

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE GOIÁS
ESCOLA DE CIÊNCIAS EXATAS E DA COMPUTAÇÃO
LICENCIATURA EM MATEMÁTICA



SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DO CALOR UTILIZANDO O MÉTODO DAS
DIFERENÇAS FINITAS - FORMULAÇÃO EXPLÍCITA

BRUNO PIRES DE OLIVEIRA

GOIÂNIA
2020

BRUNO PIRES DE OLIVEIRA

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DO CALOR UTILIZANDO O MÉTODO DAS
DIFERENÇAS FINITAS - FORMULAÇÃO EXPLÍCITA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Ciências Exatas e da computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Licenciatura em Matemática.

Orientador: Me. Samuel Lima Picanço

Coorientador: Dr. Fábio Freitas Ferreira

GOIÂNIA

2020

BRUNO PIRES DE OLIVEIRA

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DO CALOR UTILIZANDO O MÉTODO DAS
DIFERENÇAS FINITAS - FORMULAÇÃO EXPLÍCITA

Este Trabalho de Conclusão de Curso julgado adequado para obtenção o título de Licenciatura em Matemática, e aprovado em sua forma final pela Escola de Ciências Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, em ____ / ____ / _____

Prof. Ma. Ludmilla Reis Pinheiro dos Santos
Coordenador de Trabalho de Conclusão de Curso

Banca examinadora:

Orientador: Prof. Me. Samuel Lima Picanço

Coorientador: Prof. Dr. Fábio Freitas Ferreira

Prof. Dr. Anderson Costa da Silva

Prof. Dra. Silvia Cristina Belo e Silva

GOIÂNIA

2020

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus por todas as benções que ele tem me proporcionado e pelo dom da vida.

Agradeço aos meus pais Gilzana e Rogério, por tudo que eles fizeram por mim em toda minha vida, com certeza nada disso seria possível se eu não tivesse o apoio e o incentivo deles em todos os momentos da minha vida.

A minha namorada Amanda, por todo o amor e carinho estando ao meu lado por todos esse anos desde a escola, sempre foi e será um pilar muito importante para mim.

Aos meus colegas que tive a oportunidade de conhecer e conviver durante esses anos na Universidade. Em especial ao Rayan, a Josella e a Isadora, que em vários momentos me apoiaram e me aconselharam quando eu precisei.

Ao professor Me. Samuel que me ensinou muitas coisas de extrema importância para meu desenvolvimento como pessoa e também como professor, foi um prazer tê-lo como orientador, tenho por ele uma grande admiração. E também ao professor Dr. Fábio pelo auxílio como coorientador, suas observações e seus feitos foram muito significativos no decorrer do trabalho.

Agradeço a PUC-Goiás, por todo o apoio acadêmico.

RESUMO

Nessa pesquisa, busca-se verificar se o método das diferenças finitas com formulação explícita, produz boas aproximações quando é utilizado para resolver a Equação do Calor unidimensional. Como a Equação do Calor é uma equação diferencial parcial, foi feita uma discretização do seu domínio para que ela pudesse ser reescrita como uma equação algébrica. A equação foi resolvida analiticamente e em seguida foram obtidas soluções numéricas para que os resultados fossem comparados. Sendo assim, ao final do trabalho foram apresentadas soluções gráficas para um problema determinado e o erro presente na aproximação foi calculado para que pudessem ser feitas as devidas considerações.

Palavras chave: Equação do Calor; ; diferenças finitas; discretização.

ABSTRACT

The present research, sought to verify if the finite difference method with explicit description, produces good approaches when used to solve one-dimensional Heat Conduction Equation. As Heat Conduction Equation is a partial differential equation, it was done a domain discretization so it could be rewritten in an algebraic equation. The equation was analytically solved and subsequently numerical solutions were obtained so the results would be compared. Therefore, at the research end, graphic solutions were presented to a certain problem and the present error on the approximation was calculated so the due considerations could be done.

Key words: Heat Conduction Equation; Finite difference; Discretization.

Lista de Figuras

1.1	Barra Condutora de Calor	5
2.1	Soluções Analíticas	12
3.1	Molécula de Cálculo	18
3.2	Soluções Numéricas ($\Delta x = 0.0062$)	20
3.3	Representação das soluções numéricas e analíticas ($\Delta x = 0.0062$)	21
3.4	Representação das soluções numéricas e analíticas ($\Delta x = 0.0031$)	23

Sumário

Lista de Figuras	v
Introdução	1
1 Equação do Calor em uma Barra	3
1.1 Contextualização do Problema	3
1.2 Jean Baptiste Joseph Fourier	4
1.3 Obtenção da Equação do Calor	5
2 Solução analítica da Equação do Calor	8
2.1 Solução Geral	8
2.1.1 Solução Particular	10
2.1.2 Representação gráfica da solução	12
3 Solução numérica da Equação do Calor	13
3.1 Método de Diferenças Finitas	13
3.2 Derivada Numérica	14
3.2.1 Derivada Avançada de Primeira Ordem	15
3.2.2 Derivada Centrada de Segunda ordem	15
3.3 Discretização da Equação do Calor	16
3.4 Molécula de cálculo e Condição CFL	18
3.5 Soluções Numéricas	20
3.6 Simulação numérica para $\Delta x = 0.0062$	21
3.7 Simulação numérica para $\Delta x = 0.0031$	22
4 Considerações finais	25

Introdução

Dentro do curso de matemática, não tem uma matéria voltada a solução de equações diferenciais parciais. Assim, fora da grade curricular, surgiu a oportunidade de conhecê-las, isso trouxe então o interesse em pesquisar mais sobre o assunto. Em consequência disso, pôde-se perceber que diversos fenômenos naturais observados no dia a dia são modelados por equações diferenciais.

Interações entre cargas elétricas, movimento de partículas, transferência de energia e massa, são alguns exemplos de situações as quais utilizamos uma Equação Diferencial Parcial (EDP).

Problemas que envolvem a condução e/ou dissipação do calor já são estudados pelo homem há muito tempo. Um deles foi Jean Baptiste Joseph Fourier(1768-1830), responsável por formular corretamente a lei de propagação do calor em seu trabalho intitulado *Mémoire sur la propagation de la chaleur* que foi publicado em 1807 (PIFER; AURANI, 2015).

Sendo assim, com base nas afirmações de (FIGUEIREDO, 1977) pode-se dizer que resolver uma EDP analiticamente nem sempre é uma tarefa fácil. Muitas vezes só é possível obter soluções para estas equações quando impomos uma série de restrições ao problema. Dessa maneira, a presente pesquisa justifica-se pelo fato de buscar resolver numericamente a Equação do Calor em uma dimensão.

Diante do que foi apresentado, este trabalho pretende responder à seguinte questão: o método das diferenças finitas com a formulação explícita fornece uma solução numérica para a equação do calor unidimensional, próxima da solução analítica?

Assim, pode-se definir determinados objetivos principais à serem desenvolvidos no decorrer do trabalho, sendo eles, resolver a equação do calor numericamente, e comparar a solução numérica obtida a partir do método de diferenças finitas com a solução analítica unidimensional.

Para estabelecer esse objetivo, vamos dividir o trabalho em três partes. A princípio, foi resolvida a equação do calor numericamente. Em seguida, será feita a busca na literatura de

uma solução analítica para a mesma. Por fim, realizou-se uma comparação da solução numérica obtida com a solução analítica.

A metodologia de pesquisa utilizada no trabalho é uma revisão bibliográfica juntamente com uma experimentação do método numérico por meio de um software.

Foi mostrado no primeiro capítulo quais motivos levaram ao problema utilizado em nossa pesquisa, referiu-se ao matemático responsável pela elaboração da equação do calor e apresentou-se a obtenção da mesma.

Posteriormente no segundo capítulo têm-se a construção referente a solução analítica de modo geral, em seguida mostrou-se a sua solução particular e uma representação de seus resultados.

O terceiro capítulo foi desenvolvido com o objetivo de descrever todos tópicos numéricos do trabalho, foi feita a apresentação do método utilizado em conjunto com a sua aplicação e a exposição do que foi obtido.

Inicialmente, ao final deste trabalho é esperado obter um resultado positivo em relação ao método de diferenças finitas com formulação explícita e a equação do calor, tornando o método utilizado, uma nova opção quando se trabalhar com esse tipo de problema.

Capítulo 1

Equação do Calor em uma Barra

Foi apresentado neste capítulo o contexto histórico que motivou Fourier a iniciar as suas investigações e conseguinte se tem uma breve biografia a seu respeito. Por fim encerraremos o capítulo ao mostrar a dedução para a equação do calor.

1.1 Contextualização do Problema

A revolução industrial ocorrida no século XVIII, consolidou o desenvolvimento da indústria com a introdução das máquinas a vapor, a princípio na área têxtil e depois nos meios de transporte, acontecimentos que chamaram a atenção para os fenômenos relacionados ao calor (PIFER; AURANI, 2015).

Diante disso, juntamente, manifestaram-se também os problemas associados a eles, como o aumento da poluição no ar, doenças e acidentes, além do superaquecimento das máquinas. Influenciando pesquisadores a entender e explicar esses processos.

Dentre estes pesquisadores, Fourier foi um dos pioneiros e se tornou responsável por elaborar a equação da condução do calor, e na solução aplicar o uso das séries trigonométricas, que hoje muitas vezes são referidas com o seu nome. Graças ao seu trabalho, possibilitou-se a iniciação de novos estudos da matemática, com as aplicações ao cálculo.

A equação do calor, pode ser considerada uma EDP clássica, devido ao seu valor histórico significativo como afirma (FIGUEIREDO, 1977). Isso porque esse foi um dos primeiros problemas modelados pelas Equações Diferenciais a aparecer aos matemáticos, e Fourier à frente de seu tempo, buscou compreender e explicar esses processos físicos.

De acordo com (BOYCE; DIPRIMA, 2015), a motivação para resolver essas equações

vêm do desejo em aprender sobre os processos físicos que são representados por elas. Assim, podemos destacar a importância das equações diferenciais, em que elas explicam matematicamente problemas que são considerados naturais.

Ao analisar essa informação e a relacionar com o contexto histórico citado no começo do capítulo, compreende-se melhor os motivos de Fourier a desenvolver sua pesquisa. Porém, isso não é tudo e para entender, é preciso saber de um pouco da sua história.

1.2 Jean Baptiste Joseph Fourier

Com base em (EISENHAUER, 2007), foi exposta uma parte da história do criador da Equação do Calor, para agregar um valor não apenas matemático, mas também de cunho histórico para o nosso trabalho.

Jean Baptiste Joseph Fourier, nasceu em Auxerre, França em 21 de março de 1768, foi o nono dos doze filhos do segundo casamento de seu pai Joseph Fourier. Seus pais acabaram falecendo quando ele tinha apenas 9 anos de idade.

Na sua juventude estudou latim e francês, demonstrou ser uma "grande promessa". Em 1780 prosseguiu para a *Ecole Royale Militaire* de Auxerre onde mostrou seus talentos para a literatura. Mas aos 13 anos, a matemática se tornou seu verdadeiro interesse.

Quando adulto, esse interesse pela matemática permaneceu, com o desejo de realizar um trabalho grandioso. Teve como mestres, nomes significativos como Laplace e Lagrange. Envolveu-se com a política, e possuiu cargos importantes na época da revolução francesa, conquistando o respeito e a confiança de Napoleão.

Assim, a pedido de Napoleão, Fourier foi para Grenoble e se ausentou do mundo acadêmico, algo que o entristeceu, todavia exatamente nesse período ele desenvolveu sua pesquisa sobre o calor.

Em seus últimos anos, situado em Paris, ainda realizou pesquisas e publicações de artigos referentes a matemática pura e aplicada. Fourier morreu no dia 16 de maio de 1830 em Paris na França. E deixou um trabalho de extrema importância, não apenas na área de exatas, mas em vários campos da ciência.

Sendo assim, o caminho percorrido por Fourier até a apresentação da fórmula geral da equação do calor não foi fácil, ele enfrentou diversas dificuldades, tanto na sua concepção quanto na aceitação dela. Assim ele foi realizando mudanças gradualmente até chegar ao seu estado final.

Este trabalho final foi denominado *Théorie analytique de la chaleur* publicado em 1822 onde ocorreu em termos mais claros a representação de uma função por uma série trigonométrica, concluindo um estudo marcado por dúvidas e controvérsias mantidas entre os matemáticos eminentes (FIGUEIREDO, 1977).

A seguir, apresentou-se uma dedução para a Equação do Calor, e a mesma serviu como modelo matemático para realizar as soluções e comparações que eram o objetivo geral do nosso trabalho.

1.3 Obtenção da Equação do Calor

Consideremos uma barra de material condutor de calor, homogênea e finita, em que a superfície lateral está isolada, de tal modo que o calor só pode ser adicionado de forma externa pelas extremidades. Graças à homogeneidade e ao isolamento térmico o fluxo de calor se dá na direção x , tornando o problema unidimensional. Além disso, o calor específico (γ) e a condutividade térmica (k) são constantes.

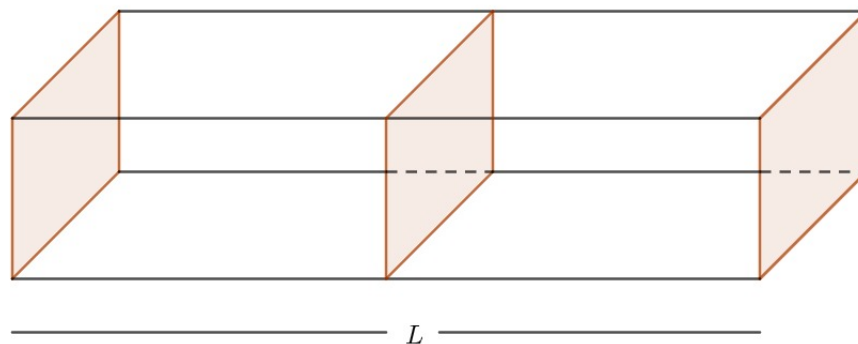


Figura 1.1: Barra Condutora de Calor
Fonte: Autoria própria

A figura (1.1) traz uma ideia menos abstrata para nossas considerações, porém não necessariamente precisa ser este o formato da barra, e ainda pode-se também utilizar mais de uma dimensão, mas o nosso problema é unidimensional.

A dedução apresentada a seguir foi baseada em (ZILL; CULLEN, 2001). Partiu-se das leis físicas, que podem ser consideradas empíricas, ou seja, são baseadas na experiência e na observação.

A primeira é a lei da calorimetria, que adotou-se a seguinte formulação,

$$Q = \gamma m \partial T \quad (1.1)$$

Sendo que,

- Q é a quantidade de calor (J);
- m é a massa do corpo (g);
- T é a temperatura (°C);
- γ = calor específico (J/g°C);

Posteriormente temos a lei de difusão de Fourier,

$$Q_t = -kA \frac{\partial T}{\partial x} \quad (1.2)$$

Em que,

- Q_t é a Quantidade de calor em função do tempo (J/s);
- A é a área perpendicular ao fluxo de calor (m²);
- k é a condutividade térmica (W/m.C);
- x é a posição na barra (m);

A partir de (1.2), vamos calcular o fluxo de calor em dois momentos quaisquer, sendo eles distintos,

$$-kA \frac{\partial T}{\partial x}(x + \Delta x) + kA \frac{\partial T}{\partial x}(x) = kA \left[\frac{\partial T}{\partial x}(x + \Delta x) - \frac{\partial T}{\partial x}(x) \right] \quad (1.3)$$

Em seguida, derivou-se a equação (1.1) pelo tempo (t), m foi substituído por $\rho \cdot \Delta x$, é possível realizar essa operação devido a relação $\rho = \frac{m}{\Delta x}$.

$$Q_t = \gamma \rho \Delta x \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.4)$$

Sendo,

- $\frac{m}{\Delta x}$ a densidade linear da barra (kg/m);

Igualando as equações (1.3) e (1.4), temos,

$$kA \left[\frac{\partial T}{\partial x}(x + \Delta x) - \frac{\partial T}{\partial x}(x) \right] = \gamma \rho \Delta x \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.5)$$

ou

$$\frac{kA}{\gamma \rho} \left[\frac{\frac{\partial T}{\partial x}(x + \Delta x) - \frac{\partial T}{\partial x}(x)}{\Delta x} \right] = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.6)$$

Tomando, $\Delta x \rightarrow 0$, tem-se:

$$\frac{kA}{\gamma \rho} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.7)$$

Chamemos $\frac{kA}{\gamma \rho}$ de a^2 , então

$$a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.8)$$

A partir da equação (1.8), estamos capacitados a calcular a temperatura ao longo da barra que foi descrita em qualquer posição e a qualquer instante de tempo. Sendo assim, podemos destacar que (1.8) esta em função da posição x na barra e do tempo t . De modo que, a^2 será a difusividade térmica, com unidade m^4/s .

No próximo capítulo, dando continuidade aos nossos objetivos, vamos fazer a introdução referente a parte desenvolvida com base na análise matemática da pesquisa, expondo a solução do problema que estamos dispostos a resolver, a princípio essa solução será mostrada analiticamente.

Nesse contexto, vale ressaltar a ênfase que abordamos na importância do contexto histórico que estamos trabalhando, assim estaremos transitando entre a história por traz dos ocorridos e o desenvolvimento matemático.

Capítulo 2

Solução analítica da Equação do Calor

Neste capítulo apresentaremos uma solução analítica para a equação do calor, em seguida foi realizada a exposição comentada dos resultados analíticos obtidos.

2.1 Solução Geral

Como foi visto em (1.8), conseguimos medir a temperatura ao longo de uma barra com comprimento conhecido em qualquer posição x e em um instante de tempo t definido. Ou seja, a solução da Equação do Calor é uma função $T(x, t)$.

As condições para a barra apresentadas no Capítulo 1, permanecem de modo que temos então um problema de valor inicial e de fronteira (FIGUEIREDO, 1977), problemas desse tipo são denominados PVIF.

Nesse contexto, aplicando o método da separação de variáveis na equação foi possível satisfazer ambas as condições isoladamente, chegando em uma solução geral para a fórmula apresentada em (1.8).

Não foi feita a demonstração de modo completo, pois foge ao foco do nosso trabalho. Deste modo, segundo (ZILL; CULLEN, 2001, p.257), podemos afirmar que a solução geral é dada por:

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) e^{\left(\frac{n\pi a}{L} \right)^2 t} \quad (2.1)$$

Temos então em (2.1) que L será o comprimento da barra, a é a difusividade térmica e b_n é denominado coeficiente de Fourier que foi determinado da seguinte forma:

A partir da condição inicial da distribuição inicial da temperatura,

$$T(x, 0) = f(x).$$

Fizemos a substituição dessa condição em $f(x)$, para compreender que a distribuição vai depender da temperatura inicial da barra.

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

Feita a substituição, obteremos então,

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx \quad (2.2)$$

A partir disso, b_n assume essa forma pelo fato da função com a qual está sendo trabalhada ser uma função ímpar e periódica, de modo que, seu período é $2L$ (FIGUEIREDO, 1977).

Segundo (FIGUEIREDO, 1977), Fourier acreditava que qualquer função poderia ser expressada pelas séries trigonométricas, o que foi desmistificado futuramente por Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805-1859). Porém, é de Fourier o mérito por explicar com clareza como uma função seria representada pelas séries.

Seu trabalho careceu de rigor, o que é compreensível, pois quando ele o desenvolveu, a análise não estava precisamente formulada. Na verdade problemas como os da convergência da série de Fourier que levaram outros matemáticos a formular mais cuidadosamente a análise (FIGUEIREDO, 1977).

Conhecemos agora, a solução analítica para a Equação do Calor, vamos aplicá-la em um problema selecionado para resolver ele analiticamente, com o objetivo de futuramente comparar com a solução numérica.

Para desenvolver a solução analítica, foi utilizado a fórmula demonstrada neste capítulo. Sendo assim, vamos descrever uma situação adversa à ser respondida, de modo que têm-se a intenção de resolvê-la detalhadamente .

2.1.1 Solução Particular

Consideremos uma barra de comprimento π , difusividade térmica 1, temperatura inicial 100 e temperatura nas extremidades igual a 0. Dadas estas condições, qual será a função que calcula a temperatura ao longo da barra com o passar do tempo?

Esse é um problema de valor inicial que estamos interessados em resolver. É sabido que $T(x, 0) = f(x) = 100$. Sabe-se ainda que $T(0, t) = 0$ e $T(\pi, t) = 0$.

Analisando as informações que possuímos, utilizaremos então a equação (2.1) e o coeficiente de Fourier (2.2) para encontrar uma função $T(x, t)$ que resolva esse problema.

Seguindo as condições dadas para a situação abordada, temos que $f(x) = 100$, $a = 1$ e $L = \pi$. Substituindo esses valores na equação (2.1):

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{\pi} \right) e^{\left(\frac{n\pi 1}{\pi} \right)^2 t} \quad (2.3)$$

Note que na equação (2.3) π aparece duas vezes multiplicando e dividindo as frações, disso podemos obter então,

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen} (nx) e^{n^2 t} \quad (2.4)$$

Logo, precisamos encontrar agora o valor de b_n , para isso foi usado (2.2), assim substituindo os valores que nos foram dados,

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} 100 \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{\pi} \right) dx \quad (2.5)$$

Novamente na equação (2.5) pode ser feita a simplificação de π na expressão, desse modo temos,

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} 100 \operatorname{sen} (nx) dx \quad (2.6)$$

ou ainda,

$$b_n = \frac{200}{\pi} \int_0^{\pi} \operatorname{sen} (nx) dx \quad (2.7)$$

Deve-se então usar a substituição de variáveis para resolver a integral. Para isso vamos considerar $u = (nx)$ e $du = n dx$ presente na integral em (2.7) e teremos,

$$b_n = \frac{200}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\text{sen}(u)}{n} du \quad (2.8)$$

Como n não é a variável a ser integrada nessa situação, ele assume o comportamento de uma constante, então podemos reescrever da seguinte forma:

$$b_n = \frac{200}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{n} \text{sen}(u) du \quad (2.9)$$

Aplicando a propriedade multiplicativa em (2.9), é possível mover a constante para o lado de fora,

$$b_n = \frac{200}{\pi} \frac{1}{n} \int_0^{\pi} \text{sen}(u) du \quad (2.10)$$

Agora que as constantes foram retiradas de dentro da integral, a expressão foi composta em,

$$b_n = \frac{200}{n\pi} \int_0^{\pi} \text{sen}(u) du \quad (2.11)$$

Dessa maneira, podemos calcular a integral facilmente e obteremos então:

$$b_n = \frac{200}{n\pi} (-\cos(u)) \Big|_0^{\pi} \quad (2.12)$$

Voltando para a variável original com a qual estamos trabalhando, temos assim,

$$b_n = -\frac{200}{n\pi} \cos(n\pi) \Big|_0^{\pi} \quad (2.13)$$

Usando o teorema fundamental do cálculo, a expressão presente em (2.13) é o mesmo que:

$$b_n = -\frac{200 \cos(n\pi)}{n\pi} - \left(-\frac{200 \cos(n \cdot 0)}{n\pi} \right) \quad (2.14)$$

Esse será o nosso valor para (b_n) . Porém, pode-se ainda simplificar a expressão (2.14),

$$b_n = \frac{-200 \cos(n\pi) + 200}{n\pi} \quad (2.15)$$

Tendo encontrado o valor de do nosso coeficiente de Fourier (b_n) , podemos então fazer a substituição de (2.15) em (2.4), encontrando:

$$T(x, t) = \frac{200}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-\cos(n\pi) + 1}{n} \right) \sin(nx) e^{n^2 t} \quad (2.16)$$

A função (2.16) é a solução analítica que procurávamos. Tendo o seu conhecimento, somos capazes de demonstrar os resultados analíticos para o nosso problema, como havíamos mencionado anteriormente.

2.1.2 Representação gráfica da solução

O resultado mostrado em (2.16) é apresentado graficamente na figura a seguir para diferentes instantes de tempo.

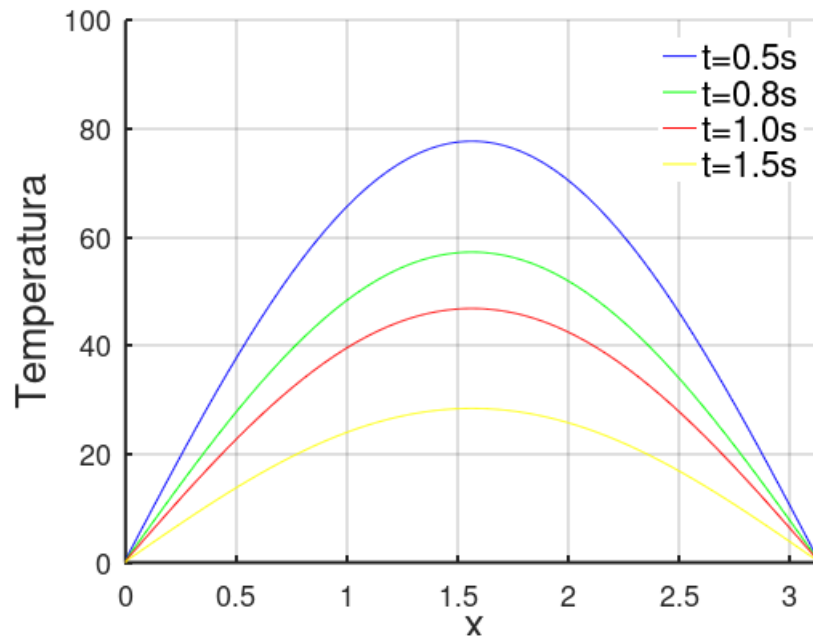


Figura 2.1: Soluções Analíticas

Fonte: Autoria própria

Note na figura (2.1) que a temperatura vai diminuindo ao longo da barra, com o passar do tempo. Observamos ainda que, como era esperado, a temperatura nas extremidades permanece nula.

No próximo capítulo resolveremos o mesmo problema numericamente e serão feitas comparações com os resultados obtidos pelo método analítico.

Capítulo 3

Solução numérica da Equação do Calor

O presente capítulo foi voltado para a apresentação dos resultados numéricos obtidos com o método empregado.

3.1 Método de Diferenças Finitas

Durante a nossa caminhada como discente na graduação temos contato com o cálculo numérico, basicamente lidamos com problemas dos quais não conseguimos obter uma solução analítica, assim realizamos cálculos para chegar em soluções numéricas.

O surgimento do computadores nos anos 40 incentivou o uso e o desenvolvimento dos métodos numéricos (CHAPRA; CANALE, 2016). Hoje em dia os computadores estão em um crescimento progressivo, isso permite que o cálculo numérico ajude na resolução de problema antes não solucionáveis. Dessa maneira, hoje têm-se novas alternativas para solucionar problemas mais complicados, como as calculadoras, softwares e programas que são desenvolvidos para aplicar diretamente esses métodos.

Antes da existência dos computadores era necessário utilizar métodos analíticos para se obter a solução de certos problemas, apesar das suas utilidades, ocorria um desperdício de tempo e energia desenvolvendo cálculos extensos e cansativos.

A partir das ideias de (CHAPRA; CANALE, 2016, p.5), podemos apontar dentre uma das funções dos métodos numéricos, que eles tem a capacidade de reduzir cálculos matemáticos mais avançados em operações aritméticas básicas tornando práticos tópicos que poderiam ser considerados obscuros se tratados de outra forma.

Dentre esses, vamos usar o método das diferenças finitas, que tem como ideia ge-

ral discretizar uma equação diferencial e substituir as derivadas presentes nesta equação por aproximações contendo apenas valores numéricos, como nos mostra (FRANCO, 2006).

Fazendo isto, estamos tornando o processo para obter a solução mais simples, ou seja, é mais fácil trabalhar com uma equação algébrica ao invés de uma diferencial, e nesse caso ainda contamos com a ajuda da máquina.

Sendo assim, apesar do nosso problema ser unidimensional, trabalhamos em um domínio que possui duas variáveis (espacial e temporal). Por isso, é necessário que façamos esse processo nas duas separadamente.

Dentro dos métodos das diferenças finitas, há diferentes formulações. Uma delas, é a formulação explícita ou também pode ser chamado de progressiva, essa se caracteriza por colocar o termo desconhecido separado do restante dos termos da equação.

Implementando esse método computacionalmente, conseguimos encontrar determinadas aproximações numéricas para o problema que estamos abordando, e esperamos obter uma solução semelhante a analítica encontrada no capítulo anterior.

3.2 Derivada Numérica

Para a discretização, é necessário apresentar a definição do que é uma derivação numérica, pois ela está diretamente ligada ao método das diferenças finitas.

A derivação numérica é uma forma de encontrar uma aproximação para a derivada a partir de um conjunto de pontos discretos e consiste em tomar um ponto conhecido x_0 e calcular a sua diferença em relação a um ponto próximo, $x_0 + \Delta x$ por exemplo, da seguinte forma:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \quad (3.1)$$

Dessa maneira, quanto menor o valor de Δx , desde que $\Delta x \neq 0$, melhor será a aproximação feita pelo método, porém sempre haverá um erro a ser considerado.

Essas diferenças, podem ser atrasadas, centradas ou avançadas, tudo depende de qual ponto próximo a x vamos considerar. Sabendo disso podemos deixar claro, que em nossos cálculos vamos usar as diferenças centradas e avançadas.

Uma forma de fazer essa aproximação da derivada numérica é por meio da expansão da série de Taylor, que pode ser expressada da seguinte forma:

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x - x_i)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x - x_i)^n \quad (3.2)$$

3.2.1 Derivada Avançada de Primeira Ordem

Diante dessas informações, a diferença avançada será utilizada na derivada de primeira ordem. Assim, apropriando-nos da expansão presente em (3.2) para f , podemos escrever a derivada para um ponto inicial x_i da seguinte forma:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (3.3)$$

Ao fazer a aproximação da derivada utilizando o Polinômio de Taylor, cometemos um erro que mostraremos adiante.

Para mostrar esse erro cometido, voltaremos em (3.2) e vamos aproximar a derivada novamente com $x = x_{i+1}$.

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)\Delta x + \frac{f''(x_i)}{2!}(\Delta x)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(\Delta x)^n \quad (3.4)$$

Ao isolar o termo que contém a primeira derivada:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} - \left(\frac{f''(x_i)}{2!}(\Delta x)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(\Delta x)^n \right)$$

O termo dentro dos parênteses é o erro que cometemos nesta aproximação, portanto:

$$E(x_i) = \left(\frac{f''(x_i)}{2!}(\Delta x)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(\Delta x)^n \right) \quad (3.5)$$

ou:

$$E(x_i) = \sum_{k=2}^n \frac{f^{(k)}(x_i)}{k!}(\Delta x)^k \quad (3.6)$$

3.2.2 Derivada Centrada de Segunda ordem

Para a derivada centrada de segunda ordem a aproximação no Polinômio de Taylor precisa da diferença avançada:

$$f''(x_i) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} [2f(x_{i+1}) - 2f(x_i) - 2f'(x_i)\Delta x] \quad (3.7)$$

e da diferença atrasada:

$$f''(x_i) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} [2f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + 2f'(x_i)\Delta x] \quad (3.8)$$

Adicionando-se (3.7) e (3.8), chegamos ao seguinte resultado:

$$2f''(x_i) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} [2f(x_{i-1}) - 4f(x_i) + 2f(x_{i+1})]$$

Finalmente:

$$f''(x_i) \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} [f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})] \quad (3.9)$$

O resultado obtido em (3.9) é a aproximação para a derivada de segunda ordem em diferenças centradas

Para conseguir obter a expressão do erro para a derivada de segunda ordem em diferenças centradas, desenvolveu-se o mesmo processo análogo a obtenção da expressão da própria derivada. Sendo assim, chegaremos ao seguinte resultado:

$$E(x_i) = 2 \cdot \sum_{k=3}^n \frac{f^{(2k-1)}(x_i)}{(2k-1)!} (\Delta x)^{(2k-1)} \quad (3.10)$$

A seguir vamos apresentar a discretização da Equação do Calor a partir da formulação explícita que citamos anteriormente, usando as diferenças que foram apresentadas acima.

3.3 Discretização da Equação do Calor

Com base em (FRANCO, 2006), para encontrar os pontos discretos foi feita a divisão do intervalo $[0, L]$ em N partes iguais de comprimento Δx , obtendo assim, os denominados $N + 1$ pontos na sobre o domínio da posição x , de modo que $x_i = i\Delta x$, $0 \leq i \leq N$ e $\Delta x = \frac{L}{N-1}$.

De forma análoga, dividindo o intervalo $[0, t]$ em M partes de comprimento Δt , encontramos os pontos $M + 1$ do tempo t , esses foram dados por: $t_n = n\Delta t$, $0 \leq n \leq M$.

Sendo assim, no domínio da equação encontraremos uma aproximação da solução nos

pontos determinados por (x_i, t_n) . Essa solução é dada por uma malha, que é um conjunto de pontos de passo Δx associados a x_i .

Adotaremos a seguinte simbologia:

$$T_i^n$$

em que, i significa a posição e n representa o contador de tempo. Por exemplo, T_2^1 quer dizer: a temperatura na posição 2 no instante de tempo 1.

Agora que estamos cientes das definições que foram preestabelecidas e necessárias para o desenvolvimento dos cálculos, faremos a exposição da discretização da equação por meio do método numérico.

Primeiramente foi aplicada a diferença centrada na derivada de segunda ordem em relação a posição x da equação (1.8),

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \frac{1}{(\Delta x)^2} \quad (3.11)$$

Consequente usando a diferença avançada ou progressiva, encontraremos a aproximação da derivada de primeira ordem,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \quad (3.12)$$

Substituindo (3.11) e (3.12) em (1.8) obteremos a seguinte expressão:

$$\frac{a^2}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) = \frac{1}{\Delta t} (T_i^{n+1} - T_i^n) \quad (3.13)$$

Multiplicando ambos os lados da equação por Δt , encontramos:

$$\frac{a^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) = T_i^{n+1} - T_i^n \quad (3.14)$$

Simplificando,

$$\frac{a^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) = T_i^{n+1} - T_i^n \quad (3.15)$$

Como T_i^{n+1} é o elemento que estamos procurando, vamos isolá-lo,

$$T_i^{n+1} = \frac{a^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) + T_i^n \quad (3.16)$$

Chamando $\frac{a^2 \Delta t}{(\Delta x)^2}$ de λ e aplicando a propriedade da distributividade em (3.16),

$$T_i^{n+1} = \lambda T_{i+1}^n - 2\lambda T_i^n + \lambda T_{i-1}^n + T_i^n \quad (3.17)$$

Colocando T_i^n em evidência para obter,

$$T_i^{n+1} = \lambda T_{i+1}^n + (1 - 2\lambda)T_i^n + \lambda T_{i-1}^n \quad (3.18)$$

Feito esse processo, podemos dizer que a equação (3.18) é a discretização de (1.8), ou seja, transformamos ela em uma equação algébrica. A partir dela encontramos aproximações para a solução numérica da Equação do Calor.

3.4 Molécula de cálculo e Condição CFL

A figura abaixo é conhecida como molécula de cálculo computacional e nela verifica-se graficamente o que está descrito em (3.18).

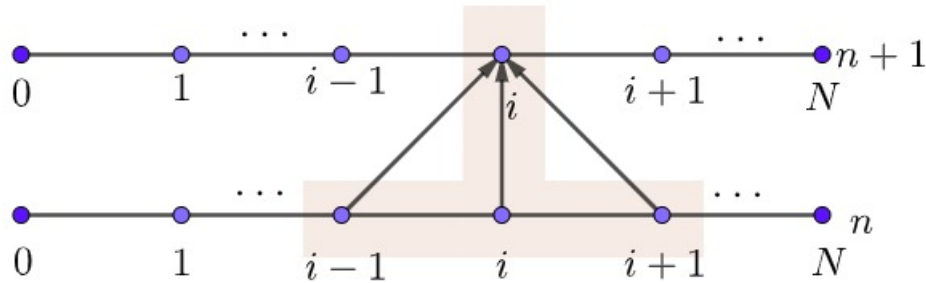


Figura 3.1: Molécula de Cálculo

Fonte: Autoria própria

Analisando de forma mais clara a figura (3.1), note que possuímos três pontos vizinhos do instante de tempo n que conhecemos os seus valores relacionados com o ponto desconhecido i do instante $n + 1$.

Dessa maneira, utiliza-se esses três pontos com valores conhecidos para calcular a temperatura em i no próximo instante por meio das coordenadas presentes no instante anterior.

Assim, calculamos as temperatura em diferentes posições por meio das aproximações. Acredita-se que quanto menor for a distância entre os pontos, melhor será o resultado obtido.

Para que o método apresente estabilidade na solução do problema, é necessário que uma condição seja atendida.

Segundo (NEVES, 2019), essa condição denominada CFL em homenagem aos devidos criadores Courant, Friedrichs e Lewy, é fundamental para a convergência quando se trata de aproximações numéricas de equações diferenciais parciais lineares ou não lineares.

Desse modo, com base no trabalho de (NEVES, 2019), temos que para qualquer esquema numérico que esteja na forma explícita, exatamente como no nosso caso, a condição é válida desde que $-1 \leq \lambda \leq 1$, ou seja,

$$\left| \frac{a^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} \right| \leq 1 \quad (3.19)$$

Diante disso, foi apresentado os valores para Δx e Δt , afim de mostrar que eles satisfazam a condição CFL em nossos cálculos.

Para nossa primeira simulação as medidas assumidas foram:

Tabela 3.1: Tabela dos valores para a primeira simulação

Constante	Valor admitido
Δx	0.0062
Δt	0.000017
λ	0.4422476

Fonte: Autoria Própria

Por outro lado, para a segunda simulação feita os cálculos foram concebidos a partir de,

Tabela 3.2: Tabela dos valores para a segunda simulação

Constante	Valor admitido
Δx	0.0031
Δt	0.000041
λ	0.4266389

Fonte: Autoria Própria

O objetivo principal do nosso trabalho é verificar se essa aproximação obtida é estável. Para isso, adiante apresentaremos a solução numérica.

3.5 Soluções Numéricas

A equação (3.18) foi implementada computacionalmente por meio de um código desenvolvido em um programa de uso livre denominado Octave. Ele é um software de linguagem computacional desenvolvido por James B. Rawlings e Jhon G. Ekerdt (EATON, 1997).

A aplicação do método que escolhemos dentro do software aconteceu a partir do processo de transcrever no programa a equação (3.18), de modo que ele fosse capaz de nos fornecer ambas os resultados graficamente.

Diante dessas informações, as soluções numéricas obtidas para todos os instantes de tempo são apresentados na figura a seguir, analogamente as soluções analíticas do capítulo 2,

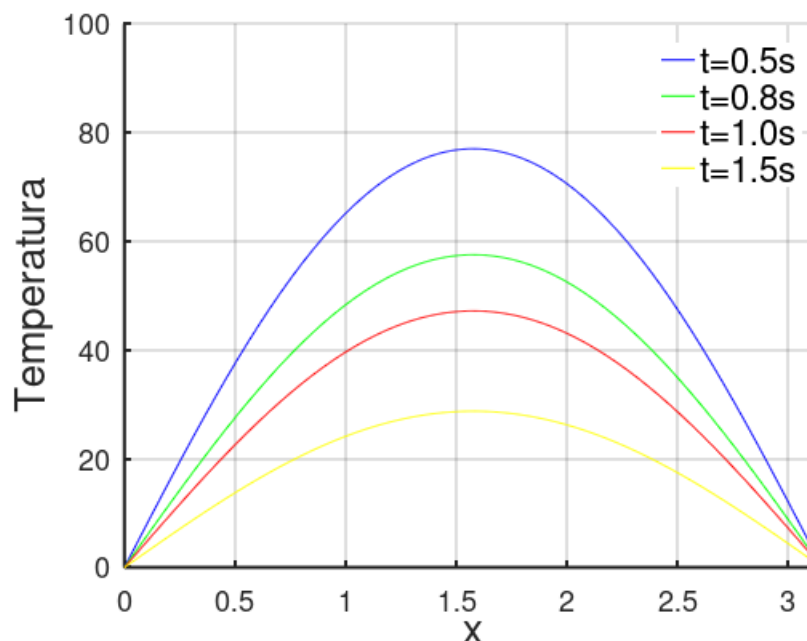


Figura 3.2: Soluções Numéricas ($\Delta x = 0.0062$)

Fonte: Autoria própria

Analisando a figura (3.2) é possível verificar visualmente que as soluções estão próximas das encontradas na figura (2.1)

Para contribuir com essa afirmação, apresentaremos as solução numéricas e analíticas nas mesmas figuras para todos os instastes de tempo separadamente.

3.6 Simulação numérica para $\Delta x = 0.0062$

Adiante serão exibidos os gráficos desenvolvidos para comparar melhor os nossos resultados:

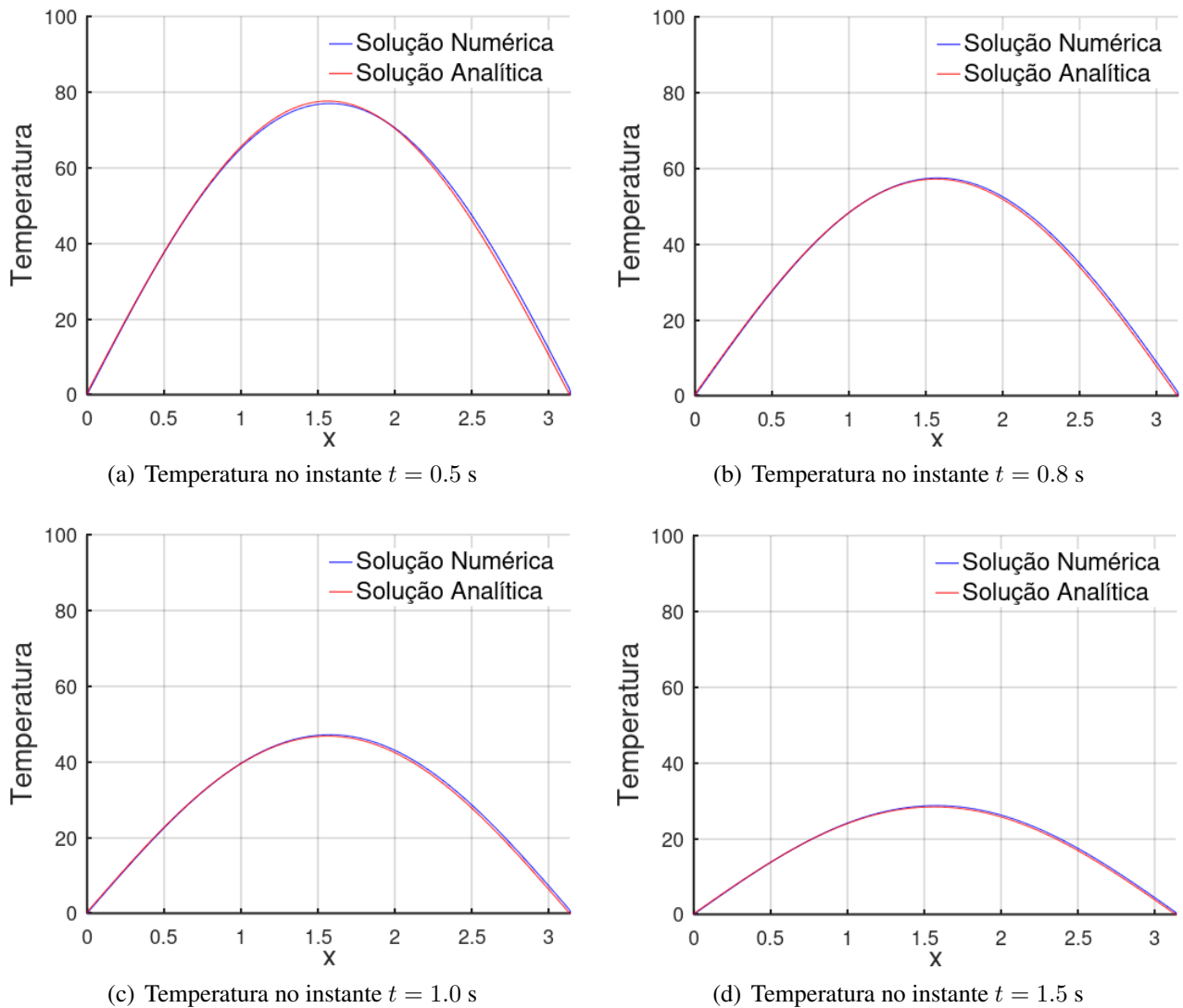


Figura 3.3: Representação das soluções numéricas e analíticas ($\Delta x = 0.0062$)

Fonte: Autoria própria

No figura (3.3(a)), observe que no centro da barra a solução numérica começa a divergir da analítica. Porém, ambas as soluções percorrem os espaços de maneira regularmente próximas, sendo esse um ponto positivo para nosso método.

Nota-se visivelmente que no segundo gráfico presente em (3.3(b)) em relação ao primeiro a aproximação teve uma leve melhoria, principalmente no centro da barra onde havia uma diferença mais considerável.

Aparentemente nos instantes de tempo $t = 1.0s$ e $t = 1.5s$ temos as aproximações com melhores resultados estabelecidos pelo método, de modo que a diferenciação entre ambas as soluções é quase imperceptível. A temperatura tem admitido praticamente os mesmos valores por quase todo o espaço.

Sendo assim, faz-se uma análise de modo geral do resultado das nossas aproximações, o método mostrou ótimos resultados.

A análise dos gráficos até o presente momento aconteceu apenas visualmente. Apesar de ser possível considerar o resultado da aproximação de modo positivo, precisamos quantificar o erro existente na solução. Entende-se por erro a diferença entre o resultado esperado e o resultado obtido, nesse caso, solução analítica e solução numérica.

Na tabela a seguir estão representados os valores obtidos para o erro.

Tabela 3.3: Tabela das Normas em cada instante de tempo ($\Delta x = 0.0062$)

Instante de tempo	Erro calculado
$t = 0,5s$	0.28405
$t = 0,8s$	0.21455
$t = 1,0s$	0.21139
$t = 1,5s$	0.21067

Fonte: Autoria própria

Para calcularmos os erros presentes na tabela (3.3) foi utilizada a norma euclidiana do vetor diferença normalizado. Ou seja:

$$\text{diferença} = \left| \frac{1}{\max \bar{T}} \bar{T} - \frac{1}{\max T} T \right|$$

Sendo $\bar{T}$ a solução analítica e T a solução numérica.

3.7 Simulação numérica para $\Delta x = 0.0031$

Visando melhorar a solução apresentada anteriormente foi feita outra simulação dobrando-se a quantidade de pontos, consequentemente diminuindo o valor de Δx . Os resultados são apresentados abaixo:

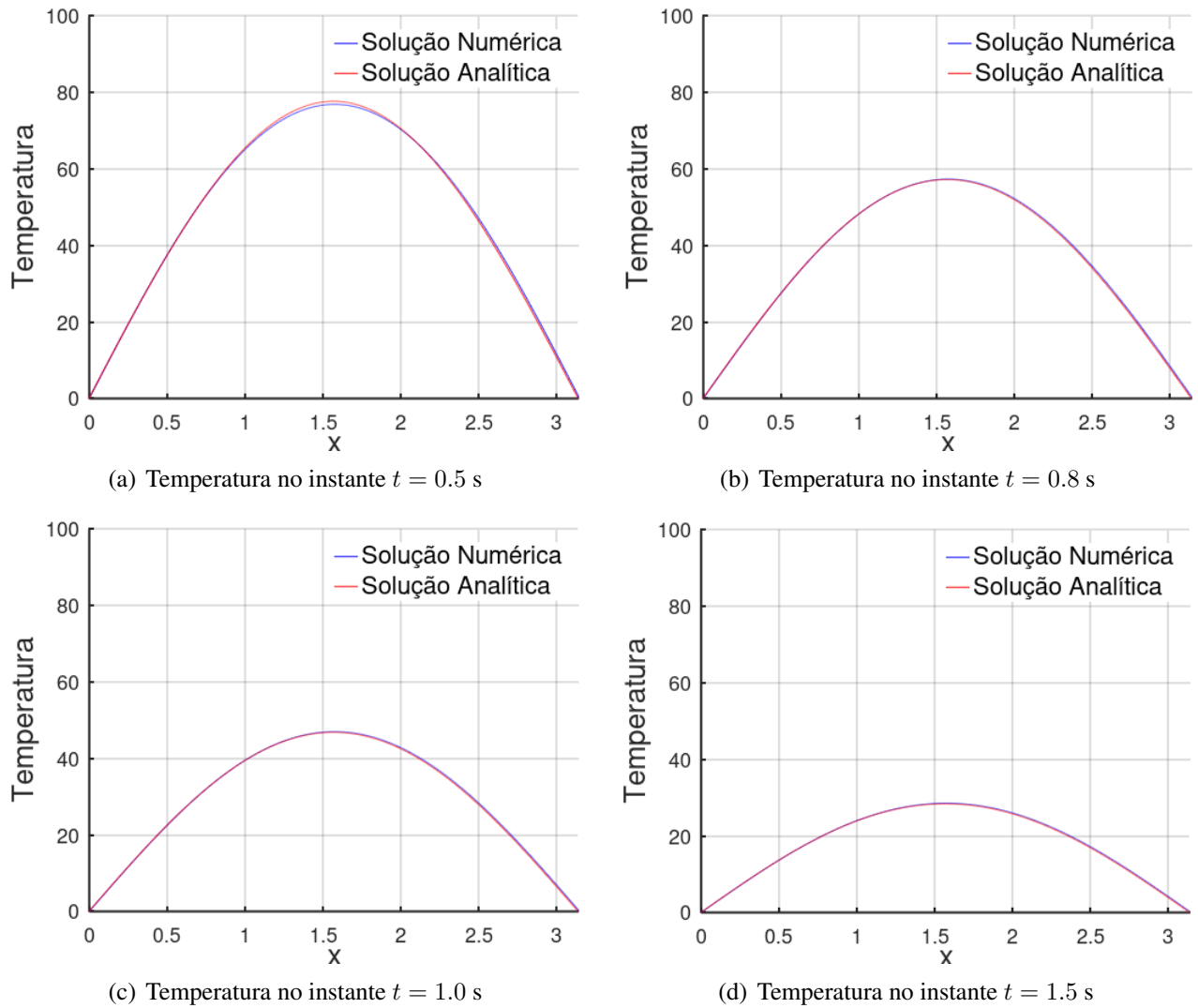


Figura 3.4: Representação das soluções numéricas e analíticas ($\Delta x = 0.0031$)

Fonte: Autoria própria

Ao analisar o instante de tempo $t = 0.5$ s presente em (3.4(a)), a sua comparação com o primeiro resultado, a diferença no centro da barra permaneceu, mesmo tendo aumentado significativamente os pontos.

Feita a verificação dos demais gráficos situados na figura (3.4) de forma nítida a aproximação sofreu uma ligeira otimização de modo que é quase insignificante a discrepância entre as soluções.

Nesse contexto, de maneira análoga vamos analisar quais mudanças essa segunda simulação trouxe para a nossa apuração da norma euclidiana, pois é esperado que a aproximação se torne ainda mais eficiente a medida que aumenta-se a quantidade de pontos calculados, assim esses erros foram colocados na tabela a seguir.

Tabela 3.4: Tabela das novas Normas em cada instante de tempo ($\Delta = 0.0031$)

Instante de tempo	Erro calculado
$t = 0,5s$	0.27756
$t = 0,8s$	0.15506
$t = 1,0s$	0.15030
$t = 1,5s$	0.14930

Fonte: Autoria própria

Verifica-se uma diminuição do erro uma vez que utilizamos uma quantidade maior de pontos na malha espacial. Contudo, percebeu-se um aumento significativo no tempo de execução do código.

No próximo capítulo serão feitas as considerações da presente pesquisa.

Capítulo 4

Considerações finais

Considerando os nossos resultados finais, foi possível perceber que a formulação explícita do método de diferenças finitas mostrou-se estável apresentando solução numérica próxima à solução analítica. Isso foi verificado graficamente e por meio do cálculo do erro.

Percebeu-se ainda que o custo computacional para uma malha mais refinada é muito grande e o resultado obtido não apresenta melhoria significativa.

Outra consideração importante é o fato de que a solução numérica traz gasto computacional enquanto a solução analítica depende exclusivamente de esforço humano. Sendo assim, cálculos trabalhosos muitas vezes são empregados. Em contrapartida, o computador se encarrega de executar o código obtido após a discretização.

Há outros métodos e formulações que podem ser utilizados para resolver o mesmo problema e fica aqui uma sugestão para futuros trabalhos nesse sentido.

Referências Bibliográficas

- BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. 10. ed. Rio de Janeiro: Grupo Editorial Nacional, 2015. page.33
- CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. *Métodos Numéricos para Engenharia*. 7. ed. Porto Alegre: AMGH Editora, 2016. page.1313
- EATON, J. W. *GNU Octave*. 3. ed. Boston: Free Software Foundation, 1997. page.2020
- EISENHAUER, G. *Jean Baptiste Joseph Fourier*. Lincoln, 2007. page.44
- FIGUEIREDO, D. G. de. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais*. Rio de Janeiro: IMPA, 1977. page.11, page.33, page.55, page.88, page.99
- FRANCO, N. B. *Cálculo Numérico: Estudo e Ensino*. 5. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006. page.1414, page.1616
- NEVES, A. M. das. *Critério de Estabilidade de um Esquema Explícito em Diferenças Finitas para o Modelo de Placas de Mindlin-Timoshenko*. Belém, 2019. page.1919
- PIFER, A.; AURANI, K. M. *A Teoria Analítica do calor de Joseph Fourier: Uma análise das bases conceituais e epistemológicas*. [S.l.], 2015. page.11, page.33
- ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. *Equações Diferenciais*. 3. ed. São Paulo: Pearson Makron Books, 2001. page.55, page.88