Problemas com Valores de Fronteira para Equações Diferenciais Ordinárias

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

Matemática Aplicada - Mestrados Eng. Química e Industrial

Outline

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 **g** envolver valores da solução apenas 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 $\mathbf{B}_a$, $\mathbf{B}_b \in \mathbb{R}^{n\times n}$ and $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$

- PVF é *linear* se a EDO e as CF forem ambas lineares

Exemplo: Condições de fronteira separadas e lineares

- PVF em dois pontos para uma EDO de segunda ordem

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

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

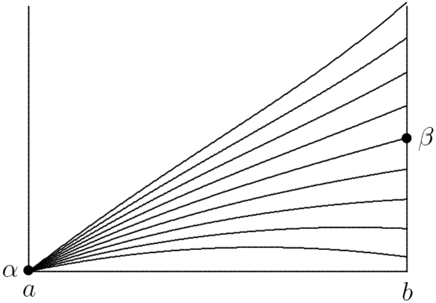
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(a) \\ y_2(a) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(b) \\ y_2(b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

Métodos Numéricos para PVFs

- Nos PVI as condições iniciais fornecem toda a informação necessária para iniciara 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
    - Colocação
    - Galerkin

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, Métodos das Tentativas

- Considere o PVF em dois pontos para uma EDO de segunda ordem
$$u'' = 6t, \quad 0 \leq t \leq 1$$
com CF
$$u(0) = 0, \quad u(1) = 1$$
- 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, Métodos das Tentativas

- Começamos por estimar o declive inicial $y_2(0) = 1$

$$\mathbf{y}^{(1)} = \mathbf{y}^{(0)} + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) = \begin{bmatrix} 0.625 \\ 1.750 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}^{(2)} = \mathbf{y}^{(1)} + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

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

Exemplo, Métodos das Tentativas

- Tentamos novamente agora com a estiva 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, Métodos das Tentativas

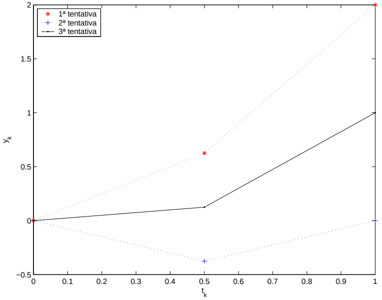
- Tentando novamente agora com a estiva do declive inicial $y_2(0) = 0$ obtemos

$$\mathbf{y}^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.125 \\ 0.750 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{y}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

- Obtemos assim a solução alvejada $y_1(1) = 0$

Exemplo, Métodos das Tentativas

- 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*

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

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

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*

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

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

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

com condições de fronteira

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

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 derivas 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: Método das Diferenças Finitas

- Consideramos novamente o PVF em dois pontos

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

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, continuação

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

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

- 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: Método das Diferenças Finitas

- Considere o PVF em dois pontos

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

com CF

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

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