

Método das diferenças finitas

Isabela Bento Beneti ¹ Ygor Fagundes Ruas ² Gabriel Xavier Pereira ³

Ilum Escola de Ciência

Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)

Campinas, Brasil

Resumo.

Palavras-chave.

1 Introdução

Em análise numérica, os métodos de diferenças finitas (FDM) consistem em uma classe de técnicas numéricas para resolver equações diferenciais por aproximação de derivadas com diferenças finitas. Sendo tanto o domínio espacial quanto o intervalo de tempo (caso aplicável) divididos em um número finito de etapas, e o valor da solução nesses pontos discretos é aproximado pela resolução de equações algébricas contendo diferenças finitas e valores de pontos próximos.

Portanto, métodos de diferenças finitas convertem equações diferenciais ordinárias (ODE) ou equações diferenciais parciais, que podem ser não lineares, em um sistema de equações lineares que podem ser resolvidas por técnicas de álgebra matricial (como será visto posteriormente nos exemplos). Atualmente, os métodos de diferenças finitas são uma das abordagens mais comuns para a solução numérica de equações diferenciais parciais.

Mas antes de resolver qualquer equação, vamos entender o método, primeiro consideramos a questão mais básica de como podemos aproximar as derivadas de uma função conhecida por fórmulas de diferenças finitas baseadas apenas nos valores da própria função em pontos discretos. Além de fornecer uma base para o desenvolvimento posterior de métodos de diferenças finitas para resolver equações diferenciais, isso nos permite investigar vários conceitos-chave, como a ordem de precisão de uma aproximação na configuração mais simples possível [3].

Assim, deixando $u(x)$ representar uma função de uma variável que, salvo indicação em contrário, sempre será considerada suave, o que significa que podemos diferenciar a função várias vezes e cada derivada é uma função limitada bem definida em um intervalo contendo um determinado ponto de interesse \bar{x} . Suponhamos que queremos aproximar $u(\bar{x})$ por uma aproximação de diferença finita baseada apenas em valores de u em um número finito de pontos próximos a \bar{x} . Uma escolha razoável seria usar:

$$D_{+u(\bar{x})} \equiv \frac{u(\bar{x} + h) - u(\bar{x})}{h} \quad (1)$$

Para alguns pequeno valor de h , Isso é motivado pela definição padrão da derivada como o valor limite dessa expressão com $h \rightarrow 0$. Contudo, essa é uma aproximação unilateral e outra aproximação unilateral seria

¹isabela220039@ilum.cnpem.br

²ygor220066@ilum.cnpem.br

³gabriel220060@ilum.cnpem.br

$$D_{-u}(\bar{x}) \equiv \frac{u(\bar{x}) - u(\bar{x} - h)}{h} \quad (2)$$

Cada uma dessas fórmulas fornece uma aproximação precisa de primeira ordem para $u'(\bar{x})$, o que significa que o tamanho do erro é aproximadamente proporcional ao próprio h . Portanto, outra possibilidade é usar a aproximação centrada:

$$D_{0u}(\bar{x}) \equiv \frac{u(\bar{x} + h) - u(\bar{x} - h)}{2h} = \frac{1}{2}((D_{+u}(\bar{x})) + (D_{-u}(\bar{x}))) \quad (3)$$

Esta é a inclinação da linha interpolando u em $\bar{x} - h$ e $\bar{x} + h$, e é simplesmente a média das duas aproximações unilaterais definidas acima. Desse modo, a equação (3) fornece uma aproximação melhor do que qualquer uma das aproximações unilaterais [1].

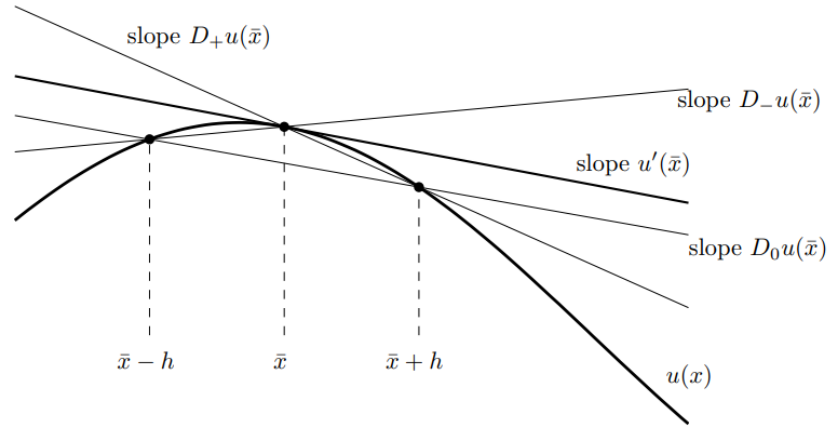


Figura 1: Várias aproximações de $u'(\bar{x})$ interpretadas como a inclinação de retas secantes.

Além disso, tem-se que o erro na solução de um método é definido como a diferença entre a aproximação e a solução analítica exata. Assim, as duas fontes de erro nos métodos de diferenças finitas são o erro de arredondamento, a perda de precisão devido ao arredondamento computadorizado de quantidades decimais, e o erro de truncamento ou erro de discretização, assim como foi estudado durante a disciplina.

Assim, temos que o método de diferenças finitas depende da discretização de uma função em uma grade. E para usar um método de diferenças finitas para aproximar a solução de um problema, deve-se primeiro discretizar o domínio do problema. Isso geralmente é feito dividindo o domínio em uma grade uniforme. Isso significa que os métodos de diferenças finitas produzem conjuntos de aproximações numéricas discretas para a derivada, geralmente de maneira escalonada no tempo [3].

Após compreender como funciona o método, temos as equações do calor e de advecção que serão resolvidas usando o método das diferenças finitas, contudo, abaixo temos uma explicação a respeito do funcionamento de cada equação.

1.1 Equação do calor

A equação do calor é uma certa equação diferencial parcial onde as soluções da equação do calor às vezes são conhecidas como funções calóricas. E a teoria da equação do calor foi desenvolvida

pela primeira vez por Joseph Fourier em 1822 com o propósito de modelar como uma quantidade como o calor se difunde através de uma determinada região.

Portanto, como a equação diferencial parcial parabólica prototípica, a equação do calor está entre os tópicos mais amplamente estudados em matemática pura, e sua análise é considerada fundamental para o campo mais amplo de equações diferenciais parciais. A equação do calor também pode ser considerada em variedades Riemannianas, levando a muitas aplicações geométricas. Seguindo o trabalho de Subbaramiah Minakshisundaram e Åke Pleijel, a equação do calor está intimamente relacionada com a geometria espectral. Além disso temos que certas soluções da equação do calor conhecidas como núcleos de calor fornecem informações sutis sobre a região em que eles são definidos, conforme exemplificado por meio de sua aplicação ao teorema do índice de Atiyah-Singer [4].

Todavia aqui o objetivo é resolver a seguinte EDP:

$$u_t = k u_{xx} \quad (4)$$

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 $u(1,t) = 0$.

1.2 Equação de advecção

A advecção é o transporte de uma substância ou quantidade pelo movimento em massa de um fluido. Onde as propriedades dessa substância são carregadas com ela e geralmente a maior parte da substância advectada também é um fluido. Portanto, as propriedades que acompanham a substância advetada são propriedades conservadas, como energia. Um exemplo de advecção é o transporte de poluentes ou lodo em um rio pelo fluxo de água a jusante, outra quantidade comumente admitida é a energia ou entalpia. Em geral, qualquer substância ou quantidade extensa conservada pode ser advetada por um fluido que pode reter ou conter a quantidade ou substância.

Desse modo, durante a advecção, um fluido transporta alguma quantidade ou material conservado por meio de movimento em massa. Onde o movimento do fluido é descrito matematicamente como um campo vetorial, e o material transportado é descrito por um campo escalar que mostra sua distribuição no espaço. Assim a advecção requer correntes no fluido e, portanto, não pode acontecer em sólidos rígidos [2].

Ademais, matematicamente temos que a equação de advecção é a equação diferencial parcial que governa o movimento de um campo escalar conservado conforme ele é advetado por um campo vetorial de velocidade conhecido. De modo que é derivado usando a lei de conservação do campo escalar, junto com o teorema de Gauss, e tomando o limite infinitesimal. Pensando nisso, temos a seguinte equação:

$$u_t + \mu u_x = 0 \quad (5)$$

Sendo $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1$, em que $k = 0.25$, $u(x,0) = \eta(x) = x(1-x)$ e $u(x,t) = \eta(x-\mu t)$

2 Metodologia

2.1 Equação do calor

Primeiramente, foi considerada a equação do calor 6, a qual relaciona a derivada primeira do calor em relação ao tempo proporcional à derivada segunda do calor no espaço. Além disso, foi considerado que $k = 0.5$, $u(x,0) = x(1-x)^2$, $u(0,t) = 0$ e $u(1,t) = 0$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (6)$$

Para facilitar a notação, foi considerada a equação 7.

$$u(x_j, t_n) = u_j^n \quad (7)$$

Em seguida, foi utilizado método de diferenças finitas para escrever a equação 6 de forma numérica, sendo g e h o passo no tempo e na posição respectivamente, considerando, ainda, que $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ seria aproximado a partir da média de seu valor entre t_n e t_{n+1} , obtendo-se a equação 8, essa abordagem é conhecida também como método de Crank–Nicolson.

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{g} = k \frac{1}{2} \left[\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} \right] \quad (8)$$

Sendo assim, é possível agrupar todas as constantes em uma constante r , como apresentado na equação 9. Em seguida, é possível manipular a equação 8 de forma a separar os termos de $n + 1$ dos termos de n , passando a obter a equação 10.

$$r = \frac{h^2}{gk} \quad (9)$$

$$u_{j-1}^{n+1} - (2 + 2r)u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1} = (2 - 2r)u_j^n - u_{j-1}^n - u_{j+1}^n \quad (10)$$

Dessa forma, basta retomar os vínculos do problema, escritas conforme a equação 7 como $u_j^0 = x_j(1 - x_j)^2$, $u_0^n = 0$ e $u_J^n = 0$, sendo $x_J = 1$. Se for trabalhado primeiramente com $n = 0$, a parcela à direita da igualdade na equação 10 pode ser facilmente encontrada pelo vínculo. Além disso, admitindo $j = 1$, é possível encontrar um valor também para u_{j-1}^{n+1} , restando apenas os valores de u_j^{n+1} e u_{j+1}^{n+1} , dessa forma, basta escrever essa mesma equação para outros valores de j , até J , dessa forma, obtêm-se um sistema linear, apresentado na equação 11. Considerando, primeiramente, $n = 0$, é possível, então, encontrar a solução para os termos de $n + 1 = 1$, ou seja, dessa forma, basta repetir o processo considerando $n = 1$ a partir do resultado obtido anteriormente e obter a solução para os termos de $n + 1 = 2$. Esse processo pode ser repetido até N , tal que $t_N = 1$, encontrando, portanto, a solução completa para o problema.

$$\begin{bmatrix} -(2 + 2r) & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -(2 + 2r) & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -(2 + 2r) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -(2 + 2r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \vdots \\ u_{J-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (2 - 2r)u_1^n - u_0^n - u_2^n - u_0^{n+1} \\ (2 - 2r)u_2^n - u_1^n - u_3^n \\ (2 - 2r)u_3^n - u_2^n - u_4^n \\ \vdots \\ (2 - 2r)u_{J-1}^n - u_{J-2}^n - u_J^n - u_J^{n+1} \end{bmatrix} \quad (11)$$

Essa abordagem pode ser explicada geometricamente pela figura 2.

Dessa forma, a fórmula apresentada na equação 11 foi aplicada em Python utilizando os vínculos dados no problema. A implementação computacional levou em conta que $g = 0.0005$ e $h = 0.0005$.

2.2 Equação de advecção

Primeiramente, foi considerada a equação de advecção 12, a qual relaciona a derivada primeira de u em relação ao tempo proporcional à derivada primeira de u no espaço. Além disso, foi considerado que $k = 0.25$, $u(x, 0) = x(1 - x)$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (12)$$

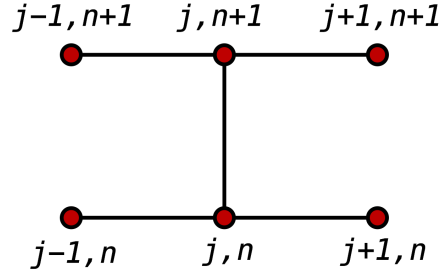


Figura 2: Representação geométrica do método de Crank-Nicolson.

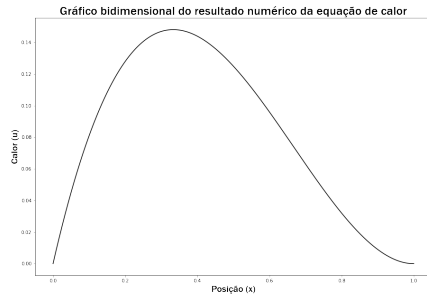


Figura 3: Gráfico bidimensional da equação do calor.

Gráfico tridimensional do resultado numérico da equação de calor

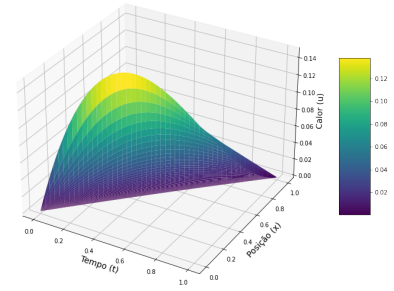


Figura 4: Gráfico tridimensional da equação do calor.

Figura 5: Figuras lado a lado

Para facilitar a notação, foi considerada novamente a equação 7.

Em seguida, foi utilizado método de diferenças finitas para escrever a equação 12 de forma numérica. Para a derivada no tempo, foi utilizado o método de diferenças finitas à direita, já para a derivada no espaço, foram utilizados ambos os métodos de diferenças finitas, sendo g e h o passo no tempo e na posição respectivamente, obtendo-se as equações 13 e 14, sendo relacionadas aos métodos de diferenças finitas à esquerda e à direita, respectivamente.

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{g} + \mu \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = 0 \quad (13)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{g} + \mu \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h} = 0 \quad (14)$$

Sendo assim, é possível agrupar todas as constantes em uma constante r , como apresentado na equação 15. Em seguida, é possível manipular as equações 13 e 14 de forma a separar o termo de $n+1$ dos termos de n , passando a obter as equações 16 e 17.

$$r = \frac{g\mu}{h} \quad (15)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - r [u_j^n - u_{j-1}^n] \quad (16)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - r [u_{j+1}^n - u_j^n] \quad (17)$$

Dessa forma, basta observar o vínculo do problema para o tempo inicial $u_j^0 = x_j(1 - x_j)$. Dessa forma, basta utilizar as equações 16 e 17 para encontrar os valores de u_j^1 . Para encontrar os valores u_0^n foi utilizada a equação 17, assim como para encontrar os valores de u_J^n , tal que $x_J = 1$, foi utilizada a equação 16, para os demais termos, foi considerada a equação 16. Dessa forma, essa formulação foi aplicada em Python. A implementação computacional levou em conta que $g = 0.0005$ e $h = 0.0005$

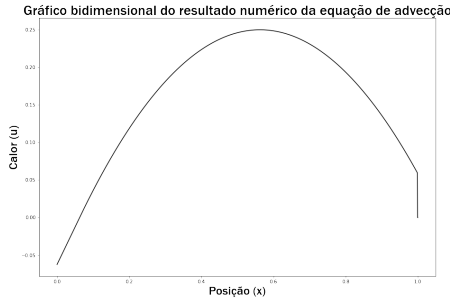


Figura 6: Gráfico bidimensional da equação do advecção.

Gráfico tridimensional do resultado numérico da equação de advecção

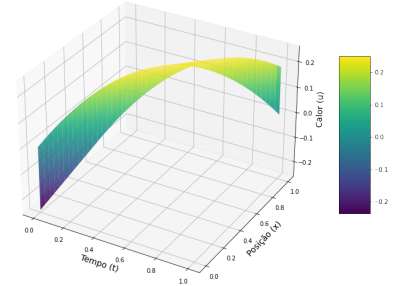


Figura 7: Gráfico tridimensional da equação do advecção.

Figura 8: Gráficos do resultado numérico da equação de advecção, obtido pelo método das diferenças finitas.

3 Resultados

Podemos concluir, com a realização desse trabalho, que o método das diferenças finitas é, de fato, uma poderosa ferramenta para obter soluções numéricas de equações diferenciais parciais, como as equações do calor e de advecção. Uma das principais vantagens da utilização desse método das diferenças finitas é a sua simplicidade conceitual e implementação direta. O desenvolvimento de seu código foi relativamente simples e fácil de ser compreendido.

No entanto, o método também possui algumas limitações e desvantagens. Uma delas é a necessidade de discretizar o domínio, o que implica em uma perda de informação contínua. Além disso, a precisão da solução numérica obtida pelo método das diferenças finitas depende da escolha dos passos espaciais e temporais, bem como da malha de discretização. Em geral, quanto menor o tamanho dos passos e a malha de discretização, maior será a precisão da solução. No entanto, isso também implica em um aumento no custo computacional (quanto menor o passo, mais vezes o código deverá iterar).

Sobre os gráficos obtidos, apesar de serem somente uma aproximação, tendo sempre (independentemente do valor do passo) algum grau de erro, as representações gráficas das equações do calor e de advecção fornecem informações valiosas sobre o comportamento desses sistemas. Eles nos permitem visualizar a evolução temporal e espacial das variáveis de interesse. É importante analisar esses gráficos com cuidado e interpretá-los corretamente. Podemos observar padrões de difusão, transporte, formação de gradientes e outros fenômenos físicos relevantes.

Em conclusão, o método das diferenças finitas é uma abordagem poderosa e versátil para obter soluções numéricas das equações do calor e de advecção. Ele possui vantagens, como sua simplicidade conceitual, mas também tem desvantagens, como a necessidade de discretizar o domínio e a dependência da precisão em relação à escolha dos parâmetros de discretização. Os gráficos das soluções numéricas fornecem uma representação visual útil do comportamento dos sistemas estudados. No entanto, é fundamental lembrar que as soluções numéricas são apenas aproximações, possuindo sempre algum grau de erro.

4 Considerações Finais

Por fim, foi possível compreender a aplicação do método de diferenças finitas, de forma a utilizá-lo para a resolução da equação do calor e da equação de advecção. Para mais informações acesse: https://github.com/benetao/trabalho_analise_numerica

5 Contribuições dos autores

Os grupos devem apresentar as contribuições de cada um dos membros. Por exemplo:

Isabela Plotagem dos gráficos, conclusões e organização do git/códigos.

Ygor Panorama Geral do método de diferenças finitas e explicação de cada problema.

Gabriel Estruturação matemática do problema e código para resolução das duas equações.

Referências

- [1] Randall J. LeVeque. **Finite Difference Methods**. https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/41896/mod_resource/content/1/LeVeque. Accessed: June 22, 2023. 2023.
- [2] Wikipedia contributors. **Advection**. <https://en.wikipedia.org/wiki/Advection>. Accessed: June 22, 2023. .
- [3] Wikipedia contributors. **Finite Difference Method**. https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_method. Accessed: June 22, 2023. .
- [4] Wikipedia contributors. **Heat Equation**. https://en.wikipedia.org/wiki/Heat_equation. Accessed: June 22, 2023. .