

# 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 2011/2012



# Índice

## Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

Equações Diferenciais às Derivadas Parciais

Características

Classificação das EDPs

# 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

# 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

## 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

## 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
- ▶ Quanto 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 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
- ▶ Quanto 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 EDPs simples (e não com sistemas de várias EDPs) 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  $t$

## Equações Diferenciais às Derivadas Parciais, continuação

- ▶ Para simplificar, vamos lidar apenas com problemas EDPs simples (e não com sistemas de várias EDPs) 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



## 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  $\mathbb{R}$

## 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  $x$

## 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 $u(t, x) = u_0(x - ct)$

## Exemplo 1: Equação da Advecção

### ▶ Equação da Advecção

$$u_t = -cu_x$$

com  $c$  uma constante não nula

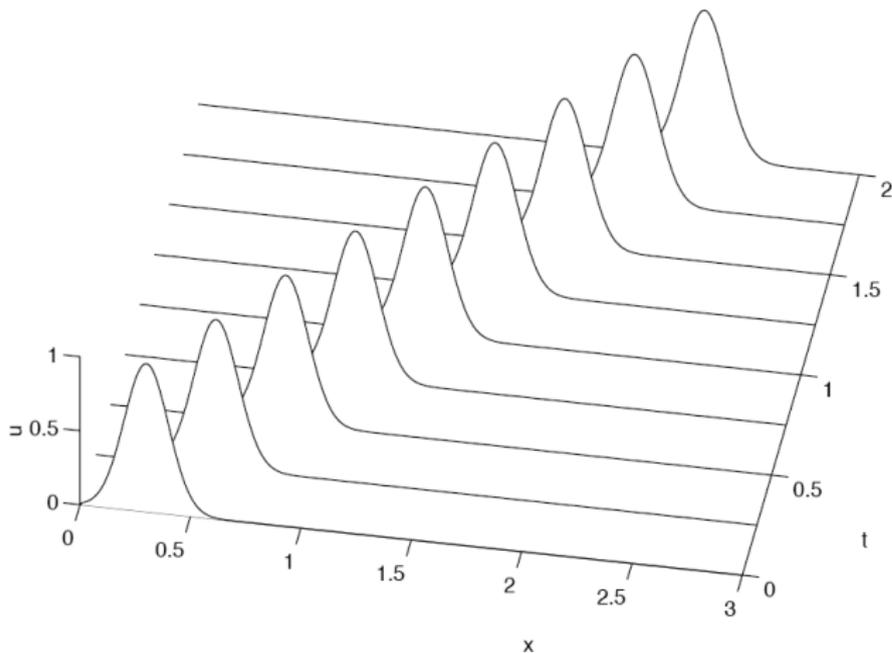
### ▶ Solução única é determinada pela condição inicial

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

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

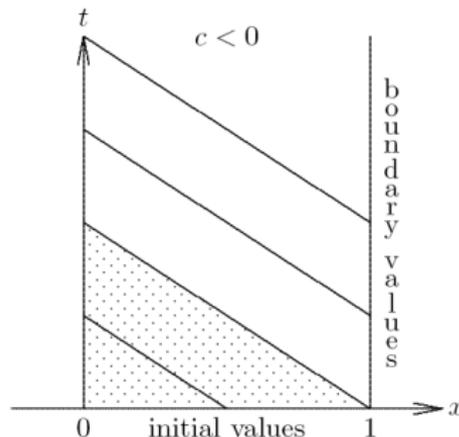
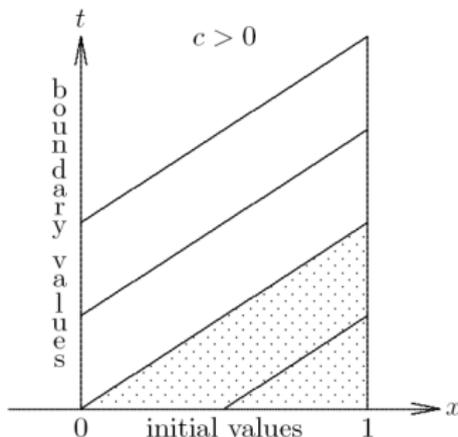
## Características

- ▶ *Características* de uma EDP são curvas de nível da solução



## Características

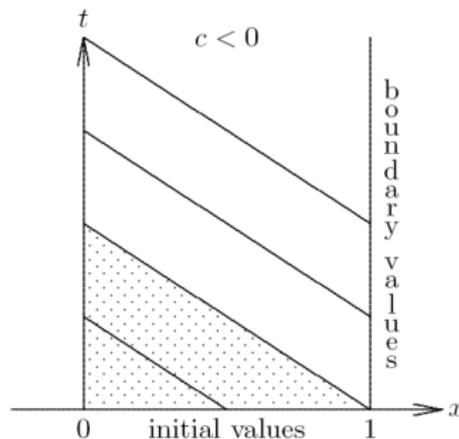
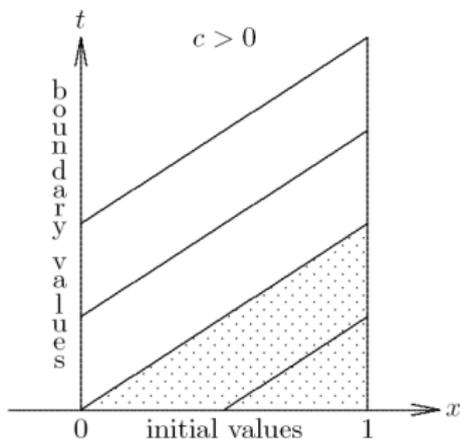
- ▶ **Características** de uma EDP são curvas de nível da solução
- ▶ Para a equação da advecção  $u_t = -cu_x$  as características são linhas rectas com declive  $c$





## Características

- ▶ **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 onde as condições de fronteira devem 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

## 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

## 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  $b^2 - 4ac$

## 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

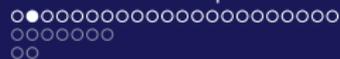
Classificação de EDPs mais genéricas não é assim tão evidente, de uma forma simplificada

## 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





## Métodos semidiscretos

- ▶ Uma forma de resolver numericamente EDPs dependentes do tempo consiste em discretizar o espaço e manter a variável tempo contínua



## 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





## Métodos das Diferenças Finitas Semidiscreto

- ▶ Definimos os pontos da malha espacial  $x_i = i\Delta x$ ,  $i = 0, 1, \dots, n + 1$ , em que  $\Delta x = 1/(n + 1)$

## 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  $u_{xx}$  pelo aproximação das diferenças finitas

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

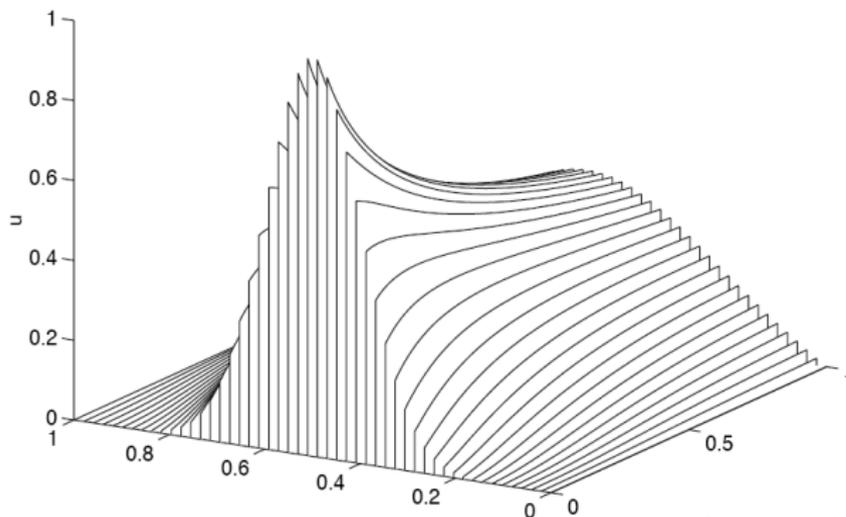






## Métodos das Linhas

- ▶ 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

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

## Exercício 1: Método das Linhas

- ▶ Consideramos a equação do calor

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

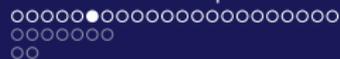
com condição inicial

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

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  $n + 1 = 1/0.25$

## 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

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

## 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

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

## 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

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

## 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

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

## Exercício 1, resolução

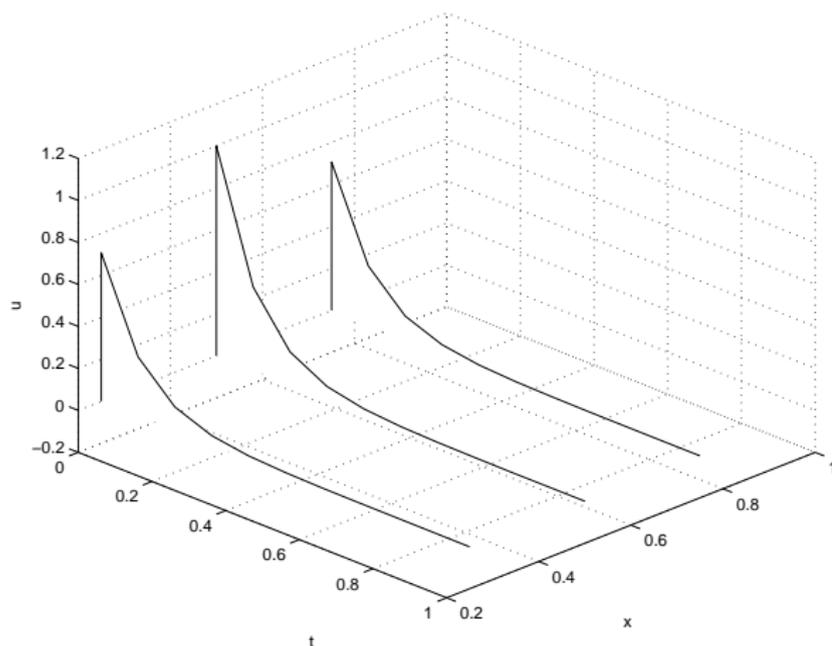
- ▶ Como as condições iniciais são  $y_i(0) = \sin(0.25i\pi)$ ,  $i = 1, 2, 3$ , reduzimos a resolução da EDP original à resolução do problema de valor inicial

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

- ▶ Resolvendo este PVI por um dos métodos previamente estudados, como por exemplo o Runge-Kutta de 4<sup>a</sup> 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 espaciais e temporais

## 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

## 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

## 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

## 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

## 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 a pontos do passado

## 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 a pontos do passado
- ▶ Podemos esperar obter relativamente boas aproximações da solução usando passos de tempo e espaço suficientemente pequenos

## 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 a 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

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

## 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  $\Delta t$  aconselhável

## 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  $\Delta t$  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

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

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



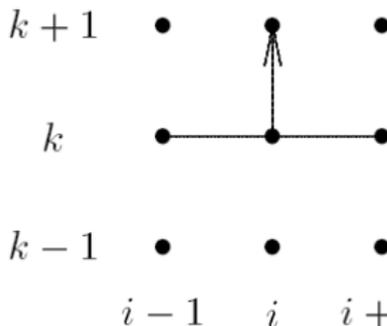
## Equação do Calor, continuação

- ▶ 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  $u_i^0 = f(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$

## 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*

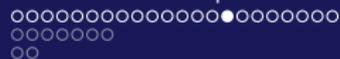
## Equação do Calor, continuação

- ▶ 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



## 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  $\Delta t = 0.25$

## 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  $\Delta x$  e temporais  $\Delta t$ . 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

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

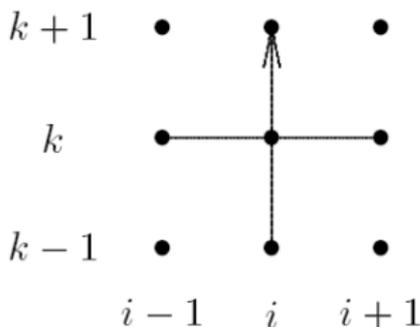
$$u(t, 0) = \alpha, \quad u(t, 1) = \beta$$

## 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

## 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

## 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

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

## 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

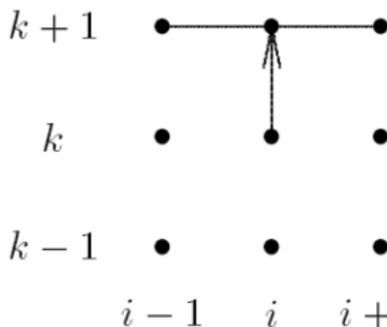
- ▶ Os métodos implícitos para EDOs apresentam uma maior região de estabilidade para o passo em comparação com os métodos explícitos. O mesmo se verifica para resolução de EDPs



## 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*

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



## 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  $\Delta t$  e  $\Delta x$

## 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  $\Delta t$  e  $\Delta x$
- ▶ Mas como se trata de um esquema de primeira ordem no tempo, a exactidão pretendida limita fortemente a escolha do passo de tempo





## Problemas Independentes do Tempo

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

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

## 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  $f = 0$

## 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



## 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



## 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

## 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



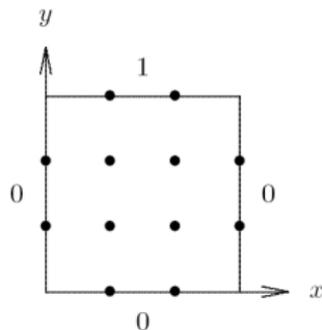
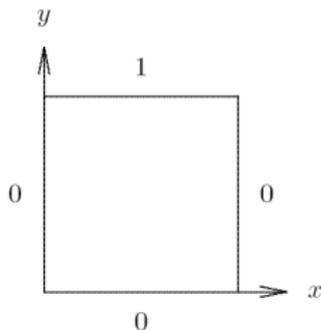


### Exercício 3: Equação de Laplace

- ▶ 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  $h = 1/(n + 1) = 1/3$



## 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

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

## 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



## 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  $A$

## 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  $A = A^T$

## 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  $y \neq 0 \in \mathbb{R}^n$

## 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

## 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

## 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  $A$

## 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()`

## Métodos Disponíveis na NMLibforOctave

- ▶ Método das Linhas (eq. do calor): `[] = pde_heat_lines()`
- ▶ Mét. Discret. Total Explícito (eq. advecção): `[] = pde_advec_exp()`

## 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()`

## 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()`

## 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(...)`

## 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.