

Universidade do Minho

Departamento de Matemática

COMPLEMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA

EQUAÇÕES DE DERIVADAS PARCIAIS

Métodos de Diferenças Finitas

M. J. Soares

1999/2000

ÍNDICE

PARTE II – EQUAÇÕES DE DERIVADAS PARCIAIS

<i>Métodos de Diferenças Finitas</i>	109
Introdução	110
Capítulo 5 Equações de Derivadas Parciais e Fórmulas de Diferenças	111
5.1. Curvas características e classificação das equações de 2ª ordem	111
5.2. Condições iniciais e condições de fronteira	117
5.3. Fórmulas de diferenças finitas	120
5.4. Notas e referências adicionais	123
Capítulo 6 Equações Parabólicas	124
6.1. Método explícito simples	126
6.2. Método de Crank-Nicolson	127
6.3. Consistência, estabilidade, convergência	130
6.4. Generalizações	142
6.5. Notas e referências adicionais	146
Capítulo 7 Equações Hiperbólicas	147
7.1. Método explícito e condição de Courant-Friedrichs-Lewy	151
7.2. Métodos implícitos	154
7.3. Notas e referências adicionais	156
Capítulo 8 Equações Elípticas	157
8.1. Fórmula dos cinco pontos para a equação de Laplace	158
8.2. Generalizações	163
8.3. Notas e referências adicionais	170
Conclusão	172
Bibliografia – Parte II	175

Parte II

EQUAÇÕES DE
DERIVADAS PARCIAIS
Métodos de Diferenças Finitas

Introdução

Como é bem sabido, a formulação matemática de grande parte de problemas físicos envolve taxas de variação a respeito de duas ou mais variáveis independentes (usualmente representando tempo, comprimento ou ângulo) e conduz naturalmente a equações de derivadas parciais (ou sistemas de tais equações). Para além da equação diferencial, a solução do problema deverá satisfazer certas condições adicionais – as chamadas condições iniciais e/ou de fronteira. Para grande parte dos problemas não é possível encontrar uma solução analítica, ou, mesmo quando tal solução existe, a sua expressão pode ser de tal modo complicada que o cálculo dos seus valores se torna muito trabalhoso. Há assim necessidade de integrar as equações numericamente.

A grande importância dos problemas com equações de derivadas parciais motivou o aparecimento de uma série de métodos numéricos para a sua resolução. De entre estes, os chamados *métodos de diferenças finitas* são, provavelmente, dos utilizados com maior frequência. Estes métodos produzem aproximações para a solução da equação diferencial em vários pontos do seu domínio e, tal como o nome indica, baseiam-se na substituição das derivadas por fórmulas de diferenças finitas. É precisamente do estudo de alguns destes métodos que nos iremos ocupar até ao final deste curso.

Capítulo 5

Equações de Derivadas Parciais e Fórmulas de Diferenças

5.1 Curvas características e classificação das equações de 2ª ordem

No que se segue, limitar-nos-emos a considerar equações de derivadas parciais de 2ª ordem quasi-lineares, em duas variáveis independentes, isto é equações da forma

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = e, \quad (5.1)$$

onde $u(x, y)$ é uma função continuamente diferenciável até à 2ª ordem num domínio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ e a, b, c e e são funções de $x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial u}{\partial y}$, mas não de derivadas de ordem superior.

Como é sabido, quando tratamos equações diferenciais ordinárias nu-

mericamente, é usual iniciar-se a integração num certo ponto onde os valores da solução u e de algumas das suas derivadas são conhecidos. Por exemplo, para uma equação de 2ª ordem é geralmente suficiente o conhecimento de $u_0 = u(x_0)$ e $u'_0 = u'(x_0)$; derivadas de ordem superior são então obtidas da equação diferencial, por derivações sucessivas. Para uma equação de derivadas parciais, é natural pensar-se num procedimento semelhante. Neste caso, será razoável substituir o ponto de partida x_0 por uma curva *inicial* ao longo da qual sejam dados os valores de $u, \frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial u}{\partial y}$. Suponhamos então que C é uma curva regular do plano $x - y$ ao longo da qual são conhecidos os valores de $u, \frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial u}{\partial y}$ e vejamos em que condições esta informação é suficiente para determinar uma única solução da equação (5.1) em pontos “fora” de C . Por outras palavras, procuramos uma solução da equação diferencial (5.1) na vizinhança de um ponto arbitrário $P = (x, y)$ de C :

$$u(x + h, y + k) = \sum_{i,j=0}^{\infty} \frac{1}{m!n!} \left(\frac{\partial^{i+j} u}{\partial x^i \partial y^j} \right) |_P h^m k^n, \quad (5.2)$$

ou seja, pretendemos saber qual a possibilidade de determinar, de forma única, os coeficientes da expansão (5.2), usando a equação diferencial (5.1) e os valores de $u, \frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial u}{\partial y}$ sobre C .

Introduzamos as seguintes notações:

$$p := \frac{\partial u}{\partial x}; \quad q := \frac{\partial u}{\partial y}; \quad r := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}; \quad s := \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}; \quad t := \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \quad (5.3)$$

Como, no ponto P , todas as derivadas de ordem superior à segunda podem ser determinadas em termos dos valores de u, p, q, r, s e t em P por

sucessiva diferenciação da equação diferencial

$$ar + bs + ct = e, \quad (5.4)$$

segue-se que precisamos apenas de determinar r, s e t em P . Assim, o problema reduz-se ao da determinação das condições sob as quais os valores de u, p, q são suficientes para a determinação, de forma única, dos valores de r, s e t ao longo de C que satisfaçam a equação diferencial (5.4).

Suponhamos que a curva C é definida através das suas equações paramétricas

$$x = x(\tau), \quad y = y(\tau), \quad (5.5)$$

com τ denotando o comprimento de arco. Temos então,

$$\begin{aligned} \frac{dp}{d\tau} &= \frac{\partial p}{\partial x} \frac{dx}{d\tau} + \frac{\partial p}{\partial y} \frac{dy}{d\tau} \\ &= r \frac{dx}{d\tau} + s \frac{dy}{d\tau} \end{aligned} \quad (5.6)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{dq}{d\tau} &= \frac{\partial q}{\partial x} \frac{dx}{d\tau} + \frac{\partial q}{\partial y} \frac{dy}{d\tau} \\ &= s \frac{dx}{d\tau} + t \frac{dy}{d\tau}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

As equações (5.6), (5.7), juntamente com a equação (5.4), constituem um sistema para a determinação das "incógnitas" r, s, t . Este sistema terá

solução única se e só se o determinante D da matriz dos seus coeficientes

$$D = \begin{vmatrix} a & b & c \\ \frac{dx}{d\tau} & \frac{dy}{d\tau} & 0 \\ 0 & \frac{dx}{d\tau} & \frac{dy}{d\tau} \end{vmatrix} \quad (5.8)$$

for não nulo. Segue-se imediatamente que o determinante (5.8) se anula se e só se

$$a\left(\frac{dy}{d\tau}\right)^2 - b\frac{dx}{d\tau}\frac{dy}{d\tau} + c\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 = 0,$$

ou, equivalentemente, se

$$a\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - b\frac{dy}{dx} + c = 0. \quad (5.9)$$

Neste caso, não existe solução do sistema (ou seja, não é possível determinar r, s, t) a não ser que se anule cada um dos determinantes:

$$D_1 = \begin{vmatrix} b & c & e \\ \frac{dy}{d\tau} & 0 & -\frac{dp}{d\tau} \\ \frac{dx}{d\tau} & \frac{dy}{d\tau} & -\frac{dq}{d\tau} \end{vmatrix}, \quad (5.10)$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} a & c & e \\ \frac{dx}{d\tau} & 0 & -\frac{dp}{d\tau} \\ 0 & \frac{dy}{d\tau} & -\frac{dq}{d\tau} \end{vmatrix} \quad (5.11)$$

e

$$D_3 = \begin{vmatrix} a & b & e \\ \frac{dx}{d\tau} & \frac{dy}{d\tau} & -\frac{dp}{d\tau} \\ 0 & \frac{dx}{d\tau} & -\frac{dq}{d\tau} \end{vmatrix}. \quad (5.12)$$

Na realidade, facilmente se prova que quando D é nulo, se algum dos determinantes D_1, D_2, D_3 se anula, os outros determinantes também se anulam. Em particular, $D_2 = 0$ conduz à seguinte equação:

$$a \frac{dy}{dx} dp + cdq + edy = 0. \quad (5.13)$$

A equação (5.9) determina duas direcções $\frac{dy}{dx}$, as quais definem, por integração, duas curvas (ou mais propriamente duas famílias de curvas) chamadas *curvas características*. Mais precisamente, três casos distintos se podem dar:

- Se $b^2 - 4ac > 0$, a equação tem duas raízes *reais distintas*

$$\frac{dy}{dx} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (5.14)$$

ou seja, existem de facto, duas curvas características que passam no ponto $P = (x, y)$. Neste caso a equação diz-se *hiperbólica*.

- Se $b^2 - 4ac = 0$, a equação tem uma e uma só raiz real. Há portanto uma única curva característica passando por P . Neste caso a equação diferencial é dita *parabólica*.
- Se $b^2 - 4ac < 0$, não existem curvas características. Neste caso, a equação diferencial chama-se *elíptica*.

Convém salientar que uma equação diferencial pode, por exemplo, ser elíptica num certo domínio, sendo hiperbólica noutro, ou seja, que o tipo

da equação diferencial pode variar no conjunto de pontos onde ela está definida.

Vemos assim que, quando a equação é hiperbólica num certo domínio, em cada ponto desse domínio existem duas direcções – as direcções das curvas características – dadas pelas soluções da equação (5.9), ao longo das quais os valores de u, p, q terão de satisfazer a equação (5.13), não podendo portanto ser dados arbitrariamente. Na prática, a relação entre as diferenciais de p e q expressa pela equação (5.13) pode ser utilizada para integrar numericamente a equação diferencial – trata-se do chamado *método das características*. Este é um método bastante adequado para resolver este tipo de equações, mas, por limitações de tempo, não o estudaremos neste curso. O aluno interessado poderá ver pormenores sobre este assunto em [29, pp 164 e segs] ou [15, pp 212 e segs].

Como exemplos de cada um dos tipos de equações atrás referidos, temos:

(i) *A Equação de Laplace*

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (5.15)$$

bem como a *Equação de Poisson*

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + g(x, y) = 0 \quad (5.16)$$

são equações elípticas.

(ii) *A Equação de Difusão (ou do Calor)*

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (5.17)$$

é parabólica.

(iii) *A Equação das Ondas*

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (5.18)$$

é hiperbólica.

De facto, nos capítulos seguintes, limitar-nos-emos ao estudo de métodos de diferenças aplicados às equações particulares (5.15)–(5.18) acima.

5.2 Condições iniciais e condições de fronteira

A cada equação de derivadas parciais devemos sempre juntar condições adicionais apropriadas, chamadas *condições iniciais* e/ou *condições de fronteira*, que servem para completar a formulação matemática de um problema “com significado”. Para que o problema resultante seja o que se chama um problema *bem posto*, isto é, um problema que possui uma única solução limitada que depende de forma contínua dos dados (ou seja, tal que uma “pequena” variação nos dados produz uma “pequena” variação na solução) as condições adicionais têm de ser escolhidas adequadamente. De facto, o tipo de equação (elíptica, parabólica ou hiperbólica) condiciona a forma das

equações adicionais, estando estas relacionadas com o domínio Ω no qual se pretende a solução do problema em causa.

A seguinte descrição dá as características típicas das condições e domínios associados a cada um dos três tipos de equações referidos.

- No caso de uma equação diferencial elíptica, a sua solução é pretendida no interior de uma região fechada e limitada Ω , sendo a solução u ou a sua derivada normal $\frac{\partial u}{\partial n}$ (ou uma combinação linear de ambas) especificadas na fronteira de Ω , $\partial\Omega$ (ver Fig. 5.1). Trata-se de um *problema de valores de fronteira*.

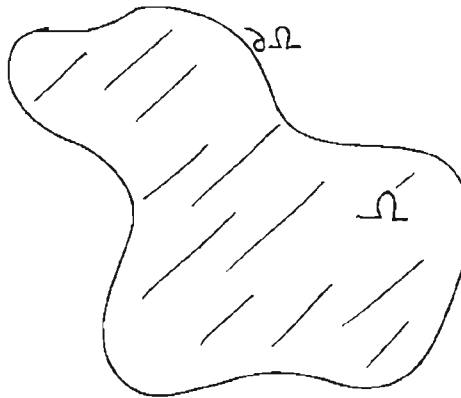


Fig. 5.1

- No caso de uma equação parabólica, o domínio Ω onde se pretende a solução é, em geral, o semi-plano

$$\Omega = \{(x, y) : y \geq 0, -\infty < x < +\infty\}, \quad (5.19)$$

ou uma semi-faixa

$$\Omega = \{(x, y) : y \geq 0, a \leq x \leq b\} \quad (5.20)$$

(ver Fig. 5.2).

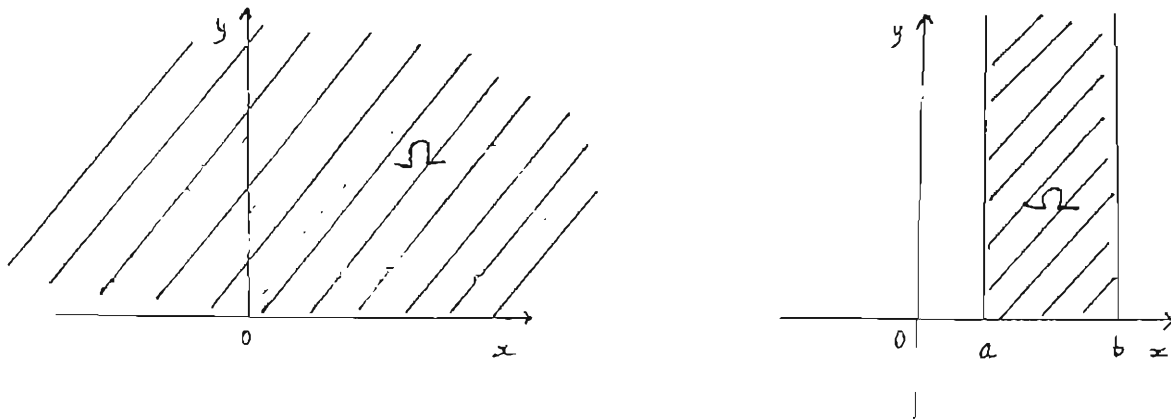


Fig. 5.2

No primeiro caso são dados os valores de u ao longo da recta $y = 0$, isto é, é dada a *condição inicial*

$$u(x, 0) = f(x), \quad -\infty < x < +\infty.$$

Em geral, neste tipo de problemas, a variável y representa o tempo, correspondendo portanto a condição anterior a especificar u no *instante inicial* $y = 0$. Trata-se de um *problema de valores iniciais*.

No segundo caso, é dada a *condição inicial*

$$u(x, 0) = f(x), \quad a \leq x \leq b,$$

juntamente com as *condições de fronteira*

$$u(a, y) = \alpha(y)$$

$$u(b, y) = \beta(y), \quad y \geq 0.$$

Trata-se de um *problema de valores iniciais e de fronteira*.

- No caso de uma equação hiperbólica, temos os mesmos domínios semi-infinitos (5.19) ou (5.20). Quando Ω é o semi-plano (5.19) são dadas as condições iniciais

$$u(x, 0) = f(x),$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x, 0) = g(x), \quad -\infty < x < +\infty.$$

Quando Ω é a faixa (5.20), são dadas condições iniciais do tipo das anteriores, mas há necessidade de se especificarem também condições de fronteira, por exemplo, do tipo

$$u(a, y) = \alpha(y), \quad u(b, y) = \beta(y), \quad y > 0.$$

5.3 Fórmulas de diferenças finitas

Como já referimos, a essência dos métodos de diferenças finitas é a substituição das derivadas envolvidas em (5.1) por aproximações dadas por

fórmulas de diferenças finitas. Vamos deduzir agora algumas dessas fórmulas para funções de duas variáveis.

Seja u uma função de duas variáveis independentes x e y . Subdividamos o plano XOY em rectângulos iguais de lados h e k , paralelos aos eixos coordenados OX e OY , respectivamente (ver Fig. 5.3). Seja P um ponto genérico desta rede (i.e., um vértice de um dos rectângulos) de coordenadas

$$x_i = ih \quad \text{e} \quad y_j = jk,$$

com i e j inteiros.

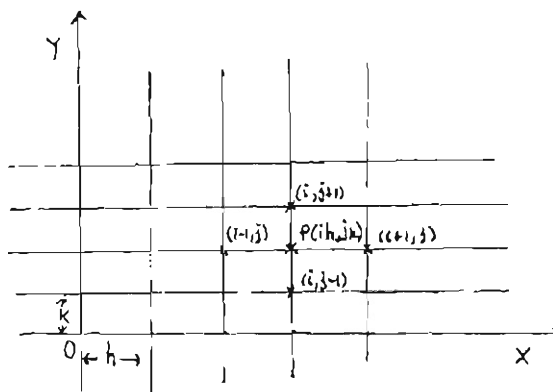


Fig. 5.3

Denotemos o valor de u em P por

$$u_{i,j} := u(ih, jk).$$

Então, se u é suficientemente diferenciável, as seguintes expressões obtêm-se facilmente por expansão em série de Taylor em torno do ponto (x_i, y_j) .

5.4 Notas e referências adicionais

- A derivação das equações (5.15)–(5.18) pode ser vista, por exemplo, nos livros clássicos de Courant e Hilbert [7] e de Garabedian [17].
- Para mais pormenores sobre o papel desempenhado pelas curvas características nas equações de derivadas parciais veja, por exemplo, Weinberger [34] ou Ames [1].

Capítulo 6

Equações Parabólicas

A descrição matemática de problemas de difusão ou de condução de calor, dependentes do tempo, conduz a uma equação parabólica cuja solução é uma função das variáveis espaciais e do tempo. No que se segue trataremos apenas do caso uni-dimensional, isto é, do caso em que a solução $u(x, t)$ da equação diferencial é apenas função de uma variável espacial e do tempo. Mais precisamente, consideremos a seguinte equação parabólica

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \sigma > 0, \quad (6.1)$$

sujeita às condições iniciais e de fronteira

$$u(x, 0) = \phi_0(x), \quad 0 < x < 1, \quad (6.2)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (6.3)$$

A solução desta equação dá-nos, por exemplo, a temperatura u num ponto situado a uma distância x de uma das extremidades de uma barra muito fina, termicamente isolada, ao fim de t unidades de tempo de condução

de calor; neste caso, a barra tem comprimento unitário e a temperatura nas suas extremidades é suposta nula em qualquer instante t ; além disso, no instante inicial $t = 0$, é conhecida a distribuição da temperatura $\phi_0(x)$ ao longo da barra. A constante σ tem a ver com o material de que a barra é feita; para a dedução desta equação veja, por exemplo, [25, pp 236-237].

Pretende encontrar-se uma solução de equação (6.1), na região $\Omega = (0, 1) \times (0, +\infty)$ e que satisfaça as condições iniciais e de fronteira (6.2), (6.3).

A região $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ é coberta por uma rede $\Omega_{h,k}$ de malha rectangular de dimensões h e k , nas direcções de x e t , respectivamente. Os métodos de diferenças finitas vão fornecer aproximações para a solução u nos nós dessa rede, isto é, nos vértices dos rectângulos.

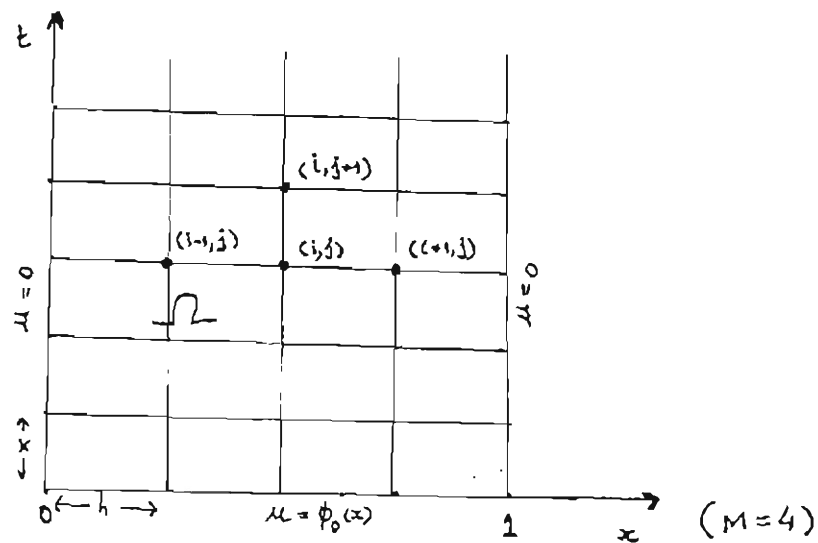


Fig. 6.1

•

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_P &= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u(x_i + \xi_i h, y_j) \\
&= \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + O(h^2), \quad (5.21)
\end{aligned}$$

onde $\xi_i \in (-1, 1)$.

•

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_P &= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} - \frac{k^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial y^4} u(x_i, y_j + \nu_j k) \\
&= \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} + O(k^2). \quad (5.22)
\end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_P &= \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - \frac{k}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} u(x_i, y_j + \mu_j k) \\
&= \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} + O(k), \quad (5.23)
\end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_P &= \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2k} - \frac{k^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial y^3} u(x_i + \mu_j k) \\
&= \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} + O(k^2) \quad (5.24)
\end{aligned}$$

Fórmulas de diferenças mais precisas para a aproximação das derivadas podem obter-se facilmente, utilizando os operadores usuais de diferenças Δ, ∇, δ e as suas relações com o operador diferencial D ; para mais pormenores, veja, por exemplo, [15] e [20] e [5].

6.1 Método explícito simples

Segue-se imediatamente de (5.6), (5.7) e da equação (6.1) que, em cada ponto $P = (ih, jk)$; $i = 1, \dots, M-1$, onde M é tal que $Mh = 1$; $j = 0, 1, 2, \dots$, se tem

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \sigma \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \right) + \tau_{i,j}; \quad i = 1, \dots, M-1, \\ j = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.4)$$

onde

$$\tau_{i,j} = \frac{k}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x_i, t_j + \nu_j k) - \sigma \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u(x_i + \xi_i, t_j) \\ = O(k + h^2). \quad (6.5)$$

Aproximações $U_{i,j}$ para $u_{i,j}$ podem obter-se ignorando os termos $O(k + h^2)$ em (6.4), isto é, de

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} = \sigma \left(\frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} \right); \quad i = 1, \dots, M-1, \\ j = 0, 1, 2, \dots \quad (6.6)$$

Fazendo

$$r := \sigma \frac{k}{h^2}, \quad (6.7)$$

a equações (6.6) podem ser reescritas como

$$U_{i,j+1} = rU_{i+1,j} + (1 - 2r)U_{i,j} + rU_{i-1,j}; \quad i = 1, \dots, M-1, \\ j = 0, 1, 2, \dots \quad (6.8)$$

A condição inicial (6.2) dá-nos os valores $U_{i,0} = \phi_0(ih); i = 1, \dots, M - 1$ e as condições de fronteira (6.3) dão-nos $U_{0,j} = U_{M,j} = 0; j = 0, 1, 2, \dots$. Os valores $U_{i,1}$ podem então ser calculados através de (6.8), usando os valores $U_{i,0}$ conhecidos; em seguida, os valores $U_{i,1}$ podem ser usados para calcular os valores $U_{i,2}$, e assim sucessivamente.

A fórmula (6.8) exprime um valor desconhecido explicitamente em termos de valores conhecidos. Por essa razão, o método definido por (6.8) diz-se um método *explícito*.

O valor de $r := \sigma \frac{k}{h^2}$ é bastante importante; de facto, como veremos mais adiante, só podemos garantir a “validade” deste método, se $0 < r \leq \frac{1}{2}$, ou seja, se $k \leq \frac{1}{2\sigma} h^2$. Para se obter uma precisão razoável, o valor de h deve ser pequeno o que, por sua vez, exige um valor de k bastante pequeno. Isto implica uma muito grande quantidade de cálculos para se progredir com a solução ao longo de t .

6.2 Método de Crank-Nicolson

Crank e Nicolson [8] propuseram um método que reduz o volume total de cálculos e que é válido para qualquer valor de r . Neste método, a derivada $(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})_{i,j}$ é substituída pela média das suas aproximações de diferenças centrais nas linhas $(j + 1)$ e j , isto é, a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

é aproximada, no ponto $P = (ih, jk)$ por

$$\begin{aligned} \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} &= \frac{\sigma}{2} \left\{ \frac{U_{i+1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i-1,j+1}}{h^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} \right\}; \\ i &= 1, 2, \dots, M-1; \quad j = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

As equações anteriores podem ser reescritas como

$$\begin{aligned} -rU_{i-1,j+1} + (2+2r)U_{i,j+1} - rU_{i+1,j+1} \\ = rU_{i-1,j} + (2-2r)U_{i,j} - rU_{i+1,j}; \\ i = 1, 2, \dots, M-1, \quad j = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (6.9)$$

onde

$$r = \sigma \frac{k}{h^2}. \quad (6.10)$$

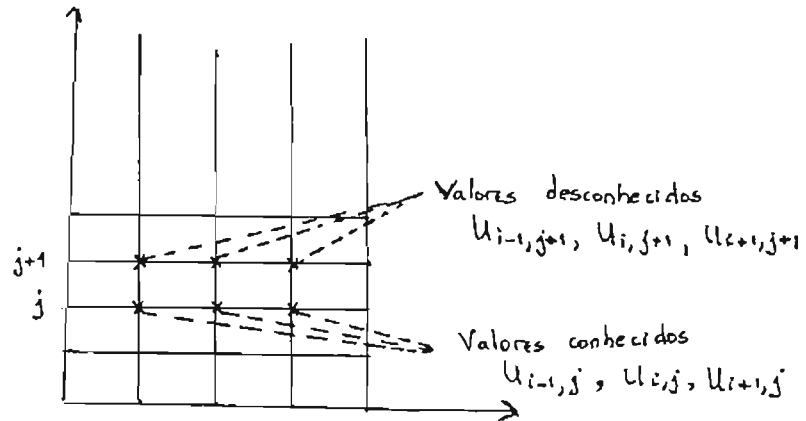


Fig. 6.2

Trata-se de um método *implícito*, pois em vez de nos dar explicitamente cada um dos valores de U nos pontos da nova linha de tempo $j+1$, apenas

nos dá uma relação entre esses valores; assim, contrariamente ao método explícito, não é possível determinar cada valor $U_{i,j+1}$ isoladamente. Em vez disso, é formado o sistema de $M - 1$ equações dadas por (6.9), o qual, uma vez que $U_{0,j+1} = U_{M,j+1} = 0$, pode ser escrito na seguinte forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1+r & -r/2 & & \dots & 0 \\ -r/2 & 1+r & -r/2 & \dots & 0 \\ & & \dots & & \\ 0 & \dots & -r/2 & 1+r & -r/2 \\ 0 & \dots & & -r/2 & 1+r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1,j+1} \\ U_{2,j+1} \\ \vdots \\ U_{M-2,j+1} \\ U_{M-1,j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-r & r/2 & & \dots & 0 \\ r/2 & 1-r & r/2 & \dots & 0 \\ & & \dots & & \\ 0 & \dots & r/2 & 1-r & r/2 \\ 0 & \dots & & r/2 & 1-r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1,j} \\ U_{2,j} \\ \vdots \\ U_{M-2,j} \\ U_{M-1,j} \end{pmatrix}, \quad (6.11)$$

ou, abreviadamente, como

$$A_1 U_{j+1} = A_2 U_j, \quad (6.12)$$

com notação óbvia.

Para determinar a solução (de diferenças) no nível $(j+1)$ da rede, isto é, para calcular $(U_{1,j+1}, \dots, U_{M-1,j+1})^T$, torna-se necessário resolver o sistema (6.11). Trata-se de um sistema cuja matriz de coeficientes é tridiagonal. Como a matriz A_1 é sempre a mesma para cada nível da rede, é conveniente efectuar a decomposição LU de A_1 e resolver os diversos sistemas

por substituição directa e inversa. Note-se que A_1 é uma matriz estritamente de diagonal dominante por colunas, pelo que não há necessidade de efectuar escolha de pivot na sua decomposição LU.

O método definido por (6.9) é um caso particular de uma classe de métodos definidos por

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} = \frac{\sigma}{h^2} \{ \theta \delta^2 U_{i,j+1} + (1 - \theta) \delta^2 U_{i,j} \}; \quad 0 \leq \theta \leq 1, \\ i = 1, \dots, M - 1; \quad j = 1, 2, \dots \quad (6.13)$$

Para $\theta = 1/2$, obtem-se o método de Crank-Nicolson, enquanto $\theta = 1$ corresponde ao método explícito. A escolha de $\theta = 0$ dá-nos um método *totalmente implícito*.

6.3 Consistência, estabilidade, convergência

Nesta secção debruçar-nos-emos sobre as condições que devem ser satisfeitas para que um método de diferenças produza uma aproximação razoável para a solução da equação diferencial correspondente. Estas condições estão associadas com dois problemas diferentes, mas relacionados. O primeiro diz respeito à *convergência* da solução exacta das equações de diferenças para a solução exacta da equação diferencial; o segundo diz respeito à *estabilidade* das equações de diferenças, ou seja, ao crescimento ilimitado ou não de quaisquer erros associados com a resolução destas equações.

Consideremos novamente a equação diferencial (6.1) que reescrevemos

na forma

$$Lu = 0, \quad (6.14)$$

com L o operador diferencial

$$L := \frac{\partial}{\partial t} - \sigma \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (6.15)$$

Em cada ponto $P = (x, t) = (ih, jk)$, ter-se-á

$$[Lu]_{i,j} = 0. \quad (6.16)$$

Como vimos, os métodos de diferenças finitas são baseados na substituição das derivadas envolvidas em (6.16) por fórmulas de diferenças finitas do tipo (5.2)-(5.5). Por outras palavras, a equação (6.16) é substituída por uma equação de diferenças

$$F(u_{i,j}) = \tau_{i,j}, \quad (6.17)$$

obtendo-se uma solução aproximada $U_{i,j}$ para $u_{i,j}$ ignorando os erros $\tau_{i,j}$, i.e., resolvendo

$$F(U_{i,j}) = 0. \quad (6.18)$$

Por exemplo, no caso do método explícito simples,

$$F(u_{i,j}) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - \sigma \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2}$$

e

$$\tau_{i,j} = \frac{k}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x_i, t_j + \nu_j k) - \sigma \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u(x_i + \xi_i h, t_j).$$

- Ao valor $\tau_{i,j} = F(u_{i,j})$ chamamos *erro de truncatura local* no ponto $(x, t) = (ih, jk)$. Se $\tau_{i,j} \rightarrow 0$ quando $h, k \rightarrow 0$, o método de diferenças diz-se *consistente* com a equação diferencial. Por outras palavras, a consistência de uma fórmula de diferenças com uma equação diferencial tem a ver com quanto a fórmula de diferenças se “aproxima” da equação diferencial quando a rede é tornada cada vez mais fina.

Exercício 6.3.1 (*Método de Douglas*) Mostre que o erro de truncatura local do método explícito simples para aproximar a solução da equação parabólica (6.1) é $O(k^2 + h^4)$ se $r := \frac{\sigma k}{h^2} = \frac{1}{6}$. Comente sobre a aplicabilidade prática deste método.

Exercício 6.3.2 Mostre que o erro de truncatura local do método definido pelas equações (6.13) é dado por:

$$\tau_{i,j} = \sigma \left[\sigma \left(\frac{1}{2} - \theta \right) k - \frac{h^2}{12} \right] \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{i,j} + O(k^2 + h^4), \quad (6.19)$$

ou seja, em geral, $\tau_{i,j} = O(k + h^2)$. Em particular, para $\theta = \frac{1}{2}$ (método de Crank-Nicolson) tem-se $\tau_{i,j} = O(k^2 + h^2)$ enquanto a escolha de

$$\theta = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\sigma k} \quad (6.20)$$

nos dá um método com erro de truncatura local $O(k^2 + h^4)$.

- Ao valor $e_{i,j} = u_{i,j} - U_{i,j}$, isto é, à diferença entre a solução *exacta* da equação diferencial no ponto $(x, t) = (ih, jk)$ e a solução *exacta* da equação

de diferenças (6.18) nesse ponto, chamamos *erro de discretização local* no ponto (x, t) . Se $e_{i,j} \rightarrow 0$ quando $h, k \rightarrow 0$ (e $i, j \rightarrow \infty$, de modo que $ih = x, jk = t$, permaneçam fixos) dizemos que o método de diferenças *converge* no ponto (x, t) .

Segue-se imediatamente de (6.17) e (6.18) que

$$F(e_{i,j}) = \tau_{i,j}. \quad (6.21)$$

Tal resultado poderá levar-nos a pensar que a consistência de uma fórmula de diferenças implicará a sua convergência. No entanto, tal não se verifica. Na realidade, as equações de diferenças não são resolvidas exactamente, sendo a sua solução afectada de erros inevitáveis (por exemplo, fruto da representação no computador, dos seus coeficientes). Há assim necessidade de se considerar a *estabilidade* da fórmula de diferenças, i.e., saber se ao resolver estas equações, a introdução de um pequeno erro poderá ou não afectar de forma significativa a solução obtida. Para ilustrar a importância da estabilidade, atente-se no seguinte:

Exemplo 6.3.1 (*D. Quinney [27, pp 168-170]*) Considere-se a equação diferencial parabólica

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

sujeita às seguintes condições iniciais e de fronteira

$$u(0, t) = u(1, t) = 0$$

$$u(x, 0) = \sin \pi x.$$

Utilizando o método explícito com:

(i) $h = 0.1$ e $k = 0.005$,

(ii) $h = 0.05$ e $k = 0.0025$,

obtiveram-se os resultados apresentados na Tabela 6.1, dos quais alguns são também representados graficamente na Fig.6.3. Nesta, a solução exata é representada pela curva, sendo os valores da solução obtida em (i) denotados por + e os resultados correspondentes a (ii) representados por •

x	t=0.02			t=0.04			t=0.06		
	(a)	(b)	(c)	(a)	(b)	(c)	(a)	(b)	(c)
0.00	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.05	0.128412		0.128149	0.105409		0.104999	0.086527		0.166357
0.10	0.253662	0.252818	0.253140	0.208224	0.206839	0.207328	0.170924	0.169223	0.026516
0.15	0.372667		0.371899	0.305910		0.304698	0.251112		0.420760
0.20	0.482495	0.480888	0.481501	0.396065	0.393432	0.394391	0.325117	0.321880	0.179793
0.25	0.580442		0.579247	0.476467		0.474546	0.391116		0.421332
0.30	0.664097	0.661886	0.662730	0.545136	0.541512	0.542865	0.447485	0.443030	0.640548
0.35	0.731399		0.729894	0.600383		0.597918	0.492836		-0.088526
0.40	0.780693	0.778093	0.779086	0.640846	0.636586	0.638370	0.526051	0.520814	-1.658603
0.45	0.810762		0.809094	0.665530		0.662610	0.546312		-1.307606
0.50	0.820869	0.818136	0.819179	0.673825	0.669346	0.671428	0.553122	0.547616	-2.197644
0.55	0.810762		0.809094	0.665530		0.662610	0.546312		-2.853685
0.60	0.780693	0.778093	0.779086	0.640846	0.636586	0.638370	0.526051	0.520814	-4.459284
0.65	0.731399		0.729894	0.600383		0.597918	0.492836		-3.639206
0.70	0.664097	0.661886	0.662730	0.545136	0.541512	0.542865	0.447485	0.443030	-4.356571
0.75	0.580442		0.579247	0.476467		0.474546	0.391116		-2.941717
0.80	0.482495	0.480888	0.481501	0.396065	0.393432	0.394804	0.325117	0.321880	-2.850369
0.85	0.372667		0.371899	0.305910		0.304552	0.251112		-1.438382
0.90	0.253662	0.252818	0.253140	0.208224	0.206839	0.207309	0.170924	0.169223	-1.135697
0.95	0.128412		0.128148	0.105409		0.105053	0.086527		-0.334337
1.00	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

- (a) Valores da solução exata $\exp(-\pi^2 t) \sin \pi x$.
 (b) Solução de diferenças com $h=0.1$, $k=0.005$.
 (c) Solução de diferenças com $h=0.05$, $k=0.0025$.

Tabela 6.1

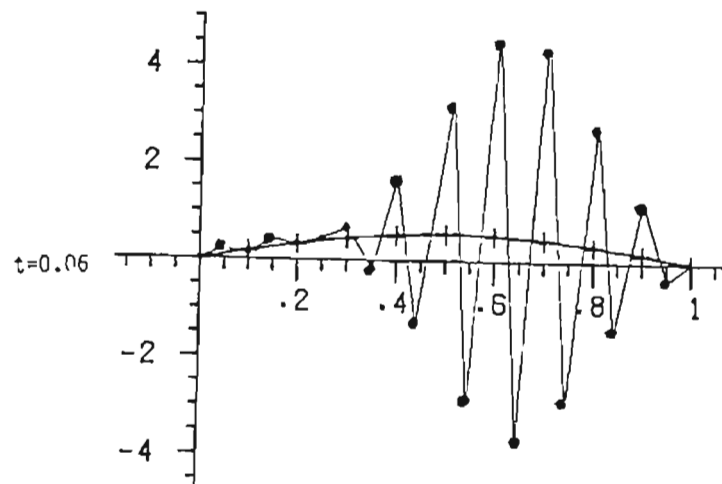
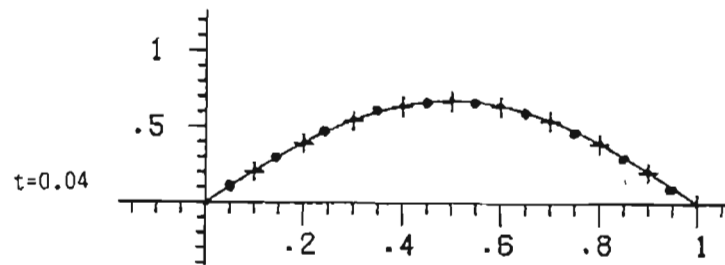
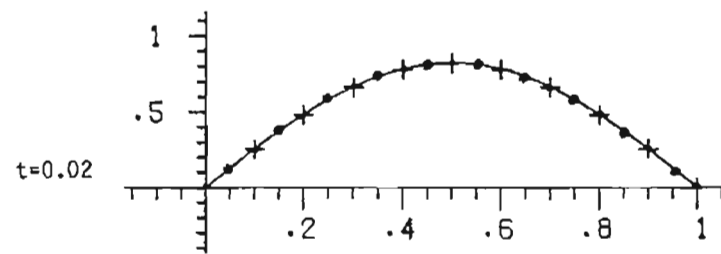


Fig.6.3

Para $h = 0.1$ e $k = 0.005$ a solução calculada concorda bastante bem com a solução exacta. Contudo, quando os passos h e k são divididos por dois (caso (ii)), produz-se uma solução de diferenças que cresce rapidamente e oscila, sendo claramente instável.

- Se $U_{i,j}$ representa a solução exacta da equação de diferenças e $V_{i,j}$ a solução realmente calculada, à diferença

$$R_{i,j} = U_{i,j} - V_{i,j} \quad (6.22)$$

chamamos *erro de arredondamento global* no ponto $(x, t) = (ih, jk)$.¹

- O *erro total* $E_{i,j}$ no ponto $(x, t) = (ih, jk)$ é dado por

$$\begin{aligned} E_{i,j} = u_{i,j} - V_{i,j} &= u_{i,j} - U_{i,j} + U_{i,j} - V_{i,j} \\ &= \text{Erro discretização} + \text{Erro arred. global} . \end{aligned} \quad (6.23)$$

Assumindo, de momento, que o erro de discretização pode ser controlado, poderá parecer razoável dizer que as equações de diferenças serão estáveis se existir um limite para o aumento do erro de arredondamento global $R_{i,j}$ quando j tende para infinito, isto é, se o crescimento de $R_{i,j}$ é limitado para todo i quando j tende para infinito. No entanto, tal não é possível, porque o erro de arredondamento global depende não apenas das equações de diferenças em si, mas também da forma como cada computador

¹Chama-se erro de arredondamento "global" por se tratar do erro acumulado até se atingir o nível j da rede.

particular faz o arredondamento dos números e efectua as operações aritméticas. A forma mais usual de estudar a estabilidade é através da análise da *propagação* dos erros iniciais, quando j tende para infinito, mantendo-se h e k constantes. Mais precisamente, diremos que o método de diferenças é *estável* se uma perturbação limitada dos dados iniciais não "crescer" de forma ilimitada, quando j tende para infinito (mantendo-se os passos h e k constantes). Existem dois processos usuais de investigar a estabilidade (assim definida) de um método de diferenças: o chamado *método de Neumann* ou *método de Fourier* e um *método de análise matricial*. Por limitações de tempo, estudaremos aqui apenas o método matricial. Mais precisamente, ilustraremos a sua aplicação considerando o método explícito definido pelas equações (6.8) para aproximar a solução do problema (6.1)-(6.3). A descrição do método de Neumann pode ser vista, por exemplo, em [29, pp 92-95] ou [27, p.174].

Estabilidade do método explícito

As equações (6.8) aproximando a equação diferencial (6.1) podem escrever-se matricialmente na forma

$$\begin{pmatrix} U_{1,j+1} \\ U_{2,j+1} \\ \vdots \\ U_{M-1,j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-2r & r & & 0 \\ r & 1-2r & r & \\ & & \ddots & \\ 0 & & r & 1-2r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1,j} \\ U_{2,j} \\ \vdots \\ U_{M-1,j} \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

(Note-se que as condições de fronteira (6.3) garantem que $U_{0,j} = U_{M,j} = 0$). Seja A a matriz tridiagonal no lado direito de (6.24) e sejam $U_l = [U_{1,l}, \dots, U_{M-1,l}]^T$; $l = j, j+1$. Então, a equação (6.24) escrever-se-á abreviadamente como

$$U_{j+1} = AU_j. \quad (6.25)$$

Assim, temos

$$U_{j+1} = AU_j = A^2U_{j-1} = A^{j+1}U_0, \quad (6.26)$$

onde U_0 é o vector dos valores iniciais. Suponhamos que foi introduzido um erro ϵ_0 em U_0 ; então, o erro ϵ_1 em U_1 será $A(U_0 + \epsilon_0) - AU_0 = A\epsilon_0$. O erro em U_2 será $A^2\epsilon_0$ etc, de modo que o erro ϵ_{j+1} em U_{j+1} será $A^{j+1}\epsilon_0$, ou seja

$$\epsilon_{j+1} = A^{j+1}\epsilon_0, \quad (6.27)$$

o que mostra que a fórmula para a propagação dos erros é a mesma do que para o cálculo de U_j . O método será estável se ϵ_j se mantiver limitado quando $j \rightarrow \infty$. Segue-se imediatamente de (6.27) que uma condição para que tal se verifique é que

$$\|A\| \leq 1.$$

Mas, como sabemos, $\|A\|_2 = \rho(A)$ (porque $A = A^T$). Logo, uma condição para a estabilidade do método é que os valores próprios de A tenham módulo

não superior a 1. Como vimos – Ex. 9 das aulas práticas – os valores próprios de uma matriz tridiagonal de ordem n da forma

$$\begin{pmatrix} b & c & & & \\ a & b & c & & \\ & a & b & c & \\ & & & \ddots & \\ & & & a & b & c \\ & & & & a & b \end{pmatrix} \quad (6.28)$$

são dados por

$$\lambda_j = b + 2\{\sqrt{ac}\} \cos \frac{(j\pi)}{(n+1)} ; \quad j = 1, \dots, n. \quad (6.29)$$

Então, os valores próprios da matriz de ordem $M-1$ do sistema (6.24) são

$$\begin{aligned} \lambda_j &= 1 - 2r(1 - \cos \frac{j\pi}{M}) \\ &= 1 - 4r \sin^2(\frac{j\pi}{2M}); j = 1, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Assim, a condição de estabilidade do método explícito será

$$|1 - 4r \sin^2(\frac{j\pi}{2M})| \leq 1. \quad (6.31)$$

Como $4r \sin^2(\frac{j\pi}{2M}) \geq 0$, segue-se que a condição (6.31) será satisfeita desde que

$$1 - 4r \sin^2(\frac{j\pi}{2M}) \geq -1,$$

ou seja, desde que

$$r \sin^2(\frac{j\pi}{2M}) \leq \frac{1}{2}. \quad (6.32)$$

Como $\sin^2(\frac{j\pi}{2M}) \leq 1$, conclui-se que o método será estável se

$$0 < r \leq \frac{1}{2}. \quad (6.33)$$

Exercício 6.3.3

- Mostre que a condição de estabilidade do método definido pelas equações (6.13) é

$$r := \frac{\sigma k}{h^2} \leq \frac{1}{(2 - 4\theta)}, \quad (6.34)$$

para valores de θ tais que $0 \leq \theta < \frac{1}{2}$ e que este método é *incondicionalmente estável* para $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$. (Em particular, isto mostra que o método de Crank-Nicolson é estável para quaisquer valores de r).

- Prove que a escolha de $\theta = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\sigma k}$ (a que corresponde, como vimos no Exercício 6.3.2, um método com erro de truncatura local $O(k^2 + h^4)$) conduz a um método estável.

Convergência do método explícito

Na análise precedente da estabilidade, considerámos o passo k como constante quando j tende para infinito, que é de facto o que acontece na prática. Para relacionar *estabilidade* com *convergência* torna-se necessário, no entanto, formular um conceito de estabilidade que seja *independente dos*

passos h e k . Mais precisamente, é necessário considerar $t = jk$ um número fixo finito e definir um esquema de diferenças como *estável* quando existir um crescimento limitado de qualquer forma de erro, quando j tende para infinito (e k tende para zero por forma que $t = jk$ permaneça constante). Uma discussão completa deste conceito de estabilidade está fora dos objectivos deste curso. O aluno mais interessado poderá consultar o livro de Isaacson e Keller [21, pp 514-529] ou o livro de Richtmyer e Morton [28, pp 60-90]. Em particular, é aí discutido o chamado *Teorema da equivalência de Lax*, o qual afirma que “*Dado um problema de valores iniciais bem posto e um esquema de diferenças finitas que seja consistente com ele, a estabilidade (no sentido acima definido) é condição necessária e suficiente de convergência.*” .

Para ilustrar (parcialmente) o Teorema da equivalência de Lax, vamos mostrar que, se admitirmos que a condição (6.33) se verifica quando h, k tendem para zero – a qual se prova ser a condição de estabilidade (neste novo sentido) do método explícito – então o método será também convergente.

Reescrevamos as equações (6.4) como

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + r(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}) + k\tau_{i,j}, \quad r = \frac{\sigma k}{h^2},$$

onde

$$\tau_{i,j} = \frac{k}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(ih, jk + \nu_j k) - \sigma \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} u(ih + \xi_i h, jk),$$

e as equações de diferenças como

$$U_{i,j+1} = U_{i,j} + r(U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}).$$

Temos então,

$$e_{i,j+1} = e_{i,j} + r(e_{i-1,j} - 2e_{i,j} + e_{i,j+1}) + k\tau_{i,j}. \quad (6.35)$$

Sejam $E_j = \max_i |e_{i,j}|$ e $E = \sup_{i,j} |\tau_{i,j}|$. Então, tem-se

$$\begin{aligned} |e_{i,j+1}| &\leq r|e_{i+1,j}| + |1 - 2r||e_{i,j}| + r|e_{i-1,j}| + kE \\ &\leq rE_j + |1 - 2r|E_j + rE_j + kE, \end{aligned}$$

o que, uma vez que $r \leq 1/2$ implica que

$$|e_{i,j+1}| \leq E_j + kE.$$

Aplicando este resultado repetidamente vem

$$\begin{aligned} E_j &\leq E_{j-1} + kE \leq E_{j-2} + 2kE \leq \dots \leq E_0 + jkE \\ &= E_0 + tE. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Como, para $t = 0, U = u$, segue-se que $E_0 = 0$. Além disso, como t é finito e o método é consistente, $tE \rightarrow 0$ quando $h, k \rightarrow 0$, ou seja, o método converge.

6.4 Generalizações

Os métodos de diferenças até aqui apresentados destinaram-se a obter soluções para a equação diferencial

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (6.37)$$

sujeita a condições iniciais e de fronteira da forma

$$u(x, 0) = \phi_0(x), 0 \leq x \leq 1, \quad u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t > 0,$$

e onde σ é uma constante. Vejamos agora como a aplicação de tais métodos se estende facilmente para problemas mais gerais.

Condições de fronteira envolvendo derivadas

Começemos por considerar a equação (6.37), com a mesma condição inicial, mas sujeita agora às seguintes condições de fronteira :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + p(t)u = q(t) \quad \text{para } x = 0, \quad (6.38)$$

$$u(1, t) = s(t), \quad t > 0. \quad (6.39)$$

Suponhamos que se pretende utilizar o método explícito simples. A condição inicial dá-nos os valores $U_{i,0}$; $i = 0, \dots, M$, e a condição de fronteira (6.39), os valores de $U_{M,j} = s(jk)$; $j = 1, 2, \dots$. Os valores de $U_{0,j}$ não são agora conhecidos, mas poderemos servir-nos da condição de fronteira (6.38) para os determinar. Por exemplo, poderemos aproximar (6.38) por

$$\frac{U_{1,j} - U_{0,j}}{h} + p(jk)U_{0,1} = q(jk)$$

obtendo assim uma equação suplementar para a determinação de $U_{0,j}$.

Note-se que $\frac{u_{1,j} - u_{0,j}}{h}$ é apenas uma aproximação $O(h)$ para $\frac{\partial u}{\partial x}$. Se pretendermos representar $\frac{\partial u}{\partial x}$ por uma fórmula mais precisa, envolvendo diferenças centrais, torna-se necessário introduzir um ponto "fictício" $(-h, jk)$,

isto é, imaginar que a barra para a qual estudamos a distribuição de temperaturas se estende ligeiramente para a esquerda. Mais precisamente, neste caso, a condição de fronteira (6.38) é representada por

$$\frac{U_{1,j} - U_{-1,j}}{2h} + p(jk)U_{0,j} = q(jk),$$

ou seja, por

$$U_{-1,j} = U_{1,j} - 2h[q(jk) - p(jk)U_{0,j}]. \quad (6.40)$$

A “temperatura” $U_{-1,j}$ é desconhecida, sendo necessária outra equação para a sua determinação. Esta é obtida assumindo que a equação diferencial (6.37) é satisfeita no extremo da barra, isto é, que a fórmula de diferenças (6.8) se utiliza também para $i = 1$, ou seja, que

$$U_{0,j+1} = rU_{1,j} + (1 - 2r)U_{0,j} + rU_{-1,j}. \quad (6.41)$$

Eliminando $U_{-1,j}$ de (6.40) e (6.41) obtemos então

$$U_{0,j+1} = (1 - 2r + 2rhp(jk))U_{0,j} + 2rU_{1,j} - 2rhq(jk). \quad (6.42)$$

Exercício 6.4.1 Mostre que se $r \leq \frac{1}{2}$ e $p(x) < 0$, $0 \leq x \leq 1$, então o método que acabámos de descrever é estável. (Sugestão: Reescreva as M equações para a determinação de $U_{0,j+1}, U_{1,j+1}, \dots, U_{M-1,j+1}$ na forma matricial e aplique o Teorema dos círculos de Gerschgorin para mostrar que, sob as condições anteriores, os valores próprios da matriz do sistema estão no círculo unitário.)

Caso em que σ não é constante

O exemplo anterior mostra que a extensão dos métodos de diferenças para problemas com condições de fronteira envolvendo derivadas é bastante simples. Consideremos agora a resolução da equação $\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, x e t na mesma região Ω , onde $\sigma = \sigma(x, t)$ é uma função que varia lentamente. O método explícito simples pode ainda aplicar-se a este problema, desde que na relação de recorrência (6.6) substituamos σ por $\sigma_{i,j} = \sigma(ih, jk)$, isto é, se substituirmos as equações (6.8) por

$$\begin{aligned} U_{i,j+1} &= r_{i,j} U_{i+1,j} + (1 - 2r_{i,j}) U_{i,j} + r_{i,j} U_{i-1,j}; & i &= 1, \dots, M-1, \\ & & j &= 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (6.43)$$

onde $r_{i,j} = \sigma_{i,j} \frac{k}{h^2}$. Isto dá-nos um método com erro de truncatura local $O(k+h^2)$, o qual é portanto consistente com a equação diferencial. Quanto à estabilidade do método, não podemos agora determinar os valores próprios da matriz correspondente às equações (6.43) directamente. Contudo, uma aplicação do Teorema dos círculos de Gerschgorin mostra que é condição suficiente de estabilidade que

$$\frac{k\sigma_{max}}{h^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (6.44)$$

onde $\sigma_{max} = \max(\sigma(x, t))$ para x e t em Ω .

Para o método implícito de Crank-Nicolson, torna-se necessário substituir σ não por $\sigma_{i,j}$, mas por $\sigma_{i,j+1/2} = \sigma(ih, (j + 1/2)k)$, uma vez que

$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k}$ dá uma aproximação $O(k^2)$ para $\frac{\partial u}{\partial t}$ no ponto $(x, t + k/2) = (ih, (j + 1/2)k)$.

A discussão da aplicação dos métodos de diferenças aqui referidos para problemas mais gerais, nomeadamente, problemas para equações parabólicas não-lineares ou envolvendo mais do que uma variável espacial pode ser vista, por exemplo, em [27, pp.189-196] ou [29, pp 37-56].

6.5 Notas e referências adicionais

- Os livros de Ames [1], Forsythe e Wasow [14] e Mitchell [23] são boas referências para um estudo mais pormenorizado de métodos de diferenças para a resolução de equações parabólicas; veja também os livros de Isaacson e Keller [21] e Richtmyer e Morton [28] para uma discussão desses métodos, bem como uma análise rigorosa dos respectivos erros de truncatura e critérios de estabilidade.

Capítulo 7

Equações Hiperbólicas

As equações hiperbólicas aparecem geralmente associadas a problemas de vibração, problemas de propagação de ondas ou problemas onde as descontinuidades persistem ao longo do tempo. Neste capítulo referimo-nos, de forma um pouco breve, à aplicação de métodos de diferenças para a resolução deste tipo de equações.

Consideremos a equação das ondas uni-dimensional

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, 0 \leq x \leq 1, \quad t > 0, \quad (7.1)$$

sujeita às seguintes condições iniciais e de fronteira

$$u(x, 0) = f(x), \quad 0 < x < 1, \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, 0) = g(x), \quad 0 < x < 1 \quad (7.3)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t > 0. \quad (7.4)$$

A solução do problema (7.1)-(7.4) dá-nos, por exemplo, o deslocamento

transversal $u(x, t)$ de um ponto situado à distância x de uma das extremidades de uma corda vibrante, no instante t . No instante inicial são conhecidas a “forma” $u(x, 0)$ e a “velocidade” $\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0)$ da corda. Neste caso, a corda, de comprimento unitário, está fixa nas duas extremidades ($u(0, t) = u(1, t) = 0$); veja Fig. 7.1. Para a dedução desta equação veja, por exemplo, [27, pp 197-198].

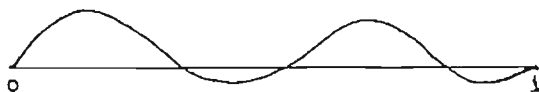


Fig. 7.1

As curvas características para a equação (7.1) são da forma $x + ct = \xi$ e $x - ct = \nu$ com ξ e ν constantes específicas para cada característica; veja a Secção 5.1. Efectuando a mudança de variáveis definida por

$$\xi = x + ct, \quad \nu = x - ct, \quad \phi(\xi, \nu) = u(x, t)$$

vemos que a equação (7.1) pode ser reescrita na forma

$$4c^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \nu} = 0,$$

cuja solução é dada por

$$\phi(\xi, \nu) = F(\xi) + G(\nu),$$

onde F e G são funções arbitrárias (duas vezes continuamente diferenciáveis) de uma só variável. Assim, a solução geral da equação (7.1) é dada por

$$u(x, t) = F(x + ct) + G(x - ct). \quad (7.5)$$

Consideremos a solução de (7.1) sujeita às condições iniciais (7.2)-(7.3). Facilmente se verifica que a solução do problema de valores iniciais (7.1)-(7.3) é dada por

$$u(x, t) = \frac{1}{2}[f(x + ct) + f(x - ct)] + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(s) ds. \quad (7.6)$$

Isto mostra que a solução num ponto $P = (x_0, t_0)$ é univocamente determinada pelos valores de f e g no intervalo $[x_0 - ct_0, x_0 + ct_0]$ na linha inicial $t = 0$.

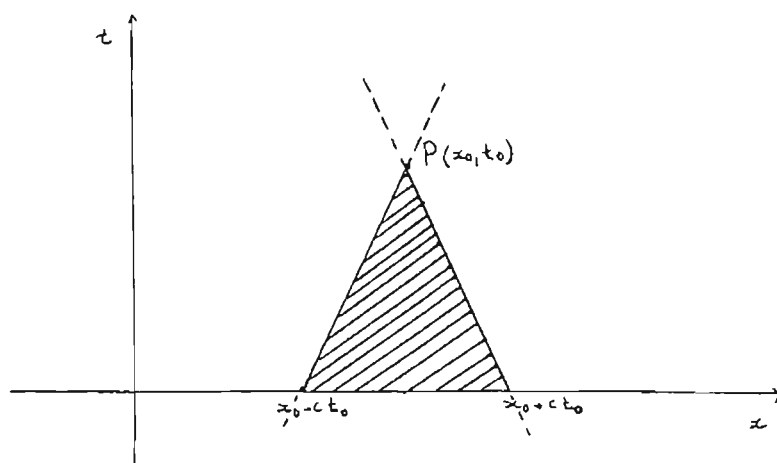


Fig. 7.2

Este intervalo, que é determinado pela intersecção das características que passam pelo ponto (x_0, t_0) com a recta $t = 0$, é chamado *intervalo de dependência* do ponto (x_0, t_0) ; ver Fig. 7.2. O triângulo sombreado é

chamado *domínio de dependência* do ponto (x_0, t_0) . A equação (7.5) só tem significado se o ponto $P = (x_0, t_0)$ é tal que o seu intervalo de dependência está contido no intervalo $(0, 1)$, onde as funções f e g estão definidas. Se o ponto Q , tal como se indica na Fig. 7.3, é tal que as características que por ele passam intersectam a recta $t = 0$ fora do intervalo $(0, 1)$ a solução poderá, no entanto ser obtida, embora de forma não tão simples, através da utilização das condições de fronteira.

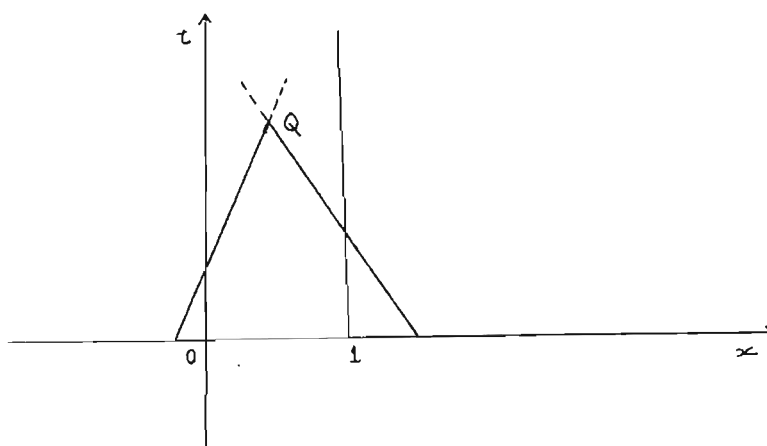


Fig.7.3

Se a equação diferencial hiperbólica não é tão simples como a equação (7.1), não é, em geral, possível obter uma solução de forma explícita, havendo portanto necessidade de recorrer à utilização de métodos numéricos. O método numérico mais conveniente para resolver as equações hiperbólicas é o método das características que referimos brevemente na Secção 5.1. Tal método é particularmente importante quando existem descontinuidades nos dados iniciais do problema, pois é precisamente ao longo das curvas ca-

racterísticas que essas descontinuidades se propagam ao domínio de solução da equação diferencial. Para uma explicação pormenorizada sobre este assunto, veja, por exemplo, [29, pp 164 e segs] ou [15, pp 212 e segs]. Contudo, problemas que não envolvem descontinuidades podem ser resolvidos satisfatoriamente por métodos de diferenças. Tais métodos têm a vantagem de ser mais apropriados para a resolução utilizando um computador. Além disso, para equações hiperbólicas de ordem superior o método das características é menos adequado, pelo que há então necessidade de recorrer a métodos de diferenças.

7.1 Método explícito e condição de Courant-Friedrichs-Lewy

Tal como no caso das equações parabólicas, para construir a solução de diferenças finitas de (7.1)–(7.4) cobre-se a região $\Omega = \{(x, t) : 0 \leq x \leq 1, t \geq 0\}$ por uma rede de malha rectangular de dimensões h e k , $\Omega_{h,k}$ com h tal que $Mh = 1$ ($M > 0$). Em cada ponto de $\Omega_{h,k}$ determina-se uma aproximação $U_{i,j}$ para $u(x_i, t_j) = u(ih, jk)$. A fórmula das diferenças finitas mais simples para aproximar a equação (7.1) é dada por

$$\frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{k^2} = c^2 \left(\frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} \right), \quad (7.7)$$

a qual tem um erro de truncatura local $O(h^2 + k^2)$.

Fazendo $r = \frac{kc}{h}$ e resolvendo em ordem a $U_{i,j+1}$ vem:

$$U_{i,j+1} = r^2 U_{i-1,j} + 2(1 - r^2) U_{i,j} + r^2 U_{i+1,j} - U_{i,j-1} \quad ; \quad i = 1, \dots, M-1, \\ j = 1, 2, \dots \quad (7.8)$$

As condições de fronteira (7.4) dão-nos $U_{0,j} = U_{M,j} = 0$. Além disso, a condição inicial (7.2) dá-nos $U_{i,0} = f_i = f(ih)$. Como o método envolve três níveis da rede, $j-1$, j e $j+1$, torna-se necessário um procedimento especial, dando-nos os valores de $U_{i,1}$, para que se possa iniciar a recursão (7.6). Para tal vamos utilizar a condição inicial (7.3), a qual ainda não foi usada. Introduzindo “pontos fictícios” (x_i, t_{-1}) com $t_{-1} = -k$, e aproximando a derivada $\frac{\partial u}{\partial t}$ nos pontos $(x_i, 0)$ por uma fórmula de diferenças centrais vem:

$$\frac{U_{i,1} - U_{i,-1}}{2k} = g_i \quad (7.9)$$

com erro de truncatura $O(k^2)$. Resolvendo (7.9) em ordem a $U_{i,-1}$ vem:

$$U_{i,-1} = U_{i,1} - 2kg_i \quad (7.10)$$

Substituindo (7.10) em (7.8) para $j = 0$ (com a introdução dos “pontos fictícios” (x_i, t_{-1}) a fórmula (7.8) assume-se agora também para $j = 0$) vem, notando que $U_{i,0} = f_i$,

$$U_{i,1} = \frac{r^2}{2} f_{i+1} + (1 - r^2) f_i + \frac{r^2}{2} f_{i-1} + kg_i. \quad (7.11)$$

O método das diferenças (7.8) pode agora ser utilizado para determinar $U_{i,j}$; $i = 1, \dots, M-1$ para $j > 1$.

As equações (7.8) e (7.11) mostram que o valor da solução num determinado ponto P da rede, U_P , depende apenas dos valores $U_{i,j}$ nos pontos da rede contidos no triângulo formado pela linha inicial $t = 0$ e pelas duas rectas de declives $\pm \frac{h}{k}$, digamos $x \pm \frac{h}{k}t = \text{const}$, que passam pelo ponto P . Esta região é indicada na Fig. 7.4, e chama-se *domínio de dependência numérico* do ponto P sendo as rectas $x \pm \frac{h}{k}t = \text{const}$ designadas por *características numéricas*. Suponhamos, tal como se ilustra na Fig. 7.4, que o domínio de dependência numérico do ponto P está contido no domínio de dependência da equação das ondas para o mesmo ponto.

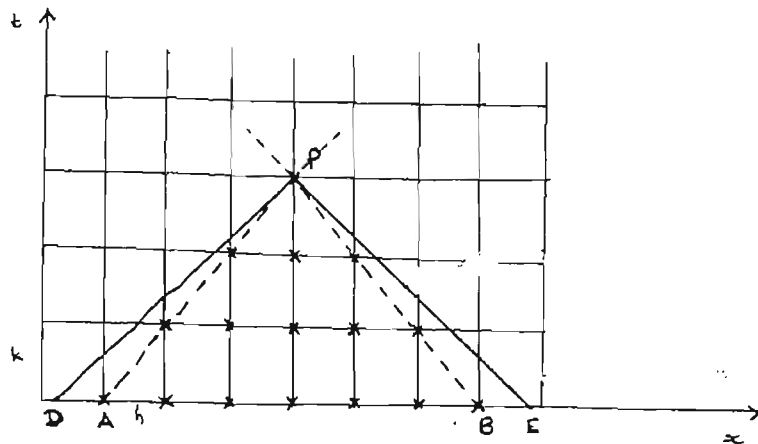


Fig.7.4

Se alterarmos as condições iniciais ao longo de DA e BE , estas modificações irão alterar a solução analítica no ponto P . No entanto, tais alterações não vão modificar a solução numérica dada pela equações (7.8) e (7.11). Neste caso, U_P não poderá convergir para u_P para todas as possíveis mudanças arbitrárias nas condições iniciais, quando $h \rightarrow 0$ e $k \rightarrow 0$, permanecendo

$r = \frac{h}{k}$ constante. Contudo, quando as características numéricas PA, PB contêm o domínio de dependência PDE , Courant, Friedrichs e Lewy [6], mostraram que a contribuição para a solução da equação de diferenças no ponto $P = (x, y) = (ih, jk)$ devida a dados iniciais exteriores ao domínio de dependência da equação diferencial, tende para zero quando $h, k \rightarrow 0$, permanecendo r constante, para P fixo.

Vemos assim que é condição necessária de convergência que “o domínio de dependência numérico da equação de diferenças contenha o domínio de dependência da equação diferencial”. Esta condição é conhecida como *condição de Courant-Friedrichs-Lewy (C.F.L.)*.

No caso do método explícito definido pelas equações (7.8) e (7.11), facilmente se verifica que a condição C.F.L. é satisfeita desde que

$$0 < r = \frac{h}{k} \leq 1. \quad (7.12)$$

Pode provar-se que a condição (7.12) é também suficiente para garantir a estabilidade do método explícito; veja, por exemplo, [23, p.198] ou [28, p. 263]. Este método tem erro de truncatura local $O(h^2 + k^2)$ (verifique!), tratando-se portanto de um método consistente.

7.2 Métodos implícitos

Tal como no caso das equações parabólicas, podemos melhorar a estabilidade dos métodos, recorrendo a métodos do tipo implícito. Por exemplo,

um método adequado para a discretização da equação (7.1) é definido por:

$$\frac{\delta_t^2 U_{i,j}}{k^2} = \frac{1}{4} \frac{\delta_x^2 U_{i,j+1} + 2\delta_x^2 U_{i,j} + \delta_x^2 U_{i,j-1}}{h^2}, \quad (7.13)$$

em que δ denota o operador usual de diferenças centrais. Este método é consistente e incondicionalmente estável; veja, por exemplo, [23, p. 201 e segs] ou [29, p.202].

Exercício 7.2.1 Prove que o erro de truncatura local do método definido pelas equações (7.13) é dado por

$$\tau_{i,j} = -\frac{1}{12} h^2 k^2 (1 + 2r^2) \left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right] (x_i, y_j) + \text{termos de ordem superior.} \quad (7.14)$$

O método (7.13) é um caso particular de uma classe de métodos propostos por Mitchell [23]:

$$\begin{aligned} \frac{\delta_t^2 U_{i,j}}{k^2} &= \frac{1}{k^2} \{ \theta \delta_x^2 U_{i,j+1} + (1 - 2\theta) \delta_x^2 U_{i,j} + \theta \delta_x^2 U_{i,j-1} \}; \\ 0 &\leq \theta \leq 1. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Esquemas de ordem superior foram também estudados em Mitchell [23], Jain [22] e Smith [29]. Tais esquemas são, no entanto, difíceis de implementar na prática, porque requerem geralmente modificações complicadas nas fronteiras.

A extensão da utilização dos métodos precedentes para equações hiperbólicas de 2ª ordem envolvendo mais do que uma variável espacial pode ser

vista em Mitchell [23, pp 202 e segs].

7.3 Notas e referências adicionais

- As referências indicadas na Secção 6.5 são também relevantes para o estudo de métodos de diferenças para equações hiperbólicas.
- A propagação de descontinuidades é uma consequência da existência de características associadas com equações hiperbólicas. Por exemplo, as equações diferenciais que descrevem o fluxo de gases são baseadas em diversas leis de conservação (de massa, momento, energia), e tais fluxos são muitas vezes caracterizados por descontinuidades internas, isto é, choques, através dos quais são exigidas condições de fronteira internas. Um dos grandes triunfos dos métodos de diferenças nos últimos anos, foi precisamente na modelação das ondas de choque para equações diferenciais hiperbólicas não-lineares; veja, a este propósito, o artigo de Osher e Sweby [26].

Capítulo 8

Equações Elípticas

As equações elípticas estão associadas a problemas de equilíbrio ou problemas de estado estacionário e, como já dissemos anteriormente, problemas envolvendo tais equações são sempre problemas de valores de fronteira. Mais precisamente, para uma equação de 2ª ordem, o seu domínio de integração é uma região limitada $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, tendo como fronteira uma curva fechada $\partial\Omega$. As condições de fronteira são, em geral, de três tipos:

(i) $u = \phi(x, y)$ em $\partial\Omega$ — o correspondente problema é chamado um *problema de Dirichlet*. É possível mostrar, usando o Teorema de Green, que este problema tem uma única solução que depende de forma contínua dos dados, ou seja, que se trata de um problema bem posto; veja, por exemplo, Garabedian [17] e Weinberger [34].

(ii) $\frac{\partial u}{\partial n} = \psi(x, y)$ em $\partial\Omega$ — *problema de Neumann*. Neste caso a solução é determinada a menos de uma constante, isto é, se u é uma solução do problema, então $u + c$ também é solução .

(iii) $u(x, y) + a(x, y) \frac{\partial u}{\partial n} = \xi(x, y)$ em $\partial\Omega$ — *problema misto ou de Robin-Churchill*. Se $a(x, y) > 0$ trata-se de um problema bem posto.

8.1 Fórmula dos cinco pontos para a equação de Laplace

Começemos por considerar a solução da equação de Laplace num quadrado $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$:

$$\Delta u := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad 0 < x, y < 1 \quad (8.1)$$

sujeita a condições de fronteira do tipo de Dirichlet:

$$u(x, y) = \begin{cases} f_0(x), & y = 0, 0 \leq x \leq 1 \\ f_1(x), & y = 1, 0 \leq x \leq 1 \\ g_1(y), & x = 0, 0 \leq y \leq 1 \\ g_2(y), & x = 1, 0 \leq y \leq 1 \end{cases} \quad (8.2)$$

A região Ω é coberta por uma rede Ω_h com malha uniforme h (na Figura 8.1 é dado um exemplo com $h = 1/3$).

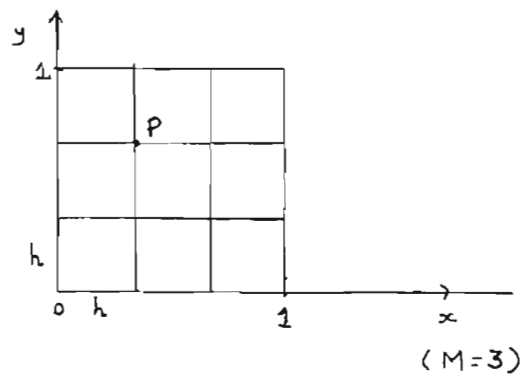


Fig. 8.1

Se, em cada ponto $P = (ih, jh)$; $i = 1, \dots, M - 1$, $j = 1, \dots, M - 1$, onde M é tal que $Mh = 1$, as derivadas envolvidas na equação (8.1) forem substituídas por fórmulas de diferenças centrais, ter-se-á:

$$\begin{aligned} \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} &= \tau_{i,j}; \\ i &= 1, \dots, M - 1, \\ j &= 1, \dots, M - 1, \end{aligned} \quad (8.3)$$

onde

$$\tau_{i,j} = -\frac{h^2}{12} \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} u(x_i + \xi_i h, y_j) + \frac{\partial^4}{\partial y^4} u(x_i, y_j + \eta_j h) \right) \quad (8.4)$$

com

$$\xi_i, \eta_j \in (-1, 1).$$

Assim, uma aproximação U_{ij} para u_{ij} pode ser obtida de (8.3) “ignorando” o erro de truncatura (8.4), i.e., de

$$\begin{aligned} \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} + \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{h^2} &= 0; \\ i &= 1, \dots, M - 1, \\ j &= 1, \dots, M - 1. \end{aligned} \quad (8.5)$$

A fórmula (8.5) é conhecida por *fórmula dos 5 pontos* para a discretização da equação de Laplace. Esta fórmula é usualmente identificada através do seguinte esquema

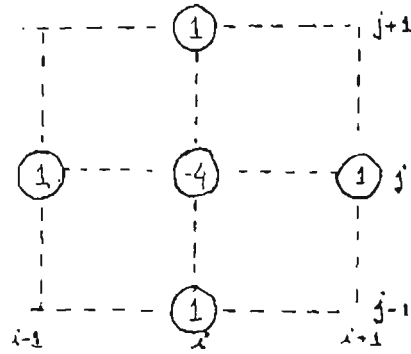


Fig. 8.2

onde são catalogados os pontos intervenientes e respectivos coeficientes. A um esquema do tipo do apresentado na Fig. 8.2 chamamos um *stencil*.

Se os pontos de Ω_h forem ordenados da esquerda para a direita e de baixo para cima, o sistema de $(M-1) \times (M-1)$ equações (8.5) pode ser escrito na forma

$$BU = b \quad (8.6)$$

com B uma matriz banda e onde b é um vector cujas componentes são dadas por valores fronteiros. Por exemplo, se $M = 4$ e os pontos de Ω_h forem numerados como se indica na Fig. 8.3,

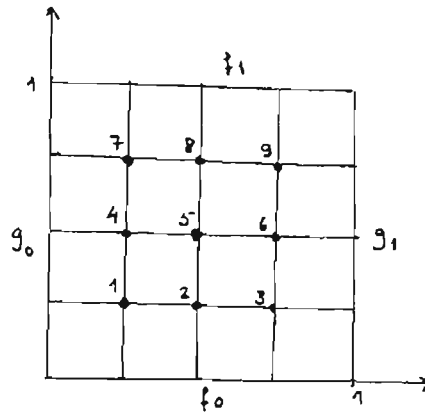


Fig. 8.3

então a matriz B em (8.6) será

$$B = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{array} \right) \quad (8.7)$$

e o vector b será

$$b = \begin{pmatrix} -f_0(h) - g_0(h) \\ -f_0(2h) \\ -f_0(3h) - g_1(h) \\ -g_0(2h) \\ 0 \\ -g_1(2h) \\ -g_0(3h) - f_1(h) \\ -f_1(2h) \\ g_1(3h) - f_1(3h) \end{pmatrix}. \quad (8.8)$$

Em geral, ordenado os pontos da forma indicada, o sistema de $(M-1)^2$ equações terá como matriz de coeficientes uma matriz tridiagonal por blocos

$$B = \begin{pmatrix} A & I & 0 & 0 & \dots & 0 \\ I & A & I & 0 & \dots & 0 \\ & & \dots & \dots & & \\ 0 & \dots & \dots & I & A & I \\ 0 & \dots & 0 & 0 & I & A \end{pmatrix}$$

onde cada bloco é uma matriz quadrada de ordem $(M-1)$; os blocos A ao longo da diagonal são matrizes tridiagonais com -4 na diagonal e 1 na subdiagonal e sobrediagonal; I representa a identidade de ordem $(M-1)$.

À medida que a rede é tornada mais fina (i.e., que M cresce) o número de equações cresce muito rapidamente. Por exemplo, se $h = 0.001$, então $M = 100$ o que dá um total de 99^2 equações em 99^2 incógnitas. Estas matrizes de grandes dimensões são, no entanto, matrizes dispersas (i.e. com grande quantidade de zeros) e com estrutura de banda. Existe uma vasta literatura discutindo formas eficientes de resolver sistemas de equações com matrizes deste tipo. Tais métodos podem classificar-se “grosso modo” em duas grandes classes: a dos *métodos directos* e a dos *métodos iterativos*, embora existam métodos de tipo híbrido. Os métodos directos são caracterizados pelo facto de, na ausência de erros de arredondamento, produzirem a solução exacta do sistema num número finito de operações aritméticas, enquanto os métodos iterativos produzem uma sequência de aproximações que (sob certas condições) converge para a solução do sistema.

Basicamente, os métodos directos utilizados para a resolução do tipo de sistemas aqui considerados – sistemas cuja matriz é dispersa e com estrutura banda – são variantes do conhecido método de eliminação Gaussiana (ou decomposição LU). Como sabemos, na resolução de um sistema geral por eliminação Gaussiana, estão envolvidas $O(n^3)$ operações aritméticas, sendo as necessidades de armazenamento de dados de $O(n^2)$. Assim, os objectivos principais das variantes da eliminação Gaussiana para matrizes dispersas são:

- 1) reduzir o número de operações, não efectuando operações envolvendo

zeros;

- 2) reduzir as exigências de armazenamento, armazenando apenas os elementos não-nulos e informação descrevendo a sua localização.

Para que tais objectivos sejam atingidos, é bastante importante a forma como as equações e incógnitas são ordenadas. Para uma discussão sobre este assunto, veja, Fox [16] e Ortega e Poole [25].

Em alternativa aos métodos directos, podem utilizar-se métodos iterativos, tipo Jacobi, Gauss-Seidel ou SOR. Tais métodos têm associados os problemas práticos inerentes a todos os métodos de carácter iterativo, tais como o problema da escolha de uma boa aproximação inicial, o da determinação de critérios de paragem apropriados e o possível crescimento de erros de arredondamento envolvidos em qualquer processo repetitivo. Contudo, com matrizes dispersas de muito grandes dimensões, a utilização destes métodos pode ser compensadora (ou mesmo indispensável).

8.2 Generalizações

Naturalmente, métodos mais precisos para a discretização da equação de Laplace poderão ser obtidos, usando fórmulas de diferenças de ordem mais elevada que envolvem mais nós da rede; em [15] e [32] poderá encontrar outras fórmulas a utilizar e respectivos erros de truncatura. A inclusão de de nós adicionais diminui, no entanto, a esparsidade da matriz do sistema

e pode causar mais dificuldades junto da fronteira do domínio.

O método descrito para resolver a equação de Laplace num quadrado (com condições de fronteira de Dirichlet) generaliza-se de forma imediata para a resolução de um problema envolvendo a equação de Poisson

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) & (x, y) \in \Omega, \\ u(x, y) = \phi(x, y) & \text{em } \partial\Omega \end{cases}$$

onde Ω é um domínio da forma representada na Fig. 8.4, isto é, tal que as linhas da rede intersectam $\partial\Omega$ em nós dessa rede.

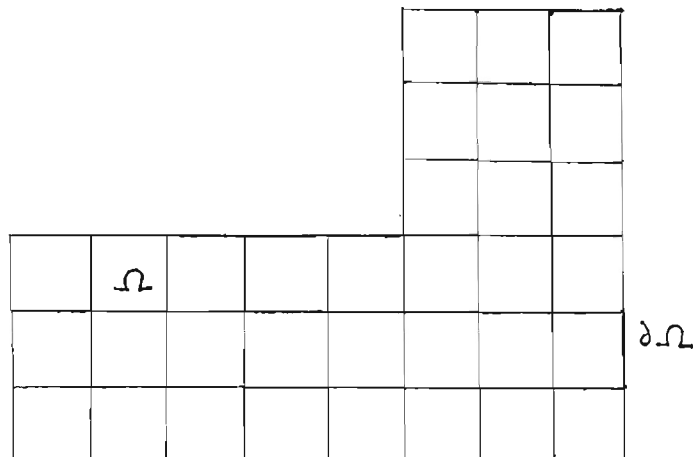


Fig. 8.4

A restrição de que a rede intersecte a fronteira $\partial\Omega$ apenas em pontos que sejam nós da rede é uma limitação bastante grande, principalmente numa região Ω irregular onde pode não ser possível encontrar uma rede uniforme que satisfaça essa condição. Suponhamos que perto da fronteira os nós estão distribuídos como se indica na Fig. 8.5

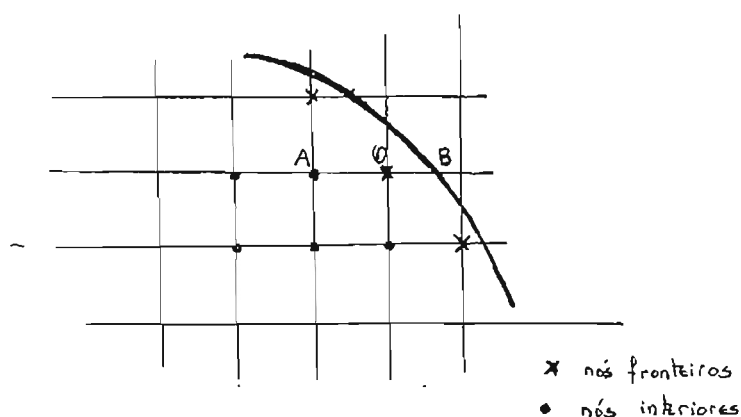


Fig. 8.5

Os pontos denotados por \bullet são chamados nós interiores — são rodeados por 4 nós contidos em Ω — e, em cada ponto deste tipo, a equação de diferenças

$$\frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} + \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{h^2} = f_{i,j} \quad (8.9)$$

pode ser aplicada. Os restantes nós contidos em Ω são chamados *nós fronteiros*. Em cada nó fronteiro torna-se necessário substituir $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ e/ou $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ por fórmulas de diferenças não centradas. Por exemplo, no ponto O , $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ pode ser substituída pela fórmula usual de diferenças centrais, mas tal

fórmula não pode ser usada para aproximar $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. Facilmente se verifica ¹ que, se A , O e B estão dispostos como se indica na Fig. 8.6,

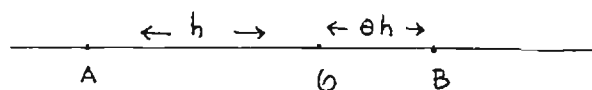


Fig. 8.6

então a seguinte fórmula de diferenças não centrada pode ser utilizada:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} \left\{ \frac{2}{(1+\theta)} u_A + \frac{2}{\theta(1+\theta)} u_B - \frac{2}{\theta} u_O \right\} + O(h). \quad (8.10)$$

Em alternativa ao uso de fórmulas não centradas, poder-se-á utilizar uma mudança de variáveis de tal modo que o problema resultante esteja definido numa região que possa ser coberta por uma rede que intersecte a fronteira apenas em nós. Por exemplo, se o domínio Ω tem fronteira circular, então o problema será resolvido de forma mais conveniente fazendo uso de coordenadas polares.

Como exemplo, considere-se a resolução da equação de Laplace $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$ na região semi-circular $\Omega = \{x^2 + y^2 \leq 1, y \geq 0\}$, sujeita às

¹Basta expandir u_A e u_B em série de Taylor em torno do ponto O

condições de fronteira $u = x^2 + y^2$ em $\partial\Omega$. A mudança de variáveis definida por $x = r \cos \theta, y = r \sin \theta$ dá-nos a equação de Laplace em coordenada polares,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = 0.$$

A região $0 \leq r \leq 1, 0 \leq \theta \leq \pi$ é agora coberta por uma rede formada por semi-círculos $r = i\delta r; i = 1, 2, \dots, M$, e linhas rectas $\theta = j\delta\theta; j = 1, 2, \dots, N$ onde $M\delta r = 1$ e $N\delta\theta = \pi$, como se indica na Figura 8.7.

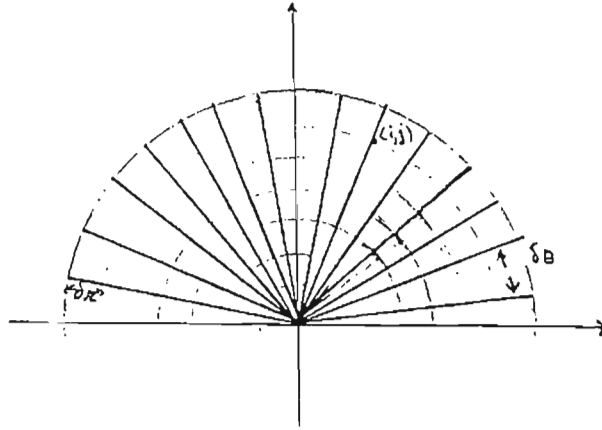


Fig. 8.7

A equação diferencial no ponto (i, j) é então aproximada por

$$\begin{aligned} & \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{(\delta r)^2} + \frac{1}{i\delta r} \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2\delta r} + \\ & + \frac{1}{(i\delta r)^2} \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{(\delta\theta)^2} = 0. \end{aligned} \quad (8.11)$$

Obtemos assim um sistema de equações que pode ser resolvido para a determinação dos valores da solução nos nós.

Problemas de Neumann

Consideremos novamente a solução da equação de Poisson

$$\frac{\partial u^2}{\partial x^2} + \frac{\partial u^2}{\partial y^2} = f, \quad (x, y) \in \Omega = \{0 \leq x, y \leq 1\}, \quad (8.12)$$

sujeita às condições de fronteira

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \begin{cases} f_1(x), & y = 0, 0 \leq x \leq 1, \\ f_2(x), & y = 1, 0 \leq x \leq 1, \\ g_1(y), & x = 0, 0 \leq y \leq 1, \\ g_2(y), & x = 1, 0 \leq y \leq 1, \end{cases} \quad (8.13)$$

onde $\frac{\partial u}{\partial n}$ denota a derivada de u na direcção da normal exterior à fronteira de Ω . Trata-se de um problema de Neumann, o qual, como já dissemos não possui solução única, uma vez que, se u é solução, também $u + c$, com c constante, é solução. Para obter uma única solução é necessária uma condição adicional, por exemplo, especificar-se o valor da solução num ponto.

A região Ω é novamente coberta por uma rede Ω_h de malha h , onde $h = 1/M$ ($M \in \mathbb{N}$) e em cada nó interior de Ω_h a solução da equação diferencial (8.12) é aproximada pela solução da equação de diferenças finitas (8.9). Isto dá-nos um total de $(M-1)^2$ equações em $(M+1)^2 - 4$ incógnitas.

Em cada ponto fronteiro é possível aproximar $\frac{\partial u}{\partial n}$ por uma fórmula envolvendo apenas esse ponto e o nó interior mais próximo, mas isto produz uma aproximação apenas $O(h)$. Em geral, são introduzidos $4(M+1)$ “pontos fictícios”, tal como se indica na Fig. 8.8 (onde tais pontos são denotados por *).

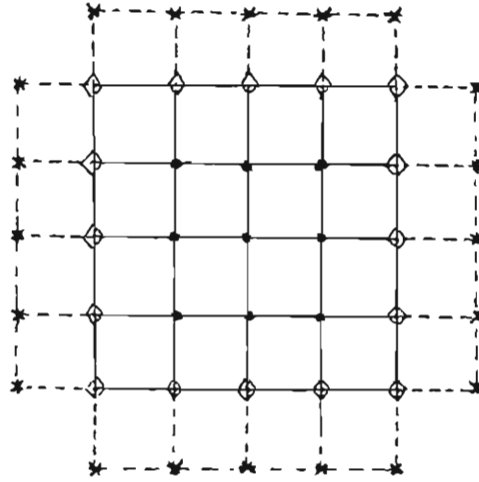


Fig. 8.8

Em cada nó interior (•) podemos aplicar a equação de diferenças (8.9); as condições de fronteira são aproximadas por

$$\left. \begin{aligned} \frac{U_{-1,j} - U_{1,j}}{2h} &= g_0(jh) ; \\ \frac{U_{M+1,j} - U_{M-1,j}}{2h} &= g_1(jh) ; \end{aligned} \right\} \quad j = 0, \dots, M, \quad (8.14)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{U_{i,-1} - U_{i,1}}{2h} &= f_0(ih) ; \\ \frac{U_{i,M+1} - U_{i,M-1}}{2h} &= f_1(ih) ; \end{aligned} \right\} \quad i = 0, \dots, M. \quad (8.15)$$

(8.16)

Além disso, nos pontos da fronteira (◊) assume-se também que a equação diferencial (8.12) é satisfeita e são novamente utilizadas as equações de diferenças (8.9). Isto dá-nos um total de $(M+3)^2 - 4$ equações em $(M+3) - 4$ incógnitas; em geral, as incógnitas $U_{-1,j}$, $U_{M+1,j}$; $j = 1, \dots, M$; $U_{i,-1}$, $U_{i,M+1}$; $i = 1, \dots, M$, são eliminadas inicialmente usando as equações

(8.14), (8.15) e as equações (8.12) nos nós da fronteira, ficando então o problema reduzido ao da solução de um sistema de $(M + 1)^2$ equações em $(M + 1)^2$ incógnitas. Convém salientar que este sistema é indeterminado pelo que, para se obter uma solução única, se deve também considerar a condição adicional especificada inicialmente.

8.3 Notas e referências adicionais

- O problema da resolução de sistemas dispersos de grande dimensão por meio métodos directos, constitui uma área de investigação actual muito activa. Os livros de Tewarson [31], Erisman e Reid [13] e George e Liu [19], bem como o artigo de Duff [9] são referências aconselhadas para este assunto. “Software” bem documentado e testado para este tipo de métodos é descrito em Duff e Reid [11], George e Liu [18] e Eisenstat *et al.* [12].
- Os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel são métodos clássicos que datam do último século. Para uma discussão completa dos métodos de Jacobi, Gauss-Seidel, SOR e suas variantes, veja, [14], [33] e [35]. Existem já rotinas implementando estes métodos clássicos, tendo-se também desenvolvido bastante trabalho para automatizar a escolha do parâmetro de aceleração do método SOR. Existe uma grande variedade de outros métodos iterativos para os quais se tem desenvolvido “software”, por exemplo, os chamados “método dos gradientes conju-

gados pre-condicionados” [4] e “métodos multi-rede” [3]. No entanto, o uso de métodos directos para matrizes dispersas provou ser bastante mais eficiente do que se julgou inicialmente. Para equações elípticas a duas dimensões, os métodos directos são, provavelmente preferíveis, enquanto, para três dimensões será talvez melhor recorrer a métodos iterativos.

Conclusão

O estudo dos métodos de diferenças finitas para a resolução de equações de derivadas parciais que fizemos nos capítulos anteriores foi, por limitações de tempo, um pouco superficial, sendo os problemas considerados artificialmente simples. Na prática, com efeito, os problemas a resolver raramente satisfarão as condições ideais dos que aqui considerámos: ter-se-ão, possivelmente, equações não-lineares ou sistemas de tais equações, existirão mais do que duas variáveis independentes etc. Os princípios gerais dos métodos de diferenças que aqui descrevemos, aplicar-se-ão ainda, embora, como é de esperar, cada um dos factores anteriores possa causar algumas dificuldades.

Os métodos de diferenças finitas para a resolução de equações de derivadas parciais aparecem já referidos, em 1928, no célebre artigo de Courant, Friedrich e Lewy [6], mas começaram apenas a ser utilizados cerca de quinze anos mais tarde, sob o estímulo da tecnologia de tempo de guerra e com a ajuda dos primeiros computadores automáticos. Com a crescente disponibilidade de máquinas de computação poderosas e com os melhoramentos em técnicas numéricas (nomeadamente, técnicas de resolução de sistemas de equações) os métodos de diferenças foram sendo usados cada vez mais, permitindo a resolução de problemas até aí considerados insolúveis.

Outro método que não podemos deixar de aqui referir, pelo papel cada

vez mais importante que tem desempenhado na resolução de problemas de equações de derivadas parciais (especialmente elípticas e parabólicas, embora também se tenha desenvolvido recentemente para equações hiperbólicas), é o chamado *método dos elementos finitos*. Embora a base matemática deste método date dos anos 40, o seu desenvolvimento, nas décadas de 50 e 60, foi devido essencialmente a engenheiros, que o utilizaram, especialmente em problemas de análise de estruturas. Desde então, a sua base matemática tem-se desenvolvido, sendo a sua aplicabilidade para equações elípticas e parabólicas gerais bem demonstrada. Para uma introdução ao método dos elementos finitos, veja, por exemplo, os livros de Strang e Fix [30] e de Mitchell e Wait [24].

Na verdade, podemos dizer que os *métodos de diferenças finitas* e o *método dos elementos finitos* são actualmente as técnicas mais utilizadas para a resolução de problemas de equações de derivadas parciais, constituindo a base do “software” disponível para a resolução de tais problemas.

No recente artigo de Boisvert e Sweet [2], encontrará uma descrição das bibliotecas de rotinas actualmente utilizadas para a resolução de problemas de equações elípticas.

Como seria de esperar, a influência do desenvolvimento da computação paralela faz-se também sentir na área da resolução de equações de derivadas parciais. A discretização das equações de derivadas parciais origina geralmente, como vimos no caso dos métodos de diferenças, sistemas de equações

lineares de grandes dimensões. Assim, grande parte da influência referida é devida ao desenvolvimento de algoritmos “paralelos” para a resolução de sistemas de equações , a que já nos referimos na primeira parte deste curso. Além disso, outra das técnicas de paralelização que também se está a tornar bastante importante, quer para os métodos de diferenças finitas quer para o método dos elementos finitos, é a chamada *técnica de decomposição do domínio*. O artigo de Duff [10] já referido no final da Parte I, é também uma referência aconselhada para este assunto.

Bibliografia – Parte II

- [1] Ames, W. F. (1977) *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 2ª ed., Nelson.
- [2] Boisvert, R. F. e Sweet, R. A. (1984) Mathematical software for elliptic boundary value problems, em *Sources and Development of Mathematical Software*. Cowell, W. R. Ed., Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- [3] Brandt, A. (1977) Multi-level adaptative techniques (MAT) for partial differential equations: ideas and software, em *Mathematical Software III*. Rice, J. Ed., Academic-Press, New York.
- [4] Concus, P., Golub, G. H. e O'Leary, D. P. (1976) A generalized conjugate gradient method for the numerical solution of elliptic partial differential equations, em *Sparse Matrix Computations*. Bunch, J. R. e Rose, D. J. Eds, Academic Press, New York.
- [5] Constantinides, A. (1987) *Applied Numerical Methods with Personal Computers*. Mc Graw-Hill, New York.
- [6] Courant, R., Friedrichs, K. e Lewy, H. (1928) *Mathematische Annalen* 100, 32-74.
- [7] Courant, R. e Hilbert, D. (1953) *Methods of Mathematical Physics*. John Wiley and Sons, New York.

- [8] Crank, J. e Nicolson, P. (1947) A practical method for numerical evaluation of differential equations of the heat-conduction type. *Proc. Camb. Phil. Soc.* **43**, 50-67.
- [9] Duff, I. S. (1977) A survey of sparse matrix research, em *Proceedings of the IEEE.* ,**65**, 500-523.
- [10] Duff, I. S. (1987) The influence of vector and parallel processors on numerical analysis, em *The State of the Art in Numerical Analysis.*, Iserles, A. e Powell, M. J. D. Eds, Oxford Univ. Press (Clarendon), Oxford.
- [11] Duff, I. e Reid, J. (1979) Some design features of a sparse matrix code. *ACM Trans. on Math. Soft.* **5**, 18-35.
- [12] Eisenstat, S. *et al.* (1977) Yale sparse matrix package I: the symmetric code. *Rpt 112*; Dept. of Computer Science, Yale University.
- [13] Erisman, A. e Reid, J. (1981) *Direct Methods for Sparse Matrices.* Oxford Univ. Press, Oxford.
- [14] Forsythe, G. e Wasow, W. (1960) *Finite Difference Methods for Partial Differential Equations.* John Wiley and sons, New York.
- [15] Fox, L. (1968) *The Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations.* Pergamon Press, Oxford.

- [16] Fox, L. (1977) Finite difference methods for elliptic boundary value problems, em *The State of the Art in Numerical Analysis*. Jacobs, D. A. H. Editor, Academic Press, New York.
- [17] Garabedian, P. R. (1964) *Partial Differential Equations*. John Wiley and Sons, New York.
- [18] George, A. e Liu, J. (1979) The design of a user interface for a sparse matrix package. *ACM Trans. on Math. Soft.* 5, 139-169.
- [19] George, A. e Liu, J. (1981) *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- [20] Hildebrand, F. B. (1956) *Introduction to Numerical Analysis*. Mc Graw-Hill, New York.
- [21] Isaacson, E. e Keller, H. (1966) *Analysis of Numerical Methods*. John Wiley and Sons, New York.
- [22] Jain, M. K. (1979) *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Wiley Eastern Ltd., New Dehli.
- [23] Mitchell, A. (1969) *Computational Methods in Partial Differential Equations*. John Wiley and sons, New York.
- [24] Mitchell, A. e Wait, R. (1977) *The Finite Element Method in Partial Differential Equations*. John wiley and Sons, New York.