Capítulo 2 - Problemas de Valores Fronteira para Equações Diferenciais Ordinárias

Carlos Balsa
Departamento de Matemática

balsa@ipb.pt

Mestrados em Engenharia da Construção
Métodos de Aproximação em Engenharia
1º Semestre 2011/2012

INSTITUTO POLITÉCNICO DE BRAGANÇA
Escola Superior de Tecnologia e de Gestão

Sumário

Problemas com Valores (ou condições) de Fronteira

- Condições laterais indicando a solução ou o valor da derivada em determinados pontos são necessários para tornar a solução única
- Para problemas de valor inicial todas as condições laterais são especificadas num único ponto t_0
- Para *Problemas com Valores de Fronteira*(PVF) as condições laterais são especificadas em mais de um ponto
- EDO de ordem k, ou o sistema de primeira ordem correspondente, necessita de k condições laterais
- Para EDOs as condições laterais são tipicamente especificadas nos extremos do intervalo $[a, b]$, resultando num *problema com valores de fronteira em dois pontos* com Condições de Fronteira (CF) em dois pontos a e b

Problemas com Valores de Fronteira, continuação

- Genericamente um *PVF em dois pontos* tem a seguinte forma

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad a \leq t \leq b$$

  com CF

$$\mathbf{g} = (\mathbf{y}(a), \mathbf{y}(b)) = \mathbf{0}$$

  com $\mathbf{f} : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^n$ e $\mathbf{g} : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^n$
- Condições de fronteira são *separadas* se qualquer componente de $\mathbf{g}$ envolver apenas valores da solução em a ou em b, mas não em ambos
- Condições de fronteira são lineares se tiverem a forma

$$\mathbf{B}_a \mathbf{y}(a) + \mathbf{B}_b \mathbf{y}(b) = \mathbf{c}$$

  com $\mathbf{B}_a$, $\mathbf{B}_b \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$
- PVF é *linear* se a EDO e as CF forem ambas lineares

Exemplo 1: Condições de fronteira separadas e lineares

- PVF em dois pontos para uma EDO de segunda ordem

$$u'' = f(t, u, u'), \quad a \leq t \leq b$$

com CF

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta$$

é equivalente ao sistema de EDOs de primeira ordem

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ f(t, y_1, y_2) \end{bmatrix}, \quad a \leq t \leq b$$

com CF separadas e lineares

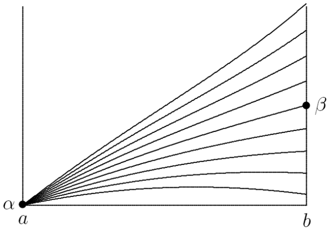
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(a) \\ y_2(a) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(b) \\ y_2(b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

Métodos Numéricos para PVFs

- Nos PVI as condições iniciais fornecem toda a informação necessária para iniciar a resolução numérica passo a passo a partir do ponto inicial
- Nos PVFs não temos informação suficiente para iniciar a resolução numérica passo a passo a partir do ponto inicial, pelo que os métodos numéricos para a resolução de PVFs são um pouco mais complexos
- Os métodos numéricos mais comuns para a resolução de PVFs em dois pontos pertencem aos seguintes tipos
  - Tentativas
  - Diferenças Finitas
  - Elementos Finitos

Métodos das Tentativas

- Ao definir o PVF em dois pontos indicamos o valor de $u(a)$
- Se conhecêssemos também o valor de $u'(a)$ teríamos um PVI que poderíamos resolver por um dos métodos estudados anteriormente
- Sem esta informação, estimamos sequencialmente valores cada vez mais correctos até encontrar o valor de $u'(a)$ para o qual a resolução do PVI correspondente tenha por solução em $t = b$ o valor de fronteira pretendido $u(b) = \beta$



Exemplo 2: Métodos das Tentativas

- Considere o PVF em dois pontos para uma EDO de segunda ordem
$$u'' = 6t, \;\; 0 \leq t \leq 1$$
com CF
$$u(0) = 0, \;\; u(1) = 1$$
- Para cada estimativa de $u'(0)$ vamos integrar o PVI resultante com o método de Runge-Kutta de 4ª ordem para determinar a proximidade da solução obtida da solução pretendida em $t = 1$
- Para simplificar vamos usar um passo $h = 0.5$ para integrar o PVI de $t = 0$ até $t = 1$ em apenas dois passos
- Em primeiro lugar transformamos a EDO de segunda ordem num sistema equivalente de primeira ordem
$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ 6t \end{bmatrix}$$

Exemplo 2, continuação

- Começamos por arbitrar o declive inicial $y_2(0) = 1$, i.e, $\mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ e resolvemos o PVI correspondente

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{h}{6}(\mathbf{D}_1 + 2\mathbf{D}_2 + 2\mathbf{D}_3 + \mathbf{D}_4) = \begin{bmatrix} 0.625 \\ 1.750 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 + \frac{h}{6}(\mathbf{D}_1 + 2\mathbf{D}_2 + 2\mathbf{D}_3 + \mathbf{D}_4) = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

- Obtemos $y_1(1) = 2$ em vez do valor desejado $y_1(1) = 1$

Exemplo 2, continuação

- Tentamos novamente agora com a estimativa do declive inicial $y_2(0) = -1$ e obtemos

$$\mathbf{y}_1 = \begin{bmatrix} -0.375 \\ -0.250 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{y}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

- Obtemos assim $y_1(1) = 0$ em vez do valor desejado $y_1(1) = 1$, mas agora sabemos que o declive inicial está compreendido entre -1 e 1

Exemplo 2, continuação

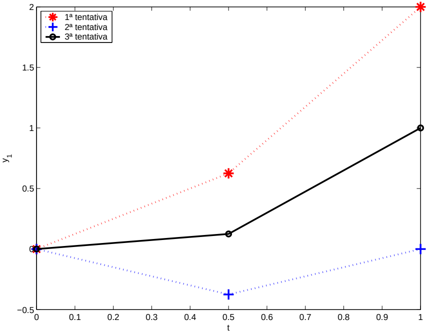
- Tentando novamente agora com a estiva do declive inicial $y_2(0) = 0$ obtemos

$$\mathbf{y}_1 = \begin{bmatrix} 0.125 \\ 0.750 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{y}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

- Obtemos assim a solução alvejada $y_1(1) = 1$

Exemplo 2, continuação

- Os resultados das três tentativas são ilustrados na figura seguinte



Diferenciação Numérica

- Dada uma função $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ e os passos h e $-h$, para aproximar a primeira e a segunda derivada em x expandimos em séries de Taylor

$$
\begin{aligned}
& f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) \ldots \\
\text{e} \quad & f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f'''(x) \ldots
\end{aligned}
$$

- Resolvendo em ordem a $f'(x)$ na primeira série obtemos a *formula da diferença em avanço*

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(x)}{2} h + \ldots \\
&\approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h},
\end{aligned}
$$

Diferenciação Numérica, continuação

- Da mesma maneira, a partir da segunda série derivamos a *formula da diferença em atraso*

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + \frac{f''(x)}{2}h + \dots \\ &\approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}, \end{aligned}$$

que também é de primeira ordem pois o maior termo desprezado é igualmente $\mathcal{O}(h)$.

Diferenciação Numérica, continuação

- Subtraindo a segunda série à primeira obtemos a *formula da diferença centrada*

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(x)}{6} h^2 + \dots \\
&\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},
\end{aligned}
$$

  que é de segunda ordem pois o maior termo desprezado é $\mathcal{O}\left(h^2\right)$.

Diferenciação Numérica, continuação

- Finalmente, adicionando as duas séries obtemos a formula da diferença centrada para a segunda derivada

$$
\begin{aligned}
f''(x) &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{f^{(iv)}(x)}{12}h^2 + \dots \\
&\approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2},
\end{aligned}
$$

cuja exactidão é também de segunda ordem.

Método das Diferenças Finitas

- Método das diferenças finitas converte PVF em sistemas de equações algébricas substituindo todas as derivadas por aproximações baseadas em diferenças finitas
- Por exemplo, para resolver o PVF em dois pontos

$$u'' = f(t, u, u'), \quad a < t < b$$

com condições de fronteira

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta$$

introduzimos uma malha de pontos $t_i = a + ih$, $i = 0, 1, \ldots, n+1$, com $h = (b-a)/(n+1)$

- Das condições de fronteira sabemos que $y_0 = u(a) = \alpha$ e $y_{n+1} = u(b) = \beta$ e procuramos valores aproximados da solução $y_i \approx u(t_i)$ em cada ponto interior da malha t_i, $i = 1, 2, \ldots, n$

Método das Diferenças Finitas, continuação

- Substituímos as derivadas por aproximações baseadas em diferenças finitas tais como

$$u'(t_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$
$$u''(t_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

- Isto conduz a sistemas de equações da forma

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f\left(t_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right)$$

  que devem ser resolvidas em ordem às incógnitas y_i, $i = 1, \ldots, n$
- Sistemas de equações podem ser ou não lineares conforme f ser ou não linear

Método das Diferenças Finitas, continuação

- Nestes casos particulares (EDO escalares de segunda ordem) os sistemas a resolver são tri-diagonais, permitindo poupar quer na quantidade de trabalho quer na quantidade de dados a armazenar em comparação com sistemas de equações genéricos
- Estas propriedades verificam-se geralmente no método das diferenças finitas: conduzem a sistemas esparsos porque cada equação envolve apenas um número reduzido de variáveis

Exemplo 3: Método das Diferenças Finitas

- Consideramos novamente o PVF em dois pontos

$$u'' = 6t, \quad 0 \leq t \leq 1$$

  com CF

$$u(0) = 0 \text{ e } u(1) = 1$$

- Para reduzir ao mínimo os cálculos, calculamos o valor aproximado da solução em apenas num ponto interior da malha, $t = 0.5$, no intervalo $[0, 1]$
- Incluindo os pontos fronteira, temos uma malha com três pontos: $t_0 = 0$, $t_1 = 0.5$ e $t_2 = 1$
- Das condições de fronteira sabemos que $u_0 = u(t_0) = 0$ e $u_2 = u(t_2) = 1$ e procuramos o valor aproximado da solução $u_1 \approx u(t_1)$

Exemplo 3, continuação

- Substituindo as derivadas em t_1 pelas formulas das diferenças finitas habituais

$$\frac{u_2 - 2u_1 + u_0}{h^2} = f\left(t_1, u_1, \frac{u_2 - u_0}{2h}\right)$$

- Substituindo valores fronteira, espaçamento da malha e segundo membro obtemos para este exemplo

$$\frac{1 - 2u_1 + 0}{(0.5)^2} = 6t_1$$

ou

$$4 - 8u_1 = 6(0.5) = 3$$

tal que

$$u(0.5) \approx u_1 = 1/8 = 0.125$$

Exercício 1: Método das Diferenças Finitas

- Considere o PVF em dois pontos

$$y'' = 3t + 4y, \quad 0 \le t \le 1$$

com CF

$$y(0) = 0 \text{ e } y(1) = 1$$

resolva EDO no intervalo $0 \le t \le 1$ por diferenças finitas usando $h = 0.2$

Método dos Elementos Finitos

- Método dos elementos finitos consiste em aproximar a função implícita na equação diferencial por uma função polinomial
- Domínio discretizado em elementos (rectas ou curvas entre os nós)
- Aproxima-se a função de maneira a minimizar o resíduo ao longo de cada elemento

Método dos Elementos Finitos, continuação

- Para resolver o PVF
$$u'' = f(t), \quad a < t < b$$
com condições de fronteira
$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta$$
introduzimos uma malha de pontos $t_i = a + ih$, $i = 0, 1, \ldots, n+1$, com $h = (b-a)/(n+1)$
- Das condições de fronteira sabemos que $y_0 = u(a) = \alpha$ e $y_{n+1} = u(b) = \beta$ e procuramos valores aproximados da solução $y_i \approx u(t_i)$ em cada ponto interior da malha t_i, $i = 1, 2, \ldots, n$
- Aproximamos a função u ao longo de cada elemento através de um polinómio do primeiro grau (recta),
$$u(t) \approx y(t) = a_0 + a_1 t$$

Método dos Elementos Finitos, continuação

- Como esta função deve respeitar as condições de fronteira do elemento i tem de se verificar

$$y_i = a_0 + a_1 t_i$$
$$y_{i+1} = a_0 + a_1 t_{i+1}$$

- Solução deste sistema de equações pode ser obtida através do método de Cramer, por exemplo,

$$a_0 = \frac{y_i t_{i+1} - y_{i+1} t_i}{t_{i+1} - t_i} \quad \text{e} \quad a_1 = \frac{y_{i+1} - y_i}{t_{i+1} - t_i}$$

- Substituindo esta solução e reagrupando os termos obtemos a função de aproximação $\boxed{y(t) = \phi_1 y_i + \phi_2 y_{i+1}}$, com $\phi_1 = \frac{t_{i+1} - t}{t_{i+1} - t_i}$ e $\phi_2 = \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i}$

Método dos Elementos Finitos, continuação

- Como a função de aproximação é linear podemos derivá-la ou integrá-la facilmente
- Derivada:

$$\frac{du}{dt} \approx \frac{d\phi_1}{dt} y_i + \frac{d\phi_2}{dt} y_{i+1} = -\frac{1}{t_{i+1} - t_i} y_i + \frac{1}{t_{i+1} - t_i} y_{i+1} = \frac{-y_i + y_{i+1}}{t_{i+1} - t_i}$$

- Integral definido:

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} u \, dt \approx \int_{t_i}^{t_{i+1}} (\phi_1 y_i + \phi_2 y_{i+1}) \, dt = \frac{y_i + y_{i+1}}{2} (t_{i+1} - t_i)$$

Método de Galerkin

- Equação diferencial original pode ser reescrita como

$$u'' - f(t) = 0$$

- Substituindo nesta equação u pela solução aproximada y, o lado direito deixa de ser zero mas sim igual a um resíduo:

$$y'' - f(t) = R$$

- Método de Galerkin: minimizar soma dos resíduos ponderados

$$\begin{aligned} &\int_{t_i}^{t_{i+1}} R\phi_j \, dt = 0, \qquad j = 1,2 \\ \Leftrightarrow &\int_{t_i}^{t_{i+1}} \left[y'' - f(t)\right] \phi_j \, dt = 0, \qquad j = 1,2 \\ \Leftrightarrow &\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'' \phi_j \, dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t)\, \phi_j \, dt, \qquad j = 1,2 \end{aligned}$$

Método de Galerkin, continuação

- Integrando por partes o lado esquerdo da equação anterior

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'' \phi_j \, dt = \left[\phi_j y'\right]_{t_i}^{t_{i+1}} - \int_{t_i}^{t_{i+1}} y' \phi_j' \, dt, \qquad j = 1, 2$$

- Sabendo que $\phi_1(t_{i+1}) = 0$, $\phi_1(t_i) = 1$, $\phi_2(t_{i+1}) = 1$ e $\phi_2(t_i) = 0$

$$\left[\phi_1 y'\right]_{t_i}^{t_i+1} = -y'(t_i) \quad \text{e} \quad \left[\phi_2 y'\right]_{t_i}^{t_{i+1}} = y'(t_{i+1})$$

- Substituindo na equação original e reorganizando para $j = 1$ e $j = 2$ obtemos as duas equações relativas ao elemento i

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y' \phi_1' \, dt = -y'(t_i) - \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t) \phi_1 \, dt$$

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y' \phi_2' \, dt = y'(t_{i+1}) - \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t) \phi_2 \, dt$$

Formulação Matricial

- Aplicando as formulas de derivação e primitivação que vimos anteriormente

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'\phi_1'\ dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{y_i - y_{i+1}}{(t_{i+1}-t_i)^2}\ dt = \frac{1}{(t_{i+1}-t_i)}(y_i - y_{i+1})$$

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'\phi_2'\ dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{-y_i + y_{i+1}}{(t_{i+1}-t_i)^2}\ dt = \frac{1}{(t_{i+1}-t_i)}(-y_i + y_{i+1})$$

- Substituindo nas equações relativas ao elemento *i*

$$\frac{1}{(t_{i+1}-t_i)}(y_i - y_{i+1}) = -y'(t_i) - \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t)\,\phi_1\ dt$$

$$\frac{1}{(t_{i+1}-t_i)}(-y_i + y_{i+1}) = y'(t_{i+1}) - \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t)\,\phi_2\ dt$$

Formulação Matricial, continuação

- As duas equações anteriores podem ser representadas matricialmente

$$\underbrace{\frac{1}{(t_{i+1}-t_i)}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_{\text{Matriz de rigidez}}\begin{bmatrix} y_i \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -y'(t_i) \\ y'(t_{i+1}) \end{bmatrix}}_{\text{Cond. de fronteira}} - \underbrace{\begin{bmatrix} \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t)\,\phi_1\,dt \\ \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t)\,\phi_2\,dt \end{bmatrix}}_{\text{Efeitos Externos}}$$

- Sistema relativo ao nó i, para obter o sistema completo (incluindo todos os nós) devemos incluir todos os n elementos nos quais o domínio foi decomposto
- Para obter a solução aproximada y_i, para $i = 0, 1, 2, ..., n+1$ será necessário resolver um sistema com $n+1$ equações e $n+1$ incógnitas, resultante da junção dos n sistemas semelhantes ao anterior

Exemplo 4: Método dos Elementos Finitos

- Consideramos novamente o PVF

$$u'' = 6t, \quad 0 \leq t \leq 1$$

com CF

$$u(0) = 0 \text{ e } u(1) = 1$$

- Para reduzir ao mínimo os cálculos, calculamos o valor aproximado da solução em apenas num ponto interior da malha, $t = 0.5$, no intervalo $[0, 1]$
- Incluindo os pontos fronteira, temos uma malha com três pontos que corresponde a dois elementos, um que liga $t_0 = 0$ a $t_1 = 0.5$ e outro que liga $t_1 = 0.5$ a $t_2 = 1$
- Das condições de fronteira sabemos que $y_0 = u(t_0) = 0$ e $y_2 = u(t_2) = 1$ e procuramos o valor aproximado da solução $y_1 \approx u(t_1)$

Exemplo 4, continuação

- As duas equações relativas ao primeiro elemento são

$$\frac{1}{(t_1 - t_0)}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y'(t_0) \\ y'(t_1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \int_{t_0}^{t_1} f(t)\,\phi_1\,dt \\ \int_{t_0}^{t_1} f(t)\,\phi_2\,dt \end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -u'(t_0) \\ u'(t_1) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.25 \\ 0.50 \end{bmatrix}$$

- As equações relativas ao segundo elemento são

$$\frac{1}{(t_2 - t_1)}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y'(t_1) \\ y'(t_2) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \int_{t_1}^{t_2} f(t)\,\phi_1\,dt \\ \int_{t_1}^{t_2} f(t)\,\phi_2\,dt \end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -u'(t_1) \\ u'(t_2) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1.00 \\ 1.25 \end{bmatrix}$$

Exemplo 4, continuação

- Juntando os dois sistemas num só obtemos

$$\begin{bmatrix} 2 & -2 & 0 \\ -2 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -u'(t_0) - 0.25 \\ -1.5 \\ u'(t_2) - 1.25 \end{bmatrix}$$

- Como y_0 e y_2 são conhecidos, mas não conhecemos $u'(t_0)$ e $u'(t_2)$, o sistemas pode ser reescrito como

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & -2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u'(t_0) \\ y_1 \\ u'(t_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ -3.25 \end{bmatrix}$$

solução deste sistema é $u'(t_0) = 0$, $y_1 = 0.125$ e $u'(t_2) = 3$

Métodos Disponíveis na NMLibforOctave

- Método das Tentativas: `[...] = ode_shoot(...)`
- Método das Diferenças Finitas: `[...] = ode_finit_diff(...)`

Bibliografia

Exposição baseada essencialmente no capítulo 10 de

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

e no capítulo 31 de

- Steven C. Chapra e Raymond P. Canale, "Métodos Numéricos para Engenharia", McGraw-Hill, São Paulo, 2008.