

Capítulo 4 - Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

Matemática Aplicada - Mestrados Eng. Química e Industrial



Índice

- 1 Equações Diferenciais às Derivadas Parciais
 - Equações Diferenciais às Derivadas Parciais
 - Características
 - Classificação das EDPs
- 2 Métodos Numéricos para PDEs
 - Problemas Dependentes do Tempo
 - Problemas Independentes do Tempo
 - Sistemas Esparsos
- 3 Software e Bibliografia

Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

- *Equações Diferenciais às Derivadas Parciais*(EDPs) envolvem derivadas parciais relativamente a mais do que uma variável independente
- Geralmente, as variáveis independentes são uma ou mais dimensões espaciais e possivelmente também o tempo
- Quanta mais dimensões mais complexa é a formulação do problema: podemos ter problemas de valor inicial puros, problemas de fronteira puros ou uma mistura de ambos os problemas
- Equações e valores fronteira podem eventualmente ser relativos a domínios irregulares

Equações Diferenciais às Derivadas Parciais, continuação

- Para simplificar, vamos lidar apenas com problemas PDEs simples (e não com sistemas de várias PDEs) com apenas duas variáveis independentes, nomeadamente
 - Duas variáveis espaciais designadas por x e y , ou
 - Uma variável espacial designada por x e uma variável temporal designada por t
- derivadas parciais relativamente a variáveis independentes são designadas através de subscritos, como por exemplo
 - $u_t = \partial u / \partial t$
 - $u_{xy} = \partial^2 u / \partial x \partial y$

Exemplo 1: Equação da Advecção

- Equação da Advecção

$$u_t = -cu_x$$

com c uma constante não nula

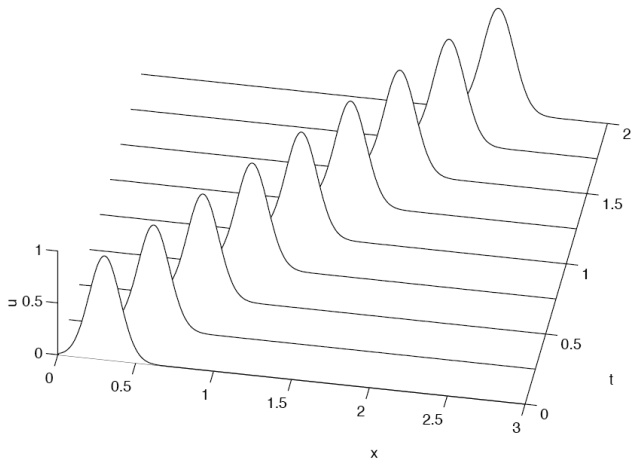
- Solução única é determinada pela condição inicial

$$u(0, x) = u_0(x), \quad -\infty < x < \infty$$

em que u_0 é uma função dada definida em $\mathbb{R}$

- Procuramos uma solução $u(t, x)$ para $t \geq 0$ e para todo o x
- Pela regra da cadeia, a solução é dada por $u(t, x) = u_0(x - ct)$
- A solução é a função inicial u_0 transladada de ct para a direita se $c > 0$, ou para a esquerda se $c < 0$

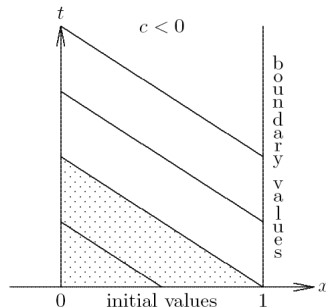
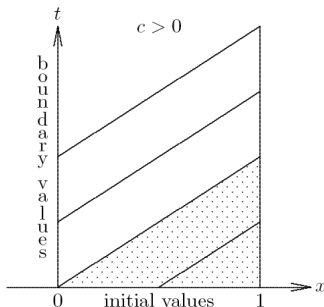
Equação da Advecção, continuação



Solução típica da equação de advecção. A função inicial é transladada com o tempo

Características

- **Características** de uma EDP são curvas de nível da solução
- Para a equação da advecção $u_t = -cu_x$ as características são linhas rectas com declive c



- Características determinam aonde as condições de fronteira devem ou podem ser definidas para que o problema seja bem posto

Classificação das EDPs

- *Ordem* de uma EDP é a ordem da derivada parcial de maior ordem que aparece na equação
- Por exemplo, a equação da advecção é de primeira ordem
- Algumas equações de segunda ordem importantes são
 - *Equação do calor*: $u_t = u_{xx}$
 - *Equação da onda*: $u_{tt} = u_{xx}$
 - *Equação de Laplace*: $u_{xx} + u_{yy} = 0$

Classificação das EDPs, continuação

- EDPs de segunda ordem com a seguinte forma

$$au_{xx} + bu_{xy} + cu_{yy} + du_x + eu_y + fu + g = 0$$

são classificadas em função do discriminante $b^2 - 4ac$

- $b^2 - 4ac > 0$: *hiperbólicas* (ex. equação da onda)
- $b^2 - 4ac = 0$: *parabólicas* (ex. equação do calor)
- $b^2 - 4ac < 0$: *elípticas* (ex. equação de Laplace)

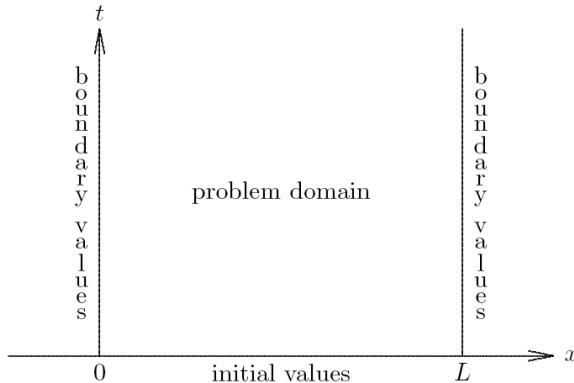
Classificação das EDPs, continuação

Classificação de EDPs mais genéricas não é assim tão evidente, de uma forma simplificada

- **Hiperbólicas**: EDPs descrevem processos físicos conservativos e dependentes do tempo que não evoluem para um estado estacionário, como por exemplo a advecção
- **Parabólicas**: EDPs descrevem processos físicos dissipativos e dependentes do tempo que evoluem para um estado estacionário, como por exemplo a difusão
- **Elípticas**: EDPs descrevem processos físicos que já atingiram o estado estacionário, e consequentemente não dependem do tempo

Problemas Dependentes do Tempo

Problemas dependentes do tempo envolvem geralmente valores iniciais assim como valores de fronteira



Métodos Semidiscretos

- Uma forma de resolver numericamente EDPs dependentes do tempo consiste em discretizar o espaço e manter a variável tempo contínua
- O resultado é um sistema de EDOs cuja resolução pode ser efectuada por um dos métodos previamente estudados
- Por exemplo, consideramos a equação do calor

$$u_t = cu_{xx}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0$$

com condição inicial

$$u(0, x) = f(x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

e condições de fronteira

$$u(t, 0) = 0, \quad u(t, 1) = 0 \quad t \geq 0$$

Método das Diferenças Finitas Semidiscreto

- Definimos os pontos da malha espacial $x_i = i\Delta x$, $i = 0, 1, \dots, n+1$, em que $\Delta x = 1/(n+1)$
- Substituindo u_{xx} pela aproximação das diferenças finitas

$$u_{xx}(t, x_i) \approx \frac{u(t, x_{i+1}) - 2u(t, x_i) + u(t, x_{i-1}))}{(\Delta x)^2}$$

- A EDP semidescritizada resulta num sistema de EDOs

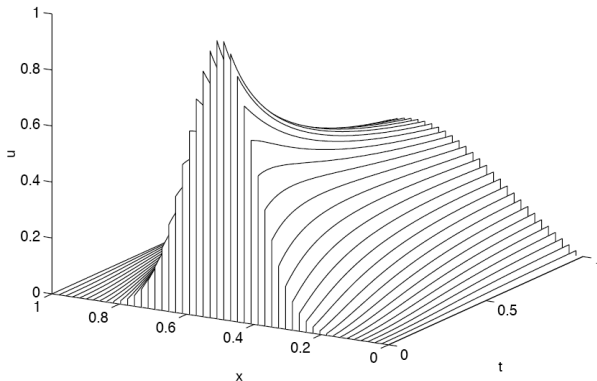
$$y'_i(t) = \frac{c}{(\Delta x)^2} (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}), \quad i = 1, \dots, n$$

em que $y_i(t) \approx u(t, x_i)$

- sabemos das condições de fronteira que $y_0(t) = y_{n+1}(t) = 0$ e das condições iniciais $y_i(0) = f(x)$, $i = 1, \dots, n$
- Podemos então usar métodos para problemas de valor inicial para resolver este sistema - esta aproximação chamada **Método das Linhas**

Métodos das Linhas

- Método das linhas usa métodos de resolução de EDOs para calcular linhas de corte da superfície solução sobre o plano espaço-tempo. Cada linha é paralela ao eixo do tempo e corresponde a um ponto da malha espacial



Exercício 1: Método das Linhas

- Consideramos a equação do calor

$$u_t = u_{xx}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0$$

com condição inicial

$$u(0, x) = \sin(\pi x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

e condições de fronteira

$$u(t, 0) = 0, \quad u(t, 1) = 0 \quad t \geq 0$$

- vamos resolver pelo método das linhas com $\Delta x = 0.25$

Exercício 1, resolução

- Definimos os pontos da malha espacial $x_i = 0.25i$, $i = 0, 1, 2, 3, 4$, em que $n + 1 = 1/0.25$
- Substituindo u_{xx} pela aproximação das diferenças finitas

$$u_{xx}(t, x_i) \approx \frac{u(t, x_{i+1}) - 2u(t, x_i) + u(t, x_{i-1}))}{(\Delta x)^2}$$

e considerando $y_i(t) \approx u(t, x_i)$ obtemos o sistema de EDOs de primeira ordem

$$y_i'(t) = \frac{1}{(\Delta x)^2} (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}), \quad i = 1, 2, 3$$

- Sabendo das condições de fronteira que $y_0(t) = y_4(t) = 0$, na forma matricial o sistema resultante é

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \end{bmatrix} = \frac{1}{(0.25)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{Y}' = \mathbf{A}\mathbf{Y}$$

Exercício 1, resolução

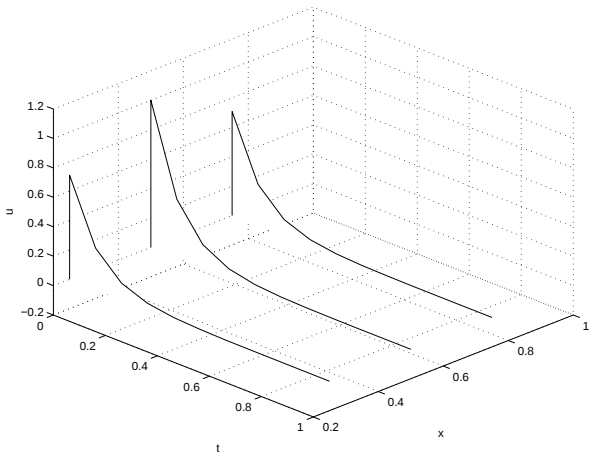
- Como as condições iniciais são $y_i(0) = \sin(0.25i\pi)$, $i = 1, 2, 3$, reduzimos a resolução da EDP original à resolução do problema de valor inicial

$$\mathbf{Y}' = \mathbf{A}\mathbf{Y} \text{ com } \mathbf{Y}_0 = \begin{bmatrix} \sin(0.25\pi) \\ \sin(0.50\pi) \\ \sin(0.75\pi) \end{bmatrix}$$

- Resolvendo este PVI por um dos métodos previamente estudados, como por exemplo o Runge-Kutta de 4ª ordem, obtemos a evolução da temperatura ao longo de três linhas interiores ao plano (x, t) , nomeadamente ao longo das linhas $x = 0.25$, $x = 0.50$ e $x = 0.75$

Exercício 1, resolução

- Resolução do exercício pelo Método das Linhas



Métodos de Discretização Completa

- *Métodos de discretização completa* para EDPs discretizam ambas as variáveis espaciais e temporais
- Nos métodos baseados em diferenças finitas completas
 - O domínio contínuo da equação é substituído por uma malha de pontos
 - As derivadas são aproximadas por diferenças finitas
 - Procuramos soluções numéricas na forma de uma tabela de valores aproximados em determinados pontos do espaço e do tempo

Métodos de Discretização Completa, continuação

- Em problemas de duas dimensões (tempo e espaço) os valores aproximados da solução representam pontos da superfície solução ao longo do domínio espaço-temporal do problema
- A exactidão da solução vai depender das dimensões dos passos escolhidos para o espaço e para o tempo
- Substituindo todas as derivadas parciais por diferenças finitas resulta num sistema de equações algébricas
- O sistema poderá ser linear ou não dependendo do tipo de EDP subjacente ao problema

Métodos de Discretização Completa, continuação

- Nos problemas de valor inicial a solução é obtida partindo de valores iniciais e avançando no tempo passo a passo, gerando uma sucessão de linhas na tabela da solução
- Os procedimentos baseados em passos de tempo podem ser explícitos ou implícitos, dependendo da formula do valor solução usar ou não apenas informação relativa pontos do passado
- Podemos esperar obter relativamente boas aproximações da solução usando passos de tempo e espaço suficientemente pequenos
- Os passos de tempo e de espaço nem sempre podem ser escolhidos independentemente um do outro

Exemplo 2: Equação do Calor

- Consideramos a equação do calor

$$u_t = cu_{xx}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0$$

com condições inicial e de fronteira

$$u(0, x) = f(x), \quad u(t, 0) = \alpha, \quad u(t, 1) = \beta$$

- Definimos os pontos da malha espacial $x_i = i\Delta x$, $i = 0, 1, \dots, n+1$, em que $\Delta x = 1/(n+1)$, e temporal $t_k = k\Delta t$, para um determinado valor de Δt aconselhável
- Usamos a notação u_i^k para representar a solução aproximada no ponto (t_k, x_i)

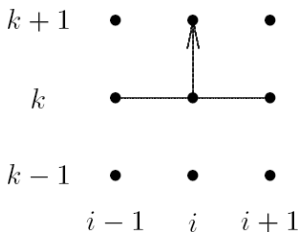
Equação do Calor, continuação

- Substituindo u_t por diferenças finitas em avanço no tempo e u_{xx} por diferenças centradas no espaço, obtemos

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = c \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{(\Delta x)^2}, \text{ ou}$$

$$u_i^{k+1} = u_i^k + c \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k), \quad i = 1, \dots, n$$

- Molécula:** padrão dos pontos envolvidos em cada nível



Equação do Calor, continuação

- Condições de fronteira dão-nos $u_0^k = \alpha$ e $u_{n+1}^k = \beta$ para todo os k , e as condições iniciais fornecem os valores iniciais $u_i^0 = f(x_i)$, $i = 1, \dots, n$
- Podemos então procurar soluções numéricas progredindo avançando no tempo através de um esquema de diferenças *explícito*
- O erro local de truncatura é $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x)^2$, pelo que a exactidão deste esquema é de primeira ordem em relação ao tempo e de segunda ordem em relação ao espaço

Exercício 2: Equação do Calor

Vamos resolver a equação do calor com as mesmas condições definidas no exercício 1, usando o processo baseado em diferenças finitas explícito

- 1 Escreva as equações a resolver para cada um dos pontos do domínio considerando $\Delta t = 0.25$
- 2 Resolva computacionalmente o problema com recurso à função `[] = pde_heat_exp()` da `NMLibforOctave`, fazendo variar os passos espaciais Δx e temporais Δt . O que observe em relação à estabilidade do método?

Exemplo 3: Equação da onda

- Consideramos a equação da onda

$$u_{tt} = cu_{xx}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0$$

com condições iniciais e de fronteira

$$u(0, x) = f(x), \quad u_t(0, x) = g(x)$$

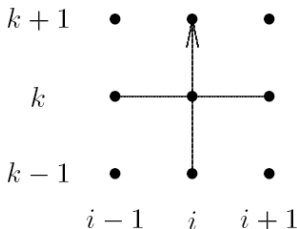
$$u(t, 0) = \alpha, \quad u(t, 1) = \beta$$

Equação da onda, continuação

- Usando a mesma malha do que antes e usando formulas das diferenças finitas centradas para u_{tt} e u_{xx} obtemos o esquema de diferenças finitas

$$\frac{u_i^{k+1} - 2u_i^k + u_i^{k-1}}{(\Delta t)^2} = c \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{(\Delta x)^2}, \text{ ou}$$

$$u_i^{k+1} = 2u_i^k - u_i^{k-1} + c \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k), \quad i = 1, \dots, n$$



Equação da onda, continuação

- Utilizando dados provenientes de dois níveis diferentes no tempo implica armazenar informação adicional
- Para iniciar o processo precisamos de conhecer u_i^0 e u_i^1 , estes podem ser obtidos a partir das condições iniciais

$$u_i^0 = f(x_i), \quad u_i^1 = f(x_i) + g(x_i)\Delta t$$

em que a segunda condição consiste na discretização da condição inicial $u_t(0, x) = g(x)$ por diferenças finitas a montante

Estabilidade dos métodos explícitos

- Nos métodos de discretização total os valores dos passos temporais e espaciais devem ser cuidadosamente escolhidos de forma a obter determinada exactidão assim como a manter a estabilidade do método
- Por exemplo, o esquema de discretização total para a equação do calor consiste no método de Euler aplicado a um sistema de EDOs semidiscreto cujos valores próprios estão entre $-4c/(\Delta x)^2$ e 0. Neste caso, a região de estabilidade do método de Euler requer que

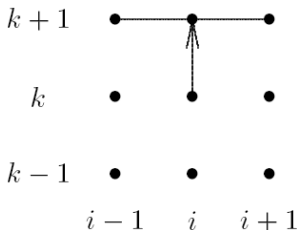
$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2c}$$

- Muitas restrições podem tornar o método relativamente ineficiente

Métodos Diferenças Finitas Implícitos

- Os métodos implícitos para EDOs apresentam uma maior região de estabilidade para o passo em comparação com os métodos explícitos. O mesmo se verifica para resolução de EDPs
- Aplicando o método de *Euler implícito* ao sistema semidiscreto de EDOs proveniente da equação do calor obtemos o *esquema de diferenças finitas implícito*

$$u_i^{k+1} = u_i^k + c \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left(u_{i+1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i-1}^{k+1} \right), \quad i = 1, \dots, n$$



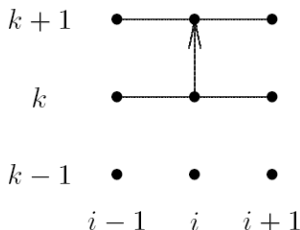
Métodos Diferenças Finitas Implícitos, continuação

- Este esquema beneficia da estabilidade incondicional inerente ao método de Euler implícito. Isto significa que não existem restrições sobre as dimensões relativas dos passos Δt e Δx
- Mas como se trata de um esquema de primeira ordem no tempo, a exactidão pretendida limita fortemente a escolha do passo de tempo

Método de Cranck-Nicolson

- Aplicando o método de *Euler modificado* ao sistema semidiscreto de EDOs proveniente da equação do calor obtemos o método implícito de *Cranck-Nicolson*

$$u_i^{k+1} = u_i^k + c \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} \left(u_{i+1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i-1}^{k+1} + u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k \right)$$



- Este método é incondicionalmente estável e possui uma exactidão de segunda ordem no tempo

Problemas Independentes do Tempo

- A seguir vamos considerar EDPs elípticas, independentes do tempo em duas dimensões, tais como a *equação de Helmholtz*

$$u_{xx} + u_{yy} + \lambda u = f(x, y)$$

- Alguns casos especiais importantes são
 - *equação de Poisson*: $\lambda = 0$
 - *equação de Laplace*: $\lambda = 0$ e $f = 0$
- Existem várias possibilidades para as condições de fronteira nos vários lados
 - *Dirichlet*: u é conhecido
 - *Neumann*: u_x ou u_y é conhecido
 - *Misto*: combinação das condições anteriores

Método das Diferenças Finitas

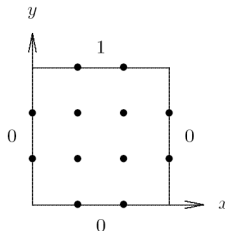
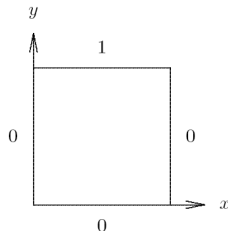
- Método das diferenças finitas para estes problemas aplicam-se tal como antes
 - Definir malha de pontos discretos ao longo do domínio da equação
 - Substituir as derivadas na EDP por diferenças finitas
 - Procurar soluções numéricas nos pontos da malha
- Ao contrario dos problemas dependentes do tempo, a solução não é encontrada avançando passo a passo no tempo
- A solução aproximada é determinada simultaneamente em todos os pontos da malha através da resolução de um único sistema de equações algébricas

Exercício 3: Equação de Laplace

- Considere a equação de Laplace

$$u_{xx} + u_{yy} = 0$$

num quadrado unitário com as condições de fronteira abaixo indicadas



- Definir uma malha discreta dentro do domínio, incluindo os pontos fronteira, tal como ilustrado na figura da direita

Equação de Laplace, continuação

- Os pontos interiores aonde vamos calcular a solução aproximada são dados por

$$(x_i, y_j) = (ih, jh), \quad i, j = 1, \dots, n$$

em que neste exemplo $n = 2$ e $h = 1/(n + 1) = 1/3$

- De seguida substituímos as derivadas por aproximações baseadas em diferenças finitas centradas em cada ponto interior da malha, obtendo-se a equação

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} = 0$$

em que $u_{i,j}$ representa a aproximação da solução verdadeira $u(x_i, y_j)$ para $i, j = 1, \dots, n$, e representa um dos valores fronteira dados se i ou j for 1 ou $n + 1$

Equação de Laplace, continuação

- Simplificando e escrevendo as quatro equações resultantes obtemos

$$4u_{1,1} - u_{0,1} - u_{2,1} - u_{1,0} - u_{1,2} = 0$$

$$4u_{2,1} - u_{1,1} - u_{3,1} - u_{2,0} - u_{2,2} = 0$$

$$4u_{1,2} - u_{0,2} - u_{2,2} - u_{1,1} - u_{1,3} = 0$$

$$4u_{2,2} - u_{1,2} - u_{3,2} - u_{2,1} - u_{2,3} = 0$$

Equação de Laplace, continuação

- Escrevendo o sistema anterior na forma matricial, obtemos

$$\mathbf{Ax} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{1,2} \\ u_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{b}$$

- Para resolver este sistema em ordem à incógnitas $u_{i,j}$ podemos usar um método directo ou iterativo, resultando na solução

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{1,2} \\ u_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.125 \\ 0.125 \\ 0.375 \\ 0.375 \end{bmatrix}$$

Equação de Laplace, continuação

- Em problemas práticos, a dimensão da malha teria de ser inferior o que implicaria que o sistema resultante seria muito maior
- A matriz dos coeficientes seria muito esparsa, contudo, uma vez que cada equação envolve apenas cinco variáveis, uma correcta manipulação deste sistema pode conduzir a grandes reduções de trabalho e da quantidades de dados a armazenar

Sistemas Esparsos

- A resolução do sistema $Ax = b$, com $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $x, b \in \mathbb{R}^n$, depende sobretudo das propriedades da matriz A
- A é **Simétrica** (S) se $A = A^T$
- A é **Positiva Definida** (PD) se $A^T y A > 0$ para qualquer $y \neq 0 \in \mathbb{R}^n$
- Métodos Directos
 - Factorização de Cholesky se A for SPD
 - Factorização LU se A é PD
- Os métodos directos conduzem a solução exacta (usando uma aritmética de precisão infinita). Mas tradicionalmente implicam elevados recursos de memória

Sistemas Esparsos, continuação

- Os métodos iterativos dividem-se em
 - Estacionários
 - Jacobi
 - Gauss-Seidel
 - SOR
 - Não estacionários
 - CG se A é SPD
 - MINRES se A é S
 - GMRES para qualquer A
- Os métodos iterativos conduzem a uma solução aproximada, mas com erro controlado. Vantagens computacionais e implicam menos recursos de memória do que os directos

Métodos Disponíveis na NMLibforOctave

- Método das Linhas (eq. do calor): `[] = pde_heat_lines()`
- Mét. Discret. Total Explícito (eq. advecção): `[] = pde_advec_exp()`
- Mét. Discret. Total Explícito (eq. calor): `[] = pde_heat_exp()`
- Mét. Discret. Total Explícito (eq. onda): `[] = pde_wave_exp()`
- Mét. Discret. Total (eq. Poisson): `[] = poissonfd()`

Resolução de Sistemas Lineares da NMLibforOctave

→ NMLibforOctave

- Método do Gradiente Conjugado: `[...] = pcg(...)`

→ NMLibforOctave

- Método de Jacobi: `[...] = jacobi(...)`
- Método de Gauss-Seidel: `[...] = gauss_seidel(...)`
- Método do MINRES: `[...] = minres(...)`
- Método do GMRES: `[...] = gmres(...)`

Bibliografia

Exposição baseada essencialmente no capítulo 11 de

- Michael T. Heath. "Scientific Computing an Introductory Survey". McGraw-Hill, 2002, New York.

e no capítulo 8 de

- Alfio Quarteroni e Fausto Saleri. "Cálculo Científico com MATLAB e Octave". Springer, 2006, Milão.