

Aula 5

1. Introdução

2. Problemas de valores fronteira

(Boundary value problems -BVP)

A. Método das diferenças finitas

B. Método de 'shooting'

3. Problema de valores próprios



1) INTRODUÇÃO

Condições iniciais e condições fronteira

Nos problemas considerados até ao presente, havia um conhecimento completo das condições iniciais (i.e., em t_0) e nenhuma restrição *à priori* em relação aos valores que as variáveis dependentes e as suas derivadas iriam ter em instantes posteriores. Como se tratavam de sistemas determinísticos, descritos por equações diferenciais ordinárias, podiam obter-se as soluções a partir de métodos numéricos (com os erros correspondentes ao método escolhido).

Pode considerar-se uma situação diferente, em que não são conhecidas todas as condições iniciais necessárias para saber como o sistema vai evoluir, mas tem-se informação sobre o que acontece, ou o que se quer que aconteça, num instante posterior.

Um exemplo típico é o lançamento de um projétil em que se sabe o módulo da velocidade inicial e se quer ajustar o ângulo de lançamento, de tal modo que o seu alcance seja um dado valor, ou que ao fim de um certo tempo o projétil tenha percorrido uma dada distância na horizontal.



Problemas de valores fronteira

Os problemas tratados até ao presente designam-se por **problemas de valor inicial** e os que foram acabados de apresentar designam-se por **problemas de valores fronteira**.

Uma maneira de tratar destes últimos problemas consiste em arbitrar um conjunto de condições iniciais, e verificar o quanto o resultado se afasta das condições fronteira desejadas. De seguida ajustam-se as condições iniciais de modo a que o resultado se aproxime da solução pretendida. Este processo é repetido tantas vezes quantas as necessárias. No exemplo dado, a escolha de um ângulo de lançamento é feita desta forma.

O método empregue designa-se por Método de *Shooting*. Para cada escolha de valores iniciais, a equação é integrada numericamente com um dos algoritmos já estudados para os problemas de valor inicial.

Um outro tipo de problemas de valor fronteira surge quando conhecemos um conjunto completo de condições iniciais, e há algum parâmetro de valor desconhecido que nos permite resolver o problema (numericamente), e que pode ser determinado a partir do conhecimento das condições fronteira.



Por exemplo, no caso do lançamento de um projétil, o coeficiente de arrasto do projétil, C_d , é desconhecido, mas pode ser determinado a partir do valor experimental do alcance para dadas condições iniciais.

BVP- Problemas de valores fronteira (Boundary Value Problems)

São conhecidos os valores das variáveis dependentes e/ou das suas derivadas em mais do que um valor da variável independente.

OBS: a definição apresentada para BVP, não descreve completamente os problemas que podem ser estudados pelo método de shooting. Quando-se determina, por exemplo, o ângulo de lançamento de um projétil, para se obter o valor desejado do alcance, não se fixam os valores das variáveis dependentes para um dado valor da variável independente (o tempo). O que se pretende é que uma dada variável dependente tenha um dado valor quando uma outra tem um valor especificado.



Os métodos para BVPs abordados em Física Computacional são de dois tipos:

- **Métodos de Diferenças Finitas**, em que se reescreve a equação diferencial na forma de um sistema de equações algébricas, usando aproximações de diferenças finitas para as derivadas.
- **Métodos de Shooting** que consistem em:
 - arbitrar um conjunto de condições iniciais (ou valor de um parâmetro desconhecido);
 - integrar numericamente a equação por um método adequado a problemas de valor inicial;
 - no final da integração, verificar o quanto o resultado se afasta/aproxima das condições fronteira desejadas;
 - ajustar as condições iniciais (ou o valor do parâmetro) de maneira a aproximarmo-nos da solução pretendida;
 - repetir o processo tantas vezes quantas forem necessárias.



Problema de valores próprios

Para se ilustrar este tipo de problemas, considere-se uma corda com densidade linear, μ , que está sujeita a uma tensão T , e que encontra fixa nas duas extremidades, $x=0$ e $x=L$, pelo que o deslocamento vertical da corda, y , toma os seguintes valores $y(0) = y(L) = 0$. Sabe-se que a corda vibra com frequências próprias, **os modos normais de vibração**, que são soluções da equação,

$$\frac{T}{\mu} \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \omega^2 y(x) = 0$$

A cada modo normal de vibração, identificado pelo índice $n = 1, 2, 3, \dots$, corresponde uma frequência ω_n .

Este tipo de problema, cuja equação diferencial se pode escrever na forma:

$$\mathcal{L} y(x) = \lambda y(x)$$

Onde \mathcal{L} é um operador diferencial, designa-se por **problema de valores próprios**.



A equação diferencial anterior, que descreve a evolução do deslocamento vertical da corda, (as vibrações), pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = -\frac{\mu}{T} \omega^2 y(x)$$

Onde se identifica o valor próprio como, $-\frac{\mu}{T} \omega^2$. No entanto, como T e μ são constantes, é habitual designar ω como o valor próprio.

Uma vez que a equação diferencial é linear, se uma dada função $y(x)$ for solução, o produto dessa equação por qualquer constante é ainda uma solução, com o mesmo valor próprio. Assim, embora se tenham os valores de y nas fronteiras $y(0) = y(L) = 0$, pode usar-se um valor não nulo de $y'(0)$, obtendo-se apenas uma amplitude diferente.

As frequências ω_n não são geralmente conhecidas à partida. Neste caso, conhecemo-las porque o problema tem solução analítica.

Problemas diferenciais de valores próprios são considerados um tipo especial de BVPs. Geralmente, neste tipo de problemas, faltam-nos condições iniciais e o valor dos valores próprios.



2) PROBLEMAS de VALORES FRONTEIRA

A. O Método das DIFERENÇAS FINITAS

No método das diferenças finitas, as derivadas num ponto são substituídas por diferenças entre valores da função nesse ponto e em pontos vizinhos, na equação diferencial. Deste modo, uma equação diferencial linear é transformada num sistema de equações algébricas.

O ponto de partida para se substituir a derivada por uma expressão de diferenças finitas é a série de Taylor.

Considere-se uma função $y(x)$, tal que a função e as suas derivadas são univocamente determinadas, são finitas e funções contínuas de x . Nestas condições $y(x)$ pode expandir-se em série de Taylor:

$$y(x + h) = y(x) + y'(x) * h + \frac{1}{2!} y''(x) * h^2 + \frac{1}{3!} y'''(x) * h^3 + \mathcal{O}(h^4)$$

E



$$y(x - h) = y(x) - y'(x) * h + \frac{1}{2!} y''(x) * h^2 - \frac{1}{3!} y'''(x) * h^3 + \mathcal{O}(h^4)$$

Usando a primeira expansão, e desprezando termos de ordem superior a $\mathcal{O}(h)$, obtém-se a aproximação de **diferenças avançadas** ou **progressivas** para a 1ª derivada:

Diferenças avançadas ou progressivas

$$y'(x) = \frac{y(x + h) - y(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Usando a segunda expansão, e desprezando termos de ordem superior a $\mathcal{O}(h)$, obtém-se a aproximação de **diferenças retardadas** ou **regressivas** para a 1ª derivada:

Diferenças retardadas ou regressivas

$$y'(x) = \frac{y(x) - y(x - h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$



Subtraindo as duas expressões, tem-se:

$$y(x + h) - y(x - h) = y'(x) * h + \frac{1}{3}y'''(x) * h^3 + \mathcal{O}(h^4)$$

Desprezando termos de ordem $\mathcal{O}(h^2)$, obtém-se a aproximação de **diferenças centradas** para a primeira derivada:

Diferenças centradas

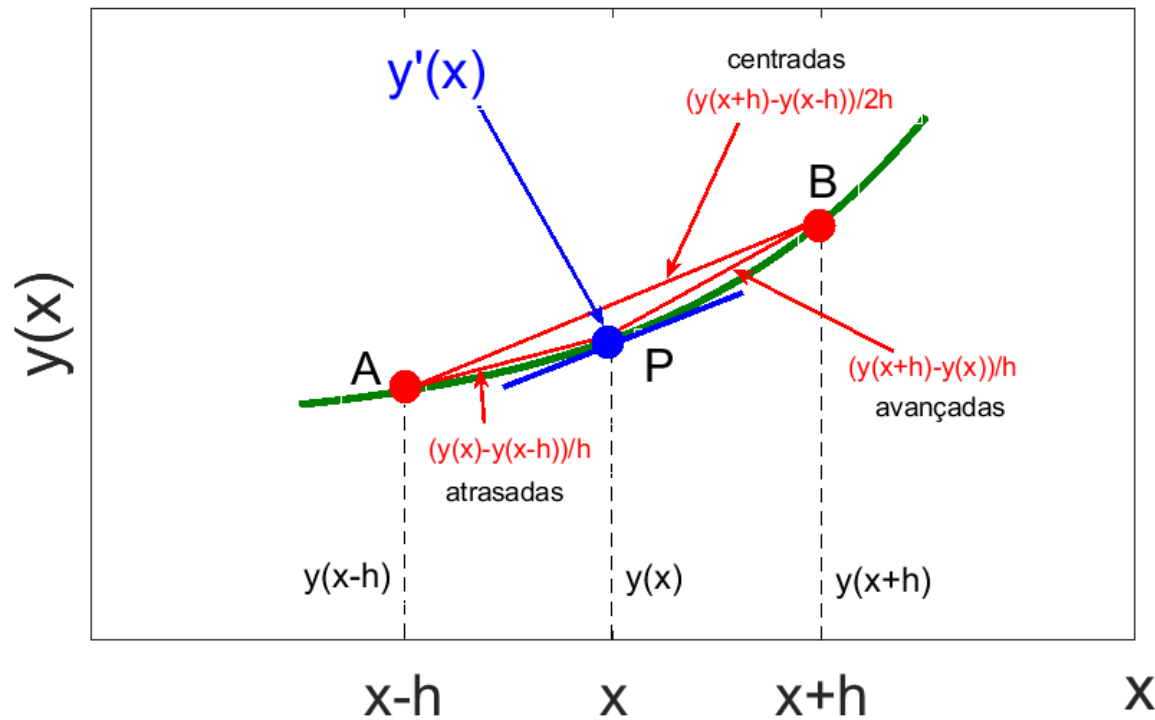
$$y'(x) = \frac{y(x + h) - y(x - h)}{2 * h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Na figura seguinte está ilustrada a aproximação da derivada no ponto P a diferenças finitas.

Deste modo, pode verificar-se que o declive da tangente à curva em P, é aproximado pelo:

- declive da corda AP no caso das diferenças retardadas ou regressivas;
- declive da corda PB no caso das diferenças avançadas ou progressivas;
- declive da corda AB no caso das diferenças centradas.





Somando as duas expansões, obtém-se:

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + y''(x) * h^2 + \mathcal{O}(h^4)$$



E fazendo um rearranjo de termos obtém-se a aproximação de **diferenças centradas para a segunda derivada**:

Diferenças centradas (2ª derivada)

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2 * y(x) + y(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

E as Condições Fronteira ?

Em problema de valores fronteira, para a integração numérica de uma dada equação diferencial é necessário especificar as condições fronteira (CF). Existem vários tipos de condições fronteira, nomeadamente as CF de Dirichlet, as de Neumann, uma combinação das duas, as CF periódicas e absorventes (esponjas), por exemplo.



Condições Fronteira de Dirichlet

Específica os valores que a solução precisa de tomar na fronteira do domínio $[x_0, x_f]$ (fixa os valores):

$$y(x_0) = \alpha \quad e \quad y(x_f) = \beta$$

Condições Fronteira de Neumann

Específica os valores que a derivada da solução precisa de tomar na fronteira do domínio (fixa os valores):

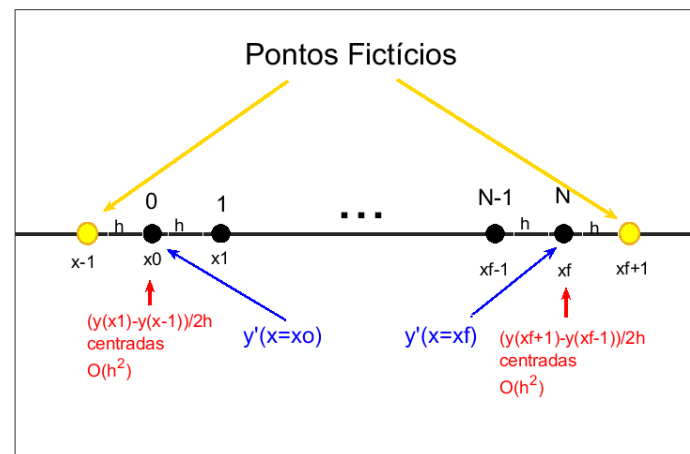
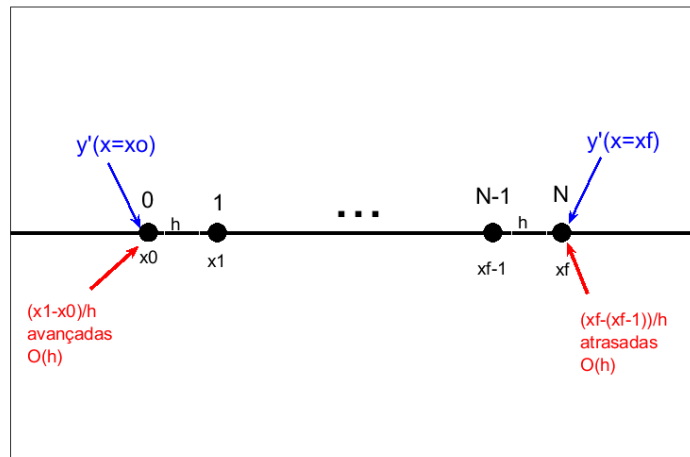
$$\frac{dy}{dx}(x_0) = f \quad e \quad \frac{dy}{dx}(x_f) = g$$

E a implementação das derivadas na fronteira em diferenças finitas?

Considere-se uma grelha de valores da variável independente equidistantes no intervalo $[x_0, x_f]$:

$$x_0, x_0 + h, x_0 + 2h, x_0 + 3h, x_0 + 4h, \dots, x_f \quad \Leftrightarrow \quad (x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, \dots, x_f)$$





i) Podem considerar-se diferenças avançadas em x_0 , e atrasadas em x_f . A precisão é da ordem de $O(h)$. E como obter maior precisão?

ii) Podem inserir-se pontos fictícios nas extremidades do domínio, um à esquerda de x_0 , e outro à direita de x_f , e considerar a aproximação de diferenças centradas. Neste caso a precisão é da ordem de $O(h^2)$.



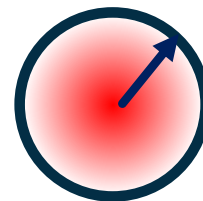
Exemplo de aplicação: Problema 5.3

Pretende-se conhecer a distribuição de temperatura ao longo do raio, $T(r)$, de uma resistência elétrica cilíndrica, de raio R . A distribuição da temperatura $T(r)$ na resistência elétrica é modelada pela seguinte equação:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} + \frac{Q}{\lambda} = 0$$

Sendo Q , o calor produzido por unidade de tempo e por unidade de volume, e λ a condutividade térmica do material.

Sabe-se que a temperatura da superfície externa, $T(R)$, é igual à temperatura ambiente 20°C (*condição fronteira*). Sabe-se também que $T'(0) = 0$, (*condição fronteira*).





Considerando N pontos segundo r (de $r_1 = 0$ a $r_N = R$), com espaçamento uniforme h , e usando aproximações de diferenças finitas centradas às derivadas de 1ª e 2ª ordens, a discretização da equação permite obter a seguinte equação:

$$\frac{T_{k-1} - 2T_k + T_{k+1}}{h^2} + \frac{-T_{k-1} + T_{k+1}}{2r_k h} = -\frac{Q}{\lambda}$$

Multiplicando ambos os membros por h^2 e fazendo um rearranjo dos termos, obtém-se:

$$\left(1 - \frac{h}{2r_k}\right) T_{k-1} - 2T_k + \left(1 + \frac{h}{2r_k}\right) T_{k+1} = -\frac{h^2 Q}{\lambda}$$



- Esta equação corresponde a um sistema de N equações algébricas, que uma vez resolvido dar-nos –à uma estimativa da distribuição da temperatura ao longo do raio, ie, os N valores da temperatura na malha considerada, onde foi discretizada a equação diferencial.
- A condição fronteira para o 1º ponto é uma CF de Neumann, no qual que é especificado o valor numérico da derivada ($T'(0) = 0$).
- A condição fronteira para o último ponto(N), é uma CF de Dirichelt, no qual que é especificado o valor numérico de T , a variável dependente, ($T(R) = 20^\circ\text{C}$).

O sistema pode ser escrito na forma matricial:

$$AT = b$$

E vai ser resolvido por recurso à rotina **LINSOLVE** do Matlab.

É necessário escrever $N-2$ equações nos $N-2$ pontos interiores do domínio de integração, variando k de 2 até $N-1$.



i) Condições fronteira com diferenças avançadas

CF de Neumann → A 1ª equação terá que ser uma forma discretizada da condição fronteira, $T'(0) = 0$.

A forma mais simples corresponderá a considerar-se a aproximação de diferenças finitas avançadas, ou progressivas, para a 1ª derivada :

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} \quad \Rightarrow \quad 0 = \frac{T_2 - T_1}{h} \quad \Leftrightarrow \quad -T_1 + T_2 = 0$$

CF de Dirichet → A última equação representa a condição fronteira, CF, $T(R) = 20^\circ\text{C}$.

Escreve-se diretamente: $T_N = 20$

A informação necessária para a escrita da matriz **A** e do vetor **b**, dos termos independentes, é conhecida. Obtém-se a seguinte forma matricial do sistema de equações:



$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 - \frac{h}{2r_2} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_2} & & \\ & 1 - \frac{h}{2r_3} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 - \frac{h}{2r_{N-1}} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_{N-1}} \\ & & & & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_{N-1} \\ T_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ \vdots \\ -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ 20 \end{bmatrix}$$

No MATLAB, depois de se escrever **A** e **b**, a solução numérica do sistema de equações é dada imediatamente por:

$$\mathbf{T} = \mathbf{lin solve}(\mathbf{A}, \mathbf{b});$$



Atendendo a que temperatura do último ponto é conhecida, $T_N = 20$, pode fazer-se uma simplificação do sistema. Sendo a penúltima equação dada por:

$$\left(1 - \frac{h}{2r_{N-1}}\right)T_{N-2} - 2T_{N-1} + \left(1 + \frac{h}{2r_{N-1}}\right)T_N = -\frac{h^2Q}{\lambda}$$

Substituindo o valor de $T_N = 20$, a equação fica com mais um termo independente, que pode passar para o 2º membro:

$$\left(1 - \frac{h}{2r_{N-1}}\right)T_{N-2} - 2T_{N-1} = -\frac{h^2Q}{\lambda} + \left(1 + \frac{h}{2r_{N-1}}\right) * 20$$

Então a última equação torna-se redundante.

A forma matricial do sistema de equações passa a ser:



$$\begin{bmatrix}
 -1 & 1 & & & \\
 1 - \frac{h}{2r_2} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_2} & & \\
 & 1 - \frac{h}{2r_3} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_3} & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & 1 - \frac{h}{2r_{N-1}} & -2
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 T_1 \\
 T_2 \\
 T_3 \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 T_{N-1}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 0 \\
 -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\
 -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 -\frac{h^2 Q}{\lambda} - \left(1 + \frac{h}{2r_{N-1}}\right) * 20
 \end{bmatrix}$$

É necessário adicionar a última temperatura ao *output* do **linsolve**:

$$T = [\mathbf{linsolve}(\mathbf{A}, \mathbf{b}); 20];$$

Esta forma alternativa, de escrever o sistema, não altera em nada os resultados numéricos. Foi apresentada apenas para se ter uma descrição mais completa dos métodos que podem ser usados.



ii) Condições fronteira com diferenças centradas (Ponto fictício)

Ao usar-se a expressão de diferenças avançadas, ou progressivas, para a 1ª das N equações, considerou-se uma aproximação de 1ª ordem, enquanto que nas outras equações, as aproximações são de 2ª ordem. Esta aproximação poderá não ter grande impacto nos resultados, especialmente se h for pequeno (outra consequência é que temos sempre $T_1 = T_2$).

Para se obter uma aproximação de 2ª ordem na condição fronteira de Neumann deve considerar-se um ponto fictício, $r_{fic} = r_{min} - h$, com uma temperatura T_{fic} .

Neste caso, a primeira equação é substituída por duas equações.

A primeira equação obtém-se a partir da discretização da equação geral, para $k=1$:

$$\left(1 - \frac{h}{2r_1}\right) T_{fic} - 2T_1 + \left(1 + \frac{h}{2r_1}\right) T_2 = -\frac{h^2 Q}{\lambda}$$

A segunda equação resulta da aplicação da CF de Neumann, cuja derivada é aproximada por diferenças centradas, uma aproximação de 2ª ordem:

$$\Rightarrow \frac{-T_{fic} + T_2}{2h} = 0$$



Desta última equação obtém-se $\Rightarrow T_{fic} = T_2$.

Substituindo na primeira equação vem, $-2T_1 + 2T_2 = -\frac{h^2 Q}{\lambda}$

Esta equação passa a ser a 1ª equação do sistema. A forma matricial do sistema passa a ser:

$$\begin{bmatrix} -2 & 2 & & & \\ 1 - \frac{h}{2r_2} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_2} & & \\ & 1 - \frac{h}{2r_3} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_3} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 - \frac{h}{2r_{N-1}} & -2 & 1 + \frac{h}{2r_{N-1}} \\ & & & & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_{N-1} \\ T_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ \vdots \\ -\frac{h^2 Q}{\lambda} \\ 20 \end{bmatrix}$$

Como habitual, a solução pode ser obtida a partir de,

$$T = \mathbf{linsolve}(\mathbf{A}, \mathbf{b});$$



B. O Método do ‘SHOOTING’: O Método da secante aplicado ao ‘shooting’

Nos métodos de shooting, o processo de ajuste das condições iniciais e/ou parâmetro (ou valor próprio) no final de cada integração é uma parte importante do algoritmo.

No caso presente usa-se para esse fim o método da secante.

Considere-se um problema geral de valores fronteira,

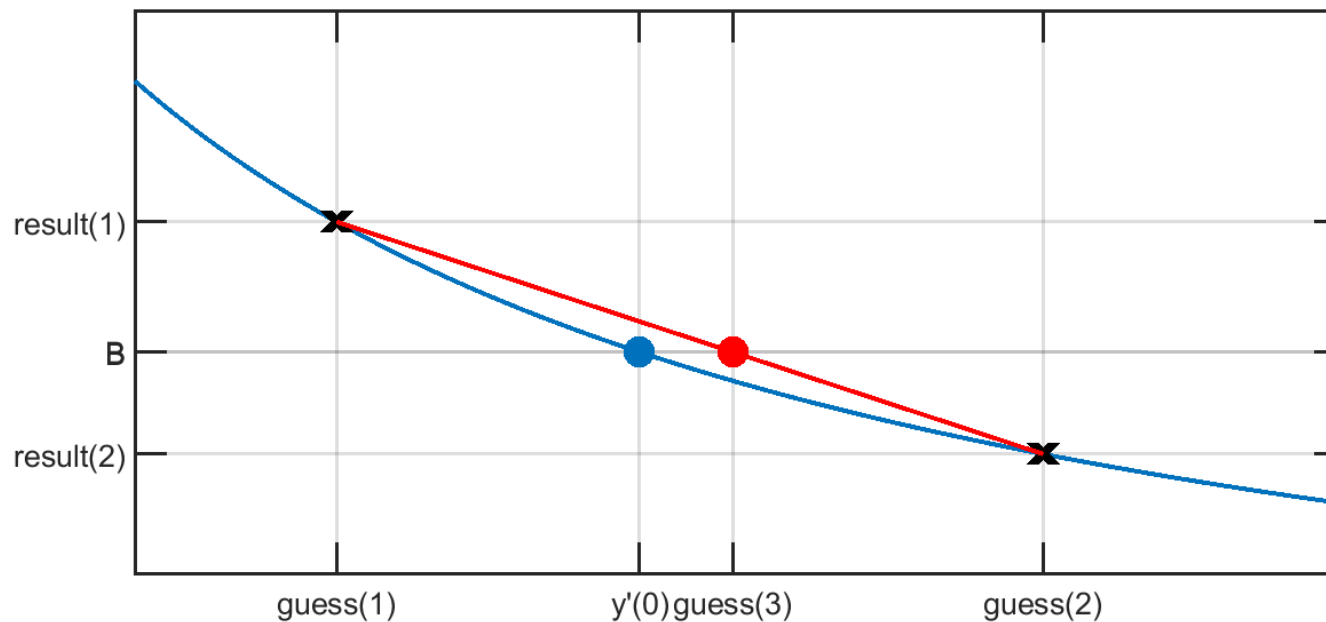
$$\frac{d^2 y}{dt^2} = f(y, y', t), \quad y(t_0) = A \quad e \quad y'(t_f) = B$$

- Falta a condição inicial $y'(t_0)$, para a qual se vai considerar uma 1ª estimativa **guess(1)**.
- Integra-se a equação considerando $y(t_0) = A$ e $y'(t_0) = \mathbf{guess(1)}$, deste t_0 até t_f obtendo-se $y(t_f) = \mathbf{result(1)}$.
- Usa-se uma outra estimativa, não muito afastada da 1ª, **guess(2)**.
- Integra-se novamente a equação com valores iniciais não muito distintos, usando, $y(t_0) = A$ e $y'(t_0) = \mathbf{guess(2)}$, obtendo-se $y(t_f) = \mathbf{result(2)}$.



O Método da secante aplicado ao ‘shooting’

Partindo-se do princípio que $y(t_f)$ é uma função de $y'(t_0)$, (*guess, result*) são pontos dessa função, conforme está ilustrado no gráfico.



O Método da secante aplicado ao ‘shooting’

Usa-se a secante para se obter uma nova estimativa para $y'(t_0)$, a **guess(3)**, para a qual a solução tem como valor fronteira um valor mais próximo de B.

Em resumo,

- Declive da secante :
$$m = \frac{\text{result}(2) - \text{result}(1)}{\text{guess}(2) - \text{guess}(1)}$$
- Ordenada na origem :
$$b = \text{result}(2) - m \times \text{guess}(2)$$
- Nova estimativa para $y'(t_0)$, ou seja $\text{guess}(3)$:
$$\text{guess}(3) = \text{guess}(2) + \frac{B - \text{result}(2)}{m}$$

Integra-se novamente, com $y(t_0) = A$ e $y'(t_0) = \text{guess}(3)$, obtendo-se $y(t_f) = \text{result}(3)$.

O processo terá que ser repetido até que as duas últimas estimativas para $y'(t_0)$ (**guesses**) não difiram mais que uma determinada tolerância pré-estabelecida.



O Método da secante aplicado ao ‘shooting’

No caso genérico, o método da secante pode resumir-se a:

- Declive da secante:

$$m = \frac{\text{result}(i) - \text{result}(i - 1)}{\text{guess}(i) - \text{guess}(i - 1)}$$

- Nova estimativa para $y'(t_0)$, ou seja $\text{guess}(i+1)$

$$\text{guess}(i + 1) = \text{guess}(i) + \frac{B - \text{result}(i)}{m}$$

Em que:

- a **guess(i)** é a estimativa sucessiva de um valor inicial ou parâmetro, que não se conhece e que se pretende determinar;
- o **result(i)** é o resultado que se obtém com a **guess(i)**, normalmente para um valor na fronteira;
- **B** é o resultado pretendido para **result**, que nos foi dado no início do problema.



3) PROBLEMA de VALORES PRÓPRIOS

Considere-se novamente o problema da corda com as extremidades fixas. A equação que rege a evolução de uma perturbação ao longo da corda é a seguinte:

$$\frac{T}{\mu} \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \omega^2 y(x) = 0$$

Para a resolução numérica desta equação, considera-se uma grelha de N pontos discretos no domínio de integração, neste caso entre 0 e L. para um dado ponto de índice k , substitui-se a segunda derivada pela sua aproximação de diferenças finitas centradas:

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} y_k$$



Esta equação dá origem ao seguinte sistema de N equações algébricas:

$$\begin{cases} y_1 = 0 \\ \frac{y_3 - 2y_2 + y_1}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} y_2 \\ \frac{y_4 - 2y_3 + y_2}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} y_3 \\ \vdots \\ \frac{y_N - 2y_{N-1} + y_{N-2}}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} y_{N-1} \\ y_N = 0 \end{cases}$$

As N-2 equações centrais podem ser expressas em notação matricial, depois de se substituir os valores de y_0 e y_N :



$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \end{bmatrix} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} h^2 \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \end{bmatrix}$$

Esta é a equação de valores próprios da matriz A :

$$A\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$$

Como A é uma matriz tridiagonal, é bastante fácil determinar todos os valores próprios.

Os 5 valores próprios de módulo mais baixo, por exemplo, permitem-nos obter as frequências angulares dos primeiros 5 modos normais de vibração.

O erro numérico é tanto menor quanto mais baixo é o modo normal de vibração.

