

MAP 2320 - Métodos Numéricos em EDP's

Equações Parabólicas

Marco Alexandre Claudino*
IME/USP

1 A equação do calor

Vamos iniciar o estudo de Equações Diferenciais Parabólicas por meio da conhecida **equação do calor**:

$$u_t = \alpha u_{xx} \quad (1)$$

para $(x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty)$ e $\alpha > 0$, com condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (2)$$

2 Métodos Numéricos

Dados M e N dois números naturais, $[0, L]$ o intervalo no espaço e $[0, T]$ o intervalo no tempo, considere os espaçamentos uniformes dados por $\Delta t = \frac{T}{N}$ e $\Delta x = \frac{L}{M}$. Denotamos por $u_m^n \approx u(x_m, t_n)$ a aproximação da função u e no ponto $t_n = n\Delta t$, $x_m = m\Delta x$ para $n = 0, 1, \dots, N$ e $m = 1, \dots, M - 1$. Considerando o problema na forma geral (1) e com condição unicial $u(0, x) = u_0(x)$ é necessário que sejam fornecidas condições de contorno para os trechos $(0, t)$ e (L, t) , com $t \in [0, T]$. Temos três tipos de condições possíveis:

- 1) **Condições de Dirichlet:** São fornecidas as soluções do problema.
- 2) **Condições de Neumann:** São fornecidas as derivadas em relação a x .
- 3) **Condições de Robin:** São fornecidas ponderações entre a solução exata e a derivada em relação a x

Para facilitar o estudo, trabalharemos apenas com condições de Dirichlet no contorno. Logo, serão dadas também as condições

$$\begin{cases} u(0, t) = g_1(t) \\ u(L, t) = g_2(t) \end{cases}$$

*claudino@ime.usp.br

2.1 Método Explícito

Para a construção do método explícito utilizamos a expansão em Série de Taylor ao redor do ponto $u(x_m, t_n)$, de modo que

$$\frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_n)}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{u(x_{m-1}, t_n) - 2u(x_m, t_n) + u(x_{m+1}, t_n)}{\Delta x^2} \right) + \tau_m^n$$

onde $\tau_m^n = \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4 - \Delta t^2)$ é o erro local de discretização cometido no ponto $u(x_m, t_n)$.

Sendo $\lambda = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ e ignorando os erros locais de discretização podemos reorganizar os termos e obter o seguinte esquema:

$$\begin{cases} u_m^0 = u_0(x_i) \\ u_0^n = g_1(t_n) \\ u_M^n = g_2(t_n) \\ u_m^{n+1} = \lambda u_{m-1}^n + (1 - 2\lambda)u_m^n + \lambda u_{m+1}^n \end{cases} \quad (3)$$

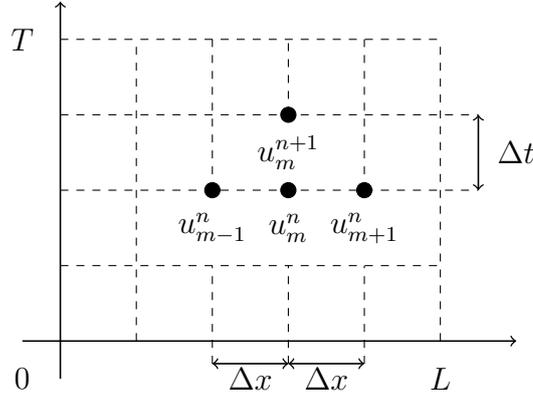


Figura 1: Esquema numérico explícito para a equação do calor.

A consistência numérica deste método é direta, pois sua construção segue da expansão em Série de Taylor ao redor do ponto u_m^n . Vamos então analisar a convergência deste método numérico. Inicialmente, definimos o erro cometido em cada ponto da malha como

$$e_m^n = u(x_m, t_n) - u_m^n$$

de forma que, substituindo na expansão de Taylor, temos

$$e_m^{n+1} - e_m^n = \lambda(e_{m-1}^n - 2e_m^n + e_{m+1}^n) + \Delta t \tau_m^n$$

onde τ_m^n é o erro de discretização local cometido neste ponto. Reorganizando os termos e utilizando o módulo, temos que

$$|e_m^{n+1}| \leq \lambda|e_{m-1}^n| + |1 - 2\lambda||e_m^n| + \lambda|e_{m+1}^n| + \Delta t|\tau_m^n|$$

Definimos $\|e^n\| = \max_m |e_m^n|$ e **vamos considerar que $\lambda \leq \frac{1}{2}$** . Desta forma:

$$|e_m^{n+1}| \leq \lambda\|e^n\| + (1 - 2\lambda)\|e^n\| + \lambda\|e^n\| + \Delta t\|\tau^n\| = \|e^n\| + \Delta t\|\tau^n\|$$

Logo

$$\|e^{n+1}\| \leq \|e^n\| + \Delta t\|\tau\|, \quad \forall n$$

e, por indução

$$\|e^n\| \leq \underbrace{n\Delta t}_{\leq T} \|\tau^n\| + \underbrace{\|e^0\|}_{=0} \Rightarrow \|e^n\| \leq T\|\tau\|$$

Como $\|\tau\| \rightarrow 0$ quando $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$, podemos concluir que $\lambda \leq \frac{1}{2}$ (ou seja $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$) é uma condição **suficiente** para a convergência do método.

Vamos agora mostrar que esta condição também é necessária utilizando o chamado **Método das linhas**. Seja $U(t) = (u_1, u_2, \dots, u_{M-1})(t)$ o vetor contendo os valores das aproximações num dado instante de tempo t . Podemos escrever a equação (1) discretizando apenas o termo espacial, de modo a obter o sistema $U_t = AU$, onde A é a matriz dada por

$$A = \frac{\alpha}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}_{(M-1) \times (M-1)}$$

Como A é uma matriz simétrica, sabemos que A é diagonalizável e existe uma matriz diagonal D e uma matriz ortonormal P tais que $A = PDP^{-1}$. Portanto

$$U_t = AU \Rightarrow U_t = PDP^{-1}U \Rightarrow P^{-1}U_t = DP^{-1}U$$

Considerando $V = P^{-1}U$, temos um sistema de EDOs desacopladas da forma $V_t = DV$, isto é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \omega_{m-1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_{m-1} \end{pmatrix} \quad (4)$$

Para $k = 1, 2, \dots, M-1$, temos que os autovetores e autovalores da matriz A são dados por:

$$(\psi_k)_m = \sin(k\pi x_m) \quad (5)$$

e

$$\omega_k = \frac{2\alpha}{\Delta x^2} (\cos(k\pi\Delta x) - 1) \quad (6)$$

respectivamente. Para testarmos que estes são realmente os autovalores e autovetores da matriz A, vamos avaliar a m-ésima entrada do vetor $A\psi_k$:

$$(A\psi_k)_m = \frac{\alpha}{\Delta x^2} (\sin(k\pi(x_m - \Delta x)) - 2\sin(k\pi x_m) + \sin(k\pi(x_m + \Delta x))) \quad (7)$$

Utilizando as relações trigonométricas

$$\begin{aligned} \sin(a+b) + \sin(a-b) &= \sin(a)\cos(b) + \sin(b)\cos(a) + \sin(a)\cos(b) - \sin(b)\cos(a) \\ &= 2\sin(a)\cos(b) \end{aligned}$$

na equação (7), temos que

$$\begin{aligned} (A\psi_k)_m &= \frac{\alpha}{\Delta x^2} (2\sin(k\pi x_m)\cos(k\pi\Delta x) - 2\sin(k\pi x_m)) \\ &= \underbrace{\left[\frac{2\alpha}{\Delta x^2} (\cos(k\pi\Delta x) - 1) \right]}_{\omega_k} \underbrace{\sin(k\pi x_m)}_{(\psi_k)_m} \end{aligned}$$

concluindo que $(A\psi_k)_m = \omega_k(\psi_k)_m$. Observe que para todos os valores de k temos que

$$|\omega_k| = \left| \frac{2\alpha}{\Delta x^2} (\cos(k\pi\Delta x) - 1) \right| \leq \frac{2\alpha}{\Delta x^2} \underbrace{|\cos(k\pi\Delta x) - 1|}_{\leq 2} \leq \frac{4\alpha}{\Delta x^2}$$

Utilizando o método de Euler podemos resolver o sistema (4) e escrever $U = PV$. Do estudo dos métodos numéricos para EDOs, sabemos que a região de estabilidade do método de Euler é dada por $|\omega|\Delta t \leq 2$. Portanto, para que o método funcione é **necessário que** $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$. Com isto, provamos o seguinte teorema:

Teorema 2.1 *O método explícito para a equação do calor (1) é convergente se, e somente se, o esquema numérico satisfaz a condição de que $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$.*

Observe que para preservar a convergência do método numérico a cada iteração do refinamento espacial estamos abrindo o cone de dependência da solução. Assim, quando $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ com $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$ temos que **a solução numérica depende de toda a informação contida no domínio discreto do problema.**

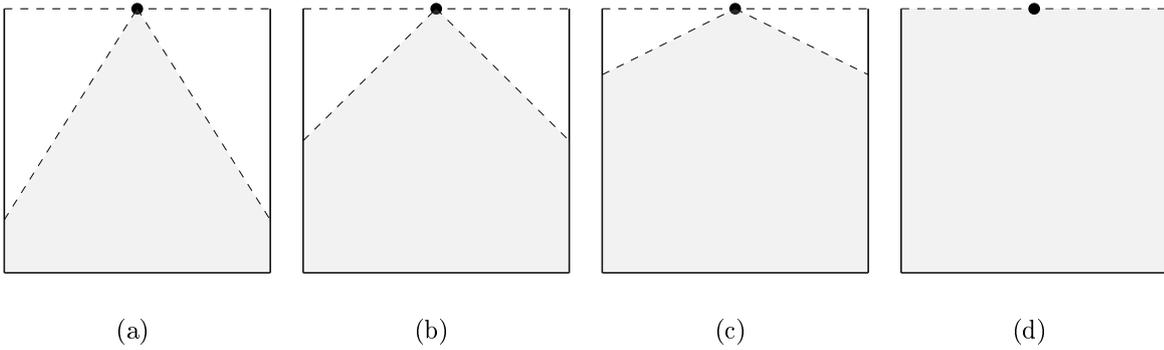


Figura 2: As áreas hachuradas representam os domínios de dependência das aproximações nas figuras (a),(b) e (c) e da solução exata na figura (d). Observe que quando $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ o domínio de dependência discreto tende ao domínio de dependência contínuo.

Isto ocorre pelo fato de que as equações parabólicas possuem velocidade de propagação infinita, isto é, qualquer pequena alteração nos dados iniciais do problema influencia o valor de todos os pontos do domínio. Desta forma, a utilização de métodos explícitos requer o uso de malhas bastante refinadas para a obtenção das aproximações do problema.

A implementação computacional pode ser realizada com o uso de dois vetores, de tamanho $(M + 1)$ contendo os valores das aproximações em instantes consecutivos. Assim, para obtermos a aproximação no instante $(n + 1)$ utilizamos os valores das aproximações no instante n . O processo é repetido até que n seja o instante final do tempo, ou seja $n = N$. Esta sequência de passos é apresentada pelo pseudocódigo contido em (1). É importante observar que a quantidade de impressões realizadas no código pode fazer com que o tempo computacional gasto seja bastante grande. Desta forma, é conveniente a implementação de alguma estratégia de controle para quais instantes serão impressas as aproximações obtidas pelo algoritmo.

Algorithm 1: Método Explícito para a Equação do calor (1).

Defina Δx e Δt tal que $\lambda \leq \frac{1}{2}$;
para $m = 1$ até $M - 1$ **faça**
 $uold[m] = u_0(x_m)$;
fim para
para $n = 1$ até N **faça**
 $u[0] = g_1(t_n)$;
 $u[M] = g_2(t_n)$;
 para $m = 1$ até $M - 1$ **faça**
 $u[m] = \lambda uold[m - 1] + (1 - 2\lambda)uold[m] + \lambda uold[m + 1]$;
 fim para
 Imprima em arquivo os valores de u ;
 Atribua os valores de u em $uold$;
fim para

2.2 Métodos Implícitos

Como observamos anteriormente, o método explícito apresenta uma restrição muito grande na malha a ser utilizada para a construção das aproximações. Desta forma, torna-se necessária a aplicação dos chamados **métodos implícitos** onde a obtenção das aproximações num determinado instante de tempo é feita através da solução de um sistema linear. Vamos apresentar e analisar alguns destes métodos:

- **Euler Implícito:** Consiste na expansão de Taylor sobre o ponto $u(x_m, t_{n+1})$ utilizando a diferença retrógrada no tempo:

$$\frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_n)}{\Delta t} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} (u(x_{m-1}, t_{n+1}) - 2u(x_m, t_{n+1}) + u(x_{m+1}, t_{n+1})) + \tau_m^n$$

Ignorando o erro de discretização local podemos reescrever o esquema acima como um sistema:

$$(I + \Delta t A)U^{n+1} = U^n$$

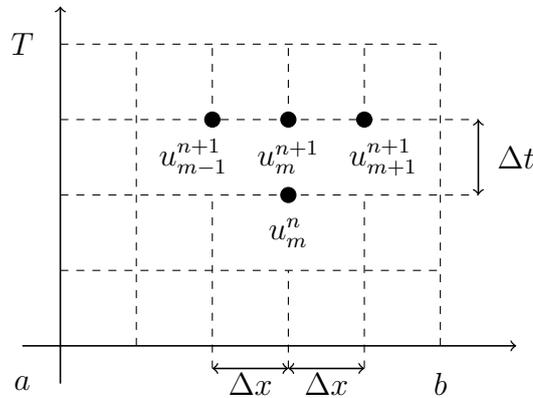


Figura 3: Esquema Euler implícito para a equação do calor.

- **Crank-Nicholson:** Neste esquema utilizamos a aproximação média de u_{xx} obtida nos instantes n e $n + 1$:

$$\frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_n)}{\Delta t} = \frac{\alpha}{2\Delta x^2} [(u(x_{m-1}, t_{n+1}) - 2u(x_m, t_{n+1}) + u(x_{m+1}, t_{n+1})) + (u(x_{m-1}, t_n) - 2u(x_m, t_n) + u(x_{m+1}, t_n))] + \tau_m^n$$

Ignorando os erros de discretização e reorganizando os termos, temos que as aproximações são obtidas através da resolução do sistema

$$\left(I + \frac{\Delta t}{2}A\right)U^{n+1} = \left(I - \frac{\Delta t}{2}A\right)U^n$$

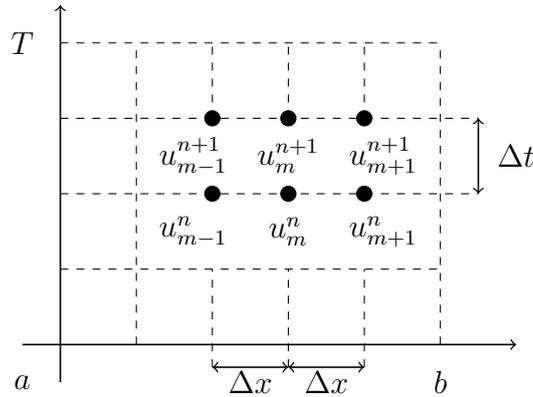


Figura 4: Esquema de Crank-Nicholson para a equação do calor.

É possível mostrar ¹ que ambos os métodos são incondicionalmente estáveis. No entanto, vale ressaltar que a qualidade das aproximações dependem diretamente dos valores de Δx e Δt . Além disso, ambos os métodos requerem a resolução de um sistema linear tridiagonal a cada passo no tempo, o que torna o método computacionalmente mais caro.

Para a implementação computacional de ambos os métodos, é necessária a resolução de um sistema simétrico tridiagonal a cada instante de tempo, da forma

$$\begin{bmatrix} d_1 & a_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & d_2 & a_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & d_3 & a_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{(M-3)} & d_{(M-2)} & a_{(M-2)} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{(M-2)} & d_{(M-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{(M-2)} \\ u_{(M-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_{(M-2)} \\ b_{(M-1)} \end{bmatrix} \quad (8)$$

onde temos que para o método de Euler implícito

$$\begin{cases} d[i] = 1 - 2\lambda, & i = 1, \dots, M - 1 \\ a[i] = \lambda, & i = 1, \dots, M - 2 \\ b[1] = uold[1] - \lambda u[0] \\ b[i] = uold[i], & i = 2, \dots, M - 2 \\ b[M - 1] = uold[M - 1] - \lambda u[M] \end{cases} \quad (9)$$

¹A análise é feita pelo método de Von Neumann ([2]-Cap.2).

e para o método de Crank-Nicholson

$$\begin{cases} d[i] = 1 - \lambda, & i = 1, \dots, M - 1 \\ a[i] = \frac{\lambda}{2}, & i = 1, \dots, M - 2 \\ b[1] = -\frac{\lambda}{2}uold[0] + (1 + \lambda)uold[1] - \frac{\lambda}{2}uold[2] - \frac{\lambda}{2}u[0] \\ b[i] = -\frac{\lambda}{2}uold[i - 1] + (1 + \lambda)uold[i] - \frac{\lambda}{2}uold[i + 1], & i = 2, \dots, M - 2 \\ b[M - 1] = -\frac{\lambda}{2}uold[M - 2] + (1 + \lambda)uold[M - 1] - \frac{\lambda}{2}uold[M] - \frac{\lambda}{2}u[M] \end{cases} \quad (10)$$

Observe que os valores de $u[0]$ e $u[M]$ são conhecidos e por isso podem ser colocados do lado direito da equação. Isto justifica o fato das componentes 1 e $M - 1$ do lado direito serem diferentes das demais. Com esta notação, a obtenção das aproximações pelo método implícito consiste em trocar o laço espacial do algoritmo (1) pela função que resolve o sistema tridiagonal. O pseudocódigo (2) apresenta a resolução do sistema associado ao problema.

Algorithm 2: Resolução de sistema tridiagonal.

Entrada: λ , \mathbf{u} (vetor onde será armazenada a solução).

Atribua os valores dos vetores \mathbf{d} , \mathbf{a} e \mathbf{b} de acordo com o método utilizado;

para $i = 2$ até $M - 1$ **faça**

$cte = a[i - 1]/d[i - 1]$;

$d[i] = d[i] - (cte)a[i - 1]$;

$b[i] = b[i] - (cte)b[i - 1]$;

fim para

$u[M - 1] = b[M - 1]/d[M - 1]$;

para $i = (M - 2)$ até 1 **faça**

$u[i] = (b[i] - a[i]u[i + 1])/d[i]$;

fim para

Saída: \mathbf{u} (solução do sistema).

É possível mostrar que as matrizes associadas aos métodos apresentados são inversíveis², de forma que os sistemas associados a cada instante de tempo tem solução única.

2.3 Método Multipasso

Por fim, apresentaremos o esquema **Du-Fort-Frankel**, que consiste em um esquema de segunda ordem e de passo múltiplo, obtido da discretização de segunda ordem no tempo em u_m^n :

$$\frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_{n-1}))}{2\Delta t} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} (u(x_{m-1}, t_{n+1}) - (u(x_m, t_{n+1}) + u(x_m, t_{n-1}))) + u(x_{m+1}, t_{n+1}))$$

Reorganizando os termos

$$u_m^{n+1} = [2\lambda (u_{m-1}^n + u_{m+1}^n) + (1 - 2\lambda) u_m^n]$$

²Para todas as linhas as matrizes $(I + \Delta t A)$ e $(I + \frac{\Delta t}{2} A)$ tem o valor da diagonal maior ou igual a soma das outras entradas da linha e a desigualdade é estrita na primeira e na última linha (chamadas matrizes fracamente diagonal dominante). Além disso, não existe nenhuma matriz de permutação capaz de transformar cada uma das matrizes em dois blocos independentes (chamadas matrizes irredutíveis). Com estas duas propriedades, temos que a matriz do sistema é inversível.

Por questões de estabilidade o termo u_m^n da discretização espacial foi substituído pela média dos valores em u_m^{n+1} e u_m^{n-1} . É possível mostrar (também via análise de Von Neumann) que o esquema é incondicionalmente estável **desde que seja garantido que** $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow 0$.

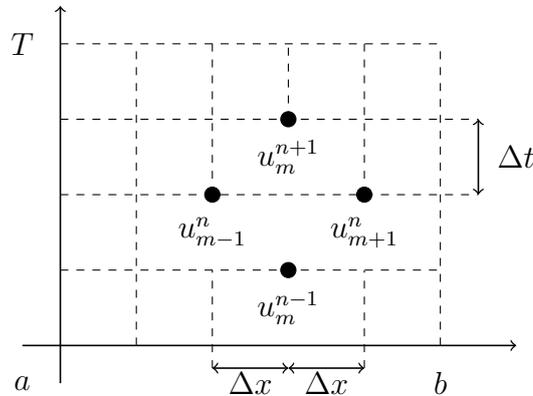


Figura 5: Esquema de Du-Fort-Frankel para a equação do calor.

A implementação computacional deste método é similar aquela utilizada para o método explícito, diferenciando apenas que antes do início do laço temporal deve ser executado um outro método para a obtenção dos valores para $n = 1$. A partir de $n = 2$, o método utiliza as aproximações nos instantes de tempo anteriores (ou seja, $(n - 1)$ e $(n - 2)$) para construir a aproximação em $(n + 1)$.

É importante observar que este método, apesar de ser um método explícito, necessita de um outro método para a sua inicialização. Desta forma, os erros cometidos na aproximação do primeiro instante de tempo irão influenciar na velocidade de convergência do método como um todo, ou seja, a ordem do método será influenciada pelo método escolhido para a construção do primeiro passo.

Referências

- [1] Stoer, J and Burlisch, R. - *Introduction to Numerical Analysis* - Springer - 3rd Ed. - 2002.
- [2] Strikwerda, J.C.- *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations* - SIAM - 2nd ed. - 2004.