, Types, Order, Degree, Examples)*. URL: https://byjus.com/maths/differential-equation/.

[2] *Differential equations introduction*. Out. de 2016. URL: https://www.khanacademy.org/math/ap-calculus-ab/ab-differential-equations-new/ab-7-1/v/differential-equation-introduction.

[3] *Finite Difference Method — Python Numerical Methods*. Berkeley Python Numerical Methods. 2020. URL: https://pythonnumericalmethods.berkeley.edu/notebooks/chapter23.03-Finite-Difference-Method.html.

[4] R. SHAMEY e X. ZHAO. «5 - Solving dynamic equations in dye transport | Modelling, Simulation and Control of the Dyeing Process». Em: *Science Direct* (2014), pp. 100–113. DOI: https://doi.org/10.1533/9780857097583.100.

[5] Jeff Dewynne Paul Wilmott Sam Howison. *The Mathematics of Financial Derivatives: A Student Introduction*. Cambridge University Press, 1995, p. 137.

[6] Pete Olver. *Introduction to Partial Differential Equations*. Springer Science & Business Media, 2013, p. 182.

[7] M. Hanif Chaudhry. *Open-Channel Flow*. Springer, 2003, p. 369.

[8] Randall J. LeVeque. *Finite Difference Methods for Differential Equations*. University of Whashington, 2005, p. 253.

[9] Prof. Dr. Felipe Corrêa. *Fenômenos de Transporte - Transporte de massa*. University Lecture.

[10] *Explicando a Matéria - Difusão em Sólidos*. URL: https://www.jornalamateria.ufscar.br/news/explicando-a-materia-difusao-em-solidos.

[11] HigherEduTutor. *Finite Difference Methods for PDEs: Advection equation*. URL: http://www-cs-faculty.stanford.edu/~uno/abcde.html. (accessed: 25.06.2023).

[12] Dennis G. Zill e Michael R. Cullen. *Equações Diferenciais*. 3ª. São Paulo: Pearson Makron Books, 2001. 469 pp.

[13] *Solução numérica da equação do calor utilizando o método das diferenças finitas – formulação explicita*. Dez. de 2016. URL: https://repositorio.pucgoias.edu.br/jspui/handle/123456789/1212.