Aula 15
Problemas de Valor de Contorno

MS211 - Cálculo Numérico

Marcos Eduardo Valle

Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Universidade Estadual de Campinas

Introdução

Na aula anterior, sistemas de equações diferenciais e equações de ordem superior com condição de valor inicial.

Em particular, um problema de valor inicial

$$v'' = f(x, v, v'), \qquad v(x_0) = \gamma_1 \quad \text{e} \quad v'(x_0) = \gamma_2,$$

pode ser escrito como o sistema

$$\begin{cases} y_1' &= y_2, \qquad\qquad y_1(x_0) &= \gamma_1, \\ y_2' &= f(x, y_1, y_2), \quad y_2(x_0) &= \gamma_2, \end{cases}$$

e resolvido usando um método de Runge-Kutta, por exemplo.

Muitos problemas, porém, são descritos por uma equação diferencial de segunda ordem com condições em mais de um ponto. Estes são os chamados problemas de valor de contorno.

Problema de Valor de Contorno

A forma mais geral de um problema de valor de contorno (PVC) é

$$\begin{cases} v''(x) = f\big(x, v(x), v'(x)\big), \\ \alpha_1 v(a) + \beta_1 v'(a) = \gamma_1, \\ \alpha_2 v(b) + \beta_2 v'(b) = \gamma_2, \end{cases}$$

em que $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ são constantes reais conhecidas tais que α_i e β_i não se anulam simultaneamente, para $i = 1, 2$.

Assumimos que x pertence ao intervalo $[a, b]$.

Assumiremos que um PVC possui uma única solução que possui derivadas contínuas.

Iremos aproximar a solução do PVC usando o **método das diferenças finitas.**

Problema de Valor de Contorno Linear

Um PVC é dito linear se f é linear em $v(x)$ ou $v'(x)$.

A forma mais geral de um PVC linear é

$$\begin{cases} v''(x) = A(x)v'(x) + B(x)v(x) + C(x), \\ \alpha_1 v(a) + \beta_1 v'(a) = \gamma_1, \\ \alpha_2 v(b) + \beta_2 v'(b) = \gamma_2. \end{cases}$$

em que A, B e C são funções de x.

Vamos começar a discussão com PVC lineares, que são relativamente mais fáceis.

Discretização do PVC

Primeiramente, dividimos o intervalo $[a, b]$ em $n+1$ subintervalos de tamanho h, ou seja, definimos

$$x_k = a + kh, \quad k = 0, 1, \ldots, n, \quad \text{com} \quad h = \frac{b-a}{n+1}.$$

Os pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$, chamados **malha**, representam uma discretização do intervalo $[a, b]$.

Note que $x_0 = a$ e $x_{n+1} = b$ são os **pontos de contorno.**

Os pontos $x_1, x_2, \ldots, x_n$ estão no **interior da malha.**

Aproximação para v'

Seja x_k um ponto no interior da malha.

A primeira derivada de v no ponto x_k pode ser aproximada por:

- **Diferença Avançada:** $v'(x_k) \approx \dfrac{v(x_k+h)-v(x_k)}{h}$.
- **Diferença Atrasada:** $v'(x_k) \approx \dfrac{v(x_k)-v(x_k-h)}{h}$.
- **Diferença Centrada:** $v'(x_k) \approx \dfrac{v(x_k+h)-v(x_k-h)}{2h}$.

Mostraremos a seguir que

- A diferença avançada possui erro local $\mathcal{O}(h)$.
- A diferença centrada possui erro local $\mathcal{O}(h^2)$.

Pode-se mostrar que a diferença atrasada também possui erro local $\mathcal{O}(h)$.

Erro da Aproximação pela Diferença Avançada

Temos um erro quando aproximamos $v'(x_k)$ usando a diferença avançada.

Com efeito, pela série de Taylor temos

$$v(x_k + h) = v(x_k) + hv'(x_k) + \frac{1}{2}v''(\xi_k)h^2,$$

em que ξ_k é um ponto entre x_k e $x_k + h$.

Dessa forma, o erro local ao usar a diferença avançada é

$$E = \left| v'(x_k) - \frac{v(x_k + h) - v(x_k)}{h} \right| = \left| \frac{v''(\xi_k)}{2} h \right| \leq \frac{M}{2} h,$$

em que $M > 0$ é tal que $|v''(x)| \leq M$ para todo $a \leq x \leq b$.

Portanto, o erro local da diferença avançada é $\mathcal{O}(h)$.

Erro da Aproximação pela Diferença Centrada

Pela série de Taylor, temos que

$$v(x_k + h) = v(x_k) + hv'(x_k) + \frac{1}{2}v''(x_k)h^2 + \frac{1}{6}v'''(\mu_k)h^3,$$

e

$$v(x_k - h) = v(x_k) - hv'(x_k) + \frac{1}{2}v''(x_k)h^2 - \frac{1}{6}v'''(\nu_k)h^3,$$

em que $\mu_k \in (x_k, x_k + h)$ e $\nu \in (x_k - h, x_k)$.

Subtraindo a segunda equação da primeira, encontramos

$$v(x_k + h) - v(x_k - h) = 2v'(x_k)h + \frac{1}{6}\Big(v'''(\mu_k) + v'''(\nu_k)\Big)h^3.$$

Logo, o erro local ao usar a diferença centrada é

$$
\begin{aligned}
E &= \left| v'(x_k) - \frac{v(x_k + h) - v(x_k - h)}{2h} \right| \\
&= \left| \frac{1}{12} \Big(v'''(\mu_k) + v'''(\nu_k) \Big) h^2 \right| \leq \frac{M}{6} h^2,
\end{aligned}
$$

em que $M > 0$ é tal que $|v'''(x)| \leq M$ para todo $a \leq x \leq b$.

Concluindo, o erro local da diferença centrada é $\mathcal{O}(h^2)$.

Aproximação para v''

Seja x_k um ponto no interior da malha.

Sabemos que

$$v(x_k+h) = v(x_k)+v'(x_k)h+v''(x_k)\frac{h^2}{2}+v'''(x_k)\frac{h^3}{6}+v^{(iv)}(\mu_k)\frac{h^4}{4!}$$

e

$$v(x_k-h) = v(x_k)-v'(x_k)h+v''(x_k)\frac{h^2}{2}-v'''(x_k)\frac{h^3}{6}+v^{(iv)}(\nu_k)\frac{h^4}{4!}$$

em que $\mu_k \in (x_k, x_k+h)$ e $\nu \in (x_k-h, x_k)$.

Somando as duas equações, encontramos

$$v(x_k+h)+v(x_k-h) = 2v(x_k)+v''(x_k)h^2+\left(v^{(iv)}(\mu_k)+v^{(iv)}(\nu_k)\right)\frac{h^4}{4!}.$$

Logo, podemos considerar a seguinte aproximação

$$v''(x_k) \approx \frac{v(x_k - h) - 2v(x_k) + v(x_k + h)}{h^2}.$$

O erro local dessa aproximação é

$$\begin{aligned} E &= \left| v''(x_k) - \frac{v(x_k + h) - 2v(x_k) + v(x_k - h)}{h^2} \right| \\ &= \left| \left(v^{(iv)}(\mu_k) + v^{(iv)}(\nu_k) \right) \frac{h^2}{4!} \right| \leq \frac{M}{12} h^2, \end{aligned}$$

em que $M > 0$ é tal que $|v^{(iv)}(x)| \leq M$ para todo $a \leq x \leq b$.

Aproximação de um PVC Linear

Vamos iniciar considerando o PVC linear:

$$\begin{cases} v''(x) = A(x)v'(x) + B(x)v(x) + C(x), \\ v(a) = \gamma_1, \\ v(b) = \gamma_2. \end{cases}$$

que é obtido considerando $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ e $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

Substituindo v' pela diferença centrada e usando a aproximação da página anterior para v'', obtemos

$$\frac{1}{h^2}\Big(v(x_{k+1}) - 2v(x_k) + v(x_{k-1})\Big)$$
$$= \frac{1}{2h}A(x_k)\big(v(x_k + h) + v(x_k - h)\big) + B(x_k)v(x_k) + C(x_k),$$

para todo $k = 1, 2, \ldots, n$.

Escrevendo $v_k = v(x_k)$, $A_k = A(x_k)$, $B_k = B(x_k)$ e $C_k = C(x_k)$, encontramos

$$\frac{1}{h^2}\left(v_{k+1} - 2v_k + v_{k-1}\right) = \frac{A_k}{2h}(v_{k+1} - v_{k-1}) + B_k v_k + C_k,$$

Equivalentemente, temos

$$r_k v_{k-1} + p_k v_k + q_k v_{k+1} = -h^2 C_k, \quad \forall k = 1, \ldots, n,$$

em que

$$p_k = 2 + B_k h^2, \quad q_k = -1 + \frac{A_k h}{2} \quad \text{e} \quad r_k = -1 - \frac{A_k h}{2}.$$

Além disso, as condições de contorno fornecem

$$v_0 = \gamma_1 \quad \text{e} \quad v_{n+1} = \gamma_2.$$

As equações acima podem ser escritas como o seguinte sistema linear tridiagonal

$$\underbrace{\begin{bmatrix} p_1 & q_1 & & & \\ r_2 & p_2 & q_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r_{n-1} & p_{n-1} & q_{n-1} \\ & & & r_n & p_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}} = \underbrace{\begin{bmatrix} -r_1\gamma_1 - h^2 C_1 \\ -h^2 C_2 \\ \vdots \\ -h^2 C_{n-1} \\ -q_n\gamma_2 - h^2 C_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}}.$$

Concluindo, uma aproximação para a solução de um PVC

$$\begin{cases} v''(x) = A(x)v'(x) + B(x)v(x) + C(x), \\ v(a) = \gamma_1, \\ v(b) = \gamma_2. \end{cases}$$

nos pontos $x_1, \ldots, x_n$ do interior da malha, pode ser obtida resolvendo um sistema linear $\mathbf{Av} = \mathbf{b}$, em que a matriz $\mathbf{A}$ é tridiagonal.

Exemplo 1

Use o método das diferenças finitas para obter uma aproximação do PVC linear

$$\begin{cases} v''(x) + 2v'(x) + v(x) = x, \\ v(0) = 0 \quad \text{e} \quad v(1) = -1, \end{cases}$$

para $0 \leq x \leq 1$, considerando $h = 0.1$ e $h = 0.05$.
Compare os resultados obtidos com a solução exata

$$v(x) = 2e^{-x}(1 - x) + x - 2.$$

Resolução: A solução do PVC é obtida resolvendo o sistema linear tridiagonal $\mathbf{Av} = \mathbf{b}$, em que

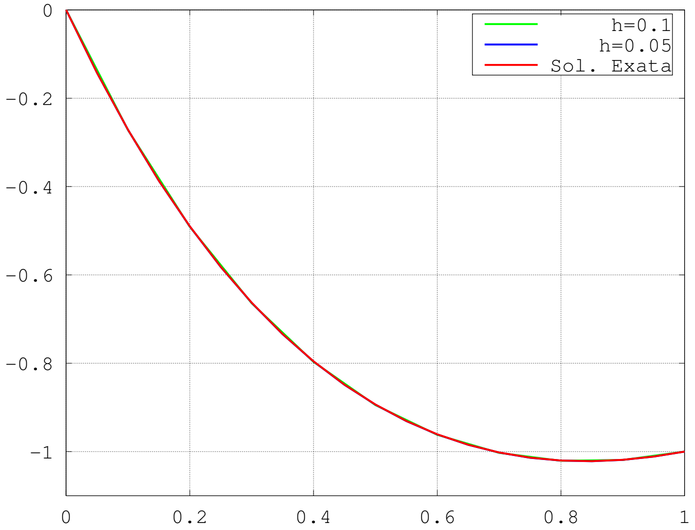
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2-h^2 & -1-h & & & \\ -1+h & 2-h^2 & -1-h & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1+h & 2-h^2 & -1-h \\ & & & -1+h & 2-h^2 \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} -h^3 \\ -2h^3 \\ \vdots \\ -(n-1)h^3 \\ -1-h-nh^3 \end{bmatrix}.$$

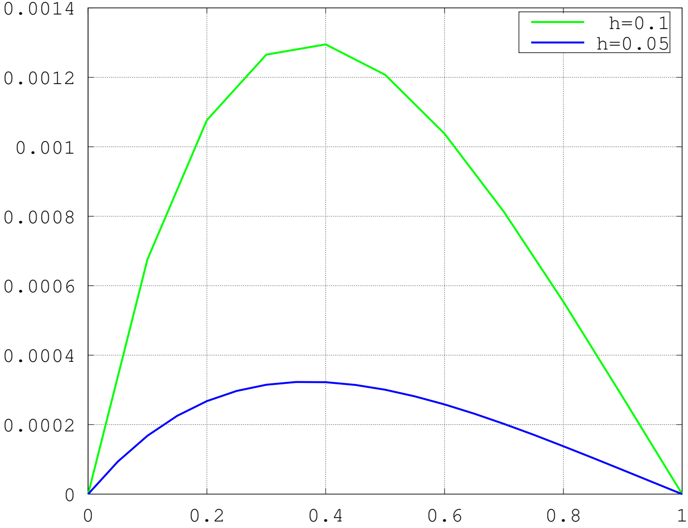
Resolvendo esse sistema encontramos o seguintes gráficos:

Gráfico da solução (aproximada e exata):



Aparentemente, não há diferenças significativas entre as aproximações e a solução exata.

Gráfico do erro global (aproximação $\times$ solução exata):



Observe que o erro obtido com $h = 0.05$ é muito menor que o erro obtido considerando $h = 0.1$.

Especificamente, temos os erros globais:

- Para $h = 0.1$, o erro global é:

$$E_{\{h=0.1\}} = \max_{1 \le k \le n} |v(x_k) - v_k| = 1.2946 \times 10^{-3}.$$

- Para $h = 0.05$, o erro global é:

$$E_{\{h=0.05\}} = \max_{1 \le k \le n} |v(x_k) - v_k| = 3.2278 \times 10^{-4}.$$

Lembre-se que o método considerado utiliza apenas diferenças divididas $\mathcal{O}(h^2)$. Logo, dividindo h por 2, espera-se que o erro seja reduzido por $1/4$. Com efeito,

$$\frac{E_{\{h=0.1\}}}{E_{\{h=0.05\}}} = 4.0107.$$

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos o método das diferenças finitas para resolver um problema de valor de contorno (PVC).

Especificamente, apresentamos as fórmulas para aproximar a derivada primeira e a derivada segunda, bem como a ordem do erro das aproximações.

O erro global da aproximação para a solução do PVC é da ordem do erro das diferenças divididas.

No caso de um PVC linear, com condição de contorno sobre v, a aproximação é obtida resolvendo um sistema linear tridiagonal, que pode ser resolvido considerando uma variação da Eliminação de Gauss ou utilizando um método iterativo.