

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
BRYAN AOLIABE SIQUEIRA

**DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
UTILIZANDO DIFERENÇAS FINITAS: UMA
ABORDAGEM NA EQUAÇÃO DO CALOR**

Blumenau

2019

BRYAN AOLIABE SIQUEIRA

DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
UTILIZANDO DIFERENÇAS FINITAS: UMA
ABORDAGEM NA EQUAÇÃO DO CALOR

Trabalho de Conclusão de Curso submetido ao Curso de Licenciatura em Matemática da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Licenciado em Matemática.

Orientadora: Profa. Dra. Louise Reips

Blumenau

2019

Catálogo na fonte pela Biblioteca Universitária da Universidade Federal de Santa Catarina.

Arquivo compilado às 3h do dia 13 de dezembro de 2019.

BRYAN AOLIABE SIQUEIRA

DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS UTILIZANDO DIFERENÇAS FINITAS: UMA ABORDAGEM NA EQUAÇÃO DO CALOR : / BRYAN AOLIABE SIQUEIRA; Orientadora, Profa. Dra. Louise Reips; , - Blumenau, , 27 de novembro de 2019.

60 p.

Trabalho de Conclusão de Curso - Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Matemática (MAT), Centro de Blumenau, Curso de Licenciatura em Matemática.

Inclui referências

1. Equações Diferenciais. 2. Discretização. 3. Diferenças Finitas. 4. Equações Parabólicas. 5. Equação do Calor. I. Profa. Dra. Louise Reips II. III. Curso de Licenciatura em Matemática IV. DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS UTILIZANDO DIFERENÇAS FINITAS: UMA ABORDAGEM NA EQUAÇÃO DO CALOR

CDU 02:141:005.7

BRYAN AOLIABE SIQUEIRA

**DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
UTILIZANDO DIFERENÇAS FINITAS: UMA
ABORDAGEM NA EQUAÇÃO DO CALOR**

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do Título de Licenciado em Matemática, e aprovado em sua forma final pelo Curso de Licenciatura em Matemática do Departamento de Matemática (MAT), Centro de Blumenau da Universidade Federal de Santa Catarina.

Blumenau, 27 de novembro de 2019.

Prof. Dr. André Vanderlinde da Silva
Coordenador do Curso de Licenciatura em
Matemática

Banca Examinadora:

Prof. Dra. Louise Reips
Orientadora
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

Prof. Dr. Felipe Vieira
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

Prof. Dr. Rafael Aleixo de Carvalho
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

*Este trabalho é dedicado a todos que contribuíram
direta ou indiretamente com meu percurso formativo.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus.

Em segundo lugar, gostaria de agradecer a minha mãe, Edivalma, que nunca mediu esforços para me dar amor, carinho e apoio. Você foi ferramenta principal para que eu pudesse concluir mais uma etapa em minha vida.

A minha prima, Luize, muito obrigado por ter confiado em mim, me ajudado nos momentos que eu mais precisei, pelas incansáveis conversas, risadas e por toda atenção dada a mim.

Aos familiares que me ajudaram de alguma forma neste percurso, agradeço imensamente. Quanto aos que me atrapalharam, faço sinceros votos que vocês melhorem e evoluam enquanto seres humanos.

Um agradecimento especial vai para minha orientadora, professora Louise Reips. Jamais terei palavras para expressar minha gratidão por todos os atendimentos de madrugada, pelas incansáveis conversas, pelos puxões de orelha, pela paciência e por ter me acompanhado e entendido em um dos momentos mais difíceis da minha vida. Se um dia eu conseguir me tornar 1% da profissional que você é, com certeza já serei um professor espetacular. Tenho certeza que você tem um lugar reservado no céu por ter me orientado.

Ao professor Felipe Vieira, uma das pessoas que tornaram minha permanência na UFSC possível, muito obrigado pelos conselhos, auxílios, broncas e incansáveis risadas. A forma como você trata seus alunos mostra o quanto você ama o que faz.

A todos os professores da UFSC Blumenau, e em especial, professores Rafael Aleixo e Eleomar, obrigado pelos ensinamentos e por toda a paciência e confiança depositada em mim.

Aos amigos de curso, Cleison, Camila, Fernanda e Luana, obrigado por terem tornado minha caminhada até aqui menos árdua, por terem me entendido e me oferecido um ombro amigo

nos momentos que eu mais precisei! Vocês são seres humanos incríveis.

As amigas Andressa, Geisa, Raquel, Rebecca, Danielli e Sabrina, obrigado por terem sempre me incentivado e feito com que eu acreditasse em mim. Vocês são uma das partes mais lindas da minha vida.

A todos os bolsistas da SOMA, obrigado pela amizade. Um salve especial vai para Camila Ignaczuk, muito obrigado pelo companheirismo.

A minha ex-professora do ensino médio (e agora amiga), Michele Cynara, obrigado pelos intermináveis conselhos, broncas e cafés. Você é uma das minhas principais inspirações profissionais, e espero um dia me tornar um professor tão excelente quanto você.

As mulheres que me inspiraram e ainda inspiram: Prof^ª Laís Gereti, Prof^ª Apoliana Groff, Prof^ª Teresa Cardoso e Prof^ª Helena Corrêa, muito obrigado por tudo. Espero que vocês saibam o quanto são incríveis e o quanto impactam positivamente a vida das pessoas.

A toda a equipe do CEI Erica Braun, e em especial, as minhas diretores Denise Müllmann e Luciana Neidert, obrigado por sempre terem apoiado meus estudos e não medido esforços para que eu pudesse concluir minha graduação. Me surpreendeu o apoio, acolhimento e amor que recebi de todos que trabalham neste local. Vocês merecem um prêmio por terem me suportado durante 4 anos.

Aos demais amigos, obrigado por terem entendido minha ausência durante todo este período formativo, sempre compreendendo minha interminável correria. Vocês merecem tudo de melhor que este mundo possa proporcionar.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram de alguma forma em mais esta etapa, meus sinceros agradecimentos.

“Conheça todas as teorias, domine todas as técnicas, mas, ao tocar uma alma humana, seja apenas outra alma humana.”

Carl Jung

RESUMO

Este trabalho apresenta uma introdução à discretização de equações diferenciais utilizando a técnica de diferenças finitas, fazendo uso dos métodos explícito e implícito. O objetivo principal é apresentar alguns desenvolvimentos do ponto de vista teórico e computacional com enfoque no modelo fundamental das equações parabólicas. Assim, inicialmente, iremos discorrer sobre os conceitos preliminares para melhor compreensão do desenvolvimento do trabalho e então apresentaremos alguns conceitos indispensáveis para convergência de um método numérico, exemplos e simulações numéricas.

Palavras-chaves: Equações Diferenciais. Discretização. Diferenças Finitas. Equações Parabólicas. Equação do Calor.

ABSTRACT

This course conclusion work presents an introduction to the discretization of differential equations, making use of the finite difference technique, utilizing the explicit and implicit methods. The main objective is to present some developments to the theoretical and computational point of view with emphasis on the fundamental model of parabolic equations; therefore, firstly we are going to expatiate about the preliminary concepts to improve the works development understanding and, subsequently, we will present some indispensable concepts for the convergence of a numerical method, examples, and numerical situations.

Keywords: Differential Equations. Discretization. Finite Differences. Parabolic Equations. Heat Equation.

LISTA DE SÍMBOLOS

$f^{(n)}(x)$	Derivada n-ésima da função f em relação a x .
$\sum_{i=1}^n a_i$	Somatório. Soma dos a_i , onde i varia entre os números naturais, a partir de 1 até n , ou seja, tem-se que $\sum_{i=1}^n a_i = (a_1 + a_2 + \dots + a_n)$.
\mathbb{R}	Conjunto dos números reais.
\mathbb{R}^2	Conjunto dos pares de número reais da forma (x, y) , onde $x, y \in \mathbb{R}$.
\mathbb{C}	Conjunto dos números complexos.
$ a $	Valor absoluto de a . Se $a \geq 0$ tem-se que $ a = a$. Caso $a < 0$, $ a = -a$.
$[a, b]$	Intervalo fechado de a até b , isto é, para $a, b \in \mathbb{R}$ tem-se que $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} : a \leq x \leq b\}$.
(a, b)	Intervalo aberto de a até b , isto é, para $a, b \in \mathbb{R}$ tem-se que $(a, b) = \{x \in \mathbb{R} : a < x < b\}$.
$a < b$	a é estritamente menor que b .
$a > b$	a é estritamente maior que b .
$a \leq b$	a é menor ou igual a b .
$a \geq b$	a é maior ou igual a b .

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	CONCEITOS PRELIMINARES	21
2.1	CLASSIFICAÇÃO	23
2.2	PROBLEMA BEM-POSTO	25
2.3	SÉRIE DE TAYLOR	26
2.4	MALHA	27
2.5	PRINCÍPIO DO MÁXIMO	28
3	DIFERENÇAS FINITAS UTILIZANDO A EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR	29
3.1	PROBLEMA DE VALOR INICIAL EM EDO'S	32
3.1.1	Método de Euler	32
3.1.2	Convergência	33
3.1.3	Consistência	34
3.2	ESTABILIDADE	35
3.3	SIMULAÇÃO NUMÉRICA	39
4	O MODELO FUNDAMENTAL DAS EQUA- ÇÕES PARABÓLICAS	41
4.1	DISCRETIZAÇÃO	42
4.2	MÉTODO EXPLÍCITO	43
4.2.1	Estabilidade	46
4.2.2	Simulação Computacional	47
4.3	MÉTODO IMPLÍCITO	48
4.3.1	Estabilidade	50
4.3.2	Simulação Computacional	51
4.4	EQUAÇÃO DO CALOR EM DUAS DIMEN- SÕES ESPACIAIS	52
4.4.1	Simulação Computacional	53
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	57
	REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

As Equações Diferenciais Parciais podem ser interpretadas como uma formulação de um modelo matemático para problemas reais usuais em muitas aplicações de Física, Química, Engenharia e Economia. Recentemente são ferramentas indispensáveis para a Biologia com todas suas ramificações, resolvendo uma quantidade expressiva de problemas.

As técnicas de solução numérica para equações diferenciais são bastante variadas e, para este trabalho, escolhemos trabalhar com o método das diferenças finitas. Todo o conteúdo tem enfoque no modelo fundamental das equações parabólicas, também conhecida como equação do calor (mencionaremos equações de 2ª ordem em uma função incógnita com até duas variáveis espaciais e uma temporal). O objetivo principal deste trabalho é realizar simulações numéricas e então, para a programação, utilizamos o software MATLAB, que é uma interface gráfica padronizada que permite a solução de problemas razoavelmente complexos sem a necessidade de um grande conhecimento sobre programação.

O trabalho que aqui segue está dividido da seguinte maneira: o Capítulo 2 está destinado aos conceitos preliminares, que permitem uma boa compreensão dos capítulos seguintes. É importante salientar que apresentaremos aqui a definição de malha para uma e duas dimensões e a definição da série de Taylor, ferramenta esta que embasa toda a construção de aproximações por diferenças finitas.

No Capítulo 3 apresentamos o método das diferenças finitas e o método de Euler, o que possibilita verificarmos como se dá, numericamente, a propagação de uma condição inicial para o interior do domínio da equação diferencial. Na sequência, apresentamos as definições de erros, consistência e estabilidade. Por fim, apresentamos a simulação numérica de dois problemas.

No Capítulo 4, iniciamos discorrendo sobre o modelo fundamental das equações parabólicas em uma dimensão espacial e

uma temporal. Apresentamos os métodos explícito e implícito e as devidas definições de erro de truncamento local e erro global para duas dimensões. Aqui, fizemos um desenvolvimento detalhado referente a estabilidade e, em seguida, realizamos a simulação computacional de ambos os métodos para um exemplo escolhido. A última parte deste capítulo trata sobre a discretização da equação do calor em duas dimensões espaciais e uma temporal; o grande objetivo aqui é a simulação numérica utilizando o método explícito e, por este motivo, omitimos, por falta de tempo, a dedução da estabilidade e consistência, dois tópicos extremamente importantes para que possamos garantir a convergência no exemplo proposto.

2 CONCEITOS PRELIMINARES

Este capítulo é destinado a apresentar uma revisão de conceitos básicos necessários para um bom entendimento dos capítulos seguintes. Abordamos as definições de equações diferenciais ordinárias, equações diferenciais parciais (principal foco deste trabalho), função lipschitziana, função contínua e sequência de Cauchy. Além disso, apresentamos as classificações de uma equação diferencial quanto à linearidade e ordem, e também destacamos quando uma equação diferencial é elíptica, hiperbólica ou parabólica e discorremos sobre o que é um problema bem-posto no sentido de Hadamard. As principais referências utilizadas neste capítulo foram [4], [7], [5] e [14].

Definição 2.1. Uma equação diferencial ordinária (EDO) é uma equação da forma

$$F(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0, \quad (2.1)$$

envolvendo uma função incógnita $y = y(x)$ e suas derivadas. Dizemos que x é a variável independente e y a variável dependente [4].

Definição 2.2. Uma equação diferencial parcial (EDP) é uma equação que envolve uma função de n variáveis, ($n \geq 2$) e suas respectivas derivadas parciais de ordem até m , com $m \geq 1$. Tal equação apresenta-se da seguinte forma:

$$F\left(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \dots, \frac{\partial^m u}{\partial x_n^m}\right) = 0, \quad (2.2)$$

onde $u = u(x_1, \dots, x_n)$ e F é uma função qualquer [7].

Definição 2.3. Sejam f uma função e p um ponto de seu domínio. Dizemos que f é contínua em p quando, para todo $\epsilon > 0$ dado,

existe $\delta > 0$ (δ dependendo de ϵ) tal que, para todo x no domínio da função:

$$p - \delta < x < p + \delta \Rightarrow f(p) - \epsilon < f(x) < f(p) + \epsilon.$$

Definição 2.4. Diz-se que uma sequência de números reais (x_n) é uma *sequência de Cauchy* quando dado arbitrariamente $\epsilon > 0$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$n, m \in \mathbb{N}, n, m > n_0 \Rightarrow |x_n - x_m| < \epsilon.$$

Definição 2.5. Uma função $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é dita *Lipschitz contínua* se existe uma constante $L \geq 0$, tal que:

$$|f(x) - f(y)| \leq L|x - y|, \forall x, y \in X.$$

Teorema 2.1. *Seja (x_n) uma sequência de números reais. Tem-se que (x_n) é convergente se, e somente se, (x_n) é uma sequência de Cauchy.*

Demonstração. Suponhamos que (x_n) seja uma sequência convergente e seja $a := \lim x_n$.

Então, dado arbitrariamente $\eta > 0$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$n \in \mathbb{N}, n > n_0 \Rightarrow |x_n - a| < \eta.$$

Dado arbitrariamente $\epsilon > 0$, podemos considerar $\eta = \frac{\epsilon}{2}$ e daí,

$$m, n \in \mathbb{N}, m, n > n_0 \Rightarrow |x_n - x_m| \leq |x_n - a| + |x_m - a| < \eta + \eta = \epsilon,$$

ou seja, (x_n) é uma sequência de Cauchy.

Reciprocamente, suponhamos que (x_n) seja uma sequência de Cauchy. Então, temos que (x_n) é limitada e admite uma subsequência (x_{n_j}) convergente. Seja $a := \lim x_{n_j}$. Então, dado arbitrariamente $\eta > 0$, existe $n_{j_0} \in \mathbb{N}$ tal que:

$$n_j > n_{j_0} \Rightarrow |x_{n_j} - a| < \eta.$$

Além disso, sendo (x_n) uma sequência de Cauchy, temos que existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que:

$$m, n \in \mathbb{N}, m, n > n_0 \Rightarrow |x_n - x_m| < \eta.$$

Desta forma, dado arbitrariamente $\epsilon > 0$, podemos considerar $\eta = \frac{\epsilon}{2}$ e daí, considerando um termo x_{n_j} com $n_j > \max\{n_{j_0}, n_0\}$, temos:

$$n \in \mathbb{N}, n > n_0 \Rightarrow |x_n - a| \leq |x_n - x_{n_j}| + |x_{n_j} - a| < \eta + \eta = \epsilon,$$

ou seja, (x_n) é convergente e $\lim x_n = a$. ■

2.1 CLASSIFICAÇÃO

As equações diferenciais podem ser classificadas de acordo com a ordem, linearidade e homogeneidade.

A ordem de uma equação diferencial é a ordem da maior derivada que aparece na equação. Por exemplo, uma equação diferencial ordinária de primeira ordem na variável x é da forma:

$$F(x, u, u_x) = 0, \quad (2.3)$$

enquanto uma equação diferencial parcial de segunda ordem nas variáveis x, y é da forma:

$$F(x, y, u, u_x, u_y, u_{xy}, u_{xx}, u_{yy}) = 0. \quad (2.4)$$

Uma EDP de segunda ordem é dita linear quando pode ser escrita na forma

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu + G = 0,$$

onde todos os coeficientes A, B, C, D, E e F somente dependem das variáveis independentes x e y .

Exemplo 2.1.1. $u_{xx} + e^x u_{yy} + 6 = 0$.

Também é possível classificar uma EDP de segunda ordem como quase-linear quando pode ser colocada na forma

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + G(x, y, u, u_x, u_y) = 0,$$

onde os coeficientes A, B e C das derivadas duplas de u , somente dependem das variáveis independentes x e y .

Exemplo 2.1.2. $u_{xx} = \sqrt{1 - x^2 - y^2}u_{yy}$.

Quando não conseguimos colocar uma EDP em nenhuma das formas acima, dizemos que é não-linear, ou seja, quando um de seus coeficientes A, B, C, D, E ou F está vinculado a variável dependente (no caso, $u = u(x, y)$).

Exemplo 2.1.3. $uu_x + u_{yy} = 0$.

Quanto a classificação, ainda, uma equação diferencial parcial de segunda ordem é dita não homogênea, se pode ser posta na forma:

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F_u + G = 0,$$

onde os coeficientes A, B, C, D, E, F e G podem depender das variáveis x e y , da função $u = u(x, y)$ ou das derivadas de primeira ordem de $u = u(x, y)$ e além disso $G(x, y) \neq 0$. Se $G(x, y) = 0$ dizemos que a EDP é homogênea [5].

As EDP's podem, também, ser divididas entre Elípticas, Hiperbólicas e Parabólicas. Vamos definir cada uma delas com interesse especial nas EDP's Parabólicas. Por simplicidade, vamos classificar as equações em duas variáveis.

Considere a EDP

$$au_{xx} + 2bu_{xy} + cu_{yy} = r(x, y, u, u_x, u_y). \quad (2.5)$$

Diremos que (2.5) é *elíptica* quando $b^2 - ac < 0$, ou seja, as raízes desta equação são complexas. As equações elípticas estão relacionadas com problemas de equilíbrio que não dependem, em geral, do tempo. Exemplos típicos são problemas de difusão, pressão, elasticidade e vibração de membranas. Uma característica dos problemas elípticos são a propagação das propriedades físicas em todas as direções.

Exemplo 2.1.4. Equação de Laplace: $u_{xx} + u_{yy} = 0$.

Para uma EDP ser *hiperbólica*, devemos ter que $b^2 - ac > 0$ em (2.5), ou seja, as raízes da equação são reais e distintas. As equações hiperbólicas podem, ao longo da variação temporal, propagar resultados não suaves ocasionando choques. Um exemplo típico é a equação da onda, que é utilizada para modelar fenômenos físicos como ondas sonoras, aquáticas ou luminosas, sendo vastamente utilizada na área acústica, eletromagnética e dinâmica dos fluidos.

Exemplo 2.1.5. Equação da onda: $u_{tt} - a^2 u_{xx} = 0$.

Por fim, quando $b^2 - ac = 0$ na equação (2.5) chamaremos esta equação de *parabólica*, ou seja, estas equações possuem raízes reais e pelo menos uma delas se repete. As equações parabólicas modelam fenômenos que evoluem com o tempo e a solução num ponto interior depende da condição inicial. O modelo fundamental das equações parabólicas é a equação do calor, que é uma versão simplificada da equação de difusão. Tanto as equações elípticas como as parabólicas possuem soluções que não permitem descontinuidades, ou seja, são suaves tanto na solução quanto nas suas derivadas.

Exemplo 2.1.6. Equação do calor: $u_t - u_{xx} = 0$.

2.2 PROBLEMA BEM-POSTO

O termo matemático problema bem-posto vem de uma definição dada pelo matemático francês Jacques Hadamard. Problemas bem-postos devem cumprir as três condições abaixo:

- (i) Existência da solução;
- (ii) Unicidade da solução: Condições de contorno e iniciais insuficientes levam a soluções múltiplas e quando estão em excesso levam a soluções não físicas;
- (iii) A solução depende continuamente das condições iniciais e de contorno: Isso implica que pequenas mudanças nas con-

dições iniciais e de contorno causam pequenas mudanças na solução.

Quando um problema não cumpre as condições propostas acima, este é chamado de problema mal-posto. Um grande número de problemas reais costumam ser mal-postos no sentido de Hadamard, o que torna a resolução do problema um grande desafio. Se o problema for bem-posto, são boas as chances de que ele possa ser resolvido por um computador usando um método numérico estável. Se ele não for bem-posto, ele precisa ser reformulado numericamente utilizando a teoria da regularização, teoria esta que foge ao objetivo deste trabalho.

2.3 SÉRIE DE TAYLOR

O desenvolvimento de funções em séries de Taylor são ferramentas frequentemente utilizadas em áreas como Cálculo e Análise Numérica. Expressar funções como a soma de termos infinitos é uma estratégia muito útil pois utilizamos tal ferramenta para aproximar funções ao redor de um ponto e além disso, podemos aplicar os conceitos de série de Taylor para estudar convergência de métodos iterativos e, ainda, para buscar soluções de equações diferenciais [14].

A dedução das principais fórmulas deste trabalho advém dessa série, possibilitando assim o cálculo de soluções iterativas para diversos problemas.

Definição 2.6. Chama-se série de Taylor a série de funções

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n. \quad (2.6)$$

A equação (2.6) é dita série de Taylor de $f(x)$ em torno de um ponto $x = x_0$.

O polinômio de Taylor de ordem n em torno de $x = x_0$

de uma função n vezes diferenciável nesse ponto é:

$$p(x) = f(x_0) + f'(x_0) \frac{(x - x_0)}{1!} + f''(x_0) \frac{(x - x_0)^2}{2!} + \dots + f^{(n)}(x_0) \frac{(x - x_0)^n}{n!}. \quad (2.7)$$

Uma discussão interessante sobre a convergência da série de Taylor pode ser encontrada em [11].

2.4 MALHA

Aqui, iremos apresentar a definição de malha, conceito necessário para que possamos falar em discretização, pois será utilizada nas aproximações das derivadas por diferenças finitas (ou seja, estamos interessados em valores numéricos pontuais de uma função e sua derivada). Para o caso unidimensional, vamos considerar $x_0 \in \mathbb{R}$ e $h > 0$. A malha de passo (ou incremento) h associada a x_0 é definida pelo conjunto de pontos

$$x_i = x_0 \pm ih, i = 1, 2, \dots, N,$$

onde nestes pontos serão calculados aproximações para uma função $y(x)$ e suas derivadas.

Nos pontos desta malha, é possível fazermos aproximações utilizando o polinômio de Taylor da seguinte forma:

$$y(x + h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(x). \quad (2.8)$$

Neste trabalho, faremos a dedução das fórmulas com uma variável utilizando a série de Taylor e faremos generalizações para mais de uma variável sem deduzí-las.

Para o caso bidimensional, vamos considerar o conjunto dos pontos (x, y) onde a equação diferencial está definida e construir uma malha sobre estes pontos da seguinte forma:

$$\mathcal{R}_h = \{(x_i, y_i) = (x + ih, y + jk), i, j = \pm 1, \pm 2, \dots\},$$

onde (x, y) é um ponto de referência arbitrário, h e k são constantes positivas (passos/incrementos) e \mathcal{R} é o conjunto de pontos que compõe a malha.

Para dimensões superiores, a definição de malha pode ser facilmente generalizada.

2.5 PRINCÍPIO DO MÁXIMO

O princípio do máximo pode ser entendido como uma consequência da segunda lei da termodinâmica. Segundo essa lei, o calor se propaga de regiões com temperaturas mais altas para regiões com temperaturas mais baixas. Com isto, temperaturas mais altas tendem a diminuir e temperaturas mais baixas tendem a aumentar, à medida que o tempo passa. Também, em consequência disso, somos levados à conclusão de que o valor máximo da temperatura ou ocorre no tempo inicial ou ocorre nas extremidades (se considerarmos uma barra, por exemplo). É esperado que todas as simulações propostas neste trabalho tenham comportamento coerente com o princípio do máximo, validando os resultados encontrados.

3 DIFERENÇAS FINITAS UTILIZANDO A EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR

O Método das Diferenças Finitas (MDF) é um método de resolução de equações diferenciais que se baseia na aproximação das derivadas por diferenças finitas. Esta aproximação é baseada na série de Taylor, que produz fórmulas que aproximam valores em um ponto com dependência de um ou mais pontos anteriores. O MDF é um método satisfatório na resolução numérica de EDP's e por este motivo, nos debruçaremos sobre este método neste trabalho. Vamos apresentar alguns desenvolvimentos com foco em EDO's somente para embasar um exemplo numérico, onde o principal objetivo é aprender a linguagem de programação. É importante enfatizar aqui, que todo problema simulado requer uma análise de estabilidade pois, sem ela, a simulação numérica não pode ser validada. As principais referências utilizadas neste capítulo foram [2] e [13].

Definição 3.1. Dizemos que um *truncamento* é a limitação de expressões matemáticas para um número finito de termos, ou de outra forma, é a limitação do número de dígitos à direita da vírgula decimal.

Exemplo 3.0.1. O truncamento de um polinômio P ao grau n pode ser definido como a soma de todos os termos de P de grau menor ou igual a n . O truncamento de polinômios surge no estudo dos polinômios de Taylor, por exemplo.

Definição 3.2. O *erro de aproximação* em determinados dados é a discrepância entre o valor exato e o valor aproximado destes dados.

Definição 3.3. Seja $\mathcal{F}(x, h)$ uma fórmula de diferença para a aproximação da derivada de ordem q de uma função $y(x)$ com erro $\mathcal{E}(x, h)$. Assim, pode-se escrever:

$$y^{(q)}(x) = \mathcal{F}(x, h) + \mathcal{E}(x, h).$$

A fórmula $\mathcal{F}(x, h)$ é dita de *ordem* p se $\mathcal{E}(x, h) = h^p \mathcal{R}(x)$, onde \mathcal{R} não depende de h . Vamos utilizar a notação $\mathcal{E}(x, h) = \mathcal{O}(h^p)$.

Essa notação significa que $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}(x, h)}{h^p}$, é uma constante finita [2].

A definição de ordem de aproximação será muito importante quando estudarmos os erros associados à formulas de diferenças.

Existem três principais fórmulas que embasam os métodos que serão estudados, sendo elas *fórmula progressiva*, *fórmula regressiva* e *fórmula centrada*. Abaixo, acompanharemos a dedução destas.

O valor de uma função f no ponto x_{i+1} pode ser aproximada recorrendo a série de Taylor em termos do valor das derivadas no ponto x_i (considerando x_{i+1} suficientemente próximo de x_i) da seguinte forma:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \dots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x_i), \quad (3.1)$$

com $h = x_{i+1} - x_i$.

Fazendo o *truncamento* para utilizar apenas três termos em (3.1), podemos obter:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(\xi), \quad (3.2)$$

onde ξ é um valor entre x_i e x_{i+1} .

Isolando o termo $f'(x_i)$ e considerando $\mathcal{O}(h) = \frac{h}{2} f''(\xi)$, obtemos:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (3.3)$$

Dizemos que (3.3) é uma aproximação para a derivada $f'(x)$ conhecida como *fórmula progressiva* onde $\mathcal{O}(h)$ é o erro de aproximação.

De forma análoga, vamos aproximar o ponto x_{i-1} da seguinte forma (considerando também três termos em (3.1)):

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) - \frac{h^2}{2} f''(\xi),$$

onde ξ é um valor entre x_{i-1} e x_i . Daí, podemos obter:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (3.4)$$

Dizemos que (3.4) é uma aproximação para a derivada $f'(x)$ conhecida como *fórmula regressiva* onde $\mathcal{O}(h) = \frac{h}{2}f''(\xi)$ é o erro de aproximação.

Agora, fazendo o uso de quatro termos em (3.1), obtemos:

Quando queremos aproximar x_{i+1} :

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1), \quad (3.5)$$

e para aproximar x_{i-1} :

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2), \quad (3.6)$$

considerando que $x_i < \xi_1 < x_{i+1}$ e $x_{i-1} < \xi_2 < x_i$.

Subtraindo (3.6) de (3.5), e após algumas manipulações, podemos escrever:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.7)$$

A expressão (3.7) é chamada de *fórmula centrada* onde $\mathcal{O}(h^2) = -\frac{h^2}{3!}f'''(\xi)$, $\xi \in (x-h, x+h)$.

Veja que as fórmulas *progressiva* e *regressiva* têm erro de ordem 1 (primeira ordem) e a fórmula *centrada* tem erro de ordem 2 (segunda ordem). A ordem de um erro é importante pois nos diz o quão rápido se dá a convergência de um método numérico. Na prática, fórmulas com erros de ordem maior se aproximam mais rapidamente do que as de ordem menor, pois a parcela que representa o erro de aproximação tende a zero mais rápido quando h é suficientemente pequeno.

3.1 PROBLEMA DE VALOR INICIAL EM EDO'S

Para facilitar o entendimento das equações parabólicas, vamos iniciar discretizando e simulando um Problema de Valor Inicial (PVI), que é um problema de evolução que consiste em propagar uma informação inicial conhecida para o interior do domínio pela equação diferencial.

Dado o PVI

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y), \\ y(a) &= \alpha, \end{aligned} \tag{3.8}$$

onde $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua. A função $y = y(x)$ ($x \geq a$) é a solução e α é o valor inicial em a .

É importante garantirmos que há solução para uma equação diferencial para então procurarmos sua solução numérica. Há um resultado que afirma a *existência* e a *unicidade* de soluções em equações diferenciais.

Teorema 3.1. (*Existência e Unicidade - Teorema de Picard*). *Seja $f(x, y)$ uma função contínua e lipschitziana e seja α um vetor dado. Então, existe exatamente uma função $y(x)$ com as seguintes propriedades:*

- i) $y = y(x)$ é contínua e diferenciável para x em $[a, b]$;*
- ii) $y'(x) = f(x, y(x))$, para $x \in [a, b]$;*
- iii) $y(a) = \alpha$.*

Observação 1. Vamos omitir essa demonstração, porém a mesma pode ser encontrada em [1].

3.1.1 Método de Euler

Dado um intervalo $[a, b]$, vamos dividi-lo em N partes. Não necessariamente essas partes devem ser igualmente espaçadas, mas aqui vamos considerar comprimentos iguais a h . Note

que o conjunto formado por estas divisões é discreto, sendo que $x_0 = a$ e $x_N = b$ e ainda todos os elementos deste conjunto têm a forma $x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, N$ onde $h = \frac{(b-a)}{N}$.

Denotemos por y_i as aproximações para $y(x_i), i = 1, 2, \dots, N$ e $y_0 = \alpha$. Utilizando a fórmula progressiva deduzida anteriormente, podemos aproximar o valor da equação no ponto y_i da seguinte forma:

$$f(x_i, y_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h},$$

ou ainda,

$$y_{i+1} - y_i = hf(x_i, y_i), \quad (3.9)$$

$\forall i = 0, 1, \dots, N - 1$.

A equação (3.9) é chamada *método explícito de Euler*.

De forma análoga, mas utilizando a fórmula regressiva, podemos obter o *método implícito de Euler*, que possui a forma:

$$f(x_i, y_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h},$$

ou ainda,

$$y_{i+1} - y_i = hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad (3.10)$$

$\forall i = 0, 1, \dots, N - 1$.

Diremos que um método numérico é eficaz quando a solução da equação de diferenças tem comportamento similar ao da solução da equação diferencial, e para garantir este comportamento, vamos estudar alguns conceitos importantes.

3.1.2 Convergência

Seja $y(x_n)$ a solução exata do PVI (3.8) e y_n uma aproximação utilizando um método numérico.

Definição 3.4. O erro global no ponto x_n é definido como a diferença entre a solução exata e a solução aproximada:

$$e_n = y(x_n) - y_n.$$

O erro global permite determinar quando um problema é convergente. Note que quanto mais próximo o resultado numérico estiver do resultado exato, menor será o erro.

Definição 3.5. Dizemos que um método numérico é convergente se o erro global e_n converge para zero quando n tende para o infinito de maneira que o ponto x_n permaneça fixo.

Suponha que $x_n = a + nh$. Da definição acima, sabemos que x_n deve permanecer fixo e n deve tender para o infinito, ou seja, h deve tender a zero para que a igualdade seja satisfeita, ou de outra forma,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a + nh = x_n.$$

Note que a convergência que definimos acima não tem aplicação prática, pois nem sempre temos uma solução exata. Na prática, testamos a convergência diminuindo o valor do passo h e verificamos se há alguma aproximação de um número fixado, ou de outra forma, podemos verificar que a sequência é de *Cauchy* e então concluímos convergência.

Há algumas perguntas que podemos nos fazer: se existe convergência no sentido prático, a solução obtida representa a solução do problema? A discretização introduz algum ruído que contamine a solução? Existe controle sobre este ruído?

Buscando responder estas perguntas vamos definir *Consistência*, *Zero Estabilidade* e *Ordem de convergência*.

3.1.3 Consistência

Dizemos que um método numérico é consistente quando a solução numérica converge para a solução do problema, ou seja, quando a equação de diferenças representa a equação diferencial.

Definição 3.6. O erro advindo exclusivamente pela substituição da solução exata na equação de diferenças é chamado de *erro de truncamento local*.

Ainda é possível interpretar este erro como o erro cometido ao calcularmos a solução num ponto x_{i+1} supondo que o ponto anterior tenha solução exata. Para o método de Euler, podemos obter a seguinte aproximação com erro de truncamento local τ_{i+1} :

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} = f(x_i, y(x_i)) + \tau_{i+1},$$

$$y'(x_i) - \frac{h}{2}y''(\xi) = f(x_i, y(x_i)) + \tau_{i+1},$$

ou seja, quando $h \rightarrow 0$, a equação de diferenças se aproxima da equação diferencial com erro de truncamento local $\tau_{i+1} = -\frac{h}{2}y''(\xi)$. Se o erro de truncamento local é de $O(h^p)$, dizemos que esse método é de ordem p ou tem ordem de consistência p . O método de Euler, então, é consistente de ordem 1.

Definição 3.7. Um método é dito ser zero-estável se as soluções básicas da equação de diferenças associada, tomando $f(x, y) = 0$, são limitadas.

Teorema 3.2. (*Equivalência de Lax*) No contexto de problema de valor inicial para equações ordinárias, um método baseado em diferenças finitas é convergente se, e somente se, ele é consistente e zero estável.

Em outras palavras, o *teorema de equivalência de Lax* nos diz que consistência e estabilidade implicam convergência.

Observação 2. A demonstração deste teorema será omitida, mas pode ser encontrada em [9].

3.2 ESTABILIDADE

O conceito de estabilidade para o método de Euler busca obter um controle da propagação de erros, ou seja, um método estável não permite a amplificação dos erros que aparecem durante o processo de simulação numérica. De forma geral, buscaremos classificar os métodos como *condicionalmente estáveis* ou *absolutamente estáveis*. Na primeira classificação há alguma condição a

ser respeitada para que o método seja *estável*, já na segunda, não há restrições específicas e a estabilidade está garantida. Veremos a seguir que, para alguns casos, a estabilidade está intimamente ligada com a discretização da malha e com a correta escolha do passo.

Para deduzir a estabilidade, vamos utilizar um *problema teste*. Seja

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C},$$

onde

$$y(0) = y_0.$$

Vamos supor que $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$. Uma solução do problema colocado acima é da forma $y(t) = y_0 e^{\lambda t}$.

Do método explícito, podemos obter

$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_i = (1 + h\lambda)y_i.$$

Para $i = 0$, obtemos:

$$y_1 = y_0 + h\lambda y_0 = (1 + h\lambda)y_0,$$

Se continuarmos as iterações, podemos ver que, para $i = 1$:

$$y_2 = y_1 + h\lambda y_1 = (1 + h\lambda)y_1 = (1 + h\lambda)(1 + h\lambda)y_0 = (1 + h\lambda)^2 y_0.$$

E novamente, fazendo $i = 2$:

$$y_3 = y_2 + h\lambda y_2 = (1 + h\lambda)y_2 = (1 + h\lambda)(1 + h\lambda)^2 y_0 = (1 + h\lambda)^3 y_0.$$

Desse modo, quando $i = 1 \rightarrow n - 1$, podemos obter por recorrência, a seguinte fórmula:

$$y_n = (1 + h\lambda)^n y_0.$$

No contexto de problema teste é fundamental que o fator de retração $|(1 + h\lambda)|$ seja estritamente menor que 1, pois precisamos obter decaimento da solução, respeitando a hipótese, isso significa que os erros permanecem limitados, ou seja, quando aumentamos a quantidade de iterações não estamos propagando erros. Seja $z = h\lambda \in \mathbb{C}$ pois $\lambda \in \mathbb{C}$. Então, podemos manipular o fator de

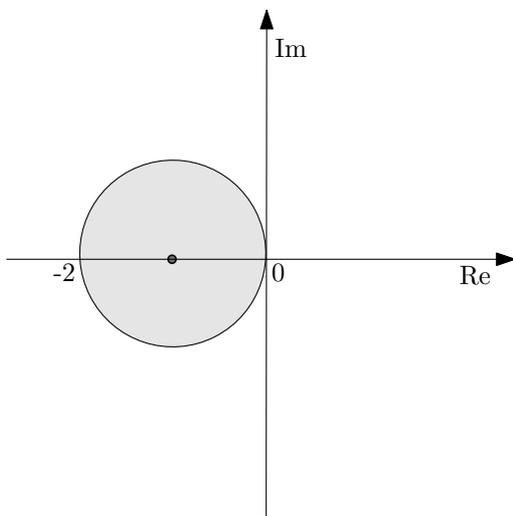


Figura 3.1 – Interpretação Geométrica da região de estabilidade absoluta para o método explícito.

forma que $|z - (-1)| < 1$, o que nos sugere uma interpretação geométrica dada na figura (3.2).

Precisamos então, escolher um h adequado de forma que z esteja dentro do disco, pois caso isso não ocorra, a solução cresce implicando em instabilidade numérica. Utilizando a desigualdade triangular, temos que $1 > |z - (-1)| \geq |z| - |-1| = |h\lambda| - 1$. Ou seja, $|h\lambda| - 1 < 1 \Rightarrow |h\lambda| < 2 \Rightarrow h|\lambda| < 2 \Rightarrow h < \frac{2}{|\lambda|}$, e esta será a condição de estabilidade para o método explícito. Dizemos que o método explícito é *condicionalmente estável*.

Vamos considerar o mesmo problema teste mas agora iremos aplicá-lo no método implícito. Disso segue que:

$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_{i+1},$$

$$y_{i+1} - h\lambda y_{i+1} = y_i,$$

$$y_{i+1} = \frac{1}{1 - h\lambda} y_i.$$

Fazendo $i = 0$, obtemos:

$$y_1 = \frac{1}{1 - h\lambda} y_0,$$

$i = 1$:

$$y_2 = \frac{1}{1 - h\lambda} y_1 = \left(\frac{1}{1 - h\lambda} \right)^2 y_0,$$

e então, para $i \rightarrow n$, obtemos:

$$y_n = \left(\frac{1}{1 - h\lambda} \right)^n y_0.$$

Seja $\left| \frac{1}{1 - h\lambda} \right| < 1$ (pois a solução precisa decair) e considerando $z = h\lambda$, podemos escrever:

$$\frac{1}{|1 - z|} < 1 \Leftrightarrow |1 - z| > 1.$$

Disso, podemos obter a seguinte interpretação geométrica na figura (3.2).

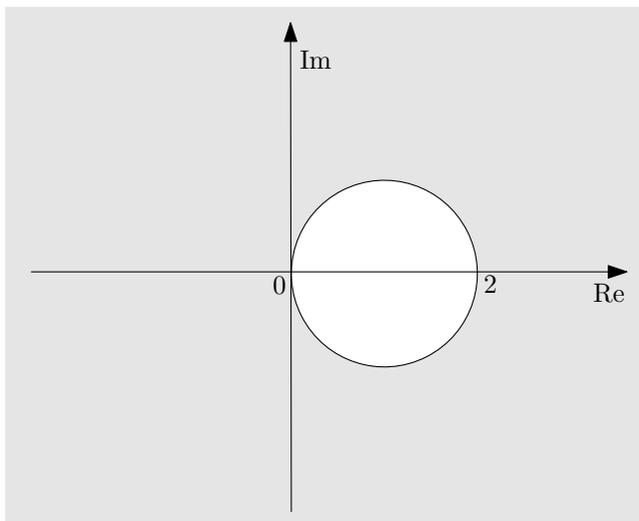


Figura 3.2 – Interpretação Geométrica da região de estabilidade absoluta para o método implícito.

É possível então concluir que a região de estabilidade é toda aquela fora do disco. Como exigimos que a parte real do problema teste é negativa, todo o semi-plano da esquerda é estável. Como $1 - h\lambda > 1 \Rightarrow -h\lambda > 0 \Rightarrow h\lambda < 0$. Sendo assim, classificamos o método implícito como *absolutamente estável*.

As figuras acima, que ilustram a região de estabilidade absoluta, foram baseadas em [12].

3.3 SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Para fins de simulação, utilizamos o seguinte Problema de Valor Inicial:

$$y' = -2y,$$

$$y(0) = 1,$$

com solução exata $y(x) = e^{-2x}$.

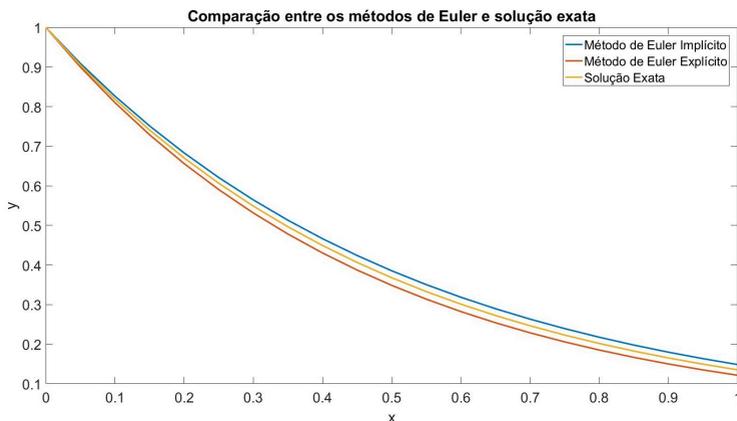


Figura 3.3 – Comparação entre os métodos para $h = 0,05$.

Veja que o problema acima é estável, pois tomando $\lambda = -2 + 0i$, temos que a condição do método explícito $h < \frac{2}{|\lambda|}$ é satisfeita e para verificarmos, basta substituímos λ e verificar que a desigualdade se verifica. No método implícito, de forma

análoga, podemos verificar que a condição $h\lambda < 0$ também se verifica. Logo, em ambos os casos, podemos garantir estabilidade.

Agora, vamos considerar o tamanho do domínio sendo $X = 12$ e o incremento $h = \frac{12}{10}$, considerando somente a solução exata e o método explícito.

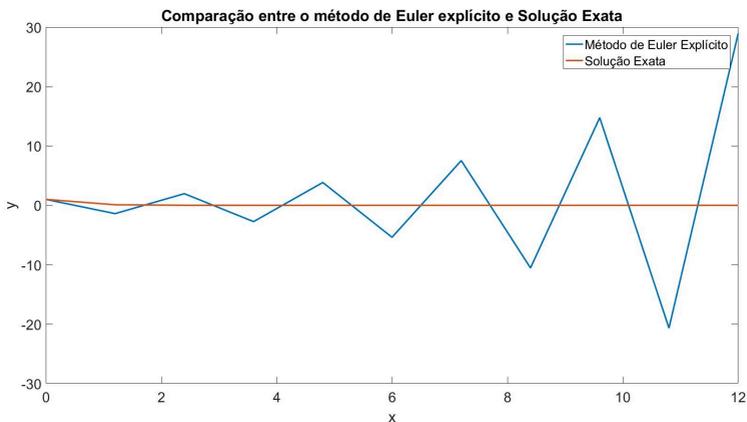


Figura 3.4 – Exemplo de instabilidade numérica.

Veja que a simulação acima exemplifica um caso de instabilidade numérica e, conseqüentemente, de não convergência. Fazendo as devidas substituições na condição de estabilidade do método explícito, é fácil verificar que a desigualdade não é respeitada, o que gerou instabilidade.

Uma análise mais detalhada de convergência será feita mais a frente, utilizando o modelo fundamental das equações parabólicas, que é o foco deste trabalho.

4 O MODELO FUNDAMENTAL DAS EQUAÇÕES PARABÓLICAS

Neste capítulo iremos apresentar o método de discretização por diferenças finitas para o modelo fundamental das equações parabólicas. A solução de uma equação parabólica costuma ser sempre suave dentro do domínio e não propaga descontinuidade. Esse tipo de equação requer a imposição de condições de fronteira para constituir um problema bem posto, o que nem sempre é algo fácil do ponto de vista teórico e computacional. Neste capítulo trabalharemos com a equação do calor, sendo abordada primeiramente com uma dimensão temporal e uma dimensão espacial e após, uma dimensão temporal e duas dimensões espaciais, onde faremos análise de consistência, estabilidade (pelo critério de von Neumann) e convergência.

Para a simulação numérica, usaremos os métodos explícito e implícito para as análises e simulações. No explícito a implementação computacional é relativamente mais simples porém a condição de estabilidade pode ser bastante restritiva em alguns casos, diferentemente do método implícito, onde a implementação computacional é relativamente trabalhosa, mas sempre estável, como veremos no desenrolar do capítulo. Na prática, sempre é importante levar em conta a precisão e o esforço computacional, pois um método com grande custo computacional não costuma ser utilizado devido ao tempo de execução do programa.

O modelo fundamental das equações parabólicas é a equação do calor,

$$u_t - a(x, t)u_{xx} = r(x, t), \quad (4.1)$$

com $a(x, t) > 0$, $0 \leq x \leq L$, $0 < t < T$, sujeita à condição inicial $u(x, 0) = \psi(x)$, e às condições de fronteira $u(0, t) = f(t)$ e $u(L, t) = g(t)$ e ainda $r(x, t)$ é uma função que representa alguma condição externa atuante.

4.1 DISCRETIZAÇÃO

Para o desenvolver deste capítulo, vamos considerar a equação do calor proposta em (4.1), com $a(x, t) = 1$ e $r(x, t) = 0$:

$$u_t = au_{xx}, a = 1, 0 \leq x \leq L, 0 < t < T, \quad (4.2)$$

$$u(x, 0) = \psi(x),$$

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

$$u(L, t) = g(t).$$

A finalidade da discretização é particionar o contínuo, a fim de obter pontos para calcular aproximações da equação diferencial. Para discretizar o domínio, dividimos o intervalo $[0, L]$ da variável espacial x , em N partes, onde para este caso, consideramos o comprimento fixado h e então obtemos $N + 1$ pontos $x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N$, onde $h = \frac{L}{N}$ e, de forma análoga, dividimos $[0, T]$, da variável temporal t , em M partes iguais de comprimento k (também fixado, para este caso), obtendo $M + 1$ pontos $t_j = jk, j = 0, 1, \dots, M$, onde $k = \frac{T}{M}$. Nos pontos (x_i, t_j) vamos obter uma aproximação, conforme ilustrado na figura (4.1).

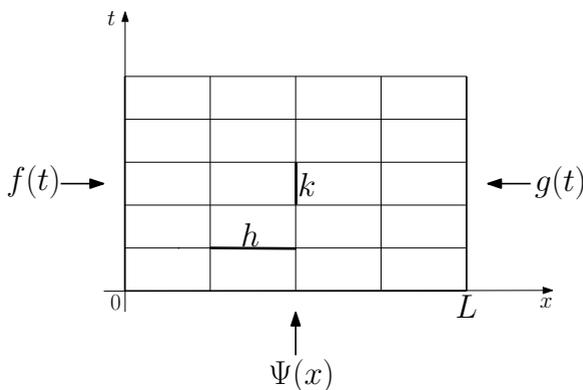


Figura 4.1 – Domínio da equação e respectiva malha

Para todas as análises seguintes, vamos denotar por $u_{i,j}$ a solução exata no ponto (x_i, t_j) e por $U_{i,j}$ o valor aproximado de $u_{i,j}$.

4.2 MÉTODO EXPLÍCITO

Para o método explícito usamos diferenças centradas na variável espacial e diferenças progressivas no tempo.

Usando diferenças centradas de segunda ordem na variável espacial para aproximar a derivada de segunda ordem obtemos:

$$u_{xx}(x_i, t_j) \simeq \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2}, \quad (4.3)$$

e usando diferenças progressivas no tempo para aproximar a derivada de primeira ordem produzimos a aproximação:

$$u_t(x_i, t_j) \simeq \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k}. \quad (4.4)$$

Substituindo essas aproximações em (4.2) obtemos:

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} = a \left(\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} \right), \quad (4.5)$$

ou de outra forma,

$$U_{i,j+1} = U_{i,j} + \sigma(U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}), \quad (4.6)$$

onde $\sigma = \frac{ka}{h^2}$.

Veja que, conhecidos os valores $U_{i-1,j}$, $U_{i,j}$ e $U_{i+1,j}$ calculamos $U_{i,j+1}$ conforme a figura 4.2. Esta figura nos mostra graficamente como acontece a dependência e o cálculo de um determinado ponto. No método explícito, o ponto $(i, j + 1)$ depende dos pontos $(i - 1, j)$, (i, j) e $(i + 1, j)$, todos do nível anterior e daí a palavra explícito. Na figura 4.2 é possível notar que, como os valores sobre a linha $j = 0$ são conhecidos (dados iniciais), e então é possível calcular os valores da linha $j = 1$ a menos do primeiro e do último, mas esses dois valores são dados exatamente

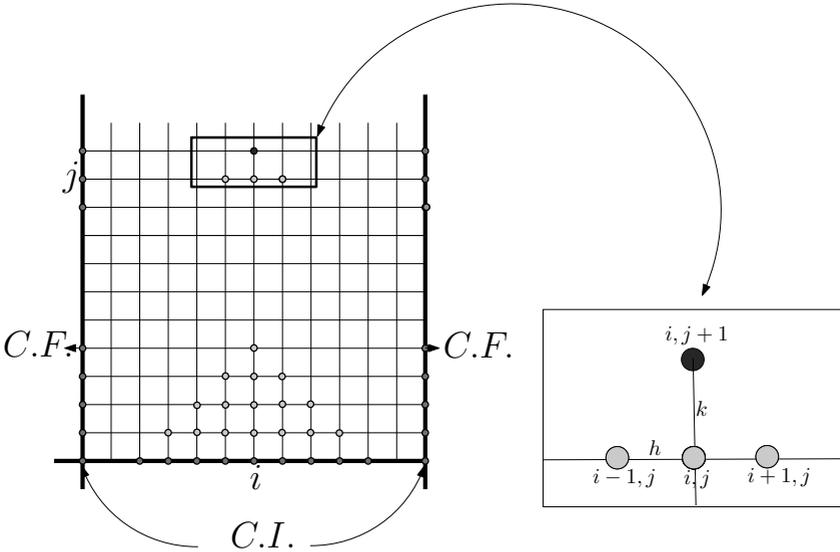


Figura 4.2 – Discretização e correspondente molécula computacional do método explícito.

pelas condições de fronteira completando assim o cálculo da linha $j = 1$. Tendo a linha $j = 1$ procedemos de maneira análoga para calcular a linha $j = 2$ e, assim, sucessivamente.

Definição 4.1. Chamaremos de *erro de truncamento local* o erro introduzido exclusivamente ao substituir a equação diferencial pela equação de diferenças inerente ao método numérico.

Considerando $u_{i,j} = u(x_i, t_j)$ e $\tau_{i,j}$ o erro ocorrido no cálculo de $U_{i,j+1}$ assumindo que todos os valores anteriores utilizados nesse cálculo são exatos, e ponderado pelo passo temporal k , podemos definir:

$$\begin{aligned} \tau_{i,j} &= \frac{u(x_i, t_{j+1}) - U_{i,j+1}}{k} \\ &= \frac{u(x_i, t_{j+1}) - (U_{i,j} + \sigma(U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}))}{k}, \end{aligned}$$

onde utilizamos a equação de diferenças para substituir o valor de $U_{i,j+1}$.

Usando agora a hipótese de que $U_{i,j} = u(x_i, t_j), \forall i$, temos:

$$\tau_{i,j} = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - (u(x_i, t_j) + \sigma(u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i+1}, t_j)))}{k},$$

que substituindo o valor de σ pode ser reescrita na forma:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{a}{h^2}(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \tau_{i,j}. \quad (4.7)$$

Observe que o *erro de truncamento local* nos diz o quanto a equação de diferenças deixa de satisfazer a equação diferencial.

Expandindo $u_{i,j+1}$, $u_{i+1,j}$ e $u_{i-1,j}$ em série de Taylor em torno do ponto (x_i, t_j) , e substituindo as expansões em (4.7) e após algumas manipulações, podemos escrever:

$$\tau_{i,j} = \frac{k}{2}u_{tt} - a\frac{h^2}{12}u_{xxxx} + \mathcal{O}(k^2) + \mathcal{O}(h^3) = \mathcal{O}(k + h^2).$$

Observe que quando h e k tendem a zero, $\tau_{i,j}$ também tende a zero e a equação discretizada tende a equação do calor. Ao expoente de menor potência chamamos de *ordem*. Sendo assim, o *método explícito* é consistente de ordem 1. A ideia da dedução proposta acima foi baseada em [2] e [13].

Definição 4.2. A diferença entre a solução aproximada e a solução exata em um ponto (x_i, t_j) define o *erro global* e pode ser escrito como:

$$e_{i,j} = U_{i,j} - u_{i,j}. \quad (4.8)$$

A noção de erro é importante pois nem sempre os dados são exatos e então ao realizarmos operações sobre valores não exatos acabamos propagando estes erros. Ao utilizarmos um método numérico, é comum buscarmos a minimização dos erros para obtermos resultados o mais próximo possível dos valores exatos ou que melhor o representem. Este erro contém todo o tipo de erro que pode contaminar a solução, inclusive o erro de arredondamento do computador.

4.2.1 Estabilidade

Para análise de estabilidade, utilizaremos o critério de von Neumann, que associa o tamanho do passo à estabilidade do método numérico. O critério de von Neumann é condição necessária e suficiente em casos tais que a EDP e o MDF são lineares. Além disso, precisamos das condições iniciais e de fronteira e o problema precisa ser de, no máximo, segunda ordem. Vamos admitir que exista uma solução para a equação $u_t = au_{xx}$ da forma:

$$u(x, t) = e^{t\lambda} e^{x\beta I}, \quad (4.9)$$

onde $I = \sqrt{-1}$ e precisamos encontrar λ e β para que a igualdade seja verificada.

Ainda, na malha, consideremos $u(x_i, t_j) = e^{t_j\lambda} e^{x_i\beta I}$, $x_i = i\Delta x = ih$ e $t_j = j\Delta t = jk$. Então, a equação (4.6) possui uma solução da forma:

$$U_{i,j} = e^{jk\lambda} e^{ih\beta I}. \quad (4.10)$$

Substituímos (4.17) em (4.6) para obter:

$$e^{(j+1)k\lambda} e^{ih\beta I} = \sigma e^{jk\lambda} e^{(i-1)h\beta I} + (1 - 2\sigma) e^{jk\lambda} e^{ih\beta I} + \sigma e^{jk\lambda} e^{(i+1)h\beta I},$$

$$e^{k\lambda} U_{i,j} = \sigma U_{i,j} e^{-h\beta I} + (1 - 2\sigma) U_{i,j} + \sigma U_{i,j} e^{h\beta I},$$

$$e^{k\lambda} U_{i,j} = [1 - 2\sigma + \sigma(e^{-h\beta I} + e^{h\beta I})] U_{i,j},$$

considerando que $U_{i,j}$ é sempre diferente de zero, pois a solução admitida é o produto de duas exponenciais, podemos dividir ambos os lados da igualdade por $U_{i,j}$, obtendo:

$$e^{k\lambda} = 1 - 2\sigma + \sigma(e^{-h\beta I} + e^{h\beta I}).$$

Mas, da identidade de Euler, podemos obter:

$$e^{ix} = \cos(x) + i\text{sen}(x),$$

$$e^{i(h\beta)} = \cos(h\beta) + i\text{sen}(h\beta),$$

$$e^{-i(h\beta)} = \cos(h\beta) - i\text{sen}(h\beta),$$

e então,

$$\begin{aligned} e^{k\lambda} &= 1 - 2\sigma + 2\sigma \cos(h\beta), \\ &= 1 - 2\sigma \left(\sin^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) \right) + 2\sigma \cos(h\beta). \end{aligned}$$

Mas sabemos que

$$\cos^2(a) = \cos(2a) + \sin^2(a),$$

e daí:

$$e^{k\lambda} = 1 - 2\sigma \sin^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) - 2\sigma \left(\cos \left(\frac{2h\beta}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) \right) + 2\sigma \cos(h\beta).$$

Assim,

$$e^{k\lambda} = 1 - 4\sigma \sin^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right).$$

Veja que $\sigma > 0$ e então $e^{k\lambda} = 1 - 4\sigma \sin^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) \leq 1$ e ainda, vamos exigir que $|e^{k\lambda}| \leq 1$.

Fazendo a devida substituição, temos que:

$$-1 \leq 1 - 4\sigma \sin^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right).$$

E finalmente, obtemos que:

$$\sigma \leq \frac{1}{2}. \quad (4.11)$$

Portanto, para estabilidade do método explícito, precisamos que a desigualdade (4.11) seja satisfeita. Sendo assim, o método explícito é dito *condicionalmente estável*, ou seja, há restrição quanto ao passo. A dedução da estabilidade acima foi baseada em [2].

4.2.2 Simulação Computacional

Considere o problema

$$u_t = u_{xx},$$

sujeito às condições

$$u(x, 0) = 60 \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right).$$

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

$$u(L, t) = 0.$$

onde

$$0 \leq x \leq 20, \quad 0 < t < 60.$$

Para fins de simulação numérica, utilizamos o incremento espacial $h = \frac{20}{19}$ e temporal $k = \frac{60}{120}$.

Precisamos que o problema acima seja consistente e estável para que convirja. Veja que o método explícito é consistente de ordem 1 e a condição de estabilidade é satisfeita considerando os incrementos espaciais e temporais utilizados. Sendo assim, há garantia de convergência na simulação proposta. Note que o resultado obtido é coerente com o Princípio do Máximo.

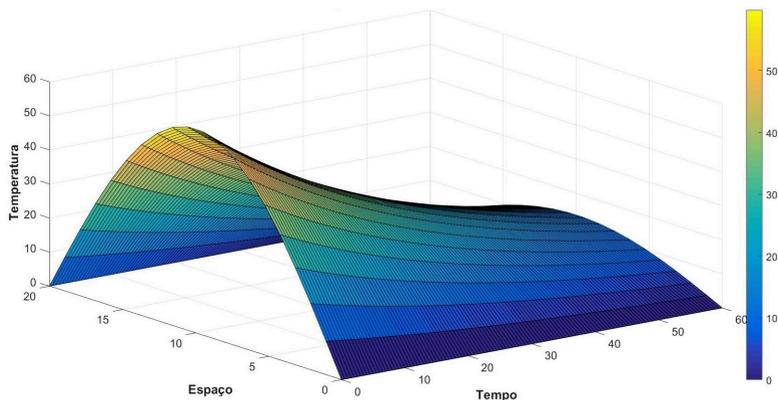


Figura 4.3 – Simulação Computacional - Método Explícito.

4.3 MÉTODO IMPLÍCITO

Para o método implícito usamos diferenças centradas na variável espacial e diferenças regressivas no tempo.

Usando diferenças centradas de segunda ordem na variável espacial para aproximar a derivada de segunda ordem, obtemos:

$$u_{xx}(x_i, t_j) \simeq \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2}, \quad (4.12)$$

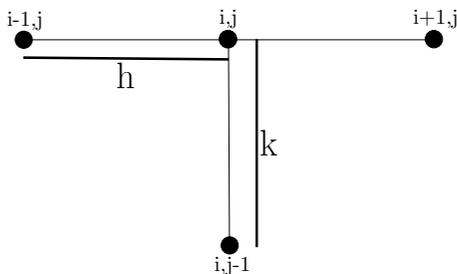


Figura 4.4 – Molécula Computacional do método implícito.

e usando diferenças regressivas no tempo para aproximar a derivada de primeira ordem produzimos a aproximação

$$u_t(x_i, t_j) \simeq \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{k}. \quad (4.13)$$

Substituindo essas aproximações em (4.2) obtemos a aproximação:

$$\frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{k} = a \left(\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} \right), \quad (4.14)$$

ou, de outra forma,

$$-\sigma U_{i-1,j} + (1 + 2\sigma)U_{i,j} - \sigma U_{i+1,j} = U_{i,j-1}, \quad (4.15)$$

onde $\sigma = \frac{ka}{h^2}$.

A Figura 4.4 nos dá a relação de dependência da fórmula. Veja que não é possível o cálculo direto de $U_{i,j}$, pois os elementos da linha j são especificados em termos do valor conhecido $U_{i,j-1}$. Para contornar esta situação, é necessário a resolução de um sistema linear para cada estágio j fixado.

Fixando um estágio j e variando i , obtemos:

$$\begin{aligned} -\sigma U_{0,j} + (1 - 2\sigma)U_{1,j} - \sigma U_{2,j} &= U_{1,j-1}, \\ -\sigma U_{1,j} + (1 - 2\sigma)U_{2,j} - \sigma U_{3,j} &= U_{2,j-1}, \\ &\vdots \\ -\sigma U_{n-3,j} + (1 - 2\sigma)U_{n-2,j} - \sigma U_{n-1,j} &= U_{n-2,j-1}, \\ -\sigma U_{n-2,j} + (1 - 2\sigma)U_{n-1,j} - \sigma U_{n,j} &= U_{n-1,j-1}. \end{aligned}$$

ou, de outra forma, utilizando a notação matricial,

$$\begin{pmatrix} 1 + 2\sigma & -\sigma & 0 & \cdots & 0 \\ -\sigma & 1 + 2\sigma & -\sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sigma & 1 + 2\sigma & -\sigma \\ 0 & \cdots & 0 & -\sigma & 1 + 2\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1,j} \\ U_{2,j} \\ \vdots \\ U_{N-2,j} \\ U_{N-1,j} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} U_{1,j-1} \\ U_{2,j-1} \\ \vdots \\ U_{N-2,j-1} \\ U_{N-1,j-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma U_{0,j} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sigma U_{N,j} \end{pmatrix}$$

ou, em notação vetorial, podemos reescrever como $AU_j = U_{j-1} + c_j$, onde $c_j = (\sigma f(jk), 0, \dots, 0, \sigma g(jk))^T$, conforme as condições de contorno definidas em (4.2).

Note que a matriz A é inversível pois é estritamente diagonal dominante, o que nos garante que o determinante de A é diferente de zero e então o sistema tem solução única.

Observação 3. O erro global e o erro de truncamento local do método implícito segue de forma análoga ao método explícito. O método implícito é consistente de ordem 1.

4.3.1 Estabilidade

Para análise de estabilidade do método implícito, ainda pelo critério de von Neumann, admitimos que a equação $u_t = au_{xx}$ tenha solução

$$u(x, t) = e^{t\lambda} e^{x\beta I}, \quad (4.16)$$

ainda considerando $I = \sqrt{-1}$ e precisamos encontrar λ e β para que a igualdade seja verificada.

Ainda, na malha, consideremos $u(x_i, t_j) = e^{t_j\lambda} e^{x_i\beta I}$, $x_i = i\Delta x = ih$ e $t_j = j\Delta t = jk$. Então, a equação (4.15) possui uma solução da forma:

$$U_{i,j} = e^{jk\lambda} e^{ih\beta I}. \quad (4.17)$$

Substituímos (4.17) em (4.15) para obter:

$$\begin{aligned}
 e^{(j-1)k\lambda} e^{ih\beta I} &= -\sigma(e^{jk\lambda} e^{(i-1)h\beta I} - 2e^{jk\lambda} e^{ih\beta I} + e^{jk\lambda} e^{(i+1)h\beta I}) + e^{jk\lambda} e^{ih\beta I}, \\
 e^{-k\lambda} U_{i,j} &= \sigma(U_{i,j} e^{-h\beta I} - 2U_{i,j} + U_{i,j} e^{h\beta I}) + U_{i,j}, \\
 e^{-k\lambda} &= -\sigma e^{-h\beta I} + 2\sigma - \sigma e^{h\beta I} + 1, \\
 e^{-k\lambda} &= 1 + 2\sigma - \sigma(e^{-h\beta I} + e^{h\beta I}).
 \end{aligned}$$

Mas, utilizando a identidade de Euler,

$$\begin{aligned}
 e^{-k\lambda} &= 1 + 2\sigma + 2\sigma \cos(h\beta), \\
 e^{-k\lambda} &= 1 + 2\sigma \left(\operatorname{sen}^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) + \cos^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right) \right) - 2\sigma \cos(h\beta).
 \end{aligned}$$

Como

$$\cos^2(a) = \cos(2a) + \operatorname{sen}^2(a),$$

então,

$$e^{-k\lambda} = 1 + 4\sigma \operatorname{sen}^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right),$$

e, finalmente,

$$e^{k\lambda} = \left(\frac{1}{1 + 4\sigma \operatorname{sen}^2 \left(\frac{h\beta}{2} \right)} \right).$$

Observe que $|e^{k\lambda}|$ é sempre menor que um, o que é a condição para estabilidade. Sendo assim, diremos que o método implícito é *incondicionalmente estável*, ou seja, não há restrição quanto ao passo. A dedução feita acima foi baseada em [2].

4.3.2 Simulação Computacional

Para a simulação do método implícito, consideramos os mesmos incrementos, o mesmo problema e as mesmas condições da simulação computacional do método explícito, obtendo o seguinte resultado:

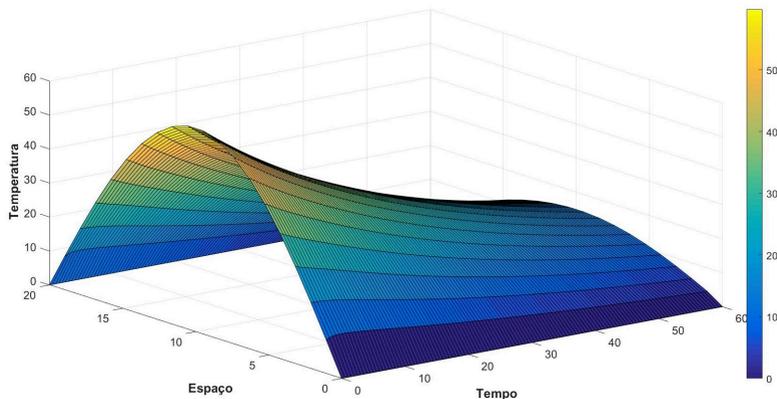


Figura 4.5 – Simulação Computacional - Método Implícito.

Quanto à convergência, já sabemos que o método implícito é consistente de ordem 1 e incondicionalmente estável, ou seja, a convergência pode ser garantida e o Princípio do Máximo também é aplicável nessa simulação.

4.4 EQUAÇÃO DO CALOR EM DUAS DIMENSÕES ESPACIAIS

Para fins deste trabalho, a equação do calor em três dimensões será dada por duas variáveis espaciais e uma temporal e aqui, nos debruçaremos apenas sob o método explícito.

Nesta parte do trabalho, omitiremos as deduções de convergência e estabilidade, porém uma análise detalhada pode ser encontrada em [13].

Considere os pontos da malha (x, y, t) , onde $x = ih_1$, $y = jh_2$ e $t = kh_3$, onde i, j, k são inteiros. Uma função discreta definida nessa malha será denotada por $U_{i,j}^k$.

O método explícito tem algumas variações quanto a quantidade de pontos necessários para aproximar um novo valor, aqui vamos estudar o que envolve cinco pontos, onde a fórmula para

obter as aproximações é dada por:

$$U_{i,j}^{k+1} = \sigma(U_{i-1,j}^k + U_{i+1,j}^k) + (1 - 4\sigma)U_{i,j}^k + \sigma(U_{i,j-1}^k + U_{i,j+1}^k),$$

onde $\sigma = \frac{h_3}{h_1 h_2}$.

Olhando para a fórmula dada acima, podemos perceber que para calcular as aproximações em um dado nível, precisaremos de 5 aproximações do nível anterior, conforme a figura (4.6).

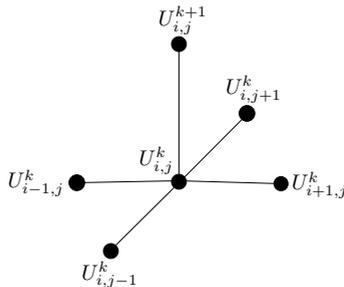


Figura 4.6 – Molécula Computacional do método explícito - 5 pontos.

Vamos assumir que o método é consistente de ordem 2 e a condição imposta sobre σ para estabilidade é $\sigma \leq \frac{1}{4}$.

4.4.1 Simulação Computacional

Considere o problema abaixo:

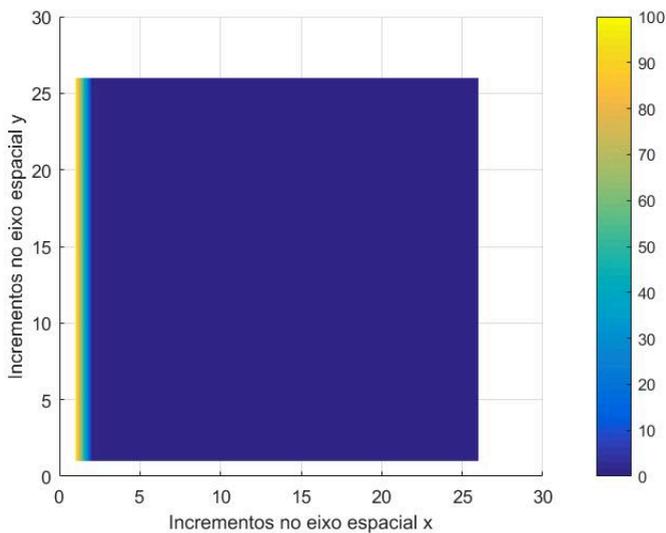
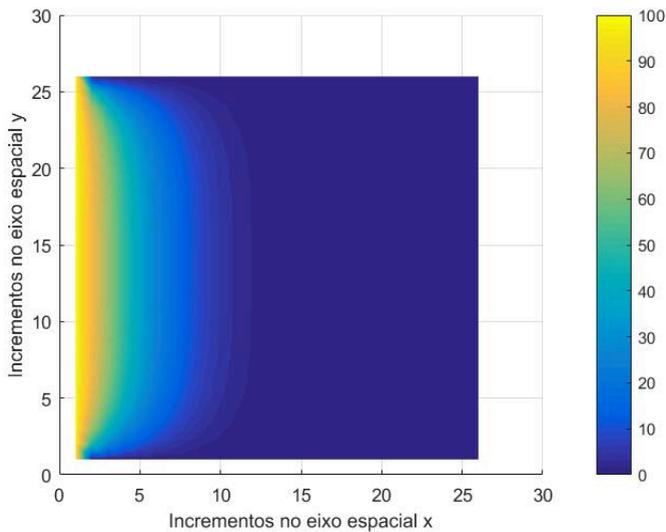
$$u_t = u_{xx} + u_{yy},$$

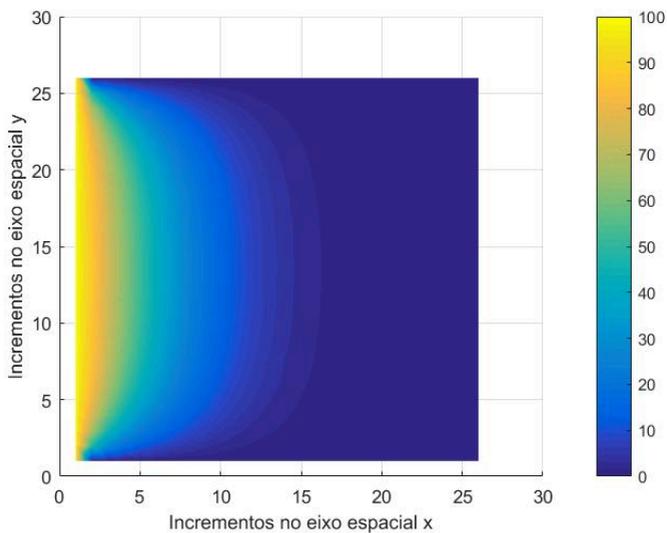
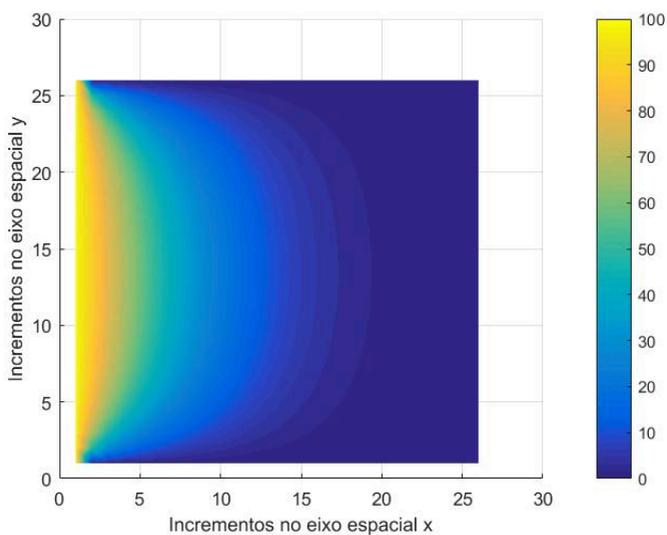
$$u(x, 1, t) = 100,$$

onde

$$0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 < t < 30.$$

Vamos resolvê-lo numericamente utilizando o incremento $\frac{1}{25}$ para ambas dimensões espaciais e $\frac{30}{75001}$ para a dimensão temporal. Apresentaremos abaixo a simulação em quatro instantes de tempo.

Figura 4.7 – Simulação Computacional para $t=0$.Figura 4.8 – Simulação Computacional para $t=10$.

Figura 4.9 – Simulação Computacional para $t=20$.Figura 4.10 – Simulação Computacional para $t=30$.

Note que o método explícito de 5 pontos é consistente de ordem 2 e a condição de estabilidade é $\sigma < \frac{1}{4}$. Veja que com os incrementos utilizados na simulação, a condição de estabilidade é satisfeita. Sendo assim, o problema proposto é convergente e em todos os instantes de tempo, o Princípio do Máximo é verificado.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho nos possibilitou entender as principais diferenças entre os métodos explícito e implícito, onde foi possível analisar a rapidez da implementação computacional, o custo computacional de cada método e também deduzir e compreender resultados importantes referentes a estabilidade. Em geral, no método explícito a implementação computacional foi relativamente mais simples, porém em alguns casos, o esforço computacional aumentou devido a restrição da estabilidade, já no implícito, a implementação computacional foi relativamente mais trabalhosa, porém, ganha-se muito na estabilidade, visto que é um método incondicionalmente estável. Para trabalhos futuros, fica a possibilidade de estudo de outros métodos utilizando diferenças finitas, em que haja um equilíbrio melhor entre precisão, esforço computacional e dificuldade de implementação.

REFERÊNCIAS

- [1] E.A. Coddington e N. Levinson. *Theory of ordinary differential equations*. McGraw-Hill Book Company, 1955.
- [2] J.A. Cuminato e M. M. Junior. *Discretização de Equações Diferenciais Parciais - Técnicas de Diferenças Finitas*. Coleção Matemática Aplicada. SBM, 2013.
- [3] M. Cristina C. Cunha. *Métodos Numéricos*. UNICAMP, 2000.
- [4] *Equações Diferenciais Ordinárias*. AbnTeX. URL: <http://www.uel.br/projetos/matessencial/superior/pdfs/edo.pdf>.
- [5] *Equações Diferenciais Parciais*. AbnTeX. URL: <http://www.uel.br/projetos/matessencial/superior/pdfs/edp.pdf>.
- [6] Hamilton Luiz Guidorizzi. *Um curso de cálculo - volume 1*. LTC, 2014.
- [7] *INTRODUÇÃO AS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS*. AbnTeX. URL: <http://professor.ufop.br/sites/default/files/freud/files/edp-cap1.pdf>.
- [8] Valéria Iório. *EDP - Um curso de Graduação*. Coleção Matemática Universitária. IMPA, 2016.
- [9] J. Lambert. *Computational methods in ordinary differential equations*. John Wiley, 1973.
- [10] J.M. Moreira e G.A. Braga. “O Princípio do Máximo para Equações Parabólicas em uma Dimensão Espacial”. Em: *Matemática Universitária* 31 (2001), pp. 127–141.
- [11] *POLINÔMIOS E SÉRIES DE TAYLOR*. AbnTeX. URL: <https://www.ime.usp.br/mat/2456/arquivos/Taylor.pdf>.
- [12] A. Quarteroni e F. Saleri. *Cálculo científico com MATLAB e Octave*. Springer, 2006.

-
- [13] Alessandro Alves Santana. “Programas em MATLAB para Implementação de Exemplos em Discretização de Equações Diferenciais Parciais”. Diss. de mestrado. São Carlos: Universidade de São Paulo, 1998, p. 172.
- [14] *Série de Taylor e Aplicações*. AbnTeX. URL: <https://www.ppgia.pucpr.br/~jamhour/Download/pub/MatComp/6%20-%20SeriedeTaylor.pdf>.