MS211 - Cálculo Numérico

Problemas de Valor de Contorno
(Slides Modificados de M. E. Valle)

Introdução

Até agora, discutimos métodos numéricos para problemas de *valor inicial*.

Em particular, um problema de valor inicial

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

pode ser escrito na forma vetorial seguinte:

$$Y' = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y' \\ f(x, y, y') \end{pmatrix}, \; Y(x_0) = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix}.$$

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

Porém, muitos problemas, chamados *problemas de valor de contorno*, são descritos por uma equação diferencial de *segunda ordem* com *condições em mais de um ponto*.

Problema de Valor de Contorno (PVC)

A forma mais geral de um PVC é

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

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 $y(x)$ e $y'(x)$.

A forma mais geral de um PVC linear é

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

em que A, B e C são funções de x.

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

Discretização do PVC

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

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

Os pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n$, chamados **malha**, representam uma discretização do intervalo $[a, b]$.

Note que $x_0 = a$ e $x_n = b$ são os **pontos de contorno.**

Os pontos $x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}$ estão no **interior da malha.**

Aproximação para y'

Seja x_k um ponto no interior da malha.

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

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

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 $y'(x_k)$ usando a diferença avançada.

Com efeito, pela série de Taylor temos

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

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

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

em que $M > 0$ é tal que $|y''(x)| \leq M$ 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

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

e

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

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

Subtraindo a segunda equação da primeira, encontramos

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

Logo, o erro local ao usar a diferença centrada é

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

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

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

Aproximação para y''

Seja x_k um ponto no interior da malha.

Sabemos que

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

e

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

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

Somando as duas equações, encontramos

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

Logo, podemos considerar a seguinte aproximação

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

O erro local dessa aproximação é

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

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

Aproximação de um PVC Linear

Vamos iniciar considerando o PVC linear:

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

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

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

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

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

Escrevendo $y_k = y(x_k)$, $A_k = A(x_k)$, $B_k = B(x_k)$ e $C_k = C(x_k)$, encontramos

$$\frac{1}{h^2}(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}) = \frac{A_k}{2h}(y_{k+1} - y_{k-1}) + B_k y_k + C_k,$$

Equivalentemente, temos

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

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

$$y_0 = \gamma_1 \quad \text{e} \quad y_n = \gamma_2.$$

As equações acima resultam no seguinte sistema linear tridiagonal

$$\underbrace{\begin{bmatrix} p_1 & q_1 & & & \\ r_2 & p_2 & q_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r_{n-2} & p_{n-2} & q_{n-2} \\ & & & r_{n-1} & p_{n-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}} = \underbrace{\begin{bmatrix} -r_1\gamma_1 - h^2 C_1 \\ -h^2 C_2 \\ \vdots \\ -h^2 C_{n-2} \\ -q_{n-1}\gamma_2 - h^2 C_{n-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}}.$$

Concluindo, uma aproximação para a solução de um PVC

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

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

Exemplo 1

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

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

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

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

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

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

Resolvendo esse sistema encontramos o seguintes gráficos:

Gráfico da solução (aproximada e exata):

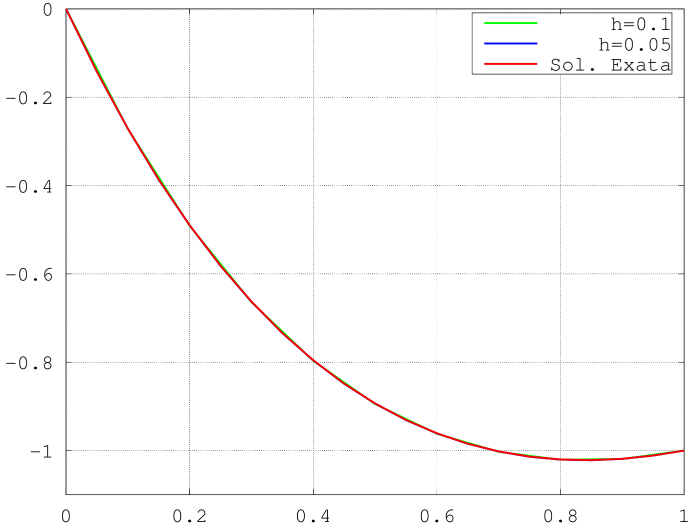
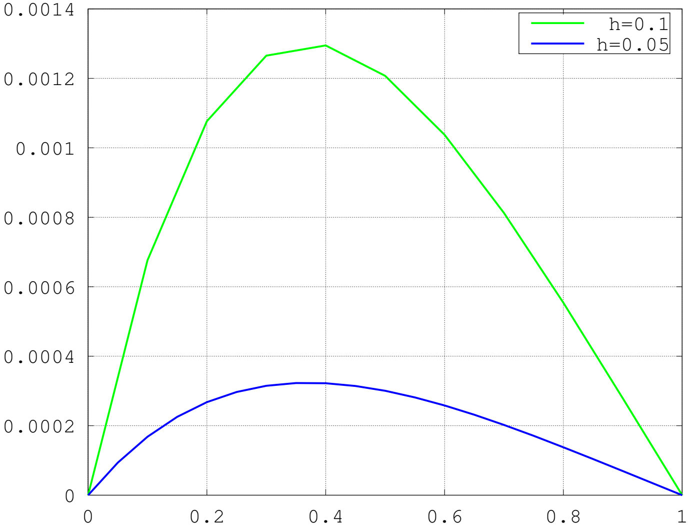


Gráfico do erro global (aproximação $\times$ solução exata):



Especificamente, temos os erros globais:

- Para $h = 0.1$, o erro global é:

$$E_{\{h=0.1\}} = \max_{1 \leq k \leq n-1} |y(x_k) - y_k| = 1.2946 \times 10^{-3}.$$

- Para $h = 0.05$, o erro global é:

$$E_{\{h=0.05\}} = \max_{1 \leq k \leq n-1} |y(x_k) - y_k| = 3.2278 \times 10^{-4}.$$

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,

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

Exemplo 2

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

$$\begin{cases} y'' = \frac{1}{8}\left(32 + 2x^3 - yy'\right), \\ y(1) = 17, \\ y(3) = \frac{43}{3}, \end{cases}$$

para $1 \leq x \leq 3$, considerando $h = 0.1$. Note que a solução exata é dada por

$$y(x) = x^2 + \frac{16}{x}.$$

Resolução: $0.1 = h = \frac{b-a}{n} = \frac{2}{n}$ implica que $n = \frac{2}{h} = 20$. Queremos determinar $y_k \approx y(x_k)$ para $k = 0, 1, \ldots, 20$. Note que $y_0 = y(x_0) = y(1) = 17$ e $y_20 = y(x_{20}) = y(3) = \frac{43}{3}$. Usando as aproximações de $y''(x_k)$ e $y'(x_k)$ com erros locais de ordem quadrática em h, obtemos as equações seguintes:

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} = \frac{1}{8}\left[32 + 2x_k^3 - y_k \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h}\right]$$

ou equivalentemente

$$100\left(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}\right) = \frac{1}{8}\left[32 + 2x_k^3 - 5y_k(y_{k+1} - y_{k-1})\right]$$

ou equivalentemente

$$800\left(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}\right) - 32 - 2(1 + k \cdot 0.1)^3 + 5y_k\left(y_{k+1} - y_{k-1}\right) = 0$$

para $k = 1, \ldots, 19$.

Para $k = 1$, obtemos $y_{k-1} = y_0 = y(x_0) = y(1) = 17$. Portanto,

$$800\left(y_2 - 2y_1 + 17\right) - 32 - 2 \cdot 1.1^3 + 5y_1\left(y_2 - 17\right) = 0$$

Para $k = 19$, obtemos $y_{k+1} = y_{20} = y(x_{20}) = y(3) = \frac{43}{3}$. Daí,

$$800\left(\frac{43}{3} - 2y_{19} + y_{18}\right) - 32 - 2 \cdot 2.9^3 + 5y_{19}\left(\frac{43}{3} - y_{18}\right) = 0$$

Além disso,

$$800\left(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}\right) - 32 - 2(1 + k \cdot 0.1)^3 + 5y_k\left(y_{k+1} - y_{k-1}\right) = 0$$

para $k = 2, \ldots, 18$. Deste modo, estamos com um *sistema não-linear com* 19 *equações e* 19 *incógnitas.*

Exemplo 3

Considere $h = 0.1$ e a modificação seguinte do problema anterior:

$$\begin{cases} y'' = \frac{1}{8}\left(32 + 2x^3 - yy'\right), \\ y(1) + y'(1) = 3, \\ y(3) = \frac{43}{3}, \end{cases}$$

Neste caso, não conhecemos $y_0 = y(x_0) = y(1)$.

Resolução: Podemos resolver este problema usando uma das seguintes alternativas:

(1) Podemos aproximar $y'(x_0)$ usando a diferença avançada e expressar y_0 em termos de y_1.

$$\begin{aligned} y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h} &= 3 \\ \Leftrightarrow y_0 + 10(y_1 - y_0) &= 3 \\ \Leftrightarrow 10y_1 - 9y_0 &= 3 \\ \Leftrightarrow 10y_1 - 3 &= 9y_0 \\ \Leftrightarrow y_0 &= \frac{10y_1 - 3}{9}. \end{aligned}$$

Continuamos ter 19 equações e 19 incógnitas, mas o erro local da aproximação de $y'(x_0)$ é $\mathcal{O}(h)$.

(2) Podemos introduzir uma nova variável y_{-1}. Desta maneira, podemos continuar de usar somente diferenças centradas. Obtemos

$$y'(x_0) \approx \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}$$

Agora podemos expressar y_{-1} em termos de y_0 e y_1:

$$\begin{aligned} y_0 + \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} &= 3 \\ \Leftrightarrow y_0 + 5(y_1 - y_{-1}) &= 3 \\ \Leftrightarrow y_0 + 5y_1 - 5y_{-1} &= 3 \\ \Leftrightarrow y_0 + 5y_1 - 3 &= 5y_{-1} \\ \Leftrightarrow y_{-1} &= y_1 + \frac{y_0 - 3}{5}. \end{aligned}$$

Portanto, estamos com 20 equações e 20 incógnitas. Continuamos com erros locais de $\mathcal{O}(h^2)$ em todas as aproximações.

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 y, a aproximação é obtida resolvendo um sistema linear tridiagonal.

Muito grato pela atenção!