2 DESENVOLVIMENTO

O desenvolvimento da pesquisa se deu três fases principais, compreendendo o estudo de livros teóricos acompanhados da implementação de métodos numéricos. A primeira parte tem como foco os Problemas de Valores de Contorno e de Equações Diferenciais Parciais, usando como referência principal o livro (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2016). Como referências teóricas suplementares, serão usados os livros (ZILL, 2017) e (THOMAS, 1995).

A segunda fase terá foco nos métodos de Volumes Finitos para Equações Elípticas e Hiperbólicas, usando como referências os livros (ISAACSON; KELLER, 1966) e (SOUSA; ROCHA, 2022).

Por fim, a última fase abarca a simulação de problemas de transporte passivo em meios porosos, usando também como referência principal o livro (SOUSA; ROCHA, 2022).

2.1 Conceitos iniciais

Uma *equação diferencial* é uma equação contendo as derivadas de uma ou mais variáveis dependente, com respeito a uma ou mais variáveis independentes, classificadas quanto ao tipo, ordem e linearidade. Quanto ao tipo, têm-se as *equações diferenciais ordinárias* (EDO) onde somente existem derivadas ordinárias de uma ou mais variáveis dependentes com respeito a somente uma variável independente, como por exemplo

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} + 6y = 0. \tag{2.1}$$

Há também há as *equações diferenciais parciais* (EDP) que envolvem as derivadas parciais de uma ou mais variáveis dependentes de duas ou mais variáveis independentes, como por exemplo

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \tag{2.2}$$

Quanto a ordem, para ambos os tipos de equações diferenciais, é a ordem da maior derivada, por exemplo a seguinte equação diferencial é de segunda ordem

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 5\frac{dy}{dx} - 4y = e^x. \tag{2.3}$$

Para facilitar a representação de uma equação diferencial ordinária de enésima ordem em uma variável dependente, é possível expressar, com síbolos na forma geral,

$$F(x, y, y', ..., y^{(n)}) = 0 \tag{2.4}$$

onde F é uma função de valores reais com $n + 2$ variáveis. Também, é possível escrevê-las na *forma normal*, em que f é uma função contínua de falores reais, por

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y', ..., y^{(n-1)}), \tag{2.5}$$

onde, por exemplo, a forma normal da equação $4xy' + y = x$ é $y' = (x - y)/4x$. Quanto à linearidade, uma equação de enésima ordem é dita *linear* quando F é linear, ou seja, a EDO de enésima ordem quando

$$a_n(x)\frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x)\frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + ... + a_1(x)\frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x). \tag{2.6}$$

Logo, uma EDO é *não linear* quando simplesmente não é linear, tal como

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \sin y = 0. \tag{2.7}$$

2.2 Problemas de Valores de Contorno

Quando se tem uma equação linear de ordem maior que dois, em que as variáveis dependentes y ou suas derivadas são especificas em pontos diferentes, o problema é dito um *problema de valores de contorno*, tal qual

$$\begin{cases} a_2(x)\frac{d^2y}{dx^2} + a_1(x)\frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x) \\ y(a) = y_0 \\ y(b) = y_1 \end{cases} \tag{2.8}$$

onde os valores $y(a) = y_0$ e $y(b) = y_1$ são as *condições de contorno*. Para efeitos deste trabalho, serão considerados os problemas da forma

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y'), \text{para } x \in [a, b] \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \tag{2.9}$$

em que não será foco as soluções analíticas, mas sim as provenientes dos métodos numéricos a serem descritos. Dando seguimento, os próximos teoremas fornecem condições para gerais para garantir a existência e unicidade da solução para o problema de contorno de segunda ordem:

Teorema 2.1. *Supondo uma função f no problema de contorno*

$$y'' = f(x, y, y'), \textit{para } x \in [a, b], \textit{ com } y(a) = \alpha \textit{ e } y(b) = \beta,$$

contínua no conjunto

$$D = \{(x, y, y'') \mid \textit{para } x \in [a, b], \textit{ com } y \in (-\infty, \infty) \textit{ e } y' \in (-\infty, \infty)\}$$

e que as derivadas parciais f_y e $f_{y'}$ também sejam contínuas em D. Se *i.* $f_y(x, y, y') > 0, \forall (x, y, y'') \in D,$ *e*

ii. existir uma constante M *tal que*

$$|f_{y'}(x, y, y')| \leq M, \forall (x, y, y'') \in D,$$

então o problema de contorno tem uma solução única.

Por exemplo, o problema

$$y'' + e^{-xy} + \sin y' = 0, \text{para } x \in [1, 2], \text{ com } y(1) = y(2) = 0$$

tem solução única, pois

$$f_y(x, y, y') = xe^{-xy} > 0 \quad \text{e} \quad |f_{y'}(x, y, y')| = |-\cos y'| \leq 1.$$

Porém, quando se trata de uma equação diferencial linear, o teorema 2.1 pode ser simplificado para

Corolário 2.2. *Supondo o problema de contorno linear*

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \textit{para } x \in [a, b], \textit{ com } y(a) = \alpha \textit{ e } y(b) = \beta, \tag{2.10}$$

que satisfaça

i. $p(x)$, $q(x)$ *e* $r(x)$ *contínuas em* $[a, b]$, *e*

ii. $q(x) > 0$ *em* $[a, b]$.

2.2.1 Método das diferenças finitas para problemas lineares

Primeiramente, discretiza-se o domínio espacial para colocar sobre ele, uma malha que, por conveniência, será uniforme com espaçamento $h = \Delta x = 1/(N+1)$ como é mostrado a seguir

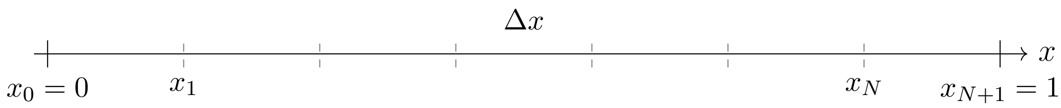

Figura 1 – Malha uniforme no intervalo $[0, 1]$.

Onde é possível acessar qualquer ponto x_k desta malha fazendo $x_k = k\Delta x$ com $k = 0, 1, ..., N+1$. Então, para prosseguir, pode-se notar que, para a função

$$y'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}, \tag{2.11}$$

é uma aproximação razoável, a expressão

$$y' \approx \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2\Delta x}, \tag{2.12}$$

e, de forma similar, é possível aproximar y'' com

$$y'' \approx \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{\Delta x^2}. \tag{2.13}$$

É possível chegar nesses resultados usando a expansão em polinômios de Taylor. É comum escrever essa fórmula de *diferenças centradas* usando a notação *big O* da forma

$$y' = \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \text{ e } y'' = \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2),$$

onde este $O(\Delta x^2)$ representa a ordem do *erro de truncamento*.

Definição 2.1. Dado uma função $f(s)$, $f(s) = O(\phi(s))$ para $s \in S$ se existe uma constante A tal que $|f(s)| \leq A|\phi(s)|$ para todo $s \in S$. Diz-se que $f(x)$ é a *big O* de $\phi(s)$ ou que $f(x)$ é da ordem de $\phi(s)$.

Usando estas definições, a mais das condições de contorno $y(a) = \alpha$ e $y(b) = \beta$, defini-se então um sistema de equações lineares com $w_0 = \alpha, w_{N+1} = \beta$ e

$$-\frac{w_{i+1} + 2w_i - w_{i-1}}{h^2} + p(x_i)\frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2h} + q(x_i)w_i = -r(x_i) \quad \forall i \in \{1, 2, ..., N\}. \tag{2.14}$$

Esta equação (2.14) pode ser reescrita como

$$-\left(1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right) w_{i-1} + (2 + h^2 q(x_i))w_i - \left(1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right) w_{i+1} = -h^2 r(x_i) \quad \forall i \in \{1, 2, ..., N\}$$

e então este pode ser expresso na forma de uma matriz tridiagonal $N \times N$, $Aw = b$, tal que

$$A = \begin{bmatrix} 2 + h^2 q(x_1) & -1 + \frac{h}{2}p(x_1) & 0 & \cdots & 0 \\ -1 - \frac{h}{2}p(x_1) & 2 + h^2 q(x_2) & -1 + \frac{h}{2}p(x_2) & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \cdots & -1 + \frac{h}{2}p(x_{N-1}) \\ 0 & \cdots & 0 & -1 - \frac{h}{2}p(x_N) & 2 + h^2 q(x_N) \end{bmatrix},$$

$$w = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{N-1} \\ w_N \end{bmatrix} \quad e \quad b = \begin{bmatrix} -r(x_1) + \left(1 + \frac{h}{2}p(x_1)\right) w_0 - r(x_2) \\ \vdots \\ -r(x_{N-1}) \\ -r(x_N) + \left(1 - \frac{h}{2}p(x_N)\right) w_{N+1} \end{bmatrix}.$$

O teorema a seguir fornecerá as consições sob as quais o sistema linear tridiagonal em questão tem uma solução única:

Teorema 2.3. *Supondo que p, q e r sejam contínuas em $[a, b]$. Se $q(x) \geq 0$ em $[a, b]$, então o sistema tridiagonal descrito anteriormente tem uma solução única; contanto que $h < 2/L$, em que $L = \max_{a \leq x \leq b} |p(x)|$.*

Nota-se que, apesar do teorema 2.3 garantir uma solução única para o problema de contorno (2.10), este não garante que $y \in C^4[a, b]$. Para garantir que o erro de truncamento seja de ordem $O(h^2)$, é preciso assegurar que $y^{(4)}$ é contínua em $[a, b]$ (devido à expansão do polinômio de Taylor).

2.2.2 Implementação do método das diferenças finitas linear

Para implementar o método descrito na seção anterior, será usada uma especialização da *Fatoração de Crout*[†] usando a vantagem da matriz A ser tridiagonal. De forma sucinta, o algoritmo fatora a matriz A em duas matrizes L e U, matrizes triagulares inferior e superior respectivamente, com a diagonal de U igual a 1 (o que o difere da fatoração de Doolitle), da forma que $Aw = LUw = b$, então

$$A = LU = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & l_{N,N-1} & l_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & u_{23} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & u_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Então, tomando $Uw = x$, resolve-se $Lx = b$ e então descobre-se w. O método, pela vantagem de A ser tridiagonal, resolve o sistema $N \times N$ realizando somente $(5N - 4)$ multiplicações/divisões e $(3N - 3)$ adições/subtrações, ao contrário de $O(2n^2)$ na fatoração *LU clássica*. O seguinte algoritmo implementa esta fatoração, bem como resolve o problema de contorno (2.10):

```
# Entrada: Extremidades A e B, contornos alpha e beta, e N >= 2.
# Saída:   Aproximações w_i de y(x_i), para cada i = 0, 1, ..., N+1.

// Passo 1
h = (B - A)/(N + 1);
x = A + h;
a[1] = 2.0 + h * h * q(x);
b[1] = (h / 2.0) * p(x) - 1.0;
d[1] = - h * h * r(x) + (1 + (h/2.0) * p(x)) * alpha;

```

[†] As condições que garantem a aplicação da fatoração de Crout, bem como notas e definições importantes usadas para o estudo desta seção, podem ser encontradas no apêndice A.

```
// Passo 2
for(int i = 2; i < N; i++){
  x = A + i * h;
  a[i] = 2.0 + h * h * q(x);
  b[i] =   (h / 2.0) * p(x) - 1;
  c[i] = - (h / 2.0) * p(x) - 1;
  d[i] = - h * h * r(x);
}

// Passo 3
x = B - h;
a[N] = 2.0 + h * h * q(x);
b[N] =   (h / 2.0) * p(x) - 1.0;
c[N] = - (h / 2.0) * p(x) - 1.0;
d[N] = - h * h * r(x) + (1.0 - (h/2.0) * p(x)) * beta;

// Passo 4
l[1] = a[1]; u[1] = b[1] / a[1]; z[1] = d[1] / l[1];

// Passo 5
for(int i = 2; i < N; i++){
  l[i] = a[i] - (c[i] * u[i-1]);
  u[i] = b[i] / l[i];
  z[i] = (d[i] - (c[i] * z[i-1])) / l[i];
}

// Passo 6
l[N] = a[N] - (c[N] * u[N-1]);
z[N] = (d[N] - (c[N] * z[N-1])) / l[N];

// Passo 7
w[0] = alpha; w[N] = z[N]; w[N+1] = beta;

// Passo 8
for(int i = N - 1; i >= 1; i--)
  w[i] = z[i] - (u[i]*w[i+1]);
```

Para ilustrar essa implementação, segue o exemplo do problema de valor de contorno:

$$y'' = -\frac{2}{x}y' + \frac{2}{x^2}y + \frac{\sin(\ln x)}{x^2}, \text{para } x \in [1,2], \text{ com } y(1) = 1 \text{ e } y(2) = 2,$$

com $N = 19$ e, portanto, $h = 0,01$, com a solução exata:

$$y = c_1 x + \frac{c_2}{x^2} - \frac{3}{10}\sin(\ln x) - \frac{1}{10}\cos\ln x,$$

em que

$$c_2 = \frac{1}{70}(8 - 12\sin(\ln 2) - 4\cos(\ln 2)) \approx -0,03921$$

e

$$c_1 = \frac{11}{10} - c_2 \approx 1,13921.$$

Então, a comparação entre a solução exata e a solução do algoritmo pode ser visualizada pelo gráfico:

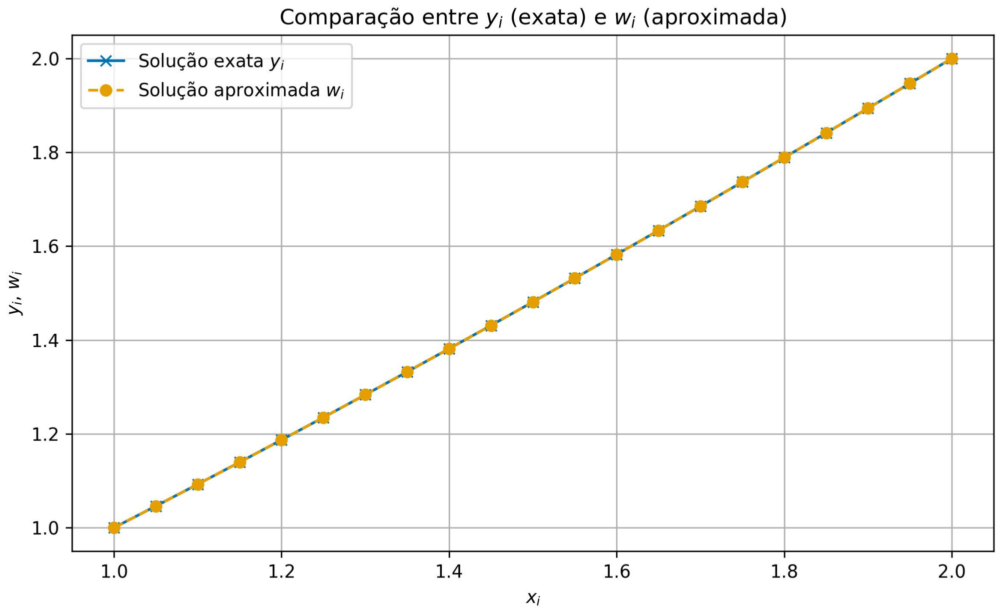

Figura 2 – Comparação y_i e w_i, com erro médio de $0,6809 \times 10^{-5}$.