



Universidade Federal
do Espírito Santo



lcad
LABORATÓRIO DE COMPUTAÇÃO
DE ALTO DESEMPENHO

Problemas Dependentes do Tempo

Parte I

Isaac P. Santos

Universidade Federal do Espírito Santo - UFES

2018/1

Aproximação de Derivadas por Diferenças Finitas

Uma diferença finita é uma expressão da forma $f(x + b) - f(x + a)$, que ao ser dividida por $(b - a)$ chama-se um **quociente de diferenças**.

O **método de diferenças finitas** consiste em aproximar a derivada de uma função por expressões (fórmulas) discretas calculadas apenas em um conjunto finito de pares ordenados $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots (x_n, y_n)$, onde $y_i = f(x_i)$, $i = 1, \dots, n$.

Essas fórmulas podem ser obtidas de várias maneiras. A forma mais simples é utilizar as ferramentas básicas do cálculo diferencial. Se f é uma função diferenciável (no ponto x_0) então a derivada de f no ponto x_0 é definida por

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (1)$$

Se $h \neq 0$ (porém razoavelmente pequeno) então a expressão

$$D_{+,h} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (2)$$

é uma aproximação para $f'(x_0)$.

Essa expressão é chamada **diferença finita progressiva** de ordem 1 de f no ponto x_0 .

Uma outra expressão para aproximar $f'(x_0)$ é dada por

$$D_{-,h} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}, \quad (3)$$

chamada de **diferença finita regressiva** ou **atrasada**.

Diferenças finitas via série de Taylor

Fórmulas de diferenças finitas para uma função $f(x)$ podem ser obtidas através de seu polinômio de Taylor. Este procedimento fornece também, em geral, a ordem de truncamento da fórmula.

Se f for suficientemente "suave", a série de Taylor de $f(x)$ em torno de $x = x_0$ é dada por

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{h^{(k)}}{(k)!}f^{(k)}(x_0) + \frac{h^{(k+1)}}{(k+1)!}f^{(k+1)}(\xi), \quad (4)$$

onde $\xi \in (x_0, x_0 + h)$, $h > 0$.

Diferenças Finitas Progressivas de ordem 1

Obtemos uma aproximação para $f'(x_0)$ através da série de Taylor

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_0 + h), \quad h > 0. \quad (5)$$

Isolando $f'(x_0)$:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_0 + h), \quad h > 0. \quad (6)$$

Erro de truncamento: $-\frac{h}{2}f''(\xi) = O(h)$.

Dizemos que o erro de truncamento é de ordem h .

Diferenças Finitas Progressivas de ordem 1

As Diferenças Finitas Progressivas são chamadas também de Diferenças Finitas Adiantadas. No inglês: **Forward-Difference formula**

A expressão matemática é dada por

$$D_{+,h} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (7)$$

Dizemos que $D_{+,h}$ é de 1a ordem em acurácia, pois ela fornece uma aproximação para $f'(x_0)$ com erro de truncamento de $O(h)$.

Obs: se o erro de truncamento de alguma fórmula for $O(h^p)$ dizemos que o método é de ordem p . A acurácia de um método é determinado pelo erro de truncamento.

Diferenças Finitas Regressivas de ordem 1

Obtemos uma aproximação para $f'(x_0)$ através da série de Taylor

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0 - h, x_0), \quad h > 0. \quad (8)$$

Isolando $f'(x_0)$:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + \frac{h}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x_0 - h, x_0), \quad h > 0. \quad (9)$$

Erro de truncamento: $\frac{h}{2}f''(\xi) = O(h)$.

Erro de truncamento é de ordem h .

Diferenças Finitas Regressivas de ordem 1

As Diferenças Finitas Regressivas são chamadas também de Diferenças Finitas Atrasada/retardada

No inglês: **Backward-Difference formula**

A expressão matemática é dada por

$$D_{-,h} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \quad (10)$$

Diferenças Finitas Centrada de ordem 2

A **diferença finita centrada** é de ordem 2. Seu erro é menor do que os erros das diferenças finitas progressiva e regressiva.

Considere as duas expansões em série de Taylor da função f em torno de x_0 :

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_+), \quad \xi_+ \in (x_0, x_0 + h), \quad h > 0.$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_-), \quad \xi_- \in (x_0 - h, x_0), \quad h > 0.$$

Diferenças Finitas Centrada de ordem 2

Subtraindo a segunda equação da primeira, obtemos:

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + h^3 \left[\frac{f'''(\xi_+) - f'''(\xi_-)}{3!} \right].$$

Dividindo por $2h$:

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = f'(x_0) + h^2 \left[\frac{f'''(\xi_+) - f'''(\xi_-)}{2 \cdot 3!} \right],$$

ou

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + O(h^2).$$

Diferenças Finitas Centrada de ordem 2

A diferença central fornece uma aproximação para $f'(x_0)$ com erro de truncamento de ordem h^2 .

A expressão matemática é dada por

$$D_{0,h} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}.$$

Diferenças Finitas

Cálculo da 1a derivada

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h),$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x+h)}{h} + O(h),$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2).$$

Diferenças Finitas

Aproximação de ordem mais elevada da primeira derivada

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h} + O(h^4).$$

Cálculo da segunda derivada:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2).$$

Diferenças finitas para sistemas de EDOs

Problema: encontrar o vetor solução $\xi = \xi(t)$ do sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs),

$$M\dot{\xi}(t) + A\xi(t) = \mathbf{b}(t), \quad t \in J = (0, T] \quad (11)$$

$$\xi(0) = \xi_0. \quad (12)$$

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \cdots & M_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1} & M_{n2} & \cdots & M_{nn} \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{b}(t) = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad \xi(t) = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}$$

ξ_0 é o vetor – condição inicial

$$\dot{\xi}(t) = \frac{d\xi(t)}{dt}$$

Diferenças finitas para sistemas de EDOs

Assumindo que a matriz M seja inversível, o sistema anterior pode ser reescrito como

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}(t) + \bar{A}\boldsymbol{\xi}(t) = \bar{\mathbf{b}}(t), \quad t \in J = (0, T] \quad (13)$$

$$\boldsymbol{\xi}(0) = \boldsymbol{\xi}_0, \quad (14)$$

onde $\bar{A} = M^{-1}A$ e $\bar{\mathbf{b}}(t) = M^{-1}\mathbf{b}(t)$.

Solução analítica (*fórmula de Duhamel*):

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \boldsymbol{\xi}(0)e^{-\bar{A}t} + \int_0^t e^{-\bar{A}(t-s)}\mathbf{b}(s)ds.$$

- ▶ Se n é grande o processo de inversão de M é caro computacionalmente;
- ▶ Usar a matriz exponencial na prática não é trivial.

Diferenças finitas para sistemas de EDOs

O problema

$$\begin{aligned} M\dot{\xi}(t) + A\xi(t) &= b(t), \\ \xi(0) &= \xi_0. \end{aligned}$$

pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \dot{\xi}(t) &= \Phi(\xi(t), t), \\ \xi(0) &= \xi_0, \end{aligned}$$

com

$$\Phi(\xi(t), t) = M^{-1} [b(t) - A\xi(t)]$$

uma função contínua e localmente Lipschitz em ξ .

Diferenças finitas para sistemas de EDOs

Considere uma discretização (partição) do intervalo temporal $[0, T]$ em m subintervalos:

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{m-1} < t_m = T, \quad (15)$$

Cada subintervalo $J_k = (t_{k-1}, t_k]$, $k = 1, 2, \dots, m$, tem tamanho (**tamanho do passo de tempo**)

$$\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$$

Isso significa que os valores de ξ no sistema (11)-(12) serão calculados em cada ponto $t_k \in (0, T]$ da discretização (15).

A derivada $\dot{\xi}(t)$ será aproximada em cada ponto $t_k \in (0, T]$ da partição através de alguma técnica de diferenças finitas;

Diferenças finitas para sistemas de EDOs

Em cada ponto $t_k \in (0, T]$ obtemos então uma aproximação ξ_k para $\xi(t_k)$, isto é,

$$\xi_k \approx \xi(t_k).$$

Método de Euler Implícito (ou regressivo)

No método de Euler Implícito (ou regressivo) a aproximação de $\dot{\xi}(t)$ no ponto t_k é feita através de diferença finita regressiva (*backward difference*):

$$\dot{\xi}(t_k) = \frac{\xi(t_k) - \xi(t_{k-1})}{\Delta t_k} \approx \frac{\xi_k - \xi_{k-1}}{\Delta t_k}.$$

Os valores de $\xi(t)$ e $b(t)$ são calculados também em t_k :

$$\xi(t_k) \approx \xi_k, \quad b(t_k) = b_k.$$

Substituindo essas expressões em (11), obtemos o método de **Euler Implícito**

$$M \frac{\xi_k - \xi_{k-1}}{\Delta t_k} + A \xi_k = b_k \quad (16)$$

Método de Euler Implícito

Para cada $k = 1, \dots, m$, o método de Euler implícito resulta no seguinte sistema linear

$$(M + \Delta t_k A)\boldsymbol{\xi}_k = M\boldsymbol{\xi}_{k-1} + \Delta t_k \mathbf{b}_k. \quad (17)$$

Dada a condição inicial $\boldsymbol{\xi}_0 = \boldsymbol{\xi}(t_0)$, as soluções aproximadas

$$\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_m$$

são obtidas resolvendo o sistema (17) sucessivamente.

Método de Euler Implícito

Algoritmo: *Método de Euler Implícito*

1. Cria uma partição $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m = T$ do intervalo temporal $[0, T]$ com m subintervalos $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$;
2. Faça $\xi_0 = \xi(0)$;
3. **para** $k = 1, \dots, m$ **faça**
4. Resolva o sistema linear

$$(M + \Delta t_k A)\xi_k = M\xi_{k-1} + \Delta t_k \mathbf{b}_k$$

5. **fim-para**

Método de Euler Implícito

- ▶ É um método de **1a ordem**. Seu erro de truncamento é de $\mathcal{O}(\Delta t)$, onde

$$\Delta t = \max_{k=1, \dots, m} \{\Delta t_k\};$$

- ▶ É incondicionalmente estável. Ele funciona bem com qualquer tamanho de passo Δt

Método de Euler Explícito (ou progressivo)

No método de Euler Explícito (ou progressivo) a aproximação de $\dot{\xi}(t)$ no ponto t_{k-1} é feita através de diferença finita progressiva (*forward difference*):

$$\dot{\xi}(t_{k-1}) = \frac{\xi(t_k) - \xi(t_{k-1})}{\Delta t_k} \approx \frac{\xi_k - \xi_{k-1}}{\Delta t_k}.$$

Os valores de $\xi(t)$ e $b(t)$ são calculados em t_{k-1} :

$$\xi(t_{k-1}) \approx \xi_{k-1}, \quad b(t_{k-1}) = b_{k-1}.$$

Substituindo essas expressões em (11), obtemos o método de **Euler Explícito**

$$M \frac{\xi_k - \xi_{k-1}}{\Delta t_k} + A \xi_{k-1} = b_{k-1} \quad (18)$$

Método de Euler Explícito

Para cada $k = 1, \dots, m$, o método de Euler explícito resulta no seguinte sistema linear

$$\boldsymbol{\xi}_k = \boldsymbol{\xi}_{k-1} + \Delta t_k M^{-1} \left(\mathbf{b}_{k-1} - A \boldsymbol{\xi}_{k-1} \right). \quad (19)$$

Dada a condição inicial $\boldsymbol{\xi}_0 = \boldsymbol{\xi}(t_0)$, as soluções aproximadas

$$\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_m$$

são obtidas resolvendo o sistema (19) sucessivamente.

Se M for uma matriz facilmente inversível (por exemplo, uma matriz diagonal) a solução $\boldsymbol{\xi}_k$ é obtida com um custo computacional menor do que aquele obtido com o método implícito.

Método de Euler Explícito

- ▶ É um método de **1a ordem**. Seu erro de truncamento é $\mathcal{O}(\Delta t)$, onde

$$\Delta t = \max_{k=1, \dots, m} \{\Delta t_k\};$$

- ▶ É **condicionalmente estável**. Existe uma restrição sobre o tamanho do passo Δt para que o método forneça soluções estáveis.

Método de Crank-Nicolson

É um método com ordem de convergência quadrática, desenvolvido por

- ▶ John Crank (Hindley, 6 de fevereiro de 1916 – 3 de outubro de 2006), físico matemático britânico.
- ▶ Phyllis Nicolson (Macclesfield, 21 de setembro de 1917 — Sheffield, 6 de outubro de 1968), matemática britânica.

Método de Crank-Nicolson

O método CN considera uma aproximação (de diferenças de finitas de segunda ordem) no ponto médio do intervalo $[t_{k-1}, t_k]$, isto é, $t_{(k-1)+\frac{1}{2}} = t_{k-\frac{1}{2}}$.

A discretização de $\dot{\xi}(t)$ é realizada no ponto $t_{(k-1)+\frac{1}{2}} = t_{k-\frac{1}{2}}$ pelo método de diferenças finitas de segunda ordem é

$$\dot{\xi}(t_{k-\frac{1}{2}}) \approx \frac{\xi_k - \xi_{k-1}}{\Delta t_k}, \quad (20)$$

Os valores de $\xi(t)$ e $b(t)$ em $t_{k-\frac{1}{2}}$ são calculados através de uma média aritmética entre seus valores nos pontos t_{k-1} e t_k , isto é,

$$\xi(t_{k-\frac{1}{2}}) \approx \frac{\xi_{k-1} + \xi_k}{2}, \quad (21)$$

e

$$b(t_{k-\frac{1}{2}}) \approx \frac{b_{k-1} + b_k}{2}. \quad (22)$$

Método de Crank-Nicolson

Substituindo (20), (21) e (22) em (11), obtemos

$$M\left(\frac{\xi_k - \xi_{k-1}}{\Delta t_k}\right) + A\left(\frac{\xi_{k-1} + \xi_k}{2}\right) = \frac{b_{k-1} + b_k}{2},$$

que resulta no sistema linear

$$\left(M + \frac{\Delta t_k}{2}A\right)\xi_k = \left(M - \frac{\Delta t_k}{2}A\right)\xi_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2}(b_{k-1} + b_k). \quad (23)$$

Os valores de b_{k-1} e b_k são conhecidos em todo o domínio espacial.

Dado ξ_{k-1} , obtemos a solução aproximada ξ_k , no tempo t_k , $k = 1, \dots, m$, resolvendo o sistema linear (23).

Método de Crank-Nicolson

- ▶ É um método de **2a ordem**. Seu erro de truncamento é $\mathcal{O}(\Delta t)^2$, onde

$$\Delta t = \max_{k=1, \dots, m} \{\Delta t_k\};$$

- ▶ O método CN é **incondicionalmente estável**. No entanto, esse método pode apresentar oscilações espúrias em diversas situações, como por exemplo quando há descontinuidades na condição inicial, ou entre a condição inicial e as condições de contorno.

Método Generalizado Trapezoidal: (método- θ)

Considere a mesma aproximação do método Crank-Nicolson, substituindo a média aritmética pela média ponderada

$$\xi(t_{(k-1)+\theta}) \approx (1 - \theta)\xi_{k-1} + \theta\xi_k, \quad \mathbf{b}(t_{(k-1)+\theta}) \approx (1 - \theta)\mathbf{b}_{k-1} + \theta\mathbf{b}_k,$$

onde $\theta \in [0, 1]$. Fazendo as substituições em (11), obtemos a seguinte família de métodos

$$\left(M + \theta\Delta t_k A\right)\xi_k = \left(M - (1 - \theta)\Delta t_k A\right)\xi_{k-1} + \Delta t_k \left((1 - \theta)\mathbf{b}_{k-1} + \theta\mathbf{b}_k\right). \quad (24)$$

Esse método é conhecido como *Método Generalizado Trapezoidal* ou *método- θ* .

Método Generalizado Trapezoidal: (método- θ)

Observe que

- a) Se $\theta = 0$, obtemos o método de Euler explícito (Euler progressivo);
- b) Se $\theta = 1/2$, obtemos o método de Crank-Nicolson;
- a) Se $\theta = 1$, obtemos o método de Euler implícito (Euler regressivo);

Método Generalizado Trapezoidal

Nos algoritmos anteriores não há preocupação em calcular o valor da derivada de ξ_k .

Apresentamos agora um algoritmo, tipo preditor-corretor, que determina a solução ξ_k e de sua derivada $\dot{\xi}_k = d_k$.

Considere a discretização

$$M\dot{\xi}_k + A\xi_k = b_k, \quad (25)$$

$$\xi_k = \xi_{k-1} + \Delta t_k d_{(k-1)+\theta}, \quad (26)$$

$$d_{(k-1)+\theta} = (1 - \theta)d_{k-1} + \theta d_k, \quad (27)$$

onde d_k é a aproximação da derivada $\dot{\xi}(t_k)$.

Método Generalizado Trapezoidal

O algoritmo consiste em determinar ξ_k e d_k em termos de ξ_{k-1} e d_{k-1} .

No tempo inicial $t = t_0 = 0$ a condição inicial fornece o valor de ξ_0 . O valor $d_0 = \dot{\xi}_0$ é obtido resolvendo o sistema

$$M d_0 + A \xi_0 = b_0,$$

ou seja,

$$M d_0 = b_0 - A \xi_0. \quad (28)$$

Método Generalizado Trapezoidal

Para $k = 1, 2, \dots, m$ tem-se os seguintes passos

(1) Definição de um preditor para ξ_k :

$$\tilde{\xi}_k = \xi_{k-1} + (1 - \theta)\Delta t_k \mathbf{d}_{k-1}.$$

(2) Usando (26), (27) e a predição para ξ_k , obtemos (a correção)

$$\begin{aligned}\xi_k &= \xi_{k-1} + \Delta t_k \mathbf{d}_{(k-1)+\theta} \\ &= \xi_{k-1} + \Delta t_k \left((1 - \theta)\mathbf{d}_{k-1} + \theta\mathbf{d}_k \right) \\ &= \tilde{\xi}_k + \theta\Delta t_k \mathbf{d}_k\end{aligned}$$

Método Generalizado Trapezoidal

(3) Substituindo a expressão anterior em (25), obtemos

$$M\mathbf{d}_k + A\left(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k + \theta\Delta t_k\mathbf{d}_k\right) = \mathbf{b}_k,$$

ou

$$\left(M + \theta\Delta t_k A\right)\mathbf{d}_k = \mathbf{b}_k - A\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k.$$

Resolvendo esse sistema linear obtemos $\mathbf{d}_k$ e usando o passo (2) obtemos $\boldsymbol{\xi}_k$.

Método Generalizado Trapezoidal

Algoritmo: *Preditor-Corretor*

1. Cria uma partição $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m = T$ do intervalo temporal $[0, T]$ com m subintervalos $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$;
2. Faça $\xi_0 = \xi(0)$; (usando a condição inicial)
3. Calcule d_0 ; (usando (28))
4. **para** $k = 1, \dots, m$ **faça**
 5. Predição: $\tilde{\xi}_k = \xi_{k-1} + (1 - \theta)\Delta t_k d_{k-1}$;
 6. Resolva: $(M + \theta\Delta t_k A)d_k = b_k - A\tilde{\xi}_k$;
 7. Correção: $\xi_k = \tilde{\xi}_k + \theta\Delta t_k d_k$;
8. **fim-para**

Método BDF2

No método BDF2 vamos utilizar uma partição uniforme do domínio temporal $[0, T]$.

O método BDF2 (Backward Difference Formula) é definido por

$$M \frac{3\xi_k - 4\xi_{k-1} + \xi_{k-2}}{\Delta t} + A\xi_k = b_k \quad (29)$$

- ▶ É um método de **2a ordem**.
- ▶ É um método de dois passos. Para obter a solução ξ_k são necessárias duas soluções anteriores, ξ_{k-1} e ξ_{k-2} .
- ▶ A inicialização do algoritmo requer duas soluções, ξ_0 e ξ_1 .
- ▶ A solução ξ_0 é dada (condição inicial) e ξ_1 pode ser obtida usando um outro método, por exemplo, Euler implícito.
- ▶ Existe uma classe de métodos $BDF(p)$, onde $p \leq 6$ é a ordem de convergência do método. O método Euler implícito é o $BDF1$

Métodos de Runge-Kutta

Os métodos Runge-Kutta são métodos de um passo que generalizam o método de Euler explícito para esquemas com ordem de acurácia mais elevada.

Considere o problema

$$\begin{aligned}M\dot{\xi}(t) + A\xi(t) &= \mathbf{b}(t), \\ \xi(0) &= \xi_0.\end{aligned}$$

descrito na forma

$$\begin{aligned}\dot{\xi}(t) &= \Phi(\xi(t), t), \\ \xi(0) &= \xi_0,\end{aligned}$$

com

$$\Phi(\xi(t), t) = M^{-1}[\mathbf{b}(t) - A\xi(t)]$$

Método Runge-Kutta de 2a ordem

O método Runge-Kutta explícito de 2a ordem é definido por

$$\begin{aligned}z_1 &= \Phi(\xi_{k-1}, t_{k-1}), \\z_2 &= \Phi\left(\xi_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2} z_1, t_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2}\right), \\ \xi_k &= \xi_{k-1} + \Delta t_k z_2.\end{aligned}$$

Note que

$$\begin{aligned}z_1 &= M^{-1}(\mathbf{b}_{k-1} - A\xi_{k-1}), \\z_2 &= M^{-1}\left[\mathbf{b}\left(t_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2}\right) - A\left(\xi_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2} z_1\right)\right].\end{aligned}$$

Método Runge-Kutta de 4a ordem

O método Runge-Kutta explícito de 4a ordem é definido por

$$\begin{aligned}z_1 &= \Phi(\xi_{k-1}, t_{k-1}), \\z_2 &= \Phi\left(\xi_{k-1} + \frac{1}{2}z_1, t_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2}\right), \\z_3 &= \Phi\left(\xi_{k-1} + \frac{1}{2}z_2, t_{k-1} + \frac{\Delta t_k}{2}\right), \\z_4 &= \Phi\left(\xi_{k-1} + \frac{1}{2}z_3, t_{k-1} + \Delta t_k\right), \\ \xi_k &= \xi_{k-1} + \frac{z_1 + 2z_2 + 2z_3 + z_4}{6} \Delta t_k.\end{aligned}$$

Equação do Calor

Considere o problema modelo (equação do calor):

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f, \quad x \in I = [0, L], \quad t \in J = (0, T], \quad (30)$$

$$u(0, t) = u(L, t) = 0, \quad (31)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad (32)$$

onde

- ▶ $u = u(x, t)$ é solução procurada,
- ▶ $f = f(x, t)$ é uma função dada (termo de fonte) e
- ▶ $u_0(x)$ é a condição inicial,
- ▶ $\alpha > 0$.

Equação do Calor

Equações (30)-(32) descrevem a evolução da temperatura, dada por $u(x, t)$, no ponto x e tempo t de uma barra metálica de comprimento L (ocupando o intervalo $[0, L]$), com condutividade térmica $\alpha > 0$ e cujos extremos são mantidos à temperaturas constantes iguais a zero graus.

A função $u_0(x)$ descreve a temperatura inicial e a função $f(x, t)$ representa a produção calórica fornecida pela barra.

Formulação Variacional

Relembrando: a descrição do método de elementos finitos inicializa reescrevendo a equação diferencial como uma equação variacional, chamada de formulação variacional (ou formulação fraca).

Para obter a formulação variacional do nosso problema, seguiremos os seguintes passos:

1. multiplicamos a equação diferencial por uma função $v(x)$, chamada *função teste* (a função teste sempre se anula nos pontos da fronteira onde a função u é prescrita);
2. integramos o resultado no domínio $I = [0, L]$; e
3. realizamos uma integração por partes (no termo que contém derivadas de segunda ordem da função u).

A multiplicação da equação diferencial pela função teste $v(x)$ e a integração do resultado em $[0, L]$ resulta em

$$\int_0^L \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} v(x) - \alpha \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} v(x) \right) dx = \int_0^L f(x, t) v(x) dx. \quad (33)$$

A integração por partes no termo de 2a ordem no lado esquerdo de (33) é dada por

$$\begin{aligned} \int_0^L -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} v dx &= -\frac{\partial u(L, t)}{\partial x} \underbrace{v(L)}_{=0} + \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} \underbrace{v(0)}_{=0} + \int_0^L u' v' dx \\ &= \int_0^L u' v' dx, \end{aligned} \quad (34)$$

onde $u' = \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$ e $v' = \frac{dv(x)}{dx}$. A Eq. (33) resulta em

$$\int_0^L \left(\frac{\partial u}{\partial t} v \right) dx + \alpha \int_0^L u' v' dx = \int_0^L f v dx. \quad (35)$$

Para cada $t \in J$ fixo, as funções $u(\cdot, t)$ e v pertencem ao seguinte espaço:

$$V_0 = \{w : \|w\|_{L^2(0,L)} < \infty, \|w'\|_{L^2(0,L)} < \infty, w(0) = w(L) = 0\} = H_0^1(0, L). \quad (36)$$

Usando o espaço V_0 obtemos a seguinte formulação variacional: achar u tal que, para todo $t \in J$ fixo, $u \in V_0$ e

$$\int_0^L \left(\frac{\partial u}{\partial t} v \right) dx + \alpha \int_0^L u' v' dx = \int_0^L f v dx, \quad \forall v \in V_0. \quad (37)$$

Discretização Espacial - MEF

A discretização espacial será feita pelo MEF (Método de Elementos Finitos)

Para cada $t \in J$ vamos aproximar a função $u(x, t)$ (solução do problema varicional) por uma *função contínua e linear-por-partes* em $[0, L]$, isto é,

$$u \approx u_h \in V_h \subset V_0.$$

Para isso, construímos uma malha $\mathcal{P}$ sobre o intervalo $I = [0, L]$,

$$\mathcal{P} : 0 < x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = L,$$

consistindo de n subintervalos (chamados elementos) e o correspondente espaço V_h de todas as funções contínuas e lineares-por-partes sobre $\mathcal{P}$.

Nesse contexto, o espaço V_h é chamado de *espaço de elementos finitos*.

Discretização Espacial - MEF

O espaço V_h é dado por

$$V_h = \left\{ v \mid v \in C^0(I); \quad v|_{I_i} \in \mathbb{P}_1(I_i), i = 1, \dots, n \right\},$$

onde $C^0(I)$ é o espaço das funções contínuas definidas em $I = [0, L]$ e $\mathbb{P}_1(I_i)$ é o espaço das funções lineares definidas em $I_i = [x_{i-1}, x_i]$.

Como estamos trabalhando com funções que se anulam nos extremos do domínio $I = [0, L]$, introduziremos o seguinte subespaço $V_{h,0}$ de V_h ,

$$V_{h0} = \{w \in V_h : w(0) = w(L) = 0\}. \quad (38)$$

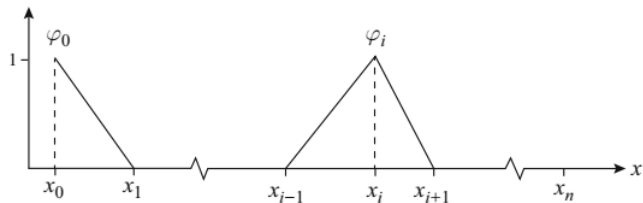
Discretização Espacial - MEF

A base nodal de $V_{h,0}$ é o conjunto

$$\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{n-1}\}, \quad (39)$$

onde excluímos as funções chapéu φ_0 e φ_n , associadas aos pontos nodais $x_0 = 0$ e $x_n = L$.

Enquanto $V_0 = H_0^1(0, L)$ é um espaço de dimensão infinita, os espaços V_h e $V_{h,0}$ são de dimensão finita, com dimensões $n + 1$ e $n - 1$, respectivamente.



Discretização Espacial - MEF

Reescrevendo o problema variacional no contexto do subespaço de dimensão finita $V_{h,0} \subset V_h$, obtemos o método de elementos finitos:

Para cada $t \in J$ achar $u_h \in V_{h,0}$ tal que

$$\int_0^L \frac{\partial u_h(x,t)}{\partial t} v_h(x) dx + \alpha \int_0^L u_h'(x,t) v_h'(x) dx = \int_0^L f(x) v_h(x) dx, \quad \forall v_h \in V_{h,0}. \quad (40)$$

Escrevemos (40) da forma

$$\int_0^L \frac{\partial u_h(x, t)}{\partial t} \varphi_i(x) dx + \alpha \int_0^L u_h'(x, t) \varphi_i'(x) dx = \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (41)$$

onde $\varphi_i(x)$, $i = 1, \dots, n-1$ são as funções chapéu, que formam a base do espaço $V_{h,0}$. Como $u_h \in V_{h,0}$ para todo $t \in J$, então

$$u_h(x, t) = \sum_{j=1}^{n-1} \xi_j(t) \varphi_j(x), \quad (42)$$

onde $\xi_j(t)$, $j = 1, \dots, n-1$ são os $n-1$ coeficientes a serem determinados.

Substituindo (42) em (41),

$$\begin{aligned} \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx &= \int_0^L \frac{\partial u_h(x, t)}{\partial t} \varphi_i(x) dx + \alpha \int_0^L u'_h(x) \varphi'_i(x) dx \\ &= \int_0^L \left[\sum_{j=1}^{n-1} \frac{d\xi_j(t)}{dt} \varphi_j(x) \right] \varphi_i(x) dx + \alpha \int_0^L \left[\sum_{j=1}^{n-1} \xi_j(t) \varphi'_j(x) \right] \varphi'_i(x) dx. \end{aligned}$$

para cada $i = 1, \dots, n-1$.

O primeiro termo $\int_0^L \left[\sum_{j=1}^{n-1} \frac{d\xi_j(t)}{dt} \varphi_j(x) \right] \varphi_i(x) dx$ resulta em

$$\begin{aligned} \int_0^L \left[\sum_{j=1}^{n-1} \frac{d\xi_j(t)}{dt} \varphi_j(x) \right] \varphi_i(x) dx &= \int_0^L \left[\dot{\xi}_1(t) \varphi_1(x) + \cdots + \dot{\xi}_{n-1}(t) \varphi_{n-1}(x) \right] \varphi_i(x) dx \\ &= \int_0^L \left[\dot{\xi}_1(t) \varphi_1(x) \varphi_i(x) + \cdots + \dot{\xi}_{n-1}(t) \varphi_{n-1}(x) \varphi_i(x) \right] dx \\ &= \dot{\xi}_1(t) \int_0^L \varphi_1(x) \varphi_i(x) dx + \cdots + \dot{\xi}_{n-1}(t) \int_0^L \varphi_{n-1}(x) \varphi_i(x) dx, \end{aligned}$$

para cada $i = 1, \dots, n-1$, onde $\dot{\xi}_j(t) = \frac{d\xi_j(t)}{dt}$.

Para $i = 1$, obtemos a linha,

$$\left[\int_0^L \varphi_1(x) \varphi_1(x) dx \right] \dot{\xi}_1(t) + \left[\int_0^L \varphi_2(x) \varphi_1(x) dx \right] \dot{\xi}_2(t) + \cdots + \left[\int_0^L \varphi_{n-1}(x) \varphi_1(x) dx \right] \dot{\xi}_{n-1}(t).$$

Para $i = 2$, obtemos a linha,

$$\left[\int_0^L \varphi_1(x) \varphi_2(x) dx \right] \dot{\xi}_1(t) + \left[\int_0^L \varphi_2(x) \varphi_2(x) dx \right] \dot{\xi}_2(t) + \cdots + \left[\int_0^L \varphi_{n-1}(x) \varphi_2(x) dx \right] \dot{\xi}_{n-1}(t).$$

Procedendo dessa forma até $i = n - 1$, obtemos,

$$\left[\int_0^L \varphi_1(x) \varphi_3(x) dx \right] \dot{\xi}_1(t) + \left[\int_0^L \varphi_2(x) \varphi_3(x) dx \right] \dot{\xi}_2(t) + \cdots + \left[\int_0^L \varphi_{n-1}(x) \varphi_3(x) dx \right] \dot{\xi}_{n-1}(t).$$

O segundo termo $\alpha \int_0^L \left[\sum_{j=1}^{n-1} \xi_j(t) \varphi'_j(x) \right] \varphi'_i(x) dx$ resulta em

$$\begin{aligned} \alpha \int_0^L \left[\sum_{j=1}^{n-1} \xi_j(t) \varphi'_j(x) \right] \varphi'_i(x) dx &= \alpha \int_0^L \left[\xi_1(t) \varphi'_1(x) + \cdots + \xi_{n-1}(t) \varphi'_{n-1}(x) \right] \varphi'_i(x) dx \\ &= \alpha \int_0^L \left[\xi_1(t) \varphi'_1(x) \varphi'_i(x) + \cdots + \xi_{n-1}(t) \varphi'_{n-1}(x) \varphi'_i(x) \right] dx \\ &= \xi_1(t) \alpha \int_0^L \varphi'_1(x) \varphi'_i(x) dx + \cdots + \xi_{n-1}(t) \alpha \int_0^L \varphi'_{n-1}(x) \varphi'_i(x) dx \end{aligned}$$

para cada $i = 1, \dots, n-1$.

Para $i = 1$, obtemos a linha,

$$\left[\alpha \int_0^L \varphi'_1(x) \varphi'_1(x) dx \right] \xi_1(t) + \left[\alpha \int_0^L \varphi'_2(x) \varphi'_1(x) dx \right] \xi_2(t) + \cdots + \left[\alpha \int_0^L \varphi'_{n-1}(x) \varphi'_1(x) dx \right] \xi_{n-1}(t).$$

Para $i = 2$, obtemos a linha,

$$\left[\alpha \int_0^L \varphi'_1(x) \varphi'_2(x) dx \right] \xi_1(t) + \left[\alpha \int_0^L \varphi'_2(x) \varphi'_2(x) dx \right] \xi_2(t) + \cdots + \left[\alpha \int_0^L \varphi'_{n-1}(x) \varphi'_2(x) dx \right] \xi_{n-1}(t).$$

Procedendo dessa forma até $i = n - 1$, obtemos,

$$\left[\alpha \int_0^L \varphi'_1(x) \varphi'_3(x) dx \right] \xi_1(t) + \left[\alpha \int_0^L \varphi'_2(x) \varphi'_3(x) dx \right] \xi_2(t) + \cdots + \left[\alpha \int_0^L \varphi'_{n-1}(x) \varphi'_3(x) dx \right] \xi_{n-1}(t).$$

Obtemos um sistema de EDOs de ordem $n - 1 \times n - 1$ da forma

$$M\dot{\boldsymbol{\xi}}(t) + A\boldsymbol{\xi}(t) = \mathbf{b}(t), \quad t \in J, \quad (43)$$

onde

$M = [M_{ij}]$ é uma matriz cujos elementos são descritos por

$$M_{ij} = \int_0^L \varphi_j(x) \varphi_i(x) dx.$$

$A = [A_{ij}]$ é uma matriz cujos elementos são descritos por

$$A_{ij} = \alpha \int_0^L \varphi_j'(x) \varphi_i'(x) dx.$$

$\mathbf{b}(t) = [b_i(t)]$ é o vetor dos termos independentes, cujos elementos são dados por

$$b_i(t) = \int_0^L f(x, t) \varphi_i(x) dx$$

e $\boldsymbol{\xi}(t) = [\xi_j(t)]$ é o vetor incógnita.

Bibliografia Básica

- ▶ Mats G. Larson and Fredrik Bengzon. The Finite Element Method: Theory, Implementation and Applications. Springer, 2013.
- ▶ Mauro A. Rincon e I-Shih Liu. Introdução ao Método de Elementos Finitos. UFRJ, Instituto de Matemática, 2010.
- ▶ Alfio Quarteroni. Numerical Models For Differential Problems. Springer, 2009.