**Revista Eletrônica
Paulista de Matemática**

ISSN 2316-9664
Volume 11, dez. 2017
Edição Iniciação Científica

André José Pereira

Universidade Estadual de
Montes Claros - UNIMONTES
andre_pereira@yahoo.com.br

Narciso da Hora Lisboa

Universidade Estadual de
Montes Claros - UNIMONTES
narciso.lisboa@unimontes.br

José Higino Dias Filho

Universidade Estadual de
Montes Claros – UNIMONTES
jhiginod@gmail.com

Análise da estabilidade do método explícito para discretização de equações diferenciais parabólicas por meio de diferenças finitas

Analysis of the stability of the explicit method for discretization of
parabolic differential equations by means of finite differences

Resumo

Este trabalho tem por objetivo estudar os critérios de estabilidade do método numérico para resolução computacional de equações diferenciais parciais parabólicas. O problema físico utilizado nesse estudo de caso consiste na equação de difusividade térmica em uma barra. O método numérico utiliza aproximações das derivadas de forma explícita por meio de diferenças finitas. Foi aplicado o critério de Neumann para verificar a condição de estabilidade e foram realizadas simulações para diferentes passos no eixo temporal. Os resultados das simulações são apresentados em gráficos e tabelas que contém os dados das soluções exatas e aproximadas em determinados pontos. Foi possível observar com os dados numéricos que a condição de estabilidade encontrada pelo critério de Neumann é essencial na prática e que o método explícito aproxima bem da solução com a condição de estabilidade satisfeita. Entretanto, há uma limitação para os tamanhos dos passos a serem tomados.

Palavras-chave: Diferenças finitas. Método explícito. Estabilidade. Equações diferenciais parabólicas.

Abstract

The objective of this Work is study of criteria of stability of numerical method for computational solution of the partial differential equations parabolic. The physic problem used in this case study consists in thermal diffusivity equation in a bar. The numerical method uses approximation of the derivatives of the explicit form by means of finites differences. Was aplicated de Neumann method for verify the condition of stability and were realized simulations for differents step of temporal axis. The results of simulations are presenteds in graphics and tables that contains the data of the exact and approximate solutions in points determinated. it was possible to observe whith the numericals data that the stability condition found by Neumann criterie is essential in practice and that the explicit method approach well to satisfied condition. However there is a limitation for the step size to be taken.

Keywords: Finite differences. Explicit method. Stability. Differential parabolic equations.

1 Introdução

A importância da modelagem matemática tem crescido muito, uma vez que a análise detalhada de um modelo e suas propriedades, viabilizadas pelo salto tecnológico dos computadores, torna possível um melhor entendimento do evento modelado. Além do mais, permite a simulação de mudanças nos parâmetros do modelo e a análise da respectiva resposta, que não seriam possíveis na situação real [1].

Com advento do Cálculo Diferencial e Integral, a modelagem de muitos problemas relacionados às diversas áreas do conhecimento, como, por exemplo, Química, Física, Biologia, Engenharia e Geometria tem resultado em equações diferenciais e problemas de valor inicial e de contorno. A partir do esforço de grandes matemáticos, surgiram muitas contribuições importantes para a solução desses problemas. Atualmente, muitos pesquisadores trabalham na busca de métodos de solução. No entanto, com grande evolução da computação, ampliando expressivamente a capacidade de processamento de dados, o computador tornou-se uma poderosíssima ferramenta para a solução dessas equações e dos problemas mencionados.

A partir disso, várias técnicas foram desenvolvidas para determinar a solução de uma equação diferencial. A solução pode ser determinada de forma exata (conhecida como solução exata) ou aproximada (solução aproximada). Os métodos de aproximar solução (métodos numéricos) são constantemente estudados, pois muitas vezes exigem um número grande de cálculos, podendo propagar erros e, assim, perdendo o significado da solução. Esse critério de análise é conhecido como estabilidade.

O objetivo desse trabalho é analisar a estabilidade do método explícito aplicado às equações diferenciais parabólicas.

2 Fundamentação teórica

2.1 Equações diferenciais parciais (EDP's)

Equações diferenciais parciais são aquelas que envolvem derivadas parciais de uma função. São classificadas em três categorias: Parabólicas (problemas de evolução), Elípticas (problemas de equilíbrio) e Hiperbólicas (problema que envolvem propagação ou descontinuidade). O problema tratado neste trabalho é evolutivo, conhecido como equação de difusão ou do calor, que é uma EDP parabólica, dada por

$$u_t = a \cdot u_{xx}, \quad (1)$$

sob as condições de contorno de Dirichlet, que especifica o valor da função no contorno. Mais detalhes sobre (1) ver ref. [2] e [3].

2.1 Discretização

Para resolver uma equação diferencial computacionalmente, é fundamental expressar o domínio (região) sobre o qual o problema será resolvido de forma adequada. Usualmente, não é possível obter soluções numéricas em regiões contínuas, devido sua infinidade de pontos. Primeiramente, o domínio é discretizado. O conceito de discretizar parte da transformação do problema contínuo em um discreto finito.

Figura 1-Discretização do Domínio

Nos pontos desse domínio discretizado, são obtidas soluções para o problema. Percebe-se, de maneira intuitiva, que quanto maior o número de pontos, maior o esforço computacional.

2.2 Diferenças finitas

Em geral, o método de diferenças finitas consiste em discretizar o domínio e substituir as derivadas da equação diferencial por aproximações que envolvem apenas valores numéricos de uma função.

Atualmente, a ferramenta base para aproximar derivadas em torno de um ponto é a série de Taylor. Esta relaciona valores da função e suas derivadas, em um ponto x , com valores da vizinhança, ou seja, com $y(x + h)$.

Aplicando a série de Taylor para $y(x)$, com $n = 1$, obtém-se a fórmula de aproximação progressiva

$$y'(x) = \frac{y(x + h) - y(x)}{h} - \frac{h^2}{2!} y''(\xi), \quad (2)$$

em que $x < \xi < x + h$.

O termo $\frac{h^2}{2!} y''(\xi)$, em (2), representa o erro da aproximação.

A ideia pode ser facilmente estendida para problemas de mais de uma variável. Por exemplo, a fórmula de diferenças progressivas para a variável temporal t ,

$$f_t(x, t) = \frac{f(x, t + k) - f(x, t)}{k} - \frac{k}{2!} f_{tt}(x, \zeta), \quad t < \zeta < t + k. \quad (3)$$

As ref. [1] e [2] descrevem com mais detalhes as demais fórmulas de aproximações para problemas unidimensionais.

2.3 Estabilidade, consistência e convergência

O método aqui apresentado é definido para problemas bem postos.

Definição 1: Um problema é dito bem posto se ele tem única solução que depende continuamente dos dados iniciais ou de fronteira ou de ambos [3].

Para que o conceito acima fique mais claro, consideramos os exemplos a seguir.

Exemplo 1: O problema

$$\begin{cases} u_t(x, t) = 0 \text{ em } \mathbb{R}^2, \\ u(x, x) = x^2, x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

tem como única solução a função u dada por $u(x, t) = x^2$. Este é um exemplo de um problema bem posto.

Exemplo 2: Para cada número real λ , $u(x, t) = \lambda x^2 + 2$ é uma solução do problema

$$\begin{cases} u_t(x, t) = 0 \text{ em } \mathbb{R}^2, \\ u(0, t) = 2, t \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

Portanto, este não é um problema bem posto, pois possui infinitas soluções.

Para encontrar a solução aproximada de um problema, deve-se ter um certo número de cálculos que dependem de h e k . Ou seja, quanto menores os valores maior será o número de passos para chegar à solução aproximada. Isso pode levar a um acúmulo de erros não controlado e, nesse caso, o método aplicado é dito não estável ou instável. Um método numérico pode ser interpretado como um procedimento de produzir números a partir de dados iniciais. Entretanto, esses dados iniciais podem conter erros (de arredondamento do computador, por exemplo), e, se amplificados, em pouco tempo o crescimento do erro dominará a solução produzida e esta perderá o significado.

Definição 2: Um método numérico é estável, se a equação de diferenças associada não amplifica erros dos passos anteriores [1].

A consistência de um método numérico está relacionada à sua ordem de convergência. A ordem de convergência é dada pela ordem do erro causado pela aproximação e a solução exata definida anteriormente. Um método que tem ordem mais alta, para mesmos tamanhos de passos, produz aproximações mais precisas.

Definição 3: Um método numérico é consistente com relação a uma dada equação se o erro de truncamento local deste método para essa equação é pelo menos $O(h)$ [1].

A análise da convergência de um método numérico é extremamente importante, pois se espera que a solução numérica produza uma solução mais próxima possível da solução analítica do problema. Uma relação entre consistência, estabilidade e convergência está associada ao Teorema de Lax.

Teorema de Lax: uma condição necessária e suficiente para convergência de um método, quando aplicado a um problema de valor inicial bem posto, é que o esquema de discretização seja consistente e estável.

O próximo exemplo ilustra as definições 2 e 3 acima e o Teorema de Lax.

Exemplo 3: Considere o problema

$$\begin{cases} u_t(x, t) = u_{xx}(x, t), (x, t) \in [0, 1] \times (0, 1), \\ u(x, 0) = x(1 - x), x \in [0, 1], \\ u(0, 1) = u(1, t) = 0, t \in (0, 1). \end{cases}$$

Seja $U_{i,j}$ o valor aproximado para a solução exata $u(x_i, t_j)$ do problema anterior dada por $u(x_i, t_j) = u(i/3, j/54)$, com $i = 0, 1, 2, 3$ e $j = 0, \dots, 54$. Veja a ref. [3]. A solução aproximada desse problema, usando o método explícito que descreveremos em seguida, é obtida através da fórmula

$$U_{i,j+1} = U_{i,j} + \frac{1}{6}(U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}).$$

O problema de valor inicial anterior é bem posto. Além disso, o método acima é consistente e estável. Portanto, a solução aproximada converge para a solução exata.

2.4 Método explícito

Discretizando a derivada de segunda ordem da variável espacial x aplicando diferenças centradas, obtém-se:

$$u_{xx}(x_i, t_j) \cong \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2}. \quad (4)$$

E a derivada primeira da variável temporal t , aplica-se diferenças progressivas, obtendo:

$$u_t(x_i, t_j) \cong \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k}. \quad (5)$$

Substituindo (4) e (5) na equação (1), obtemos

$$U_{i,j+1} = \frac{ka}{h^2}(U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}) + U_{i,j}.$$

Para $\sigma = \frac{ka}{h^2}$, tem-se a equação de diferenças pelo método explícito dada por

$$U_{i,j+1} = \sigma(U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}) + U_{i,j}. \quad (6)$$

A molécula computacional (Figura 2) mostra a tradução gráfica da fórmula (6), ela representa a relação de dependência existente entre o valor no ponto $(i, j + 1)$ e seus vizinhos.

Figura 2 – Tradução gráfica do método explícito

2.5 Estabilidade – critério de Neumann

O critério de Von Neumann é muito utilizado para determinar a estabilidade de um método numérico.

Admitira-se que haja uma solução da equação de diferenças do método explícito, tem-se pelo critério de estabilidade de Neumann:

$$\begin{aligned} U_{i,j} &= e^{\lambda j} e^{I\beta i} = (e^{\lambda})^j e^{I\beta i} = (e^{\lambda})^j (\cos\beta i + I \sin\beta i); \\ U_{i,j+1} &= e^{\lambda(j+1)} e^{I\beta i} = (e^{\lambda})^{j+1} e^{I\beta i} = (e^{\lambda})^{j+1} (\cos\beta i + I \sin\beta i); \\ U_{i+1,j} &= e^{\lambda j} e^{I\beta(i+1)} = (e^{\lambda})^j e^{I\beta(i+1)} = (e^{\lambda})^j [\cos\beta(i+1) + I \sin\beta(i+1)]; \\ U_{i-1,j} &= e^{\lambda j} e^{I\beta(i-1)} = (e^{\lambda})^j e^{I\beta(i-1)} = (e^{\lambda})^j [\cos\beta(i-1) + I \sin\beta(i-1)]. \end{aligned}$$

Substituindo na equação de diferenças (6) vemos que

$$e^{\lambda(j+1)} e^{I\beta i} = e^{\lambda j} e^{I\beta i} + \sigma (e^{\lambda j} e^{I\beta(i-1)} - 2e^{\lambda j} e^{I\beta i} + e^{\lambda j} e^{I\beta(i+1)}).$$

Aplicando as propriedades do expoente e simplificando os termos comuns obtém-se

$$e^{\lambda} = 1 + \sigma (e^{-I\beta} - 2 + e^{I\beta}).$$

Como $e^{-I\beta} + e^{I\beta} = \cos(-\beta) + I \sin(-\beta) + \cos\beta + I \sin\beta = 2\cos\beta$, conclui-se que

$$e^{\lambda} = 1 + \sigma (-2 + 2\cos\beta).$$

Para que o método seja estável, deve-se assumir que $|e^{\lambda}| \leq 1$ e impor que $e^{\lambda} \geq -1$. Portanto, tem-se

$$1 + \sigma (-2 + 2\cos\beta) \geq -1$$

e, consequentemente,

$$\sigma \leq \frac{1}{1 - \cos\beta}.$$

Logo, se tem $\sigma \leq \frac{1}{2}$.

Assim, conclui-se que o método é condicionalmente estável. Observe que a condição $\sigma \leq \frac{1}{2}$ é bastante restritiva ao tamanho do passo k , pois isso significa que $\frac{ka}{h^2} \leq \frac{1}{2}$. Desta

maneira, se desejar calcular a solução para um tempo razoavelmente longo, o esforço computacional poderá ser grande.

3 Resultados

Os dados apresentados nessa seção foram gerados através de um algoritmo implementado em linguagem Python.

Considere a equação do calor ou de difusão

$$\begin{cases} u_t = u_{xx}, & 0 \leq x \leq 1, & t \geq 0, \\ u(x, 0) = 100 \cdot \text{sen}(\pi x), & 0 \leq x \leq 1, \\ u(0, t) = u(1, t) = 0, & t > 0, \end{cases}$$

cujas soluções exatas são: $u(x, t) = 100 \cdot e^{-\pi^2 t} \cdot \text{sen}(\pi x)$.

Discretizando o intervalo $[0, 1]$ por pontos com espaçamentos $h = 0.1$ e a variável tempo com espaçamento k , obtém-se uma malha para o domínio $[0, 1] \times [0, 0.5]$.

Se considerar uma partição no eixo temporal de modo que cada $k = 0.01$, terá $\sigma = \frac{ka}{h^2} = 1$. Logo, σ estará fora da condição de estabilidade. Observe os resultados:

Resultados método explícito		
	$h = 0.1$	$k = 1/100$
(x, t)	Aproximada	Exata
(0.0, 0.5)	0.0000000	0.0000000
(0.1, 0.5)	42548941.8	0.222242
(0.2, 0.5)	-80973026.2	0.422730
(0.3, 0.5)	111535765.7	0.581838
(0.4, 0.5)	-131245330.1	0.683992
(0.5, 0.5)	138147529.3	0.719192
(0.6, 0.5)	-131526676.0	0.683992
(0.7, 0.5)	111990993.1	0.581838
(0.8, 0.5)	-81428253.6	0.422730
(0.9, 0.5)	42830287.74	0.222243
(1.0, 0.5)	0.0000000	0.0000000

Tabela 1 – Resultados método explícito

Claramente a solução se tornou espúria. Isso mostra a necessidade do estudo e análise da estabilidade de um método numérico. Observe que as soluções encontradas não são compatíveis com o problema físico em questão.

Ao determinar valores de k e x para que $\sigma \leq \frac{1}{2}$ e satisfaça a condição de estabilidade. Para $k = \frac{1}{200}$, obtém-se $\sigma = \frac{ka}{h^2} = 0.5$. Ou seja, satisfaz a condição de estabilidade do método. Observe na tabela 2 os resultados.

Resultados método explícito		
	$h = 0.1$	$k = 1/200$
(x, t)	Aproximada	Exata
(0.0, 0.5)	0.000000	0.000000
(0.1, 0.5)	0.204463	0.222242
(0.2, 0.5)	0.388912	0.422730
(0.3, 0.5)	0.535291	0.581838
(0.4, 0.5)	0.629273	0.683992
(0.5, 0.5)	0.661656	0.719192
(0.6, 0.5)	0.629273	0.683992
(0.7, 0.5)	0.535291	0.581838
(0.8, 0.5)	0.388912	0.422730
(0.9, 0.5)	0.204463	0.222243
(1.0, 0.5)	0.000000	0.000000

Tabela 2 – Resultados método explícito

Gráfico 1 – Solução aproximada × solução exata para $k = 1/200$

Tomando agora $k = \frac{1}{600}$, ou seja, refinando a malha no eixo temporal, temos $\sigma = \frac{ka}{h^2} = 0,1\bar{6}$, obtém-se os seguintes resultados:

Resultados método explícito		
	$h = 0.1$	$k = 1/600$
(x, t)	Aproximada	Exata
(0.0, 0.5)	0.000000	0.000000
(0.1, 0.5)	0.222261	0.222242
(0.2, 0.5)	0.422766	0.422730
(0.3, 0.5)	0.581887	0.581838
(0.4, 0.5)	0.684050	0.683992
(0.5, 0.5)	0.719253	0.719192
(0.6, 0.5)	0.684050	0.683992
(0.7, 0.5)	0.581888	0.581838
(0.8, 0.5)	0.422766	0.422730
(0.9, 0.5)	0.222261	0.222243
(1.0, 0.5)	0.000000	0.000000

Tabela 3 – Resultados método explícito

Gráfico 2 – Solução aproximada $\times$ solução exata para $k = 1/600$

Pode-se observar que a solução para uma malha mais refinada apresentam pontos mais aproximados da solução exata do problema.

Assim, para valores dentro do intervalo do critério estabilidade, o método explícito fornece boas aproximações do problema em questão. Desta maneira, no intuito de visualizar melhor o comportamento da solução, está apresentado no gráfico 3 a solução aproximada em 3D.

Gráfico 3 – Solução aproximada em 3D para $k = 1/600$

4 Conclusão

Neste trabalho, foi possível analisar computacionalmente, através de um algoritmo, que o método explícito produz boas aproximações do intervalo de estabilidade $\sigma \leq \frac{1}{2}$. Entretanto, essa condição limita bastante o passo temporal, tendo assim um esforço computacional muito grande.

Para valores de $\sigma > \frac{1}{2}$ o método acumula erros dos passos anteriores e produz uma solução não condizente com a solução analítica do problema. Assim, conclui-se que o método é condicionalmente estável.

5 Referências

- [1] BARROSO, L. C et al. **Cálculo numérico: com aplicações**. 2. ed. São Paulo, Editora HARBRA, 1987.
- [2] BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares de valores de contorno**. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2015.
- [3] CUMINATO, J. A.; MENEGUETTE JUNIOR, M. **Discretização de equações diferenciais parciais: técnicas de diferenças finitas**. Rio de Janeiro: SBM, 2013.
- [4] SANTOS, R. J. **Equações diferenciais parciais: uma introdução**. Belo Horizonte: Imprensa Universitária da UFMG, 2015.

Artigo recebido em ago. 2017 e aceito em nov. 2017.