Problemas de Valor de Contorno

Paulo J. S. Silva

12 de setembro de 2017

1 Problemas de Valor de Contorno

Estudamos anteriormente problemas de valor inicial, onde toda a dinâmica está definida pela equação diferencial e o valores da função desconhecida e, eventualmente, de algumas de suas derivadas de ordem mais baixa em um instante inicial t_0. Em particular, se a equação diferencial envolve y, y' e y'' consideramos um problema na forma

$$\begin{aligned} y''(t) &= f(t, y(t), y'(t)) \qquad t > t_0, \\ y(t_0) &= \alpha, \\ y'(t_0) &= \beta. \end{aligned}$$

Esse tipo de problema é bem natural se estamos estudando a evolução de algo no tempo, já que nesse caso é esperado que a situação do objeto estudado seja conhecida no tempo inicial t_0. Note que as condições iniciais são a chave para garantir que a solução do sistema seja única.

Porém há situações em que não conhecemos o valor da derivada de y no ponto inicial. Se tivermos apenas o valor de y em um ponto ainda sobrará um grau de liberdade e a equação diferencial não terá a sua solução completamente determinada. Para evitar isso uma outra possibilidade é conhecermos o valor de y em um outro ponto além do inicial. Por exemplo, podemos estar interesados em considerar problemas do tipo

$$\begin{aligned} y''(x) &= f(x, y(x), y'(x)) \qquad a < x < b, \\ y(a) &= \alpha, \\ y(b) &= \beta. \end{aligned}$$

Nesse caso conhecemos os valores que de y em dois pontos, que chamamos de *valores de contorno*. Um exemplo o estudo do movimento de um projétil quando conhecemos apenas a força que age sobre ele e a sua posição em dois intantes de tempo mas não conhecemos a sua velocidade inicial.

Nessa parte do curso vamos estudar métodos numéricos para resolução do problema acima que é conhecido como *problema de valores de contorno (PVC)*.

1.1 Método das diferenças finitas

Vamos estudar o uso do método de diferenças finitas para resolver um problema de valor de contorno. Assim como foi feito no caso do PVI, vamos tentar resolver o problema usando métodos numéricos. Dessa forma, é mais uma vez natural desistir de encontrar uma função como solução, e aceitar encontrar apenas aproximações dos valores da (função) solução em um conjunto pré-definido de pontos. Mais uma vez vamos considerar uma discretização do intervalo $a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N = b$ e o nosso objetivo será simplesmente encontrar aproximações y_i do valores da (função) solução nos pontos x_i. Ou seja queremos encontrar y_i tal que

$$y_i \approx y(x_i), \qquad i = 0, \ldots, N,$$

em que y é a solução do PVC.

A grande dificuldade de resolver uma equação diferencial é lidar com os termos que envolvem as derivadas (primeira e segunda) da função icógnita. Vamos tentar evitar isso aproximando essas derivadas por fórmulas que dependem apenas dos valores de y. Mais uma vez a ferramenta que temos para conseguir são as expansões de Taylor. Recapitulando, se y é $n+1$ diferenciável temos

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \ldots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(x) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}y^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (x, x+h).$$

Lembrem mais uma vez que o ponto ξ que aparece na fórmula acima não é conhecido exatamente, apenas sabemos que ele pertence ao intervalo $(x, x+h)$.

Usando essa fórmula podemos obter diretamente aproximações para a primeira derivada de y que dependem apenas dos valores da função y. De fato,

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(\xi).$$

Portanto,

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \frac{h}{2}y''(\xi).$$

E, se h é pequeno, podemos escrever

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h}.$$

Essa fórmula é conhecida como *diferença avançada* e vemos que o erro nela é proporcial a h. Esse tipo de erro é dito *da ordem* h e usamos a notação $O(h)$.

De maneira análoga podemos deduzir a fórmula de *diferença atrasada*:

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{h}.$$

De novo uma fórmula com erro da ordem de h.

Além disso, podemos aproveitar as duas fórmulas de Taylor usadas acima e conseguir algo ainda melhor

$$\begin{aligned}
y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(\xi^+), \quad \xi^+ \in (x_i, x_{i+1}) \\
y(x_{i-1}) &= y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^3}{3!}y'''(\xi^-), \quad \xi^- \in (x_{i-1}, x_i).
\end{aligned}$$

De forma análoga ao que foi feito no método do ponto médio na seção anterior, ao subtrairmos essas duas fórmulas obtemos

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = 2hy'(x_i) + O(h^3).$$

De onde obtemos

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} + O(h^2).$$

Essa é uma aproximação para y' que parece melhor do que as duas anteriores já que o seu erro é proporcional a h^2 que é bem menor que h para h pequeno. Essa fórmula é conhecida como *diferença centrada* e é geralmente é mais interessante do que as diferenças avançada e atrasada.

Agora para podermos atacar o PVC como descrito acima, que envolve também as derivadas segundas de y, precisamos de alguma aproximação para essa derivada. De novo partimos das expansões de Taylor de x_{i-1} e x_{i+1} em torno de x_i.

$$
\begin{aligned}
y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(\xi) + \frac{h^4}{4!}y(\xi^+), \quad \xi^+ \in (x_i, x_{i+1}) \\
y(x_{i-1}) &= y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^3}{3!}y'''(\xi) + \frac{h^4}{4!}y(\xi^-), \quad \xi^- \in (x_{i-1}, x_i).
\end{aligned}
$$

Só que agora ao invés de subtrair vamos somar as expressões para obter

$$
y(x_{i+1}) + y(x_{i-1}) = 2y(x_i) + h^2 y''(x_i) + O(h^4).
$$

Isolando o $y''(x_i)$ que é o que desejamos aproximar obtemos

$$
y''(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2).
$$

Isso quer dizer que a aproximação para a derivada

$$
y''(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2},
$$

também é de ordem de h^2, assim como a diferença centrada para aproximar y'. Essa aproximação é conhecida também como *diferença centrada*, mas agora para aproximar a segunda derivada.

Estamos prontos para colocar isso em prática para resolver um PVC.

1.2 Problemas lineares

Vamos começar pensando como resolver um problema de valores de contorno linear. Nesse caso consideramos que a função f depente de forma linear de y e y'. Para ser mais preciso, vamos considerar que

$$
f(x, y, y') = -p(x)y' - q(x)y + r(x),
$$

para funções $p,\ q,\ r$ que dependem apenas de x. Assim o PVC fica

$$
y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x), \qquad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta.
$$

1.2.1 Exemplo

$$
y'' - 5xy' + x^2 y = e^x, \qquad y(0) = 3, \quad y(1) = 0.
$$

Nesse caso identificamos as funções $p(x) = -5x$, $q(x) = x^2$ e $r(x) = e^x$.

1.3 O Método de diferenças finitas no exemplo

O método de diferenças finitas consiste em usar a equação diferencial e aproximações de derivadas calculadas anteriormente para definir equações que definiem as aproximações $y_i \approx y(x_i)$. Por exemplo, se considerarmos o exemplo anterior e os pontos $0 = x_0 < x_1 = 1/4 < x_2 = 1/2 < x_3 = 3/4 < x_4 = 1$ podemos escrever as condições dadas pela equação diferencial como

$$
\begin{aligned}
& y''(x_i) - 5x_i y'(x_i) + x_i^2 y(x_i) = e^{x_i}, \qquad i = 1, \ldots, 3, \\
& y(x_0) = 3, \\
& y(x_4) = 0,
\end{aligned}
$$

Agora substituindo os valores exatos $y(t_i)$ por suas aproximações y_i, as condições de contorno e as aproximações de derivadas centradas teremos

$$
\begin{aligned}
&\frac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2} - 5x_i\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h} + x_i^2 y_i = e^{x^i}, \qquad i = 1,\ldots,3,\\
&y_0 = 3,\\
&y_4 = 0.
\end{aligned}
$$

Organizando as equações acima multiplicadas por h^2 temos

$$
\begin{aligned}
&(1-(h/2)5x_i)y_{i-1} - (2+h^2x_i^2)y_i + (1+(h/2)5x_i)y_{i+1} = h^2e^{x_i}, \qquad i = 1,\ldots,3,\\
&y_0 = 3,\\
&y_4 = 0.
\end{aligned}
$$

Como os valores de h e $x_i, i = 0,\ldots,4$, são conhecidos o que temos acima um sistema de equações lineares nas variáveis y_1, y_2, y_3. Lembre-se que y_0 e y_4 já tem os seus valores definidos. Ou seja um sistema simples 3 por 3.

Note que aqui não é possível calcular y_1 somente a partir de y_0 como feito em problemas de valor inicial. Isso ocorre porque o valor em y_1 depende tanto da condição em $a = x_0$ quando da condição no outro extremo $b = x_4$. Todas as aproximações de y que são desconhecidas devem ser calculadas de uma única vez resolvendo o sistema de equações lineares.

1.4 Fórmula geral do método de diferenças finitas para problemas lineares

Deve ser natural imaginar que podemos escrever uma fórmula geral, que pode então ser implementada como um programa de computador, para a aplicação do método de diferenças finitas no caso linear geral. Vejamos como fazer isso. Vamos iniciar revisitando a fórmula do caso geral.

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x), \qquad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta.$$

A ideia do método de diferenças finitas é dividir o intervalo de solução em subintervalos usando um passo fixo h de modo que $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ e assim $x_{i+1} = x_i + h$. A partir daí devemos re-escrever a equação diferencial nos pontos da malha, isto é:

$$y''(x_i) + p(x_i)y'(x_i) + q(x_i)y(x_i) = r(x_i), \quad i = 1,2,\ldots,n-1.$$

Por fim, devemos substituir as derivadas de y pelas aproximações baseadas em diferenças. Também é natural usar a melhor aproximação que temos. Ou seja, no caso das derivadas primeiras devemos usar diferenças centradas. Ficamos com

$$\frac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2} + p_i\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h} + q_iy_i = r_i, \quad i = 1,2,\ldots,n-1. \tag{1}$$

$$y_0 = \alpha, \qquad y_{n+1} = \beta. \tag{2}$$

Também é comum multiplicar as equações acima por h^2 para eliminar as frações. Ficamos finalmente com

$$(y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}) + p_ih\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2} + h^2q_iy_i = h^2r_i, \quad i = 1,2,\ldots,n-1. \tag{3}$$

$$y_0 = \alpha, \qquad y_{n+1} = \beta. \tag{4}$$

Separando os termos que aparecem na frente das variáveis y_{i-1}, y_i, y_{i+1} chegamos a

$$(1-h/2\ p_i)y_{i-1} + (-2+h^2q_i)y_i + (1+h/2\ p_i)y_{i+1} = h^2r_i, i = 1,2,\ldots,n-1. \tag{5}$$

$$y_0 = \alpha, \qquad y_{n+1} = \beta. \tag{6}$$

Um sistema de equações lineares.

Notem que apesar do sistema acima parecer ser inicialmente de $n+1$ equações e variáveis, duas variáveis, y_0 e y_n, tem os seus valores definidos trivialmente pelas duas últimas equações. Portanto resta apenas um sitema nas $n-1$ variáveis $y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}$.

Podemos também apresentar o sistema em seu formato matricial. Nesse caso ele fica

$$Ay = b.$$

Com

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-2} & b_{n-2} & c_{n-2} \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} h^2 r_1 - a_1 \alpha \\ h^2 r_2 \\ \vdots \\ h^2 r_{n-2} \\ h^2 r_{n-1} - c_{n-1} y_n \end{pmatrix}.$$

$$a_i = 1 - h/2\, p_i, \qquad b_i = -2 + h^2 q_i, \qquad c_i = 1 + h/2\, p_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

Uma observação importante é que a matriz do sistema é tridiagonal. Ela possui apenas a diagonal principal e as primeiras diagonais superior e inferior não nulas. Isso permite resolver o sistema linear muito mais rapidamente, já que, por exemplo, a fatoração LU nesse caso tem que zerar apenas um número por coluna. Uma implementação que leva isso em consideração tanto no processo de fatoração quanto no processo de resolução dos subproblemas por substituição é então capaz de resolver esse problema com grande eficiência, em $O(n)$, ao invés da ordem cúbica que está usualmente associada a fatorações.

Além disso a existência das fórmulas acima mostram que é possível escrever um programa de computador que resolve um PVC. O que esse programa deve fazer é montar a matriz e o lado direito descritos acima e resolver o sistema de forma eficiente.