

Problemas de valores fronteira (boundary value problems — BVP)

Apresentação 4 — Aula Teórica 4 (T2) ou 5 (T1)

Física Computacional

Departamento de Física
Universidade de Aveiro

11 ou 12 de março de 2019

Condições iniciais e condições fronteira

Até agora, em todos os problemas que tratámos, tínhamos um conhecimento completo das condições iniciais (em t_0) e nenhuma restrição *a priori* em relação aos valores que as variáveis independentes e as suas derivadas iriam ter em instantes posteriores. Como se tratavam de sistemas determinísticos, descritos por equações diferenciais ordinárias, podíamos obter as soluções a partir de métodos numéricos (com os erros correspondentes ao método escolhido).

Vamos agora considerar uma situação diferente, em que não sabemos todas as condições iniciais necessárias para saber como o sistema vai evoluir, mas temos informação sobre o que acontece, ou o que queremos que aconteça, num instante posterior.

Um exemplo típico é o lançamento de um projétil em que sabemos o módulo da velocidade inicial e queremos ajustar o ângulo de lançamento, de tal maneira 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 valor fronteira — Método de *shooting*

Os problemas que tratámos até agora são problemas de valor inicial e aqueles que acabámos de apresentar são problemas de valor fronteira.

Uma maneira de tratar estes últimos problemas consiste em arbitrar um conjunto de condições iniciais (no exemplo dado, escolher um ângulo de lançamento), verificar o quanto o resultado se afasta das condições fronteira desejadas e ajustar as condições iniciais de maneira a aproximarmo-nos da solução pretendida, repetindo o processo tantas vezes quantas forem necessárias.

Este método denomina-se Método de *shooting*. Para cada escolha de valores iniciais, usa-se um dos algoritmos para problemas de valor inicial já estudados.

Problemas de valor fronteira

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 não nos permite resolver o problema (numericamente) e que pode ser determinado a partir do conhecimento das condições fronteira.

Um exemplo pode ser o caso em que o C_D do projétil não é conhecido, mas pode ser determinado a partir do valor experimental do alcance para umas dadas condições iniciais.

BVP — Problemas de valores fronteira

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.

Note que a definição acima não descreve completamente os problemas que podem ser estudados pelo método de *shooting*. Quando determinamos, por exemplo, o ângulo de lançamento para ter o valor desejado do alcance de um projétil, não fixamos os valores das variáveis dependentes para um dado valor da variável independente (o tempo). O que queremos é que uma variável dependente tenha um dado valor quando uma outra tem um valor especificado.

Métodos numéricos para BVPs

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

① **Métodos de *Shooting*** que consistem em:

- arbitrar um conjunto de condições iniciais (ou valor de um parâmetro desconhecido);
- integrar numericamente 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 aproximarmos da solução pretendida;
- repetir o processo tantas vezes quantas forem necessárias.

② **Métodos de diferenças finitas** que reescreve a equação diferencial na forma de um sistema de equações algébricas, usando aproximações de diferenças finitas para as derivadas.

Exemplo — Modos normais de vibração

Consideremos uma corda com densidade linear μ que está sujeita a uma tensão T e que se encontra fixa nas duas extremidades, $x = 0$ e $x = L$, pelo que $y(0) = y(L) = 0$. Sabemos que a corda vibra com 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 .

Problema de valores próprios

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 das vibrações da corda pode ser reescrita

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

onde identificamos o valor próprio como $-\frac{\mu}{T}\omega^2$. No entanto, como T e μ são constantes, é usual designar ω como o valor próprio.

Modos normais de vibração

Uma vez que a equação diferencial é linear, se uma dada função $y(x)$ for solução, o produto dessa função por qualquer constante é ainda uma solução, com o mesmo valor próprio. Assim, embora tenhamos apenas os valores de y nas fronteiras $y(0) = y(L) = 0$, podemos usar um qualquer valor não nulo de $y'(0)$, obtendo 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 um tipo de BVPs – geralmente, neste tipo de problemas, faltam-nos condições iniciais e o valor dos valores próprios.

Como já vimos, existem outros tipos de BVPs que não são problemas de valores próprios, mas para os quais também não conhecemos um dado parâmetro ou condição inicial.

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.

Vamos voltar a trabalhar com base na série de Taylor, para encontrar aproximações de diferenças finitas para as derivadas.

Método das diferenças finitas

$$y(x + h) = y(x) + y^{(1)}(x) \cdot h + \mathcal{O}(h^2)$$

$$y(x - h) = y(x) - y^{(1)}(x) \cdot h + \mathcal{O}(h^2)$$

Usando a primeira expansão, obtemos a aproximação de **diferenças progressivas** para a primeira derivada:

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

Usando a segunda expansão, obtemos a aproximação de **diferenças regressivas** para a primeira derivada:

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

Método das diferenças finitas

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

Subtraindo as duas expressões (expandidas só até h^2), obtemos a aproximação de **diferenças centradas** para a primeira derivada:

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

Somando as duas expansões, obtemos a aproximação de **diferenças centradas para a segunda derivada**:

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

Modos normais de vibração — diferenças finitas

Voltemos à equação diferencial:

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

Consideremos 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:

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

Modos normais de vibração — diferenças finitas

A equação diferencial deu origem a um sistemas de N equações algébricas:

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1 = 0 \\ \frac{y_3 - 2y_2 + y_1}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} \cdot y_2 \\ \frac{y_4 - 2y_3 + y_2}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} \cdot y_3 \\ \vdots \\ \frac{y_N - 2y_{N-1} + y_{N-2}}{h^2} = -\frac{\omega^2 \mu}{T} y_{N-1} \\ y_N = 0 \end{array} \right.$$

Modos normais de vibração — diferenças finitas

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

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

Esta é a equação de valores próprios da matriz \mathbf{A} :

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

Modos normais de vibração — diferenças finitas

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.

Diferenças finitas: outro tipo de problema

No Problema 4.3, vamos estudar a aplicação do método das diferenças finitas a um problema que não é de valores próprios. Para compreender o que está em causa, é mais fácil partir deste problema particular.

Problema 4.3: A equação seguinte modela a distribuição de temperatura $T(r)$ numa resistência elétrica cilíndrica de raio R , quando a temperatura da superfície externa, $T(R)$, é igual à temperatura ambiente 20°C . A outra condição fronteira é $T'(0) = 0$.

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

onde Q é o calor produzido por unidade de tempo e por unidade de volume e λ é a condutividade térmica. 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 primeira e de segunda ordem, vem:

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

Diferenças finitas: outro tipo de problema

Multiplicando tudo por h^2 e rearranjando, ficamos com

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

Existem diferenças muito importantes em relação ao problema estudado anteriormente:

- 1 Já não se trata de um problema de valores próprios, apenas um sistema de N equações que nos permitirão obter estimativas para os N valores da temperatura na malha discretizada.
- 2 A condição fronteira para o primeiro ponto é agora uma condição fronteira de Neumann em que o que está especificado é o valor numérico da derivada.
- 3 A condição fronteira para o último ponto continua a ser uma condição fronteira de Dirichlet (valor especificado da variável dependente), mas o valor agora não é zero.

Diferenças finitas: outro tipo de problema

Vamos escrever o sistema de equações na forma matricial

$$AT = b$$

para usar posteriormente a rotina `linsolve` do MATLAB. Para escrever as $N - 2$ equações para os pontos internos, usamos a expressão do slide anterior, com k a ir de 2 a $N - 1$.

A primeira equação tem que ser uma forma discretizada da condição fronteira $T'(0) = 0$. A alternativa mais simples é usar a aproximação de diferenças finitas progressivas para a primeira derivada:

$$\frac{-T_1 + T_2}{h} = 0 \Leftrightarrow -T_1 + T_2 = 0.$$

A última equação, que representa a condição fronteira $T(R) = 20$, escreve-se diretamente:

$$T_N = 20$$

Diferenças finitas: outro tipo de problema

Já temos toda a informação necessária para escrever a matriz \mathbf{A} e o vetor \mathbf{b} dos termos independentes. A forma matricial do sistema de equações é

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

No MATLAB, depois de escrever \mathbf{A} e \mathbf{b} , a solução numérica do sistema de equações é dada imediatamente por

`T = linsolve(A,b);`

Diferenças finitas: outro tipo de problema

A penúltima equação é

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

Como sabemos que $T_N = 20$, podemos fazer a substituição e ficamos com mais um termo independente que vai para o membro da direita:

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

A última equação torna-se redundante.

Diferenças finitas: outro tipo de problema

A forma matricial do sistema de equações passa a ser

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

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

```
T = [ linsolve(A,b); 20 ];
```

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

Diferenças finitas: outro tipo de problema

Ao usar a expressão de diferenças finitas progressivas para a primeira das N equações, estamos a aplicar uma aproximação de primeira ordem, enquanto que, nas outras equações, as aproximações são de segunda ordem. Isto pode não afetar muito os resultados, especialmente se h for pequeno (outra consequência é que temos sempre $T_1 = T_2$).

A maneira mais comum de obter uma aproximação de segunda ordem nesta condição fronteira de Neumann é considerar um ponto fictício em $r_{\text{fic}} = r_{\text{min}} - h$, com uma temperatura T_{fic} . A primeira equação é substituída por duas outras.

A primeira delas é óbvia,

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

Diferenças finitas: outro tipo de problema

A segunda equação é a expressão de diferenças finitas centradas para a primeira derivada, que é uma aproximação de segunda ordem:

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

Seria possível colocar estas duas equações no sistema, mas é muito mais elegante substituir $T_{\text{fic}} = T_2$, que resulta da segunda equação, na primeira equação. Ficamos com

$$-2T_1 + 2T_2 = -\frac{h^2 Q}{\lambda},$$

que passa a ser a nossa primeira equação.

Diferenças finitas: outro tipo de problema

A forma matricial do sistema de equações é agora

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

Como habitual, a solução pode ser obtida a partir de

`T = linsolve(A,b);`

Método da secante aplicado ao shooting

Nos métodos de shooting, o processo de ajuste de condições iniciais e/ou parâmetros (ou valor próprio) no final de cada integração é uma parte importante do algoritmo. O método proposto em FC para esta parte do algoritmo é o **método da secante**.

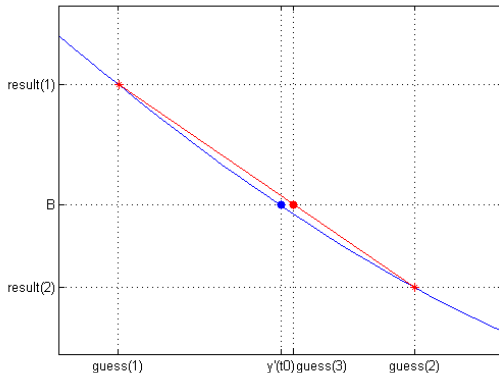
Considere como exemplo um problema de valores fronteira

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

- Falta-nos a condição inicial $y'(t_0)$, para a qual usamos uma primeira estimativa *guess*(1)
- Integramos a equação usando $y(t_0) = A$ e $y'(t_0) = \text{guess}(1)$ desde t_0 até t_f obtendo $y(t_f) = \text{result}(1)$.
- Usamos uma outra estimativa, não muito afastada da primeira, *guess*(2).
- Voltamos a integrar, agora usando $y(t_0) = A$ e $y'(t_0) = \text{guess}(2)$, obtendo $y(t_f) = \text{result}(2)$

Método da secante aplicado ao shooting

Partindo do princípio que $y(t_f)$ é uma função de $y'(t_0)$, $(guess, result)$ são pontos dessa função, conforme se ilustra no gráfico. Usamos a secante para estimar uma nova $guess(3)$ para a qual a solução tem como valor fronteira um valor mais próximo de B .



Método da secante aplicado ao shooting

- Declive da secante:

$$m = \frac{result(2) - result(1)}{guess(2) - guess(1)}$$

- Ordenada na origem:

$$b = result(2) - m \times guess(2)$$

- Nova estimativa para $y'(t_0)$, ou seja $guess(3)$:

$$guess(3) = guess(2) + \frac{B - result(2)}{m}$$

- Integramos de novo, agora usando $y(t_0) = A$ e $y'(t_0) = guess(3)$, obtendo $y(t_f) = result(3)$.
- 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.

Método da secante aplicado ao shooting

No caso genérico, o método da secante fica:

- Declive da secante:

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

- Nova estimativa para $y'(t_0)$, ou seja $guess(i+1)$:

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

Lembre-se que:

- a $guess(i)$ é a estimativa sucessiva de um valor inicial ou parâmetro que não conhecemos e queremos determinar;
- o $result(i)$ é o resultado que vamos obtendo com a $guess(i)$, usualmente para um valor na fronteira;
- B é o resultado pretendido para $result$ que nos foi dado no início do problema.