Universidade Federal do Paraná – UFPR

Departamento de Engenharia Química



Introdução ao Método de Diferenças Finitas com Aplicações em Engenharia Química

Prof. Éliton Fontana

2019/1

Este material foi desenvolvido como complemento para a disciplina de Métodos Matemáticos Aplicados à Engenharia Química II. Devido a falta de atenção ou de conhecimento do autor, eventuais erros podem estar presentes ao longo do texto. Utilize com cautela.

Contents

1 Revisão sobre Sistemas de Equações Algébricas Lineares **5**

1.1 Conceitos Preliminares 5

1.2 Interpretação Geométrica do Sistema Linear 7

1.3 Solução de Sistemas Lineares por Eliminação de Gauss 9

1.4 Independência Linear e Posto de uma Matriz 12

1.5 Existência e Unicidade para Sistemas Lineares 13

2 Algoritmo de Thomas e Métodos Iterativos **18**

2.1 Matrizes Tridiagonais e o Algoritmo de Thomas 19

2.2 Métodos Iterativos para Sistemas Lineares 21

2.2.1 Método de Jacobi 22

2.2.2 Convergência de Métodos Iterativos 24

2.3 Condicionamento de Sistemas Lineares 26

3 Métodos Numéricos para Problemas de Valor de Contorno **32**

3.1 Estratégias de Solução de PVC's 33

3.2 Aproximações por Diferenças Finitas 34

3.2.1 Aproximação da Derivada Primeira 35

3.2.2 Aproximação da Derivada Segunda 39

3.2.3 Discretização das Condições de Contorno 40

3.2.4 Discretização de PVC's utilizando Diferenças Finitas 41

4 Classificação das Equações Diferenciais Parciais **49**

4.1 Características Gerais das EDP's 49

4.2 Classificação das EDP's de 2ª Ordem Lineares 50

4.2.1 EDP's Elípticas, $\delta < 0$ 53

4.2.2 EDP's Parabólicas, $\delta = 0$ 53

4.2.3 EDP's Hiperbólicas, $\delta > 0$ 55

5 Método de Diferenças Finitas para EDP's Elípticas **58**

5.1 Equação de Laplace 58

5.1.1 Discretização das Condições de Contorno 62

5.1.2 Obtenção do Sistema de Equações Algébricas 63

6 Método de Diferenças Finitas para EDP's Parabólicas **70**

6.0.1 Discretização das Derivadas Temporal e Espacial 72

6.1 Método Explícito 73

6.2 Método Implícito 78

1 Revisão sobre Sistemas de Equações Algébricas Lineares

A aplicação de leis físicas na modelagem de sistemas de interesse em muitos casos origina um conjunto de equações algébricas lineares que devem ser resolvidas simultaneamente. Além disso, métodos de resolução de equações diferenciais com frequência levam à transformação das equações diferenciais em um conjunto de equações algébricas que podem ser então resolvidas. Por exemplo, os métodos de diferenças finitas e de volumes finitos consistem em dividir o domínio de solução em um conjunto de pequenos elementos discretos, sendo para cada elemento atribuída uma equação algébrica. Este processo, chamado de discretização, sempre origina um conjunto de equações algébricas lineares.

É fundamental conseguir definir quando um sistema de equações algébricas lineares possui alguma solução (ou seja, é consistente) e se essa solução é única ou envolve um certo número de parâmetros arbitrários. O estudo de sistemas de equações algébricas lineares é um dos tópicos fundamentais da álgebra linear. A seguir será apresentada uma breve revisão da teoria básica de sistemas lineares e de sua resolução pelo método de eliminação de Gauss.

1.1 Conceitos Preliminares

Em muitos casos, deve-se buscar soluções para problemas do tipo:

$$f(x) = 0$$

Quando a função $f(x)$ possui a forma $f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0$ a equação é chamada de algébrica (ou polinomial). No caso onde $n = 1$, a equação é **linear**, enquanto que para casos onde $n > 1$ a equação é **não-linear**. Quando a função $f(x)$ não pode ser expressa como um polinômio, a equação é dita transcendental (por exemplo, $\sin(x)$, $e^x, \ldots$) e possui um comportamento não-linear.

A equação anterior possui somente uma variável x, porém com frequência os problemas envolvem mais de uma variável e um sistema de equações acoplado. Neste momento, será considerado somente o caso onde todas as equações que foram o sistema são lineares, de modo que sistema com m equações e n variáveis pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

O sistema anterior pode ser escrito de diferentes formas, dependendo da conveniência. Por exemplo, pode ser expresso na forma vetorial:

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} x_1 + \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{bmatrix} x_2 + \ldots + \begin{bmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix} x_n = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

A expressão acima pode ainda ser simplificada definindo-se os vetores $\mathbf{a_n}$ dos coeficientes que multiplicam cada uma das variáveis, bem como os termos não-homogêneos (aqueles que não multiplicam nenhuma das variáveis):

$$\mathbf{a_1}x_1 + \mathbf{a_2}x_2 + \ldots + \mathbf{a_n}x_n = \mathbf{b}$$

onde:

$$\mathbf{a_1} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{a_2} = \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{a_n} = \begin{bmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Quando todos os termos do vetor $\mathbf{b}$ são nulos, o sistema é chamado de ***homogêneo***, enquanto que no caso onde pelo menos um dos termos b_m é diferente de zero, o sistema é chamado de ***não-homogêneo***.

Na maioria dos casos, o mais conveniente é expressar os coeficientes na forma de uma matriz $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

onde $\mathbf{A}$ é uma matriz $m \times n$ definida como:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

O vetor $\mathbf{x}$ contém todas as variáveis do sistema linear:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Na maioria casos, a matriz $\mathbf{A}$ e o vetor $\mathbf{b}$ são conhecidos e deve-se determinar o vetor $\mathbf{x}$ que satisfaça a igualdade. Uma sequência de números $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_m)$ é dita solução do sistema linear se cada uma das m equações é satisfeita quando $x_1 = s_1$, $x_2 = s_2$ e assim sucessivamente. Se existirem uma ou mais soluções $\mathbf{s}$, o sistema é dito ***consistente*** e o conjunto de todas as possíveis soluções é chamado de ***conjunto de soluções***. Caso existir somente um vetor $\mathbf{s}$ que satisfaz a equação, esta solução é chamada de ***única***.

Considere o caso simplificado onde $m = n = 1$:

$$a_{11}x_1 = b_1$$

No caso genérico onde $a_{11} \neq 0$, a equação anterior admite a solução única $x_1 = b_1/a_{11}$, porém, se $a_{11} = 0$ existem duas possibilidades: se $b_1 \neq 0$ então não existe nenhum valor de x_1 que satisfaça a equação, portanto a equação não possui solução. Caso $b_1 = 0$ então a equação se torna $0x_1 = 0$ e qualquer valor de x_1 satisfaz a equação, portanto existem infinitas soluções. Apesar de simples, esta equação estabelece um padrão que pode ser observado para qualquer sistema *linear*: irá existir 1 solução, nenhuma solução ou infinitas soluções. Para sistemas de dimensões superiores, este comportamento pode ser facilmente entendido analisando as equações do ponto de vista geométrico, como será apresentado a seguir.

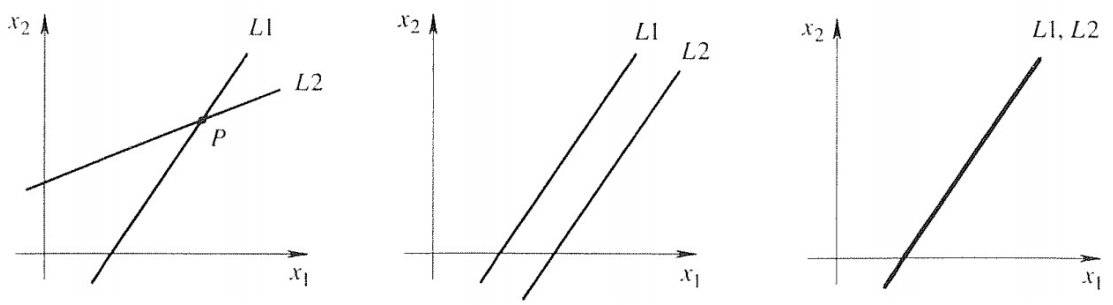
1.2 Interpretação Geométrica do Sistema Linear

Considere o caso agora onde $m = n = 2$:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

Considerando que a_{11} ou a_{12} sejam diferentes de zero, então a primeira equação define uma reta no plano (x_1, x_2), sendo que qualquer ponto sobre esta reta é uma solução para esta equação. De forma semelhante, se a_{21} ou a_{22} são não-nulos, a segunda equação forma uma reta e os pontos sobre esta reta são solução para esta equação.

A partir disto, existem três possibilidades para a solução do sistema composto pelas duas equações. No primeiro caso, as retas podem se interceptar em um único ponto P, de modo que o sistema de equações irá admitir somente uma solução (ou seja, existe somente um conjunto de valores x_1, x_2 que satisfaz as duas equações ao mesmo tempo). A segunda possibilidade é que as retas sejam paralelas e não se interceptem em nenhum ponto. Neste caso, não haverá solução para o sistema linear (o sistema é inconsistente). Por último, as retas podem ser coincidentes, de modo que qualquer ponto sobre as retas irá satisfazer ambas as equações e portanto o sistema possui infinitas soluções. Estas possibilidades são ilustradas na figura a seguir.



(a) Solução única (b) Sem solução (c) Infinitas Soluções

Anteriormente, assumiu-se que, por exemplo, a_{11} ou a_{12} eram não nulos. Caso ambos valores forem nulos, o comportamento do sistema irá depender do valor de b_1. Se $b_1 \neq 0$, então a primeira equação não possui solução e como consequência o sistema também não possui solução. Porém, se $b_1 = 0$, então qualquer valor de x_1 e x_2 satisfaz a primeira equação, sendo que o conjunto de soluções da segunda equação também será solução do sistema e portanto existem infinitas soluções.

Uma análise similar pode ser aplicada para sistemas de maior ordem. Por exemplo, para um sistema com $m = n = 3$ as soluções de cada uma das 3 equações será um plano no espaço cartesiano x_1, x_2, x_3. Novamente, os três planos podem se interceptar em um ponto único (única solução), em infinitos pontos (infinitas soluções) ou não se interceptarem (sem solução). De forma geral, para um sistema com $m = n \geq 4$, as soluções representam *hiperplanos* em um espaço n-dimensional.

1.3 Solução de Sistemas Lineares por Eliminação de Gauss

Como visto anteriormente, um sistema linear pode ser expresso em sua forma matricial como:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

O método de eliminação de Gauss é um dos algoritmos mais simples utilizados para a resolução de sistemas lineares. O método consiste basicamente em transformar uma matriz $\mathbf{A}$ $m \times n$ com $m = n$ em um matriz triangular superior através de operações no sistema que não alterem a igualdade. O método também pode ser usado para casos onde $m \neq n$, porém neste caso a matriz obtida não será triangular.

O primeiro passo para a resolução do problema com o método de eliminação é a obtenção da *matriz aumentada* $\mathbf{A}|\mathbf{b}$ que representa o sistema. Esta matriz consiste na junção da matriz $\mathbf{A}$ com a parte não-homogênea $\mathbf{b}$. Para um sistema com m equações e n variáveis, a matriz aumentada é expressa como:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} & b_m \end{array}\right]$$

A linha vertical é adicionada somente por conveniência. Para a resolução com o método de Gauss, deve-se zerar todos os elementos abaixo da diagonal principal da matriz $\mathbf{A}$, de modo a se obter uma matriz aumentada com o seguinte formato:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b}^* = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{mn} & b_m \end{array}\right]$$

Neste formado, a matriz é chamada de ***matriz escalonada***. As seguintes operações elementares podem ser aplicadas na matriz aumentada original sem alterar a igualdade do sistema:

1 - Adição de uma linha com outra linha;

2 - Multiplicação de uma linha por uma constante não-nula;

3 - Troca de posição entre duas linhas.

Cabe ressaltar que estas operações podem ser aplicadas somente nas ***linhas*** da matriz e não nas ***colunas***. A partir da obtenção da matriz escalonada, pode-se facilmente obter a solução do sistema linear através da retro-substituição no sistema linear.

Exercício 01: Resolva o seguinte sistema linear utilizando o método de eliminação de Gauss.

$$x_1 + x_2 - x_3 = 1$$
$$3x_1 + x_2 + x_3 = 9$$
$$x_1 - x_2 + 4x_3 = 8$$

A primeira etapa é definir a matriz aumentada com base nos coeficientes:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b}^* = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 9 \\ 1 & -1 & 4 & 8 \end{array}\right]$$

A partir deste ponto, pode-se fazer qualquer uma das operações listadas anteriormente até se obter a matriz escalonada. Por exemplo, multiplicando a primeira linha por 3 e subtraindo da segunda linha ($L_2 \rightarrow L_2 - 3L_1$), obtém-se:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b}^* = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 4 & 6 \\ 1 & -1 & 4 & 8 \end{array}\right]$$

Fazendo agora a terceira linha menos a primeira ($L_3 \rightarrow L_3 - L_1$):

$$\mathbf{A}|\mathbf{b}^* = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 4 & 6 \\ 0 & -2 & 5 & 7 \end{array}\right]$$

Por último, pode-se subtrair a segunda linha da terceira ($L_3 \rightarrow L_3 - L_2$)

$$\mathbf{A}|\mathbf{b}^* = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 4 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right]$$

Assim, o sistema linear inicial pode ser escrito como:

$$x_1 + x_2 - x_3 = 1$$
$$-x_2 + 4x_3 = 6$$
$$x_3 = 1$$

Partindo-se da última equação e avançando até a primeira, pode-se facilmente determinar a solução do sistema:

$$x_3 = 1 \qquad x_2 = -1 \qquad x_1 = 3$$

Para saber se esta é mesmo uma solução do problema, basta substituir os valores obtidos no sistema original e averiguar se as equações são satisfeitas:

$$x_1 + x_2 - x_3 = 3 - 1 - 1 = 1$$
$$3x_1 + x_2 + x_3 == 3(3) - 1 + 1 = 9$$
$$x_1 - x_2 + 4x_3 = 3 - (-1) + 4(1) = 8$$

Portanto, os valores obtidos são uma solução do sistema.

Neste exemplo, obteve-se uma solução única para o sistema. Porém, como discutido anteriormente, podem haver casos onde nenhuma solução ou infinitas soluções são obtidas. Por exemplo, considere o seguinte sistema linear:

$$2x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 4$$
$$x_1 - 2x_2 + x_3 = 3$$
$$7x_1 - x_3 = 2$$

Aplicando operações elementares nas linhas da matriz aumentada, pode-se mostrar que este sistema pode ser escrito como:

$$2x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 4$$
$$-7x_2/2 + 2x_3 = 1$$
$$-7x_2/2 + 2x_3 = -4$$

Assim, a segunda e a terceira equação estabelecem igualdades que não podem ser satisfeitas ao mesmo tempo, portanto o problema não possui solução.

De forma semelhante, quando existirem mais variáveis do que equações ($n > m$), não será possível obter uma solução explícita para cada variável, de modo que a solução do problema irá conter parâmetros em aberto (que podem assumir qualquer valor) e assim o sistema irá possuir infinitas soluções.

Na maioria das situações, sistemas sem solução ou com infinitas soluções não possuem significado físico consistente. Por isso, deve-se garantir que os sistemas obtidos (por exemplo, na discretização de uma equação diferencial) possuam solução única. Para definir os casos onde o sistema possui solução única, é necessário primeiramente rever os conceitos de independência linear e posto de uma matriz.

1.4 Independência Linear e Posto de uma Matriz

Considere um conjunto de m vetores $\mathbf{a_1}, \mathbf{a_2}, \ldots, \mathbf{a_m}$ com o mesmo número de componentes. Uma ***combinação linear*** destes vetores é uma expressão da forma:

$$c_1\mathbf{a_1} + c_2\mathbf{a_2} + \ldots + c_m\mathbf{a_m}$$

onde $c_1, c_2, \ldots, c_m$ são escalares. Considere agora a equação

$$c_1\mathbf{a_1} + c_2\mathbf{a_2} + \ldots + c_m\mathbf{a_m} = 0$$

Uma possibilidade de satisfazer esta igualdade é definir todos os escalares $c_1, c_2, \ldots, c_m = 0$. Se esta for a única forma possível de satisfazer a igualdade, então os vetores $\mathbf{a_1}, \mathbf{a_2}, \ldots, \mathbf{a_m}$ formam um conjunto ***linearmente independentes (L.I.)***.

Se a equação puder ser satisfeita com pelo menos um dos escalares sendo não-nulos, então ao menos um dos vetores pode ser escrito como uma combinação linear dos demais e portanto é ***linearmente dependente (L.D.)***. Por exemplo, considere que $c_1 \neq 0$, a equação anterior pode ser escrita como:

$$\mathbf{a_1} = -\frac{c_2}{c_1}\mathbf{a_2} - \ldots - \frac{c_m}{c_1}\mathbf{a_m}$$

Ou seja, $\mathbf{a_1}$ é uma combinação linear dos demais vetores.

Como visto anteriormente, quando escrito na forma matricial, cada equação passa a ocupar uma linha da matriz. O número máximo de linhas linearmente independentes (equivalente ao número máximo de equações L.I.) é chamado de ***posto (rank)*** da matriz. O posto de uma matriz é invariante em relação às operações elementares apresentadas anteriormente. Por isso, uma das maneiras de determinar o posto da matriz é reduzir ela para a forma escalonada e observar quantas linhas não nulas são obtidas. Além disso, pode-se mostra que o posto de uma matriz $\mathbf{A}$ e o posto de sua transposta $\mathbf{A}^T$ são iguais.

Com base nos conceitos de dependência linear e posto de uma matriz, pode-se enunciar os seguintes teoremas:

Teorema 01: Considere p vetores com cada um possuindo n componentes. Estes vetores são linearmente independentes se a matriz formada utilizando estes vetores como linhas possuir um posto p. Em contrapartida, se estes vetores são linearmente dependentes, então o posto da matriz será menor que p.

Teorema 02: Considere p vetores com cada um possuindo n componentes. Se $n < p$, então estes vetores são linearmente dependentes.

Em analogia com os sistemas lineares, o Teorema 02 é equivalente a dizer que se existirem mais variáveis do que equações, algumas das equações serão linearmente dependentes. Outra forma de entender este teorema é analisar um espaço vetorial. Por exemplo, um espaço no $\Re^3$ (como um sistema cartesiano x, y, z) será completamente definido por três vetores LI (por exemplo $(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)$). Qualquer outro vetor neste espaço poderá ser escrito como uma combinação linear destes.

1.5 Existência e Unicidade para Sistemas Lineares

Com base no conceito de posto de uma matriz, pode-se enunciar os seguintes teoremas sobre a existência e unicidade da solução de sistemas lineares.

Teorema 03 - Existência: Um sistema linear de m equações e n variáveis da forma:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

possui solução (ou seja, é consistente) se e somente se a matriz dos coeficientes $\mathbf{A}$ possuir o mesmo posto que a matriz aumentada $\mathbf{A}|\mathbf{b}$.

De modo geral, o Teorema 03 implica que a adição do vetor $\mathbf{b}$ como última coluna não altera a quantidade de linhas L.I. presentes na matriz. Como enunciado anteriormente, o posto de uma matriz e de sua transposta são equivalentes. Assim, pode-se interpretar o teorema acima como sendo equivalente a afirmar que a coluna $\mathbf{b}$ deve ser L.D. com relação as demais colunas da matriz aumentada. Por exemplo, considere um sistema com $m = n = 2$, por simplicidade:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

A matriz aumentada e sua transposta podem ser escritas como:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b} = \left[\begin{array}{cc|c} a_{11} & a_{12} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & b_2 \end{array}\right] \qquad \mathbf{A}|\mathbf{b}^T = \left[\begin{array}{cc} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ \hline b_1 & b_2 \end{array}\right]$$

Assumindo que o sistema possui solução, então existem valores x_1 e x_2 que satisfazem o sistema linear. Isto implica que a terceira linha da matriz transposta ($L3$) pode ser escrita como uma combinação linear das outras duas linhas ($L1$ e $L2$), da forma:

$$L3 = L1x_1 + L2x_2$$

Assim, a linha $L3$ é L.D. Caso não existirem valores x_1 e x_2 que possibilitem esta operação, o sistema não possui solução.

Teorema 04 - Unicidade: Um sistema linear de m equações e n variáveis da forma:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

possui solução única se e somente se o posto da matriz dos coeficientes $\mathbf{A}$ e o posto matriz aumentada $\mathbf{A}|\mathbf{b}$ forem iguais a n. Se o posto destas matrizes for menor que n, o sistema possui infinitas soluções. Considerando que as matrizes possuam um posto r, estas infinitas soluções podem ser expressas em termos de $n-r$ parâmetros arbitrários, ou seja, irão formar um espaço de dimensão $n-r$. Por exemplo, se $n-r=1$, a soluções irão depender de um parâmetro e serão representadas como uma reta, se $n-r=2$ irão depender de 2 parâmetros serão representadas por um plano e assim sucessivamente.

O Teorema 04 pode ser também expresso da seguinte forma: um sistema linear irá possuir solução única somente quando existir uma equação L.I. para cada variável desconhecida. Este teorema pode ser analisado de forma diferente para sistemas homogêneos e não-homogêneos.

Considere um sistema homogêneo da forma:

$$\mathbf{Ax} = 0$$

Este sistema sempre irá admitir a solução trivial $\mathbf{x} = 0$. Pelo Teorema 04, se o posto r de $\mathbf{A}$ for igual ao número de variáveis n, então esta é a única solução possível. Soluções não-triviais irão existir se e somente se $r < n$, sendo que neste caso as soluções irão formar um espaço vetorial de dimensão $r-n$ (conhecido como espaço de solução).

Considere agora um sistema não-homogêneo da forma

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

Além dos teoremas de existência e unicidade apresentados anteriormente, pode-se apresentar o seguinte teorema para este tipo de sistema:

Teorema 05: Se um sistema não-homogêneo é consistente, então todas as suas soluções podem ser obtidas da forma:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_h + \mathbf{x}_0$$

onde $\mathbf{x}_h$ é a solução do problema homogêneo associado e $\mathbf{x}_0$ é alguma solução do problema não-homogêneo.

Como visto, o Teorema 05 é equivalente ao teorema que garante a solução de EDO's de segunda ordem não-homogêneas.

Resta agora uma questão a ser avaliada: como posso determinar o posto da matriz $\mathbf{A}$ para garantir que o sistema possui solução única?

Uma maneira de responder esta pergunta é simplesmente aplicando o método de eliminação de Gauss e buscando uma solução para o problema. Porém, uma estratégia mais sensata é primeiramente determinar se o problema possui solução para depois tentar encontrá-la.

Na grande maioria dos casos, estaremos trabalhando com casos onde $m = n$, ou seja, tem-se o mesmo número de equações e variáveis. Os métodos de resolução de EDP's, por exemplo, sempre irão gerar sistemas com $m = n$. Assim, a matriz dos coeficiente $\mathbf{A}$ usualmente será uma matriz quadrada. Neste caso, pode-se determinar se a matriz possui alguma linha L.D. calculando o ***determinante*** da matriz $\mathbf{A}$. Com base nisso, pode-se enunciar o seguinte teorema:

Teorema 06: Uma matriz quadrada $\mathbf{A}$ $n \times n$ possui posto n se e somente se:

$$\det \mathbf{A} \neq 0$$

Exemplo 02: Determine se o seguinte sistema linear possui solução única. Caso possuir, encontre a solução.

$$\begin{aligned} x_1 + 3x_2 + 5x_3 &= 14 \\ 2x_1 - x_2 - 3x_3 &= 3 \\ 4x_1 + 5x_2 - x_3 &= 7 \end{aligned}$$

Primeiramente, deve-se avaliar se o problema possui solução. Para isso, pode-se avaliar o determinante da matriz dos coeficientes:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & -1 & -3 \\ 4 & 5 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\det \mathbf{A} = (1)(-1)(-1) + (3)(-3)(4) + (5)(2)(5) - (5)(-1)(4) - (3)(2)(-1) - (1)(-3)(5)$$

$$\det \mathbf{A} = 1 - 36 + 50 + 20 + 6 + 15 = 56$$

Portanto, o determinante é diferente de zero, o que implica que a matriz é L.I.

Avaliando a matriz aumentada para aplicar o método de redução de Gauss:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b} = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 3 & 5 & 14 \\ 2 & -1 & -3 & 3 \\ 4 & 5 & -1 & 7 \end{array}\right]$$

Zerando os termos na primeira coluna:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b} = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 3 & 5 & 14 \\ 0 & -7 & -13 & -25 \\ 0 & -7 & -21 & -49 \end{array}\right]$$

Deixando agora a matriz na forma escalonada:

$$\mathbf{A}|\mathbf{b} = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 3 & 5 & 14 \\ 0 & -7 & -13 & -25 \\ 0 & 0 & -8 & -24 \end{array}\right]$$

Assim, o sistema linear pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} x_1 + 3x_2 + 5x_3 = 14 \quad &\rightarrow \quad x_1 = 5 \\ -7x_2 - 13x_3 = -25 \quad &\rightarrow \quad x_2 = -2 \\ -8x_3 = -24 \quad &\rightarrow \quad x_3 = 3 \end{aligned}$$

Lista de Exercícios XX - Sistemas Lineares Algébricos

1) Avalie se os seguintes sistemas lineares possuem solução única, infinitas soluções ou não possuem solução. Caso possuírem solução única, encontre esta solução e verifique se está correta substituindo os valores encontrados no sistema linear.

a)

$$2x - 3y = 1$$
$$5x + y = 2$$

b)

$$2x - 3y = 1$$
$$4x - 6y = 2$$

c)

$$x - 2y = 1$$
$$2x - 4y = 4$$

d)

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 4$$
$$5x_1 + 6x_2 + 7x_3 = 8$$
$$9x_1 + 10x_2 + 11x_3 = 12$$

e)

$$2x_1 - 3x_2 + 4x_3 = 2$$
$$4x_1 + x_2 + 2x_3 = 2$$
$$x_1 - x_2 + 3x_3 = 3$$

f)

$$x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 = -1$$
$$2x_1 + x_2 + x_3 - x_4 = 4$$
$$x_1 + 2x_2 - x_3 - 2x_4 = 5$$
$$x_1 + x_3 = 1$$

g)

$$x_1 + x_2 + x_3 = 0$$
$$x_1 - 2x_2 + 2x_3 = 4$$
$$x_1 + 2x_2 - x_3 = 2$$

02) Determine para quais valores de λ os seguintes sistemas homogêneos possuem solução não-trivial. Encontre as soluções não-triviais associadas a cada valor de λ, definindo um número necessário de constantes.

a)

$$2x + y = \lambda x$$
$$x + 2y = \lambda y$$

(R): possui solução não-trivial somente se $\lambda = 1$ ou $\lambda = 3$. Para $\lambda = 1$, a solução é da forma $x = c, y = -c$, onde c é uma constante e para $\lambda = 3$, a solução é da forma $x = c, y = c$.

b)

$$2x - y = \lambda x$$
$$-x + 2y = \lambda y$$

(R): possui solução não-trivial somente se $\lambda = 1$ ou $\lambda = 3$. Para $\lambda = 1$, a solução é da forma $x = c, y = c$, onde c é uma constante e para $\lambda = 3$, a solução é da forma $x = c, y = -c$.

2 Algoritmo de Thomas e Métodos Iterativos

Como visto no capítulo anterior, métodos de eliminação direta, como o método de Gauss, podem ser aplicados para a resolução de sistemas de equações algébricas lineares. Diversos outros métodos são muito utilizados, como os métodos de Gauss-Jordan, fatoração LU e da matriz inversa. Estes métodos estão baseados em processos de eliminação de determinados termos da matriz dos coeficientes através de operações algébricas que não alterem o sistema.

Apesar de não haver uma regra geral, os métodos de eliminação costumam ser aplicados quando as seguintes condições são satisfeitas: (a) o número de equações é pequeno (menos de 100), (b) a maioria dos coeficientes da matriz **A** são não-nulos, (c) a matriz dos coeficientes não é predominantemente diagonal ou (d) o sistema de equações é mal condicionado (quando pequenos mudanças nos parâmetros de entrada causam grandes mudanças nos resultados obtidos).

A princípio, os métodos de eliminação poderiam ser aplicados para qualquer sistema. No entanto, existem alguns problemas que limitam a utilização destes métodos para certas classes de problemas, especialmente envolvendo um grande número de equações. Nestes casos, é necessário um número muito grande de operações para se obter a matriz escalonada, o que faz com que os erros de arredondamento sejam muito significativos.

De modo geral, a utilização de métodos iterativos é mais adequada para a resolução de sistemas com muitas equações onde não existe uma forma adequada de controlar o erro. No entanto, quando a matriz possui alguns formatos específicos, a utilização de métodos de eliminação próprios para cada formato pode permitir a resolução de forma simples, com um erro associado baixo e com um gasto mínimo de memoria computacional. Em particular, são de especial interesse as matrizes *tridiagonais*, pois estas surgem com frequência na resolução de EDP's e podem ser resolvidas facilmente com um método de eliminação chamado de algoritmo de Thomas, como será apresentado a seguir.

2.1 Matrizes Tridiagonais e o Algoritmo de Thomas

Uma matriz é dita tridiagonal quando possui uma largura de banda igual a 3, ou seja, somente a diagonal principal e os elementos vizinhos acima e abaixo são não-nulos. Este tipo de matriz surge naturalmente na resolução de PVC's pelo método de diferenças finitas de EDP's através de métodos implícitos. De forma geral, um sistema linear tridiagonal $n \times n$ pode ser expresso como:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{4,5} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

Para resolver este tipo de sistema, pode-se utilizar uma versão simplificada do método de eliminação de Gauss conhecida como algoritmo de Thomas. Como todos os elementos da primeira coluna abaixo da segunda linha são nulos, o único elemento que precisa ser eliminado nesta coluna é a_{21}. Assim, pode-se fazer a seguinte operação elementar na segunda linha:

$$L2 \leftarrow L2 - (a_{21}/a_{11})L1$$

onde $L2$ representa a linha 2 e $L1$ a linha 1. Com isso, a linha 2 passa a ser escrita como:

$$\begin{bmatrix} 0 & a_{22} - (a_{21}/a_{11})a_{12} & a_{23} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

De forma similar, para deixar a matriz no formato triangular, na coluna 2 somente o termo a_{32} precisa ser eliminado, na coluna 3 somente o termo a_{43} e assim sucessivamente. Como visto no exemplo para a primeira coluna, somente o elemento da diagonal superior será alterado pelo processo de eliminação (o elemento acima não será afetado pois será descontado o valor de zero).

De maneira generalizada, os elementos da diagonal principal após a eliminação passam a ser avaliados como:

$$a'_{i,i} = a_{i,i} - (a_{i,i-1}/a_{i-1,i-1})a_{i-1,i} \qquad (i = 2, 3, 4, \dots, n)$$

onde o sobrescrito $'$ é utilizado para destacar o valor novo, obtido após o procedimento. Como discutido na aula anterior, as operações elementares utilizadas nos método de eliminação são aplicadas na matriz aumentada, levando em conta também a parte não-homogênea do sistema. Por isso, as operações que afetam a diagonal principal também irão afetar o vetor **b**. Assim, os elementos deste vetor passam a ser avaliados como:

$$b'_i = b_i - (a_{i,i-1}/a_{i-1,i-1})b_{i-1} \qquad (i = 2, 3, 4, \ldots, n)$$

Com isso, pode-se construir uma matriz triangular $\mathbf{A}'$ e o sistema linear pode ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a'_{22} & a_{23} & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a'_{33} & a_{34} & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a'_{44} & a_{4,5} & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ldots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & a'_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & a'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ b'_4 \\ \vdots \\ b'_{n-1} \\ b'_n \end{bmatrix}$$

A partir deste sistema, a solução **x** pode ser avaliada, partindo do último elemento x_n e avançando até o primeiro:

$$x_n = b'_n/a'_{nn}$$

$$x_i = (b'_i - a'_{i,i+1}x_{i+1})/a'_{i,i} \qquad i = n-1, n-2, n-3, \ldots 1$$

Uma das principais vantagens do algoritmo de Thomas é sua facilidade de implementação. A estrutura do código pode ser dividida em duas partes:

(a) Substituição: [1]

$$\texttt{Para } i = 2 \texttt{ até } n:$$

$$e_i = a_{i,i-1}/a_{i-1,i-1}$$

$$a_{i,i} = a_{i,i} - e_i a_{i-1,i}$$

$$b_i = b_i - e_i b_{i-1}$$

[1] O vetor e_i só é utilizado para facilitar a implementação, não sendo necessário digitar os valores mais de uma vez.

(b) Resolução: [2]

$$x_n = b_n/a_{n,n}$$

$$\texttt{Para } i = n-1 \texttt{ até } 1:$$

$$x_i = (b_i - a_{i,i+1}x_{i+1})/a_{i,i}$$

É importante observar que o contador na etapa (b) é *decrescente*, por isso, os valores x_{i+1} já são conhecidos quando x_i está sendo calculado.

Exemplo 01: Através da aplicação do método de diferenças finitas, obteve-se o seguinte conjunto de equações para avaliar a distribuição de temperatura T_i ao longo de um objeto:

$$T_1 = 0$$

$$T_{i-1} - (2 + \alpha^2 \Delta x^2)T_i + T_{i+1} = 0 \qquad i = 2, 3, 4$$

$$T_5 = 10$$

Considerando que $\alpha = 4$ e $\Delta x = 0.125$, utilize o algoritmo de Thomas para encontra os valores de T_i.

R: $T = (0 \quad 1.451 \quad 3.266 \quad 5.896 \quad 10)^T$

2.2 Métodos Iterativos para Sistemas Lineares

O algoritmo de Thomas, apesar de muito simples, está restrito a matrizes estritamente tridiagonais. Quando o sistema não possui este formato e a utilização dos métodos de eliminação não é conveniente, costuma-se utilizar métodos iterativos para a resolução do sistema linear. Estes métodos são particularmente úteis para avaliar matrizes muito esparsas (com muitos elementos iguais a zero), pois neste caso os métodos tendem a convergir rapidamente.

Para iniciar os métodos iterativos, deve-se assumir uma solução inicial $\mathbf{x}^1$ (chute inicial). Através de alguma estratégia específica de cada método, este vetor é então corrigido para um valor aprimorado $\mathbf{x}^2$. Este processo é então repetido (iterado) até que a diferença entre o vetor obtido e o anterior seja menor que um valor especificado. Este processo é convergente se cada iteração produz um valor que se aproxima cada vez mais da solução exata conforme o número de iterações aumenta. O número de interações necessárias para se atingir um

[2] Nesta etapa, o contador deve ir na direção do último elemento até o primeiro, ou seja, com passo -1.

determinado critério de convergência estabelecido depende de vários fatores, podendo-se destacar:

- O formato da matriz dos coeficientes. Matrizes com superior dominância diagonal convergem mais rapidamente;
- O método de iteração utilizado, ou seja, a forma como a solução inicial é corrigida;
- A solução inicial assumida. Quanto mais próximo da solução exata, mas rapidamente o método irá convergir;
- O critério de convergência estabelecido.

Dentre os métodos iterativos mais simples para a resolução de sistemas lineares, pode-se destacar os de Jacobi e Gauss-Siedel. O método de Jacobi será apresentado a seguir.

2.2.1 Método de Jacobi

O método de Jacobi é o método iterativo mais simples para a resolução de sistemas lineares. Apesar de apresentar uma convergência relativamente lenta, o método funciona bem para sistemas esparsos com grande dominância diagonal, ou seja, onde os elmentos da diagonal principal são muito maiores que os demais elementos da mesma linha. No entanto, este método não funciona em todos os casos. Em particular, uma condição necessária é que todos os elementos da diagonal principal sejam não nulos. Quando algum elemento é nulo, pode-se eventualmente resolver o problema trocando-se a ordem das linhas (lembrando que esta é uma operação elementar que não altera o sistema).

Considere novamente o sistema linear da forma:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Assumindo que todos os termos a_{ii} são todos não-nulos, a solução deste sistema linear

pode ser dada por:

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \ldots - a_{1n}x_n)$$
$$x_2 = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \ldots - a_{2n}x_n)$$
$$\vdots$$
$$x_n = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \ldots - a_{n,n-1}x_{n-1})$$

Como pode ser visto, para determinar o valor de algum termo x_i, é preciso conhecer todos os outros valores x_j, $j \neq i$. O método de Jacobi consiste em assumir um valor inicial para o vetor $\mathbf{x}^1$, substituir no lado direito das equações anteriores, encontrar um novo valor $\mathbf{x}^2$ e continuar com este processo até que a diferença entre o valor $\mathbf{x}^k$ e $\mathbf{x}^{k+1}$ seja pequena o suficiente. Assim, pode-se estabelecer a seguinte relação para avançar as iterações:

$$x_1^{k+1} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^k - a_{13}x_3^k - \ldots - a_{1n}x_n^k)$$
$$x_2^{k+1} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^k - a_{23}x_3^k - \ldots - a_{2n}x_n^k)$$
$$\vdots$$
$$x_n^{k+1} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^k - a_{n2}x_2^k - \ldots - a_{n,n-1}x_{n-1}^k)$$

As equações acima podem ser expressas de forma geral como:

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^k - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^k\right)$$

Uma maneira mais conveniente de expressar a relação anterior pode ser obtida somando-se e subtraindo-se (portanto, sem alterar a igualdade) o termo x_i^k do lado direito da equação. Com isso, temos:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j^k\right)$$

Separando o termo entre parêntesis e definido:

$$R_i = b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j^k \qquad \rightarrow \qquad x_i^{k+1} = x_i^k + \frac{R_i}{a_{ii}}$$

Quando o método numérico atingir a convergência, o termo R_i será nulo, por isso o termo R_i é muitas vezes chamado de *resíduo* da equação. De fato, deve-se garantir que o resíduo diminua ao longo das iterações para garantir que o método está convergido para algum lugar.

Critério das Linhas

Se o método for convergente, conforme o valor de k aumenta, mais próximo se estará da solução verdadeira. Um critério que pode ser utilizado para determinar se o método será convergente é avaliar se a matriz dos coeficientes possui a diagonal principal dominante, ou seja, se os termos da diagonal principal em cada linha são maiores (em módulo) que a soma dos demais termos da mesma linha:

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} |a_{ij}|$$

Este critério é muitas vezes chamado de *critério das linhas* e é uma condição suficiente, mas não necessária, para que o método de Jacobi seja convergente para qualquer chute inicial. Quando esta condição não é satisfeita, o método ainda pode convergir, mas irá depender de outros fatores, como por exemplo solução inicial adotada.

Anteriormente, foi especificado que o processo iterativo deve continuar até que a diferença entre o valor atual e o anterior seja pequena o suficiente. Para definir o que isto significa, é importante entender como o erro pode ser calculado.

2.2.2 Convergência de Métodos Iterativos

Todo sistema não-singular de equações algébricas lineares possui uma solução exata. A princípio, os métodos de resolução direta, como os de eliminação, são capazes de fornecer esta solução exata. No entanto, como os valores são avaliados computacionalmente com uma quantidade finita de algarismos significativos, sempre irão existir erros de arredondamento associados à solução, seja ela por métodos diretos ou iterativos.

De forma geral, os métodos iterativos costumam ser menos afetados pelos erros de arredondamento do que os diretos, devido principalmente a três fatores: (a) os sistemas de equações resolvidos iterativamente normalmente possuem a diagonal dominante, (b) usualmente são esparsos e (c) cada iteração ao longo da resolução é independente dos erros de arredondamento do passo anterior, ou seja, a diferença causada pelo erro somente altera o valor inicial utilizado em cada iteração, mas não se acumula ao longo das iterações.

Quando um método numérico convergente é utilizado, a solução obtida se aproxima assintoticamente da solução exata conforme o número de iterações aumenta. Quando o número de iterações tende ao infinito, a diferença entre a solução obtida numericamente e a solução

exata é da magnitude da precisão com que os valores são computados (8 algarismos significativos para precisão simples e 16 para precisão dupla). Normalmente não é necessário atingir uma precisão tão grande, sendo por isso estabelecido um critério de parada.

A precisão de um método numérico é medida em termos do ***erro*** associado ao método. Existem duas formas de especificar o erro, de forma absoluta ou relativa:

$$\text{Erro absoluto} = \text{Valor aproximado obtido} - \text{Valor exato}$$

$$\text{Erro relativo} = \frac{\text{Erro absoluto}}{\text{Valor exato}}$$

A utilização do erro absoluto como critério de convergência só faz sentido quanto é conhecida a magnitude da solução exata. Por exemplo, um critério absoluto de 10^{-3} costuma ser suficiente se a solução exata possuir valores da ordem de 10^2, por exemplo. No entanto, se a solução é da ordem de 10^{-4}, o critério é totalmente incorreto. Por isso, é sempre mais adequado especificar o erro relativo.

No entanto, durante a resolução do sistema linear, o valor da solução exata não é conhecido, portanto os erros definidos anteriormente não podem ser calculados. Por isso, durante a resolução, o erro é calculado baseado na variação dos valores ao longo das iterações. Ao longo da solução, o erro absoluto $\Delta x_i = x_i^{k+1} - x_i^{exato}$ é aproximado como $\Delta x_i = x_i^{k+1} - x_i^k$.

Em cada iteração realizada o erro pode ser pequeno para um determinado valor de i e grande para outro valor, por isso deve-se ter cuidado quando é analisado se o critério de convergência foi atingido. Existem diferentes formas de fazer isto, sendo que as mais comuns são avaliar o valor máximo entre os erros para cada variável ou o somatório dos erros de cada variável. Considerando um critério de convergência ε, estes critérios podem ser respectivamente expressos como:

$$|(x_i^{k+1} - x_i^k)_{max}| \leq \varepsilon \qquad \sum_{i=1}^{n} |x_i^{k+1} - x_i^k| \leq \varepsilon$$

É importante destacar que o erro sempre deve ser avaliado em ***módulo*** e que a soma dos módulos é *diferente* do módulo das somas. De forma equivalente, os erros relativos podem ser expressos como:

$$\left| \left(\frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{x_i^{k+1}} \right)_{max} \right| \leq \varepsilon \qquad \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{x_i^{k+1}} \right| \leq \varepsilon$$

Exemplo 02) Resolva os Exemplo 01 utilizando o método de Jacobi, tendo como critério de convergência um erro relativo menor que 10^{-3}.

2.3 Condicionamento de Sistemas Lineares

Uma dúvida comum que surge na resolução de sistemas lineares é em relação à precisão com que os coeficientes e a solução precisam ser avaliados, ou seja, quantos algarismos significativos devem ser utilizados nos cálculos. De forma geral, todo sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ com $\det \mathbf{A} \neq 0$ admite solução única. A princípio, esta solução pode sempre ser obtida utilizando o método de eliminação de Gauss ou algum método iterativo, como o método de Jacobi, com algarismos com precisão infinita. No entanto, todos os cálculos são realizados com valores com precisão limitada. Como consequência sempre existem erros de arredondamento associados e estes erros podem ou não alterar a solução do sistema.

Para alguns sistemas, pequenas variações nos coeficientes causam uma grande variação na solução obtida. Como muitas vezes os coeficientes são obtidos através de medidas físicas (que possuem erros associados) ou advém de outros métodos matemáticos, deve-se avaliar a sensibilidade do sistema em relação aos coeficientes. Com base nisso, pode-se dividir os problemas em duas classes:

- Problemas bem condicionados: são aqueles onde uma pequena variação em qualquer um dos elementos do problema causa somente uma pequena variação na solução do problema;

- Problemas mal condicionados: são problemas onde uma pequena variação em algum dos elementos causa uma grande variação na solução obtida. Estes problemas tendem a ser muito sensíveis em relação a erros de arredondamento.

Considere o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 1.0001x_2 = 2.0001 \end{bmatrix}$$

Utilizando o método de eliminação de Gauss, pode-se reescrever o sistema como:

$$\begin{bmatrix} x_1 + x_2 = 2 \\ 0.0001x_2 = 0.0001 \end{bmatrix}$$

Assim, a solução do sistema é $x_1 = 1$, $x_2 = 1$. Considere agora que o coeficiente a_{22} seja alerado para 0.9999 (uma redução de menos de 0.02%):

$$\begin{bmatrix} x_1 + x_2 = 2 \\ x_1 + 0.9999x_2 = 2.0001 \end{bmatrix}$$

Utilizando o método de eliminação, podemos reescrever o sistema como:

$$\begin{bmatrix} x_1 + x_2 = 2 \\ -0.0001x_2 = 0.0001 \end{bmatrix}$$

Assim, a solução obtida neste caso é $x_1 = 3$, $x_2 = -1$, o que se distancia muito da solução obtida anteriormente. Este exemplo mostra como um sistema mal condicionado pode ser sensível aos coeficientes.

Um indicativo de que um sistema pode ser mal condicionado é quando o determinante da matriz é muito próximo a zero, porém este critério não representa uma avaliação quantitativa do condicionamento. Uma maneira de avaliar o quanto um determinado sistema é mal condicionado é através da determinação do ***número de condicionamento***, que é definido com base na norma da matriz dos coeficientes e sua inversa.

O número de condicionamento é uma medida da sensitividade do sistema a pequenas variações em qualquer de seus elementos. A origem deste número não será apresentada aqui, mas pode ser encontrada em Hoffman (2001). Considerando um sistema linear da forma $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, o número de condicionamento da matriz $\mathbf{A}$ é definido como:

$$C(\mathbf{A}) = \| \mathbf{A} \| \| \mathbf{A}^{-1} \|$$

Pequenos valores de $C(\mathbf{A})$, da ordem de uma unidade, indicam uma pequena sensibilidade da solução em relação a variações nos coeficientes, ou seja, indicam problemas bem condicionados. Valores grandes de $C(\mathbf{A})$ mostram que o sistema é mal condicionado.

Na definição do número de condicionamento, a norma utilizada é a norma Euclidiana (ou de Frobenius), definida como:

$$\| \mathbf{A} \| = \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} (a_{ij})^2 \right)^{1/2}$$

Exemplo 03: Determine o número de condicionamento da seguinte matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix}$$

Primeiramente, pode-se determinar a inversa da matriz $\mathbf{A}$ para na sequência calcular as normas. Lembrando da definição, a matriz inversa $\mathbf{A}^{-1}$ é uma matriz tal que:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$$

Neste caso, como a matriz é pequena, pode-se formar um sistema linear para determinar a inversa:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Assim:

$$a + c = 1$$

$$b + d = 0$$

$$a + 1.0001c = 0$$

$$b + 1.0001d = 1$$

Resolvendo o sistema, obtém-se:

$$\begin{bmatrix} 10001 & -10000 \\ -10000 & 10000 \end{bmatrix}$$

Com isso, as normas podem ser calculadas:

$$\| \mathbf{A} \| = (1^2 + 1^2 + 1^2 + 1.0001^2)^{1/2} = 2.00005$$

$$\| \mathbf{A}^{-1} \| = (10001^2 + (-10000)^2 + (-10000)^2 + 10000^2)^{1/2} = 20000.5$$

Dessa forma, o número de condicionamento será:

$$C(\mathbf{A}) = \| \mathbf{A} \| \| \mathbf{A}^{-1} \| = (2.00005)(20000.5) = 40002.0$$

Como visto, o número de condicionamento é muito elevando, indicando que a matriz é muito mal condicionada, como discutido anteriormente.

Lista de Exercícios 02 - Solução Numérica de Sistemas Lineares Algébricos

1) ***Algoritmo de Thomas.*** Utilize o algoritmo de Thomas para resolver os seguintes sistemas tridiagonais, caso possuírem solução única (utilize, de preferência, alguma ferramenta computacional). Confira se os valores obtidos estão corretos substituindo-os no sistema original.

a)

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 8 \\ 12 \\ 11 \end{bmatrix}$$

b)

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 0 \\ 8 \end{bmatrix}$$

c)

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 17 \\ 14 \\ 7 \end{bmatrix}$$

d)

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2) Através da aplicação do método de diferenças finitas, obteve-se o seguinte conjunto de equações para a distribuição de temperatura em um material:

$$T_1 = 0$$

$$T_{i-1} - 4T_i + T_{i+1} = 0 \qquad i = 2, \ldots, 99$$

$$T_{100} = 1$$

Faça um esboço de um algoritmo para a resolução deste sistema linear através do uso do algoritmo de Thomas e através do uso do método de Jacobi.

3) Utilize o método de Jacobi para obter uma solução aproximada para os seguintes sistemas lineares. Avalie também o número de condicionamento destes sistemas.

a)

$$\begin{aligned} 8x_1 + 2x_2 &= 2 \\ 1x_1 - 7x_2 &= 7 \end{aligned}$$

b)

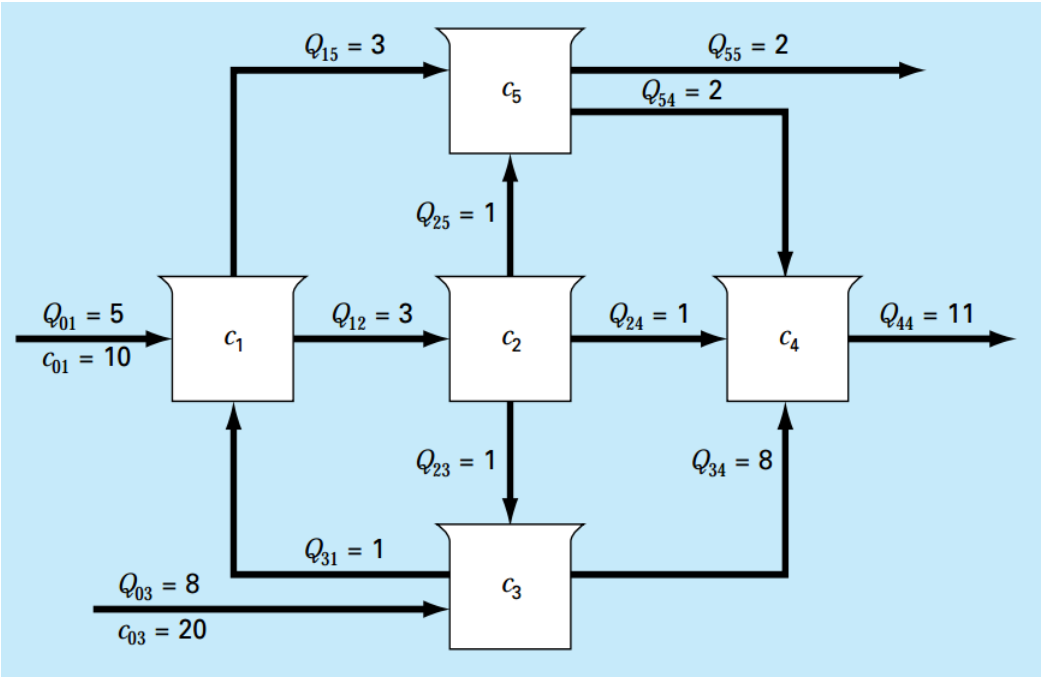
$$\begin{aligned} 3x_1 - x_2 + x_3 &= 2 \\ x_1 + 4x_2 + x_3 &= 1 \\ 2x_1 + x_2 + 6x_3 &= 4 \end{aligned}$$

4) ***Sistema sem diagonal dominante.*** Considere o seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 4x + 2y + 3z = 8 \\ 3x - 5y + 2z = -14 \\ -2x + 3y + 8z = 27 \end{bmatrix}$$

Como pode ser observado, este sistema não possui a diagonal dominante, portanto o critério das linhas não pode ser aplicado. Implemente um algoritmo utilizando o método de Jacobi para encontrar uma solução aproximada para o sistema. Compare com o valor obtido através do método de eliminação de Gauss.

5) Considere o sistema de tanques apresentando na figura a seguir.



Neste esquema, Q_{ij} representa a vazão volumétrica que sai do tanque i e vai para o tanque j e c_i representa a concentração mássica de um dado componente no tanque i. As vazões são

ajustadas para que o sistema opere em estado estacionário, ou seja, o volume dos tanques não varia com o tempo.

Para determinar a concentração do componente avaliado em cada um dos tanques, pode-se aplicar o princípio de conservação da massa em cada tanque, ou seja, a quantidade de massa que entra deve ser igual à quantidade que sai. Por exemplo, para o tanque 1 temos que:

$$Q_{01}c_{01} + Q_{31}c_3 = Q_{12}c_1 + Q_{15}c_1$$

De forma semelhante, para o tanque 2:

$$Q_{12}c_1 = Q_{25}c_2 + Q_{24}c_2 + Q_{23}c_2$$

a) Utilizando o mesmo procedimento, obtenha as equações para a conservação da massa nos demais tanques;

b) Escreva o sistema de equações obtidas na forma matricial;

c) Implemente um código para resolver o sistema de equações lineares através do método de Jacobi;

d) Verifique se a massa alimentada através de uma fonte externa nos tanques 1 e 3 equivale a massa que é removida do sistema através dos tanques 5 e 4.

3 Métodos Numéricos para Problemas de Valor de Contorno

Equações diferenciais de ordem maior que um podem gerar problemas de valor inicial (PVI) ou problemas de valor de contorno (PVC), dependendo da forma como as condições conhecidas são especificadas. Por exemplo, considere a EDO:

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = g(x)$$

Até o momento, foram analisados principalmente casos onde condições iniciais conhecidas são especificadas da forma:

$$y(x_0) = y_0 \qquad\qquad y'(x_0) = y'_0$$

originando desta forma um PVI. Para a resolução numérica de PVI's, pode-se partir da condição inicial e ir avançando até um tempo final arbitrário.

Em muitos casos, os problemas envolvem condições conhecidas em pontos diferentes, sendo estas chamadas de condições de contorno, podendo ser expressas, por exemplo, como:

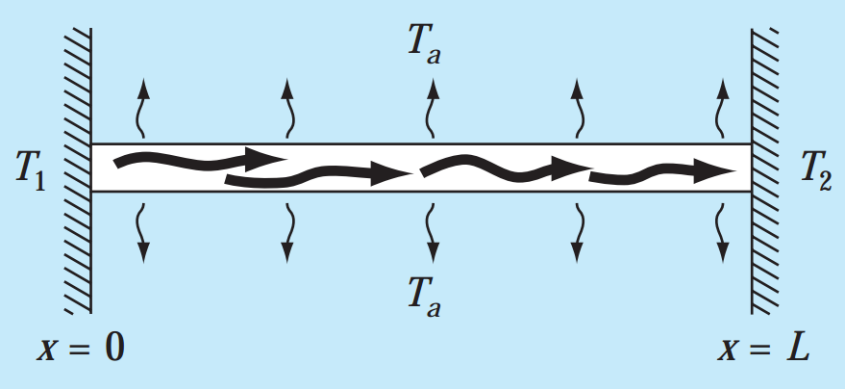
$$y(\alpha) = y_0 \qquad\qquad y(\beta) = y_1$$

De forma geral, os PVC's envolvem uma coordenada espacial como variável independente. Assim, a resolução de um PVC's consiste em buscar uma solução que satisfaz a equação diferencial no intervalo $\alpha < x < \beta$ juntamente com as condições de contorno especificadas. Isto implica que existem duas condições, em pontos diferentes do domínio de solução, que deve ser simultaneamente satisfeitas. Por isso, os métodos de marcha (como os de Runge-Kutta) não podem ser empregados neste caso.

3.1 Estratégias de Solução de PVC's

Os métodos para resolver problemas de valor de contorno se dividem em duas categorias: os baseados em transformar o PVC em um PVI e os baseados em discretizar a equação utilizando métodos de diferenças finitas.

Os métodos que transformação PVC's e PVI's consistem basicamente em utilizar uma das condições de contorno como condição inicial e assumir (chutar) diferentes valores para uma segunda condição inicial fictícia. O problema é então resolvido com métodos de resolução de PVI's (Euler, RK4, etc.) e verifica-se que a condição de contorno não utilizada é satisfeita. Caso não for, muda-se o chute da condição fictícia até o resultado obtido satisfazer a segunda condição de contorno real. Por exemplo, considere a seguinte equação utilizada para descrever a variação na temperatura em uma barra que perde calor para o ambiente por convecção, como apresentado na figura a seguir.



Considerando que a barra seja muito fina, com raio muito menor que o comprimento, pode-se assumir que a equação que descreve a variação na temperatura ao longo de x pode ser expressa como:

$$\frac{d^2T}{dx^2} + h'(T_a - T) = 0$$

onde h' é um coeficiente de troca térmica e T_a é a temperatura ambiente.

As condições de contorno corresponde a temperatura fixas nas extremidades, em $x = 0$ e $x = L$, de modo que:

$$T(0) = T_1 \qquad\qquad T(L) = T_2$$

Para transforma a equação em um PVI equivalente, primeiramente é preciso aplicar o método de redução de ordem. Escrevendo o PVI como:

$$\frac{dT}{dx} = z \qquad\qquad T(0) = T_1$$

$$\frac{dz}{dx} + h'(T_a - T) = 0 \qquad\qquad z(0) = z_0$$

O valor de z_0 não é conhecido, pois o valor da derivada de T em $x = 0$ não foi especificado. O método utilizado neste caso consiste em assumir diferentes valores para z_0 até que a condição $T(L) = T_2$ seja satisfeita. Para equação lineares, este método funciona razoavelmente bem, pois pode-se interpolar os valores para $T(L)$ obtidos para diferentes valores de z_0 para encontrar o valor de z_0 que corresponde a solução correta do problema. No entanto, de modo geral este método é pouco utilizado, por isso não será apresentado aqui em detalhes. Os métodos baseados em aproximações por diferenças finitas costumam ser mais eficientes, como será apresentado a seguir.

3.2 Aproximações por Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas é um método de ***discretização*** de equações diferenciais. Isto significa que ele transforma uma função contínua em uma representação discreta (pontos). Por exemplo, considere uma função $f(x) = 2x$ definida em um intervalo entre 0 e 1. Esta função pode ser representada de forma discreta como, por exemplo, $f[x] = [0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2]$, assumindo um espaçamento entre os pontos de 0.2, ou seja, esta representação está relacionada como um domínio discreto da forma $x = [0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1]$.

As soluções obtidas com a aplicação do método de diferenças finitas sempre serão discretas. Caso for necessário obter os valores para algum valor de x que não corresponda exatamente aos pontos do domínio, pode-se interpolar os valores.

A primeira etapa da aplicação do método de diferenças finitas consiste exatamente em definir o domínio discreto onde a solução será buscada. Por exemplo, considere o caso apresentado anteriormente para a distribuição de calor em uma barra estacionária. A região onde se deseja obter a distribuição de temperatura é no intervalo de $x = 0$ até $x = L$. Este intervalo corresponde ao *domínio de solução* da equação diferencial. No entanto, ele está em uma forma contínua e não discreta. Para discretizar o domínio, deve-se dividi-lo em um determinado número de pontos. Por exemplo, considere que $L = 1$ e que se deseja dividir o domínio em pontos com espaçamento $\Delta x = 0.1$, ou seja, deseja-se dividir o domínio em 10 elementos de igual tamanho. Quanto mais elementos forem utilizados, maior será a precisão do método, porém o gasto computacional também irá aumentar.

O domínio discreto será então:

$$x = [0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9.1]$$

Como pode ser visto, este conjunto contém 11 pontos. De maneira geral, o número de pontos sempre será igual ao número de elementos em que o domínio é dividido mais 1. Este vetor pode ser representado de uma forma mais simples como:

$$x[i] = i\Delta x \qquad\qquad i = 0, 1, 2, \ldots 10$$

ou de forma equivalente:

$$x[i] = (i-1)\Delta x \qquad\qquad i = 1, 2, 3, \ldots 11$$

Na resolução de PVI's, não é necessário inicialmente definir o domínio de solução, pois pode-se continuar avançando por quantos passos forem necessários, partindo de um valor inicial. No entanto, para o caso de PVC's, o domínio de solução é fechado e deve ser considerado como um todo.

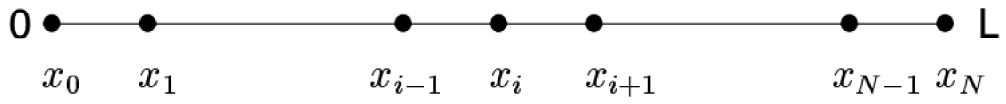
A estratégia do método de diferenças fintas consiste em buscar equações algébricas que aproximem a solução em cada ponto i. Para isso, as derivadas são aproximadas como relações algébricas envolvendo a solução em diferentes valores de i. Esta aproximação pode ser realizada de diferentes formas, dependendo da precisão desejada e da natureza do problema e das condições de contorno. Porém, a origem destas aproximações sempre é uma aproximação em série de Taylor em torno de cada ponto i, como será discutido a seguir.

3.2.1 Aproximação da Derivada Primeira

Para apresentar o processo de discretização da derivada de uma função contínua $y(x)$ em um intervalo $0 \leq x \leq L$, será considerado um domínio discreto como o apresentado na figura a seguir, onde o domínio físico contínuo (região entre 0 e L) é dividido em $N + 1$ pontos. Lembrando novamente, o objetivo do método de diferenças finitas é obter aproximações para o valor da função $y(x)$ em cada um destes $N + 1$ pontos.

Esta representação discreta do domínio de solução é normalmente chamada de ***grid numérico*** ou ***malha numérica***.

Como visto em aulas anteriores, a expansão em série de Taylor pode ser utilizada para avaliar o valor de uma função em um dado ponto com base no valor conhecido em outro ponto.



Dependendo da forma como a aproximação é realizada, obtém-se diferentes formulações para o método de diferenças finitas, como será apresentado a seguir.

Aproximação para Frente (Foward)

Considere que se deseja aproximar o valor em x_{i+1} com base no valor em x_i, ou seja, deseja-se aproximar $y(x_{i+1}) = y_{i+1}$ com base em $y(x_i) = y_i$.

A expansão em série de Taylor neste caso pode ser expressa como:

$$y_{i+1} = y_i + (x_{i+1} - x_i)\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!}\frac{d^2y}{dx^2}\Big|_{x=x_i} + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3}\Big|_{x=x_i} + \dots \quad (3.1)$$

Considerando que $(x_{i+1} - x_i)$ seja relativamente pequeno, os termos de alta ordem proporcionais a $(x_{i+1} - x_i)^2, (x_{i+1} - x_i)^3, \dots$ podem ser desprezados. Assim, a derivada primeira da função $y(x)$ no ponto x_i pode ser aproximada como:

$$\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Definindo $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, a expressão pode ser dada por:

$$\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$

Esta expressão é conhecida como *aproximação por diferenças finitas para frente* (ou método de diferenças finitas para frente), pois utiliza o valor da função em um ponto a frente x_{i+1} para estimar o valor da derivada em um ponto anterior x_i. Fazendo o limite de Δx tendendo a zero:

$$\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$

obtém-se a própria definição da derivada em um ponto. Portanto, esta formulação é ***consistente***.

Este método é equivalente ao método de Euler explícito para a resolução de PVI's, sendo que a diferença é que no método de Euler deseja-se aproximar o valor da função em diferentes pontos com base no conhecimento da derivada $dy/dt = f(t, y)$ e no método de diferenças finitas deseja-se aproximar o valor da derivada com base no valor em diferentes pontos. Nos dois casos, porém, ocorre uma linearização da função em torno de um ponto.

Na aproximação da derivada, foram desprezados os termos $O(x_{i+1} - x_i)^2$, assim, o erro de truncamento local do método de diferenças para frente é da ordem de $O(\Delta x^2)$, onde o símbolo O representa o operador ordem de grandeza. Como a aproximação é aplicada em N pontos ao longo do domínio, este erro se acumula N vezes. Pode-se mostrar que quando aplicado para avaliar N pontos, o erro associado será da ordem de $O(x_{i+1} - x_i) = O(\Delta x)$, isto indica que a aproximação por diferenças para frente é um método de ***primeira ordem***.

A ordem de um método numérico de resolução por discretização representa a relação como o erro de truncamento global varia em função do espaçamento Δx utilizado. De modo geral, o erro sempre será proporcional a $O(\Delta x^p)$, onde p representa a ordem do método. Quanto maior a ordem, mais rapidamente o erro diminui conforme o passo é reduzido.

A utilização de um Δx muito pequeno (tendendo a zero) é impraticável, pois exigiria um tempo computacional demasiadamente alto, além de fazer com que os erros de arredondamento dos dígitos numéricos aumentassem rapidamente. Um procedimento simples que pode na maioria dos casos ser utilizado para determinar se o passo utilizado é adequado é resolver o problema com valores de Δx gradativamente menores. A partir de um determinado ponto as soluções obtidas serão muito parecidas, sendo que uma maior redução em Δx a partir deste ponto não irá reduzir o erro global de forma significativa e irá aumentar o erro de arredondamento.

Aproximação para Trás (Backward)

De forma semelhante ao realizado para obter a derivada em x_i com base na expansão para obter y_{i+1}, pode-se realizar uma expansão para obter a função em x_{i-1}:

$$y_{i-1} = y_i + (x_{i-1} - x_i)\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} + \frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2!}\frac{d^2y}{dx^2}\Big|_{x=x_i} + \frac{(x_{i-1} - x_i)^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3}\Big|_{x=x_i} + \dots$$

Considerando que o espaçamento entre os pontos é constante, temos novamente que $\Delta x = x_i - x_{i-1} = -(x_{i-1} - x_i)$, assim:

$$y_{i-1} = y_i - (\Delta x)\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} + \frac{(\Delta x)^2}{2!}\frac{d^2y}{dx^2}\Big|_{x=x_i} - \frac{(\Delta x)^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3}\Big|_{x=x_i} + \dots \tag{3.2}$$

Novamente, desprezando os termos de ordem maior ou igual a 2, obtém-se:

$$\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x}$$

esta aproximação é conhecida como *aproximação por diferenças finitas para trás* (ou método de diferenças finitas para trás), e também representa uma aproximação de primeira ordem para a derivada em um dado ponto x_i.

A utilização dos métodos para trás ou para frente é, a princípio, equivalente. A única restrição ocorre nas extremidades do domínio. Por exemplo, no ponto x_0 não pode ser aplicado o método para trás pois não existe um ponto anterior a este. De forma semelhante, no ponto x_N a formulação para frente não pode ser utilizada, pois de maneira equivalente não existe nenhum ponto após este para ser utilizado de base.

Aproximação Central

De forma geral, a utilização de métodos de primeira ordem para a discretização de todos os pontos do domínio não costuma apresentar bons resultados, especialmente nos casos envolvendo gradientes aproximadamente simétricos em relação a direção x, como por exemplo problemas envolvendo condução de calor ou difusão de massa.

Uma aproximação de segunda ordem pode ser obtida fazendo a expansão para y_{i+1} menos a expansão para y_{i-1}. Com isso, obtém-se:

$$y_{i+1} - y_{i-1} = 2\Delta x \frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} + \frac{2(\Delta x)^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3}\Big|_{x=x_i} + \dots$$

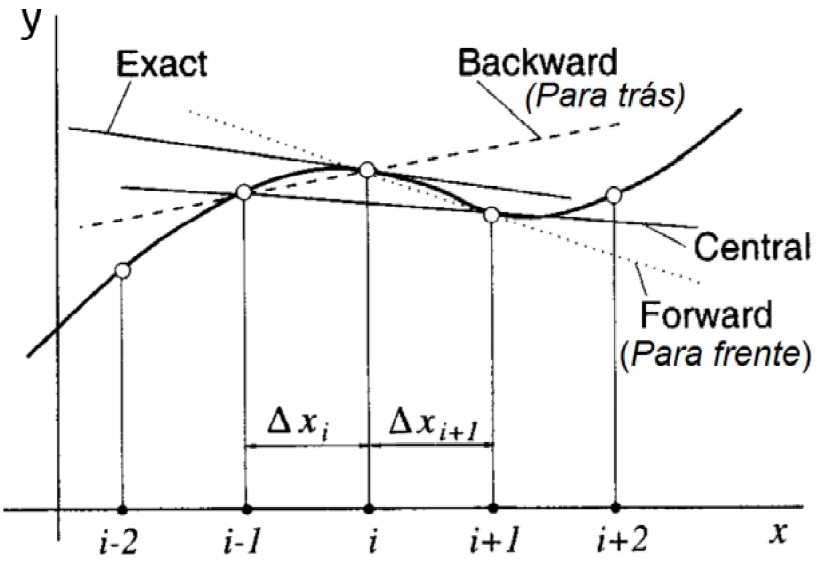
Desprezando agora os termos da ordem de $O(\Delta x)^3$, pode-se obter a seguinte expressão para uma aproximação da derivada primeira em x_i:

$$\frac{dy}{dx}\Big|_{x=x_i} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x}$$

Esta expressão é conhecida como *aproximação pode diferenças finitas central* (ou método de diferenças finitas central). Neste caso, o erro de truncamento local é da ordem de $O(\Delta x)^3$, de modo que o erro global será da ordem de $O(\Delta x)^2$. Assim, esta aproximação é de segunda ordem.

Existem aproximações de ordem superior, porém a aproximação central é a mais empregada, sendo adequada para a maioria dos casos. Novamente, dever-se observar que esta aproximação não pode ser aplicada nos pontos extremos do sistema. A melhor estratégia para a discretização da equação é utilizar o método central para os pontos internos, o método para frente no ponto x_0 e o método para trás no ponto x_N.

Uma comparação geométrica dos três esquemas de discretização é apresentada na figura a seguir.



3.2.2 Aproximação da Derivada Segunda

O método de diferenças finitas pode ser aplicado também para a discretização de derivadas de maior ordem. As aproximações para a derivada segunda são obtidas considerando a definição da derivada em um ponto. Da mesma forma que a derivada primeira pode ser aproximada em termos da variação da função em dois pontos, a derivada segunda pode ser aproximada em termos da variação na derivada primeira em dois pontos. Por exemplo, utilizando um esquema para frente:

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_i} = \frac{\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_{i+1}} - \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_i}}{x_{i+1} - x_i}$$

onde a derivada avaliada no ponto x_{i+1}, utilizando novamente um esquema para frente, é obtida de forma equivalente a derivada no ponto x_i como:

$$\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_{i+1}} = \frac{y_{i+2} - y_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}}$$

Considerando que os pontos sejam igualmente espaçados (grid igualmente espaçado), pode-se juntar as expressões para de derivada em x_{i+1} e a expressão para a derivada em x_i, obtém-se a seguinte expressão para a derivada segunda em x_i:

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_i} = \frac{y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{(\Delta x)^2}$$

Esta expressão representa o esquema para frente aplicado à derivada segunda. Como ele se baseia em esquemas de primeira ordem, também é uma aproximação de primeira ordem.

Fazendo um procedimento semelhante utilizando o esquema para trás, obtém-se:

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_i} = \frac{y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}}{(\Delta x)^2}$$

sendo este o esquema para trás aplicado para a derivada segunda, sendo também um método de primeira ordem.

Utilizando o esquema central, obtém-se a seguinte aproximação:

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_i} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(\Delta x)^2}$$

sendo esta uma aproximação de segunda ordem. Novamente, a estratégia que normalmente resulta em um melhor resultado é utilizar o esquema central para os pontos internos e os esquemas para frente e para trás para o primeiro e para o último ponto, respectivamente.

3.2.3 Discretização das Condições de Contorno

Além da equação diferencial envolvendo a derivada da função, a resolução de Problemas de Valor de Contorno necessita que determinadas condições de contorno também sejam em determinados pontos do domínio.

Para o caso de condições que consistem em definir o valor da função em um dado ponto, basta atribuir este valor para a função discretizada no ponto. Por exemplo, considere o exemplo anterior de transferência de calor em uma barra, onde a temperatura nas duas extremidades era conhecida: $T = T_1$ em $x = 0$ e $T = T_2$ em $x = L$. Considerando que x_0 corresponde ao ponto inicial $x = 0$ e x_N corresponde ao ponto $x = L$, as condições de contorno são implementadas definindo:

$$T_0 = T_1 \qquad\qquad T_N = T_2$$

Em muitos casos, a condição de contorno envolve a própria derivada de função em algum ponto. Por exemplo, considere que no exemplo da transferência de calor na barra metálica, a extremidade $x = L$ fosse mantida isolada termicamente. Neste caso, a condição de contorno é expressa como:

$$\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=L} = 0$$

Neste caso, é necessário discretizar a condição de contorno para transforma-la numa relação algébrica. Como este ponto corresponde ao último ponto do domínio, os esquemas para frente e central não pode ser utilizados, pois iriam depender de um ponto y_{N+1} que está fora do domínio de solução. Assim, é necessário utilizar o esquema para trás, de modo que a condição pode ser discretizada como:

$$\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=L} = \frac{T_N - T_{N-1}}{x_N - x_{N-1}} = 0 \qquad \rightarrow \qquad T_N = T_{N-1}$$

ou seja, a condição de derivada nula na posição $x = L$ implica que a variável em no ponto x_N é igual a variável no ponto anterior (x_{N-1}).

3.2.4 Discretização de PVC's utilizando Diferenças Finitas

A partir das expressões obtidas para aproximar a derivada em um ponto através de expressões algébricas, pode-se transformar um problema de valor de contorno em um conjunto de equações algébricas, sendo que para cada ponto do domínio discreto será atribuída uma equação. Esta é uma característica importante dos métodos de diferenças finitas: para que a resolução seja possível, deve-se atribuir uma equação para cada ponto do domínio discreto.

Considere novamente a equação utilizada anteriormente para modelar a transferência de calor em um barra metálica:

$$\frac{d^2T}{dx^2} + h'(T_a - T) = 0$$

Para ilustrar os diferentes tipos de condição de contorno, considere agora que na fronteira $x = 0$ a barra seja mantida a uma temperatura $T = T_{ext}$ e na extremidade $x = L$ a barra esteja isolada, de modo que as condições de contorno neste caso serão:

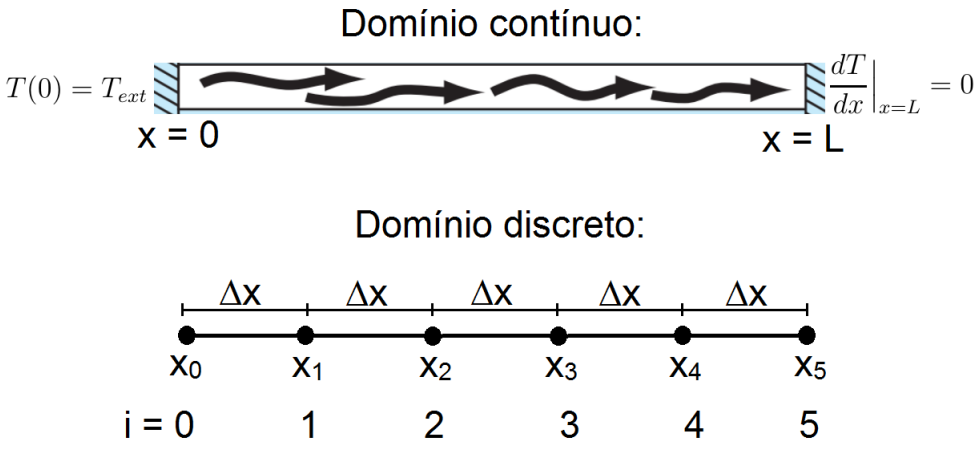
$$T(0) = T_{ext} \qquad \left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=L} = 0$$

onde T_{ext}, h', T_a e L são constantes. Para discretizar a equação, deve-se primeiramente definir o grid numérico, ou seja, deve-se definir em quantos pontos o domínio de solução contínuo será dividido e como estes pontos estão distribuídos. Neste caso, será assumido que o número de pontos será $N+1 = 6$ e, por simplicidade, será considerado que os pontos estão igualmente espaçados, portanto o domínio discreto será um conjunto de 6 pontos igualmente espaçados, como ilustrado na figura a seguir.

Como pode ser observado, quando 6 pontos são utilizados, o domínio contínuo é dividido em 5 subdomínios com tamanho Δx, ou seja, $\Delta x = L/5$.

O objetivo do método de diferenças finitas é obter uma aproximação para a temperatura em cada um dos pontos x_i, ou seja, deve encontrar 6 valores T_0, T_1, T_2, T_3, T_4 e T_5. Para isso, é necessário que cada ponto possua uma equação algébrica associada. O primeiro passo para a resolução é discretizar a equação. Neste caso, a equação possui somente uma derivada segunda que deve ser discretizada. Para isso, será utilizar o esquema de diferenças central:

$$\frac{d^2T}{dx^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}$$



Além da derivada segunda, a equação também envolve o termo $h'(T_a - T)$. Como h' e T_a são constantes, basta utilizar os seus valores na equação discretizada. Como a expressão anterior é utilizara para avaliar a derivada segunda no ponto x_i, a temperatura T deve ser substituída pela sua equivalente discreta T_i. Assim, a equação discretizada será:

$$\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} + h'(T_a - T_i) = 0$$

Multiplicando por Δx^2 e agrupando os termos:

$$T_{i+1} + T_{i-1} - (2 + h'\Delta x^2)T_i + \Delta x^2 h' T_a = 0$$

ou ainda:

$$(2 + h'\Delta x^2)T_i - T_{i+1} - T_{i-1} = \Delta x^2 h' T_a$$

Esta relação pode ser utilizada para obter equações para a temperatura em todos os pontos internos, ou seja, para todos os pontos exceto x_0 e x_5. Assim, para o ponto x_1 temos que:

$$(2 + h'\Delta x^2)T_1 - T_2 - T_0 = \Delta x^2 h' T_a$$

De forma semelhante, para o ponto x_2:

$$(2 + h'\Delta x^2)T_2 - T_3 - T_1 = \Delta x^2 h' T_a$$

e para os pontos x_3 e x_4:

$$(2 + h'\Delta x^2)T_3 - T_4 - T_2 = \Delta x^2 h' T_a$$

$$(2 + h'\Delta x^2)T_4 - T_5 - T_3 = \Delta x^2 h' T_a$$

Para estes pontos x_0 e x_5, deve-se utilizar as condições de contorno. Considerando a primeira condição $T(0) = T_{ext}$, isto resulta em:

$$T_0 = T_{ext}$$

A segunda condição de contorno é dada em termos de derivada nula. Neste caso, é preciso discretizar a condição. Como comentado anteriormente, neste caso somente uma aproximação para trás pode ser utilizada, de modo que:

$$\frac{dT}{dx}\Big|_{x=L} = 0 \qquad \rightarrow \qquad \frac{T_5 - T_4}{\Delta x} = 0 \qquad \rightarrow \qquad T_5 - T_4 = 0$$

Isto forma um conjunto de 6 equações lineares que podem ser utilizadas para a obtenção das 6 variáveis $T_0, T_1, T_2, \ldots$ Na forma matricial, estas equações podem ser expressas como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & (2+h'\Delta x^2) & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & (2+h'\Delta x^2) & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & (2+h'\Delta x^2) & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & (2+h'\Delta x^2) & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{ext} \\ \Delta x^2 h' T_a \\ \Delta x^2 h' T_a \\ \Delta x^2 h' T_a \\ \Delta x^2 h' T_a \\ 0 \end{bmatrix}$$

Assim, obtém-se um sistema linear tridiagonal que pode ser resolvido para obter a temperatura em cada um dos pontos do domínio discreto. Para ilustrar, considere um caso onde $L = 1\,cm$ (de modo que $\Delta x = L/5 = 0.2\,cm$), $T_{ext} = 100°C$, $T_a = 25°C$ e $h' = 0.1\,cm^{-2}$. Com isso, o sistema linear pode ser avaliado como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2.004 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2.004 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2.004 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.004 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 100 \\ 0.1 \\ 0.1 \\ 0.1 \\ 0.1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Para resolver este sistema linear, pode-se utilizar o algoritmo de Thomas (TDMA), como visto em aulas anteriores. Relembrando, este método irá transforma a matriz dos coeficientes em uma matriz triangular superior. Os elementos abaixo da diagonal principal serão zerados e os acima da diagonal principal não serão afetados. Os elementos da diagonal principal (a partir da linha 2) são reavaliados como:

$$a'_{i,i} = a_{i,i} - (a_{i,i-1}/a_{i-1,i-1})a_{i-1,i}$$

De forma semelhante, os termos do lado direito são reavaliados como:

$$b'_i = b_i - (a_{i,i-1}/a_{i-1,i-1})b_{i-1}$$

Assim, o sistema pode ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2.004 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.505 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.33955 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1.2575 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.204759 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 100 \\ 100.1 \\ 50.0501 \\ 33.35 \\ 25.0008 \\ 19.8814 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema, obtém-se:

$$T[0] = T_0 = 100°C$$

$$T[0.2] = T_1 = 98.83°C$$

$$T[0.4] = T_2 = 97.96°C$$

$$T[0.6] = T_3 = 97.38°C$$

$$T[0.8] = T_4 = 97.09°C$$

$$T[1] = T_5 = 97.09°C$$

Para comparação, a solução exata em cada um destes pontos é:

$$T[0] = T_0 = 100°C$$

$$T[0.2] = T_1 = 98.697°C$$

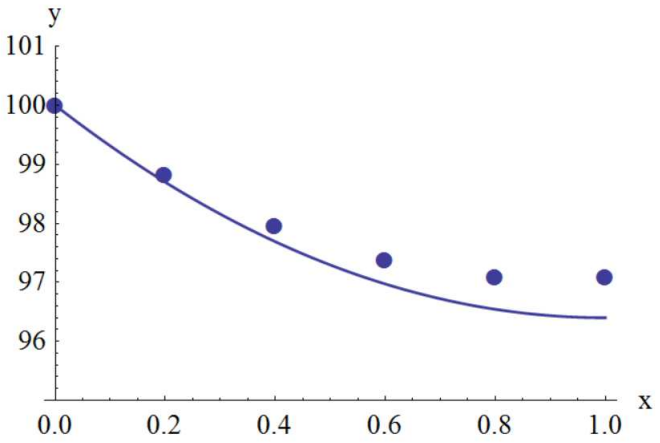
$$T[0.4] = T_2 = 97.689°C$$

$$T[0.6] = T_3 = 96.97°C$$

$$T[0.8] = T_4 = 96.54°C$$

$$T[1] = T_5 = 96.4°C$$

Na figura a seguir é apresenta uma comparação entre a solução exata (linha) e a solução aproximada obtida com o método de diferenças finitas (pontos). Pode-se observar que o desvio é relativamente alto, sendo que um resultado melhor pode ser obtido aumentado-se o número de pontos.



Neste exemplo, a resolução do problema envolveu um sistema linear tridiagonal. Quando o método de diferenças finitas é aplicado a um PVC linear, este sempre será o caso. Quando aplicado em equações não-lineares, o sistema de equações algébricas obtido também será não-linear e deverá ser resolvido com métodos adequados (método de Newton, por exemplo).

Lista de Exercícios 09 - Métodos Numéricos para Problemas de Valor de Contorno

01) Em conforto térmico, é frequentemente analisada a perda de calor através de um determinado corpo, que é dada pela variação da temperatura T através da seguinte expressão:

$$\frac{d^2T}{dx^2} - h(T_{ext} - T) = 0$$

Considere o caso de um casaco com espessura $L = 1.5cm$ onde $h = 0.13\,cm^{-2}$. Na região interior, em contato com o usuário, a temperatura é de $T_0 = 28°C$, enquanto que a temperatura na região exterior é de $T_{ext} = -5°C$. Pode-se assumir também que a temperatura na superfície externa do casaco (em $x = L$) é igual a temperatura externa. Utilizando o método de diferenças finitas, determine a temperatura em $x = 0.5\,cm$ e em $x = 1\,cm$, considerando $\Delta x = 0.25\,cm$.

R: $T[0.5] = 17.61°C$, $T[1] = 6.49°C$

02) A seguinte equação pode ser utilizada para descrever a variação na temperatura ao longo do raio r de uma barra circular com fonte interna de calor, como por exemplo um fio metálico por onde passa uma corrente elétrica:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dT}{dr} + S = 0$$

Esta equação esta expressa em uma forma adimensional, de modo que nenhuma das variáveis possui unidade. A superfície externa da barra corresponde a $r = 1$ e o ponto central corresponde a $r = 0$. Como condições de contorno, temos que:

$$T = 1 \qquad \text{em} \qquad r = 1$$

$$\frac{dT}{dr} = 0 \qquad \text{em} \qquad r = 0$$

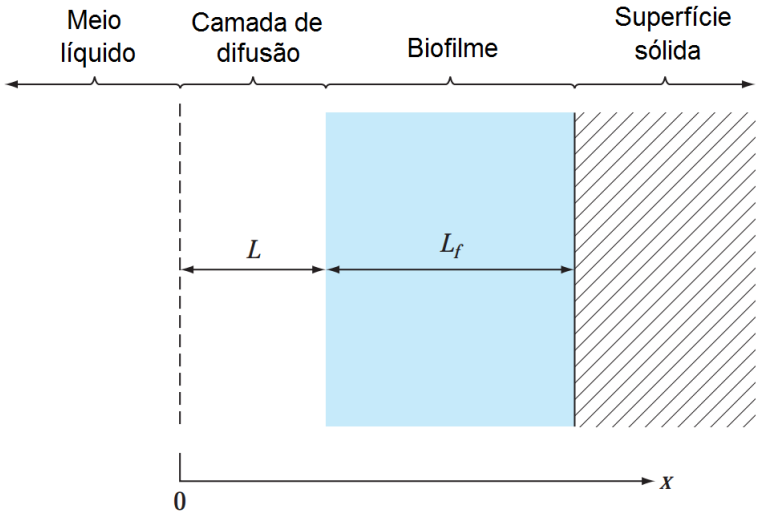
Isto significa que a temperatura na superfície externa é mantida constante e que o fluxo de calor é simétrico.

a) Considerando que $S = 10$, utilize o método de diferenças finitas com $\Delta r = 0.2$ para obter a variação na temperatura ao longo do raio. *Obs.:* A variável independente r que aparece de forma explícita na EDO também deve ser discretizada.

R: $T_0 = T_1 = 3.23$, $T_2 = 3.055$, $T_3 = 2.575$, $T_4 = 1.889$, $T_5 = 1$

b) Faça um esboço de um algoritmo que possa ser utilizado para obter a solução aproximada utilizando $\Delta r = 0.02$.

03) Um biofilme com espessura L_f cresce sobre uma superfície sólida, como indicado na figura a seguir. Sobre a superfície do biofilme, existe uma camada com espessura L por onde difunde um determinado composto A, que ao entrar no biofilme é sujeito a uma reação irreversível de primeira ordem que converte o composto A em um composto B.



As equações de balanço de massa em estado estacionário que descrevem a variação na concentração de A ao longo da camada de difusão e do biofilme são as seguintes:

$$D\frac{d^2C_A}{dx^2} = 0 \qquad 0 \leq x < L$$

$$D_f\frac{d^2C_A}{dx^2} - kC_A = 0 \qquad L \leq x \leq L + L_f$$

onde $D = 0.8\,cm^2/s$ é o coeficiente de difusão na camada de difusão, $D_f = 0.064\,cm^2/s$ é o coeficiente de difusão no biofilme e $k = 100\,s^{-1}$ é a taxa para a reação de conversão de A em B. Como condições de contorno, pode-se assumir que a concentração do composto A é constante no meio líquido ($x = 0$) de modo que:

$$C_A = C_{A,0} \qquad x = 0$$

A superfície sólida pode ser considerada impermeável, de modo que a seguinte condição é satisfeita:

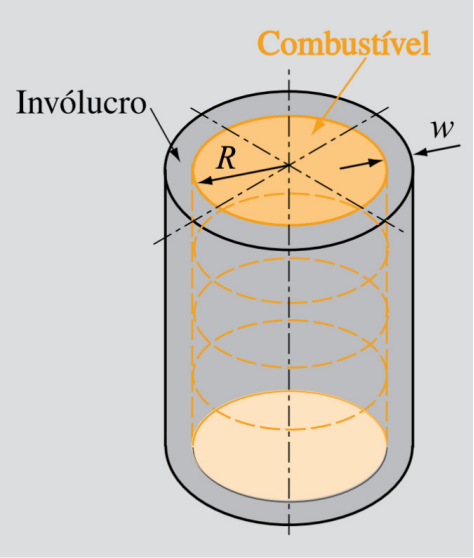
$$\frac{dC_A}{dx} = 0 \qquad x = L + L_f$$

Considerando que $L = 0.004\,cm$, $L_f = 0.008\,cm$ e $C_{A,0} = 0.1\,mol/cm^3$, utilize o método de diferenças finitas com $\Delta x = 0.001$ para obter a distribuição do composto A ao longo da camada de difusão e do biofilme. Pode-se assumir que a resistência a transferência de massa

na interface biofilme/camada de difusão é desprezível, de modo que a concentração nos dois lados da interface é a mesma.

R: Concentração na interface com a superfície sólida: $C_A(L + L_f) = 0.0913\, mol/cm^3$

04) [1] A pastilha de combustível de um reator nuclear é uma estrutura cilíndrica em que o combustível é retido no interior de um invólucro, conforme mostrado na figura abaixo:



O combustível faz com que calor seja gerado no interior do cilindro e também no invólucro em decorrência de reações nucleares. A superfície externa do invólucro é resfriada com água corrente em $T_\infty = 473K$ com um coeficiente de transferência de calor de $h = 10^4\, W/m^2K$. A condutividade térmica do material utilizado no invólucro é $k = 16,75\, W/mK$. As dimensões da pastilha de combustível são $R = 1,5 \times 10^{-2}\, m$ e $w = 3,0 \times 10^{-3}\, m$. A distribuição de temperaturas no invólucro é determinada pela solução do seguinte problema de valor de contorno:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(rk\frac{dT}{dr}\right) = 10^8\frac{e^{-r/R}}{r} \qquad R \leq r \leq R + w$$

Como condições de contorno para esta equação, temos que:

$$\left.\frac{dT}{dr}\right|_{r=R} = -\frac{6,32 \times 10^5\, W/m^2}{k}$$

$$\left.\frac{dT}{dr}\right|_{r=R+w} = -\frac{h}{k}(T|_{r=R+w} - T_\infty)$$

Utilize o método de diferenças finitas para obter o perfil de temperatura ao longo do raio do invólucro. Determine um espaçamento Δ_r suficientemente pequeno para que o erro de truncamento seja desprezível.

[1] Este exercício foi retirado do livro: Gilat, A; Subramaniam, V. Métodos Numéricos para Engenheiros e Cientistas: Bookman, 2008.

4 Classificação das Equações Diferenciais Parciais

4.1 Características Gerais das EDP's

Uma equação diferencial parcial é uma equação representando a relação entre uma função de duas ou mais variáveis independentes e as derivadas parciais desta função com respeito a estas variáveis independentes. Nos problemas encontrados com mais frequência na engenharia, as variáveis independentes são usualmente as dimensões espaciais x, y e z e o tempo t.

A grande maioria das EDP's não possui solução analítica, sendo necessário utilizar algum método numérico para obter uma solução aproximada. Dentre as poucas que possuem solução analítica, as mais comuns são a equação de Laplace bidimensional, a equação do calor (ou equação da difusão) e a equação da onda, dadas, respectivamente, por:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0 \qquad \frac{\partial f}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

Dentre as características gerais mais importantes para o estudo e classificação das EDP's, pode-se destacar a ordem, linearidade e homogeneidade:

- A ordem de uma equação diferencial é definida como a ordem da derivada de maior ordem presente. Na maioria dos casos (quando termos difusivos são considerados) obtém-se equações de segunda ordem;
- Uma EDP é dita linear se todas as derivadas parciais (incluindo de ordem zero, ou seja, a própria variável dependente) aparecem de uma forma linear e se nenhum dos coeficientes depende da variável dependente;
- A homogeneidade está relacionada com a presença de algum termo que não esteja multiplicado pela variável dependente ou alguma de suas derivadas, sendo uma EDP

dita homogênea se nenhum destes termos aparecer na equação. Na maioria dos casos, os termo não-homogêneos estão diretamente relacionados com termos fonte, ou seja, aqueles que não dependem da variável dependente (taxas de geração/consumo, por exemplo).

Além destas classificações comuns a todas as equações diferenciais, as EDP's podem ser classificadas de acordo com como uma perturbação irá se propagar pelo domínio de solução, do ponto de vista geométrico. Esta classificação define a forma como a equação pode ser resolvida e quais os métodos mais adequados, sendo portanto esta classificação fundamental para uma análise correta do problema.

De forma geral os problemas modelados por EDP's são resolvidos com quatro variáveis independentes (três direções espaciais e o tempo). No entanto, a classificação geral pode ser analisadas considerando-se o caso de equações com somente duas variáveis independentes. Além disso, será considero que a EDP é linear. A análise de EDP's não-lineares é mais complexa, porém em muitos casos os problemas podem ser modelados ou aproximados por EDP's lineares. Não-linearidades normalmente estão associados à dependência de algum coeficiente com as variáveis dependentes. Por exemplo, a aplicação das equações de conservação de momento para fluidos não-newtonianos leva a EDP's não-lineares, pois a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação não é linear. De forma semelhante, caso a condutividade térmica de um material depender da temperatura, as equações de transferência de calor neste material serão não-lineares.

4.2 Classificação das EDP's de 2ª Ordem Lineares

De forma geral, uma EDP linear de segunda ordem contendo duas variáveis independentes x e y com uma variável dependente ϕ pode ser expressa como:

$$A\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y} + C\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + D\frac{\partial\phi}{\partial x} + E\frac{\partial\phi}{\partial y} + F\phi + G = 0 \tag{4.1}$$

os coeficientes A, B, C, D, E, F e G podem ser funções das variáveis independentes x e y, mas não da variável ϕ.

A equação característica associada a esta EDO é da forma:

$$\frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} = 0$$

As EDP's são classificadas com base no *discriminante* $\delta = B^2 - 4AC$. As equações onde $\delta < 0$, $\delta = 0$ e $\delta > 0$ são chamadas, respectivamente de *elípticas, parabólicas e hiperbólicas*, sendo que muitas características fundamentais das equações, incluindo os métodos numéricos mais apropriados para resolver a equação, estão diretamente relacionados com esta classificação. Observe que a natureza da equação depende somente dos coeficientes associados com os termos de segunda ordem, sendo que os termos de primeira e de ordem zero não possuem nenhuma influência na classificação.

A classificação das EDP's como elípticas, parabólicas e hiperbólicas está diretamente relacionada com a presença ou não de *caminhos característicos* nas equações. O caminho característico representa a direção no domínio de solução onde a informação é transportada. Por exemplo, considere o caso onde uma determinada espécie química se propaga em um meio contínuo. Caso o meio for estacionário (por exemplo, um perfume difundido em uma sala com ar estagnado), a propagação será em todas das direções, sem uma direção preferencial. Neste caso, diz-se que não existe um caminho preferencial. Porém, caso exista um campo de velocidades (por exemplo, se um ventilador for ligado), a propagação irá ocorrer com maior intensidade em uma direção, neste caso existe então um caminho característico.

A quantidade de caminhos característicos está associado com as raízes da equação característica, conforme a tabela a seguir.

$B^2 - 4AC$	Raízes da eq. caract.	Caminhos caract.	Classificação
< 0	Complexas	0	Elíptica
$= 0$	Real e repetida	1	Parabólica
> 0	Reais e distintas	2	Hiperbólica

A presença de caminhos característicos no domínio de solução leva ao conceito de *domínio de dependência* e *domínio de influência*. Considere um ponto P no domínio de solução. O domínio de dependência do ponto P é definido como a região do domínio de solução que afeta o ponto P. Assim, o ponto P depende de tudo que acontece no domínio de dependência. O domínio de influência do ponto P é definido como a região do domínio de solução que é influenciada pelo ponto P, ou seja, o ponto P afeta tudo que está em seu domínio de dependência. Caso uma perturbação seja causada no ponto P, esta perturbação irá afetar tudo que está no domínio de influência de P. De forma semelhante, qualquer perturbação no domínio de dependência irá afetar a solução no ponto P.

As equações parabólicas e hiperbólicas possuem caminhos característicos reais e, como consequência, domínios de dependência e de influência específicos. As equações elípticas, no entanto, não possuem caminhos característicos. Neste caso, tanto o domínio de dependência quanto o de influência correspondem a todo o domínio de solução da equação. Estes resultados são ilustrados na Figura 1.

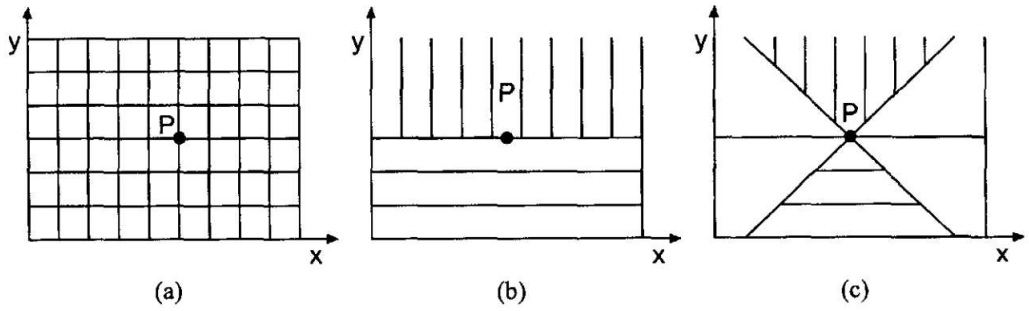


Figure 4.1: Domínio de dependência (linhas horizontais) e de influência (linhas verticais) para EDP's (a) elípticas, (b) parabólicas e (c) hiperbólicas. y e x representam as variáveis independentes.

Em resumo, a interpretação física da classificação das EDP's pode ser explicada em termo da equação característica:

- Se raízes reais existirem (EDP's parabólicas e hiperbólicas), caminhos preferenciais de propagação de informação existem, sendo que a velocidade de propagação irá depender da inclinação dos caminhos característicos. Como consequência, domínios de influência e dependência específicos irão existir para cada ponto no domínio de solução. Problemas físicos governados por este tipo de equação são chamados de *problemas de propagação* e usualmente estão associados a um comportamento transiente;

- Se as raízes da equação característica forem complexas (EDP elíptica), não existe um caminho preferencial de propagação. A solução em cada ponto influencia e é influenciada pela solução em todos os outros pontos do domínio de solução. Os problemas físicos governados por este tipo de equação são chamados de *problemas de equilíbrio*, estando associados com problemas estacionários.

4.2.1 EDP's Elípticas, $\delta < 0$

As EDP's elípticas surgem naturalmente quando o termo de derivada cruzada é nulo e A e C (coeficientes associados às derivadas de 2ª ordem) são positivos. Um exemplo de EDP elíptica é a Equação de Laplace mencionada anteriormente.

Considere, por exemplo, a equação que descreve a condução de calor em um meio bidimensional ($B = 0, A = 1, C = 1$):

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Esta equação admite solução analítica através do método de separação de variáveis. No entanto, para fins de definir as características geras associadas às equações elípticas, a equação para condução unidimensional mantém todas as características mais importantes associadas e por isso será usada como exemplo.

Considere a equação:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

Com condições de contorno de temperatura fixa $T(0) = T_0$ e $T(L) = T_L$, com $T_L > T_0$. A solução desta equação é da forma:

$$T(x) = T_0 + \frac{(T_L - T_0)}{L} x$$

Esta equação apresenta duas características associadas ao comportamento elíptico da equação:

1 - A temperatura em qualquer ponto P no domínio é influenciada pela temperatura nas duas extremidades $x = 0$ e $x = L$;

2 - Na ausência de termos-fonte, $T(x)$ é limitada pelas temperaturas nas extremidades, sendo que $T(x)$ não pode ser maior que T_L nem menor que T_0.

Como esta equação não possui caminhos característicos, os domínios de dependência e de influência são iguais a todo o domínio de solução. Além disso, como a derivada não apresenta nenhuma descontinuidade ao longo do domínio, a distribuição de temperatura será contínua.

4.2.2 EDP's Parabólicas, $\delta = 0$

As EDP's parabólicas surgem quando $B = 0$ e $A = 0$ ou $C = 0$. Um exemplo clássico de EDP parabólica é a equação da difusão (de calor ou massa) transiente:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Esta equação é uma EDP de segunda ordem em relação a x, sendo portanto necessário especificar duas condições de contorno, por exemplo:

$$T(0,t) = T_0 \qquad\qquad T(L,t) = T_0$$

Em relação ao tempo, a equação é de primeira ordem, de modo que somente uma condição inicial precisa ser especificada, por exemplo:

$$T(x,0) = T_i$$

Esta é uma característica das EDP's parabólicas, onde não é necessário definir duas condições para uma das variáveis, ou seja, não é necessário definir uma condição final para o sistema (não é preciso prever o futuro para resolver a EDP!).

Utilizando o método de separação de variáveis, obtém-se a seguinte solução para a EDP:

$$T(x,t) = T_0 + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin(c_n^1 x) e^{c_n^2 t}$$

onde

$$c_n^1 = \frac{n\pi}{L} \qquad\qquad c_n^2 = -\frac{\alpha n^2 \pi^2}{L^2}$$

e

$$B_n = \frac{2}{L} \int_0^L (T_i - T_0) \sin(c_n^1 x) dx$$

ou seja, B_n é uma função da condição inicial e da direção x.

Através desta solução, pode-se observar que:

- A temperatura nas extremidades, T_0, influencia a temperatura $T(x,t)$ em qualquer ponto do domínio, da mesma forma que para as EDP's elípticas;
- A condição inicial T_i influencia a temperatura para todos os tempos futuros. No entanto, como c_n^2 é negativo, esta influência diminui com o passar do tempo. No limite quando $t \to \infty$, esta influência tende a zero e a equação passa a ter um comportamento elíptico;
- A temperatura em qualquer ponto do domínio de solução é limitada pelas condições de contorno e inicial.

Com base neste exemplo, pode-se perceber que a variável t possui um comportamento bem distinto da variável x. As variações em t admitem somente influência em *uma direção*, enquanto que as variações em x ocorrem em *duas direções*. Como, neste caso, t representa o

tempo, este comportamento já é esperado pelo comportamento físico do sistema (o presente altera somente o futuro e não o passado), no entanto, este comportamento é observado em qualquer EDP parabólica, mesmo quando somente variáveis espaciais são consideradas. Por exemplo, no escoamento no interior de tubos (função das direções radial e axial), a direção axial possui um comportamento parabólico. Os métodos numéricos utilizados para este tipo de equação devem considerar este comportamento, sendo necessário o uso de métodos de *marcha no tempo* (*time-marching*) para a resolução da equação.

4.2.3 EDP's Hiperbólicas, $\delta > 0$

Considere o caso do escoamento unidimensional transiente de um fluido no interior de um tubo com uma velocidade constante $U > 0$. O fluido é alimentado a uma temperatura T_0 e, nas condições do escoamento, a transferência de calor por condução pode ser desprezada. A equação que descreve a variação da temperatura ao longo do escoamento é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho c_p U T) = 0$$

com as condições:

$$T(x,0) = T_i \qquad\qquad T(0,t) = T_0$$

Apesar de possuir some termos de primeira ordem, está é uma equação hiperbólica. Para provar isto, basta diferenciar a equação em relação a t ou a x, onde se obtém que os coeficientes A ou C são nulos e $B > 0$, considerando que as propriedades físicas e a velocidade são positivas.

A solução para este problema será uma função descontínua da forma:

$$T(x,t) = \begin{cases} T_i & t < \dfrac{x}{U} \\ T_0 & t \geq \dfrac{x}{U} \end{cases}$$

Basicamente, esta função representa uma descontinuidade (degrau) na solução que viaja ao longo do domínio. Neste caso, o termo x/U funciona como um *tempo característico*. Conforme o fluido é alimentado com uma temperatura T_0, leva um determinado tempo para que este afete a temperatura em um posição x longe da entrada, sendo este tempo uma função *somente* da velocidade U.

Com base nesta solução, pode-se observar as seguintes características associadas com as EDP's hiperbólicas:

- A condição de contorno especificada em $x = 0$ afeta somente a temperatura para $x > 0$. Caso valores de $x < 0$ fossem avaliados, estes não seriam afetados por T_0;
- A condição de contorno na entrada se propaga ao longo do domínio de solução com uma velocidade finita U;
- Qualquer variação nas condições da entrada não serão sentidas em um ponto x até que $t = x/U$.

Lista de Exercícios 10 - Classificação de EDP's e Métodos das Linhas

01) Classifique as seguintes equações diferencias em parabólicas, elípticas ou hiperbólicas:

$a)\ \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = e^x + e^y$

$b)\ \rho u \dfrac{\partial u}{\partial x} = \mu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \rho g_x$

$c)\ \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = 0$

$d)\ \nabla u = \nabla^2 u$

5 Método de Diferenças Finitas para EDP's Elípticas

As equações elípticas surgem com frequência na modelagem de problemas de equilíbrio, como por exemplo na descrição de transferência de calor em sistemas bidimensionais em estado estacionário. Como visto na aula anterior, as equações elípticas possuem a característica de que o domínio de dependência e o domínio de influência são iguais e englobam todo o domínio de solução. Por isso, para conhecer o valor de uma dada variável em um ponto, deve-se conhecer os valores em todos os outros pontos. Isto implica que para resolver uma equação elíptica através de métodos numéricos, deve-se resolver todo o domínio de solução simultaneamente. Por isso, o método das linhas não pode ser aplicado neste caso.

Dentre as EDP's elípticas mais importantes, pode-se destacar as equações de Laplace e de Poisson. Em um sistema bidimensional, estas equações são expressas, respectivamente, como:

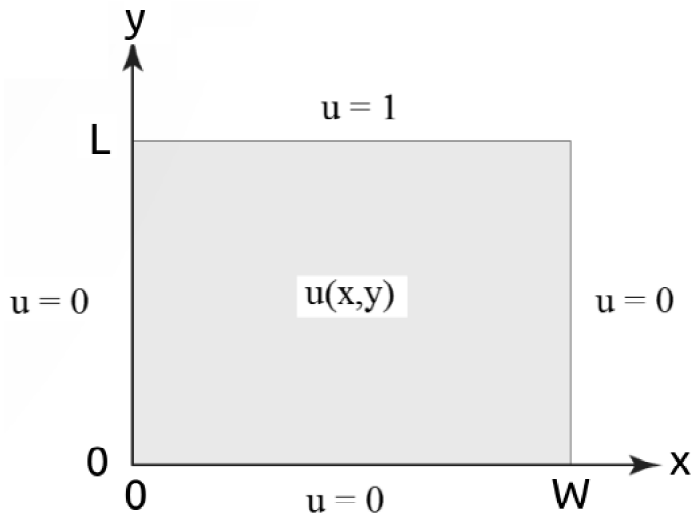
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$$

5.1 Equação de Laplace

Para ilustrar a aplicação do método de diferenças finitas para equações elípticas, considere a distribuição de temperatura em um sistema 2D com dimensões $L \times W$ onde três contornos são mantidos em uma temperatura fria T_F e a superfície superior é mantida em uma temperatura quente T_Q. Pode-se definir uma temperatura adimensional $u = (T - T_F)/(T_Q - T_F)$ para facilitar a resolução, de modo que quando $T = T_F$, $u = 0$ e quanto $T = T_Q$, $u = 1$. Um esquema deste sistema é apresentado na figura a seguir.

Neste caso, a equação que governa a distribuição de temperatura é a equação de Laplace:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$



com as seguintes condições de contorno associadas:

$$u(0,y) = 0 \qquad u(W,y) = 0 \qquad u(x,0) = 0 \qquad u(x,L) = 1$$

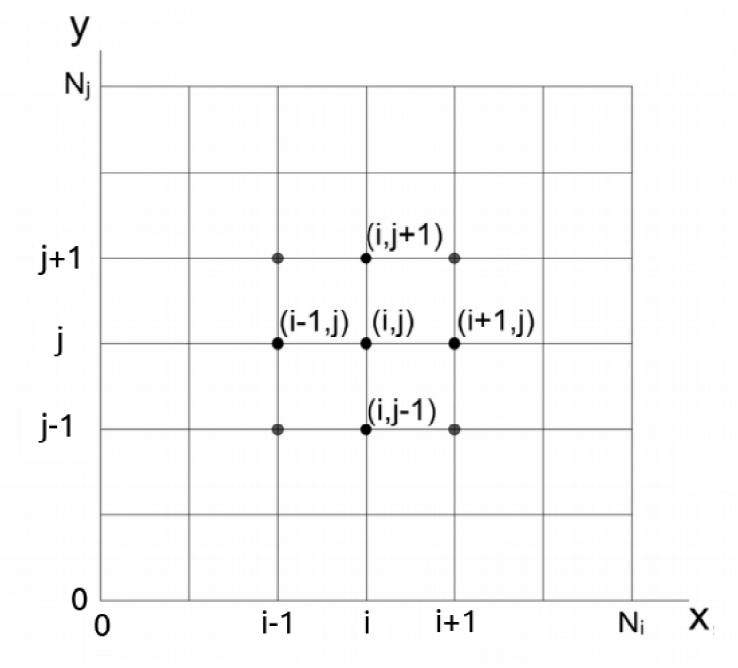
Para resolver este tipo de equação, pode-se aplicar o método de diferenças finitas. Anteriormente, o método foi aplicado para a resolução de EDO's, de modo que a solução buscada era função de somente uma variável independente. O domínio de solução desta variável foi então dividido em um dado número de pontos e aproximações por diferença finitas foram aplicadas para obter uma representação discreta da derivada em cada um destes pontos.

No caso da equação de Laplace, a solução buscada é função de duas variáveis independentes, de modo que o domínio de solução é um plano e não uma reta. Neste caso, também é necessário dividir o domínio em um conjunto de pontos, porém estes pontos irão gerar uma matriz e não um vetor como no caso das EDO's.

Por exemplo, considere que o domínio de solução seja dividido em N_i elementos com tamanho Δx na direção x (ou $N_i + 1$ pontos) e em N_j elementos com tamanho Δy na direção y (ou $N_j + 1$ pontos), como indicado na figura a seguir.

Neste caso, o grid numérico (ou malha numérica) possui duas dimensões, de modo que a solução será deverá ser indicada com dois índices, neste caso $u[i,j]$. O índice i se refere à direção x e o índice j à direção y. Por exemplo, considerando Δx e Δy constantes, o termo $u[3,6]$ se refere a aproximação da solução em $x = 3\Delta x$ e $y = 6\Delta y$.

A equação de Laplace possui derivadas segundas em relação a duas variáveis independentes x e y. Neste caso, a aproximação por diferenças finitas das derivadas parciais parte de uma expansão em séries de Taylor na direção específica da variável independente analisada. Por exemplo, para avaliar a derivada em relação a x, considera-se y constante e portanto o índice



j é mantido fixo e o índice i é variado de acordo com o esquema utilizado. Utilizando um esquema central para a aproximação nas duas direções, temos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u[i-1,j] - 2u[i,j] + u[i+1,j]}{\Delta x^2} \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{u[i,j-1] - 2u[i,j] + u[i,j+1]}{\Delta y^2}$$

Substituindo na EDP:

$$\frac{u[i-1,j] - 2u[i,j] + u[i+1,j]}{\Delta x^2} + \frac{u[i,j-1] - 2u[i,j] + u[i,j+1]}{\Delta y^2} = 0$$

Multiplicando a equação por Δx e definindo $\alpha = \Delta x/\Delta y$:

$$u[i-1,j] - 2u[i,j] + u[i+1,j] + \alpha^2(u[i,j-1] - 2u[i,j] + u[i,j+1]) = 0$$

Colocando os termos $u[i,j]$ em evidência:

$$u[i-1,j] + u[i+1,j] + \alpha^2(u[i,j-1] + u[i,j+1]) - (2+2\alpha^2)u[i,j] = 0$$

De modo que:

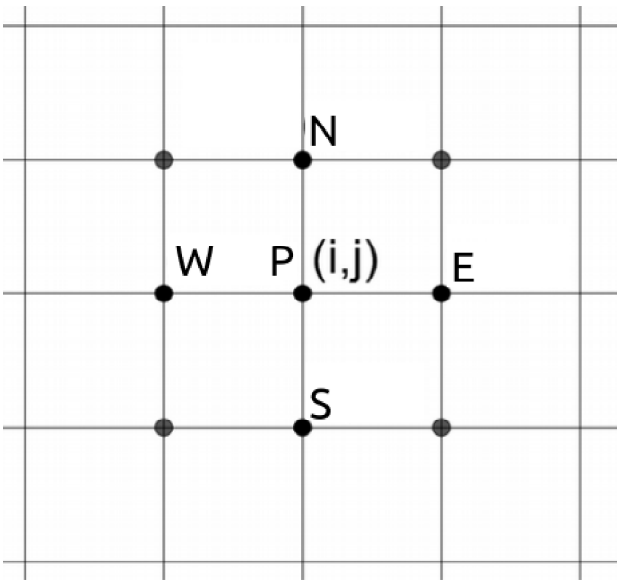
$$u[i,j] = \frac{u[i-1,j] + u[i+1,j] + \alpha^2(u[i,j-1] + u[i,j+1])}{2(1+\alpha^2)}$$

Esta expressão pode ser utilizada para determinar a solução em um dado ponto com base nos valores dos pontos vizinhos. Como envolve o conhecimento de pontos vizinhos em todas as direções, esta expressão não pode ser utilizada nas fronteiras, onde algum dos vizinhos não é definido. Assim pode-se utilizar a expressão anterior para qualquer valor de i diferente de 0 ou N_i e para qualquer valor de j diferente de 0 ou N_j.

Como pode ser observado, no caso de um grid quadrado, com $\Delta x = \Delta y$, teremos que $\alpha^2 = 1$, de modo que a solução no ponto $[i, j]$ será simplesmente a média aritmética da solução nos seus quatro vizinhos.

Por envolver o valor da variável em um dado ponto e em seus quatro vizinhos, esta forma de aproximação é muitas vezes chamada de *aproximação em 5 pontos*.

Uma notação muito útil para apresentar relações similares a esta pode ser conseguida utilizando o conceito de pontos cardeais. Com isso, os vizinhos a um dado ponto P são representados como pontos leste (E), oeste (W), norte (N) e sul (S), por comparação com uma projeção cartográfica cartesiana, como indicado na figura a seguir.



Neste esquema, o ponto $[i, j]$ é identificado como ponto P, o ponto $[i + 1, j]$ como ponto E, e assim sucessivamente. A vantagem de utilizar este esquema é que pode-se associar um coeficiente A com cada ponto, de modo a escrever a equação discretizada como:

$$A_P(u[i,j]) + A_W(u[i-1,j]) + A_E(u[i+1,j]) + A_S(u[i,j-1]) + A_N(u[i,j+1]) = 0$$

No exemplo anterior, os coeficientes associados são:

$$A_P = -(2 + 2\alpha^2) \qquad A_W = A_E = 1 \qquad A_N = A_S = \alpha^2$$

A discretização de equações elípticas homogêneas em um sistema bidimensional sempre irá gerar uma relação desta forma, portanto pode-se simplesmente alterar os coeficientes A para incluir as modificações em relação a este caso.

5.1.1 Discretização das Condições de Contorno

Para resolver o sistema de equações lineares, cada ponto do grid deve possuir uma equação linearmente independente associada. A relação anterior pode ser aplicada para todos os pontos externos, enquanto que nas fronteiras pode-se utilizar as condições de contorno.

Relembrando, as condições de contorno associadas são:

$$u(0,y) = 0 \qquad u(W,y) = 0 \qquad u(x,0) = 0 \qquad u(x,L) = 1$$

A primeira condição, $u(0,y) = 0$, é aplicada em $x = 0$, ou seja, na extremidade esquerda do domínio de solução. Como a direção x é representa pelo ínidice i, a fronteira $x = 0$ equivale a $i = 0$. Com relação a direção y, identificada pelo índice j, a condição deve ser válida para todos os valores de $j = 0$ até $j = N_j$. Assim, pode-se especificar esta condição de contorno como:

$$u(0,y) = 0 \quad \rightarrow \quad u[0,j] = 0 \qquad j = 0 \quad \text{até} \quad N_j$$

A utilização de índices partindo de 0 e indo até N_i ou N_j causa problema nos vértices do grid, pois nestes pontos pode haver sobreposição de condições de contorno. Por exemplo, considere a condição na superfície superior ($y = L$). Esta condição estabelece que $u(x,L) = 1$. Assim, pode-se definir esta condição na forma discreta como:

$$u(x,L) = 1 \quad \rightarrow \quad u[i,N_j] = 1 \qquad i = 0 \quad \text{até} \quad N_i$$

ou seja, fixa-se a direção y e varia-se a direção x para cobrir todo o domínio de solução. No entanto, no vértice $u[0,N_j]$ (canto superior esquerdo), já havia sido atribuída a condição $u[0,N_j] = 0$. O mesmo problema irá ocorrer em todos os vértices, pois representam uma interseção entre fronteiras que podem ou não ter condições distintas associadas. A pergunta óbvia que deve ser feita neste caso é qual condição deve ser aplicada nos vértices. A resposta não tão óbvia é que não existe uma regra geral para isto. Normalmente, o grid numérico possui um número elementos suficientemente grande para a escolha não ter uma importância tão significativa. Neste caso, será considere que nos vértices superiores $u = 1$. Assim, a primeira condição deve ser expressa como:

$$u(0,y) = 0 \quad \rightarrow \quad u[0,j] = 0 \qquad j = 0 \quad \text{até} \quad N_j - 1$$

e as demais condições resultam em:

$$u(W,y) = 0 \quad \rightarrow \quad u[N_i,j] = 0 \qquad j = 0 \quad \text{até} \quad N_j - 1$$

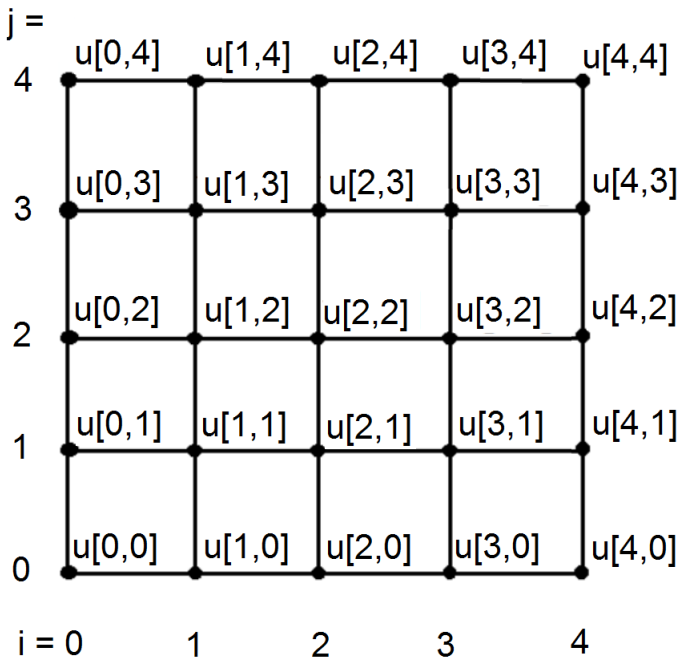
$$u(x,0) = 0 \quad \rightarrow \quad u[i,0] = 0 \qquad i = 1 \quad \text{até} \quad N_i - 1$$

Na última condição, foram especificados valores a partir de $i = 1$ até $i = N_i - 1$ porque os vértices já haviam sido definidos nas demais condições.

Dessa forma, todos os pontos do grid possuem uma equação algébrica associada. Resolvendo este sistema de equações, obtém-se uma aproximação para a solução da EDP.

5.1.2 Obtenção do Sistema de Equações Algébricas

Para ilustrar este problema, considere uma malha simplificada com $N_i = N_j = 4$ e com igual espaçamento nas direções x e y, de modo que $\Delta x = \Delta y$ e como consequência $\alpha = 1$. Certamente um grid com este número de elementos não é adequado para representar um sistema físico real, mas será utilizado somente para ilustrar a obtenção das equações.



As condições definidas anteriormente, na forma discretizada, foram:

$$\text{fronteira esquerda} \qquad u[0,j] = 0 \qquad j = 0 \quad \text{até} \quad N_j - 1$$

$$\text{fronteira superior} \qquad u[i,N_j] = 1 \qquad i = 0 \quad \text{até} \quad N_i$$

$$\text{fronteira direita} \qquad u[N_i,j] = 0 \qquad j = 0 \quad \text{até} \quad N_j - 1$$

$$\text{fronteira inferior} \qquad u[i,0] = 0 \qquad i = 1 \quad \text{até} \quad N_i - 1$$

A aplicação da condição na fronteira esquerda resulta em:

$$u[0,0] = u[0,1] = u[0,2] = u[0,3] = 0$$

De forma semelhante, a aplicação das condições nas fronteiras superior, direita e inferior resulta, respectivamente, em:

$$u[0,4] = u[1,4] = u[2,4] = u[3,4] = u[4,4] = 1$$

$$u[4,0] = u[4,1] = u[4,2] = u[4,3] = 0$$

$$u[1,0] = u[2,0] = u[3,0] = 0$$

Estas condições definem os $N_i \times N_j = 16$ pontos da fronteira. Para os pontos internos, deve-se utilizar a equação discretizada obtida anteriormente:

$$A_P(u[i,j]) + A_W(u[i-1,j]) + A_E(u[i+1,j]) + A_S(u[i,j-1]) + A_N(u[i,j+1]) = 0$$

Com os coeficientes

$$A_P = -(2+2\alpha^2) = -4 \qquad A_W = A_E = 1 \qquad A_N = A_S = \alpha^2 = 1$$

Por exemplo, para $j = 1$, estas equações resultam em:

$$A_P u[1,1] + A_W u[0,1] + A_E u[2,1] + A_S u[1,0] + A_N u[1,2] = 0$$

$$A_P u[2,1] + A_W u[1,1] + A_E u[3,1] + A_S u[2,0] + A_N u[2,2] = 0$$

$$A_P u[3,1] + A_W u[2,1] + A_E u[4,1] + A_S u[3,0] + A_N u[3,2] = 0$$

Como pode ser visto, estas equações dependem também dos valores nas posições $j = 0$ e $j = 2$. Fazendo o mesmo procedimento para as demais linhas, irá se obter equações semelhantes. Neste caso, serão 9 equações além das condições de contorno. Por simplicidade, as aproximações $u[i,j]$ serão representadas por u_{ij}. Assim, considerando os valores dos coeficientes e as condições de contorno, as equações anteriores podem ser expressas como:

$$-4u_{11} + u_{21} + u_{12} = 0$$

$$-4u_{21} + u_{11} + u_{31} + u_{22} = 0$$

$$-4u_{31} + u_{21} + u_{32} = 0$$

De forma semelhante, para $j = 2$, as equações obtidas são:

$$-4u_{12} + u_{22} + u_{13} + u_{11} = 0$$

$$-4u_{22} + u_{12} + u_{32} + u_{23} + u_{21} = 0$$

$$-4u_{32} + u_{31} + u_{22} + u_{33} = 0$$

Finalmente, para $j = 3$

$$-4u_{13} + u_{12} + u_{23} = -1$$

$$-4u_{23} + u_{13} + u_{33} + u_{22} = -1$$

$$-4u_{33} + u_{23} + u_{32} = -1$$

Este sistema pode ser representado na forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \\ u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \\ u_{13} \\ u_{23} \\ u_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Este sistema pode ser apresentado de uma forma simplificada como:

$$\begin{bmatrix} B & \mathbf{I} & 0 \\ \mathbf{I} & B & \mathbf{I} \\ 0 & \mathbf{I} & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u_1} \\ \mathbf{u_2} \\ \mathbf{u_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade 3×3 e os blocos B são dados por:

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

os vetores $\mathbf{u_x}$ representam os pontos associados com valores fixos de $j = x$.

O sistema linear formado com estas equações irá apresentar uma estrutura conhecida como tridiagonal em blocos. A resolução deste sistema linear através de técnicas de eliminação

não costuma apresentar bons resultados, pois a matriz dos coeficientes usualmente é muito esparsa (a maioria dos elementos são nulos). Em contrapartida, métodos iterativos como Jacobi e Gauss-Siedel apresentam excelentes resultados, pois usualmente a matriz possui a diagonal principal dominante.

Resolvendo o sistema de equações, obtém-se os seguintes valores:

$$u_{11} = u_{31} = 0.0714 \qquad u_{21} = 0.0982$$

$$u_{12} = u_{32} = 0.1875 \qquad u_{22} = 0.25$$

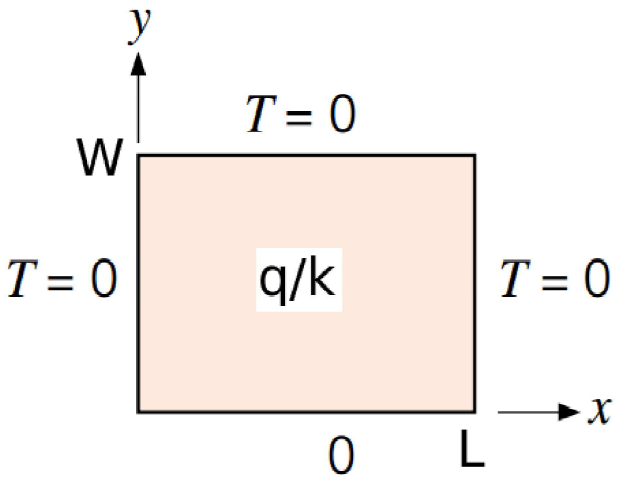
$$u_{13} = u_{33} = 0.4286 \qquad u_{23} = 0.5268$$

Lista de Exercícios 11 - Diferenças Finitas para EDP's Elípticas

1) (***Equação de Poisson)*** Considere um sistema bidimensional, como na Figura a seguir, representando um meio sólido com condutividade térmica constante onde existe uma fonte uniforme de calor $\dot{q}/k$ e as fronteiras são mantidas em $T = 0°C$. Neste caso, a equação que descreve a variação de temperatura ao longo das direções x e y, em estado estacionário, é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{\dot{q}}{k}$$

As equações com este formato são chamadas de equação de Poisson e são uma importante classe de equações elípticas.



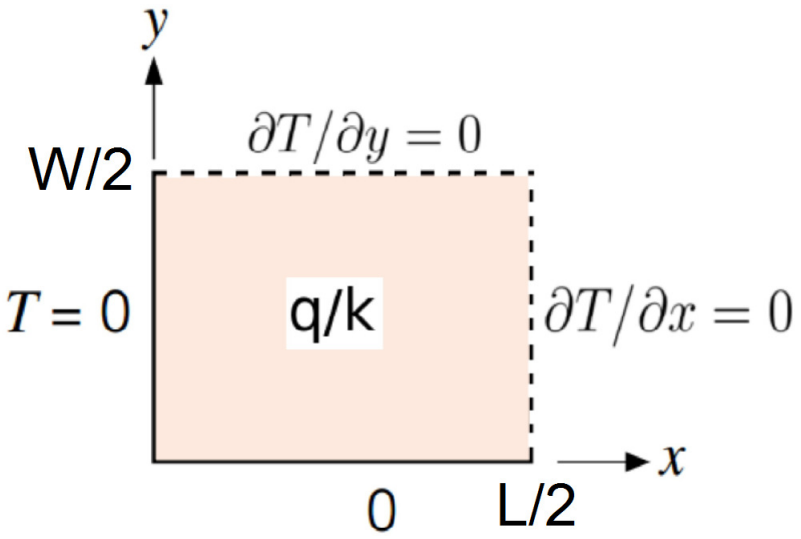
Considere um sistema onde $L = W = 1\,cm$ e $\dot{q}/k = 1.5 \times 10^3 K/cm^2$ correspondendo, por exemplo, a um microchip onde ocorre dissipação de calor devido à passagem de uma corrente elétrica. Utilizando uma malha com $N_i = N_j = 5$, obtenha a temperatura no centro do microchip. Se necessário, interpole os valores dos pontos vizinhos ao ponto central.

R: $T = 67.5°C$

2) (***Utilização de Planos de Simetria)*** Considere novamente o sistema descrito no exemplo anterior. Como as condições de contorno impostas são iguais em todos as fronteiras e a fonte de calor é homogênea, os planos paralelos aos eixos x e y e que cruzam o ponto central representam *planos de simetria*. Isto implica que é suficiente considerar somente 1/4 do domínio de solução, já que o comportamento neste quadrante será idêntico ao comportamento nos demais[1]. A condição matemática que representa os planos simetrias é de derivada nula

[1] Alguns sistemas podem apresentar quebra de simetria devido à flutuações inifinitesimais próximas a pontos de bifurcação, mas este comportamento é raro e usualmente não precisa ser considerado.

em relação à direção normal. Dessa forma, o problema anterior pode ser representado da forma:



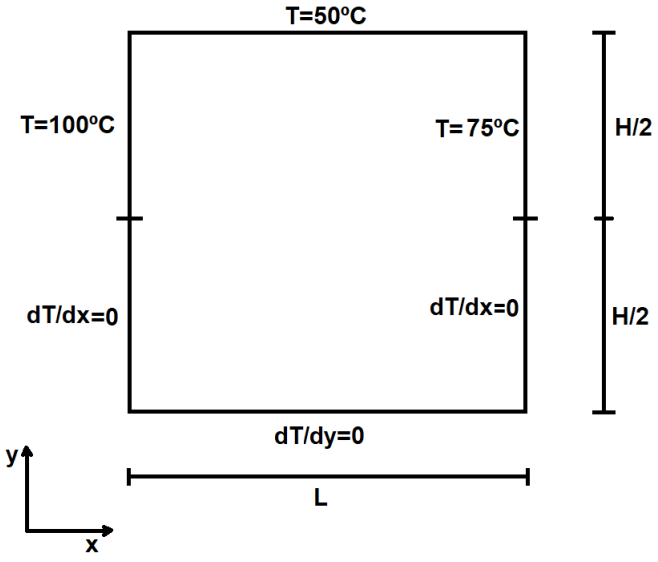
a) Utilizando novamente $N_i = N_j = 5$, obtenha a temperatura no ponto central. Observe que neste caso o ponto central corresponde exatamente ao vértice $T[N_i, N_j]$.

R: $T = 51.465°C$

3) A distribuição de temperatura em uma placa plana é dada pela equação de Laplace:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial T}{\partial y^2} = 0$$

Considere um sistema com as seguintes condições de contorno:



a) Aplique o método de Diferenças Finitas para discretizar a equação e as condições de contorno em uma malha com N_x elementos na direção x e N_y elementos na direção y;

b) Faça um esboço de um algoritmo que possa ser utilizado para obter $T(x, y)$ para este caso;

c) Implemente o algoritmo proposto no item b, considereando $L = H = 10$. Avalei diferentes valores de Δx e Δy até que a solução não seja significativamente influenciada por estes valores.

6 Método de Diferenças Finitas para EDP's Parabólicas

Como visto em aulas anteriores, as equações parabólicas possuem uma separação entre o domínio de influência e o domínio de dependência dos pontos. A principal categoria de equações parabólicas são as relacionadas com a equação do calor:

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

Sendo que esta equação governa a variação de um potencial u ao longo do tempo e da direção espacial x.

Para equações parabólicas, a separação entre os domínios de influência e de dependência possibilita o uso de métodos de marcha para avaliar a solução a partir de uma condição inicial até um ponto final que não precisa ser previamente definido, ou seja, pode-se construir o domínio discretizado conforme se avança na solução.

Para ilustrar a aplicação do método de diferenças finitas para a discretização de equações parabólicas, será considerado a equação do calor unidimensional por simplicidade:

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

Neste caso, assim como para a equação de Laplace vista anteriormente, o domínio de solução também possui duas dimensões, de modo que a variável discretizada será identificada como $u[i, m] = u_{i,m}$ onde i representa a direção x e m o tempo. A solução da EDP neste caso será da forma $u(x, t)$, enquanto que sua aproximação discreta será da forma $u_{i,m}$.

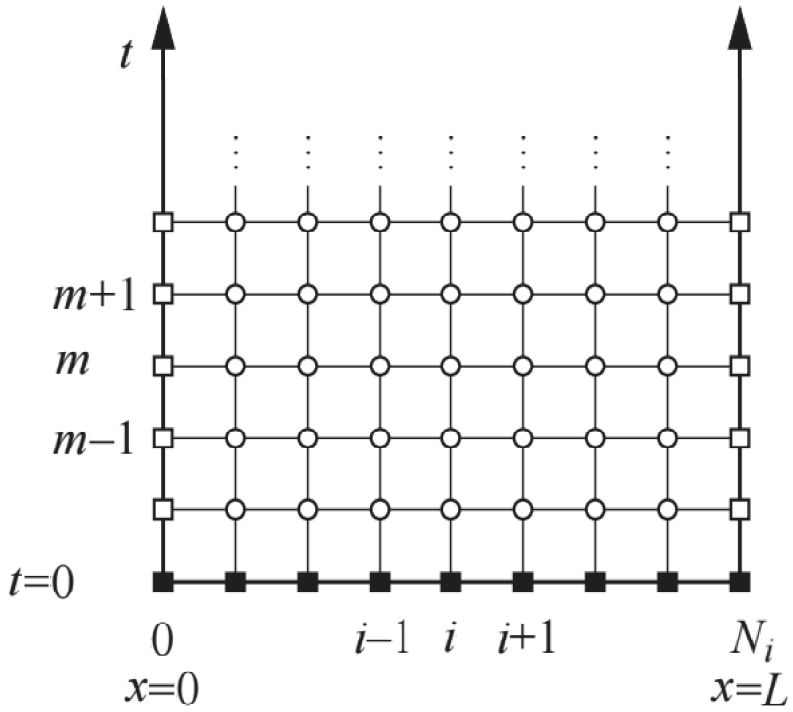
Para resolver esta equação, é necessário especificar duas condições de contorno em x e uma condição inicial no tempo. Por exemplo, considere que as extremidades $x = 0$ e $x = L$ sejam mantidas em uma condição tal que $u = 0$ para todo o tempo.

$$u(0, t) = 0 \qquad\qquad u(L, t) = 0$$

Além disso, considere que inicialmente o sistema esteja mantido em uma condição $u = 1$ ao longo de toda a direção x:

$$u(x, 0) = 1$$

Uma das principais diferenças em relação às equações elípticas é que no caso das parabólicas o domínio de solução é aberto em uma das direções, no exemplo anterior em relação ao tempo. Isto implica que não é necessário conhecer condições em um valor final de tempo para resolver a equação. Na figura a seguir é representado um exemplo de grid numérico associado a uma equação parabólica.



O grid neste caso possui N_i elementos na direção x, ou seja, esta direção já está totalmente definida. Na direção t, pode-se continuar avaliando o sistema conforme for necessário. Neste caso, é comum dizer que cada valor m corresponde a um ***nível de tempo*** distinto. Por exemplo, $u_{2,4}$ representa uma aproximação para a solução no ponto $i = 2$ no nível de tempo $m = 4$. Em termos do domínio contínuo, isto representa uma aproximação na posição $x = 2\Delta x$ e no tempo $t = 4\Delta t$.

Para aplicar o método de diferença finitas nesta equação, deve-se discretizar a derivada espacial, assim como realizado para a equação de Laplace, e a derivada temporal, como será apresentado a seguir

6.0.1 Discretização das Derivadas Temporal e Espacial

A existência de um caminho preferencial nas EDP's parabólicas facilita a sua análise numérica, pois para determinar a solução em um dado ponto $u_{i,m}$ basta considerar o seu domínio de dependência. Analisando em termos físicos, isto significa que não é preciso avaliar um nível de tempo $m+1$ (futuro) para determinar a solução em um nível de tempo m (presente). Assim, para avaliar a derivada primeira em uma posição i e em um nível m, deve-se utilizar um esquema para trás, de forma que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u[i,m] - u[i,m-1]}{\Delta t}$$

Para a discretização da derivada espacial em x, como comentado anteriormente, considera-se as demais variáveis independentes constantes. Neste caso, existem duas possibilidades para a discretização: manter o tempo constante no nível m ou no nível $m-1$. Cada uma das possibilidades possui suas vantagens e desvantagens. A avaliação no nível $m-1$ é conhecida como *formulação explícita*, e utilizando um esquema central resulta em:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u[i-1,m-1] - 2u[i,m-1] + u[i+1,m-1]}{\Delta x^2}$$

De forma equivalente, a formulação baseada no nível m é conhecida como *formulação implícita*, e resulta em:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u[i-1,m] - 2u[i,m] + u[i+1,m]}{\Delta x^2}$$

Pode-se observar que se a derivada segunda for substituída por uma função $f(t,y)$ qualquer, a formulação explícita é equivalente ao método de Euler explícito e a formulação implícita ao método de Euler implícito. A principal vantagem do método explícito é sua facilidade de implementação, pois pode-se partir da condição inicial definida no nível $m=0$ para avaliar de forma explícita todos os pontos no nível $m=1$ e continuar com este processo até atingir o tempo final desejado. Já a formulação implícita requer a resolução de um conjunto de equações algébricas para cada nível de tempo. No entanto, assim como para o método de Euler, a formulação explícita possui sérios problemas de estabilidade, sendo em muitos casos necessário o uso de passos de tempo muito pequenos, enquanto que a formulação implícita é automaticamente estável. A seguir serão apresentados mais detalhes sobre as duas possíveis formulações.

6.1 Método Explícito

Utilizando a formulação explícita, a equação do calor unidimensional pode ser expressa na forma discretizada como:

$$\frac{u[i,m]-u[i,m-1]}{\Delta t}=\alpha\left(\frac{u[i-1,m-1]-2u[i,m-1]+u[i+1,m-1]}{\Delta x^2}\right)$$

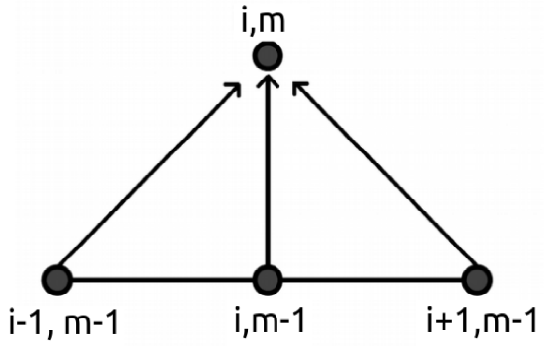
Como pode ser visto, esta equação possui somente um termo avaliado no nível de tempo m. Definindo o seguinte parâmetro adimensional, conhecido como *número de Fourier*:

$$Fo=\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2}$$

A equação anterior pode ser escrita como:

$$u[i,m]=u[i,m-1]+Fo(u[i-1,m-1]-2u[i,m-1]+u[i+1,m-1])$$

Assim, o termo $Fo(u[i-1,m-1]-2u[i,m-1]+u[i+1,m-1])$ pode ser visto como uma correção para o valor no ponto i devido a uma passagem de tempo Δt. Desta forma, os valores para um novo nível de tempo m podem ser obtido somente com base nos valores do passo anterior (já conhecidos), de forma que este procedimento é um método de marcha no tempo (não é necessário convergir no passo atual para avançar para o próximo). Este comportamento é ilustrado na figura a seguir:



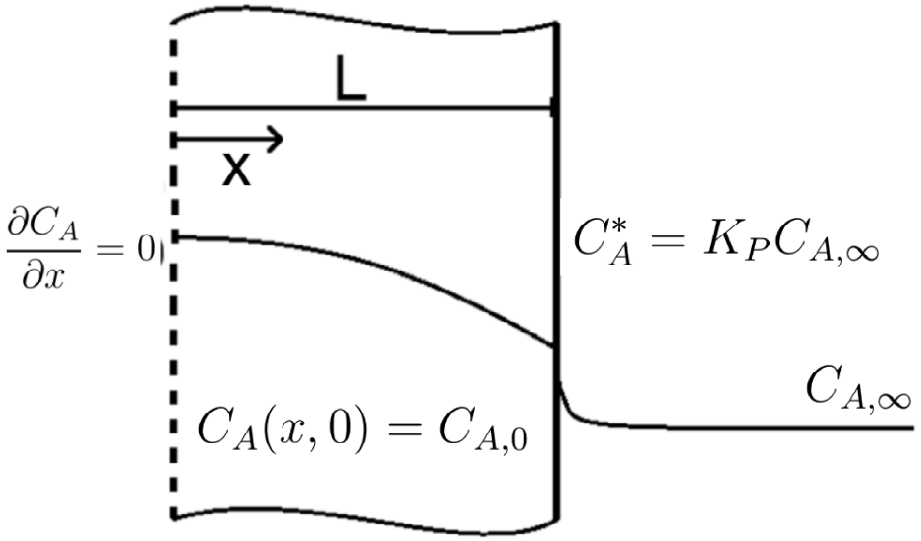
Conforme comentado anteriormente, o principal problema com a formulação explícita é a dificuldade em garantir a estabilidade. Para analisar a estabilidade desta formulação pode-se utilizar um método chamado de *método de von Neumann*. A obtenção do critério de estabilidade não será apresentada aqui por brevidade, porém pode-se mostrar que o método será estável somente se:

$$Fo=\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2}<\frac{1}{2}$$

ou seja, deve-se utilizar valores de Δx e Δt que garantam que esta condição seja satisfeita. Da mesma forma que os critérios utilizados para manter a estabilidade do método de Euler,

esta condição não garante que a precisão desejada será atingida, garante somente que os erros de arredondamento não serão amplificados ao longo da solução. De fato, a redução no valor de Δx irá aumentar o número de Fourier e como consequência prejudicar a estabilidade. Porém como a aproximação por diferenças finitas é baseada em um truncamento da série de Taylor, a redução em Δx reduz os erros de truncamento. A estratégia que costuma ser aplicada neste caso é determinar o Δx tal que os erros de truncamento sejam suficientemente baixos e com base neste valor determinar qual o passo de tempo que pode ser utilizado para garantir a estabilidade.

Para ilustrar a aplicação do método explícito, considere um caso onde deseja-se remover uma dada espécie química A do interior de um meio poroso até o meio externo, como por exemplo em um processo de extração sólido-líquido ou processo de sacagem, como ilustrado na figura a seguir:



Mediante alguns hipóteses simples, a equação que descreve a transferência de massa da espécie A é dada por:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}$$

onde D_A é o coeficiente de difusão e C_A a concentração da espécie A. A solução neste caso será da forma $C_A(x,t)$. Como condições de contorno, temos que:

$$C_A(L,t) = K_p C_{A,\infty} = C_A^*$$

$$\left.\frac{\partial C_A}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$$

Como condição inicial, será considerado que o sistema está com uma concentração constante:

$$C_A(x,0) = C_{A,0}$$

Para facilitar a resolução deste problema, pode-se definir uma variável adimensional da forma:

$$u = \frac{C_A - C_A^*}{C_{A,0} - C_A^*}$$

de forma que a equação governante, as condições de contorno e a condição inicial podem ser reescritas como:

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

$$u(L,t) = 0 \qquad \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=0} = 0 \qquad u(x,0) = 1$$

A discretização da equação governante através do método de diferenças finitas explícito resulta em:

$$u[i,m] = u[i,m-1] + Fo(u[i-1,m-1] - 2u[i,m-1] + u[i+1,m-1])$$

ou em notação compacta:

$$u_{i,m} = u_{i,m-1} + Fo(u_{i-1,m-1} - 2u_{i,m-1} + u_{i+1,m-1})$$

onde neste caso $Fo = D_A \Delta t / \Delta x^2$. Como a difusividade é uma propriedade física do sistema, este é um valor fixo e previamente conhecido. Assim, é necessário definir dois parâmetros, por exemplo Δx e Fo, de modo que Δt pode ser calculado.

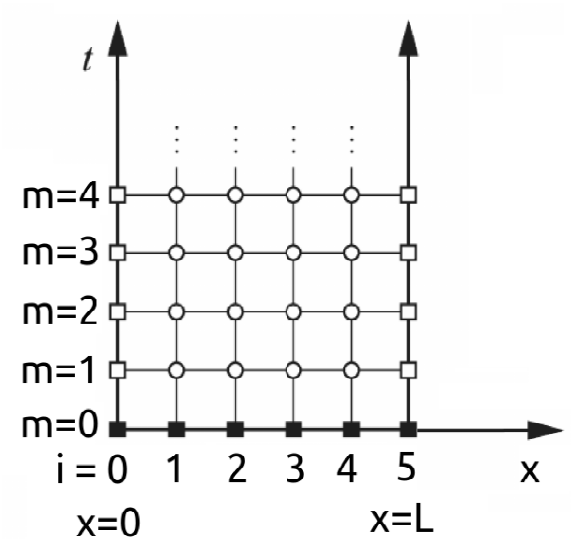
Por exemplo, considere um caso onde $L = 1\,mm$ e $\Delta x = 0.2$, de modo que $N_i = L/\Delta x = 5$. O valor de Δt deve ser pequeno o suficiente para garantir a estabilidade. O critério para estabilidade é $Fo < 0.5$, porém é recomendável utilizar um valor relativamente menor. Neste caso, será considerado que $Fo < 0.25$, de modo que o passo de tempo será:

$$\Delta t = \frac{Fo \Delta x^2}{D_A}$$

Por exemplo, pode-se considerar que um valor razoável para D_A é $0.01\,mm^2/s$, de modo que:

$$\Delta t = \frac{(0.25)(0.2)^2}{0.01} = 1\,s$$

Considerando que $N_i = 5$, o grid numérico será da forma como apresentado na figura seguir.



Para inicar o processo de aproximação da solução, pode-se primeiramente definir as condições de contorno e a condição inicial. Novamente, nos vértices do grid existe uma sobreposição de condições, pois as condições de contorno indicam que $u(0,t) = u(L,t) = 0$ para qualquer t e a condição inicial indica que $u(x,0) = 1$ para qualquer x. Neste caso será considerado que a condição inicial seja satisfeita nos vértices, de modo que para o nível de tempo $m = 0$ (condição inicial), temos que:

$$u_{0,0} = u_{1,0} = u_{2,0} = u_{3,0} = u_{4,0} = u_{5,0} = 1$$

Com base nestes valores, pode-se determinar o próximo nível de tempo, $m = 1$. Primeiramente, pode-se definir as condições de contorno. Na extremidade $x = L$, a condição de primeira espécie pode ser expressa na forma discreta como:

$$u(L,t) = 0 \qquad \rightarrow \qquad u_{5,m} = 0 \qquad m \geq 1$$

sendo esta condição válida para qualquer nível de tempo além do inicial. De forma semelhante, a condição de segunda espécie na fronteira $x = 0$ implica que:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=0} = 0 \qquad \rightarrow \qquad u_{0,m} = u_{1,m} \qquad m \geq 1$$

Assim, resta avaliar os pontos internos ($i = 1$ até $i = 4$). Por exemplo, para $i = 1$ temos que:

$$u_{1,1} = u_{1,0} + Fo(u_{0,0} - 2u_{1,0} + u_{2,0}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 1) = 1$$

De forma semelhante, para os demais pontos:

$$u_{2,1} = u_{2,0} + Fo(u_{1,0} - 2u_{2,0} + u_{3,0}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 1) = 1$$

$$u_{3,1} = u_{3,0} + Fo(u_{2,0} - 2u_{3,0} + u_{4,0}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 1) = 1$$

$$u_{4,1} = u_{4,0} + Fo(u_{3,0} - 2u_{4,0} + u_{5,0}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 1) = 1$$

Como pode ser visto, somente o ponto associado a condição de contorno em $x = L$ foi alterado. Resumindo:

$$u_{0,1} = u_{1,1} = u_{2,1} = u_{3,1} = u_{4,1} = 1 \qquad u_{5,1} = 0$$

Esta característica é comum dos métodos de diferenças finitas explícito. No próximo nível de tempo, $m = 2$, somente os valores em $i = 5$ e $i = 4$ serão diferentes dos valores iniciais, ou seja, para cada nível de tempo somente um ponto adicional é afetado pela condição de contorno. Neste caso, os valores nestes pontos serão:

$$u_{5,2} = 0$$

$$u_{4,2} = u_{4,1} + Fo(u_{3,1} - 2u_{4,1} + u_{5,1}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 0) = 0.75$$

De modo que:

$$u_{0,2} = u_{1,2} = u_{2,2} = u_{3,2} = 1 \qquad u_{4,2} = 0.75 \qquad u_{5,1} = 0$$

De forma semelhante, para o próximo nível de tempo somente os valores associados a $i = 3$, $i = 4$ e $i = 5$ serão diferentes da condição inicial:

$$u_{5,3} = 0$$

$$u_{4,3} = u_{4,2} + Fo(u_{3,2} - 2u_{4,2} + u_{5,2}) = 0.75 + 0.25(1 - 2(0.75) + 0) = 0.625$$

$$u_{3,3} = u_{3,2} + Fo(u_{2,2} - 2u_{3,2} + u_{4,2}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 0.75) = 0.9375$$

Assim:

$$u_{0,3} = u_{1,3} = u_{2,3} = 1 \qquad u_{3,3} = 0.9375 \qquad u_{4,3} = 0.625 \qquad u_{5,1} = 0$$

Para $m = 4$, obtém-se:

$$u_{5,4} = 0$$

$$u_{4,4} = u_{4,3} + Fo(u_{3,3} - 2u_{4,3} + u_{5,3}) = 0.625 + 0.25(0.9375 - 2(0.625) + 0) = 0.54687$$

$$u_{3,4} = u_{3,3} + Fo(u_{2,3} - 2u_{3,3} + u_{4,3}) = 0.9375 + 0.25(1 - 2(0.9375) + 0.625) = 0.875$$

$$u_{2,4} = u_{2,3} + Fo(u_{1,3} - 2u_{2,3} + u_{3,3}) = 1 + 0.25(1 - 2 + 0.9375) = 0.9844$$

Assim:

$$u_{0,4} = u_{1,4} = 1 \qquad u_{2,4} = 0.9844 \qquad u_{3,4} = 0.875 \qquad u_{4,4} = 0.54687 \qquad u_{5,1} = 0$$

Pode-se continuar com este procedimento até atingir o tempo final desejado.

6.2 Método Implícito

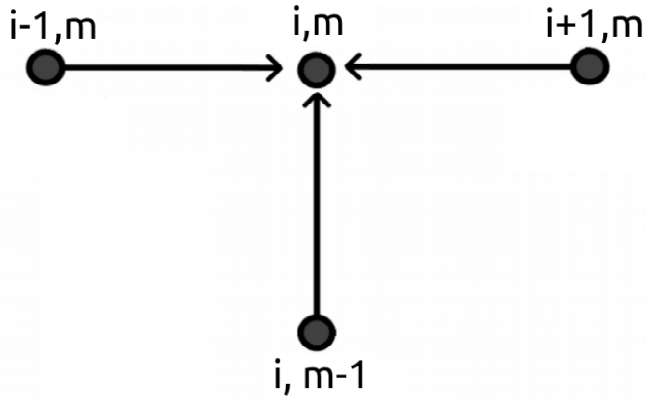
Na formulação implícita, a derivada espacial é avaliada no mesmo nível de tempo onde o ponto está sendo avaliado. Com isso, a equação do calor unidimensional é discretizada como:

$$\frac{u[i,m]-u[i,m-1]}{\Delta t}=\alpha\left(\frac{u[i-1,m]-2u[i,m]+u[i+1,m]}{\Delta x^2}\right)$$

Considerando novamente a definição do número de Fourier, esta expressão pode ser escrita como:

$$u[i,m]=u[i,m-1]+Fo(u[i-1,m]-2u[i,m]+u[i+1,m])$$

Assim, o valor no ponto irá depender do valor no mesmo ponto e no tempo anterior e dos valores vizinhos no mesmo passo de tempo, como representado na figura a seguir. A formulação implícita é automaticamente estável para qualquer valor de Fo.



Para ilustrar a aplicação do método implícito, será considerado o mesmo exemplo utilizado anteriormente para o método explícito, mantendo um grid com $N_i = 5$ elementos. Neste caso pode-se utilizar um valor de Fo maior, já que não existe problemas de estabilidade. No entanto, será considerado o mesmo valor $Fo = 0.25$ para possibilitar uma comparação direta. Relembrando, a equação governante e as condições associadas são:

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

$$u(L,t)=0 \qquad \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=0}=0 \qquad u(x,0)=1$$

A equação discretizada é dada por:

$$u_{i,m}=u_{i,m-1}+Fo(u_{i-1,m}-2u_{i,m}+u_{i+1,m})=u_{i,m-1}+Fo(u_{i-1,m}+u_{i+1,m})-2Fou_{i,m}$$

Esta relação também pode ser expressa como:

$$(2Fo+1)u_{i,m} - u_{i,m-1} - Fou_{i-1,m} - Fou_{i+1,m} = 0$$

Novamente, para o nível de tempo inicial, temos que a condição inicial resulta em:

$$u_{0,0} = u_{1,0} = u_{2,0} = u_{3,0} = u_{4,0} = u_{5,0} = 1$$

Para o próximo nível de tempo, as condições de contorno resultam em:

$$u_{5,1} = 0 \qquad u_{0,1} = u_{1,1}$$

Para os pontos internos, neste caso será obtido o seguinte sistema de equações:

$$(2Fo+1)u_{1,1} - u_{1,0} - Fou_{0,1} - Fou_{2,1} = 0 \quad \rightarrow \quad (1.25)u_{1,1} - 0.25u_{2,1} = 1$$

$$(2Fo+1)u_{2,1} - u_{2,0} - Fou_{1,1} - Fou_{3,1} = 0 \quad \rightarrow \quad (1.5)u_{2,1} - 0.25u_{1,1} - 0.25u_{3,1} = 1$$

$$(2Fo+1)u_{3,1} - u_{3,0} - Fou_{2,1} - Fou_{4,1} = 0 \quad \rightarrow \quad (1.5)u_{3,1} - 0.25u_{2,1} - 0.25u_{4,1} = 1$$

$$(2Fo+1)u_{4,1} - u_{4,0} - Fou_{3,1} - Fou_{5,1} = 0 \quad \rightarrow \quad (1.5)u_{4,1} - 0.25u_{3,1} = 1$$

Este sistema linear pode ser expresso como:

$$\begin{bmatrix} 1.25 & -0.25 & 0 & 0 \\ -0.25 & 1.5 & -0.25 & 0 \\ 0 & -0.25 & 1.5 & -0.25 \\ 0 & 0 & -0.25 & 1.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{3,1} \\ u_{4,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Como pode ser visto, neste caso se obtém um sistema tridiagonal que pode ser resolvido, por exemplo, com o uso do algoritmo de Thomas. Resolvendo este sistema, obtém-se em conjunto com as condições de contorno:

$$u_{0,1} = u_{1,1} = 0.999 \qquad u_{2,1} = 0.9949 \qquad u_{3,1} = 0.9706 \qquad u_{4,1} = 0.8284 \qquad u_{5,1} = 0$$

Neste caso, pode-se observar que a condição de contorno em $x = L$ afeta todos os pontos do grid. Este resultado é mais coerente com o comportamento físico do sistema.

Avaliando para o próximo nível de tempo ($m = 2$):

$$(2Fo+1)u_{1,2} - u_{1,1} - Fou_{0,2} - Fou_{2,2} = 0 \quad \rightarrow \quad 1.25u_{1,2} - 0.25u_{2,2} = 0.999$$

$$(2Fo+1)u_{2,2} - u_{2,1} - Fou_{1,2} - Fou_{3,2} = 0 \quad \rightarrow \quad 1.5u_{2,2} - 0.25u_{1,2} - 0.25u_{3,2} = 0.9949$$

$$(2Fo+1)u_{3,2} - u_{3,1} - Fou_{2,2} - Fou_{4,2} = 0 \quad \rightarrow \quad 0.5u_{3,2} - 0.25u_{2,2} - 0.25u_{4,2} = 0.9706$$

$$(2Fo+1)u_{4,2} - u_{4,1} - Fou_{3,2} - Fou_{5,2} = 0 \quad \rightarrow \quad 1.5u_{4,2} - 0.25u_{3,2} = 0.8284$$

Na forma matricial, este sistema resulta em:

$$\begin{bmatrix} 1.25 & -0.25 & 0 & 0 \\ -0.25 & 1.5 & -0.25 & 0 \\ 0 & -0.25 & 1.5 & -0.25 \\ 0 & 0 & -0.25 & 1.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,2} \\ u_{2,2} \\ u_{3,2} \\ u_{4,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.999 \\ 0.9949 \\ 0.9706 \\ 0.8284 \end{bmatrix}$$

Como pode ser visto, a matriz dos coeficientes não é alterada, havendo uma mudança somente na parte não-homogênea. Resolvendo o sistema, obtém-se:

$$u_{0,2} = u_{1,2} = 0.9968 \qquad u_{2,2} = 0.9842 \qquad u_{3,2} = 0.929 \qquad u_{4,2} = 0.7071 \qquad u_{5,2} = 0$$

Fazendo o mesmo procedimento para o próximo nível de tempo ($m = 3$), será obtido o sistema:

$$\begin{bmatrix} 1.25 & -0.25 & 0 & 0 \\ -0.25 & 1.5 & -0.25 & 0 \\ 0 & -0.25 & 1.5 & -0.25 \\ 0 & 0 & -0.25 & 1.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,3} \\ u_{2,3} \\ u_{3,3} \\ u_{4,3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9968 \\ 0.9842 \\ 0.929 \\ 0.7071 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema:

$$u_{0,3} = u_{1,3} = 0.9912 \qquad u_{2,3} = 0.9686 \qquad u_{3,3} = 0.8839 \qquad u_{4,3} = 0.6187 \qquad u_{5,3} = 0$$

Finalmente, para $m = 4$:

$$\begin{bmatrix} 1.25 & -0.25 & 0 & 0 \\ -0.25 & 1.5 & -0.25 & 0 \\ 0 & -0.25 & 1.5 & -0.25 \\ 0 & 0 & -0.25 & 1.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,4} \\ u_{2,4} \\ u_{3,4} \\ u_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9912 \\ 0.9686 \\ 0.8839 \\ 0.6187 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema:

$$u_{0,4} = u_{1,4} = 0.9829 \qquad u_{2,4} = 0.9495 \qquad u_{3,4} = 0.8396 \qquad u_{4,4} = 0.5524 \qquad u_{5,4} = 0$$

Comparando com os valores obtidos com o método explícito para o mesmo nível de tempo:

$$u_{0,4} = u_{1,4} = 1 \qquad u_{2,4} = 0.9844 \qquad u_{3,4} = 0.875 \qquad u_{4,4} = 0.54687 \qquad u_{5,1} = 0$$

Como visto, os resultados obtidos com os dois métodos estão bem próximos, com a diferença que o método explícito tende a provocar uma variação mais rápida nos pontos próximos a condição de contorno em $x = L$ e uma variação mais lenta nos pontos mais internos.

De forma geral, o sistema obtido para cada nível m será da forma:

$$\mathbf{A}\vec{u}_m = \vec{u}_{m-1}$$

onde

$$\vec{u}_m = (u_{1,m}, u_{2,m}, u_{3,m}, u_{4,m})$$

Lista de Exercícios 12 - Diferenças Finitas para EDP's Parabólicas

1) ***(Equação do Calor)*** Uma das equações mais importantes para a engenharia é a equação do calor, definida de forma geral como:

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

onde α é uma constante representando o coeficiente de difusão. Esta equação é utilizada para descrever processos transientes unidirecionais (não somente de calor). Considere as seguintes condições de contorno:

$$u(0,t) = 0 \qquad\qquad u(1,t) = 0$$

e a seguinte condição inicial:

$$u(x,0) = 1$$

a) Considerando uma malha com $\Delta x = 0.2$ e $\alpha = 0.5$, determine o passo de tempo máximo que pode ser utilizado para garantir a estabilidade da solução com o uso de uma formulação explícita;

R: $\Delta t \leq 0.04$

b) Utilizando o método explícito, determine o valor de u em $x = 0.6$ e $x = 0.8$ para os três primeiros passos de tempo, considerando o valor de Δt obtido no item anterior;

R: $t = \Delta t : u(0.6) = 1, u(0.8) = 0.5$; $t = 2\Delta t : u(0.6) = 0.75, u(0.8) = 0.5$; $t = 3\Delta t : u(0.6) = 0.625, u(0.8) = 0.375$

c) Determine u em $x = 0.6$ e $x = 0.8$ para os três primeiros passos de tempo utilizando uma formulação implícita. Considere o mesmo passo de tempo adotado no item b.

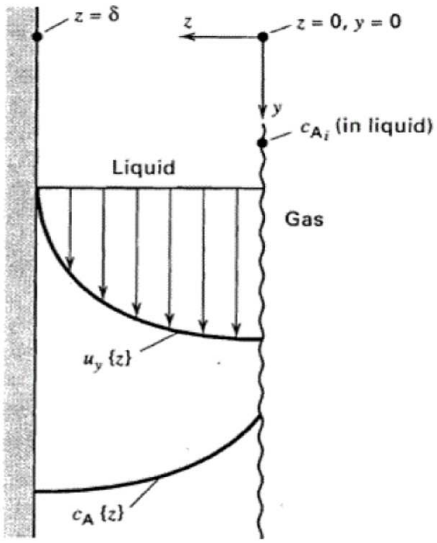
R: $t = \Delta t : u(0.6) = 0.909, u(0.8) = 0.727$; $t = 2\Delta t : u(0.6) = 0.7934, u(0.8) = 0.562$; $t = 3\Delta t : u(0.6) = 0.679, u(0.8) = 0.451$

2) ***(Transferência de Massa em um Filme Descendente)*** Muitos processos de interesse na engenharia química envolvem o transporte através de filmes líquidos que se formam sobre superfícies verticais. Considere, por exemplo, um caso onde uma espécie química A é absorvida pelo meio líquido, conforme ilustrado na figura a seguir.

A variação na concentração da espécie A ao longo de y e z é dada por:

$$u_y(z)\frac{\partial C_A}{\partial y} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}$$

Mesmo não envolvendo uma derivada temporal, esta equação é uma EDP parabólica, pois existe um caminho característico associado à direção y (a informação viaja de cima para baixo).



Através da aplicação das equações de Navier-Stokes, pode-se mostrar que no regime laminar o perfil de velocidade é dado por:

$$u_y(z) = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu}\left(1 - \frac{z^2}{\delta^2}\right)$$

Como as propriedades físicas e a espessura do filme δ são constantes, pode-se ainda expressar o perfil como:

$$u_y(z) = k_1\left(1 - \frac{z^2}{\delta^2}\right)$$

Como condições de contorno, pode-se considerar que em $y = 0$ o líquido está isento do composto A, de modo que:

$$C_A(0, z) = 0$$

Na interface com o gás, pode-se assumir uma relação de equilíbrio:

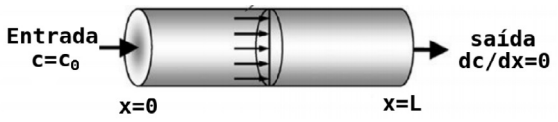
$$C_A(y, 0) = C_{Ae}$$

Além disso, pode-se também considerar que a parede é impermeável, resultando em uma condição de derivada nula em relação a z:

$$\frac{\partial C_A}{\partial z}(y, \delta) = 0$$

Com base nestas informações, utilize o método de diferenças finitas com formulação explícita para discretizar a equação para C_A, ou seja, obtenha as equações algébricas que descrevem a concentração ao longo do sistema.

3) Os reatores do tipo PFR (*plug flow reactor*) representam um modelo de reator ideal muito utilizado para representar reatores tubulares, onde a reação ocorre conforme a mistura escoa através do reator, como representado na figura a seguir.



Através de algumas considerações, pode-se assumir que a concentração das espécies varia somente ao longo do tempo t e do comprimento x do reator, de modo que para uma reação do tipo $A \rightarrow B$ a concentração c do reagente pode ser obtida através da seguinte equação:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U\frac{\partial c}{\partial x} - kc$$

onde D é a difusividade mássica da espécie no meio, U é a velocidade média da mistura reativa e k a velocidade de reação. Como condições de contorno para este sistema, pode-se considerar que a concentração na entrada ($x = 0$) é conhecida e que a reação ocorre até a mistura atingir a saída ($x = L$), de modo que:

$$c(0,t) = c_0 \qquad \left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=L} = 0$$

Como condição inicial, pode-se considerar que inicialmente o reator estava isento do reagente ($c(x,0) = 0$. Considere os seguintes valores para as constantes: $D = 10^{-4}\, m^2/s$, $U = 0.01\, m/s$, $k = 0.5\, s^{-1}$, $c_0 = 100\, mol/m^3$ e $L = 0.1\, m$.

a) Utilizando o método de diferenças finitas com formulação explícita, discretize a EDP e obtenha o conjunto de equações algébricas que descreve a variação na concentração ao longo do espaço e do tempo;

b) Faça um esboço de um algoritmo para resolver o sistema de equações obtidos na etapa anterior;

c) Implemente o sistema de equações no Scilab e obtenha a concentração ao longo do reator até um tempo final de 60 s. Atente para os critérios de estabilidade $Fo = D\Delta t/\Delta x^2 \leq 0.5$ e $Co = U\Delta t/\Delta x \leq 1$;

d) Avalie diferentes valores de Δx e Δt para garantir que o erro associado à discretização seja suficientemente pequeno.