EXEMPLO MOTIVADOR I

Método das Diferenças Finitas Aplicado a Problemas Unidirecionais com Simetria

Equações Diferenciais Ordinárias – Problemas de Valor no Contorno

Estrutura Geral do Problema:

$$\frac{1}{x^s}\cdot\frac{d}{dx}\left[x^s\cdot\frac{dy(x)}{dx}\right]-f\left[x,y(x)\right]=0 \qquad (1)$$

no domínio : $0 \le x < 1$

Sujeita às condições de contorno:

$$\text{CC1: } \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0}=0 \qquad (2\text{-a})$$

$$\text{CC2: } \alpha\cdot\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=1}+\left.y(x)\right|_{x=1}=1 \qquad (2\text{-b})$$

O valor médio de uma função de $y(x)$ no domínio: $0 \le x < 1$ é definido através da integral:

$$\bar{F}=(s+1)\cdot\int_{x=0}^{x=1}x^s\cdot F\left[y(x)\right]\cdot dx \qquad (3)$$

O domínio do problema é dividido em n segmentos iguais, assim:

$x_i=\frac{i}{n}$ para $i = 0, 1, \cdots, n$. Em cada ponto interno de discretização se considera:

$y(x_i)=y_i$, $\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x_i}=\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2\cdot\Delta x}$ e $\left.\frac{d^2y(x)}{dx^2}\right|_{x_i}=\frac{y_{i+1}-2\cdot y_i+y_{i-1}}{(\Delta x)^2}$ para $i = 1, \cdots, n-1$, as aproximações das derivadas primeira e segunda são aproximações de segunda ordem.

Para calcular $\frac{dy(x)}{dx}$ em $x = 0$ e em $x =1$, assim se procede:

(i) No intervalo entre $0<x<x_1$ considera-se:

$$\frac{dy(x)}{dx}\cong\frac{y_2-y_0}{2\cdot\Delta x}+\frac{y_2-2\cdot y_1+y_0}{(\Delta x)^2}\cdot(x-x_1)\Rightarrow\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0}\cong\frac{y_2-y_0}{2\cdot\Delta x}+\frac{y_2-2\cdot y_1+y_0}{(\Delta x)^2}\cdot(-\Delta x),$$

ou seja: $\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0}=\frac{1}{\Delta x}\left(-\frac{3}{2}\cdot y_0+2\cdot y_1-\frac{1}{2}\cdot y_2\right)$

(ii) No intervalo entre $x_{n-1}<x<x_n=1$ considera-se:

$$\frac{dy(x)}{dx} \cong \frac{y_n - y_{n-2}}{2\cdot\Delta x} + \frac{y_n - 2\cdot y_{n-1} + y_{n-2}}{(\Delta x)^2}\cdot(x - x_{n-1}) \Rightarrow \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x_n=1} \cong \frac{y_n - y_{n-2}}{2\cdot\Delta x} + \frac{y_n - 2\cdot y_{n-1} + y_{n-2}}{(\Delta x)^2}\cdot\Delta x$$

ou seja: $\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x_n=1} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{1}{2}\cdot y_{n-2} - 2\cdot y_{n-1} + \frac{3}{2}\cdot y_n\right)$.

Nos pontos internos, obriga-se a equação discretizada satisfazer a EDO original, isto é:

$\left.\frac{d^2y(x)}{dx^2}\right|_{x_i} + \frac{s}{x_i}\cdot\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x_i} - f[x_i, y_i] = 0$, ou seja:

$\frac{y_{i+1} - 2\cdot y_i + y_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{s}{i}\cdot\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\cdot(\Delta x)^2} - f(x_i, y_i) = 0$, agrupando os termos, obtém-se:

$\left(1 - \frac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i-1} - 2\cdot y_i + \left(1 + \frac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i+1} - (\Delta x)^2\cdot f(x_i, y_i) = 0$, identificando: $\Delta x = \frac{1}{n}$, resulta:

$\boxed{\left(1 - \frac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i-1} - 2\cdot y_i + \left(1 + \frac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i+1} - \frac{f(x_i, y_i)}{n^2} = 0}$ para $i = 1, \cdots, n-1$

Além disso: CC1: $\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0} = 0 \Rightarrow \boxed{-\frac{3}{2}\cdot y_0 + 2\cdot y_1 - \frac{1}{2}\cdot y_2 = 0}$ e

CC2: $\alpha\cdot\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=1} + y(x)\big|_{x=1} = 1 \Rightarrow \frac{\alpha}{\Delta x}\cdot\left(\frac{1}{2}\cdot y_{n-2} - 2\cdot y_{n-1} + \frac{3}{2}\cdot y_n\right) + y_n = 1$, agrupando os termos, obtém-se: $\boxed{\frac{\alpha}{2}\cdot y_{n-2} - 2\cdot\alpha\cdot y_{n-1} + \left(\frac{3\cdot\alpha}{2} + \frac{1}{n}\right)\cdot y_n = \frac{1}{n}}$

Dando origem ao sistema algébrico não linear de n equações e n incógnitas $[y_1, y_2, \ldots, y_n]$:

$$\begin{cases} -\frac{3}{2}\cdot y_0 + 2\cdot y_1 - \frac{1}{2}\cdot y_2 = 0 \\ \left(1 - \frac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i-1} - 2\cdot y_i + \left(1 + \frac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i+1} - \frac{f(x_i, y_i)}{n^2} = 0 \quad \text{para } i = 2, \cdots, n-1 \\ \frac{\alpha}{2}\cdot y_{n-2} - 2\cdot\alpha\cdot y_{n-1} + \left(\frac{3\cdot\alpha}{2} + \frac{1}{n}\right)\cdot y_n = \frac{1}{n} \end{cases}$$

Há ainda duas outras maneiras de calcular as derivadas nos contornos:

(a) Aproximação de Primeira Ordem. Neste caso, aproximam-se as derivadas por:

$\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0} \cong \frac{y_1 - y_0}{\Delta x}$ e $\left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=1} \cong \frac{y_n - y_{n-1}}{\Delta x}$, resultando no sistema de equações algébricas:

$$\begin{cases} -y_0 + y_1 = 0 \\ \left(1 - \dfrac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i-1} - 2\cdot y_i + \left(1 + \dfrac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i+1} - \dfrac{f\left(x_i, y_i\right)}{n^2} = 0 \quad \text{para } i \;=\; 2,\; \cdots, n-1 \\ -\alpha\cdot y_{n-1} + \left(\alpha + \dfrac{1}{n}\right)\cdot y_n = \dfrac{1}{n} \end{cases}$$

(b) Extrapolação das derivadas primeiras. Neste caso, as derivadas no primeiro e último elemento são aproximadas por:

$$\frac{dy(x)}{dx} \cong \frac{y_2 - y_0}{2\cdot\Delta x}\cdot\left(\frac{x_2 - x}{\Delta x}\right) + \frac{y_3 - y_1}{2\cdot\Delta x}\cdot\left(\frac{x - x_1}{\Delta x}\right) \Rightarrow \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0} \cong \frac{-2\cdot y_0 + y_1 + 2\cdot y_2 - y_3}{2\cdot\Delta x}$$

$$\frac{dy(x)}{dx} \cong \frac{y_{n-1} - y_{n-3}}{2\cdot\Delta x}\cdot\left(\frac{x_{n-1} - x}{\Delta x}\right) + \frac{y_n - y_{n-2}}{2\cdot\Delta x}\cdot\left(\frac{x - x_{n-2}}{\Delta x}\right) \Rightarrow \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=x_n=1} \cong \frac{y_{n-3} - 2\cdot y_{n-2} - y_{n-1} + 2\cdot y_n}{2\cdot\Delta x}$$

Dando origem ao sistema algébrico não linear:

$$\begin{cases} -2\cdot y_0 + y_1 + 2\cdot y_2 - y_3 = 0 \\ \left(1 - \dfrac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i-1} - 2\cdot y_i + \left(1 + \dfrac{s}{2\cdot i}\right)\cdot y_{i+1} - \dfrac{f\left(x_i, y_i\right)}{n^2} = 0 \quad \text{para } i \;=\; 2,\; \cdots, n-1 \\ \dfrac{\alpha}{2}\cdot y_{n-3} - \alpha\cdot y_{n-2} - \dfrac{\alpha}{2}\cdot y_{n-1} + \left(\alpha + \dfrac{1}{n}\right)\cdot y_n = \dfrac{1}{n} \end{cases}$$

Exercício de Treinamento: resolva numericamente, aplicando o método de diferenças finitas, o problema:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial y(x,t)}{\partial t} = \dfrac{1}{x^s}\cdot\dfrac{\partial}{\partial x}\left[x^s\cdot\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right] - f\left[x, y(x,t), \theta(x,t)\right] \\ \\ \dfrac{\partial \theta(x,t)}{\partial t} = \dfrac{1}{x^s}\cdot\dfrac{\partial}{\partial x}\left[x^s\cdot\dfrac{\partial \theta(x,t)}{\partial x}\right] + \beta\cdot f\left[x, y(x,t), \theta(x,t)\right] \end{cases} \tag{1}$$

no domínio : $0 \le x < 1$ e $t > 0$.

Sujeita às condições:

$$\text{Condições de contorno: } \begin{cases} \text{CC1: } \left.\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} = 0 \quad \text{e} \quad \left.\dfrac{\partial \theta(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} = 0 & \text{(2-a)} \\ \text{CC2: } \alpha\cdot\left.\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1} + \left. y(x,t)\right|_{x=1} = y_b(t) \qquad \text{para } t>0 \\ \lambda\cdot\left.\dfrac{\partial \theta(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1} + \left.\theta(x,t)\right|_{x=1} = \theta_b(t) & \text{(2-b)} \end{cases}$$

Condição Inicial: $y(x,t)\big|_{t=0} = y_{inic}(x)$ e $\theta(x,t)\big|_{t=0} = \theta_{inic}(x)$ para $0 \le x < 1$ (2-c)

Considerando os valores dos parâmetros α e λ como nulos e valores positivos quaisquer, considere também:

$f\left[x, y(x,t), \theta(x,t)\right] = Da \cdot \left[y(x,t)\right]^m \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(x,t)}\right)\right]$,escolhendo os valores de Da >0, γ>0 e $m \geq 0$. Considere, por simplicidade, $y_{inic}=0$, $\theta_{inic}=\theta_b=1$ e $y_b(t)=1$ (simulação do *start-up*).

Compare seus resultados aplicando o método dos momentos e o de Galerkin e adotando valores crescentes de n.

Avalie em sua resposta a variação com o tempo do valor médio de $y(x,t)$ e de $\theta(x,t)$:

$$\bar{y}(t) = (s+1) \cdot \int_{x=0}^{x=1} x^s \cdot y(x,t) \cdot dx = \frac{(s+1)}{2} \cdot \int_{u=0}^{u=1} u^{\frac{s-1}{2}} \cdot y(u,t) \cdot du$$

$$\bar{\theta}(t) = (s+1) \cdot \int_{x=0}^{x=1} x^s \cdot \theta(x,t) \cdot dx = \frac{(s+1)}{2} \cdot \int_{u=0}^{u=1} u^{\frac{s-1}{2}} \cdot \theta(u,t) \cdot du$$

Além disso, calcule o *fator de efetividade:*

$$\eta(t) = (s+1) \cdot \int_{x=0}^{x=1} x^s \cdot \left[y(x,t)\right]^m \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(x,t)}\right)\right] \cdot dx$$ ou, na forma:

$$\eta(t) = \frac{(s+1)}{2} \cdot \int_{u=0}^{u=1} u^{\frac{s-1}{2}} \cdot \left[y(u,t)\right]^m \cdot \exp\left[\gamma \cdot \left(1 - \frac{1}{\theta(u,t)}\right)\right] \cdot du$$

Utilize em todas as situações como critério de desempenho do método a evolução temporal dos valores médios dos resíduos ao quadrado.