

Métodos Numéricos para a resolução de Problemas de Valor de Contorno

Thiago de Sousa Goveia

16 de Janeiro de 2017

1 Problema de Valor de Contorno

A solução de um problema regido por um modelo matemático depende de informações ligadas ao contexto em que tal problema ocorre. Estas informações podem dizer a respeito das condições iniciais ou das condições de contorno. Condições iniciais caracterizam um **Problema de Valor Inicial (PVI)** e geralmente são relativas ao instante de tempo inicial do processo. As condições de contorno por sua vez, caracterizam um **Problema de Valor de Contorno (PVC)** e normalmente são dadas em função do limite espacial do processo em questão [2, p. 447]. Desta forma, enquanto os PVI geralmente relatam processos transientes, isto é, variantes no tempo, os PVC lidam com problemas em estado estacionário.

O PVI de um modelo de ordem N é composto da equação do processo e do valor inicial da variável dependente e de suas derivadas, até a ordem $N - 1$, como mostra a equação a seguir:

$$\begin{cases} y'' + p(t)y' + q(t)y = f(t) \\ y(t_0) = y_0 \\ y'(t_0) = y'_0 \end{cases} \quad (1)$$

De forma análoga, o PVC é definido a partir da equação que modela o processo e suas condições nos pontos de contorno ou borda.

$$\begin{cases} y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = f(x) \\ y(x_i) = \alpha \\ y'(x_f) = \beta \end{cases} \quad (2)$$

Portanto, se as condições adicionais forem dadas em um único instante (ou ponto), tem-se o PVI do processo. Caso sejam dadas em dois ou mais pontos distintos, tem-se o PVC.

As condições de contorno usualmente podem ser classificadas como condições de Dirichlet ou de Neumann. As **condições de Dirichlet** são também conhecidas como **essenciais** e são estabelecidas sobre a variável dependente. Já

as **condições de Neumann** são condições **naturais** e são impostas sobre as derivadas da variável dependente. A seguir são dados alguns exemplos.

$$\begin{array}{ll} y(x_k) = y_k & \text{Cond. Dirichlet} \\ y(x_k) = 0 & \text{Cond. Dirichlet Homogênea} \\ y'(x_k) = y_k & \text{Cond. Neumann} \\ y'(x_k) = 0 & \text{Cond. Neumann Homogênea} \end{array} \quad (3)$$

A resolução analítica de PVC, ou mesmo de PVI, se torna impraticável à medida em que a complexidade do modelo, ou do contexto em que ele ocorre, aumenta. Tal complexidade pode ocorrer, por exemplo, com a existência de coeficientes variáveis, regiões irregulares ou com condições de contorno inadequadas, existência de interfaces ou devido à grande quantidade de detalhes do problema [4, p. 410].

Métodos numéricos apropriados podem ser utilizados na obtenção de uma solução aproximada para tais problemas. Neste trabalho serão abordados o **Método das Diferenças Finitas (MDF)** e o **Método dos Elementos Finitos (MEF)**.

A fim ilustrar o PVC, considere o seguinte exemplo unidimensional, no qual um dado domínio Ω , contido no conjunto dos números reais, é limitado por uma borda Γ .

$$\begin{cases} \Omega = [a, b] \\ \Gamma = \{a, b\} \end{cases} \quad (4)$$

Um PVC aplicado sobre a região $\Omega \cup \Gamma$ pode ser então dado pelo sistema a seguir. A parte Γ_D da fronteira possui condição de contorno de Dirichlet, enquanto a parte Γ_N possui condição de Neumann. Portanto, tem-se que $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$.

$$\begin{cases} y''(x) = p(x)y'(x) + q(x)y(x) + r(x) & \text{em } \Omega \\ y(a) = \alpha & \text{em } \Gamma_D \\ y'(b) = \beta & \text{em } \Gamma_N \end{cases} \quad (5)$$

Resolver este problema consiste em encontrar a curva do modelo que satisfaz às condições de contorno. Um exemplo de curva solução é dado na figura 1. É importante notar que, dependendo do modelo e das condições adicionais, um PVC pode possuir uma, nenhuma ou múltiplas soluções. Este comportamento se assemelha ao de equações algébricas lineares [2, p. 448]. Conforme o princípio de Hadamard, o problema é dito **bem posto** se tiver solução única, caso contrário, será dito **mal posto**.

2 Método das diferenças finitas

Como dito anteriormente, métodos numéricos são utilizados para aproximar soluções de equações diferenciais. O MDF tem como objetivo, discretizar o

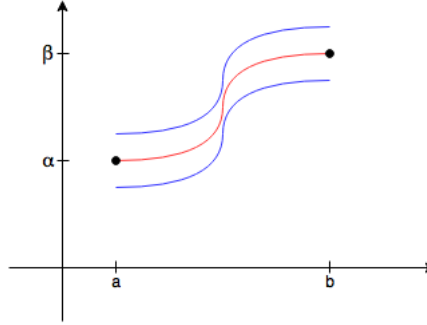


Figura 1: PVC: Encontrar a curva solução entre os pontos (a, α) e (b, β)

domínio do problema e substituir cada derivada da equação por um quociente-diferença adequado [3, p. 684].

Sendo o domínio Ω unidimensional e contínuo, o mesmo pode ser discretizado particionando-se o intervalo $]a, b[$ em subintervalos iguais. Para isso, seleciona-se um conjunto de N pontos igualmente espaçados entre a e b , e dessa forma, $N + 1$ subintervalos são obtidos. O conjunto $\Omega \cup \Gamma$ pode então ser representado na como um conjunto de valores discretos x_i , como mostra a equação a seguir:

$$x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, N + 1 \quad (6)$$

O incremento h corresponde ao comprimento de cada subintervalo e é dado por:

$$h = \frac{b - a}{N + 1} \quad (7)$$

Nos pontos interiores x_i com $i = 1, 2, \dots, N$, isto é, dentro da borda $\{a, b\}$ ou no domínio Ω , a equação diferencial a ser aproximada é dada na primeira equação do sistema 5. Deseja-se obter o valor de $y(x_i)$ como uma média do valor de seus vizinhos $y(x_i + h)$ e $y(x_i - h)$. Esta abordagem é chamada de diferença centrada, uma vez que o ponto $y(x_i)$ a ser obtido é o ponto central de uma vizinhança.

A aproximação da derivada é feita por meio da expansão em série de Taylor truncada. Como a equação a ser aproximada é de ordem 2, a expansão deve ser feita até uma ordem superior a 2. No caso do exemplo apresentado, a expansão foi feita até a ordem 3 e a notação do grande O foi utilizada para denotar o erro do truncamento.

$$y(x_i + h) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + O(h^4) \quad (8)$$

$$y(x_i - h) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + O(h^4) \quad (9)$$

As equações 8 e 9 são as expansões truncadas. A soma dessas equações fornece o valor da segunda derivada na forma de diferença centrada.

$$y''(x_i) = \frac{y(x_i + h) - 2y(x_i) + y(x_i - h) - O(h^2)}{h^2} \quad (10)$$

De forma similar, para a derivada de primeira ordem, obtém-se

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i + h) - y(x_i - h) - O(h)}{2h} \quad (11)$$

Simplificando a notação de forma que $y_{i+1} = y(x_i + h)$ e $y_{i-1} = y(x_i - h)$ o sistema dado em 5 pode ser representado em termos discretos por meio o sistema 12. Como se trata de uma aproximação, as parcelas relativas ao erro foram desconsideradas.

$$\begin{cases} \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = p(x_i) \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q(x_i)y + r(x_i) \\ y(a) = \alpha \\ y'(b) = \beta \\ i = 0, 1, \dots, N+1 \end{cases} \quad (12)$$

Reorganizando a equação do modelo de 12 no formato apresentado pela equação 13 a solução se torna computacionalmente trivial. Iterando os valores de i , o conjunto de equações lineares pode ser colocado na forma matricial, sendo a matriz dos coeficientes, uma matriz tridiagonal.

$$e_i y_{i-1} + c_i y_i + d_i y_{i+1} = r_i \quad (13)$$

$$\begin{bmatrix} c_1 & d_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ e_2 & c_2 & d_2 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_N & c_N & d_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_N \end{bmatrix} \quad (14)$$

A discretização obtida em 12 pode ser expandido para n dimensões. As equações 15 e 16 mostram a equação de laplace em duas dimensões e a mesma equação discretizada pelo método das diferenças finitas centradas.

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} = 0 \quad (15)$$

$$\begin{cases} \frac{u(x_{i+1}, y) - 2u(x, y) + u(x_{i-1}, y))}{h^2} + \frac{u(x, y_{i+1}) - 2u(x, y) + u(x, y_{i-1}))}{h^2} = 0 \\ i = 0, 1, \dots, N+1 \end{cases} \quad (16)$$

3 Método dos Elementos Finitos

O método dos elementos finitos, é um método numérico, tal como o método das diferenças finitas, no entanto, é mais genérico e adequado às aplicações do mundo real. Neste método, o domínio do problema é visto como uma coleção de subdomínios, sobre os quais, a equação que modela o problema é aproximada por um método variacional. [5, p. 13]

3.1 Método Variacional

Os métodos variacionais são técnicas utilizadas para extremizar o valor de um funcional em um determinado espaço de funções. Por extremizar entende-se encontrar o valor mínimo, máximo ou o ponto de inflexão do funcional. Sistemas físicos, segundo o princípio de Hamilton ou princípio da mínima ação, tendem a minimizar sua energia interna ao realizar trabalho. Dessa forma, problemas envolvendo modelos matemáticos podem ser resolvidos considerando-se o problema de minimização de energia equivalente. (**Nota:** Um apêndice sobre elasticidade plana, princípio de Hamilton e análise funcional deve ser acrescentado).

Um funcional $I(y)$ é uma regra que associa cada função u de um domínio Ω a um único número real:

$$I : y \rightarrow \mathbb{R} \quad (17)$$

Em linhas gerais, pode ser entendido como uma função de funções. Um exemplo típico de funcional é a integral definida a seguir, a qual mapeia a função y em um valor real.

$$I = \int_a^b u(y, y', x) dx \quad (18)$$

Se uma função $y(x)$, por exemplo, minimiza o funcional, qualquer variação infinitesimal α em $y(x)$ produzirá um valor maior no funcional I , o qual deixará de satisfazer a condição de mínimo. O operador variacional δ desloca a função y em uma distância igual a $\alpha\eta(x)$, sendo α uma constante que tende a zero e η uma função suave definida em $[a, b]$, tal que $\eta(a) = \eta(b) = 0$.

Assim, tem-se:

$$\begin{cases} y(x, \alpha) = y(x) + \alpha\eta(x) \\ y(x, \alpha)' = y(x)' + \alpha\eta'(x) \\ \alpha\eta(x) = \delta y(x) \\ \alpha\eta'(x) = \delta y'(x) \end{cases} \quad (19)$$

Se substituirmos as equações de 19 em 18 o valor do funcional passa depender tanto da função y quanto de suas variações, realizadas pelo parâmetro α .

$$I(\alpha) = \int_a^b u(y(x, \alpha), y'(x, \alpha), x) dx \quad (20)$$

A variação do funcional I , pode ser entendida em termos diferenciais, como a derivada do funcional em relação ao incremento α da variação.

$$\delta I = \frac{\partial I}{\partial \alpha} \quad (21)$$

O valor extremo procurado (mínimo, máximo ou ponto de inflexão) é caracterizado por possuir a primeira derivada igual a zero, portanto:

$$\delta I = \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_a^b u(y(x, \alpha), y'(x, \alpha), x) dx = 0 \quad (22)$$

$$\delta I = \int_a^b \left(\frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \alpha} + \frac{\partial u}{\partial y'} \frac{\partial y'}{\partial \alpha} \right) dx = 0 \quad (23)$$

Das equações em 19 tem-se

$$\begin{aligned} \delta I &= \int_a^b \left(\frac{\partial u}{\partial y} \eta + \frac{\partial u}{\partial y'} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial y}{\partial \alpha} \right) dx \\ &= \int_a^b \left(\frac{\partial u}{\partial y} \eta + \frac{\partial u}{\partial y'} \eta' \right) dx = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

É importante notar que a variação ocorre apenas no conjunto imagem do funcional, assim $\frac{\partial x}{\partial \alpha} = 0$. Integrando separadamente o segundo termo por partes tem-se:

$$\delta I = \int_a^b \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial u}{\partial y'} \right) dx + \left[\frac{\partial u}{\partial y'} \eta(x) \right]_a^b \quad (25)$$

Uma vez que a variação no contorno é zero (fronteiras fixas), $\eta(a) = \eta(b) = 0$, o valor de δI é dado por:

$$\delta I = \int_a^b \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial u}{\partial y'} \right) dx = 0 \quad (26)$$

Sendo η uma função derivável em $[a, b]$, para que a igualdade 26 seja satisfeita, torna-se necessário que o termo entre parentesis seja igual a zero

$$\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial u}{\partial y'} = 0, \quad a < x < b \quad (27)$$

Do conjunto de funções admissíveis, a única função que minimiza o funcional I e portanto a energia interna do processo físico, é a mesma que resolve a equação 27, conhecida como Equação de Euler-Lagrange.

3.2 Método dos Resíduos ponderados

O método dos elementos finitos consiste em encontrar uma solução do problema diferencial por meio da aproximação por polinômios [1, p. 97]. Uma vez que aproximações geram erros, aqui chamados de resíduos, torna-se necessário reduzir tais resíduos para que se tenha uma aproximação de qualidade.

Uma vez que o método opera sobre um domínio Ω discreto, tal que $\Omega \approx \sum \Omega_j$, os polinômios utilizados na aproximação são definidos por partes no domínio Ω , isto é, são diferentes em apenas um intervalo do domínio.

O somatório definido na equação 28 aproximação da solução u de uma equação diferencial. As constantes c_j são os coeficientes desconhecidos e as funções ϕ_j , chamadas de funções de forma, são conhecidas, diferenciáveis por partes no domínio Ω e de respeitam as condições de contorno, ou seja $\phi_j(a) = \phi_j(b) = 0$.

$$u(x) \approx U_N(x) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(x) \quad (28)$$

Considere a forma geral da equação diferencial a ser resolvida, indicada pelo operador diferencial \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}u = f \quad (29)$$

Uma vez que U_N é um resultado aproximado de u , mas não necessariamente igual, a desigualdade a seguir é válida e conhecida como **residual da aproximação**.

$$R(x, c_j) = \mathcal{L}U_N - f \neq 0 \quad (30)$$

De modo a obter a aproximação mais adequada, deve-se minimizar o resíduo da aproximação em todo o domínio. Uma vez que não se pode requerer que os resíduos de todos os subdomínios sejam zero, como mostrado na equação 30, faz-se a ponderação dos mesmos por meio de funções w de forma a atender a condição residual dada a seguir:

$$\int_{\Omega} w_i(x) R(x, c_i) d\Omega = 0, \quad i = (1, 2, \dots, N) \quad (31)$$

O parâmetro w_i é um conjunto de funções integráveis linearmente independentes, chamadas de funções peso [5, p. 60].

Alguns casos especiais do método dos resíduos ponderados são obtidos a partir da escolha do parâmetro w_i

Método de Petrov-Galerkin	$w_i = \psi_i \neq \phi_i$	(32)
Método de Galerkin	$w_i = \phi_i$	
Método dos Mínimos quadrados	$w_i = \frac{d}{dx} \left(a(x) \frac{d\phi_i}{dx} \right)$	
Método da colocação	$\delta(x - x_i)$ (δ de Dirac)	

3.3 Formulação fraca do Problema

A forma fraca, ou forma variacional de uma equação diferencial é uma integral ponderada, equivalente à equação diferencial e às suas condições naturais de contorno. Por meio da forma fraca obtém-se um conjunto de equações algébricas relacionadas aos coeficientes desconhecidos (c_i). Para diferentes escolhas da função de peso, diferentes equações algébricas serão obtidas. [5, p. 64]

A obtenção da forma fraca será ilustrada com a equação diferencial a seguir e suas condições de contorno:

$$\mathcal{L}u = \frac{d^2u}{dx^2} = f, \quad u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta \quad (33)$$

Antes de se aplicar a discretização (ou interpolação) dada em 28, substitui-se o problema contínuo a ser resolvido, na integral dos resíduos ponderados:

$$R = \frac{d^2u}{dx^2} - f = 0 \quad (34)$$

$$\int_a^b w \left(\frac{d^2u}{dx^2} - f \right) dx = 0 \quad (35)$$

Integrando por partes:

$$w \frac{du}{dx} \Big|_a^b - \int_a^b \frac{du}{dx} \frac{dw}{dx} dx = \int_a^b w f dx \quad (36)$$

A equação 36 é denominada forma fraca da equação 33. Adicionalmente, verifica-se a condição de contorno. Se for considerado que $w(a) = w(b) = 0$ por exemplo, tem-se:

$$- \int_a^b \frac{du}{dx} \frac{dw}{dx} dx = \int_a^b w f dx \quad (37)$$

Substituindo a função contínua u por sua aproximação U_N e considerando o método de Galerkin:

$$- \int_a^b \frac{d}{dx} \sum_{j=1}^N c_j \phi_j \frac{d}{dx} \phi_i dx = \int_a^b f \phi_i dx, \quad i = (1, 2, \dots, N) \quad (38)$$

$$- \sum_{j=1}^N \int_a^b \frac{dc_j \phi_j}{dx} \frac{d\phi_i}{dx} dx = \int_a^b f \phi_i dx, \quad i = (1, 2, \dots, N) \quad (39)$$

$$\sum_{j=1}^N A_{ij} c_j = F_i, \quad i = (1, 2, \dots, N) \quad (40)$$

A equação 40 é a forma matricial obtida com a aplicação do método de Galerkin, a qual é esparsa e simétrica.

4 Conclusão Parcial

Este relatório parcial abordou a resolução de PVC por meio de métodos numéricos. Fica como encargo dos próximos relatórios:

1. Formalizar os métodos de aproximação (Ritz, Petrov-Galerkin...);
2. Incluir exemplos com desenvolvimento mais detalhados;
3. Criar apêndices de demonstração e rigor matemático;
4. Aprofundar abordagem do MEF e fazer considerações estruturais;
5. Incluir todas as referências e formatar as citações;
6. Incluir imagens png/svg;
7. Iniciar a abordagem da teoria eletromagnética.

Referências

- [1] Mark E. Davis. *Numerical Methods & modeling for chemical engineers*. John Wiley & sons, 2001.
- [2] William E. Boyce; Richard C. DiPrima. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. LTC, 2010.
- [3] Richard L. Burden; J. Douglas Faires. *Numerical Analysis*. Brooks/Cole, 2010.
- [4] David L. Powers. *Boundary Value Problems and Partial Differential Equations*. Elsevier, 2006.
- [5] J. N. Reddy. *An Introduction to the Finite Element Method*. McGraw Hill, 2006.