Análise numérica - Método das diferenças finitas

Barbara Perez, Sarah Freire, Thaynara Matos e Vitória Yumi Nicoleti

Ilum, Escola de Ciência, CNPEM - Campinas, Brasil

24 de junho de 2023

1 Introdução

Cada vez mais, busca-se a descrição e modelagem de diversos problemas do mundo real por meio de equações diferenciais. Nesse sentido, o entendimento de múltiplos métodos para a resolução delas se faz de suma importância e relevância para a compreensão de assuntos das mais diversas áreas, que, muitas vezes, são considerados difíceis pela complexidade de solução.

Na área de equações diferenciais, há as ordinárias e as parciais. As ordinárias se caracterizam por uma equação de derivadas de uma função qualquer de uma única variável, por exemplo, que dependa apenas do tempo. Em contrapartida, as parciais são equações de derivadas de uma função qualquer que pode depender de mais de uma variável, logo, exemplificando, que pode apresentar dependência de tempo e espaço.

Dentre os métodos existentes, há o método das diferenças finitas, que destaca-se por permitir que se aproxime, utilizando Série de Taylor, por exemplo, as derivadas de uma função por fórmulas discretas que exigem apenas um conjunto finito de pares ordenados de valores do domínio e da imagem (diferenças finitas). Assim, tem, como principal objetivo, aproximar soluções para equações diferenciais parciais (EDPs) - apesar de também poder resolver equações diferenciais ordinárias (EDOs) -, isto é, permitir que se aproxime os valores que dependem das derivadas parciais com respeito ao espaço e/ou ao tempo de uma função que satisfaça uma dada relação, que determinada pelo seu campo, dada algumas condições de contorno ao longo das bordas do seu domínio [6]. Essa abordagem traz grandes vantagens, pois, ao resultar em um grande sistema algébrico, ao invés da equação diferencial, torna o problema de mais fácil resolução numérica e computacional.

Nesse contexto, visando aplicá-la e desenvolver códigos que a resolvam e permitam solução gráfica para análise, serão resolvidas a equações de calor e de a de advecção.

2 Equação do calor

2.1 Explicação do problema

A Equação do Calor pode ser considerada uma consequência da lei de Fourier do resfriamento e é também chamada de Equação da Condução de Calor ou Equação do Calor Difuso. Ela uma equação diferencial parcial(EDP) que descreve a propagação ou distribuição do calor[4] em um determinado meio e serve como modelo matemático para a difusão de calor em sólidos[5].

No nosso problema, ela será dada por:

$$U_t = kU_{xx} \tag{1}$$

Essa equação descreve como a temperatura U varia ao longo do tempo t e ao longo da posição x em uma dimensão, de modo que temos que:

U_t**:** taxa de variação da temperatura em relação ao tempo.
k**:** coeficiente de difusão térmica, que depende das propriedades térmicas do material tratado
U_{xx} **:** segunda derivada espacial da temperatura, que representa a taxa de variação da temperatura em relação à posição.

Sendo $0 \leq x \leq 1$ 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 Solução por diferenças finitas

Dessa forma, dada a Equação 1 referente a variação do calor no tempo, é possível resolver esse problema pelo método das diferenças finitas, visto que é necessário aproximar tanto a primeira derivada do calor em relação ao tempo, quanto a segunda derivada em relação ao espaço para encontrar a solução.[[3]]

Dentro das condições, foi indicado que deveriam ser considerados os intervalos $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1$ e, por isso, o primeiro passo é discretizá-los. Nesse sentido, o intervalo espacial é particionado em $P_x = \{x_0, x_1, \ldots, x_m, x_{m+1}\}$ e o temporal em

$P_t = \{t_0, t_1, \ldots, t_n, t_{n+1}\}$, de modo que os passos sejam $h_x = \frac{1}{m+1}$ e $h_t = \frac{1}{n+1}$, respectivamente.

Para encontrar a solução da Equação 1, pode-se inciar pela aproximação das derivadas parciais. Assim, utilizando a diferença atrasada para a primeira derivada do calor em relação ao tempo U_t, temos que

$$U_t = \frac{\partial U(x,t)}{\partial t}$$

$$U_t = \frac{U(x,t) - U(x,t-h_t)}{h_t}. \quad (2)$$

A aproximação da segunda derivada por diferença finitas pode ser denotada por

$$U_{xx} = \frac{\partial U(x,t)}{\partial x^2}.$$

$$U_{xx} = \frac{U(x-h_x,t) - 2U(x,t) + U(x+h_x,t)}{h_x^2}. \quad (3)$$

Com as duas aproximações necessárias, é possível reorganizar a equação do calor (Equação 1) com os termos alcançados. Para facilitar a implementação futura, o subíndice que representa a partição para o espaço e tempo serão consideradas como $i = x_0, x_1, \ldots, x_m, x_{m+1}$ e $j = t_0, t_1, \ldots, t_n, t_{n+1}$. Assim,

$$\frac{U(x,t)-U(x,t-h_t)}{h_t} = k\frac{U(x-h_x,t)-2U(x,t)+U(x+h_x,t)}{h_x^2}$$

$$\frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{h_t} = k\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h_x^2}. \quad (4)$$

Para alcançar a fórmula de atualização (Equação), $U_{i,j+1}$ é isolado e os termos são reorganizados, de modo a considerar $\alpha = \frac{h_t k}{h_x^2}$. Com isso, um sistema matricial pode ser construído considerando as condições de contorno.

$$U_{i,j-1} = -\alpha(U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}) + U_{i,j}$$

$$U_{i,j-1} = -\alpha U_{i-1,j} + U_{i,j}(1 + 2\alpha) - \alpha U_{i+1,j} \quad (5)$$

Nesse sistema matricial do tipo $AU_j = U_{j1} + b$, A representa a matriz dos coeficientes que resultaram da discretização da equação e dita a influência dos pontos vizinhos em cada ponto da malha espacial, b é o vetor que contém informações sobre as condições de contorno e, enfim, a matriz U contém a solução aproximada da equação do calor discretizada nos pontos da malha espacial ao longo do tempo.

$$A = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \ddots & \vdots \\ 0 & \alpha & 1-2\alpha & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \alpha \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{bmatrix},$$

$$U = \begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,N} \\ u_{2,1} & u_{2,2} & \cdots & u_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{M,1} & u_{M,2} & \cdots & u_{M,N} \end{bmatrix} e$$

$$b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Enfim, foi elaborado um código em Python que resolve esse sistema linear e identifica a solução U. A distribuição da temperatura de acordo com a mudança do tempo e da posição pode ser observada na Figura 1.

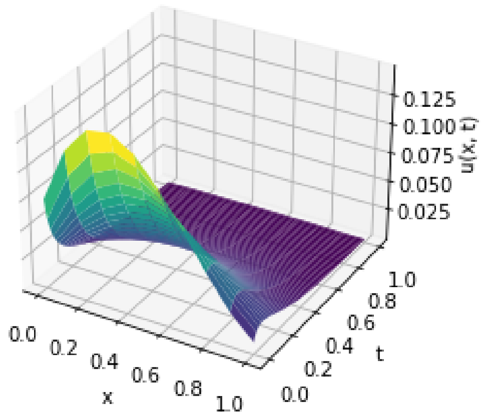

Figura 1: Representação da distribuição da temperatura conforme mudanças de posição e temperatura.

3 Equação de Advecção

3.1 Explicação do problema

A equação da advecção se trata de uma equação diferencial parcial (EDP) que descreve o transporte, também chamado de advecção, de determinada quantidade conservada por um campo de velocidade. Essa equação é bastante utilizada em diferentes áreas e permite a modelagem, do transporte de substâncias por um meio, sendo um exemplo de aplicação a modelagem de poluentes em corpos d'água. O estudo dela é fundamental também, por exemplo, para a solução das equações de Navier-Stokes, que buscam descrever o escoamento de fluidos [1, 2].

A equação de advecção linear em uma dimensão pode ser dada por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mu\frac{\partial U}{\partial x} = 0$$

$$U(x,0) = \eta(x)$$

sendo μ uma velocidade constante e $\eta(x)$ a condição inicial.

Assim, sua solução exata que procuramos, baseada na condição inicial, pode ser escrita por:

$$U(x,t) = \eta(x - \mu t)$$

3.2 O uso do método de diferenças finitas para resolver o problema

Dando continuidade, considerando a equação apresentada na subseção anterior, pode-se iniciar seu processo de resolução por meio do método das diferenças finitas, visto a necessidade de aproximar a sua primeira derivada em relação ao tempo e ao espaço.

Assim, temos então, uma equação que descreve o movimento de fluídos a partir de sua derivada parcial em relação ao tempo e em relação a posição. Dado também as sua malha gráfica de comportamento sendo $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1$, a velocidade do movimento como $\mu = 0,25$ e as condições sendo $U(x,0) = \eta(x) = x(1-x)$ e $U(x,t) = \eta(x - \mu t)$.

Com todas as condições estabelecidas, pode-se, então, iniciar os passos do método das diferenças finitas. A priori, o que deve ser feito é a discretização dos intervalos de tempo e espaço. Tornando-os pontos discretos, $P_x = \{x_0, x_1, ..., x_n, x_n + 1\}$ e para o período de tempo, $P_t = \{t_0, t_1, ..., t_n, t_n + 1\}$ utilizando os passos $h_x = \frac{1}{n+1}$ e $h_t = \frac{1}{n+1}$ para as duas discretizações.

Para encontrar a solução das derivadas parciais da equação será utilizado, então, o método das diferenças finitas à direita, para o tempo obtemos,

$$D_+U(x) = \frac{U(x, t+h) - U(x,t)}{h}. \tag{6}$$

Já para a aproximação da posição será necessário utilizar as diferenças finitas à esquerda,

$$D_-U(t) = \frac{U(x,t) - U(x-h,t)}{h}. \tag{7}$$

essas aproximações cometem um erro da ordem O(h).

Então, fazendo a substituição da equação inicial usando as aproximações encontradas, chega-se em uma nova formulação,

$$U(x,t) = \frac{U(x, t+h_t) - U(x,t)}{h_t} + \mu \frac{U(x,t) - U(x-h_x,t)}{h_x}. \tag{8}$$

Antes de prosseguir, a fim de simplificar, será feita a representação da partição do tempo e espaço como $j = t_0, t_1, ..., t_n, t_n + 1$ e $i = x_0, x_1, ...x_n, x_n + 1$
Assim, isolando U(x,t+h),

$$U_i, j+1 = U_i, j - \frac{\mu h_t}{h_x}(U_i, j - U_i - 1, j \tag{9}$$

Por fim, para chegar na resolução procurada é apenas necessário adicionar um termo de "upwind"para levar em conta a direção do fluxo deixando-a mais completa e exata:

$$U_i, j+1 = U_i, j - \frac{\mu h_t}{h_x}(U_i, j - U_i - 1, j + O(h_t, h_x). \tag{10}$$

Com a resolução em mãos foi possível, então, construir um código em python para obter sua visualização gráfica obedecendo as condições estabelecidas no início desse texto como pode ser observado na Figura 2.

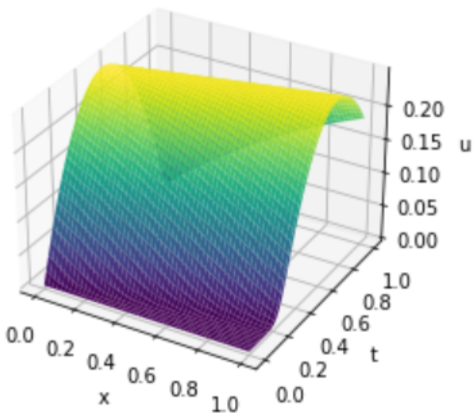

Figura 2: Visualização gráfica da solução por diferenças finitas para a Equação de Advecção

4 Conclusão

Obter a solução analítica de grande parte de problemas físicos e matemáticos é uma tarefa árdua e complexa, exigindo técnicas matemáticas avançadas e muito trabalho computacional, tanto quanto, a depender do caso, tornar-se inviável. Neste trabalho apresentamos um método numérico bem estabelecido na matemática para resolver as equações do calor e da advecção, as quais são de grande relevância científica dada a sua importância para, entre outras coisas, entender o comportamento de materiais e fluídos. Foi possível deduzir-se algebricamente as resoluções para cada uma das equações e, por fim, realizar computacionalmente todos os cálculos relacionados a elas a partir de condições estabelecidas previamente, o que possibilitou a construção de gráficos representativos da solução.

5 Contribuição dos membros

Barbara da Paixão Perez Rodrigues: O uso do método das diferenças finitas para resolver o problema da equação da advecção e conclusão.
Sarah Peixoto Rodrigues Freire: Explicação do problema da equação do calor e resolução gráfica para a equação da advecção.
Thaynara Beatriz Selasco de Matos: O uso do método das diferenças finitas para resolver o problema da equação da equação do calor e resolução gráfica do problema.

Vitória Yumi Uetuki Nicoleti: Introdução, explicação do problema da equação de advecção.

Referências

[1] **Advection Equation**. https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/physik_tp/lectures/ws2016-2017/num_methods_i/advection.pdf. [Online; acesso em 24 de junho de 2023].

[2] Carmo, Bruno S. **Equações de Advecção e Adveção-Difusão**. https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/3495261/mod_resource/content/3/PME5425-Aulas_13_e_14-Adveccao_e_Adveccao-Difusao-BEAMER-handout.pdf. [Online; acesso em 24 de junho de 2023].

[3] R. J. LeVeque. **Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems**. SIAM, 2007.

[4] Thermal Engineering. **O que é equação de calor (equação de condução de calor) - Definição**. https://www.thermal-engineering.org/pt-br/o-que-e-equacao-de-calor-equacao-de-conducao-de-calor-definicao/. [Online; acesso em 24 de junho de 2023].

[5] Universidade Federal de Ouro Preto. **Equações Diferenciais Parciais - Capítulo 2**. https://professor.ufop.br/sites/default/files/freud/files/edp-cap2.pdf. [Online; acesso em 24 de junho de 2023].

[6] Vinícius Francisco Wasques. **Notas de Matemática: Análise Numérica**.