

Capítulo 4 - Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

Mestrados em Engenharia da Construção
Métodos de Aproximação em Engenharia
1º Semestre 2009/2010



Índice

Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

Características

Classificação das EDPs

Métodos Numéricos para PDEs

Problemas Dependentes do Tempo

Problemas Independentes do Tempo

Sistemas Esparsos

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

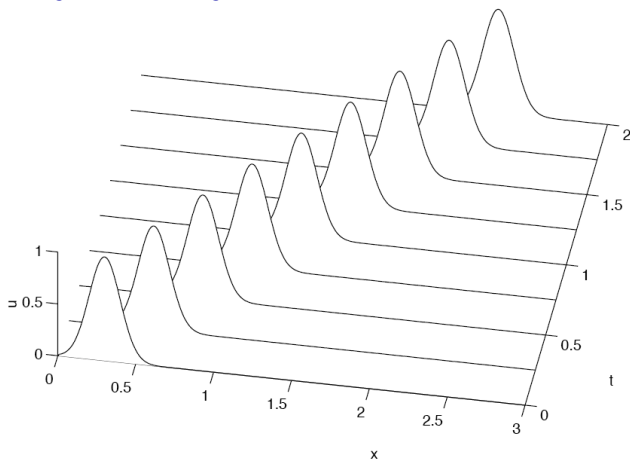
► Solução única é determinada pela condição inicial

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

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

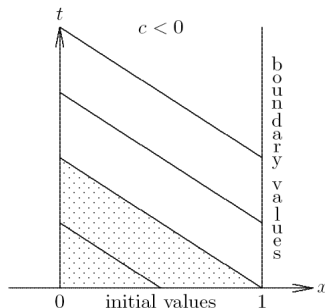
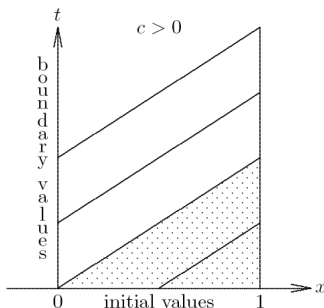


Solução típica da equação de advecção. A função inicial é



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

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

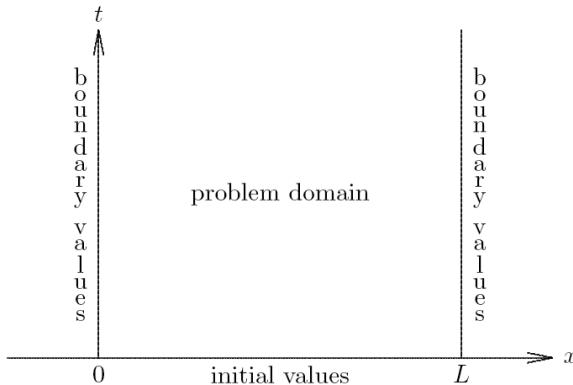
Classificação de EDPs mais genéricas não é assim tão evidente, de uma forma simplificada

- ▶ **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

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

Métodos 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

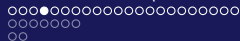
$$u_{xx}(t, x_i) \approx \frac{u(t, x_{i+1}) - 2u(t, x_i) + u(t, x_{i-1}))}{(\Delta x)^2}$$

- ▶ A EDP semidescritizada resulta num sistema de EDOs

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

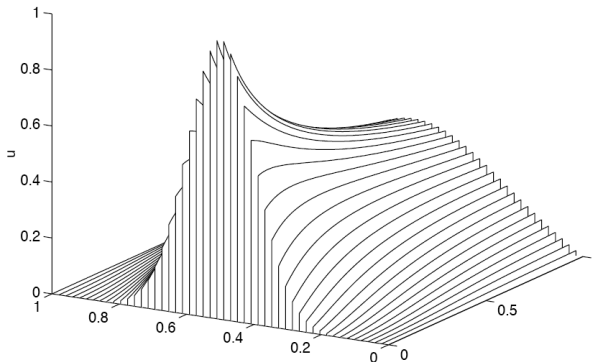
em que $y_i(t) \approx u(t, x_i)$

- ▶ 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} pelo 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

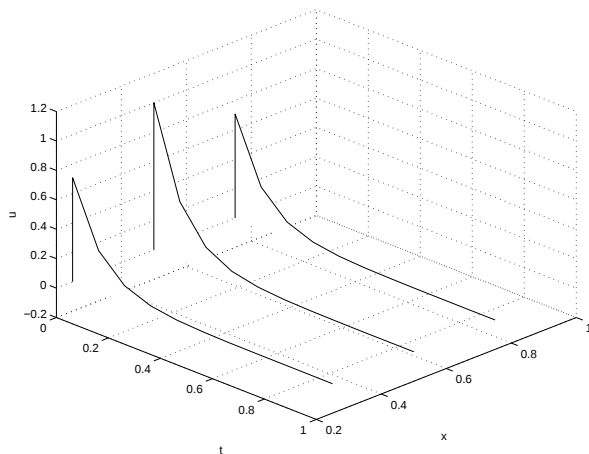
- ▶ Como as condições iniciais são $y_i(0) = \sin(0.25i\pi)$, $i = 1, 2, 3$, reduzimos a resolução da EDP original à resolução do problema de valor inicial

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

- ▶ 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

representação gráfica da resolução pelo Método das Linhas



Métodos de Discretização Completa

- ▶ *Métodos de discretização completa* para EDPs discretizam ambas as variáveis spaciais 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

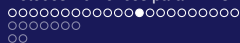
- ▶ Consideramos a equação do calor

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

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)



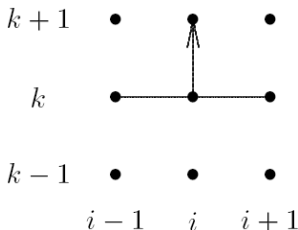
Equação do Calor, continuação

- ▶ 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

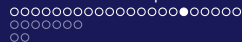
- Consideramos a equação da onda

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

com condições iniciais e de fronteira

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

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

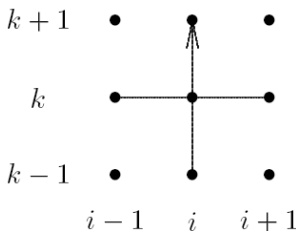


Equação da onda, continuação

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

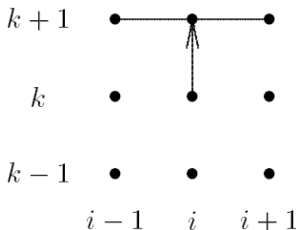
$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2c}$$

- ▶ Muitas restrições podem tornar o método relativamente ineficiente

Métodos Implícitos para Diferenças Finitas

- ▶ 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*

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



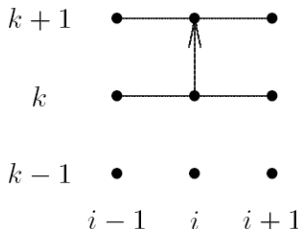
Métodos Diferenças Finitas Implícitos, continuação

- ▶ 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

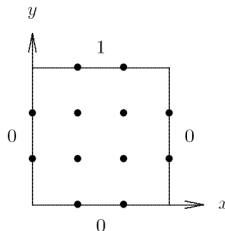
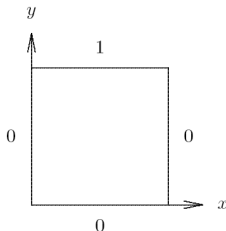


Exercício 3: Equação de Laplace

- 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 às 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 no Octave e na NMLibforOctave

→ Octave

- ▶ 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.