Modelação Numérica 2017

Aula 10, 21/Mar

- Equações diferenciais às derivadas parciais

http://modnum.ucs.ciencias.ulisboa.pt

Equações diferenciais às derivadas parciais

- Muitos problemas envolvem a solução de equações diferenciais. A sua solução numérica requer a sua:
  - Discretização: o teorema da amostragem deve ser satisfeito.
  - Transformação em equações algébricas.
- No caso das equações diferenciais às derivadas parciais existem duas ou mais variáveis independentes, podendo uma dessas variáveis ser o tempo.
- É conveniente classificar os problemas representados por estas equações em duas classes:
  - Problemas de condições iniciais (dependentes do tempo).
  - Problemas de condições fronteira (independentes do tempo).

Exemplos com primeiras e segundas derivadas

- Equação de advecção (linear,1D): $$\frac{\partial T}{\partial t} = -u\frac{\partial T}{\partial x},\; u = const$$
- Equação da difusão (linear, 1D): $$\frac{\partial T}{\partial t} = K\frac{\partial^2 T}{\partial x^2},\; K = const$$
- Equação de Poisson (2D): $$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = f(x,y)$$
- Equação de Laplace (2D): $$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$
- Equação de ondas (2D): $$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)$$

Equação de Navier-Stokes

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u\frac{\partial u}{\partial x} - v\frac{\partial u}{\partial y} - w\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + fv + v\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)$$

Advecção não linear

Difusão

- Equação fundamental da mecânica de fluídos, com aplicação na Meteorologia, Oceanografia, etc.
- É uma equação diferencial não linear de segunda ordem.
- A solução numérica destas equações requer a sua transformação em equações algébricas discretas. Existem vários métodos: diferenças finitas, elementos finitos, método espectral.

Diferenças finitas

- Série de Taylor:

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots$$

$$f(x) = e^x$$

https://en.wikipedia.org/wiki/Taylor_series

Diferenças finitas

- Diferenças avançadas:

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} &= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0) - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots}{\Delta x} \\
&= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 + \ldots \\
&= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)
\end{aligned}$$

Diferenças finitas

- Diferenças retardadas:

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} &= -\frac{f(x_0 - \Delta x) - f(x_0) - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots}{\Delta x} \\
&= \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 + \ldots \\
&= \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)
\end{aligned}$$

Diferenças finitas

- Diferenças centradas:

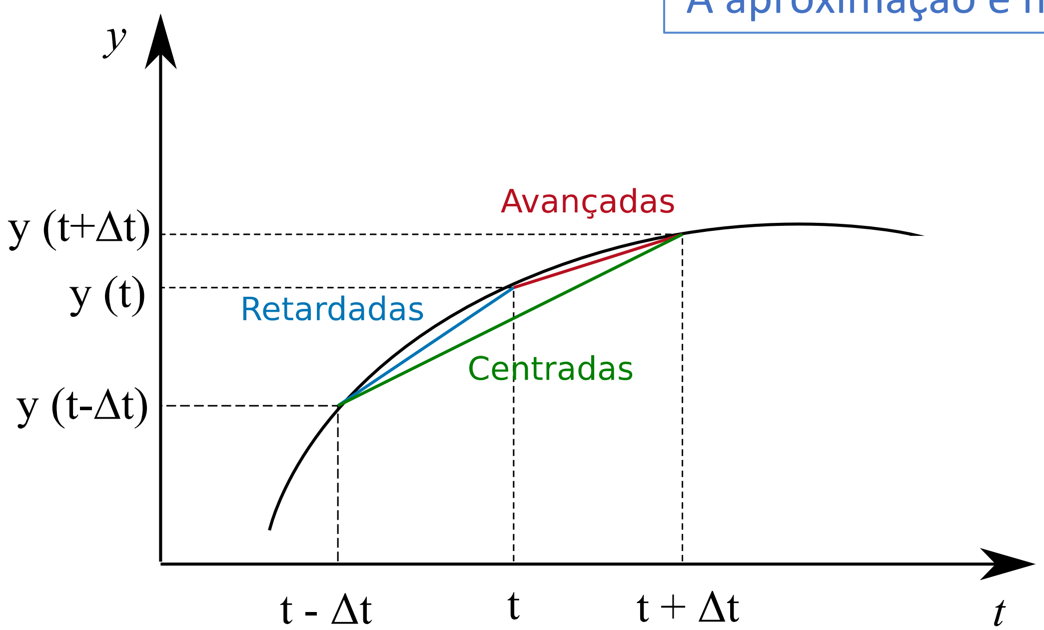
$$
\begin{array}{rl}
 & f(x_0+\Delta x) = \cancel{f(x_0)} + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} \Delta x + \cancel{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2} + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots \\
- & f(x_0-\Delta x) = \cancel{f(x_0)} - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} \Delta x + \cancel{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x=x_0} \Delta x^2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots \\
\hline
 & f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x) = 2\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} \Delta x + \frac{2}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} &= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x) - \frac{2}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3 + \ldots}{2\Delta x} \\
&= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} - \frac{\frac{2}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^3}{2\Delta x} + \ldots \\
&= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{x=x_0} \Delta x^2 + \ldots \\
&= \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)
\end{aligned}
$$

Diferenças finitas

- Diferenças avançadas: $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} = \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$
- Diferenças retardadas: $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0-\Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$
- Diferenças centradas: $$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} = \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

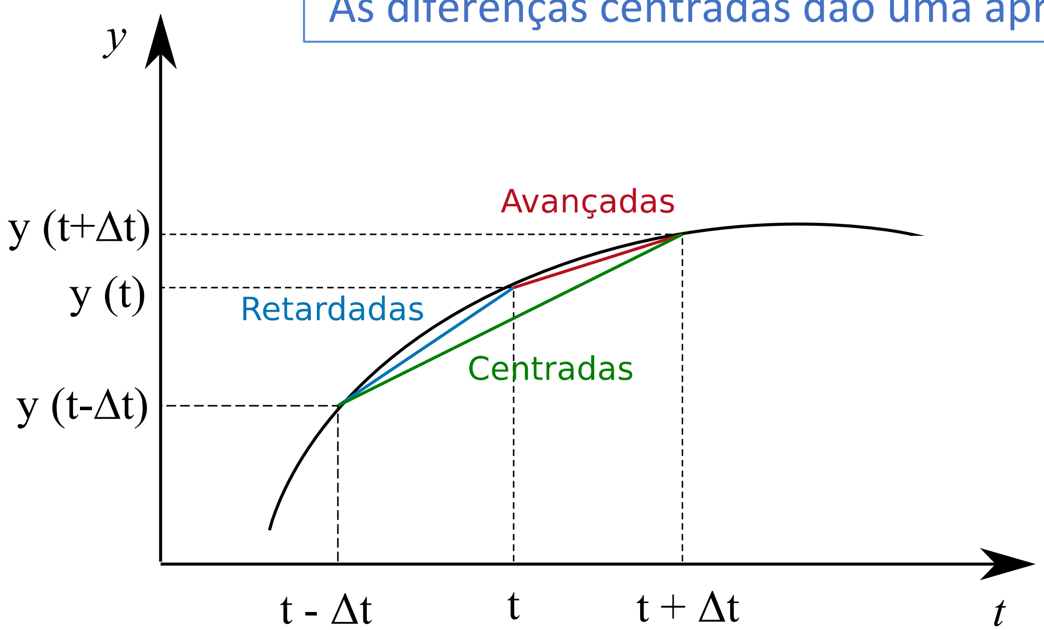
A aproximação é melhor quando Δx -> 0



Diferenças finitas

- Diferenças avançadas: $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} = \frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$
- Diferenças retardadas: $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} = \frac{f(x_0)-f(x_0-\Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$
- Diferenças centradas: $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=x_0} = \frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$

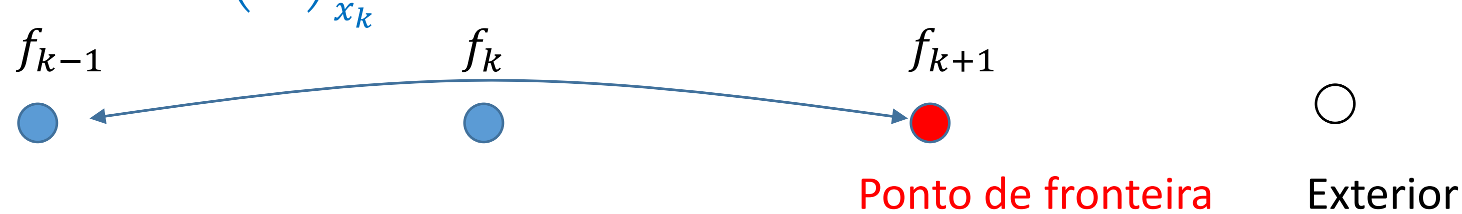
As diferenças centradas dão uma aproximação mais exacta



Diferenças de ordens mais elevadas

- Combinando séries de Taylor para $f(x_0 \pm n\Delta x)$, podem estabelecer-se aproximações às derivadas até qualquer ordem, implicando no entanto que o cálculo de uma derivada requer valores da função numa vizinhança cada vez mais extensa, o que não é prático e traz problemas quando nos aproximamos da fronteira.
- Por exemplo, no caso das diferenças centradas, elas só podem ser calculadas em pontos interiores, devendo os pontos de fronteira ser calculados à parte (na condição fronteira).

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_k} \approx \frac{1}{\Delta \mathrm{x}} f_{k+1} + f_{k-1} \qquad \frac{\partial f}{\partial x} \approx ?$$



Considerações iniciais

- A precisão do método utilizado na discretização é só uma das propriedades relevantes a considerar.
- Seja qual for a precisão, um método consistente deve convergir para a solução analítica no limite $\Delta x \longrightarrow 0$.
- Independentemente da precisão, um método só é útil se for numericamente estável, i.e. se o erro não crescer exponencialmente. Este critério é muito relevante para problemas que evoluem no tempo.
- O erro de um método precisa de ser caracterizado em detalhe. Por exemplo: como se traduz na representação da propagação de ondas (velocidade de fase e de grupo), como discrimina os diferentes comprimentos de onda (dispersão), etc..
- O teorema da amostragem é relevante!
- Estes tópicos serão importantes nos exemplos deste curso.

Equação de advecção (linear, 1D)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -u\frac{\partial T}{\partial x},\ u = const$$

- A equação é linear se $u = const$ e tem, nesse caso, solução analítica.
- Trata-se de um problema de valores iniciais. I.e., dada a distribuição inicial $T(x, t=0)$ calcular $T(x, t>0)$.
- Vamos discretizar a função $T(x, t) \approx T^{n\Delta t}_{k\Delta x} \equiv T^n_k$

(O índice superior representa tempo, o inferior o espaço). Vamos experimentar uma solução por diferenças finitas usando o método de Euler, com diferenças avançadas no tempo e centradas no espaço:

$$\frac{T_k^{n+1} - T_k^n}{\Delta t} = -u\frac{T_{k+1}^n - T_{k-1}^n}{2\Delta x} \Rightarrow T_k^{n+1} = T_k^n - u\Delta t\frac{T_{k+1}^n - T_{k-1}^n}{2\Delta x}$$

- Trata-se de um método com 1 nível (o cálculo da solução no passo de tempo n só depende de 1 passo anterior $n - 1$).
- Trata-se de um método explícito: T^{n+1}_k depende do campo no passo de tempo anterior (e não do seu valor noutros pontos em $t = n\Delta t$).