Método das Diferenças Finitas Aplicados a Equações Diferenciais Parciais

Ilum School of Science, Campinas – SP, Brasil

Ana Clara Santos Brandão, Ana Clara Batista Loponi, João Guilherme dos Santos Caramês

ana220069@ilum.cnpem.br, ana220073@ilum.cnpem.br, joao220064@ilum.cnpem.br

Introdução

Os estudos de ciências naturais são, quase exclusivamente, voltados para a descrição de fenômenos, dos mais raros e ocasionais ao mais cotidianos. O crescimento de um fungo, o movimento de um objeto em queda livre, a colisão de dois corpos, a mudança de fase de uma sustância, são todos episódios descritos por campos específicos, como microbiologia, física clássica, termodinâmica (respectivamente). Contudo, atrelado a cada um destes fenômenos, existe um campo essencial para a análise dos sistemas; a matemática. Desta forma, através de funções, expressões e conceitos, em conjunto com as leis de cada relativas a cada área, a matemática é capaz de descrever o comportamento de sistemas simples e complexos e sua evolução em relação ao espaço e tempo.

Uma forma comum a essas aplicações matemáticas são expressões chamadas equações diferenciais. O princípio básico dessas equações está em relacionar uma função à sua derivada. A exemplo disto, tomamos o objeto em queda livre [1]. A força em qualquer sistema físico é representada por $F = ma$, onde *m* corresponde à massa e *a* à aceleração do objeto. Se entendermos a aceleração como a derivada da velocidade em relação ao tempo, podemos reescrever a equação como $F = m\frac{\partial v}{\partial t}$. Por outro lado, se considerarmos as forças atuantes do sistema, temos que $F = mg - \gamma v$, onde mg é a força da gravidade (já que o objeto está em queda) e γv é um coeficiente de resistência do ar, que neste caso é proporcional a velocidade do objeto. Sendo assim, podemos escrever $mg - \gamma v = m\frac{\partial v}{\partial t}$, que é uma equação diferencial.

Um caso particular as equações diferenciais ocorrem quando a expressão apresenta uma derivada parcial de uma função com duas ou mais variáveis independentes [2]. Observa-se que, no exemplo acima, é apresentado uma equação que evolui apenas no tempo, por isso, é chama de Equação Diferencial Ordinária (EDO), no caso da presença de mais variáveis, classificamos como Equação Diferencial Parcial (EDP). A diferença essencial entre os dois casos é que, em EDP's, além da evolução temporal, pode haver evoluções em uma ou mais dimensões de espaço.

A equação do calor, também conhecida como a equação de difusão de calor, é uma equação diferencial parcial que descreve a propagação do calor em um meio. Ela é amplamente utilizada na modelagem de fenômenos de transferência de calor em diversas áreas, como física, engenharia e ciências aplicadas.

A equação do calor é representada da seguinte forma:

$$1. \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \mathrm{k}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Onde $\frac{\partial u}{\partial t}$ representa a derivada parcial da função u em relação ao tempo *t*. Esse termo descreve como a temperatura varia ao longo do tempo. *k* é a difusividade térmica, que é uma constante positiva. Ela está relacionada à capacidade do material em transmitir calor por condução. Quanto maior o valor de *k*, mais rápido ocorrerá a difusão do calor. Por fim, $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ representa a segunda derivada parcial da função *u* em relação à coordenada espacial *x*. Esse termo descreve como a temperatura varia espacialmente no domínio considerado. A segunda derivada espacial indica a curvatura da função u em relação à coordenada espacial *x*.

Portanto, a equação $\frac{\partial u}{\partial t} = \mathrm{k}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ estabelece que a taxa de variação da temperatura em relação ao tempo em um ponto é proporcional à segunda derivada espacial da temperatura. Isso significa que a variação da temperatura ao longo do tempo depende da curvatura da distribuição de temperatura no espaço.

A equação do calor pode ser interpretada da seguinte maneira: a taxa de variação da temperatura em um ponto é determinada pela diferença de temperatura entre esse ponto e seus vizinhos. Se houver uma diferença de temperatura significativa entre um ponto e seus vizinhos, o calor fluirá do ponto mais quente para o mais frio, resultando em uma equalização das temperaturas ao longo do tempo.

As condições iniciais e de contorno são fundamentais para resolver a equação do calor e determinar a distribuição de temperatura em um sistema específico. As condições iniciais fornecem a distribuição de temperatura inicial em um dado momento de tempo, enquanto as condições de contorno especificam os valores ou restrições da temperatura nas bordas do domínio espacial.

Por outro lado, a equação de advecção, também conhecida como equação de transporte, é uma equação diferencial parcial que descreve o transporte de uma grandeza ao longo de uma direção específica, geralmente representada pelo eixo x.

$$2. \quad \frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{t}} + \mu\frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{x}} = 0$$

Na equação (2), $\frac{\partial u}{\partial t}$ representa a derivada parcial de *u* em relação ao tempo *t*. $\mu\frac{\partial u}{\partial x}$ é o produto do coeficiente de advecção μ pela derivada parcial de *u* em relação à posição *x*. Esse termo representa a taxa de variação espacial de *u* devido ao transporte ou advecção ao longo do eixo x. Observa-se que o lado direito da equação corresponde ao número 0, isso indica que a quantidade total da grandeza *u,* se mantém constante ao longo do tempo, ou seja, não há geração ou destruição de *u*. A equação de advecção é uma equação de conservação.

O coeficiente μ, também conhecido como velocidade de advecção, determina a velocidade com que a grandeza u é transportada ao longo do eixo x. Se μ for positivo, a advecção ocorre na direção positiva de x, enquanto um valor negativo indica a advecção na direção negativa de x. Quando μ é zero, a equação de advecção se torna uma equação estacionária, sem transporte ao longo do eixo x.

De forma geral, EDP's possuem um amplo campo de soluções; qualquer função que satisfaça a equação pode ser considerada uma solução. Uma forma de extrair uma solução, é por meio do estabelecimento condições de contorno ao problema, tal que $x'(\alpha) = y_0$ e $x'(\beta) = y_1$, desta forma, busca-se soluções para o problema no intervalo $[\alpha, \beta]$.

Uma forma convencional para aproximar soluções de equações diferenciais parciais, utilizando condições de contorno, dá-se pelo método das Diferenças Finitas, que consiste em discretizar a equação, obtendo assim uma solução numérica, dentro do intervalo pré-posto [?]. Portanto, a aplicação do método consiste na divisão do domínio da função em uma malha, onde a cada ponto será atribuído um valor relacionado a aproximação da derivada naquele ponto.

A aproximação pode ocorrer no sentido positivo (adiantada) ou negativo (atrasada), visto que se considera para a aproximação dois pontos. Assim, a diferença finita adiantada, toma como base os pontos x_1 e x_2, sendo $x_2 - x_1 = h$, enquanto a diferença finita atrasada toma os pontos x_0 e x_1, sendo a diferença entre esses dois pontos também igual a h. Existe ainda a diferença finita centrada, neste caso, a aproximação considera três pontos. Desta forma, o erro cometido pelo método possui ordem h, correspondente ao tamanho do passo dado a cada aproximação.

Metodologia

De início, tendo em vista o conteúdo apresentado anteriormente, utilizamos do Método de Diferenças Finitas para a resolução da Equação do Calor. De maneira mais específica, usamos o método FTCS (Forward in Time and Centered in Space), o qual usa da diferença finita avançada para o tempo (3) e da centrada para o espaço (4), sendo que a diferencial em relação ao espaço é de segunda ordem.

3. $$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u(x, t+\Delta t) - u(x.t)}{\Delta t}$$

4. $$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u(x+\Delta x, t) - 2 \cdot u(x.t) + u(x-\Delta x, t)}{\Delta x^2}$$

Assim, podemos reescrever a equação (1) da seguinte maneira:

$$\frac{u(x,\ t+\Delta t)\ -\ u(x.\ t)}{\Delta t} = \mathrm{k}\ \cdot\ \frac{u(x+\Delta x,\ t)\ -\ 2\ \cdot\ u(x.\ t)\ +\ u(x\ -\ \Delta x,\ t)}{\Delta x^2}$$

5. $$\mathrm{u}(x,\ t+\Delta t)\ = \mathrm{u}(x,\ t)\ +\ \mathrm{k}\ \cdot\ \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\big(u(x+\Delta x,\ t)\ -\ 2\ \cdot\ u(x.\ t)\ +\ u(x\ -\ \Delta x,\ t)\big)$$

Por outro lado, para a Equação de Advecção, a abordagem utilizada foi a Upwind, a qual se diferencia da anterior por usar a diferença finita atrasada para o tempo (6) e para o espaço (7) ou o contrário, ou seja, avançada para ambos. Isso acontece pois buscamos soluções com estabilidade e a valor do coeficiente de advecção afeta o teste de estabilidade de Von Neumann, como mostra [5] e no caso trabalhado de coeficiente positivo, é mais adequado usar a versão atrasada.

$$6.\quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u(x,t) - u(x.t - \Delta t)}{\Delta t}$$

$$7.\quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x,t) - u(x - \Delta x.t)}{\Delta x}$$

Dessa forma, reescrevemos a equação (2) a seguir:

$$\frac{u(x,\ t)\ -\ u(x,\ t\ -\ \Delta t)}{\Delta t} + \mu\frac{u(x,\ t)\ -\ u(x\ -\ \Delta x.\ t)}{\Delta x} = 0$$

$$\frac{u(x,\ t)\ -\ u(x,\ t\ - \Delta t)}{\Delta t} + \mu\frac{u(x,\ t)\ -\ u(x\ - \Delta x.\ t)}{\Delta x} = 0$$

$$8.\quad \mathrm{u}(x,\ t) = \mathrm{u}(x,\ t\ -\ \Delta t) - \mu\frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \big(u(x,\ t)\ -\ u(x\ -\ \Delta x.\ t)\big)$$

Com isso, temos as equações diferenciais aproximadas e podemos utilizar de métodos computacionais para resolvê-las, dadas, claro, suas condições iniciais e de contorno. Logo, para fazer isso, faz-se necessária uma sequência lógica de passos, os quais descrevemos no diagrama a seguir:

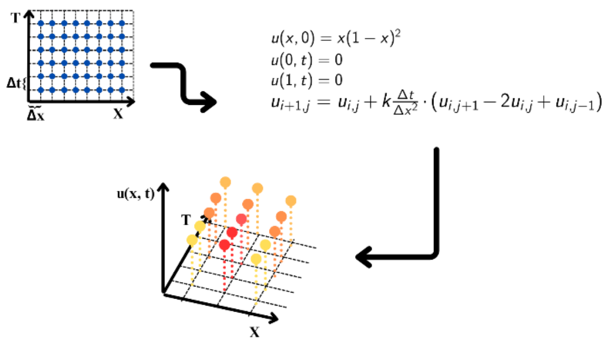

Figura 1: Diagrama lógico de resolução computacional de uma EDP por diferenças finitas.

Na figura 1, vemos que o primeiro passo é gerar uma grade de pontos, um domínio ou matriz, ou seja, dado um certo espaçamento atribuído aos valores de cada intervalo (cada variável possuirá seu próprio intervalo), definimos as subdivisões dos intervalos e as interseções geram os pontos que serão trabalhados, quão menor forem os espaçamentos, maior será a quantidade de pontos. O segundo passo é usar a equação encontrada anteriormente e as condições iniciais e de contorno numa iteração, onde cada ponto será calculado usando a aproximação. Por fim, no terceiro passo, gera-se um gráfico com os pontos encontrados sendo uma projeção em relação a malha feita no primeiro passo. Vale notar que, por convenção, usamos também a notação i,j para representar as equações, já que esse processo facilita a implementação em linguagem computacional e, nesse caso, i representa as linhas da matriz e o tempo e j representa as colunas da matriz e o espaço.

Resultados e Discussão

A equação do calor descreve a difusão de energia térmica em um dado corpo ou espaço e sua evolução temporal, desta forma, a figura 2 apresenta três exemplos de soluções numéricas, com valores de *k* respectivos a 0.5, 0.25 e 0.1. O que se observa é uma distribuição mais brusca da temperatura quando o coeficiente de difusão térmica é maior, indicando que propagação do calor, neste caso, é mais rápida, e leva a uma uniformização da temperatura. Em contrapartida, para valores pequenos de *k*, o calor se propaga de forma lenta, indicando uma baixa taxa de transferência de energia.

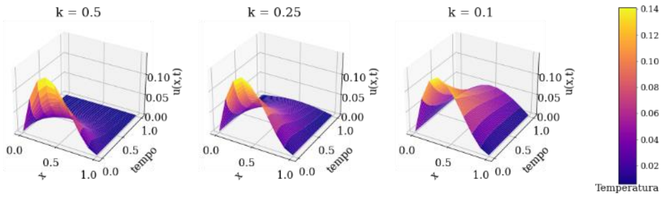

Figura 2: Representação gráfica da equação do calor nos intervalos t[0,1] e x[0,1], com k = 0.5, k = 0.25 e k = 0.1, respectivamente.

Como já vimos, a equação de advecção descreve o transporte de uma grandeza ao longo de uma direção específica. Neste sentido, a figura 3 apresenta três exemplos das soluções numéricas, com velocidades respectivas a 0.5, 0.25 e 0.1. Nesses gráficos, têm-se a representação visual da evolução da grandeza u ao longo do tempo e do espaço, obtendo uma discretização da equação, onde a função u é calculada em pontos discretos do espaço e do tempo.

Os eixos do gráfico representam as coordenadas espaciais (eixo x) e o tempo (eixo y). A altura do gráfico em um determinado ponto (x, t) representa o valor da grandeza u nesse ponto e tempo específicos.

Se modificarmos parâmetros da equação, como o coeficiente de advecção μ, isso afeta a propagação e o comportamento da grandeza u, no gráfico. Diferentes valores de μ podem resultar em velocidades de advecção diferentes, alterando a forma e o padrão das ondas no gráfico.

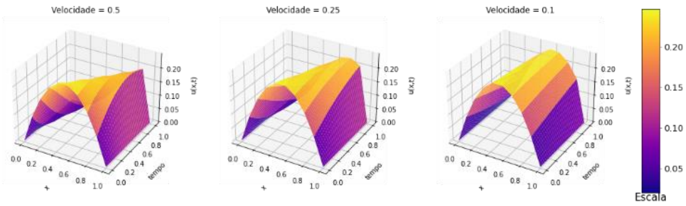

Figura 3: Representação gráfica da equação de advecção nos intervalos t[0,1] e x[0,1], com $\mu = 0.5$, $\mu = 0.25$ e $\mu = 0.1$, respectivamente.

Conclusão

Como vimos, Método das Diferenças Finitas é uma técnica amplamente utilizada para aproximar soluções numéricas de equações diferenciais parciais. Ele envolve a discretização da equação e a atribuição de valores a pontos em uma malha. A diferença finita adiantada e a diferença finita atrasada são duas abordagens comuns para a aproximação da derivada em um ponto.

Na equação do Calor, utiliza-se do método FTCS (Forward in Time and Centered in Space). Nesse método, a diferença finita avançada é usada para o tempo e a diferença finita centrada é usada para o espaço. Aplicado o Método das Diferenças Finitas, a equação é discretizada no tempo e no espaço.

O domínio espacial é dividido em uma malha de pontos, e o tempo é dividido em intervalos regulares. A aproximação da derivada temporal é feita usando a diferença finita avançada, enquanto a aproximação da derivada espacial é feita usando a diferença finita centrada de segunda ordem. Essas aproximações são então substituídas na Equação do Calor, resultando em um sistema de equações discretas. Esse sistema pode ser resolvido numericamente para obter a distribuição de temperatura ao longo do tempo e do espaço.

Para aplicar o Método das Diferenças Finitas na Equação de Advecção, a equação é discretizada no tempo e no espaço. O domínio espacial é dividido em uma malha de pontos, e o tempo é dividido em intervalos regulares. A aproximação da derivada temporal é feita usando a diferença finita adiantada, enquanto a aproximação da derivada espacial pode ser feita usando a diferença finita adiantada ou a diferença finita centrada. Essas aproximações são então substituídas na equação, resultando em um sistema de equações discretas. Esse sistema também pode ser resolvido numericamente para obter a evolução da quantidade conservada ao longo do tempo e do espaço.

Contribuições

Ana Clara Batista Loponi: Introdução – equação do calor, equação de advecção, Resultados e Discussão - equação de advecção, Conclusão;

Ana Clara Santos Brandão: Introdução – equações diferenciais (EDO e EDP), método das diferenças finitas; Resultados e Discussão – difusão térmica na equação do calor,

João Guilherme dos Santos Caramês: Metodologia – método das diferenças finitas para equação do calor, método das diferenças finitas para equação de advecção, obtenção dos resultados (código em anexo).

Referências

[1] WASQUES, Vinícius Francisco. Notas Matemáticas: Equações Diferenciais. Ilum Escola de Ciência, 2022.

[2] MARCELO LOPES VIEIRA. Equações Diferenciais Parciais | Uma Introdução aos Conceitos Básicos (EDPs). Matemática Simplificada. Disponível em: <https://matematicasimplificada.com/equacoes-diferenciais-parciais/>. Acesso em: 24 jun. 2023.

[3] WASQUES, Vinícius Francisco. Notas de Matemática: Análise Numérica. Ilum Escola de Ciência, 2023.

[4] PEIRCE, A. W. Partial Differential Equations: Lecture 8 - Separation of Variables [PDF]. University of British Columbia, 2012. Disponível em: https://personal.math.ubc.ca/~peirce/M257_316_2012_Lecture_8.pdf. Acesso em: 24 de junho de 2023.

[5] International Centre for Theoretical Physics (ICTP). Aula 10: 2-Numerical Methods for the Advection Equation [PDF]. Disponível em: https://indico.ictp.it/event/a06220/session/18/contribution/10/material/0/2.pdf. Acesso em: 24 de junho de 2023.