

Problemas de Valor Inicial (PVI)

Lucia Catabriga

luciac@inf.ufes.br

May 23, 2019

Dadas as funções $p(x, t)$, $q(x, t)$ e $r(x, t)$ contínuas em $(a, b) \times (0, t_f)$, encontrar $u(x, t)$ tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + p(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} + q(x, t)u = r(x, t) \quad \text{para } x \in (a, b) \times (0, t_f)$$

com condições iniciais:

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad \text{para } x \in (a, b)$$

e condições de contorno do tipo:

$$u(a, t) = u_a(a, t) \quad \text{ou} \quad \frac{\partial u(a, t)}{\partial x} = \sigma_a(t) \quad \text{ou} \quad \alpha_a \frac{\partial u(a, t)}{\partial x} + \beta_a u(a, t) = \gamma_a(t)$$

$$u(b, t) = u_b(b, t) \quad \text{ou} \quad \frac{\partial u(b, t)}{\partial x} = \sigma_b(t) \quad \text{ou} \quad \alpha_b \frac{\partial u(b, t)}{\partial x} + \beta_b u(b, t) = \gamma_b(t)$$

onde u_a , u_b , σ_a , σ_b , α_a , β_a , α_b , β_b , γ_a e γ_b são funções de t conhecidas do problema.

Discretização do Domínio Físico:

$$h = \frac{(b - a)}{(n - 1)}$$

$x_i = a + (i - 1)h$, sendo $a = x_1$, $b = x_n$ e n número de incógnitas

Discretização do Domínio Temporal:

Δt (passo de tempo)

$$t_k = k\Delta t$$

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \dots < x_n = b$$

$$0 < t_1 < \dots < t_{k-1} < t_k < t_{k+1} < \dots < t_f$$

Objetivo:

obter aproximações $u_i^k \approx u(x_i, t_k) \quad \forall \quad i = 1, \dots, n$ e $k > 0$.

Aproximação das derivadas por Diferenças finitas no domínio espacial:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_k) \approx \frac{u_{i+1}^k - u_i^k}{h}, \quad \theta(h) \text{ (Diferença Adiantada)}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_k) \approx \frac{u_i^k - u_{i-1}^k}{h}, \quad \theta(h) \text{ (Diferença Atrasada)}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_k) \approx \frac{u_{i+1}^k - u_{i-1}^k}{2h}, \quad \theta(h^2) \text{ (Diferença Central)}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_k) \approx \frac{u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k}{h^2}, \quad \theta(h^2)$$

Aproximação das derivadas por Diferenças finitas no domínio temporal:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_k) \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t}, \quad \theta(\Delta t) \text{ (Diferença Adiantada)}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{k+1}) \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t}, \quad \theta(\Delta t) \text{ (Diferença Atrasada)}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{k+1/2}) \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t}, \quad \theta(\Delta t^2) \text{ (Diferença Central)}$$

Aplicando diferença central na derivada temporal \Rightarrow Método Crank-Nicolson:

$$\begin{aligned} \left(\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} \right) - \left(\frac{u_{i-1}^{k+1/2} - 2u_i^{k+1/2} + u_{i+1}^{k+1/2}}{h^2} \right) + p_i^{k+1/2} \left(\frac{u_{i+1}^{k+1/2} - u_{i-1}^{k+1/2}}{2h} \right) + q_i^{k+1/2} u_i^{k+1/2} &= \\ r_i^{k+1/2} & \\ \left(\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} \right) + \frac{1}{2} \left[- \left(\frac{u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k}{h^2} \right) + p_i^k \left(\frac{u_{i+1}^k - u_{i-1}^k}{2h} \right) + q_i^k u_i^k \right] &+ \\ \frac{1}{2} \left[- \left(\frac{u_{i-1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}}{h^2} \right) + p_i^{k+1} \left(\frac{u_{i+1}^{k+1} - u_{i-1}^{k+1}}{2h} \right) + q_i^{k+1} u_i^{k+1} \right] &= \\ \frac{1}{2} [r_i^k + r_i^{k+1}] & \end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned} u_*^{k+1/2} &= \frac{1}{2} (u_*^{i-1} + u_*^{i+1}) \\ r_i^{k+1/2} &= \frac{1}{2} [r_i^k + r_i^{k+1}] \end{aligned}$$

Consistência, Convergência e Estabilidade de Equações Diferenciais

- A solução aproximada representa a solução exata da equação diferencial?
- Quando e sob que condições as soluções dos sistemas lineares resultantes discretos representam a solução exata da equação diferencial?

⇒ Depende da **Consistência** das aproximações de diferenças finitas e da **Estabilidade** e **Convergência** do método numérico empregado.

Consistência

- Quanto menor Δx melhor a aproximação para as derivadas de uma função u :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$

ou seja, o **erro de truncamento local** $\Theta(\Delta x) \rightarrow 0$

- Para que uma discretização seja **consistente** com a equação diferencial parcial, seu **erro de truncamento local** deve tender a zero quando $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$

Consistência em um exemplo - Equação de Calor 1D:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u_i^{k+1} = u_i^k + a\Delta t \left(\frac{u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k}{(\Delta x)^2} \right)$$

Expandindo em série de Taylor os termos u_{i+1}^k , u_{i-1}^k e u_i^{k+1} em torno do ponto (x_i, t_k) :

$$u_{i\pm 1}^k = u_i^k \pm (\Delta x) \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^k + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i^k \pm \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_i^k + \Theta(\Delta x)^4$$

$$u_i^{k+1} = u_i^k + (\Delta t) \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^k + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_i^k + \Theta(\Delta t)^3$$

$$\underbrace{\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^k}_{\text{EDP}} = a \underbrace{\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i^k}_{\text{Erro Local de Truncamento} \rightarrow 0 \text{ para } \Delta x, \Delta t \rightarrow 0} - \left(\frac{\Delta t}{2!} \right) \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_i^k + \Theta((\Delta t)^2, (\Delta x)^2)$$

⇒ Aproximação consistente

Convergência

- Quando a solução numérica no domínio de interesse u_i^k se aproxima da solução exata $u(x_i, t^k)$ da equação diferencial se $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ dizemos que o método numérico é **convergente**.
- **consistência** é uma condição necessária para a **convergência**
- Podemos dizer que:
consistência + estabilidade \rightarrow convergência
- O que é **estabilidade**?

Estabilidade

- Um método numérico é **estável** se quaisquer erros ou perturbações na solução não são amplificados sem limite.
- O conceito de **estabilidade** está relacionado ao crescimento, ou diminuição dos erros introduzidos nos cálculos.
- O acúmulo dos erros pode ser evitado se seguirmos os **critérios de estabilidade** dos métodos numéricos, isto é, condições que garantam que o método numérico seja estável.
- Normalmente para problemas transientes as condições de estabilidade estabelecem limite superior para o valor de Δt em função de valores de Δx (ou Δy e Δz se problemas multidimensionais), além de coeficientes físicos como condutividade térmica, velocidade de propagação, entre outros.

Estabilidade - Em um exemplo

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

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

Critério de estabilidade do método explícito:¹

$$\lambda = \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2}$$

Os métodos Implícito e Crank-Nicolson são incondicionalmente estáveis.

¹Fortuna, A.O., Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos - Conceitos Básicos e Aplicações, 2000.

Aplicação - Problema Parabólico - Equação do Calor Transiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t)$$

onde $0 < x < l$, $\kappa > 0$ e $t > 0$, sendo:

- Condições de Contorno:

$$u(0) = u_0(t) \qquad u(l) = u_l(t) \qquad \text{ou}$$

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \sigma_0(t) \qquad \frac{\partial u(l, t)}{\partial x} = \sigma_l(t) \qquad \text{ou}$$

$$\alpha_0 \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} + \beta_0 u(0, t) = \gamma_0(t) \qquad \alpha_l \frac{\partial u(l, t)}{\partial x} + \beta_l u(l, t) = \gamma_l(t)$$

onde u_0 , u_l , σ_0 , σ_l , α_0 , β_0 , α_l , β_l , γ_0 e γ_l são conhecidas.

- Condições Iniciais:

$$u(x, 0) = g(x) \text{ em } (0, l)$$

Experimento 1: Equação do calor com condutividade térmica constante, fonte de calor nula e valor prescrito

- Parâmetros básicos:

$$\kappa = 0.835 \text{ cm}^2/\text{s}, f(x, t) = 0 \text{ e } (0, l) = (0, 10)$$

- Condições de contorno e iniciais:

$$u(0, t) = 100^\circ\text{C}, u(10, t) = 50^\circ\text{C} \text{ e } u(x, 0) = 0, \text{ para } x \in (0, 10)$$

- Parâmetros da aproximação por Diferenças finitas considerando a condição de estabilidade:

- $h = 1$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- $h = 0.1$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- $h = 0.01$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- Para cada valor de Δt observe o comportamento dos 3 métodos de avanço no tempo para um número de passos compatível com o valor de h .

- Para uma dada configuração (h , Δt e método de avanço no tempo), encontre o tempo t no qual a temperatura atinge o estado estacionário com tolerância de 10^{-3} .

Experimento 2: Equação do calor com condutividade térmica constante, fonte de calor nula e fluxo prescrito

- Parâmetros básicos:

$$\kappa = 0.835, f(x, t) = 0 \text{ e } (0, l) = (0, 10).$$

- Condições de contorno e iniciais:

$$u(0, t) = 100^\circ\text{C}, \frac{\partial u(10, t)}{\partial x} = 0 \text{ e } u(x, 0) = 0, \text{ para } x \in (0, 10]$$

- Parâmetros da aproximação por Diferenças finitas considerando a condição de estabilidade:

- $h = 1$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- $h = 0.1$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- $h = 0.01$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- Para cada valor de Δt observe o comportamento dos 3 métodos de avanço no tempo para um número de passos compatível com o valor de h .

- Para uma dada configuração (h , Δt e método de avanço no tempo), encontre o tempo t no qual a temperatura atinge o estado estacionário com tolerância de 10^{-3} .

Experimento 3: Equação do calor com condutividade térmica constante, fonte de calor unitária e fluxo prescrito

- Parâmetros básicos:

$$\kappa = 0.835, f(x, t) = 1 \text{ e } (0, l) = (0, 10).$$

- Condições de contorno e iniciais:

$$u(0, t) = 100^{\circ}\text{C}, \frac{\partial u(10, t)}{\partial x} = 0 \text{ e } u(x, 0) = 0, \text{ para } x \in (0, 10]$$

- Parâmetros da aproximação por Diferenças finitas considerando a condição de estabilidade:

- $h = 1$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- $h = 0.1$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- $h = 0.01$ e $\Delta t_1 < \frac{h^2}{2\kappa}$ e $\Delta t_2 > \frac{h^2}{2\kappa}$

- Para cada valor de Δt observe o comportamento dos 3 métodos de avanço no tempo para um número de passos compatível com o valor de h .
- Para uma dada configuração (h , Δt e método de avanço no tempo), encontre o tempo t no qual a temperatura atinge o estado estacionário com tolerância de 10^{-3} .

Equação da onda acústica bidimensional

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = s_\phi \quad \text{em } \Omega = (0, L) \times (0, L)$$

$$\phi = \phi(x, y, t) = \phi(r, t)$$

$$s_\phi(r, t) = \delta(r - r_0) f(t), \text{ onde } f(t) = (1 - 2\pi^2 f_c^2 t^2) e^{-\pi^2 f_c^2 t^2}$$

- Fonte localizada no ponto $r_0 = (0, 0)$ do domínio.

Condições iniciais:

$$\phi(x, y, 0) = \phi^0(x, y) = 0$$

$$\phi'(x, y, 0) = \phi'^0(x, y) = 0$$

Esquema explícito no tempo (I)

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = s_\phi$$

$$\left(\frac{\phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k + \phi_{i-1}^k}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i+n}^k - 2\phi_i^k + \phi_{i-n}^k}{\Delta y^2} \right) - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\phi_i^{k+1} - 2\phi_i^k + \phi_i^{k-1}}{\Delta t^2} = s_{\phi_i}^k$$

$$1 \leq i \leq N = n^2$$

$$(\Delta x = \Delta y)$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} (\phi_{i+n}^k + \phi_{i+1}^k - 4\phi_i^k + \phi_{i-1}^k + \phi_{i-n}^k) - \frac{1}{\alpha^2 \Delta t^2} (\phi_i^{k+1} - 2\phi_i^k + \phi_i^{k-1}) = s_{\phi_i}^k$$

$$(\times \Delta x^2)$$

Esquema explícito no tempo (II)

$$(\phi_{i+n}^k + \phi_{i+1}^k - 4\phi_i^k + \phi_{i-1}^k + \phi_{i-n}^k) - \frac{\Delta x^2}{\alpha^2 \Delta t^2} (\phi_i^{k+1} - 2\phi_i^k + \phi_i^{k-1}) = (\Delta x^2) s_{\phi_i}^k$$

$$-\left(\frac{\Delta x^2}{\alpha^2 \Delta t^2}\right) \phi_i^{k+1} = [-\phi_{i+n}^k - \phi_{i+1}^k + 4\phi_i^k - \phi_{i-1}^k - \phi_{i-n}^k] - \left(\frac{2\Delta x^2}{\alpha^2 \Delta t^2}\right) \phi_i^k + \left(\frac{\Delta x^2}{\alpha^2 \Delta t^2}\right) \phi_i^{k-1} + (\Delta x^2) s_{\phi_i}^k$$

$$\phi_i^{k+1} = -\left(\frac{\alpha^2 \Delta t^2}{\Delta x^2}\right) [-\phi_{i+n}^k - \phi_{i+1}^k + 4\phi_i^k - \phi_{i-1}^k - \phi_{i-n}^k] + 2\phi_i^k - \phi_i^{k-1} - (\alpha^2 \Delta t^2) s_{\phi_i}^k$$

Formato Matriz-Vetor: $\phi^{k+1} = -\hat{\alpha} A \phi^k + 2\phi^k - \phi^{k-1} - f$,

onde $\hat{\alpha} = \left(\frac{\alpha^2 \Delta t^2}{\Delta x^2}\right)$, $f = (\alpha^2 \Delta t^2) s_{\phi}^k$ e A tem estrutura pentadiagonal

$(-1, -1, +4, -1, -1)$.

Exemplo com $n = 626 \times 626$ Parâmetros:

$L = 10.000$ m; $\Delta x = 16$ m; $\Delta y = 16$ m; $t_f = 5$ s; $\Delta t = 0,003$ s; $\alpha = 2.000$ m/s; $f_c = 5$ Hz .

