Aula 16
Método das Diferenças Finitas para a Equação do Calor.

MS211 - Cálculo Numérico

Marcos Eduardo Valle

Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Universidade Estadual de Campinas

Na aula anterior, apresentamos o método das diferenças finitas para a solução de uma equação diferencial ordinária com condição de contorno.

Na aula de hoje, veremos que o método das diferenças finitas pode ser aplicado também para a resolução de uma equação diferencial parcial.

Especificamente, ilustraremos a aplicação do método das diferenças finitas para a resolução numérica da equação do calor.

A Equação do Calor

Considere uma barra fina de tamanho L. Pela lei do resfriamento de Newton, a temperatura em um ponto x no instante de tempo t, denotada por $u(x,t)$, satisfaz a equação a equação diferencial parcial

$$u_t(x,t) = u_{xx}(x,t), \quad 0 \leq x \leq L \quad \text{e} \quad 0 \leq t \leq T,$$

com a condição inicial

$$u(x,0) = q(x), \quad 0 \leq x \leq L,$$

e as condições de contorno

$$u(0,t) = \gamma_1 \quad \text{e} \quad u(1,t) = \gamma_2, \quad 0 < t \leq T.$$

Aqui, q representa a temperatura inicial da barra e γ_1 e γ_2 correspondem à temperatura na fronteira da barra.

Discretização

Tal como nas equações diferenciais ordinárias, dividimos o intervalo $[0, L]$ em $n + 2$ pontos

$$x_i = hi, \quad \text{com } h = \frac{L}{n+1}, \quad \text{para } i = 0, 1, \dots, n + 1.$$

Analogamente, definimos

$$t_j = j\Delta t, \quad \text{com } \Delta t = \frac{T}{m}, \quad \text{para } j = 0, 1, \dots, m.$$

Além disso, denotaremos por u_{ij} a aproximação da solução exata u em (x_i, t_j).

Note que, da condição inicial, concluímos

$$u_{i0} = q(x_i), \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

Aproximação para u_{xx}

A derivada parcial de u_{xx} em um ponto (x_i, t_j) pode ser aproximada da seguinte forma usando o método das diferenças finitas:

$$u(x_i, t_j) \approx \frac{u(x_i - h, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i + h, t_j)}{h^2},$$

com erro local $\mathcal{O}(h^2)$.

Substituindo $u(x_i, t_j)$ por sua aproximação u_{ij}, temos:

$$u(x_i, t_j) \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2}.$$

Método Explícito

A derivada parcial u_t pode ser aproximada usando a **diferença avançada**, ou seja,

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u(x_i, t_j + \Delta t) - u(x_i, t_j)}{\Delta t},$$

com erro local $\mathcal{O}(\Delta t)$.

Substituindo $u(x_i, t_j)$ por sua aproximação em u_{ij}, encontramos:

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{\Delta t}.$$

Substituindo as aproximações para as derivadas parciais na equação diferencial, encontramos

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{\Delta t} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2},$$

para $i = 1, \ldots, n$ e $j = 0, 1, \ldots, m-1$.

Reorganizando os termos, encontramos:

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

em que

$$\alpha = \frac{\Delta t}{h^2}.$$

Usa as condições de contorno, podemos escrever a seguinte equação vetorial:

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{A}\mathbf{u}_j + \mathbf{b}, \quad \text{para } j = 0, 1, \ldots, m-1.$$

em que

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

$$\mathbf{u}_j = \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{n-1,j} \\ u_{n,j} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \alpha\gamma_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha\gamma_2 \end{bmatrix}.$$

Da condição inicial, temos

$$\mathbf{u}_0 = \begin{bmatrix} q(x_1) \\ q(x_2) \\ \vdots \\ q(x_{n-1}) \\ q(x_n) \end{bmatrix}.$$

A partir dessa equação, deduzimos $\mathbf{u}_{j+1}$ usando a relação

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{A}\mathbf{u}_j + \mathbf{b}, \quad \text{para } j = 0, 1, \ldots, m-1.$$

Esse é o chamado **método explícito.**

Lembre-se que as aproximações para as derivadas tem erro local $\mathcal{O}(h^2)$ e $\mathcal{O}(\Delta t)$.

Esse fato, porém, não garante que u_{ij} é uma boa aproximação para a solução exata $u(x_i, t_j)$.

Com efeito, pode-se mostrar que uma boa aproximação pode ser obtida somente se

$$\alpha = \frac{\Delta t}{h^2} < \frac{1}{2}.$$

Essa inequação é uma restrição severa para a utilização do método explícito.

Por exemplo, se $h = 0.01$, deveremos ter $\Delta t < 1/20.000$.

Exemplo 1

Aplique o método explícito para a equação do calor

$$u_t(x,t) = u_{xx}(x,t), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq t \leq 1,$$

com a condição inicial

$$u(x,0) = x(1-x), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

e as condições de contorno

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad 0 < t \leq 1,$$

usando

$$h = \frac{1}{4} \quad \text{e} \quad \Delta t = \frac{1}{4}.$$

Nesse caso, $\alpha = 4$ e temos a relação de recorrência

$$\begin{bmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ u_{3,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7 & 4 & 0 \\ 4 & -7 & 4 \\ 0 & 4 & -7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ u_{3j} \end{bmatrix}, \quad \text{para; } j = 0, 1, 2, 3.$$

Da condição inicial, temos

$$\mathbf{u}_0 = \begin{bmatrix} 0.18750 & 0.25000 & 0.18750 \end{bmatrix}^T.$$

Da relação de recorrência, encontramos

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} -0.31250 & -0.25000 & -0.31250 \end{bmatrix}^T,$$
$$\mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 1.18750 & -0.75000 & 1.18750 \end{bmatrix}^T,$$
$$\mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} -11.312 & 14.750 & -11.312 \end{bmatrix}^T,$$
$$\mathbf{u}_4 = \begin{bmatrix} 138.19 & -193.75 & 138.19 \end{bmatrix}^T.$$

Esse resultado é inconsistente pois não há fonte de calor e a temperatura no instante $t = 1$ é maior que a temperatura em certos pontos da barra no instante inicial.

Método Implícito

Usando a **diferença atrasa**, derivada parcial u_t pode ser aproximada por

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_j - \Delta t)}{\Delta t},$$

com erro local também $\mathcal{O}(\Delta t)$.

Substituindo $u(x_i, t_j)$ por sua aproximação em u_{ij}, temos:

$$u_t(x_i, t_j) \approx \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t}.$$

Substituindo as aproximações para as derivadas parciais na equação diferencial, encontramos

$$\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{h^2},$$

para $i = 1, \ldots, n$ e $j = 1, \ldots, m$.

Reorganizando os termos, encontramos:

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

em que

$$\alpha = \frac{\Delta t}{h^2}.$$

Usa as condições de contorno, podemos escrever a seguinte equação vetorial:

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_j = \mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{b}, \quad \text{para } j = 1, \dots, m.$$

em que

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & & & \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ & & & -\alpha & 1+2\alpha \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{u}_j = \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{n-1,j} \\ u_{n,j} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \alpha\gamma_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha\gamma_2 \end{bmatrix}.$$

Da condição inicial, temos

$$\mathbf{u}_0 = \begin{bmatrix} q(x_1) \\ q(x_2) \\ \vdots \\ q(x_{n-1}) \\ q(x_n) \end{bmatrix}.$$

A partir dessa equação, deduzimos $\mathbf{u}_j$ usando a relação

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_j = \mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{b}, \quad \text{para } j = 1, \ldots, m.$$

Como $\mathbf{u}_j$ é obtido resolvendo um sistema linear, essa abordagem é conhecida como **método implícito.**

Tal como no método explícito, as aproximações para as derivadas no método implícito tem erro local $\mathcal{O}(h^2)$ e $\mathcal{O}(\Delta t)$.

No método implícito, porém, não há nenhuma restrição para o tamanho de h e Δt.

Formalmente, pode-se mostrar que u_{ij} converge para a solução exata $u(x_i, t_j)$ quando $h \to 0$ e $\Delta t \to 0$.

Em outras palavras, obtemos uma boa aproximação u_{ij} de $u(x_i, t_j)$ tomando h e Δt suficientemente pequenos.

Exemplo 2

Aplique o método implícito para a equação do calor

$$u_t(x,t) = u_{xx}(x,t), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq t \leq 1,$$

com a condição inicial

$$u(x,0) = x(1-x), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

e as condições de contorno

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad 0 < t \leq 1,$$

usando

$$h = \frac{1}{4} \quad \text{e} \quad \Delta t = \frac{1}{4}.$$

Nesse caso, $\alpha = 4$ e temos a relação de recorrência

$$\begin{bmatrix} 9 & -4 & 0 \\ -4 & 9 & -4 \\ 0 & -4 & 9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ u_{3j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{1,j-1} \\ u_{2,j-1} \\ u_{3,j-1} \end{bmatrix}, \quad \text{para; } j = 1, 2, 3, 4.$$

Da condição inicial, temos

$$\mathbf{u}_0 = \begin{bmatrix} 0.18750 & 0.25000 & 0.18750 \end{bmatrix}^T.$$

Da relação de recorrência, encontramos

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 0.054847 & 0.076531 & 0.054847 \end{bmatrix}^T,$$
$$\mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 0.016321 & 0.023011 & 0.016321 \end{bmatrix}^T,$$
$$\mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} 0.0048763 & 0.0068913 & 0.0048763 \end{bmatrix}^T,$$
$$\mathbf{u}_4 = \begin{bmatrix} 0.0014582 & 0.0020619 & 0.0014582 \end{bmatrix}^T.$$

Nesse caso, o resultado é consistente com a física do problema. Resultados melhores podem ser obtidos considerando h e Δt menores!

Considerações Finais

Na aula de hoje vimos como o método das diferenças finitas pode ser usado para resolver uma equação diferencial parcial, especificamente, a equação do calor.

Em particular, vimos o método explícito e o método implícito.

Ambos os métodos são baseados em aproximações da derivada parcial da ordem $\mathcal{O}(h^2)$ e $\mathcal{O}(\Delta t)$.

O método explícito, porém, exige que $\Delta t < h^2/2$. O método implícito não possui nenhuma restrição sobre h e Δt.

Na literatura, exitem abordagens mais avançadas para a resolução de equações diferenciais parciais.

O **método de Crank-Nicolson**, que utiliza diferenças finitas com aproximações $\mathcal{O}(h^2)$ e $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, é um exemplo.