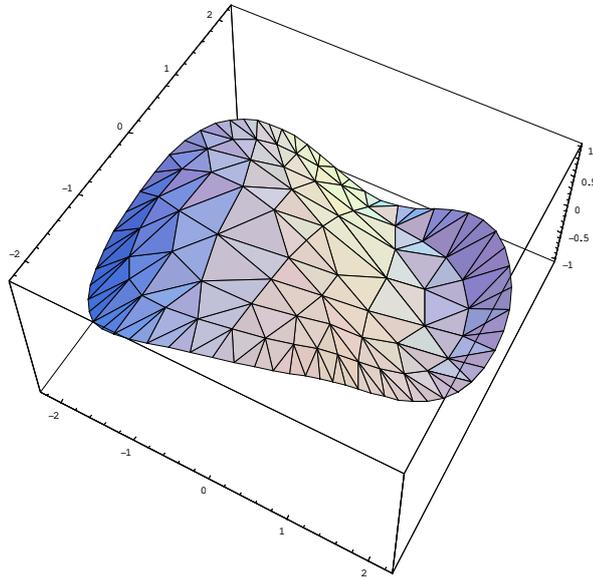


Análise Numérica de Equações Diferenciais Parciais
(*uma introdução*)



Carlos J. S. Alves

Departamento de Matemática
Instituto Superior Técnico
Universidade Técnica de Lisboa

(Versão 0.3 – Julho de 2008)

Índice

I	Introdução	6
1	Noções gerais	7
1.1	Exemplos de Equações Diferenciais Parciais	7
1.1.1	Exemplo 1 – Equação de Poisson	7
1.1.2	Exemplo 2 - Equação do Calor	8
1.1.3	Exemplo 3 - Equação das Ondas	9
1.2	Aproximação de Operadores Lineares	10
1.2.1	Aproximação usando Coeficientes Indeterminados.	11
1.2.2	Aproximação de derivadas	13
1.2.3	Expansão simbólica	15
II	Método das Diferenças Finitas	18
2	Diferenças Finitas em Problemas Elípticos	19
2.1	Equação de Laplace/Poisson	20
2.1.1	Resultados elementares	21
2.1.2	Unicidade	26
2.1.3	Princípio do Máximo	27
2.1.4	Problema bem-posto	29
2.2	Diferenças Finitas - Equação de Poisson	30
2.2.1	Aproximação do Laplaciano	30
2.2.2	Equações nos pontos interiores	32
2.2.3	As condições de fronteira	33
2.2.4	O problema discreto	34
2.2.5	O sistema linear no caso de um rectângulo	38
2.2.6	Domínio genérico - aplicação de métodos iterativos	39
2.2.7	Convergência e estimativa de erro	43
2.2.8	Caso tridimensional	45
2.3	Outras equações e sistemas elípticos	46
2.3.1	Bilaplaciano	46
2.3.2	Elasticidade linear	47
2.3.3	Sistema de Stokes	49
2.4	Exemplos computacionais (Laplaciano)	50

3	Diferenças Finitas em Problemas de Evolução	54
3.1	Equação do Calor	54
3.1.1	Diferenças finitas para a equação do calor	56
3.2	Esquema Explícito para a Equação do Calor	57
3.2.1	Consistência do Esquema Explícito	58
3.2.2	Estabilidade do Esquema Explícito	59
3.2.3	Convergência do Esquema Explícito	60
3.3	Consistência, Estabilidade e Teorema de Lax	61
3.3.1	Estabilidade	61
3.3.2	Consistência	62
3.3.3	Convergência	62
3.4	Esquemas θ para a Equação do Calor	63
3.4.1	Esquema Implícito (puro)	63
3.4.2	Esquemas implícitos θ	65
3.4.3	Simulações numéricas	68
3.5	Redução a um sistema linear de EDO's	70
3.6	Equação das Ondas	70
3.6.1	Caso unidimensional (1D+1T)	71
3.6.2	Sistema de 1ª ordem	72
3.6.3	Esquema explícito instável	74
3.6.4	Esquema implícito	75
3.6.5	Esquema explícitos condicionalmente estáveis	75
3.6.6	Esquemas de ordem 2	78
III	Método dos Elementos Finitos	80
4	Método de Galerkin	81
4.1	Formulação Variacional	81
4.2	Formulação abstracta	85
4.2.1	Equivalência I (Caso simétrico - minimização de energia)	87
4.2.2	Equivalência II (Formulações fraca e forte)	90
4.2.3	Teoremas fundamentais	93
4.3	Formulação Variacional Discreta	99
4.3.1	Funções base	100
5	Interpolação por Elementos Finitos	102
5.1	Caso unidimensional	102
5.2	Discretização geométrica (malhagem)	105
5.2.1	Construção da Triangulação	108
5.3	Elementos Finitos - Tripleto	109
5.3.1	Elementos de Lagrange Lineares	110
5.3.2	Elementos de Lagrange Quadráticos	111
5.3.3	Outros elementos finitos	112
5.3.4	Elementos equivalentes afins	118
5.4	Interpolação Local e Global	119

5.4.1	Interpolação local	119
5.4.2	Interpolação global	120
5.4.3	Construção da interpolação global	121
6	Estimativas de Erro e Integração	124
6.1	Estimativas para o erro de interpolação	124
6.1.1	Espaço quociente por polinômios	124
6.1.2	Estimativas Globais	129
6.2	Estimativas de erro do Método de Galerkin	134
6.2.1	Regularidade da solução	134
6.2.2	Estimativas de erro	135
6.2.3	Erro de aproximação do domínio	137
6.3	Integração numérica	138
6.3.1	Integração de Gauss em cada elemento	138
6.3.2	Caso unidimensional	139
6.3.3	Fórmulas de Gauss para o Quadrado de Referência	140
6.3.4	Fórmulas de Gauss para o Triângulo de Referência	141
6.3.5	O erro na integração numérica	142
7	Complementos - Método de Galerkin	147
7.1	Método de Galerkin-Estrutura do Sistema Linear	147
7.1.1	Numeração dos nós e dos triângulos	147
7.1.2	Sistema Linear	148
7.2	Outras Condições de Fronteira	151
7.2.1	Condição de Dirichlet não homogênea	151
7.2.2	Condição de Neumann	151
7.2.3	Condições mistas Dirichlet-Neumann	153
7.3	Outros Problemas Elípticos	154
7.3.1	Bilaplaciano (equação das placas)	154
7.3.2	Elasticidade linear	155
IV	Apêndices	158
8	Complementos de apoio	159
8.1	Fórmulas Integrais	159
8.2	Espaços de Hilbert e Dualidade	162
8.3	Algumas noções em Espaços de Sobolev	164
8.3.1	Espaços L^p	164
8.3.2	O espaço $H^1(a, b)$	165
8.3.3	O espaço $H^1(\Omega)$ com $\Omega \subset \mathbf{R}^d$	168
8.3.4	Espaços de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$	169
8.3.5	Traço de uma função	171
8.3.6	Dualidade - Espaços de Sobolev negativos, $H^{-s}(\Omega)$	173
8.3.7	Resultados em espaços de Sobolev	174

9	Exercícios	175
9.1	Diferenças finitas	175
9.2	Elementos Finitos	181

Prefácio

O presente texto resulta de um texto anterior de 2002, usado para a disciplina de Métodos Numéricos para Problemas Elípticos, disciplina que foi leccionada no Instituto Superior Técnico, no quarto ano da Licenciatura em Matemática Aplicada e Computação para os alunos que seguiam a especialização em Análise Numérica e também como cadeira introdutória para a mesma especialização no Mestrado em Matemática Aplicada. Actualmente, essa disciplina deu lugar a Análise Numérica de Equações Diferenciais Parciais, onde o conteúdo programático inclui também uma parte de problemas de evolução.

A escolha foi dividir a matéria em dois grandes tópicos - Métodos de Diferenças Finitas e Método dos Elementos Finitos. Na primeira parte inclui-se não apenas a aproximação de problemas elípticos, mas também problemas de evolução, concentrando-se no caso unidimensional em espaço. Na segunda parte é apenas abordado o caso estacionário, por uma questão de exiguidade temporal. Esta divisão em duas partes é também uma divisão conceptual entre a aproximação forte, ilustrada pelo método das diferenças finitas, e aproximação fraca, ilustrada pelo método dos elementos finitos.

Como o assunto é demasiado vasto, foram feitas algumas simplificações do ponto vista teórico, já que um dos objectivos da cadeira é também a implementação computacional efectiva. A implementação computacional dos métodos não é trivial para o caso bidimensional ou tridimensional, especialmente quando se consideram domínios arbitrários; aqui é apenas focado com maior detalhe o caso bidimensional. A teoria matemática dos elementos finitos não é trivial e necessita de utilizar conhecimentos em espaços de Sobolev, pelo que é feita uma introdução teórica (grande parte em apêndice).

É claro que neste curso introdutório não há tempo para introduzir outros métodos numéricos, como o método dos elementos de fronteira, nem tão pouco há tempo para entrar num maior detalhe acerca do próprio método dos elementos finitos. O objectivo do curso é apenas introduzir conhecimentos que poderão (e deverão...) ser complementados através da leitura de obras referenciadas na bibliografia.

Carlos J. S. Alves

Parte I

Introdução

Capítulo 1

Noções gerais

Um objectivo deste capítulo inicial é apresentar alguns problemas no quadro das equações com derivadas parciais, começando por apresentar a clássica distinção entre problemas elípticos, parabólicos e hiperbólicos através da classificação do operador diferencial envolvido e também através dos exemplos mais clássicos, com aplicações directas em problemas físicos. O outro objectivo é apresentar algumas noções de aproximação de operadores diferenciais, recorrendo à noção de delta de Dirac, enquanto elemento base dessas aproximações no sentido clássico, e ao mesmo tempo obter algumas aproximações que serão úteis para o método das diferenças finitas.

1.1 Exemplos de Equações Diferenciais Parciais

Uma relação entre formas quadráticas e as equações diferenciais parciais de segunda ordem, pode ser estabelecida de forma *naïve* motivando a distinção habitual entre problemas elípticos, parabólicos e hiperbólicos. As variáveis nas derivadas parciais são substituídas por variáveis cartesianas e podemos ver que isso corresponde à classificação habitual em cónicas.

Vejam os alguns dos exemplos mais significativos nas aplicações, e que correspondem a exemplos clássicos de operadores diferenciais elípticos, parabólicos ou hiperbólicos.

1.1.1 Exemplo 1 – Equação de Poisson

O operador diferencial elíptico mais simples e importante é o *operador de Laplace*:

$$\Delta = \partial_1^2 + \dots + \partial_d^2.$$

No caso 2D temos $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2$ e se relacionarmos com $Q(x, y) = x^2 + y^2$, torna-se clara a razão de lhe chamar elíptico.

A equação diferencial associada num domínio (aberto) $\Omega \subset \mathbb{R}^d$,

$$\Delta u = f, \text{ em } \Omega \tag{1.1}$$

é conhecida como *Equação de Poisson*.

No caso homogéneo, $f = 0$, a equação $\Delta u = 0$ é conhecida como *Equação de Laplace* e as suas soluções são também designadas *funções harmónicas*.

Distingue-se entre *problemas interiores* em que o domínio Ω é limitado, e *problemas exteriores*, em que o domínio Ω é o complementar de um domínio limitado. No primeiro caso

impõem-se apenas condições sobre a fronteira, e no segundo caso, há que considerar um comportamento assintótico no infinito, o que corresponde a considerar o infinito como uma fronteira artificial.

Condições de Fronteira. Para equações diferenciais de segunda ordem, as condições de fronteira habituais são:

- Condição de Dirichlet: $u = g$, sobre $\partial\Omega$
- Condição de Neumann: $\partial_{\mathbf{n}}u = g$, sobre $\partial\Omega$

O símbolo $\partial_{\mathbf{n}}$ designa a derivada normal, definida pelo produto interno do vector normal $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_d)$ com o gradiente $\nabla = (\partial_1, \dots, \partial_d)$

$$\partial_{\mathbf{n}}u = \nabla u \cdot \mathbf{n} \quad (1.2)$$

Por convenção, a normal \mathbf{n} aponta sempre para o exterior de Ω . Trata-se de uma função definida em cada ponto da fronteira $\partial\Omega$ que toma valores vectoriais. Está bem definida se a fronteira for regular (variedade C^1 de dimensão $d-1$), ou pelo menos seccionalmente regular (o conjunto dos pontos onde não está bem definida tem medida nula). Consideram-se ainda *condições de fronteira mistas*, em que numa parte da fronteira é imposta a condição de Dirichlet e na restante Neumann, ou ainda *condições de Robin*, da forma $\partial_{\mathbf{n}} - Zu = g$, em que Z é uma função não negativa.

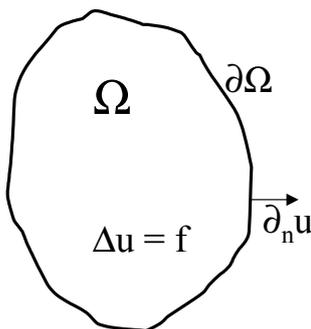


Figura 1.1.1: Ilustração de um problema de Poisson com condições de Neumann na fronteira.

As equações de Poisson servem de modelo a muitos fenómenos, nomeadamente electrostática (nesse caso u é o potencial electrostático e trata-se da Lei de Ohm para a condutividade eléctrica), termodinâmica (nesse caso u é a temperatura e trata-se da Lei de Fourier da condutividade térmica), concentração química (sendo u a concentração química, trata-se da Lei da Difusão de Fick), escoamento de fluidos perfeitos (nesse caso u será um potencial e ∇u o campo de velocidades), etc. Trata-se de um modelo para situações de equilíbrio.

1.1.2 Exemplo 2 - Equação do Calor

Um exemplo de equação diferencial parabólica está associada com o *operador de difusão*:

$$Du = \partial_t u - \kappa \Delta u, \quad (1.3)$$

em que κ é uma constante de difusão. Esta equação tem uma forma mais geral considerando κ como função, $Du = \partial_t u - \nabla \cdot (\kappa \nabla u)$, mas iremos concentrar-nos no caso constante.

O operador D é designado por parabólico pois é facilmente associado a uma forma quadrática parabólica. No caso 1D+1T, $D = \partial_t u - \kappa \partial_x^2$ e $Q(x, t) = t - \kappa x^2 = 0$ corresponde à equação da parábola $t = \kappa x^2$; e no caso 2D+1T, $D = \partial_t u - \kappa(\partial_x^2 + \partial_y^2)$ temos $Q(x, y, t) = t - \kappa(x^2 + y^2) = 0$ associado à equação do parabolóide $t = \kappa(x^2 + y^2)$.

A equação do calor

$$\partial_t u - \Delta u = f \quad (1.4)$$

modela a evolução da temperatura de um corpo. No caso homogéneo, $f = 0$, assume-se que não há fontes de calor internas.

Para além disso, pode também servir para modelar a concentração química de produtos (o que é útil em engenharia do ambiente, para controle de poluição... nesse caso considera-se também uma parte de advecção). A equação do calor é também utilizada em modelos financeiros (equações de Black-Scholes), por via da teoria de equações diferenciais estocásticas. Finalmente, notamos ainda a semelhança com a equação de Schrödinger $i\hbar \partial_t u - \Delta u = V$, no caso homogéneo ou quando o potencial V não depender de u .

Condições Iniciais. Como se trata de uma equação de evolução, a variável temporal é substantivamente diferente das variáveis espaciais. Assim, normalmente o domínio é da forma $\Omega \times]t_0, +\infty[$ em que Ω representa o domínio espacial, t_0 representa o instante inicial, podendo ainda considerar-se um instante final $t_f > t_0$. A fronteira tem assim duas componentes, uma espacial $\partial\Omega \times]t_0, +\infty[$ e uma temporal $\bar{\Omega} \times \{t_0\}$. Na parte temporal é imposta uma condição de valores iniciais, da forma

$$u(x, t_0) = u_0(x), \quad (x \in \bar{\Omega}),$$

e na parte da fronteira espacial consideramos, para o problema de Dirichlet,

$$u(x, t) = u_\Gamma(x, t), \quad (x, t) \in \partial\Omega \times]t_0, +\infty[,$$

sendo conveniente compatibilizar os valores em $\partial\Omega$, $u_0(x) = u_\Gamma(x, 0^+)$ para $x \in \partial\Omega$.

1.1.3 Exemplo 3 - Equação das Ondas

Um exemplo de operador diferencial hiperbólico é o *operador de d'Alembert*:

$$\square u = \partial_t^2 u - \Delta u \quad (1.5)$$

em que, por exemplo, no caso 1T+2D, $\square = \partial_t^2 u - (\partial_x^2 + \partial_y^2)$ está associado a $Q(t, x, y) = t^2 - (x^2 + y^2)$, o que define um hiperbolóide.

A equação das ondas

$$\partial_t^2 u - \Delta u = f \quad (1.6)$$

modela a evolução da amplitude das ondas acústicas ao longo do tempo. No caso homogéneo, $f = 0$, assume-se que não há fontes acústicas internas que perturbem essa evolução. O domínio pode ser considerado, tal como no caso anterior, $\Omega \times]t_0, +\infty[$, com eventual limitação por um instante final t_f . Relativamente às condições de fronteira, este caso é semelhante ao da equação

das ondas, mas como o operador diferencial envolve uma segunda derivada no tempo, há duas condições iniciais a impor,

$$\begin{aligned} u(x, t_0) &= u_0(x), & (x \in \bar{\Omega}), \\ \partial_t u(x, t_0) &= u_1(x), & (x \in \bar{\Omega}). \end{aligned}$$

Equações semelhantes a esta, mas em que o laplaciano é substituído por outros operadores diferenciais vectoriais (Maxwell, Lamé), modelam a propagação de ondas electromagnéticas ou ondas elásticas (respectivamente).

1.2 Aproximação de Operadores Lineares

Recordamos a noção de operador linear $A : X \rightarrow Y$, entre dois espaços de Banach X, Y , e a norma de operadores associada

$$\|A\|_{L(X,Y)} = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_Y}{\|x\|_X}. \quad (1.7)$$

Alguns dos operadores que iremos considerar estão definidos em espaços $C^p(V)$, em que V é um conjunto compacto em \mathbb{R}^d . Recordamos normas associadas a estes espaços de funções

$$\|f\|_{C^p(V)} = \max_{x \in V} \|f(x)\| + \max_{x \in V} \|\nabla f(x)\| + \dots + \max_{x \in V} \|\nabla^p f(x)\| \quad (1.8)$$

em que ∇^p representa o tensor $\partial_{i_1} \cdots \partial_{i_p}$ das derivadas parciais com índices $i_1, \dots, i_p \in \{1, \dots, p\}$. No caso unidimensional, temos simplesmente

$$\|f\|_{C^p(V)} = \max_{x \in V} \|f(x)\| + \max_{x \in V} \|\partial f(x)\| + \dots + \max_{x \in V} \|\partial^p f(x)\| \quad (1.9)$$

em que ∂ representa o operador de derivação.

Para efeitos de aproximar operadores A que actuem sobre um domínio $D(A) \subset C(V)$, interessa-nos definir operadores simples, que podem servir como base dessas aproximações, em particular iremos considerar deltas de Dirac.

Definição 1.2.1 *Dado um ponto $x \in V$, e funções $f \in C(V)$, o operador linear*

$$\delta_x(f) = f(x), \quad (1.10)$$

é designado delta de Dirac, centrado em x .

Em muitos casos as aproximações são combinações lineares de deltas de Dirac

$$\tilde{A} = \alpha_0 \delta_{x_0} + \dots + \alpha_n \delta_{x_n},$$

Regras numéricas bem conhecidas são caso particular de aproximações de operadores diferenciais e integrais por deltas de Dirac. Essas aproximações são normalmente deduzidas de forma a que a aproximação seja exacta para polinómios de um determinado grau. Pela expansão em série de Taylor, é expectável que a fórmula sendo válida para polinómios de um determinado grau, permita uma boa aproximação para funções regulares, ou analíticas. Designaremos por $\mathcal{A}(V)$ o espaço de funções analíticas num conjunto $V \subset \mathbb{R}^d$.

No que se segue iremos admitir que $\mathcal{A}(V) \subset D(A)$, ou seja que os operadores estão definidos para funções analíticas.

Definição 1.2.2 Seja $d = 1$. Dizemos que uma aproximação \tilde{A} de um operador linear A tem pelo menos grau m se for exacta para monómios de grau menor ou igual a m . Ou seja,

$$\tilde{A}(\#^k) = A(\#^k), \quad (k = 0, \dots, m), \quad (1.11)$$

com $\#^k(x) = x^k$. Uma aproximação com pelo menos grau m diz-se ter grau m se não tiver grau $m + 1$.

No caso de dimensão $d > 1$, a definição é semelhante entendendo $\#^k = \#_1^{k_1} \dots \#_d^{k_d}$.

Deve distinguir-se grau, ou grau soma, de grau máximo. No caso do grau soma exige-se $|k|_1 = k_1 + \dots + k_d \leq m$, enquanto no caso de grau máximo exige-se $|k|_\infty = \max\{k_1, \dots, k_d\} \leq m$.

Observação: No caso multidimensional, temos duas classificações de graus de polinómios, em que a noção grau máximo m inclui todos os polinómios de grau m , pois $|k|_\infty \leq |k|_1 \leq m$. Exigir que uma fórmula tenha grau máximo m é mais forte que exigir grau m . Por exemplo se a aproximação tiver grau máximo 3, isso inclui a verificação para um monómio de grau 5, por exemplo, $\#_1^3 \#_2^2(x) = x_1^3 x_2^2$.

1.2.1 Aproximação usando Coeficientes Indeterminados.

O método mais simples que permite obter aproximações de um certo grau, consiste em definir uma combinação cujos coeficientes são determinados pela resolução de um sistema linear. Por exemplo, consideramos \tilde{A} uma aproximação que é combinação linear de operadores dados (normalmente mais simples) \tilde{A}_j ,

$$\tilde{A} = \sum_{j=0}^n \alpha_j \tilde{A}_j \quad (1.12)$$

Os coeficientes $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ podem ser determinados pela resolução do sistema linear

$$A(\varphi_i) = \tilde{A}(\varphi_i) \iff A(\varphi_i) = \sum_{j=0}^n \alpha_j \tilde{A}_j(\varphi_i) \quad (i = 0, \dots, n)$$

em que φ_k são funções base de teste, e para efeitos de impor um grau n , serão os monómios $\#^k$ até grau n .

Matriz de Vandermonde.

A aplicação do método dos coeficientes indeterminados no caso unidimensional com monómios, leva a um sistema de Vandermonde, considerando aproximações por operadores $\tilde{A}_j = \delta_{y_j}$ definidos por deltas de Dirac em nós y_0, \dots, y_m pré-estabelecidos. Neste caso, $\tilde{A}_j(\varphi_i) = \delta_{y_j}(\#^i) = \#^i(y_j) = y_j^i$, e portanto, verificando para os monómios $\#^0, \dots, \#^n$, obtemos um sistema $(n + 1) \times (m + 1)$

$$\begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_0^n & \dots & y_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(\#^0) \\ \vdots \\ A(\#^n) \end{bmatrix} \quad (1.13)$$

em que a matriz do sistema $M = [y_j^i]$ é habitualmente quadrada ($n = m$), e é designada matriz de Vandermonde (transposta). Nesse caso, o sistema, ainda que mal condicionado, é invertível,

permitindo obter os coeficientes que definem uma aproximação \tilde{A} do operador A , que tem pelo menos grau n . É ainda possível considerar como incógnitas os próprios nós y_j , o que permite obter graus $n > m$. No entanto, nesse caso o sistema deixa de ser linear (e a sua apresentação matricial não terá significado útil).

Observação: Uma aproximação de grau m não significa uma aproximação de ordem m . Por exemplo, no caso de integração numérica, as aproximações de grau m correspondem normalmente a aproximações de ordem $m + 1$. Na derivação numérica, uma aproximação de grau m para a primeira derivada tem normalmente ordem m , mas para a segunda derivada tem ordem $m - 1$. Como regra empírica (podendo ser enunciada mais precisamente): uma aproximação de grau m para a derivação de ordem q terá normalmente uma ordem de aproximação $m - q + 1$.

Exemplo conhecido:

a) *Regra de quadratura dos trapézios simples.*

Relembramos o caso em que o operador considerado consiste na integração de funções contínuas $f \in C([a, b], Y)$,

$$I(f) = \int_a^b f(t)dt.$$

Se procurarmos uma aproximação com os nós de integração a e b , na forma $\tilde{I} = \alpha\delta_a + \beta\delta_b$, que tenha pelo menos grau 1, obtemos o sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(\#^0) \\ I(\#^1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b - a \\ \frac{1}{2}(b^2 - a^2) \end{bmatrix}$$

cuja solução $\alpha = \beta = \frac{1}{2}(b - a)$, dá exactamente a Regra dos trapézios. Portanto o operador integral $I = \int_a^b \cdot$ pode ser rudemente aproximado por uma combinação linear de 2 deltas de Dirac

$$\tilde{I} = \frac{(b - a)}{2}(\delta_a + \delta_b).$$

Esta aproximação pode ser concretizada exactamente para funções em $D(I) = C^2[a, b]$, através da expressão de erro (∂ representa o operador de derivação),

$$\exists_{\xi \in (a,b)} : I - \tilde{I} = -\frac{(b - a)^3}{12} \delta_\xi \partial^2$$

b) *Regra de quadratura dos trapézios composta.*

Como é bem conhecido, usando subintervalos de comprimento $h = (b - a)/n$, definindo $n + 1$ nós, $x_k = a + kh$, $k \in \{0, 1, \dots, n\}$, temos ainda a regra dos trapézios composta em $C^2[a, b]$,

$$\exists_{\xi_n \in (a,b)} : \int_a^b \cdot = (b - a) \left(\frac{1}{n} \sum_{k=0}^n 1_k^* \delta_{x_k} - \frac{h^2}{12} \delta_{\xi_n} \partial^2 \right),$$

em que 1_k^* representa uma função característica para o conjunto dos índices $\bar{J} = \{0, \dots, n\}$, mais concretamente,

$$1_k^* = \begin{cases} 1, & k \in J = \{1, \dots, n - 1\} \\ 1/2, & k \in \partial J = \{0, n\} \\ 0, & k \notin \bar{J} \end{cases}.$$

O termo de erro com a segunda derivada permite assim garantir que a fórmula tem grau 1, e também que é possível, para funções C^2 , uma boa aproximação do integral I por uma simples soma ponderada de deltas de Dirac,

$$\tilde{I}_n = h \sum_{k=0}^n 1_k^* \delta_{x_k}.$$

De facto, obtemos uma boa aproximação na norma dos funcionais $\mathcal{L}(C^2[a, b], \mathbb{R})$

$$\left\| I - \tilde{I}_n \right\|_{\mathcal{L}(C^2[a, b], \mathbb{R})} = \left\| -\frac{h^2}{12} \delta_{\xi_n} \partial^2 \right\|_{\mathcal{L}(C^2[a, b], \mathbb{R})} = \frac{h^2}{12} \sup_{\substack{f \neq 0 \\ f \in C^2[a, b]}} \frac{|\delta_{\xi_n} \partial^2 f|}{\|f\|_{C^2[a, b]}} \leq \frac{h^2}{12},$$

resultante de $|f''(\xi_n)| \leq \|f\|_{C^2[a, b]}$.

1.2.2 Aproximação de derivadas

Um outro exemplo conhecido é a aplicação de regras numéricas na aproximação de operadores de derivação. Por exemplo, fixando um ponto z , e sendo $\delta_z \partial f = f'(z)$ o operador de derivação nesse ponto, consideramos as aproximações clássicas $\tilde{\partial}_z$ que, estabelecido um espaçamento $h > 0$, usam como nós $z - h, z, z + h$.

A aplicação do método dos coeficientes indeterminados para a aproximação $\tilde{\partial}_z = \alpha_0 \delta_{z-h} + \alpha_1 \delta_z + \alpha_2 \delta_{z+h}$ leva às equações

$$\begin{cases} \delta_z \partial \#^0 = (\alpha_0 \delta_{z-h} + \alpha_1 \delta_z + \alpha_2 \delta_{z+h})(\#^0) \Leftrightarrow 0 = \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 \\ \delta_z \partial \#^1 = (\alpha_0 \delta_{z-h} + \alpha_1 \delta_z + \alpha_2 \delta_{z+h})(\#^1) \Leftrightarrow 1 = \alpha_0(z-h) + \alpha_1 z + \alpha_2(z+h) \\ \delta_z \partial \#^2 = (\alpha_0 \delta_{z-h} + \alpha_1 \delta_z + \alpha_2 \delta_{z+h})(\#^2) \Leftrightarrow 2z = \alpha_0(z-h)^2 + \alpha_1 z^2 + \alpha_2(z+h)^2 \end{cases}$$

Das duas primeiras equações tem-se $(\alpha_2 - \alpha_0) = \frac{1}{h}$ e há várias possibilidades de aproximações de 1º grau. Por exemplo, $\alpha_0 = 0$ implica $\alpha_2 = \frac{1}{h}$ e $\alpha_1 = -\alpha_2 = -\frac{1}{h}$, o que nos dá as diferenças progressivas, e de forma semelhante $\alpha_2 = 0$ leva às diferenças regressivas. Para obtermos uma aproximação de segundo grau, a terceira equação implica $2z = 2(\alpha_2 - \alpha_0)zh + 2(\alpha_2 + \alpha_0)h^2$, ou ainda $z = z + (\alpha_2 + \alpha_0)h^2 \Leftrightarrow \alpha_2 = -\alpha_0$. A solução é única $\alpha_2 = \frac{1}{2h}$, $\alpha_0 = -\frac{1}{2h}$ e portanto $\alpha_1 = 0$, donde se obtém a fórmula com diferenças centradas. Este sistema dá-nos as três principais aproximações que iremos considerar para a primeira derivada:

Diferenças progressivas

$$\tilde{\partial}_z^+(f) = \frac{f(z+h) - f(z)}{h} = f[z, z+h], \quad (1.14)$$

ou seja $\delta_z \partial$ é aproximado por $\delta_z \tilde{\partial}^+ = \frac{1}{h}(\delta_{z+h} - \delta_z) = \delta[z, z+h]$, com $\tilde{\partial}^+ = \frac{1}{h}(\tau_h - 1)$, em que $\tau_h(f) = f(\# + h)$, e 1 representa a identidade.

Diferenças regressivas.

$$\tilde{\partial}_z^-(f) = \frac{f(z) - f(z-h)}{h}, \quad (1.15)$$

ou seja $\delta_z \partial$ é aproximado por $\delta_z \tilde{\partial}^- = \frac{1}{h}(\delta_z - \delta_{z-h}) = \delta[z-h, z]$, com $\tilde{\partial}^- = \frac{1}{h}(1 - \tau_{-h})$.

Diferenças centradas

$$\tilde{\partial}_z(f) = \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h}, \quad (1.16)$$

ou seja $\delta_z \tilde{\partial}$ é aproximado por $\delta_z \tilde{\partial} = \frac{1}{2h}(\delta_{z+h} - \delta_{z-h}) = \delta[z-h, z+h]$, com $\tilde{\partial} = \frac{1}{2h}(\tau_h - \tau_{-h})$.

É também comum considerar-se metade do espaçamento, ou seja, $\tilde{\partial}_z = \delta[z - \frac{h}{2}, z + \frac{h}{2}]$.

• O método dos coeficientes indeterminados permite obter aproximações, mas não nos dá uma expressão para o erro cometido nessas aproximações. Para esse efeito podemos considerar um outro método, através da expansão de Taylor,

$$\begin{cases} \alpha_0 f(z-h) = \alpha_0 f(z) - \alpha_0 h f'(z) + \alpha_0 \frac{h^2}{2} f''(z) - \alpha_0 \frac{h^3}{3!} f'''(z) + \alpha_0 \frac{h^4}{4!} f''''(\xi^-) \\ \alpha_1 f(z) = \alpha_1 f(z) \\ \alpha_2 f(z+h) = \alpha_2 f(z) + \alpha_2 h f'(z) + \alpha_2 \frac{h^2}{2} f''(z) + \alpha_2 \frac{h^3}{3!} f'''(z) + \alpha_2 \frac{h^4}{4!} f''''(\xi^+) \end{cases}$$

Somando obtemos $\alpha_0 f(z-h) + \alpha_1 f(z) + \alpha_2 f(z+h) = (\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2)f(z) + (\alpha_2 - \alpha_0)hf'(z) + \dots$, ou seja iremos obter as equações nos coeficientes que também se deduziram pelo método dos coeficientes indeterminados, mas haverá ainda uma parte que contém o erro, pois não foram consideradas aproximações. Consoante se pretenda obter a primeira, a segunda ou até a terceira derivada, podemos exigir que os coeficientes sejam 0 ou 1. Por exemplo, para a primeira derivada, para conseguir uma aproximação de 3ª ordem deveríamos obter,

$$(\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2) = 0, \quad (\alpha_2 - \alpha_0)h = 1, \quad (\alpha_0 + \alpha_2)\frac{h^2}{2} = 0, \quad (\alpha_2 - \alpha_0)\frac{h^3}{3!} = 0,$$

o que é impossível, devendo retirar-se a última condição. Assim voltamos a uma aproximação de 2ª ordem onde obtemos novamente $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = -\alpha_0 = \frac{1}{2h}$, podendo escrever-se

$$\frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} = 0 + f'(z) + 0 + \frac{1}{h} \frac{h^3}{3!} f'''(z) + \frac{1}{2h} \frac{h^4}{4!} (f''''(\xi^+) - f''''(\xi^-))$$

que é uma expressão para o erro em $O(h^2)$, pois

$$f'(z) = \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} - \frac{h^3}{6} f'''(z) + \frac{h^3}{48} (f''''(\xi^+) - f''''(\xi^-)).$$

No entanto é claro que neste caso é excessivo expandir até à 4ª ordem, podendo obter-se com uma expansão de 3ª ordem (exercício),

$$f'(z) = \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} - \frac{h^3}{6} f'''(\xi).$$

Por outro lado, se o objectivo for aproximar a segunda derivada, impomos

$$(\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2) = 0, \quad (\alpha_2 - \alpha_0)h = 0, \quad (\alpha_0 + \alpha_2)\frac{h^2}{2} = 1, \quad (\alpha_2 - \alpha_0)\frac{h^3}{3!} = 0,$$

e como $\alpha_2 = \alpha_0$ satisfaz a 1ª e a 4ª equações, é possível obter essa aproximação, com $\alpha_2 = \alpha_0 = h^{-2}$ e $\alpha_1 = -2h^{-2}$. Assim, retiramos

$$\frac{f(z+h) - 2f(z) + f(z-h)}{h^2} = 0 + f''(z) + 0 + \frac{1}{h^2} \frac{h^4}{4!} (f''''(\xi^+) + f''''(\xi^-))$$

e estando a admitir implicitamente $f \in C^4[z - h, z + h]$, pelo Teorema do Valor Intermédio, $\exists \xi \in [z - h, z + h] : f''''(\xi) = \frac{1}{2}(f''''(\xi^+) + f''''(\xi^-))$.

Obtemos assim uma aproximação por **diferenças centradas de segunda ordem**:

$$f''(z) = \frac{f(z+h) - 2f(z) + f(z-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}f''''(\xi), \quad (1.17)$$

que iremos usar ao longo do curso. Esta aproximação pode ser descrita em termos de deltas de Dirac, na forma

$$\tilde{\partial}_z^2 = \frac{1}{h^2}(\delta_{z+h} - 2\delta_z + \delta_{z-h}) = 2\delta[z-h, z, z+h].$$

Observação: A aproximação da 3ª derivada só será possível nestes pontos se incluirmos as derivadas, já que o coeficiente de 1ª ordem não poderá ser nulo se o coeficiente de 3ª ordem não o for.

Exercício 1: Usando o método dos coeficientes indeterminados obter a expressão da aproximação

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

Exercício 2: Mostrar que para funções $f \in C^2[z, z+h]$,

$$\exists_{\xi \in (z, z+h)} : \partial_z - \tilde{\partial}_z^+ = -\frac{h}{2}\delta_\xi \partial^2 \Rightarrow \left\| \partial - \tilde{\partial}^+ \right\|_{\mathcal{L}(C^2[z, z+h], \mathbb{R})} \leq \frac{h}{2}.$$

1.2.3 Expansão simbólica

Escrever as fórmulas em termos de deltas de Dirac pode servir para obter fórmulas de aproximação de derivadas através de uma expansão simbólica. Mais concretamente, começamos por notar que a expansão em série de Taylor com resto de Lagrange de 3ª ordem,

$$\exists_{\xi_x \in (x; x+h)} : f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2f''(x) + \frac{1}{3!}h^3f'''(\xi_x),$$

pode ser escrita

$$\exists_{\xi_x \in (x; x+h)} : \delta_{x+h} = \delta_x(1 + h\partial + \frac{1}{2}h^2\partial^2) + \frac{1}{6}\delta_{\xi_x}h^3\partial^3.$$

A aplicabilidade desta fórmula está restrita, no sentido clássico, para funções $f \in C^3(V_x)$, em que $V_x \supset [x, x+h]$ é uma vizinhança de x , o que se depreende do contexto. Da mesma forma, para funções analíticas, continuando a expansão em série de Taylor, obtemos a fórmula mais interessante

$$\delta_{x+h} = \delta_x \exp(h\partial),$$

porque formalmente,

$$\exp(h\partial) = 1 + h\partial + \frac{1}{2}h^2\partial^2 + \dots$$

Observação: Nexto contexto, poderá ser útil definir

$$\exp_m(x) = \sum_{k=0}^m \frac{x^k}{k!},$$

notando que $\exp_m(x) \rightarrow \exp(x)$, quando $m \rightarrow \infty$. Assim, podemos escrever a expansão de Taylor com resto de Lagrange de ordem m , de uma forma mais reduzida

$$\exists_{\xi_x \in (x; x+h)} : \delta_{x+h} = \delta_x \exp_m(h\partial) + \frac{1}{m!} \delta_{\xi_x} (h\partial)^m.$$

- Recuperando a definição de diferença progressiva, obtemos

$$\delta_z \tilde{\partial}^+ = \frac{1}{h} (\delta_{z+h} - \delta_z) = \frac{1}{h} (\delta_z \exp(h\partial) - \delta_z) \Rightarrow \delta_z \exp(h\partial) = \delta_z (1 + h\tilde{\partial}^+).$$

Da igualdade anterior retiramos $\exp(h\partial) = 1 + h\tilde{\partial}^+$ (1 significa identidade), obtendo

$$h\partial = \log(1 + h\tilde{\partial}^+),$$

em que o logaritmo está definido através da sua série de potências,

$$\log(1 + x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} x^k.$$

Assim, obtemos formalmente a expansão simbólica

$$\partial = \frac{1}{h} \log(1 + h\tilde{\partial}^+) = \frac{1}{h} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} (h\tilde{\partial}^+)^k.$$

Truncando a soma a um termo obtemos $\partial \approx \tilde{\partial}^+$ (o que já conhecíamos). Podemos agora obter aproximações superiores, com dois termos:

$$\begin{aligned} \partial &\approx \tilde{\partial}^+ - \frac{1}{2h} (h\tilde{\partial}^+)^2 = \tilde{\partial}^+ - \frac{h}{2} (\tilde{\partial}^+)^2 = \tilde{\partial}^+ - \frac{1}{2h} (\tau_h - 1)^2 \\ &= \frac{1}{h} (\tau_h - 1) - \frac{1}{2h} (\tau_{2h} - 2\tau_h + 1) = \frac{1}{2h} (4\tau_h - \tau_{2h} - 3 \cdot 1) \end{aligned}$$

o que corresponde a uma conhecida aproximação de segunda ordem,

$$f'(x) = \frac{4f(x+h) - f(x+2h) - 3f(x)}{2h} + \frac{h^2 f'''(\xi)}{3}.$$

Continuando com a expansão podemos obter outras fórmulas de ordem superior, neste caso usando os nós $x, x+h, x+2h, \dots$

- Para obter fórmulas centradas, usamos a relação com diferenças centradas, ou seja

$$\delta_z \tilde{\partial} = \frac{1}{2h} (\delta_{z+h} - \delta_{z-h}) = \frac{1}{h} \delta_z \left(\frac{\exp(h\partial) - \exp(-h\partial)}{2} \right) \Rightarrow \delta_z \sinh(h\partial) = \delta_z (h\tilde{\partial}).$$

Em vez do logaritmo, obtemos o inverso do seno hiperbólico,

$$\partial = h^{-1} \sinh^{-1}(h\tilde{\partial})$$

em que

$$\sinh^{-1}(x) = x - \frac{1}{2 \times 3} x^3 + \frac{1 \times 3}{2 \times 4 \times 5} x^5 - \frac{1 \times 3 \times 5}{2 \times 4 \times 6 \times 7} x^7 + \dots$$

obtendo-se como primeira aproximação exactamente $\partial \approx \tilde{\partial}$, que neste caso tem ordem 2. Continuando a expansão, obtemos $\partial \approx \tilde{\partial} - \frac{h^2}{6}\tilde{\partial}^3$, que já é uma fórmula de ordem 4. Convém notar que $-\frac{h^2}{6}\tilde{\partial}^3$ é ainda semelhante ao termo de erro que se obtém para a aproximação por diferenças centradas (substituindo $\tilde{\partial}^3$ por $\partial^3\dots$), o mesmo se passava com a aproximação anterior por diferenças progressivas, não só para o primeiro termo, mas também para a fórmula deduzida, já que o termo seguinte da expansão logarítmica será $\frac{1}{3h}(h\tilde{\partial}^+)^3 = \frac{h^2}{3}(\tilde{\partial}^+)^3$. Podemos ver que esta expansão simbólica permite não apenas obter as fórmulas, mas também indicar as expressões dos erros, truncando as séries com o termo de Lagrange.

Parte II

Método das Diferenças Finitas

Capítulo 2

Diferenças Finitas em Problemas Elípticos

O objectivo principal desta parte é permitir uma familiarização com uma técnica extremamente simples, mas frequentemente eficaz, para a aproximação da solução de problemas de equações com derivadas parciais — o denominado *método das diferenças finitas* (FDM - *finite difference method*).

Uma das principais desvantagens que os métodos de diferenças finitas apresentam diz respeito à discretização espacial do domínio, que normalmente fica condicionada a uma grelha reticulada. Este tipo de desvantagem não aparece numa discretização temporal, pelo que o uso de técnicas relacionadas com diferenças finitas continua a ser mais popular em problemas de evolução, nomeadamente através de uma ligação com outros métodos apropriados para discretizações espaciais.

Iremos concentrar-nos no caso de operadores diferenciais lineares de segunda ordem, já que modelam uma parte considerável dos problemas elípticos. Todo o destaque será dado à equação de Laplace (ou Poisson), já que o Laplaciano é o operador elíptico mais simples que encontramos. Algumas considerações teóricas serão introduzidas, de forma a que se possa estabelecer melhor uma ponte entre o problema discreto e o problema contínuo. Nomeadamente alguns processos construtivos para a obtenção de uma solução explícita serão apresentados, não apenas com o intuito de permitir uma comparação (por exemplo, computacional) com soluções exactas, mas também para que estejam presentes outras possibilidades de obter a solução.

Um operador diferencial linear de segunda ordem da forma, escrito na forma da divergência,

$$\mathcal{A}u = - \sum_{i,j=1}^d \partial_j (a_{ij} \partial_i u) + \sum_{i=1}^d b_i \partial_i u + c u, \quad (2.1)$$

ou escrito na forma usual,

$$\mathcal{A}u = - \sum_{i,j=1}^d a_{ij} \partial_{ij} u + \sum_{i=1}^d B_i \partial_i u + c u, \quad (2.2)$$

com $B_i = b_i - \sum_{j=1}^d \partial_j a_{ij}$. Consideramos normalmente $a_{ij} = a_{ji}$. Dizemos que \mathcal{A} é um *operador*

elíptico se existir $\alpha > 0$ tal que

$$\sum_{i,j=1}^d a_{ij}v_iv_j \geq \alpha|v|^2, \forall v \in \mathbb{R}^d. \quad (2.3)$$

Repare-se que isto corresponde a considerar que a matriz dos coeficientes a_{ij} é definida positiva, o que nos leva a valores próprios positivos e é consistente com a relação estabelecida anteriormente com as cónicas, neste caso as elipses. Notamos ainda que no caso em que os coeficientes são funções pode ocorrer que a propriedade de elipticidade seja verificada em certos pontos e noutros não.

O exemplo óbvio de operador elíptico é $\mathcal{A}u = -\Delta u$, considerando $a_{ij} = \delta_{ij}$, e os restantes coeficientes nulos. Grande parte das propriedades dos operadores elípticos é deduzida inicialmente no caso mais simples, o do operador de Laplace, que irá assim constituir o assunto principal deste texto.

2.1 Equação de Laplace/Poisson

Como já fizémos referência, a equação de Laplace descreve estados de equilíbrio. Vejamos como podemos deduzir esta equação a partir de algumas considerações físicas. Consideremos u representando uma certa densidade (segundo as várias interpretações físicas em que se aplica) e consideremos que é conservativo o fluxo \mathbf{F} (quantidade proporcional ao gradiente, ou seja $\mathbf{F} = a\nabla u$) através da fronteira $\partial\omega$ de qualquer subconjunto aberto ω do domínio Ω , ou seja¹,

$$\int_{\partial\omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} = 0, \text{ para qualquer } \omega \subset \Omega,$$

então, pelo teorema da divergência

$$\int_{\omega} \nabla \cdot \mathbf{F} = 0, \text{ para qualquer } \omega \subset \Omega.$$

Como os subconjuntos ω são arbitrariamente pequenos, isto corresponde a estabelecer a equação pontual

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = 0, \text{ em } \Omega$$

ou seja, a equação de Laplace, $\nabla \cdot (a\nabla u) = 0$, que no caso de a ser uma função constante se resume a

$$\Delta u = 0, \text{ em } \Omega.$$

Na sua forma não homogénea, isto é, $\Delta u = f$, é denominada *Equação de Poisson*.

¹Caso não se considere esta conservação, assume-se que há uma compensação ao fluxo que se traduz numa média nesse subconjunto, ou seja

$$\int_{\partial\omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} = \int_{\omega} f,$$

obtendo-se assim a equação de Laplace não homogénea

$$\Delta u = f,$$

designada equação de Poisson.

Por vezes escreve-se $-\Delta u = f$, ou até $-\Delta u = 0$, consistente com a definição de operador elíptico.

É claro que a equação de Laplace colocada em todo o espaço e sem outras restrições tem uma infinidade de soluções possíveis, começando pela solução trivial $u = 0$, ou pelos polinômios de primeiro grau. Torna-se necessário impôr condições suplementares, de forma a especificar qual a solução pretendida. Habitualmente essas condições são impostas na fronteira do domínio $\partial\Omega$, e no caso de considerarmos domínios ilimitados também devemos impor condições na 'outra fronteira', no infinito, através de um comportamento assintótico.

Observação: Convém lembrar que em \mathbb{R}^2 é extremamente fácil encontrar funções que verifiquem a equação de Laplace (*funções harmônicas*), através do isomorfismo de \mathbb{R}^2 com o corpo dos complexos \mathbb{C} . Com efeito, sendo $z = x + iy$, é bem conhecido que qualquer função de variável complexa $f(z) = u(z) + iv(z)$, que seja holomorfa, verifica as condições de Cauchy-Riemann, e consequentemente verifica a equação de Laplace.

Isto permite um processo extremamente fácil de encontrar funções harmônicas em \mathbb{R}^2 , e em particular concluímos, pelo facto dos polinômios serem funções holomorfas, que a sua parte real ou a sua parte imaginária é uma função que verifica a equação de Laplace – obtêm-se assim *polinômios harmônicos*. Por exemplo,

$$x = \operatorname{Re}(z), y = \operatorname{Im}(z); x^2 - y^2 = \operatorname{Re}(z^2), 2xy = \operatorname{Im}(z^2); x^3 - 3xy^2 = \operatorname{Re}(z^3), 3x^2y - y^3 = \operatorname{Im}(z^3), \text{ etc...}$$

são polinômios harmônicos. Ou ainda, $e^x \cos(y) = \operatorname{Re}(e^z)$, $e^x \sin(y) = \operatorname{Im}(e^z)$ são também funções harmônicas.

Interessa-nos saber em que circunstâncias podemos assegurar a existência, a unicidade e a dependência contínua dos dados, três questões que se colocam em qualquer problema de equações diferenciais – dizendo-se nesse caso que se trata de um problema bem posto (no sentido de Hadamard).

Definição 2.1.1 *Um problema diz-se bem posto se:*

(i) *existe solução; (ii) a solução é única; (iii) a solução depende continuamente dos dados (numa certa norma).*

2.1.1 Resultados elementares

Antes de passarmos ao caso com várias variáveis, analisemos o que se passa com uma única variável, em que o correspondente à equação de Laplace é a equação diferencial ordinária $u'' = 0$.

Caso unidimensional, $u'' = 0$.

O caso unidimensional é um caso trivial mas que aponta algumas características. A equação $u'' = 0$, que é uma equação diferencial ordinária com equação característica associada $r^2 = 0$. Essa equação tem uma raiz dupla $r_1 = r_2 = 0$, o que significa que a fórmula geral é dada por

$$u(x) = Ax + B$$

em que as constantes podem ser determinadas por condições na fronteira do domínio, que será um intervalo.

Se considerarmos o problema no intervalo $\Omega =]a, b[$,

$$u''(x) = 0, \forall x \in]a, b[,$$

as condições de fronteira correspondentes são colocadas nos extremos a e b , já que $\partial]a, b[= \{a, b\}$.

Problema de Dirichlet.

Corresponde a impor $u(a) = \alpha$, $u(b) = \beta$, e as constantes A, B podem ser determinadas resolvendo o sistema

$$\begin{cases} Aa + B = \alpha \\ Ab + B = \beta \end{cases} \quad \text{ou seja} \quad \begin{bmatrix} a & 1 \\ b & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

que tem solução única, já que $a \neq b$. A solução é a recta que une os extremos,

$$u(x) = \alpha + \frac{x-a}{b-a}(\beta - \alpha).$$

Problema misto Dirichlet-Neumann.

Consideramos, por exemplo, $u(a) = \alpha$, $u'(b) = \beta$, e as constantes A, B surgem da resolução de

$$\begin{cases} Aa + B = \alpha \\ A = \beta \end{cases} \quad \text{ou seja} \quad \begin{bmatrix} a & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

que tem a solução única $u(x) = \alpha + \beta(x - a)$.

Problema de Neumann.

Consideramos $u'(a) = \alpha$, $u'(b) = \beta$. Aqui surge um pequeno problema, pois ficamos com as condições

$$\begin{cases} A = \alpha \\ A = \beta \end{cases} \quad \text{ou seja} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}.$$

Assim, para que haja solução é preciso uma condição de compatibilidade: $\alpha = \beta$ e nesse caso a constante B é arbitrária, não havendo solução única... ou seja, haverá uma família de soluções $u(x) = \alpha x + B$... podendo-se dizer que $u(x) = \alpha x$ é solução única a menos de uma constante aditiva.

Problema de Cauchy.

Consideramos, por exemplo, $u(a) = \alpha$, $u'(a) = \beta$. Neste caso voltamos a ter o sistema

$$\begin{cases} Aa + B = \alpha \\ A = \beta \end{cases} \quad \text{ou seja} \quad \begin{bmatrix} a & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}.$$

que tem a solução única $u(x) = \alpha + \beta(x - a)$. Neste caso é preciso ter em atenção que as condições colocadas em a determinam perfeitamente a solução do problema, pelo que qualquer condição colocada em b será dispensável e poderá não ser compatível com a solução.

Separação de variáveis

Iremos brevemente rever o processo clássico de separação de variáveis para obter soluções particulares para uma equação diferencial parcial. Consiste em admitir que em determinadas coordenadas a solução pode ser escrita como o produto de de funções que dependem apenas de uma das variáveis. Ao obter soluções desta forma, não resolvemos o problema para qualquer domínio, nem para qualquer condição de fronteira, mas permite ter uma ideia de uma certa classe de soluções e ao mesmo tempo encontrar funções que sirvam de teste para verificar a eficácia de métodos numéricos.

Antes de prosseguir convém lembrar que no caso de termos soluções u_1, \dots, u_m para uma certa equação homogênea $Du = 0$, em que D é um operador diferencial linear, então uma combinação linear $u = \sum_{k=1}^m \alpha_k u_k$ é ainda solução.

Separação em variáveis cartesianas Suponhamos que a solução se pode escrever na forma

$$u(x, y) = v(x)w(y)$$

então

$$0 = \Delta u = v''(x)w(y) + v(x)w''(y)$$

ou seja, supondo que $v, w \neq 0$

$$0 = \frac{v''(x)}{v(x)} + \frac{w''(y)}{w(y)} \Leftrightarrow \frac{v''(x)}{v(x)} = -\frac{w''(y)}{w(y)}$$

e como as funções de x não dependem de y podemos igualar a uma constante

$$\frac{v''(x)}{v(x)} = C, \quad \frac{w''(y)}{w(y)} = -C$$

o que nos leva ao sistema

$$\begin{cases} v''(x) - Cv(x) = 0 \\ w''(y) + Cw(y) = 0 \end{cases}$$

cuja solução geral dá, se $C = \mu^2 > 0$ (resultante da eq. característica $r^2 - C = 0 \Leftrightarrow r = \pm\sqrt{C} = \pm\mu$)

$$\begin{cases} v(x) = A_1 e^{\mu x} + A_2 e^{-\mu x} \\ w(y) = B_1 \cos(\mu y) + B_2 \sin(\mu y) \end{cases} \quad (2.4)$$

(o caso $C < 0$ seria análogo, trocando v com w) podemos agora tentar ajustar as constantes de forma a que sejam verificadas condições de fronteira constantes... pois nesse caso também haveria apenas quatro constantes a determinar.

Da outra hipótese, $C = 0$, retiramos

$$\begin{cases} v(x) = A_1 + A_2 x \\ w(y) = B_1 + B_2 y. \end{cases}$$

Claro que usando soluções do tipo

$$u_m(x, y) = e^{mx} \cos(my)$$

através de combinações lineares concluímos que, por exemplo,

$$u(x, y) = \sum_{m=1}^M \alpha_m e^{mx} \cos(my)$$

ainda é uma função harmónica. É assim possível obter uma função harmónica que verifique $u = g$ num segmento S , em que o valor de x é constante, assumindo que g admite desenvolvimento em série de Fourier. No entanto ainda que esse segmento não defina a fronteira de um domínio aberto limitado, e portanto não se adequa aos problemas colocados anteriormente, é possível usar esta ideia com outro tipo de coordenadas.

Separação em variáveis polares Ao considerarmos coordenadas polares, escrevendo

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta,$$

fica claro que se r for constante e θ variar em $[0, 2\pi[$ define-se a fronteira da bola $B(0, r)$.

Podemos agora pensar em $u(x, y)$ como $u(r, \theta)$ através das correspondências

$$\begin{aligned} T : (r, \theta) &\longrightarrow (x, y) = (r \cos \theta, r \sin \theta) \\ T^{-1} : (x, y) &\longrightarrow (r, \theta) = (\sqrt{x^2 + y^2}, \arccos(\frac{x}{r})) \end{aligned}$$

Sendo $u(r, \theta) = u(T^{-1}(x, y))$, após alguns cálculos, é possível mostrar que o laplaciano em coordenadas polares se escreve na seguinte forma:

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2.$$

Portanto se considerarmos uma separação de variáveis $u(r, \theta) = v(r)w(\theta)$, de $\Delta u = 0$ iremos obter a equação

$$v''w + \frac{1}{r}v'w + \frac{1}{r^2}vw'' = 0.$$

Supondo que $v, w \neq 0$, dividindo por vw e multiplicando por r^2 obtemos

$$r^2 \frac{v''}{v} + r \frac{v'}{v} = -\frac{w''}{w}.$$

Como o primeiro membro depende apenas de r e o segundo apenas de θ , a igualdade só faz sentido se o resultado for uma constante, que designaremos por C . Teremos portanto duas equações

$$\begin{cases} r^2 \frac{v''}{v} + r \frac{v'}{v} = C \\ -\frac{w''}{w} = C \end{cases} \quad \begin{cases} r^2 v'' + r v' - C v = 0 \\ w'' + C w = 0 \end{cases}$$

Começemos por examinar a equação em w . As possíveis soluções virão da equação característica $\rho^2 + C = 0$

$$\begin{cases} w(\theta) = A\theta + B & \text{se } C = 0 \\ w(\theta) = Ae^{-\sqrt{-C}\theta} + Be^{\sqrt{-C}\theta} & \text{se } C < 0 \\ w(\theta) = A \cos(\sqrt{C}\theta) + B \sin(\sqrt{C}\theta) & \text{se } C > 0 \end{cases}$$

ora, apenas a última possibilidade nos dá uma função w periódica, e de forma a que $w(0) = w(2\pi)$ é preciso que $C = m^2$ para um certo $m > 0$ inteiro.

Quanto à equação

$$r^2 v'' + r v' - m^2 v = 0$$

podemos procurar as suas soluções na forma $v(r) = r^p$, verificando-se

$$p(p-1)r^2 r^{p-2} + p r r^{p-1} - m^2 r^p = 0 \Leftrightarrow p(p-1) + p - m^2 = 0 \Leftrightarrow p^2 = m^2$$

logo $p = \pm m$.

Se $p < 0$, obtemos uma solução $v(r) = r^{-m}$ que explode em zero e que neste contexto não nos interessa.

Se $m = 0$, obtemos $r^2 v'' + r v' = 0$, ou seja $v(r) = A + B \log(r)$ que explode quando $r = 0$... (no fundo este caso contempla a possibilidade da solução fundamental).

Portanto o caso adequado é considerar $p = m \in \mathbb{N}$.

Com efeito podemos pensar agora em escrever a solução na forma

$$u(r, \theta) = \sum_{m \geq 0} v_m(r) w_m(\theta) = \sum_{m \geq 0} r^m (A_m \cos(m\theta) + B_m \sin(m\theta)),$$

ou seja, como série de Fourier.

Ao impor uma condição de Dirichlet $u(R, \theta) = g(\theta)$, podemos procurar a solução resolvendo

$$g(\theta) = \sum_{m \geq 0} R^m (A_m \cos(m\theta) + B_m \sin(m\theta))$$

o que se torna razoavelmente simples se conhecermos a expansão em série de Fourier² de

$$g(\theta) = \sum_{m \geq 0} (a_m \cos(m\theta) + b_m \sin(m\theta)),$$

o que dará

$$A_m = \frac{a_m}{R^m}, \quad B_m = \frac{b_m}{R^m}$$

Para haver convergência uniforme da série de Fourier basta exigir que g seja contínua de variação limitada.

Repare-se que este é um processo de assegurar que *existe solução* para o problema de Dirichlet quando temos como dado uma função de variação limitada numa bola. No entanto, este resultado é restritivo, e podemos estabelecer resultados muito mais gerais ao provarmos, mais à frente, o teorema de Lax-Milgram.

• Por outro lado, notamos que se a função é harmónica em Ω (domínio aberto) então é uma função analítica em Ω .

²A expansão em série de Fourier de uma função contínua de variação limitada $g(\theta)$, com $\theta \in [0, 2\pi]$, é dada através das fórmulas

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta) d\theta, \text{ e para } m > 0 : \\ a_m &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta) \cos(m\theta) d\theta \\ b_m &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta) \sin(m\theta) d\theta \end{aligned}$$

Em \mathbb{R}^2 podemos ver este resultado como uma generalização do que já conhecemos nas funções complexas, em que ser holomorfa implica a analiticidade (a analiticidade em \mathbb{C} implica a analiticidade em \mathbb{R}^2 das partes reais e imaginárias, o contrário pode não acontecer, obviamente). Mas na realidade este resultado é mais geral e aplica-se a uma grande classe de equações diferenciais parciais lineares, *homogêneas*, e com coeficientes *analíticos*. Uma demonstração pode ser obtida através das fórmulas de representação, já que se tratam de integrais paramétricos que usam as soluções fundamentais, que são funções analíticas (excepto na origem). Este resultado é importante, já que implica que o conhecimento da função num aberto de Ω implica o seu conhecimento em Ω , desde que Ω seja conexo. No entanto, a demonstração deste resultado sai fora do âmbito do curso.

Refira-se ainda que no caso de se tratar da equação de Poisson, $\Delta u = f$, a regularidade da solução u no interior de Ω está intimamente ligada à regularidade de f . É de esperar que haja uma maior regularidade, já a soma das segundas derivadas terá que ter a regularidade de f , no entanto, é claro que só podemos esperar que $u \in C^{m+2}$ se $f \in C^m$.

2.1.2 Unicidade

Acabamos de verificar parcialmente a questão de existência, iremos agora abordar a questão de unicidade num caso suficientemente geral, para soluções $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, em que Ω é um domínio regular arbitrário.

Problema de Dirichlet

Para mostrar a unicidade para o caso do problema de Dirichlet, para a equação de Poisson, basta pensar que se tivermos u_1 e u_2 soluções do mesmo problema ($k = 1, 2$)

$$\begin{cases} \Delta u_k = f & \text{em } \Omega \\ u_k = g & \text{em } \partial\Omega \end{cases}$$

então $u = u_1 - u_2$ verifica o problema homogêneo

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{em } \Omega \\ u = 0 & \text{em } \partial\Omega \end{cases}$$

Através da 1ª. fórmula de Green,

$$0 = \int_{\Omega} u \Delta u = \int_{\partial\Omega} u \partial_n u - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla u = - \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \Rightarrow \nabla u = 0 \text{ em } \Omega$$

Assim u é constante em Ω , e como $u = 0$ na fronteira, pela continuidade, $u \in C(\bar{\Omega})$, é claro que $u = 0$ em $\bar{\Omega}$ e portanto $u_1 = u_2$.

Problema de Dirichlet-Neumann

Usando o mesmo raciocínio, sendo u_1 e u_2 soluções do mesmo problema ($k = 1, 2$)

$$\begin{cases} \Delta u_k = f & \text{em } \Omega, \\ u = g_0 & \text{em } \Gamma_0, \\ \partial_n u = g_1 & \text{em } \Gamma_1, \end{cases}$$

em que $\Gamma_0 \cup \Gamma_1 = \partial\Omega$, obtemos para $u = u_1 - u_2$ o problema homogéneo

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{em } \Omega, \\ u = 0 & \text{em } \Gamma_0, \\ \partial_n u = 0 & \text{em } \Gamma_1, \end{cases}$$

e da mesma forma, separando, usando a 1ª fórmula de Green isto implica que u é constante em Ω , e como $u \in C(\bar{\Omega})$, e também $u = 0$ em Γ_0 , é claro que $u = 0$ em $\bar{\Omega}$.

Problema de Neumann

No caso do problema de Neumann, apenas são impostas condições sobre a derivada normal na fronteira, assim temos para duas soluções u_1 e u_2

$$\begin{cases} \Delta u_k = f & \text{em } \Omega \\ \partial_n u_k = g & \text{em } \partial\Omega, \end{cases}$$

e consequentemente para $u = u_1 - u_2$ verifica-se o problema homogéneo

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{em } \Omega \\ \partial_n u = 0 & \text{em } \partial\Omega. \end{cases}$$

Se aplicarmos ainda a 1ª fórmula de Green, podemos concluir que u é constante, mas como u não se anula em nenhuma parte de $\partial\Omega$, não podemos concluir que é nula. Assim sendo, retiramos apenas que $u = u_1 - u_2 = C$ em $\bar{\Omega}$, ou seja as duas soluções diferem por uma constante.

Portanto a unicidade no caso do problema de Neumann fica estabelecida a menos de constante!

• No caso do problema de Neumann para além da unicidade não estar estabelecida, pelo teorema da divergência temos

$$\int_{\Omega} f = \int_{\Omega} \Delta u = \int_{\partial\Omega} \partial_n u = \int_{\partial\Omega} g$$

e torna-se necessário assegurar a **condição de compatibilidade**

$$\int_{\partial\Omega} g = \int_{\Omega} f, \tag{2.5}$$

que no caso de funções harmónicas, em que $f = 0$, corresponde a verificar que g tem média nula, $\int_{\partial\Omega} g = 0$.

2.1.3 Princípio do Máximo

Iremos apresentar agora o chamado ‘princípio do máximo forte’.

Note-se que designando por $|V|$ o volume de V , e por $|\partial V|$ a superfície de ∂V , temos os seguintes resultados para bolas de centro em x_0 e raio r em \mathbf{R}^d ,

$$|B(x_0, r)| = \sigma_d r^d, \quad |\partial B(x_0, r)| = \sigma_d d r^{d-1},$$

em que $\sigma_d = |B(0, 1)| = \frac{\sqrt{\pi^d}}{\Gamma(1+d/2)}$, em que Γ é a função gama³.

³A função gama

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$$

Teorema 2.1.1 (*Princípio do Valor Médio*). *Seja u harmónica em Ω . Para qualquer bola $B(x_0, r) \subset \Omega$ é válida a propriedade*

$$u(x_0) = \frac{1}{|\partial B(x_0, r)|} \int_{\partial B(x_0, r)} u(y) ds_y = \frac{1}{|B(x_0, r)|} \int_{B(x_0, r)} u(y) dy$$

Para além disso, a recíproca é válida, ou seja, se se verificar a propriedade anterior para qualquer bola em Ω , então a função é harmónica.

Demonstração: e.g. [7]. \square

Observação 1: No caso unidimensional, já vimos que as funções harmónicas são polinómios do primeiro grau e é então claro que

$$\frac{1}{2r} \int_{x_0-r}^{x_0+r} ax + b = ax_0 + b,$$

o que corresponde à exactidão da regra dos trapézios para polinómios de grau 1.

Observação 2: No caso em que consideramos funções *sub-harmónicas*, ou seja funções $u : \Delta u \geq 0$, temos apenas a desigualdade

$$u(x_0) \leq \frac{1}{|\partial B(x_0, r)|} \int_{\partial B(x_0, r)} u(y) ds_y,$$

o mesmo se passando para o integral de volume. No caso de funções *sobre-harmónicas*, verificando $\Delta u \leq 0$, a desigualdade aparece no outro sentido.

Teorema 2.1.2 (*Princípio do máximo/mínimo*). *Se $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ e $\Delta u = 0$ em Ω , então*

$$\max_{x \in \bar{\Omega}} u(x) = \max_{x \in \partial \Omega} u(x), \quad \min_{x \in \bar{\Omega}} u(x) = \min_{x \in \partial \Omega} u(x).$$

Ou seja, uma função harmónica no interior toma valores entre os limites definidos na fronteira.

é a generalização natural do factorial para números reais (ou complexos), pois $n! = \Gamma(n+1)$, verificando-se sempre a propriedade $\Gamma(z) = z\Gamma(z-1)$.

Assim, apresentamos alguns valores para os ‘volumes’ de bolas unitárias em várias dimensões:

$$\sigma_1 = 2, \sigma_2 = \pi, \sigma_3 = \frac{4\pi}{3}, \sigma_4 = \frac{\pi^2}{2}, \sigma_5 = \frac{8\pi^2}{15}, \sigma_6 = \frac{\pi^3}{6}, \dots$$

a que correspondem os valores $2, 2\pi, 4\pi, 2\pi^2, \frac{8}{3}\pi^2, \pi^3$ para as respectivas ‘superfícies’.

Como curiosidade geométrica, o maior valor para σ_d segundo esta fórmula (que *a priori* apenas faz sentido para números naturais) é obtido para uma dimensão $d = 5.25695\dots$ com o volume $5.277768\dots$ repara-se ainda que se $d \rightarrow \infty$, então $\sigma_d \rightarrow 0$. O que significa, por exemplo, que para $d > 12$ um hiper-cubo unitário não irá caber na hiper-esfera unitária!

Quanto à superfície, a variação com d é a mesma, mas com uma diferença de 2 dimensões e vem multiplicada pelo factor 2π . Assim, o máximo aparece em $d = 7.25695\dots$ com a superfície $33.1612\dots$ e depois também converge para zero.

Demonstração:

Vamos mostrar que se Ω é conexo e $u(x_0) = \max_{x \in \bar{\Omega}} u(x) = M$ então $u(x) = M$ em Ω .

Suponhamos que existia um $V \subset B(x_0, r) \subset \Omega : u(x) < M$, então se V tiver medida não nula

$$u(x_0) = \frac{1}{|B(x_0, r)|} \int_{B(x_0, r)} u(y) dy < \frac{1}{|B(x_0, r)|} \int_{B(x_0, r)} M dy = M$$

o que contradiz $u(x_0) = M$. Assim V tem medida nula e $u(x) = M$ no aberto $B(x_0, r)$. Como a função é analítica em Ω conexo, então pelo prolongamento analítico $u(x) = M$ em Ω .

Agora, por continuidade, $u(x) = M$ em $\partial\Omega$ e portanto se o máximo é interior, a função é constante e o mesmo valor é atingido na fronteira.

O mesmo raciocínio aplica-se para o mínimo. \square

Observação 1: No caso de funções sub-harmônicas, $\Delta u \geq 0$, obtemos apenas o princípio do máximo $\max_{\Omega} u = \max_{\partial\Omega} u$, e no caso de de funções sobre-harmônicas, $\Delta u \leq 0$, obtemos apenas o princípio do mínimo $\min_{\bar{\Omega}} u = \min_{\partial\Omega} u$. Para a demonstração é necessário assumir que o domínio verifica a *condição da bola interior*, ou seja que em qualquer ponto x_0 de Ω existe um $\varepsilon > 0$ tal que $B(x_0, \varepsilon) \subset \Omega$. Note-se em domínios com cúspidas isto não acontece!

Observação 2: Note-se que é uma consequência da demonstração que, no caso em que a função não é constante, o máximo/mínimo têm que estar na fronteira. No caso unidimensional, como as funções harmônicas se tratam de rectas, é claro que num dos extremos toma o valor mínimo e no outro o valor máximo, a menos que se trate de uma constante.

2.1.4 Problema bem-posto

Falta apenas abordar a questão da solução depender continuamente dos dados (numa certa norma). Começamos por verificar isso recorrendo ao princípio do máximo.

- A solução do problema de Dirichlet depende continuamente dos dados na norma do máximo.

Com efeito, como dadas g_1 e g_2 funções em $\partial\Omega$, se $\|g_1 - g_2\|_{\infty} \rightarrow 0$ isto significa que se considerarmos o dado $g = g_1 - g_2$, a solução $u = u_1 - u_2$ irá verificar, pelo princípio do máximo (e do mínimo...)

$$\|u\|_{\infty, \Omega} = \|g\|_{\infty, \partial\Omega} \rightarrow 0$$

ou seja $\|u_1 - u_2\|_{\infty} \rightarrow 0$, isto significa que o problema está bem posto na norma do máximo (que é a norma utilizada para funções contínuas). \square

- O problema de Neumann também está bem posto se considerarmos unicidade a menos de uma constante aditiva e admitirmos que os dados verificam a condição de compatibilidade.

- O problema de Cauchy não está bem posto. Para além da própria questão de existência de solução (o problema é normalmente sobredeterminado), ilustramos o problema da dependência dos dados, com o seguinte exemplo:

– Se considerarmos para cada m inteiro o problema

$$(P_m) \begin{cases} \Delta u = 0 \text{ em } [0, +\infty[\times \mathbf{R} \\ u(0, y) = g_m(y) = \frac{1}{m} \sin(my) \\ \partial_n u(0, y) = 0 \end{cases}$$

e designarmos por u_m a solução do problema (P_m) , vemos que $g_m \rightarrow 0$, mas a solução

$$u_m(x, y) = \frac{1}{m} \sin(my) \cosh(mx)$$

converge para infinito exponencialmente quando $x \rightarrow \infty$.

2.2 Diferenças Finitas - Equação de Poisson

Consideremos a aproximação da solução de um problema em que é verificada a equação de Laplace ou Poisson num domínio Ω contido em \mathbb{R}^2 utilizando um esquema de diferenças finitas. Normalmente o domínio Ω não é formado por pequenos quadrados, apenas podemos aproximá-lo usando pequenos quadrados e definindo um domínio aproximado $\tilde{\Omega}$. Repare-se que isto é semelhante aquilo que acontece quando através de pixels num écran são aproximadas formas arredondadas, quanto mais pequenos forem os pequenos quadrados, melhor será a aproximação da forma geométrica do domínio... No entanto, isto tem como contrapartida um consumo de tempo e memória acrescido, já que implica um grande número de incógnitas no sistema de equações que se irá resolver. Outra grande dificuldade é efectuar aproximações com condições de fronteira que utilizem a normal (p.ex. as condições de Neumann), já que no domínio reticulado temos apenas normais verticais ou horizontais.

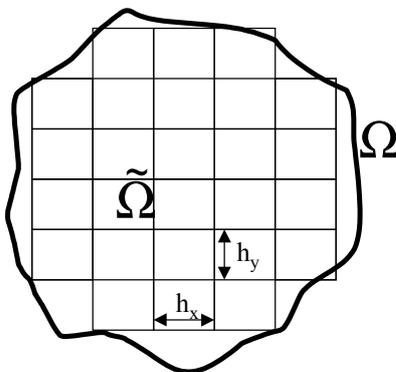


Figura 2.2.1: Aproximação de um domínio Ω por um domínio $\tilde{\Omega}$, e espaçamento do reticulado.

2.2.1 Aproximação do Laplaciano

Supomos então que $\tilde{\Omega}$ é um domínio aberto bem definido num reticulado (ou malha). Os pontos desse reticulado são (x_i, y_j) , tendo-se

$$x_{i+1} = x_i + h_x, \quad y_{i+1} = y_i + h_y,$$

com $h_x = h_y = h$ ou com valores diferentes. Utilizando esta malha, as derivadas de segunda ordem podem ser aproximadas usando as aproximações deduzidas na primeira parte. Assim, querendo aproximar Δu num ponto (x_i, y_i) , pertencente ao reticulado, consideramos

$$\partial_x^2 u(x_i, y_j) = \frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i-1}, y_j)}{h_x^2} - \frac{h_x^2}{12} \partial_x^4 u(x_i, y_j)$$

e da mesma forma

$$\partial_y^2 u(x_i, y_j) = \frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1})}{h_y^2} - \frac{h_y^2}{12} \partial_y^4 u(x_i, y_j).$$

Abreviando as notações, $u_{ij} = u(x_i, y_j)$, ficamos com

$$\Delta u \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h_y^2},$$

em que o erro será em $O(h_x^2) + O(h_y^2)$... isto assegura que o esquema de aproximação é consistente e de segunda ordem.

Algumas notações

• Iremos usar a notação $\tilde{\Delta}$ para designar esta aproximação de segunda ordem do laplaciano, ou seja

$$\tilde{\Delta} u_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h_y^2}. \quad (2.6)$$

Esta estrutura de aproximação de segunda ordem do laplaciano sugere uma *molécula em forma de cruz*, já que a disposição na malha dos 5 pontos envolvidos $u_{ij}, u_{i+1,j}, u_{i-1,j}, u_{i,j+1}, u_{i,j-1}$ se assemelha a uma pequena cruz. Existem outro tipo de aproximações, de ordem superior, que utilizam mais pontos e levam a outro tipo de moléculas (ver exercícios no final do capítulo).

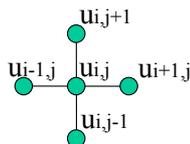


Figura 2.2.2: Molécula em forma de cruz na aproximação de segunda ordem de Δ .

• Para facilitar as notações iremos supor no que segue que $\Omega = \tilde{\Omega}$.

No caso em que $\Omega \neq \tilde{\Omega}$, há duas possibilidades distintas de lidar com a aproximação da fronteira.

i) Trabalhar com $\partial\tilde{\Omega}$ e considerar uma aproximação que consiste em estabelecer uma projecção Π_h de $\partial\Omega$ para $\partial\tilde{\Omega}$, e definindo uma função \tilde{g} a partir de g através de $\tilde{g}(x_i, y_j) = g(x, y)$, em que $(x_i, y_j) = \Pi_h(x, y)$ com $(x, y) \in \partial\Omega$. Neste caso existe um erro nesta projecção, mas podemos continuar a utilizar o reticulado e a aproximação de segunda ordem do laplaciano.

ii) Trabalhar ainda com a verdadeira fronteira $\partial\Omega$. Neste caso, nos pontos interiores próximos da fronteira, já não poderemos usar um reticulado com nós igualmente espaçados, já que eles devem estar sobre a fronteira. Devido a este facto, a cruz da molécula deixará de ser simétrica (ver figura) e o laplaciano nesses pontos já não irá ser dado com uma aproximação de segunda ordem.

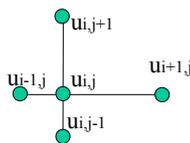


Figura 2.2.3: Molécula em forma de cruz descentrada, usada na aproximação de Δ , próximo da fronteira original.

Com efeito, se consideramos $(x_i, y_{j\pm 1}) = (x_i, y_j \pm h_y^\pm)$, $(x_{i\pm 1}, y_j) = (x_i \pm h_x^\pm, y_j)$, é claro que

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} &= u_{ij} + h_y^+ \partial_y u_{ij} + \frac{(h_y^+)^2}{2} \partial_y^2 u_{ij} + \frac{(h_y^+)^3}{6} \partial_y^3 u(\xi_+) \\ u_{i,j-1} &= u_{ij} - h_y^- \partial_y u_{ij} + \frac{(h_y^-)^2}{2} \partial_y^2 u_{ij} - \frac{(h_y^-)^3}{6} \partial_y^3 u(\xi_-) \end{aligned}$$

e como podemos ter $h_y^+ \neq h_y^-$, a simples soma das equações já não faz desaparecer a o termo com $\partial_y u_{ij}$, há que multiplicar a primeira equação por $\frac{h_y^-}{h_y^+}$. Mesmo assim, isto permitirá obter apenas uma aproximação de primeira ordem de $\partial_y^2 u_{ij}$, já que se mantêm os termos de terceira ordem, passando-se obviamente o mesmo para a aproximação de $\partial_x^2 u_{ij}$.

• Iremos usar a notação Ω_h para designar o conjunto discreto dos pontos do reticulado que estão no interior de Ω (relembre-se, assumimos Ω idêntico a $\tilde{\Omega}$ no que se segue). Ou seja, sendo \mathcal{R}_2 o conjunto dos pontos do reticulado, temos

$$\Omega_h = \{(x_i, y_j) \in \mathcal{R}_2 : (x_i, y_j) \in \Omega\}.$$

Da mesma forma, iremos usar a notação $\partial\Omega_h = \{(x_i, y_j) \in \mathcal{R}_2 : (x_i, y_j) \in \partial\Omega\}$ e $\bar{\Omega}_h = \Omega_h \cup \partial\Omega_h$.

Iremos ainda usar a seguinte notação para os pontos do reticulado, $p_{ij} = (x_i, y_j)$.

• Introduzimos também o operador de truncatura local para o laplaciano, que nos dá o erro nos pontos $p_{ij} \in \Omega_h$,

$$\tau(u)_{ij} = \Delta u(x_i, y_j) - \tilde{\Delta} u(x_i, y_j)$$

e já vimos que temos

$$\tau(u)_{ij} = \frac{-1}{12} (h_x^2 \partial_x^4 u(\xi_x, y_j) + h_y^2 \partial_y^4 u(x_i, \xi_y)).$$

2.2.2 Equações nos pontos interiores

No esquema de segunda ordem adoptado, é fácil constatar que, conhecendo os quatro pontos das extremidades da cruz, podemos atribuir um valor ao centro. No entanto enquanto as extremidades não tocarem a fronteira, esses valores são também incógnitas. Os pontos interiores são portanto obtidos através da resolução de um sistema linear.

No caso da discretização da equação de Poisson, impomos

$$\tilde{\Delta}(u_{ij}) = \frac{1}{h_x^2} (u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}) + \frac{1}{h_y^2} (u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}) = f_{ij} \quad (2.7)$$

para qualquer ponto $(x_i, y_j) \in \Omega_h$. Ou seja, sendo $N = \#\Omega_h$, ficamos com N equações.

No caso de aproximar $\Delta u = 0$, podemos ainda deduzir que

$$u_{ij} = \frac{h_y^2}{2(h_x^2 + h_y^2)} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + \frac{h_x^2}{2(h_x^2 + h_y^2)} (u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) \quad (2.8)$$

e reparamos que quando $h_x = h_y$ ficamos simplesmente com

$$u_{ij} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}). \quad (2.9)$$

Observação: As fórmulas (2.8) e (2.9) são as versões discretas da fórmula da média. No caso da fórmula (2.8) há uma média ponderada, já que os valores de h_x e h_y são diferentes, mas a soma dos pesos é 1, e no caso da fórmula (2.9) é imediato.

2.2.3 As condições de fronteira

Aproximação com Condição de Dirichlet

Quando consideramos condições de Dirichlet, as únicas incógnitas são os valores nos N pontos interiores, já que nos pontos da fronteira, $(x_i, y_j) \in \partial\Omega_h$ impomos obviamente

$$u_{ij} = g_{ij}.$$

Portanto temos N equações (2.7) para N incógnitas, o que não nos garante à partida que o sistema tem solução, nem que é única, mas pelo princípio do máximo discreto que veremos de seguida, concluiremos que existe e é única.

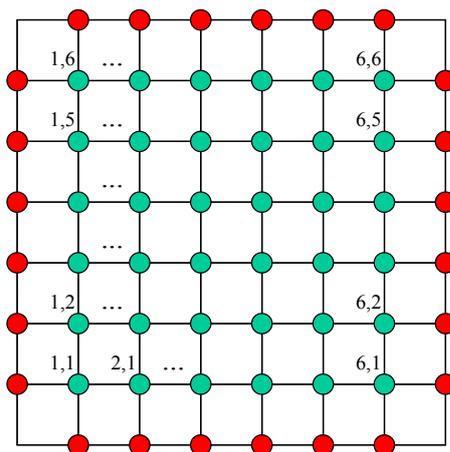


Figura 2.2.4: Esquema de diferenças finitas num quadrado. Distinção entre os valores dados na fronteira e as incógnitas nos pontos interiores.

Aproximação com Condição de Neumann

Antes de prosseguir com a análise, referimos que o método das diferenças finitas não é aconselhado para problemas num domínio não inserido num reticulado, especialmente quando aparecem condições de Neumann, já que qualquer domínio reticulado admite apenas quatro possíveis direcções para a normal, $(\pm 1, 0)$ ou $(0, \pm 1)$. De qualquer forma, admitindo, por exemplo, que a condição de Neumann é colocada numa parte da fronteira em que a normal é constante, podemos obter aproximações com interesse.

Considere-se, sem perda de generalidade, a aproximação da derivada normal num ponto (x_i, y_1) que assumimos ser dada por $\partial_n u_{i1} = -\partial_y u_{i1} = g_{i1}$. Uma hipótese que não garante bons resultados numéricos é fazer a aproximação de $\partial_y u_{i1}$ considerando uma aproximação de primeira ordem que não necessita de pontos extra, com $\partial_y u_{i1} = \frac{u_{i2} - u_{i1}}{h_y} + O(h_y)$.

É importante notar que nestes pontos em que estão impostas condições de Neumann, apenas a derivada normal é dada, o valor da função surge também como incógnita. Assim, aparece mais uma equação que, pela aproximação anterior, será $-g_{i1} = \frac{u_{i2} - u_{i1}}{h_y}$, que é compensada pela existência de mais uma incógnita, u_{i1} .

Vamos agora tentar obter uma aproximação de segunda ordem, adequada à aproximação que considerámos nos pontos interiores. Para esse efeito desenvolvemos

$$u_{i2} = u_{i1} + h_y (\partial_y u)_{i1} + \frac{h_y^2}{2} (\partial_y^2 u)_{i1} + O(h_y^3)$$

e admitindo que tínhamos a equação de Laplace sai também $(\partial_y^2 u)_{i1} = -(\partial_x^2 u)_{i1} = -\frac{1}{h_x^2} (u_{i+1,1} - 2u_{i1} + u_{i-1,1}) + O(h_x^2)$. Substituindo, ficamos com

$$u_{i2} = u_{i1} - h_y g_{i1} - \frac{h_y^2}{2} \frac{1}{h_x^2} (u_{i+1,1} - 2u_{i1} + u_{i-1,1}) + O(h_x^2) h_y^2 + O(h_y^3),$$

ou seja,

$$g_{i1} = \frac{1}{h_y} \left(u_{i1} - u_{i2} - \frac{h_y^2}{2} \frac{1}{h_x^2} (u_{i+1,1} - 2u_{i1} + u_{i-1,1}) \right) + O(h_x^2) h_y + O(h_y^2)$$

o que já é uma aproximação de segunda ordem.

Neste caso, a equação a incluir é

$$u_{i2} = u_{i1} - h_y g_{i1} - \frac{h_y^2}{2} \frac{1}{h_x^2} (u_{i+1,1} - 2u_{i1} + u_{i-1,1}) \quad (2.10)$$

e que, no caso $h_x = h_y = h$, fica simplesmente

$$u_{i2} = 2u_{i1} - h g_{i1} - \frac{1}{2} (u_{i+1,1} + u_{i-1,1}). \quad (2.11)$$

Observação: Repare-se que no caso em que se tem a derivada normal nula, a equação (2.11) volta a ser uma fórmula da média, já que obtemos $u_{i1} = \frac{1}{2} u_{i2} + \frac{1}{4} (u_{i+1,1} + u_{i-1,1})$, de certa forma admitindo que existiria um ponto extra tal que $u_{i0} = u_{i2}$.

2.2.4 O problema discreto

Iremos agora estabelecer o correspondente discreto do teorema do máximo, e assim podemos estabelecer facilmente a unicidade e também uma estimativa para controlar erros no interior a partir dos erros na fronteira.

Teorema 2.2.1 (do máximo/mínimo discreto). *Se u_{ij} verifica a equação de Laplace discreta $\tilde{\Delta}(u_{ij}) = 0$ (para pontos $p_{ij} \in \Omega_h$), então*

$$\max_{p_{ij} \in \Omega_h} u_{ij} = \max_{p_{ij} \in \partial\Omega_h} u_{ij}, \quad \min_{p_{ij} \in \Omega_h} u_{ij} = \min_{p_{ij} \in \partial\Omega_h} u_{ij}$$

Demonstração:

Suponhamos que o máximo/mínimo era atingido num ponto $p_{ij} \in \Omega_h$.

Usando a fórmula

$$u_{ij} = \alpha(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + \beta(u_{i,j+1} + u_{i,j-1})$$

já vimos que u_{ij} é o baricentro dos 4 pontos $u_{i+1,j}, u_{i-1,j}, u_{i,j+1}, u_{i,j-1}$, porque a soma dos pesos, com

$$\alpha = \frac{h_y^2}{2(h_x^2 + h_y^2)}, \quad \beta = \frac{h_x^2}{2(h_x^2 + h_y^2)},$$

é igual a 1. Como estes pesos são positivos u_{ij} está compreendido⁴ entre os valores dos 4 pontos de $V_{ij} = \{u_{i+1,j}, u_{i-1,j}, u_{i,j+1}, u_{i,j-1}\}$.

Portanto $\min V_{ij} \leq u_{ij} \leq \max V_{ij}$.

Como $u_{ij} = \alpha(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + \beta(u_{i,j+1} + u_{i,j-1})$ é uma média, só há duas possibilidades, ou a desigualdade é estrita ou então há igualdade em todos os pontos de V_{ij} .

Se houver igualdade em todos os pontos, a função é constante, porque o mesmo se irá passar para qualquer ponto de V_{ij} que também será máximo/mínimo. Se a desigualdade for estrita isso contradiz a hipótese de ser máximo/mínimo em p_{ij} . \square

Definindo a norma do máximo num conjunto discreto ω ,

$$\|u_{ij}\|_{\infty, \omega} = \max_{p_{ij} \in \omega} |u_{ij}|,$$

é consequência imediata que, nas condições do teorema anterior, temos

$$\|u_{ij}\|_{\infty, \bar{\Omega}_h} = \|u_{ij}\|_{\infty, \partial\Omega_h}.$$

Apresentamos também um princípio do máximo para a discretização de funções sub-harmônicas, em que a demonstração anterior se repete, e que poderá ser visto como um corolário. Analogamente, poderíamos estabelecer um princípio do mínimo para funções sobre-harmônicas discretas.

Corolário 2.2.1 *Seja $u_{ij} : \tilde{\Delta}u_{ij} = f_{ij} \geq 0$, então*

$$\max_{\Omega_h} u_{ij} \leq \max_{\partial\Omega_h} u_{ij}$$

Demonstração:

No caso mais simples, em que $h_x = h_y = h$, ficamos com

$$f_{ij} = \tilde{\Delta}u_{ij} = \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{ij}),$$

e portanto

$$u_{ij} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) - \frac{h^2}{4}f_{ij}.$$

Como $f_{ij} \geq 0$, mais uma vez concluímos que $u_{ij} \leq \max V_{ij}$ e a demonstração anterior repete-se. \square

⁴Nota: Se tivermos $\sum \alpha_i = 1$, com $\alpha_i > 0$, então teremos

$$\min u_i = \sum \alpha_i \min u_i \leq \sum \alpha_i u_i \leq \sum \alpha_i \max u_i = \max u_i.$$

Problema de Dirichlet discreto

Teorema 2.2.2 *Uma solução do problema de Dirichlet discreto para a equação de Poisson existe e é única, havendo também dependência contínua dos dados na fronteira.*

Demonstração:

Unicidade:

Se pensarmos em duas soluções $u^{(1)}, u^{(2)}$, do problema de Dirichlet discreto para a equação de Poisson, temos

$$\tilde{\Delta}u_{ij}^{(k)} = f_{ij} \text{ em } \Omega_h, \text{ e } u_{ij}^{(k)} = g_{ij} \text{ em } \partial\Omega_h.$$

Se fizermos $u = u^{(1)} - u^{(2)}$, obtemos a equação de Laplace condições de Dirichlet nulas e portanto

$$\|u_{ij}\|_{\infty, \bar{\Omega}_h} = \|u_{ij}\|_{\infty, \partial\Omega_h} = 0$$

o que implica $u_{ij} = 0$ em $\bar{\Omega}_h$.

Existência:

Já tínhamos visto que o número de equações é igual ao número de incógnitas, igual a $\#\Omega_h$, e como acabamos de ver que o sistema homogêneo tem solução única, o sistema será sempre possível e bem determinado.

Dependência contínua dos dados:

Ela é imediata em qualquer sistema invertível. Mas podemos especificar mais, já que se tivermos uma perturbação \tilde{g}_{ij} dos dados g_{ij} , então a diferença entre as soluções correspondentes, $\tilde{u}_{ij} - u_{ij}$, verifica a equação de Laplace discreta (assumimos que f_{ij} não é perturbado) com condição de Dirichlet dada por $\tilde{g}_{ij} - g_{ij}$ e temos

$$\|\tilde{u}_{ij} - u_{ij}\|_{\infty, \bar{\Omega}_h} = \|\tilde{g}_{ij} - g_{ij}\|_{\infty, \partial\Omega_h}.$$

Conclui-se assim que o erro no interior será menor ou igual que o erro na fronteira. \square

Problema misto Dirichlet-Neumann discreto

Teorema 2.2.3 *O problema misto Dirichlet-Neumann discreto é bem posto.*

Demonstração:

A demonstração é semelhante. Repare-se que neste caso devemos considerar o problema

$$\begin{cases} \tilde{\Delta}u_{ij} = f_{ij}, & \text{em } \Omega_h \\ u_{ij} = g_{ij}^0 & \text{sobre } \Gamma_h^0 \\ \partial_n u_{ij} = g_{ij}^1 & \text{sobre } \Gamma_h^1, \end{cases}$$

com $\partial\Omega_h = \Gamma_h^0 \cup \Gamma_h^1$.

Dadas duas soluções $u^{(1)}, u^{(2)}$, verificando este problema, teremos $u = u^{(1)} - u^{(2)}$ verificando condições homogêneas, isto é, $u_{ij} = 0$ em Γ_h^0 , e $\partial_n u_{ij} = 0$ em Γ_h^1 . Neste caso, a equação discreta fica (num ponto $(i, 1)$ da fronteira Γ_h^1)

$$u_{i2} = u_{i1} - h_y g_{i1}^1 - \frac{h_y^2}{2} \frac{1}{h_x^2} (u_{i+1,1} - 2u_{i1} + u_{i-1,1})$$

e como $g^1 = 0$, temos

$$\begin{aligned}
u_{i2} &= u_{i1} - \frac{h_y^2}{2h_x^2}(u_{i+1,1} - 2u_{i1} + u_{i-1,1}) \\
\Leftrightarrow u_{i2} + \frac{h_y^2}{2h_x^2}(u_{i+1,1} + u_{i-1,1}) &= u_{i1}\left(1 + \frac{h_y^2}{h_x^2}\right) \\
\Leftrightarrow h_x^2 u_{i2} + \frac{h_y^2}{2}(u_{i+1,1} + u_{i-1,1}) &= u_{i1}(h_x^2 + h_y^2) \\
\Leftrightarrow u_{i1} &= \frac{h_x^2}{h_x^2 + h_y^2} u_{i2} + \frac{h_y^2}{2(h_x^2 + h_y^2)}(u_{i+1,1} + u_{i-1,1})
\end{aligned}$$

ora isto significa que um ponto da fronteira é ainda o baricentro dos três pontos $u_{i2}, u_{i+1,1}, u_{i-1,1}$ com os pesos respectivos $\frac{h_x^2}{h_x^2 + h_y^2}, \frac{h_y^2}{2(h_x^2 + h_y^2)}, \frac{h_y^2}{2(h_x^2 + h_y^2)}$ (note que a soma dos pesos é igual a 1).

Isto significa que nestes pontos, em que se aplica a condição de Neumann nula, ainda é válido o princípio do máximo *local*, ou seja, ou a função é constante, ou

$$u_{i1} \in] \min\{u_{i2}, u_{i+1,1}, u_{i-1,1}\}, \max\{u_{i2}, u_{i+1,1}, u_{i-1,1}\} [.$$

Portanto a função nunca atingirá valores extremos em pontos com condição de Neumann nula, consequentemente atingirá sobre a parte da fronteira Γ_h^0 , onde temos a condição $u_{ij} = 0$, logo pelo princípio do máximo, haverá solução nula.

A existência resulta da unicidade e de o número de equações ser igual ao número de incógnitas.

No caso mais simples $h_x = h_y = h$, temos as equações para os pontos interiores $p_{ij} \in \Omega_h$,

$$u_{ij} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}),$$

os valores em Γ_h^0 são dados, e temos ainda as equações para os pontos de fronteira Γ_h^1 , dadas tal como em

$$u_{i1} = \frac{1}{2}u_{i2} + \frac{h}{2}g_{i1}^1 + \frac{1}{4}(u_{i+1,1} + u_{i-1,1}).$$

No total teremos $\#\Omega_h + \#\Gamma_h^1$ equações e incógnitas, pelo que a unicidade do sistema homogéneo implica que o sistema seja possível e bem determinado.

A dependência contínua dos dados resulta da invertibilidade do sistema. \square

Problema de Neumann discreto

Já referimos que o método de diferenças finitas não é o mais adequado para este tipo de problemas. Com efeito, como temos condições de Neumann em toda a fronteira, surge-nos imediatamente um problema nos cantos do domínio em que a normal não está definida. Admitindo que o canto é apenas devido à aproximação geométrica, temos mesmo assim alguns problemas...

Se repararmos nas equações colocadas sobre os pontos da fronteira p_{21} e p_{12} , torna-se claro que é preciso ter um valor no canto p_{11} , para a aproximação de segunda ordem. Artificialmente, podemos pensar em impor $u_{21} = u_{11}$, o que significa adicionar uma equação e uma incógnita, repetindo o processo nos outros cantos, seguindo uma certa orientação. Isto permitirá obter $\#\bar{\Omega}_h$ equações e incógnitas. Só que agora, não iremos ter um resultado de unicidade no sistema homogéneo... De facto, seguindo a demonstração anterior apenas poderemos concluir que a função será constante, e como não há condições de Dirichlet nulas em nenhum ponto, não podemos concluir que é nula! Devido a isso, também só podemos concluir a existência caso seja verificada uma condição suplementar.

Isto não é estranho, já que tínhamos visto no caso contínuo que o problema de Neumann apenas estaria bem posto a menos de constante aditiva e se fosse verificada a *condição de compatibilidade* (2.5). Essa condição de compatibilidade resultava imediatamente do teorema da divergência, e podemos estabelecer qual o correspondente no caso discreto da mesma forma.

Com efeito, supondo que $\tilde{\Delta}u_{ij} = f_{ij}$ em Ω_h , escrevendo

$$h\tilde{\Delta}u_{ij} = \tilde{\mathbf{d}}_1u_{ij} - \tilde{\mathbf{d}}_1u_{i-1,j} + \tilde{\mathbf{d}}_2u_{ij} - \tilde{\mathbf{d}}_2u_{i,j-1},$$

em que $\tilde{\mathbf{d}}_1u_{ij} = \frac{u_{i+1,j}-u_{ij}}{h}$, e $\tilde{\mathbf{d}}_2u_{ij} = \frac{u_{i,j+1}-u_{ij}}{h}$, obtemos

$$\sum_{\substack{i=1,\dots,N \\ j=1,\dots,N}} hf_{ij} = \sum_{\substack{i=1,\dots,N \\ j=1,\dots,N}} (\tilde{\mathbf{d}}_1u_{ij} - \tilde{\mathbf{d}}_1u_{i-1,j}) + \sum_{\substack{i=1,\dots,N \\ j=1,\dots,N}} (\tilde{\mathbf{d}}_2u_{ij} - \tilde{\mathbf{d}}_2u_{i,j-1})$$

e pela propriedade telescópica

$$\sum_{\substack{i=1,\dots,N \\ j=1,\dots,N}} hf_{ij} = \sum_{j=1,\dots,N} (\tilde{\mathbf{d}}_1u_{N,j} - \tilde{\mathbf{d}}_1u_{0,j}) + \sum_{i=1,\dots,N} (\tilde{\mathbf{d}}_2u_{i,N} - \tilde{\mathbf{d}}_2u_{i,0}),$$

ou seja,

$$h \sum_{p_{ij} \in \Omega_h} f_{ij} = \sum_{p_{ij} \in \partial\Omega_h} \tilde{\partial}_n u_{ij} = \sum_{p_{ij} \in \partial\Omega_h} g_{ij}$$

isto, se considerarmos a aproximação de primeira ordem de $\partial_n u_{ij} = g_{ij}$.

- O problema pode ser contornado se for imposta uma condição de Dirichlet num único ponto da fronteira. Desta forma voltamos ao enquadramento do problema Dirichlet-Neumann, e a unicidade do problema homogêneo (graças à condição de Dirichlet nula nesse ponto) permite garantir que o sistema é possível e determinado. Isto poderá parecer demasiado artificial, mas corresponde simplesmente a atribuir um valor concreto à constante, e o valor da ‘derivada normal’, que não é atribuído nesse ponto, é automaticamente calculado de forma a que condição de compatibilidade seja satisfeita.

2.2.5 O sistema linear no caso de um rectângulo

Consideramos agora que Ω é um rectângulo e $\bar{\Omega}_h$ é o conjunto dos nós igualmente espaçados definido por um reticulado \mathcal{R} . Em cada ponto $p_{ij} \in \Omega_h$ temos a equação (no caso Laplace)

$$u_{ij} - \alpha(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) - \beta(u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) = 0,$$

em que $\alpha = \frac{h_y^2}{2(h_x^2+h_y^2)}$, $\beta = \frac{h_x^2}{2(h_x^2+h_y^2)}$. Assim, a matriz do sistema aparece sob a forma de blocos

$$\begin{bmatrix} K & -\beta I & 0 & \cdots & 0 \\ -\beta I & K & -\beta I & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\beta I & K & -\beta I \\ 0 & \cdots & 0 & -\beta I & K \end{bmatrix}$$

em que $-\beta I$ é um bloco com uma matriz diagonal e em que o bloco K é dado por

$$K = \begin{bmatrix} 1 & -\alpha & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha & 1 & -\alpha & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\alpha & 1 & -\alpha \\ 0 & \cdots & 0 & -\alpha & 1 \end{bmatrix}.$$

Esta estrutura com $n_y \times n_y$ blocos de dimensão $n_x \times n_x$ resulta de considerar uma numeração sequencial do tipo

$$\begin{array}{cccccc} 1 & & 2 & 3 & \cdots & n_x \\ n_x + 1 & & \cdots & \cdots & \cdots & 2n_x \\ \vdots & & & & & \vdots \\ n_x(n_y - 1) + 1 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & n_x n_y \end{array}$$

por exemplo, num caso em que consideramos $n_x = 6, n_y = 6$ temos a figura seguinte.

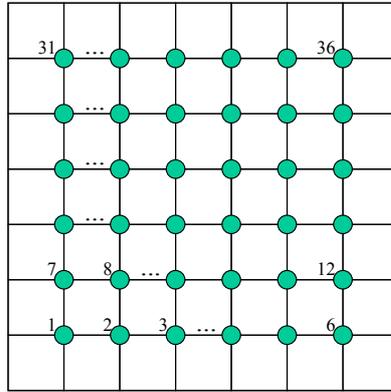


Figura 2.2.5: Numeração ordenada dos nós num retângulo 6×6 .

Esta estrutura permite ver que a matriz será uma matriz com diagonal dominante (mas não estritamente dominante!), e até concluir que é irredutível (pois trata-se de uma matriz tridiagonal com blocos não nulos), o que permite concluir a invertibilidade (já antes demonstrada). E como a diagonal é positiva, podemos concluir que se trata de uma matriz simétrica definida positiva.

2.2.6 Domínio genérico - aplicação de métodos iterativos

Se no caso de um retângulo é razoavelmente imediato construir a matriz associada ao sistema, para domínios com geometrias mais complicadas isso pode ser bastante mais moroso. Por outro lado, como as matrizes do sistema são esparsas, tornou-se bastante comum utilizar métodos iterativos para a resolução do sistema linear. Isto revelou-se eficaz, usando o método de Gauss-Seidel, e especialmente o método SOR, já que a matriz obtida é simétrica, definida positiva, e nessas condições os métodos convergem.

No caso de um domínio Ω_h , qualquer, com pontos p_{mn} , vamos admitir que a matriz é M . Iremos usar índices duplos, assim, numa linha com índice duplo (i, j) , temos a equação

$$\sum_{p_{mn} \in \Omega_h} M_{ij,mn} u_{mn} = u_{ij} - \alpha(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) - \beta(u_{i,j+1} + u_{i,j-1}).$$

Consequentemente, o valor $M_{ij,kl}$ é dado pela equação substituindo $u_{mn} = \delta_{mn,kl}$, em que $\delta_{mn,kl}$ é o delta de Kronecker para os índices duplos (m, n) e (k, l) . Assim, podemos provar que mesmo no caso de um domínio genérico a matriz é simétrica e definida positiva.

(i) Para qualquer domínio Ω_h a matriz M é simétrica.

Como já referimos, usando $u_{mn} = \delta_{mn,kl}$, obtemos

$$M_{ij,kl} = \delta_{ij,kl} - \alpha(\delta_{i+1,j;kl} + \delta_{i-1,j;kl}) - \beta(\delta_{i,j+1;kl} + \delta_{i,j-1;kl}),$$

ou seja,

$$M_{ij,kl} = \begin{cases} 1, & \text{se } (i, j) = (k, l) \\ -\alpha, & \text{se } (i \pm 1, j) = (k, l) \\ -\beta, & \text{se } (i, j \pm 1) = (k, l) \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Devido às equivalências

$$\begin{aligned} (i \pm 1, j) = (k, l) &\Leftrightarrow (k \mp 1, l) = (i, j) \\ (i, j \pm 1) = (k, l) &\Leftrightarrow (k, l \mp 1) = (i, j) \end{aligned}$$

torna-se claro que o valor $M_{kl,ij}$ iria produzir o mesmo resultado, concluindo-se assim a simetria da matriz para qualquer domínio.

$$u_{ij} = \alpha(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) + \beta(u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) = u_{ji},$$

(ii) Para qualquer domínio Ω_h a matriz M é definida positiva.

Reparamos que mais uma vez em qualquer linha existe uma dominância (não estrita) do termo diagonal. Pelo teorema de Gerschgorin (e.g. [1]), como a matriz é simétrica podemos concluir que todos os valores próprios pertencem ao intervalo $[0, 2]$. Como já vimos que o problema discreto é bem posto, o sistema é invertível e podemos excluir o valor próprio nulo. Assim, os valores próprios estão no intervalo $]0, 2]$ e portanto a matriz M é definida positiva, podendo aplicar-se os métodos de Gauss-Seidel e SOR.

Método de Gauss-Seidel

A aplicação do método de Gauss-Seidel é extremamente simples, no sentido em que basta estabelecer o processo iterativo

$$u_{ij}^{(k+1)} = \alpha(u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k+1)}) + \beta(u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k+1)}).$$

Aqui está implícita uma ordenação... os termos $u_{i-1,j}$ aparecem anteriores a $u_{i,j}$ (e o mesmo se passa para os termos $u_{i,j-1}$), o que é feito automaticamente ao serem definidos os ciclos em i e em j . Com efeito, computacionalmente, resume-se a definir uma lista com os valores $u_{[[i,j]]}$ e, dentro de um ciclo em i e em j , atribuir simplesmente

$$u_{[[i,j]]} = \alpha(u_{[[i+1,j]]} + u_{[[i-1,j]]}) + \beta(u_{[[i,j+1]]} + u_{[[i,j-1]]}).$$

Como o valor recentemente atribuído é o que consta nos registos de $u_{[[i-1,j]]}$ e de $u_{[[i,j-1]]}$, a implementação do método de Gauss-Seidel é imediata (ao contrário do que aconteceria se tentássemos implementar o método de Jacobi, pois seria preciso guardar numa outra lista os valores anteriores)!

Outra vantagem deste processo é que basta atribuir inicialmente os valores na fronteira g_{ij} a $u_{[[i,j]]}$ e executar o ciclo apenas nos pontos $p_{ij} \in \Omega_h$ (excluindo assim os pontos da fronteira $p_{ij} \in \partial\Omega_h$).

Os valores $u_{[[i,j]]}$ para os pontos $p_{ij} \in \Omega_h$ podem ser inicializados com um valor qualquer (por exemplo, zero). No entanto, no caso da equação de Laplace, como já sabemos que a solução no interior estará entre os valores máximo e mínimo dados na fronteira, será de bom senso inicializar com uma média dos valores da fronteira.

É óbvio que, como os únicos valores conhecidos são os valores da fronteira, o método iterativo dará pior resultados na generalidade dos pontos interiores. Há que pensar que a informação da fronteira apenas chegará verdadeiramente aos pontos mais interiores após um número de iterações razoável. Esse número de iterações está directamente ligado ao número

$$r = \max_{p_{ij}, p_{kl} \in \bar{\Omega}_h} \{|i - k|, |j - l|\}$$

que é o correspondente discreto do diâmetro de $\bar{\Omega}_h$. Assim, se considerarmos uma aproximação exigente, com bastantes pontos internos, será também preciso exigir um grande número de passos no método iterativo, no mínimo o número deverá ser superior ao dobro de r para que a aproximação tenha algum significado.

Não é uma boa estratégia tentar imediatamente obter uma aproximação com um grande número de pontos internos, como já vimos isso exige um grande número de passos no método iterativo. O melhor processo é começar por considerar poucos pontos internos para obter uma aproximação rapidamente e usar essa aproximação como iterada inicial numa discretização com um maior número de pontos. Normalmente, considera-se um novo $h = \frac{h^*}{2}$, ou seja, é metade do anterior h^* . Ou seja, supondo que tínhamos obtido os valores iniciais para um certo $h^* = 2h$, então poderíamos inicializar $u_{[[i,j]]}$ a partir de $u_{[[i^*,j^*]]}^*$ da seguinte forma. Sendo $p_{ij} = p_{i^*j^*}^*$ (i.e. (i, j) , nos novos índices, representa o mesmo ponto que (i^*, j^*) , nos antigos), aos valores

$$u_{[[i,j]], u_{[[i+1,j]], u_{[[i,j+1]], u_{[[i+1,j+1]]}$$

é atribuído o valor de $u_{[[i^*,j^*]]}^*$. Isto garante que os valores iniciais estejam já próximo da solução e rapidamente poderemos obter bons valores, sem haver necessidade de considerar um número exagerado de passos no processo iterativo.

Método SOR

Outra hipótese para melhorar o processo iterativo, é acelerar a convergência usando um método de relaxação, mais concretamente o método de relaxação SOR (successive over relaxation⁵):

$$u_{ij}^{(k+1)} = (1 - \omega)u_{ij}^{(k)} + \omega \left(\alpha(u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k+1)}) + \beta(u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k+1)}) \right)$$

em que $\omega \in]0, 2[$ é um parâmetro qualquer (no caso em que $\omega = 1$, obtemos o método de Gauss-Seidel).

⁵**Teorema** (Ostrowski): O método SOR converge para matrizes definidas positivas desde que $\omega \in]0, 2[$.

Trata-se também de uma condição necessária (Teorema de Kahan) desde que se exija a convergência para qualquer iterada inicial.

Há um valor optimal para ω , que designamos por $\omega^* \in]1, 2[$, para o qual a convergência do método SOR será mais rápida. No caso de um domínio Ω_h qualquer não é possível estabelecer *a priori* qual o melhor valor. No entanto, no caso de um domínio rectangular, é possível mesmo mostrar que dada a matriz⁶ $M = L + D + U$, definindo $B = D^{-1}(L + U)$, o valor optimal será dado através do raio espectral de B ,

$$\rho(B) = \frac{1}{2} \left(\cos\left(\frac{\pi}{n_x + 1}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{n_y + 1}\right) \right)$$

na fórmula

$$\omega^* = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(B)^2}}$$

No caso $n_x = n_y = n$, fica simplesmente

$$\omega^* = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)^2}},$$

ou seja,

$$\omega^* = \frac{2}{1 + \sin\left(\frac{\pi}{n+1}\right)}.$$

Como a rapidez de convergência será independente dos dados de fronteira, uma vez determinado o factor ω^* ele poderá ser ainda utilizado para outros problemas. Para confirmar a rapidez de convergência, podemos usar uma solução conhecida, como as obtidas no método de separação de variáveis.

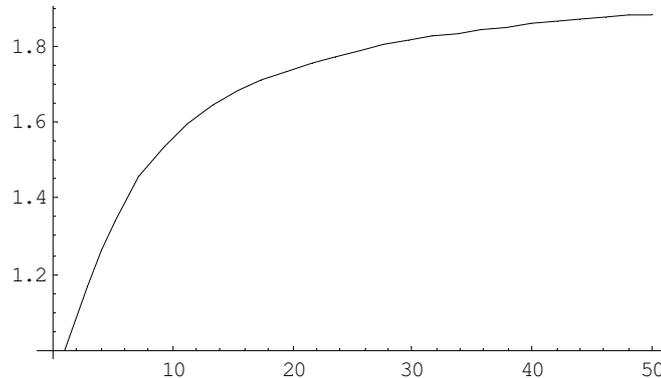


Figura 2.2.6: Nesta figura mostra-se a influência da dimensão do sistema na variação do parâmetro optimal ω^* do método de SOR. O caso apresentado é o caso de um quadrado, em que é possível obter uma fórmula explícita. Podemos constatar que mesmo para um sistema de dimensão pequena, os valores optimais verificam normalmente $\omega > 1.5$, sendo assim aconselhável proceder à utilização de um parâmetro de relaxação superior a 1.5. No entanto, deve ter-se em atenção que, caso ω esteja demasiado próximo de 2, e devido ao rápido crescimento do erro para parâmetros superiores ao valor optimal, o método de SOR pode ser menos eficaz que o método de Gauss-Seidel.

⁶A decomposição $M = L + D + U$ significa, como habitualmente:

L = parte de M inferior à diagonal,

D = parte diagonal de M ,

U = parte de M superior à diagonal.

Erro do sistema – estimativas a posteriori

Relembremos brevemente uma parte relativa a métodos iterativos para sistemas lineares e como é possível ter uma noção do erro que é cometido na aproximação da solução do sistema. Seja $M\mathbf{u} = \mathbf{b}$ o sistema a resolver. Decompondo a matriz M na forma $M = L + D + U$, definimos para $\omega \neq 0$,

$$M_\omega = L + \frac{1}{\omega}D, \quad N_\omega = \left(1 - \frac{1}{\omega}\right)D + U$$

$$C_\omega = -M_\omega^{-1}N_\omega$$

e verificamos que se trata de um método de ponto fixo em que a função iteradora é $G\mathbf{u} = M_\omega^{-1}\mathbf{b} + C_\omega\mathbf{u}$, ficando assim definido o processo iterativo

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= M_\omega^{-1}\mathbf{b} + C_\omega\mathbf{u}_n \Leftrightarrow M_\omega\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{b} - N_\omega\mathbf{u}_n \\ \Leftrightarrow \mathbf{u}_{n+1} &= \omega D^{-1}\mathbf{b} + (1 - \omega)\mathbf{u}_n - \omega D^{-1}(L\mathbf{u}_{n+1} + U\mathbf{u}_n), \end{aligned}$$

o que é equivalente a processar a iteração da forma especificada no início deste parágrafo.

Sabemos que para o método do ponto fixo são válidas as estimativas de erro

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_n\| \leq \|C_\omega\|^n \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_0\|, \quad \text{ou ainda } \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_n\| \leq \frac{\|C_\omega\|^n}{1 - \|C_\omega\|} \|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_0\|,$$

no entanto, calcular $\|C_\omega\|$ é impraticável, num caso genérico, pois implicaria o cálculo de matrizes inversas.

Mas, como $\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n = C_\omega(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1})$, é possível ter uma noção do valor de $\|C_\omega\|$ efectuando a razão

$$r_n = \frac{\|\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n\|}{\|\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1}\|} \leq \|C_\omega\|,$$

e apesar de podermos garantir apenas a majoração e não a minoração, para valores de n elevados a razão r_n dá-nos um valor aproximado de $\|C_\omega\|$.

2.2.7 Convergência e estimativa de erro

Vamos agora seguir [10] para mostrar a convergência do método de diferenças finitas e a estimativa de erro.

Lema 2.2.1 *Consideremos $\bar{\Omega}_h$ um conjunto discreto qualquer, contido num quadrado $Q = [0, a] \times [0, a]$. Então*

$$\max_{p_{ij} \in \Omega_h} |v_{ij}| \leq \max_{p_{ij} \in \partial\Omega} |v_{ij}| + \frac{a^2}{2} \max_{p_{ij} \in \Omega_h} |\tilde{\Delta}v_{ij}| \quad (2.12)$$

Demonstração.

Consideramos a função auxiliar $w(x, y) = \frac{1}{2}x^2$, e observamos que nos pontos p_{ij} do reticulado em Q temos

$$0 \leq w_{ij} \leq \frac{a^2}{2}$$

onde $w_{ij} = w(x_i, y_j)$. Portanto,

$$\tilde{\Delta}w_{ij} = \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{2}(x_i + h)^2 - 2\frac{1}{2}x_i^2 + \frac{1}{2}(x_i - h)^2 \right) = \frac{1}{h^2}(x_i h - x_i h + h^2),$$

ou seja, $\tilde{\Delta}w_{ij} = 1$.

Definimos agora

$$v_{ij}^\pm = \pm v_{ij} + w_{ij}M,$$

em que $M = \max_{\Omega} |\tilde{\Delta}v_{ij}|$. Para qualquer ponto interior, $p_{ij} \in \Omega_h$, temos

$$\tilde{\Delta}v_{ij}^\pm = \pm \tilde{\Delta}v_{ij} + M \geq 0$$

e assim pelo princípio do máximo discreto,

$$v_{ij}^\pm \leq \max_{p_{nm} \in \partial\Omega_h} v_{nm}^\pm = \max_{p_{nm} \in \partial\Omega_h} (\pm v_{nm} + w_{nm}M) \leq \max_{p_{nm} \in \partial\Omega_h} (\pm v_{nm}) + \frac{a^2}{2}M.$$

Reparando agora que, pela definição de M ,

$$\pm v_{ij} = v_{ij}^\pm - w_{ij}M \leq v_{ij}^\pm,$$

surge imediatamente

$$\pm v_{ij} \leq \max_{\partial\Omega} (\pm v_{ij}) + \frac{a^2}{2}M$$

que implica o resultado. \square

Assumindo uma regularidade da solução $u \in C^4(\bar{\Omega})$, podemos agora estabelecer uma majoração para o erro pontual $|e_{ij}|$, definido por

$$e_{ij} = u(x_i, y_j) - u_{ij},$$

e para a norma $\|\mathbf{e}_h\|_\infty$, definindo $\mathbf{e}_h = (e_{ij})$, o vector do erro.

Teorema 2.2.4 *Seja $u \in C^4(\bar{\Omega})$ a solução exacta do problema de Poisson. Consideremos $\bar{\Omega}_h$ um conjunto discreto aproximação de $\bar{\Omega}$, e contido num quadrado $Q = [0, a]^2$. Então*

$$|e_{ij}| \leq \max_{\Omega_h} |u(x_i, y_j) - u_{ij}| \leq C_1 h_x^2 + C_2 h_y^2, \quad (2.13)$$

em que $C_1 = \frac{a^2}{24} \max_{\mathbf{w} \in \Omega} |\partial_x^4 u(\mathbf{w})|$, $C_2 = \frac{a^2}{24} \max_{\mathbf{w} \in \Omega} |\partial_y^4 u(\mathbf{w})|$. Ou ainda, se $h_x = h_y = h$,

$$\|\mathbf{e}_h\|_\infty = \|u(x_i, y_j) - u_{ij}\|_{\infty, \Omega_h} \leq \frac{a^2}{24} (\|\partial_x^4 u\|_{\infty, \bar{\Omega}} + \|\partial_y^4 u\|_{\infty, \bar{\Omega}}) h^2. \quad (2.14)$$

Demonstração:

Já vimos que o operador de truncatura local para o laplaciano verifica, para $p_{ij} \in \Omega_h$,

$$\tau(u)_{ij} = \Delta u(x_i, y_j) - \tilde{\Delta}u(x_i, y_j) = \frac{-1}{12} (h_x^2 \partial_x^4 u(\xi_i, y_j) + h_y^2 \partial_y^4 u(x_i, \xi_j)).$$

Definindo $v_{ij} = u_{ij} - u(x_i, y_j)$, como $\Delta u(x_i, y_j) = f_{ij}$ e também $\tilde{\Delta} u_{ij} = f_{ij}$, então

$$\tilde{\Delta} v_{ij} = f_{ij} - \tilde{\Delta} u(x_i, y_j) = \Delta u(x_i, y_j) - \tilde{\Delta} u(x_i, y_j) = \tau(u)_{ij}.$$

Como as condições de fronteira são iguais, obtemos

$$v_{ij} = u_{ij} - u(x_i, y_j) = 0 \text{ para } (x_i, y_j) \in \partial\Omega_h.$$

Pelo Lema anterior,

$$\max_{p_{ij} \in \Omega_h} |v_{ij}| \leq \max_{p_{ij} \in \partial\Omega_h} |v_{ij}| + \frac{a^2}{2} \max_{p_{ij} \in \Omega_h} |\tilde{\Delta} v_{ij}|$$

e portanto

$$\max_{p_{ij} \in \Omega_h} |u(x_i, y_j) - u_{ij}| \leq 0 + \frac{a^2}{2} \max_{p_{ij} \in \Omega_h} |\tau(u)_{ij}|.$$

Concluimos que

$$\max_{p_{ij} \in \Omega_h} |u(x_i, y_j) - u_{ij}| \leq \frac{a^2}{24} \max_{p_{ij} \in \Omega_h} |h_x^2 \partial_x^4 u(\xi_i, y_j) + h_y^2 \partial_y^4 u(x_i, \xi_j)|.$$

e deduzimos o resultado. \square

Observação: A demonstração foi apresentada para o problema de Dirichlet, mas podemos reparar que se tivéssemos um problema que inclísse numa parte Γ_h^1 condições de Neumann, o mesmo raciocínio seria aplicável, se admitisse erro nulo na aproximação da derivada normal. Com efeito, a única parte que seria diferente diria respeito a $\max_{p_{ij} \in \partial\Omega_h} |v_{ij}|$ que, no entanto, continuaria a ser nulo, já que as condições de Neumann nulas (se o erro fosse nulo) implicariam que o máximo seria em Γ_h^0 que teria condições de Dirichlet nulas.

2.2.8 Caso tridimensional

Com é obvio, toda a análise que foi efectuada anteriormente pode ser estendida sem grande dificuldade para dimensões superiores, tudo se resume a considerar uma nova aproximação dos operadores diferenciais. Por exemplo, no caso tridimensional, o operador de Laplace passará a ser aproximado por

$$\tilde{\Delta} u_{ijk} = \frac{u_{i+1,j,k} - 2u_{ijk} + u_{i-1,j,k}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{ijk} + u_{i,j-1,k}}{h_y^2} + \frac{u_{i,j,k+1} - 2u_{ijk} + u_{i,j,k-1}}{h_z^2} \quad (2.15)$$

que constitui ainda uma aproximação de segunda ordem. No caso mais simples, da equação de Laplace, e se considerarmos $h_x = h_y = h_z$, obtemos imediatamente a fórmula da média discreta

$$u_{ijk} = \frac{1}{6}(u_{i+1,j,k} + u_{i-1,j,k} + u_{i,j+1,k} + u_{i,j-1,k} + u_{i,j,k+1} + u_{i,j,k-1}), \quad (2.16)$$

o mesmo acontecendo para dimensões superiores...

2.3 Outras equações e sistemas elípticos

Vamos agora abordar ligeiramente casos de outras equações, de ordem superior, e também alguns sistemas de equações elípticas. A noção de operador elíptico existe para operadores diferenciais de ordem superior e também para operadores vectoriais. Iremos ver alguns casos mais significativos, que têm aplicação em problemas da física-matemática. Nomeadamente, iremos abordar ligeiramente o operador bilaplaciano, o operador da elasticidade (ou de Navier) e o operador de Stokes.

2.3.1 Bilaplaciano

Com aplicação importante na teoria da deformação de placas (com espessura negligenciável), introduzimos o *operador bilaplaciano*, que em \mathbf{R}^2 é

$$\Delta^2 u = \Delta(\Delta u) = \partial_x^4 u + 2\partial_x^2 \partial_y^2 + \partial_y^4 u,$$

e que se trata ainda de um operador elíptico. Uma função que verifica $\Delta^2 u = 0$ é designada por função *biharmónica*.

Portanto se tivermos uma placa fixa sujeita a uma carga f (por exemplo, devido à gravidade), obtemos um deslocamento u nos pontos (x, y) da placa $\Omega \subset \mathbf{R}^2$, como solução do problema

$$\begin{cases} \Delta^2 u = f, & \text{em } \Omega, \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega, \\ \partial_n u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases}$$

Ao ser verificada esta equação obtemos o deslocamento para o estado de equilíbrio. Existem várias possíveis condições de fronteira que são adaptadas às várias maneiras como a placa está apoiada, mas aqui apenas consideramos apoios fixos. Iremos ver mais à frente que este problema está bem posto.

No quadro da aproximação com diferenças finitas, podemos obter uma aproximação de segunda ordem se usarmos convenientemente a expansão em série de Taylor a partir de 12 pontos (ver figura), e obtém-se, para $h_x = h_y$,

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}^2 u_{ij} &= \alpha_0 u_{ij} + \alpha_1 (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) \\ &\quad + \alpha_2 (u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}) + \alpha_3 (u_{i+2,j} + u_{i-2,j} + u_{i,j+2} + u_{i,j-2}) \end{aligned}$$

com os pesos

$$\alpha_0 = \frac{20}{h^4}, \quad \alpha_1 = -\frac{8}{h^4}, \quad \alpha_2 = \frac{2}{h^4}, \quad \alpha_3 = \frac{1}{h^4}.$$

No caso de funções biharmónicas ($f = 0$) ficamos com a fórmula

$$\begin{aligned} u_{ij} &= \frac{2}{5} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) \\ &\quad - \frac{1}{10} (u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}) - \frac{1}{20} (u_{i+2,j} + u_{i-2,j} + u_{i,j+2} + u_{i,j-2}). \end{aligned}$$

• Há ainda uma outra possibilidade de abordagem, que consiste em decompor o problema com o bilaplaciano em dois problemas com a equação de Poisson, ou seja consideramos

$$\begin{cases} \Delta u = v \\ \Delta v = f \end{cases}$$

e é claro que $\Delta(\Delta u) = \Delta v = f$, pelo que passamos a ter uma equação de Poisson na sua forma vectorial, já que introduzindo $\mathbf{w} = (u, v)$, e $\mathbf{g} = (v, f)$ ficamos com $\Delta \mathbf{w} = \mathbf{g}$, notando, no entanto, que o segundo membro depende de v e consequentemente de \mathbf{w} .

Este tipo de abordagem permite uma discretização clássica, ou seja

$$\begin{cases} u_{ij} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) - \frac{h^2}{4}v_{ij}, \\ v_{ij} = \frac{1}{4}(v_{i+1,j} + v_{i-1,j} + v_{i,j+1} + v_{i,j-1}) - \frac{h^2}{4}f_{ij}, \end{cases}$$

mas notamos que isto traz alguma análise detalhada na fronteira, pois implicaria converter os dados na fronteira nos valores de v_{ij} , ou seja, conhecer Δu_{ij} a partir dos valores da segunda derivada normal $\partial_n \partial_n u$.

2.3.2 Elasticidade linear

Um outro exemplo interessante consiste em tratar problemas elípticos que têm a sua origem na elasticidade linear, e que dão origem a um sistema de equações às derivadas parciais. Para esse efeito, consideramos uma entidade, designada por *tensor das tensões*,

$$\sigma_{ij}(\mathbf{u}) = \lambda \operatorname{div}(\mathbf{u})\delta_{ij} + \mu(\partial_i u_j + \partial_j u_i).$$

No caso bidimensional, $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ representa o vector deslocamento, que será a incógnita, e λ, μ são parâmetros positivos, associados às características do meio elástico, designados por coeficientes de Lamé. Este tensor das tensões, assume, em certa medida, uma generalização do vector gradiente, pelo que usaremos a notação

$$\nabla^* \mathbf{u} = \sigma_{ij}(\mathbf{u}) = \lambda \operatorname{div}(\mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T),$$

já que é consistente com outras noções semelhantes e estabelece um paralelo com o problema de Laplace, ou seja, podemos definir o denominado *operador de Navier*,

$$\Delta^* = \operatorname{div}(\nabla^*)$$

e também

$$\partial_n^* \mathbf{u} = \nabla^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{n},$$

verificando-se a validade do teorema

$$\int_{\Omega} \Delta^* \mathbf{u} = \int_{\partial\Omega} \partial_n^* \mathbf{u}$$

e da 2ª fórmula de Green (também designada por fórmula de Betti)

$$\int_{\Omega} \Delta^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - \int_{\Omega} \Delta^* \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = \int_{\partial\Omega} \partial_n^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - \int_{\partial\Omega} \partial_n^* \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}.$$

É ainda fácil estabelecer uma expressão explícita para Δ^* ,

$$\Delta^* \mathbf{u} = \mu \Delta \mathbf{u} + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}).$$

O problema de Dirichlet associado à equação da elastoestática linear escreve-se, assim, simplesmente,

$$\begin{cases} \Delta^* \mathbf{u} = \mathbf{f} & \text{em } \Omega, \\ \mathbf{u} = \mathbf{g} & \text{sobre } \partial\Omega, \end{cases}$$

e para o correspondente problema de Neumann, a derivada normal passa a ser $\partial_n^* \mathbf{u}$.

Quanto a uma discretização por diferenças finitas, basta reparar que da relação $\Delta^* \mathbf{u} = \mu \Delta \mathbf{u} + (\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u}$, podemos proceder à aproximação de $\Delta \mathbf{u}$ de forma semelhante à que fizemos no caso escalar, ou seja

$$\tilde{\Delta} \mathbf{u}_{ij} = \frac{\mathbf{u}_{i+1,j} - 2\mathbf{u}_{ij} + \mathbf{u}_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{\mathbf{u}_{i,j+1} - 2\mathbf{u}_{ij} + \mathbf{u}_{i,j-1}}{h_y^2}.$$

A outra parte, relativa à aproximação de $\nabla \nabla \cdot \mathbf{u}$, pode ser feita usando a definição

$$\nabla \nabla \cdot \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \partial_x (\partial_x u^{(1)} + \partial_y u^{(2)}) \\ \partial_y (\partial_x u^{(1)} + \partial_y u^{(2)}) \end{bmatrix},$$

em que aqui escrevemos $\mathbf{u} = (u^{(1)}, u^{(2)})$. Podemos manter a aproximação de segunda ordem para $\partial_x^2 u^{(1)}$, para $\partial_y^2 u^{(2)}$, e aproximar as derivadas cruzadas $\partial_x \partial_y u^{(2)}$, $\partial_y \partial_x u^{(1)}$ com um desenvolvimento de Taylor nas duas variáveis. Basta reparar que

$$v(x + h_x, y + h_y) = \sum_{i,j \geq 0} \frac{h_x^i h_y^j}{(i+j)!} \partial_x^i \partial_y^j v(x, y),$$

ou seja, para $h_x = h_y$,

$$v_{i \pm 1, j \pm 1} = v_{ij} \pm h(\partial_x + \partial_y)v_{ij} \pm h^2 \partial_{xy}^2 v_{ij} + h^2 \frac{1}{2}(\partial_x^2 + \partial_y^2)v_{ij} + \dots$$

Com simples cálculos, é possível mostrar que

$$\partial_{xy}^2 v_{ij} = \partial_{yx}^2 v_{ij} = \frac{v_{i+1,j+1} - v_{i-1,j+1} - v_{i+1,j-1} + v_{i-1,j-1}}{4h_x h_y} + O(h_x^2) + O(h_y^2)$$

e assim obter uma aproximação de segunda ordem para $\Delta^* \mathbf{u}_{ij}$. Esta aproximação utiliza um esquema com uma molécula de 8 átomos em quadrado, como mostra figura seguinte:

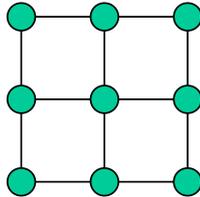


Figura 2.2.7: Molécula quadrada para uma aproximação de segunda ordem do operador de Navier.

2.3.3 Sistema de Stokes

Referimos ainda o sistema de equações de Stokes, que representa um modelo para o escoamento lento de um fluido incompressível. Neste caso, é fundamental introduzir o *tensor de Stokes*, que é dado através da pressão p e do vector velocidade \mathbf{u} por

$$\nabla^S(\mathbf{u}, p) = -p\mathbf{I} + \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T).$$

Usamos a notação com o gradiente, para realçar as semelhanças com o operador de Laplace. No entanto, para além de exigirmos o conhecimento de

$$\Delta^S(\mathbf{u}, p) = \nabla \cdot \nabla^S(\mathbf{u}, p) = \mu\Delta\mathbf{u} - \nabla p$$

é necessário ainda considerar que a divergência do campo de velocidades seja nula, ou seja, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

O sistema de Stokes fica assim

$$\begin{cases} \mu\Delta\mathbf{u} - \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \end{cases}$$

e na fronteira impõe-se normalmente condições de Dirichlet (apenas em \mathbf{u}). É claro que a pressão, que também é incógnita do problema, apenas irá ficar determinada a menos de uma constante.

Uma discretização simples, usando diferenças centradas para as derivadas de primeira ordem, leva a uma aproximação de segunda ordem para o gradiente da pressão,

$$\nabla p_{ij} = \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i-1,j}}{2h_x}, \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j-1}}{2h_y} \right) + O(h_x^2) + O(h_y^2),$$

e também para a divergência da velocidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{ij} = \frac{u_{i+1,j}^{(1)} - u_{i-1,j}^{(1)}}{2h_x} + \frac{u_{i,j+1}^{(2)} - u_{i,j-1}^{(2)}}{2h_y} + O(h_x^2) + O(h_y^2).$$

Repare-se que o aparecimento da pressão, faz surgir uma nova incógnita em cada ponto interior (... e na fronteira), no entanto, há também uma nova equação que é dada pela imposição de divergência nula. Considerando, por exemplo, $\mu = 1$ e $\mathbf{f} = 0$, com $h_x = h_y$, obtemos as equações em cada ponto $(x_i, y_j) \in \Omega_h$,

$$\begin{cases} \frac{u_{i+1,j}^{(1)} + u_{i-1,j}^{(1)} + u_{i,j+1}^{(1)} + u_{i,j-1}^{(1)} - 2u_{ij}^{(1)}}{h^2} = \frac{p_{i+1,j} - p_{i-1,j}}{2h} \\ \frac{u_{i+1,j}^{(2)} + u_{i-1,j}^{(2)} + u_{i,j+1}^{(2)} + u_{i,j-1}^{(2)} - 2u_{ij}^{(2)}}{h^2} = \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j-1}}{2h} \\ u_{i+1,j}^{(1)} - u_{i-1,j}^{(1)} + u_{i,j+1}^{(2)} - u_{i,j-1}^{(2)} = 0 \end{cases}$$

e há uma dificuldade imediata, já que na fronteira os valores p_{ij} são também desconhecidos.

Uma possibilidade de contornar este problema consiste em considerar pontos intermédios substituindo, por exemplo, a aproximação $\frac{p_{i+1,j} - p_{i-1,j}}{2h}$ por $\frac{p_{i+1/2,j} - p_{i-1/2,j}}{h}$. No entanto a aproximação envolve detalhes que não abordaremos aqui (para maior detalhe, consultar por exemplo [17]).

2.4 Exemplos computacionais (Laplaciano)

• **Exemplo 1.** Para ilustrarmos a convergência do esquema de diferenças finitas aplicado à equação de Poisson, começamos por considerar um exemplo académico, em que a solução é conhecida

$$u(x, y) = \cos(\pi x/4) \cos(\pi y/4) \quad (2.17)$$

e assim, $\Delta u = f$ com $f = -\frac{\pi^2}{8}u$. Consideramos o domínio $\Omega =]-4, 4[^2 \setminus (\bar{B}_1^\infty(-2, 2) \cup \bar{B}_1^\infty(2, -2))$, onde $\bar{B}_\rho^\infty(z) = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x - z\|_\infty \leq \rho\} = z + [-1, 1]^2$, que tem uma fronteira com 3 componentes conexas – uma externa Γ_0 fronteira do quadrado maior $] - 4, 4[^2$, e duas internas, Γ_1 e Γ_2 , fronteiras dos quadrados aí inscritos (ou seja, $\bar{B}_1^\infty(-2, 2)$ e $\bar{B}_1^\infty(2, -2)$, respectivamente). Na fronteira Γ_0 consideramos um condição de Neumann homogénea, $\partial_{\mathbf{n}}u = 0$, que é verificada pela solução apresentada, e nas fronteiras Γ_1, Γ_2 consideramos a condição de Dirichlet dada pelos valores de u (ou seja $g = u$).

Consideramos a resolução exacta do sistema linear resultante do método das diferenças finitas usando a discretização de segunda ordem do Laplaciano (e da condição de Neumann). Para $h = h_x = h_y$, obtemos os resultados que se apresentam em tabela

h	1	0.5	0.25	0.125	0.0625
$\ e_h\ _\infty$	0.0588	0.0141	0.00348	0.000865	0.000216

Estes resultados evidenciam um comportamento quadrático do erro, $\|e_h\|_\infty \approx 0.057h^2$, conforme previsto pela discretização de segunda ordem, e na Fig.2.4.1 é apresentado o gráfico do erro, que é semelhante ao gráfico da solução dada por (2.17), a menos de factor de escala (o erro é quase 5000 vezes inferior). Esta circunstância não é estranha ao facto das 4ª derivadas da solução (que estão no erro de truncatura) serem semelhantes à função, a menos de factor de escala (notando ainda que esse erro de truncatura envolve o factor $\left|2\frac{h^2}{12}\frac{\pi^2}{256}u\right| \leq 0.000248$, próximo do erro registado).

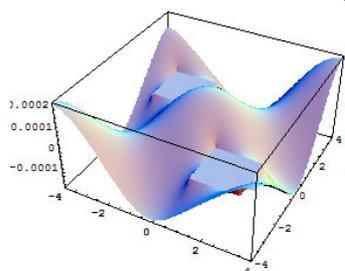


Figura 2.4.1: Gráfico do erro para $h = 0.0625$, considerando a solução exacta do sistema linear com $129^2 - 2 \cdot 33^2 = 14463$ incógnitas.

• **Exemplo 2.** Para o mesmo domínio, considerámos a solução do problema $\Delta u = 0$, exigindo valores constantes sobre as fronteiras interiores, mais precisamente, $u = 100^\circ C$ em Γ_1 e $u = 20^\circ C$ em Γ_2 , mantendo a condição de Neumann nula sobre Γ_0 . A solução não é conhecida, sendo apresentadas em Fig.2.4.2 as aproximações obtidas com $h = 0.5$ (à esquerda) e com $h = 0.1$ (à direita). O gráfico obtido com $h = 0.5$ evidencia já o aspecto global da solução, devendo notar-se que neste caso, havendo singularidades das derivadas da solução nas fronteiras interiores, não

está garantida a convergência, pelo que a aproximação é naturalmente mais grosseira próximo dessas fronteiras. Reparamos ainda na constatação do princípio do máximo discreto, pois o máximo está na fronteira Γ_1 , e também do mínimo, que está na fronteira Γ_2 .

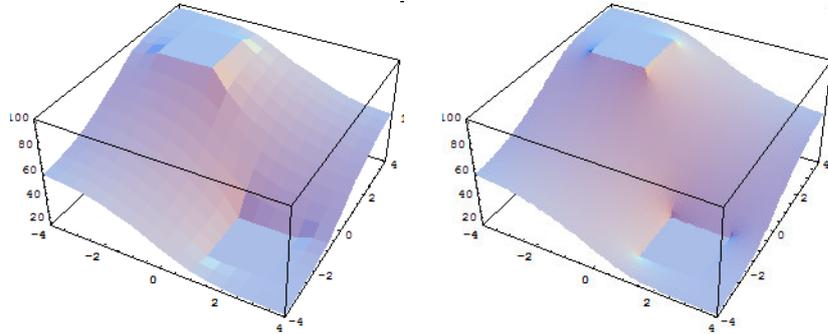


Figura 2.4.2: Gráficos da aproximação da solução do Exemplo 2, considerando uma aproximação grosseira com $h = 0.5$ (à esquerda), e uma mais fina, com $h = 0.1$ (à direita).

• **Exemplo 3.**

Neste exemplo consideramos a aplicação de métodos iterativos para a resolução do sistema linear. O domínio é $\Omega =]-1, 1[^2$, e consideramos o problema de Dirichlet na equação de Laplace, com a solução exacta $u(x, y) = 2 \cosh(y)(\sin(x) + \cos(x))$. Na Fig.2.4.3, com $h = \frac{1}{15}$, apresentam-se os gráficos da solução (à direita), da aproximação resolvendo o sistema pelo método de Gauss-Seidel com 80 iterações (ao centro), e do erro (à esquerda). De notar que aqui o erro inclui a soma do erro da discretização com o erro da aproximação do sistema. O valor máximo do erro absoluto é razoavelmente elevado e é obtido num ponto próximo do centro. Neste caso o número de iterações no método de Gauss-Seidel foi pequeno e os pontos centrais são os últimos a receber a contribuição da condição de fronteira, o que justifica este erro mais elevado no centro.

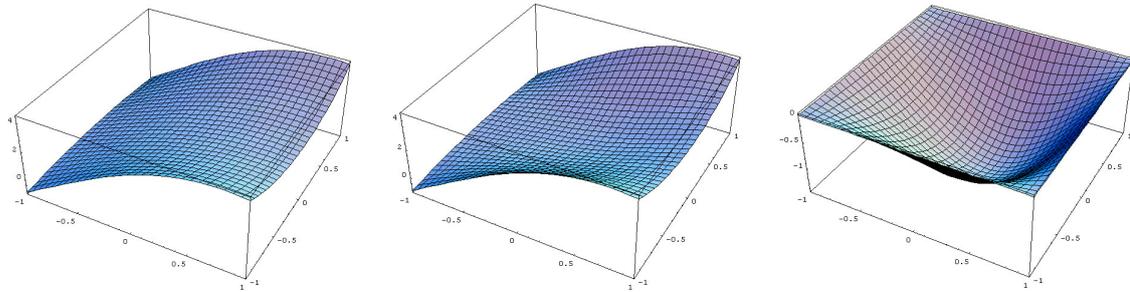


Figura 2.4.3: Gráficos da solução exacta (à esquerda), da solução aproximada usando o método de Gauss-Seidel com 80 iterações (ao centro), e do erro (à direita).

Na tabela seguinte apresenta-se a variação do erro máximo aumentando m o número de iterações no método de Gauss-Seidel.

m	$\ u - u_h^{(m)}\ _\infty$	m	$\ u - u_h^{(m)}\ _\infty$
80	1.4187	640	0.002589
160	0.5856	1280	0.0004585
320	0.1006	2560	0.0004610

Aqui usámos a notação $u_h^{(m)}$ para designar o valor obtido para o método de Gauss-Seidel com m iterações e um passo h fixo. Até $m = 640$ nota-se um acentuado decréscimo no valor absoluto do erro, mas de $m = 1280$ para $m = 2560$ há um pequeno aumento. Isto deve-se obviamente ao facto de que para esse número elevado de iterações a solução aproximada do sistema é bastante boa e apenas resta o valor do erro de discretização do método das diferenças finitas. Repare-se que devemos separar o erro em

$$\|u - u_h^{(m)}\|_\infty \leq \|u - u_h\|_\infty + \|u_h - u_h^{(m)}\|_\infty,$$

em que a primeira parcela é o erro da discretização geométrica e a segunda parcela é o erro da aproximação da solução do sistema.

Capítulo 3

Diferenças Finitas em Problemas de Evolução

A aplicação de métodos de diferenças finitas é muito habitual em problemas de evolução, onde os operadores diferenciais incluem uma derivada parcial no tempo. No caso linear, o operador diferencial pode normalmente ser escrito na forma

$$\mathcal{D} = \partial_t - D_x$$

onde D_x representa um operador diferencial linear nas variáveis espaciais ($x \in \mathbb{R}^d$). Neste capítulo iremos estudar a aplicação de métodos de diferenças finitas às equações do calor e das ondas, representativas de problemas parabólicos e hiperbólicos.

Assim, obtemos a equação do calor (homogénea) considerando $D_x = \alpha \Delta_x$ (onde $\alpha > 0$ é um parâmetro de difusão), e podemos obter a equação das ondas considerando um sistema (c é a velocidade de propagação da onda),

$$\begin{cases} \partial_t u_1 = u_2 \\ \partial_t u_2 = c^2 \Delta_x u_1 \end{cases}$$

já que por substituição em u_2 se verifica $\partial_t^2 u_1 = c^2 \Delta_x u_1$. Este sistema pode ser expresso na forma $\mathcal{D}u = 0$ através de um operador vectorial $\mathcal{D} = \partial_t - (\#_2, c^2 \Delta_x \#_1)$.

A aplicação a estes problemas dos esquemas de diferenças finitas é normalmente muito simples, e é especialmente apropriado fazer a discretização no tempo por diferenças finitas, podendo a discretização no espaço ser feita também por um método de diferenças finitas ou por um outro (por exemplo, elementos finitos). Iremos estudar apenas o caso em que a discretização é feita por diferenças finitas em ambos os casos, concentrando-nos no caso mais simples, num problema de segunda ordem em que a dimensão espacial é 1.

3.1 Equação do Calor

A **equação do calor** que também é denominada *equação de difusão* é, na sua forma mais simples

$$\partial_t u(x, t) = \Delta_x u(x, t),$$

em que iremos considerar $x \in \Omega, t \in (t_0, +\infty)$. O domínio de aplicação é agora um conjunto $\Omega \times (t_0, +\infty)$ em dimensão $d + 1$, que corresponde a um *cilindro generalizado*, assumindo Ω

fixo (será um cilindro para $d = 2$ e Ω circular). Poderia ser considerada ainda uma variação do domínio (espacial) dependente do tempo $\Omega(t)$, mas iremos mesmo restringir ao caso mais simples, com $d = 1$ e onde $\Omega = (x_a, x_b)$ será um intervalo fixo.

Trata-se de uma equação parabólica, e o estudo que aqui faremos pode ser aplicado a outras equações similares. Esta equação modela a evolução de bastantes fenómenos físicos, relacionados com dissipação ou difusão, com é o caso da evolução da temperatura num corpo. Também está relacionada com alguns modelos de matemática financeira, nomeadamente com a equação de Black-Scholes, que com uma transformação de variáveis apropriada se pode reduzir à equação do calor.

• Separação de variáveis

Consideramos separação de variáveis $u(x, t) = v(x)w(t)$ na equação do calor, retirando (para $v, w \neq 0$)

$$v(x)w'(t) = \Delta_x v(x)w(t) \Leftrightarrow \frac{w'(t)}{w(t)} = \frac{\Delta_x v(x)}{v(x)} = \text{const.} = K$$

ou seja,

$$w' = Kw \wedge \Delta_x v = Kv.$$

Notamos que temos uma solução exponencial em w

$$w(t) = w_0 e^{Kt},$$

e uma solução de uma equação de Helmholtz em v . Em ambos os casos, o comportamento da solução depende do sinal de K .

Se $K > 0$, a solução cresce assintoticamente quando $t \rightarrow \infty$, e obtemos a equação de Helmholtz modificada em v . Este caso não tem correspondente físico na dissipação (difusão) do calor, ao contrário do caso $K < 0$. Assim, assumiremos que u decresce assintoticamente, considerando $K = -\mu^2$, obtendo no caso unidimensional

$$w(t) = w_0 e^{-\mu^2 t}, \quad v(x) = v_0 e^{i\mu x} + v_1 e^{-i\mu x}.$$

Temos assim, como possíveis soluções particulares (1D+1T), na forma trigonométrica,

$$u(x, t) = e^{-\mu^2 t} (c_0 \sin(\mu x) + c_1 \cos(\mu x)).$$

Notamos ainda que uma combinação destas soluções particulares pode nalguns casos levar à resolução do problema de valor inicial, considerando uma expansão em série de Fourier da condição inicial u_0

• Problema de Dirichlet (unicidade)

Consideramos o problema de Dirichlet, não homogéneo, em dimensão d , limitando a observação até um tempo $t_f < \infty$,

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \kappa \Delta_x u(x, t) + f(x, t), & (x, t) \in \Omega \times (t_0, t_f) & (i) \\ u(x, t_0) = u_0(x), & x \in \Omega & (ii) \\ u(x, t) = u_\Gamma(x, t), & (x, t) \in \partial\Omega \times (t_0, t_f) & (iii) \end{cases} \quad (3.1)$$

em que $\kappa > 0$ é uma constante de difusão. Por uma questão de simplificação iremos considerar frequentemente $\kappa = 1$ e $f = 0$, sem perda de generalidade.

Neste problema de evolução (3.1) distinguimos entre a *condição na fronteira* $\partial\Omega$ (iii), e a *condição inicial* (ii). É claro que ambas as condições podem ser consideradas como parte de uma única condição de fronteira para o domínio $\Omega \times (t_0, +\infty)$.

Admitindo que a solução é limitada no tempo, obtemos unicidade de solução, tendo-se mesmo o princípio do máximo/mínimo para a equação do calor homogénea (ie. $f = 0$),

$$\max_{\partial\Omega \times [t_0, t_f] \cup \tilde{\Omega} \times \{0\}} u = \max_{\tilde{\Omega} \times [t_0, t_f]} u$$

(analogamente para o mínimo). Isto garante ainda uma dependência contínua dos dados iniciais u_0 e dos dados na fronteira u_Γ .

Considerando $u = u_1 - u_2$ (diferença entre soluções), podemos ainda obter a unicidade em termos de um decrescimento da energia, definindo

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} u(x, t)^2 dx.$$

Portanto,

$$E'(t) = \int_{\Omega} \partial_t u(x, t) u(x, t) dx = \kappa \int_{\Omega} \Delta_x u(x, t) u(x, t) dx = -\kappa \int_{\Omega} \nabla_x u(x, t) \cdot \nabla_x u(x, t),$$

em que a última igualdade resulta de aplicar a fórmula de Green (já que $u = 0$ em $\partial\Omega$). É assim claro que a derivada da energia é sempre negativa, $E'(t) = -\kappa \|\nabla_x u(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}^2$, decrescente e menor que o valor inicial. Consequentemente $0 \leq E(t) \leq E(0) = u_0 - u_0 = 0$, ou seja $E \equiv 0$ e portanto $u \equiv 0$.

3.1.1 Diferenças finitas para a equação do calor

Consideramos o problema de Dirichlet para a equação homogénea, 1D+1T,

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\partial_t - \kappa \Delta_x)u(x, t) = f(x, t), & (x, t) \in (x_a, x_b) \times (t_0, t_f) \quad (i) \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in (x_a, x_b) \quad (ii) \\ u(x_a, t) = u_a(t), & t \in (t_0, t_f) \quad (iii) \\ u(x_b, t) = u_b(t), & t \in (t_0, t_f) \quad (iv) \end{array} \right. \quad (3.2)$$

notamos que a condição de fronteira (3.1)-(iii) foi aqui substituída por duas condições nos extremos (3.2)-(iii)+(iv), que correspondem à fronteira do intervalo $\Omega = (x_a, x_b)$.

Na aproximação por diferenças finitas usamos uma grelha de pontos (x_n, t_m) igualmente espaçados:

$$\begin{aligned} x_n &= x_a + nh_x \wedge t_m = t_0 + mh_t \\ h_x &= \frac{x_b - x_a}{N} \wedge h_t = \frac{t_f - t_0}{M} \end{aligned}$$

de forma a que $x_0 = x_a, x_N = x_b, t_M = t_f$. O espaçamento temporal h_t é normalmente diferente do espaçamento espacial h_x , e a relação entre ambos pode condicionar a estabilidade do esquema

de diferenças finitas adoptado. Como anteriormente, iremos abreviar u_{nm} para a aproximação de $u(x_n, t_m)$.

No problema de Dirichlet, as condições iniciais e aos limites são definidas directamente pelos valores impostos, ou seja

$$u_{n0} = u_0(x_n) \wedge u_{0m} = u_a(t_m) \wedge u_{Nm} = u_b(t_m).$$

Resta por isso considerar a aproximação no interior, ou seja, a aproximação do operador diferencial \mathcal{D} nos pontos internos,

$$\mathcal{D}u = \partial_t u - \kappa \Delta_x u.$$

Esta aproximação é local, através de diferenças finitas, de forma a garantir consistência nos pontos da grelha.

3.2 Esquema Explícito para a Equação do Calor

Procurando resolver $\mathcal{D}u = f$ consideramos, no caso mais simples, uma aproximação temporal com diferenças progressivas, e uma aproximação espacial com diferenças centradas (FTCS – *forward in time, centered in space*). Ou seja, consideramos a aproximação

$$\partial_t u(x_n, t_m) = \frac{u_{n,m+1} - u_{nm}}{h_t} + O(h_t), \quad \partial_x^2 u(x_n, t_m) = \frac{u_{n+1,m} - 2u_{nm} + u_{n-1,m}}{h_x^2} + O(h_x^2),$$

e desprezando os termos $O(h_t), O(h_x^2)$, obtemos

$$\mathcal{D}_h u_{nm} = \frac{u_{n,m+1} - u_{nm}}{h_t} - \kappa \frac{u_{n+1,m} - 2u_{nm} + u_{n-1,m}}{h_x^2},$$

o que, a partir de $\mathcal{D}_h u_{nm} = f_{nm}$, leva ao Esquema Explícito:

$$u_{n,m+1} = u_{nm} + \kappa h_t \frac{u_{n+1,m} - 2u_{nm} + u_{n-1,m}}{h_x^2} + h_t f_{nm}.$$

Consideremos a equação homogénea $f = 0$. A dependência explícita pode ser expressa por um operador \mathcal{M}_h

$$u_{n,m+1} = \mathcal{M}_h(u_{nm}) = u_{nm} + \kappa \frac{h_t}{h_x^2} (u_{n+1,m} - 2u_{nm} + u_{n-1,m}), \quad (3.3)$$

e podemos encarar $u_{nm} = \mathcal{M}_h^m(u_{n,0})$. Assim, a solução dependeria directamente das condições iniciais se ignorássemos as condições nos limites laterais.

Ilustramos esquematicamente, na Fig.3.2.1, a *molécula* do esquema explícito (à esquerda), ao evidenciar que o cálculo de $u_{n,m+1}$ é feito a partir dos 3 valores num tempo anterior, $u_{n+1,m}, u_{nm}, u_{n-1,m}$. Na figura da direita, ilustramos como o valor de $u_{n,m+1}$ depende sucessivamente dos valores situados na base da pirâmide cuja inclinação será definida pela razão

entre os passos h_t/h_x .

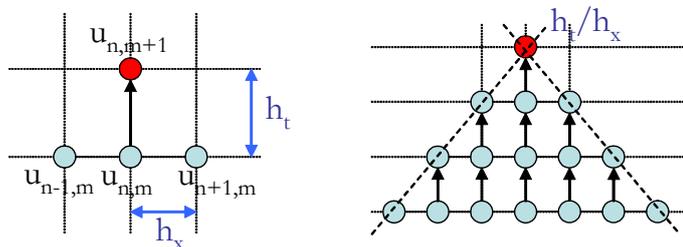


Figura 3.2.1: Esquema Explícito para a Equação do Calor: molécula do esquema (à esquerda) e pirâmide de dependência da avaliação (à direita).

Conforme já mencionado, sem o conhecimento dos valores nos extremos x_a e x_b o esquema dependeria apenas dos valores da base, ou seja dos valores iniciais $u_{n,0}$. O conhecimento dos valores $u_{0,m}$ e $u_{N,m}$ permite completar os restantes valores (à esquerda e à direita, respectivamente), de forma automática.

Sem outras restrições, poderíamos pensar que aumentando o valor de h_t face ao valor de h_x isso permitiria avançar mais rapidamente, para uma previsão antecipada no tempo, com menos passos. No entanto, iremos ver que isso não é arbitrariamente possível, pois para além de isso levar a aproximações grosseiras no tempo, pondo em causa a consistência, há ainda uma questão de estabilidade numérica que impede mesmo uma antecipação arbitrária.

Há assim três questões essenciais que devem ser abordadas, estando relacionadas entre si: (i) *Consistência*; (ii) *Estabilidade*; (iii) *Convergência*.

Iremos primeiro abordá-las no caso do esquema explícito, generalizando depois as noções utilizadas.

3.2.1 Consistência do Esquema Explícito

A consistência de um esquema é uma noção local, que mede a qualidade da aproximação local. Para esse efeito comparamos os novos valores dados pelo esquema, admitindo que os restantes eram exactos e que não continham já um erro de aproximação. Sendo $u_{n,m+1}$ os novos valores obtidos pelo esquema, a sua diferença face ao valor correcto $u(x_n, t_{m+1})$ medirá a consistência. Mais concretamente, temos um erro local de truncatura

$$\varepsilon_{n,m+1} = u(x_n, t_{m+1}) - u_{n,m+1},$$

em que $u_{n,m+1}$ é a expressão dada por (3.3) mas admitindo valores exactos, ou seja,

$$u_{n,m+1} = u(x_n, t_m) + \kappa h_t \frac{u(x_{n+1}, t_m) - 2u(x_n, t_m) + u(x_{n-1}, t_m))}{h_x^2} + h_t f(x_n, t_m).$$

A ordem de consistência do esquema é normalmente definida pelo valor p em

$$\frac{u(x_n, t_{m+1}) - u_{n,m+1}}{h_t} = O(h^p),$$

com $h = \max\{h_t, h_x\}$. No caso do esquema explícito, por expansão de Taylor,

$$\begin{aligned} u(x_n, t_{m+1}) &= u(x_n, t_m) + h_t \partial_t u(x_n, t_m) + O(h_t^2) = u(x_n, t_m) + \kappa h_t \partial_x^2 u(x_n, t_m) + h_t f(x_n, t_m) + O(h_t^2) \\ &= u(x_n, t_m) + \kappa h_t \frac{u(x_n + h_x, t_m) - 2u(x_n, t_m) + u(x_n - h_x, t_m)}{h_x^2} + h_t f_{nm} + h_t O(h_x^2) + O(h_t^2) \\ &= u_{n,m+1} + O(h_t h_x^2) + O(h_t^2), \end{aligned}$$

concluindo-se que a consistência do esquema explícito é de 1ª ordem.

3.2.2 Estabilidade do Esquema Explícito

A estabilidade de um esquema garante que a acumulação sucessiva de erros é limitada. Como admitimos que os valores de f não estão afectados de erro, considera-se o problema homogéneo, com $f = 0$. Para avaliar a estabilidade é comum utilizar o *critério de estabilidade de Von Neumann*. Em primeiro lugar, assume-se que os valores iniciais são da forma

$$u_{n,0} = R_0 e^{i\mu x_n},$$

para qualquer $\mu \in \mathbb{Z}$. Depois, procuramos ver se os valores seguintes, sendo da forma $u_{n,m} = R_m e^{i\mu x_n}$, levam a uma sucessão (R_m) que é limitada.

No caso do esquema explícito, temos

$$R_{m+1} e^{i\mu x_n} = u_{n,m+1} = R_m e^{i\mu x_n} + h_t \frac{R_m e^{i\mu x_{n+1}} - 2R_m e^{i\mu x_n} + R_m e^{i\mu x_{n-1}}}{h_x^2},$$

e como $e^{i\mu x_{n\pm 1}} = e^{i\mu x_n} e^{\pm i\mu h_x}$, obtemos por divisão do termo comum $e^{i\mu x_n}$

$$R_{m+1} = R_m + h_t \frac{e^{i\mu h_x} - 2 + e^{-i\mu h_x}}{h_x^2} R_m.$$

A sucessão (R_m) é assim recursiva, definida por

$$R_{m+1} = R R_m, \text{ com } R = 1 + \frac{h_t}{h_x^2} \left(e^{i\mu h_x} - 2 + e^{-i\mu h_x} \right),$$

e como $R_m = R_0 R^m$, a condição necessária e suficiente para a sua limitação é $|R| \leq 1$. Reparando que

$$e^{i\mu h_x} - 2 + e^{-i\mu h_x} = \left(e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x} \right)^2 = (2i \sin(\mu h_x))^2 = -4 \sin^2(\mu h_x)$$

obtemos a condição

$$|R| \leq 1 \Leftrightarrow \left| 1 - 4 \frac{h_t}{h_x^2} \sin^2(\mu h_x) \right| \leq 1 \Leftrightarrow -2 \leq -4 \frac{h_t}{h_x^2} \sin^2(\mu h_x) \leq 0$$

que se resume a $\frac{h_t}{h_x^2} \sin^2(\mu h_x) \leq \frac{1}{2}$. Como μ é qualquer, $\sin^2(\mu h_x)$ poderá atingir 1, pelo que a condição de estabilidade é $\frac{h_t}{h_x^2} \leq \frac{1}{2}$, ou seja,

$$h_t \leq \frac{1}{2} h_x^2.$$

Isto significa uma restrição considerável no espaçamento temporal h_t , que deve ser bastante pequeno face ao espaçamento espacial h_x . Por exemplo, se $h_x = 0.01$, devemos ter $h_t \leq 0.00005$, ou ainda para dimensões idênticas, numa grelha com 100 nós no espaço, serão necessários 20000 nós no tempo! Isto é uma restrição considerável que motivará a adopção de outros esquemas.

3.2.3 Convergência do Esquema Explícito

Enquanto na consistência avaliamos localmente a qualidade da aproximação, ao avaliar a convergência, estamos a avaliar globalmente, sem admitir que os valores anteriores são correctos. A ordem de convergência é dada pelo valor p na estimativa de erro

$$e_{n,m} = u(x_n, t_m) - u_{n,m} = O(h^p).$$

Iremos que a consistência e a estabilidade dos esquemas implicam a sua convergência, pelo Teorema de Lax. No entanto, para ilustrar essa propriedade, podemos verificá-la sem recorrer a esse teorema.

Explicitando o erro local de truncatura, usando os restos de Lagrange na expansão de Taylor, temos para o valor exacto

$$\begin{aligned} u(x_n, t_{m+1}) &= u(x_n, t_m) + \kappa \frac{h_t}{h_x^2} (u(x_{n+1}, t_m) - 2u(x_n, t_m) + u(x_{n-1}, t_m)) + h_t f(x_n, t_m) \\ &\quad - h_t \frac{h_x^2}{12} \partial_x^4 u(\xi_n^x, t_m) - \frac{h_t^2}{2} \partial_t^2 u(x_n, \xi_m^t), \end{aligned}$$

com $\xi_n^x \in (x_{n-1}, x_{n+1})$, $\xi_m^t \in (t_m, t_{m+1})$. Subtraindo da expressão do esquema $u_{n,m+1} = u_{n,m} + \frac{h_t}{h_x^2} (u_{n+1,m} - 2u_{n,m} + u_{n-1,m}) + h_t f_{nm}$, ficamos com

$$e_{n,m+1} = e_{n,m} + \frac{h_t}{h_x^2} (e_{n+1,m} - 2e_{n,m} + e_{n-1,m}) - h_t \frac{h_x^2}{12} \partial_x^4 u(\xi_n^x, t_m) - \frac{h_t^2}{2} \partial_t^2 u(x_n, \xi_m^t).$$

Aplicando a desigualdade triangular, temos

$$|e_{n,m+1}| \leq \left| 1 - 2 \frac{h_t}{h_x^2} \right| |e_{n,m}| + \frac{h_t}{h_x^2} (|e_{n+1,m}| + |e_{n-1,m}|) + h_t \frac{h_x^2}{12} |\partial_x^4 u(\xi_n^x, t_m)| + \frac{h_t^2}{2} |\partial_t^2 u(x_n, \xi_m^t)|$$

e designando

$$E_m = \max_n |e_{n,m}|, D^{X4} = \max_{x \in \Omega \times (t_0, t_f)} |\partial_x^4 u(x, t)|, D^{T2} = \max_{x \in \Omega \times (t_0, t_f)} |\partial_t^2 u(x, t)|$$

obtemos

$$E_{m+1} = \max_n |e_{n,m+1}| \leq \left| 1 - 2 \frac{h_t}{h_x^2} \right| E_m + \frac{h_t}{h_x^2} (E_m + E_m) + h_t \frac{h_x^2}{12} D^{X4} + \frac{h_t^2}{2} D^{T2}.$$

Quando a condição de estabilidade é verificada temos $\frac{2h_t}{h_x^2} \leq 1$. Assim, $\left| 1 - 2 \frac{h_t}{h_x^2} \right| = 1 - 2 \frac{h_t}{h_x^2}$, ficando $\left| 1 - 2 \frac{h_t}{h_x^2} \right| E_m + 2 \frac{h_t}{h_x^2} E_m = E_m$, logo

$$E_{m+1} \leq E_m + h_t \left(\frac{h_x^2}{12} D^{X4} + \frac{h_t}{2} D^{T2} \right).$$

Por aplicação recursiva da desigualdade, concluímos que

$$E_m \leq E_0 + mh_t \left(\frac{h_x^2}{12} D^{X4} + \frac{h_t}{2} D^{T2} \right),$$

ou seja, temos

$$\max_{n=0, \dots, N} |e_{n,m}| \leq (t_m - t_0) \left(\frac{h_x^2}{12} D^{X4} + \frac{h_t}{2} D^{T2} \right),$$

o que implica $e_{n,m} = O(h_t)$, quando limitados os valores das segundas derivadas temporais e das quartas derivadas espaciais. Tal como iremos ver pelo Teorema de Lax, a consistência de ordem 1 e a estabilidade do esquema implicam a convergência de ordem 1.

3.3 Consistência, Estabilidade e Teorema de Lax

Antes de apresentarmos outros esquemas para a equação do calor, apresentamos a relação entre consistência, estabilidade e convergência, que é possível obter através do Teorema de Lax (ou ainda Lax-Richtmyer).

Para esse efeito definimos mais precisamente os conceitos de consistência e estabilidade.

Num esquema de diferenças finitas para um problema de evolução, os valores num tempo t_{m+1} podem ser definidos a partir dos tempos anteriores, t_m, \dots, t_{m-q} onde $q + 1$ é o número de passos. Para simplificar, consideramos $q = 0$ (método unipasso), e assim definindo o vector

$$\mathbf{u}_m = (u_{0,m}, \dots, u_{N,m})$$

podemos considerar o vector \mathbf{u}_{m+1} obtido a partir de \mathbf{u}_m por um esquema linear

$$\mathbf{u}_{m+1} = \mathcal{M}_h \mathbf{u}_m.$$

Por uma questão de simplificação, e como não assumimos erros nos dados, consideramos que os problemas são homogêneos.

3.3.1 Estabilidade

A noção de estabilidade significa que a aplicação sucessiva de \mathcal{M}_h , ou seja \mathcal{M}_h^m , será limitada. Condição para essa limitação é exigir que a norma de \mathcal{M}_h não seja superior a 1, pois se $\|\mathcal{M}_h\| \leq 1$, temos

$$\|\mathbf{u}_m\| = \|\mathcal{M}_h^m \mathbf{u}_0\| \leq \|\mathcal{M}_h\|^m \|\mathbf{u}_0\| < \infty.$$

A condição $\|\mathcal{M}_h\| \leq 1$ significa

$$\|\mathcal{M}_h\| = \sup_{\mathbf{u}_0 \neq 0} \frac{\|\mathcal{M}_h \mathbf{u}_0\|}{\|\mathbf{u}_0\|} \leq 1.$$

Através de interpolação trigonométrica (ou transformação de Fourier discreta), podemos escrever \mathbf{u}_0 (ou uma aproximação da função u_0) em termos de coeficientes de Fourier,

$$(\mathbf{u}_0)_n = u_0(x_n) = \sum_{\mu \in \mathbb{Z}} c_\mu e^{i\mu x_n},$$

(bastando considerar $\mu = 0, \dots, N$ para determinar c_μ). Assim, para efeitos de avaliar a limitação da norma, basta considerar vectores da base $(\mathbf{u}_0)_n = e^{i\mu x_n}$, conforme o critério de Von Neumann.

Nesse caso, $\mathbf{u}_1 = \mathcal{M}_h \mathbf{u}_0 = \mathcal{M}_h(e^{i\mu x_n}) = R e^{i\mu x_n}$ e obtemos

$$\|\mathcal{M}_h\| = \sup \frac{\|(R e^{i\mu x_n})\|}{\|(e^{i\mu x_n})\|} = |R|$$

justificando que, para métodos unipasso, a condição $|R| \leq 1$ garante estabilidade.

Observação: No caso de métodos multipasso o raciocínio é semelhante, mas convém observar que isso leva a equações às diferenças, onde é necessário garantir que as raízes da equação característica associada tenham módulo não superior a 1.

3.3.2 Consistência

A consistência de ordem p de um esquema, pode traduzir-se na relação

$$\mathbf{u}_{m+1}^E - \mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{u}_{m+1}^E - \mathcal{M}_h \mathbf{u}_m^E = h_t O(h^p),$$

em que \mathbf{u}_{m+1} é a aproximação que se obtém com os valores exactos $\mathbf{u}_m^E = u(x_n, t_m)$.

Alternativamente, podemos considerar a diferença entre a aproximação do operador original \mathcal{D} e da sua aproximação por diferenças finitas \mathcal{D}_h . Nesse caso, admitimos que para um ponto (x_ν, t_μ) temos a aproximação para qualquer w função regular,

$$(\mathcal{D}w)(x_\nu, t_\mu) - \mathcal{D}_h[w(x_n, t_m)] = O(h^p)$$

isto significa que há uma consistência de ordem p na aproximação do operador diferencial.

Aplicando para a solução u , e dado que \mathbf{u}_m^E não é solução de $\mathcal{D}_h \mathbf{u}_m = 0$, temos

$$\mathcal{D}_h \mathbf{u}_m^E = (\mathcal{D}u)(x_\nu, t_\mu) + O(h^p) = O(h^p).$$

Considerando a separação de \mathcal{D}_h em duas partes $\mathcal{D}_h = \tilde{\partial}_t^+ - \tilde{D}$ (em que $\tilde{\partial}_t^+$ corresponde às diferenças progressivas), obtemos $(\tilde{\partial}_t^+ - \tilde{D})\mathbf{u}_m^E = O(h^p)$ e recuperamos a noção anterior de consistência,

$$\mathbf{u}_{m+1}^E = \mathbf{u}_m^E + h_t \tilde{D} \mathbf{u}_m^E + h_t O(h^p) = \mathbf{u}_{m+1} + h_t O(h^p),$$

pois \mathbf{u}_{m+1} é solução de $\mathcal{D}_h \mathbf{u}_m^E = 0$, verificando $\mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{u}_m^E + h_t \tilde{D} \mathbf{u}_m^E$.

3.3.3 Convergência

Um método terá ordem de convergência p se verificar

$$\mathbf{e}_m = \mathbf{u}_m^E - \mathbf{u}_m = O(h^p),$$

onde $\mathbf{u}_m^E = u(x_n, t_m)$ é o vector com os valores exactos no tempo t_m . Ao contrário da consistência esta estimativa não é local, já que os valores \mathbf{u}_m acumulam erros das aproximações anteriores.

Vejamus que para um método estável é possível obter convergência de ordem p , se houver consistência de ordem p , ou seja,

$$\mathbf{e}_{m+1} = \mathcal{M}_h \mathbf{e}_m + h_t O(h^p),$$

Isto implica recursivamente,

$$\mathbf{e}_m = \mathcal{M}_h^m \mathbf{e}_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \mathcal{M}_h^k (h_t O(h^p)).$$

Admitindo naturalmente um erro inicial nulo, $\mathbf{e}_0 = 0$, isto significa que existe $C_1 > 0$:

$$\|\mathbf{e}_m\| \leq C_1 \sum_{k=0}^{m-1} \|\mathcal{M}_h\|^k h_t h^p.$$

Assumindo a estabilidade do método, temos uma limitação $\|\mathcal{M}_h\|^m \leq C_2$ e assim,

$$\|\mathbf{e}_m\| \leq C_1 \|\mathcal{M}_h\|^m m h_t h^p \leq C_1 C_2 h^p,$$

concluindo-se a convergência de ordem p . Estabelece-se o Teorema de Lax:

Teorema 3.3.1 (*Lax*) *Se um esquema é estável e consistente de ordem p , então é convergente com ordem p .*

Notamos ainda que há uma versão mais forte deste resultado, dada pelo Teorema de Equivalência de Lax-Richtmyer, que assegura que um esquema consistente é convergente se e só se for estável.

3.4 Esquemas θ para a Equação do Calor

Conforme vimos há uma forte restrição de estabilidade para o esquema explícito, o que motiva a utilização de outros esquemas para a equação do calor. Começamos por considerar o esquema implícito (puro). A partir de uma combinação convexa entre o esquema explícito e o esquema implícito, obtemos novos esquemas denominados esquemas θ (theta), que também são implícitos. Para distinguir entre estes novos esquemas implícitos, o esquema implícito original é denominado implícito *puro*.

3.4.1 Esquema Implícito (puro)

No esquema implícito puro, mantém-se a aproximação espacial com diferenças centradas, mas no tempo t_{m+1} e a aproximação em tempo é considerada por diferenças regressivas (BTCS – *backward in time, centered in space*). Ou seja, consideramos a aproximação

$$\partial_t u(x_n, t_{m+1}) = \frac{u_{n,m+1} - u_{nm}}{h_t} + O(h_t), \quad \partial_x^2 u(x_n, t_{m+1}) = \frac{u_{n+1,m+1} - 2u_{n,m+1} + u_{n-1,m+1}}{h_x^2} + O(h_x^2),$$

e desprezando os termos $O(h_t), O(h_x^2)$, obtemos

$$\mathcal{D}_h u_{nm} = \frac{u_{n,m+1} - u_{nm}}{h_t} - \kappa \frac{u_{n+1,m+1} - 2u_{n,m+1} + u_{n-1,m+1}}{h_x^2},$$

o que, a partir de $\mathcal{D}_h u_{nm} = 0$, leva ao Esquema Implícito:

$$u_{n,m+1} = u_{nm} + \kappa h_t \frac{u_{n+1,m+1} - 2u_{n,m+1} + u_{n-1,m+1}}{h_x^2} + h_t f_{n,m+1}. \quad (3.4)$$

mas já não é possível obter directamente os valores $u_{n,m+1}$ a partir dos valores u_{nm} . É necessário resolver um sistema linear cuja estrutura é muito simples, tridiagonal. Reescrevendo (3.4) com $\chi = \kappa h_t h_x^{-2}$

$$-\chi u_{n+1,m+1} + (1 + 2\chi)u_{n,m+1} - \chi u_{n-1,m+1} = u_{nm} + h_t f_{n,m+1}, \quad (3.5)$$

e tendo em atenção que conhecemos os valores nos extremos $u_{0,m+1} = u_a(t_{m+1})$, $u_{N,m+1} = u_b(t_{m+1})$, obtemos o sistema

$$\begin{bmatrix} 1+2\chi & -\chi & 0 & \cdots & 0 \\ -\chi & 1+2\chi & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\chi \\ 0 & \cdots & 0 & -\chi & 1+2\chi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,m+1} \\ u_{2,m+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1,m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{1,m} \\ u_{2,m} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1,m} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \chi u_{0,m+1} + h_t f_{1,m+1} \\ h_t f_{2,m+1} \\ \vdots \\ h_t f_{N-2,m+1} \\ \chi u_{N,m+1} + h_t f_{N-1,m+1} \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Neste caso, o vector \mathbf{u}_{m+1} dado pelo esquema implícito é solução de um sistema

$$\mathbf{M}_I \mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{u}_m + \mathbf{f}_{m+1}.$$

em que \mathbf{f}_{m+1} contém a parte não homogénea e as condições nos extremos do intervalo.

A matriz do sistema \mathbf{M}_I tem a diagonal estritamente dominante, pois $1 + 2\chi > |-\chi| + |-\chi|$, o que garante a invertibilidade do sistema.

Observamos ainda que as figuras em Fig.3.2 relativas ao esquema explícito, aparecem agora invertidas no esquema implícito puro.

Consistência e estabilidade do esquema implícito puro

A consistência do esquema implícito é semelhante à consistência do esquema explícito, pois as aproximações são semelhantes – de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço. Definindo $u_{nm}^E = u(x_n, t_m)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}u(x_n, t_{m+1}) - \mathcal{D}_h u_{nm}^E &= (\partial_t - \kappa \partial_x^2 u)(x_n, t_{m+1}) \\ &\quad - \left(\frac{u_{n,m+1}^E - u_{nm}^E}{h_t} - \kappa \frac{u_{n+1,m+1}^E - 2u_{n,m+1}^E + u_{n-1,m+1}^E}{h_x^2} \right) \\ &= \left(\partial_t u(x_n, t_{m+1}) - \frac{u_{n,m+1}^E - u_{nm}^E}{h_t} \right) \\ &\quad - \kappa \left(\partial_x^2 u(x_n, t_{m+1}) - \frac{u_{n+1,m+1}^E - 2u_{n,m+1}^E + u_{n-1,m+1}^E}{h_x^2} \right) \\ &= O(h_t) + O(h_x^2) = O(h), \end{aligned}$$

o que implica a consistência de primeira ordem.

Seguindo o critério de Von Neumann, consideramos $u_{n,m} = R_m e^{i\mu x_n}$, de (3.5) obtemos

$$-\chi R_{m+1} e^{i\mu(x_n+h_x)} + (1 + 2\chi)R_{m+1} e^{i\mu x_n} - \chi R_{m+1} e^{i\mu(x_n-h_x)} = R_m e^{i\mu x_n}$$

ou seja,

$$R_{m+1} \left(1 - \chi(e^{i\mu h_x} - 2 + e^{-i\mu h_x}) \right) = R_m$$

e usando ainda a relação com o seno,

$$R_{m+1} = R_m \left(1 + 4\chi \sin^2(\mu h_x) \right)^{-1}.$$

Neste caso, temos

$$|R| = \left(1 + 4\chi \sin^2(\mu h_x) \right)^{-1} \leq 1,$$

pelo que a estabilidade é verificada incondicionalmente, quaisquer que sejam h_t, h_x .

Aplicando o Teorema de Lax, conclui-se que o esquema implícito puro tem convergência de ordem 1, para quaisquer h_t, h_x .

3.4.2 Esquemas implícitos θ

Consideramos agora esquemas θ que são uma combinação convexa dos esquemas anteriores. Formalmente para $\theta \in [0, 1]$,

$$\text{Esquema } \theta = (1 - \theta) \text{ Explícito} + \theta \text{ Implícito.}$$

Assim, para $\theta = 0$ (respect. $\theta = 1$) recuperamos o esquema explícito (respect. o esquema implícito) puro.

Para facilitar a expressão longa do esquema θ , reescrevemos o esquema explícito na forma matricial

$$\begin{bmatrix} u_{1,m+1} \\ u_{2,m+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1,m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - 2\chi & \chi & 0 & \cdots & 0 \\ \chi & 1 - 2\chi & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \chi \\ 0 & \cdots & 0 & \chi & 1 - 2\chi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,m} \\ u_{2,m} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1,m} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \chi u_{0,m} + h_t f_{1,m} \\ h_t f_{2,m} \\ \vdots \\ h_t f_{N-2,m} \\ \chi u_{N,m} + h_t f_{N-1,m} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{M}_E \mathbf{u}_m + \mathbf{f}_m.$$

Aproveitamos para salientar que a matriz tridiagonal \mathbf{M}_E , correspondente ao método explícito, tem valores próprios menores que 1 (em módulo) quando $\chi = \kappa h_t h_x^{-2} \leq \frac{1}{2}$.

Os esquemas θ resultam agora de combinar a parte explícita e implícita

$$\begin{aligned} (1 - \theta) \times \quad \mathbf{u}_{m+1} &= \mathbf{M}_E \mathbf{u}_m + \mathbf{f}_m, \\ \theta \times \quad \mathbf{M}_I \mathbf{u}_{m+1} &= \mathbf{u}_m + \mathbf{f}_{m+1} \end{aligned}$$

obtendo-se

$$((1 - \theta)\mathbf{I} + \theta\mathbf{M}_I)\mathbf{u}_{m+1} = ((1 - \theta)\mathbf{M}_E + \theta\mathbf{I})\mathbf{u}_m + ((1 - \theta)\mathbf{f}_m + \theta\mathbf{f}_{m+1}).$$

que pode ser reescrito abreviadamente,

$$\mathbf{M}_{I,1-\theta}\mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{M}_{E,\theta}\mathbf{u}_m + \mathbf{f}_{m+\theta}.$$

considerando $\mathbf{M}_{\alpha,\theta} = \theta\mathbf{I} + (1-\theta)\mathbf{M}_\alpha$, ou mais precisamente,

$$\mathbf{M}_{I,1-\theta} = \begin{bmatrix} 1 + 2\chi\theta & -\theta\chi & \ddots & 0 \\ -\theta\chi & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & -\theta\chi \\ 0 & \ddots & -\theta\chi & 1 + 2\chi\theta \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{M}_{E,\theta} = \begin{bmatrix} 1 - 2\chi(1-\theta) & (1-\theta)\chi & \ddots & 0 \\ (1-\theta)\chi & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & (1-\theta)\chi \\ 0 & \ddots & (1-\theta)\chi & 1 - 2\chi(1-\theta) \end{bmatrix}.$$

É ainda fácil observar que a matriz $\mathbf{M}_{I,1-\theta}$ é sempre invertível, pois tem a diagonal estritamente dominante, $1 + 2\chi\theta > |-\theta\chi| + |-\theta\chi| = 2\chi\theta$.

Esquema de Crank-Nicolson

De entre as várias possibilidades para escolha de θ , a escolha $\theta = \frac{1}{2}$ leva ao denominado *Esquema de Crank-Nicolson*, com

$$\mathbf{M}_{I,1/2}\mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{M}_{E,1/2}\mathbf{u}_m + \mathbf{f}_{m+1/2},$$

em que

$$\mathbf{M}_{I,1/2} = \begin{bmatrix} 1 + \chi & -\chi/2 & \ddots & 0 \\ -\chi/2 & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & -\chi/2 \\ 0 & \ddots & -\chi/2 & 1 + \chi \end{bmatrix}, \mathbf{M}_{E,\theta} = \begin{bmatrix} 1 - \chi & \chi/2 & \ddots & 0 \\ \chi/2 & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \chi/2 \\ 0 & \ddots & \chi/2 & 1 - \chi \end{bmatrix}$$

e $\mathbf{f}_{m+1/2} = \frac{1}{2}(\mathbf{f}_m + \mathbf{f}_{m+1})$. Iremos ver que a escolha do meio, de Crank-Nicolson, não é só a mais simples, é também a mais eficaz, permitindo convergência de ordem 2.

Consistência dos esquemas θ

Seja $f = 0$, para simplificar. Por combinação convexa das equações explícitas e implícitas, obtemos

$$u_{n,m+1} = u_{n,m} + \kappa \frac{h_t}{h_x^2} (u_{n+1,m+\theta} - 2u_{n,m+\theta} + u_{n-1,m+\theta}), \quad (3.7)$$

em que abreviamos $u_{n,m+\theta} = (1-\theta)u_{n,m} + \theta u_{n,m+1}$. Este esquema resulta de considerar $\mathcal{D}_h u_{nm} = 0$, com

$$\mathcal{D}_h u_{nm} = \frac{u_{n,m+1} - u_{n,m}}{h_t} - \kappa \frac{1}{h_x^2} (u_{n+1,m+\theta} - 2u_{n,m+\theta} + u_{n-1,m+\theta})$$

e a sua consistência pode ser obtida comparando com $\mathcal{D}_h u(x_n, t_m + \theta h_t)$.

Sendo $t_{m+\theta} = t_m + \theta h_t$, obtemos por expansão de Taylor

$$\begin{aligned} u_{n,m+1}^E &= u(x_n, t_{m+\theta}) + (1-\theta)h_t \partial_t u(x_n, t_{m+\theta}) + (1-\theta)^2 h_t^2 \partial_t^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + O(h_t^3) \\ u_{n,m}^E &= u(x_n, t_{m+\theta}) + (-\theta h_t) \partial_t u(x_n, t_{m+\theta}) + (-\theta h_t)^2 \partial_t^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + O(h_t^3) \end{aligned}$$

pelo que se obtém,

$$\frac{u_{n,m+1}^E - u_{n,m}^E}{h_t} = \partial_t u(x_n, t_m + \theta h_t) + ((1-\theta)^2 - \theta^2) h_t \partial_t^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + O(h_t^2).$$

Se $(1-\theta)^2 - \theta^2 = 0$, ou seja, $\theta = \frac{1}{2}$, o resto é um termo $O(h_t^2)$, caso contrário será $O(h_t)$. Portanto

$$\partial_t u(x_n, t_m + \theta h_t) - \frac{u_{n,m+1}^E - u_{n,m}^E}{h_t} = O(h^{p_\theta}) \quad (3.8)$$

com $p_\theta = 2$ se $\theta = \frac{1}{2}$ e $p_\theta = 1$ se $\theta \neq \frac{1}{2}$.

Por outro lado, ainda por expansão de Taylor

$$\begin{aligned} \partial_x^2 u(x_n, t_m) &= \partial_x^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + (-\theta h_t) \partial_t \partial_x^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + O(h_t^2), \\ \partial_x^2 u(x_n, t_{m+1}) &= \partial_x^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + (1-\theta) h_t \partial_t \partial_x^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + O(h_t^2), \end{aligned}$$

obtemos

$$(1-\theta) \partial_x^2 u(x_n, t_m) + \theta \partial_x^2 u(x_n, t_{m+1}) = \partial_x^2 u(x_n, t_{m+\theta}) + O(h_t^2)$$

e efectuando as aproximações de $\partial_x^2 u(x_n, t_m)$ e $\partial_x^2 u(x_n, t_{m+1})$ por diferenças centradas, concluímos que

$$\partial_x^2 u(x_n, t_{m+\theta}) - \frac{1}{h_x^2} (u_{n+1,m+\theta}^E - 2u_{n,m+\theta}^E + u_{n-1,m+\theta}^E) = O(h_x^2) + O(h_t^2). \quad (3.9)$$

Juntando as estimativas (3.8) e (3.9) resulta

$$\mathcal{D}u(x_n, t_{m+\theta}) - \mathcal{D}_h u_{nm}^E = O(h_t^{p_\theta}) + O(h_x^2),$$

e o esquema terá consistência de ordem 2 quando $p_\theta = 2$, isto é quando $\theta = \frac{1}{2}$ (Crank-Nicolson), sendo de ordem 1 nos restantes casos.

Estabilidade dos esquemas θ

Mais uma vez consideramos o critério de Von Neumann, tendo em atenção que $u_{n,m} = R_m e^{i\mu x_n}$ implica

$$u_{n,m+\theta} = (1-\theta)R_m e^{i\mu x_n} + \theta R_{m+1} e^{i\mu x_n} = R_{m+\theta} e^{i\mu x_n},$$

designando $R_{m+\theta} = (1-\theta)R_m + \theta R_{m+1}$. Da expressão (3.7) obtemos (usando ainda $\chi = \kappa h_t h_x^{-2}$),

$$R_{m+1} e^{i\mu x_n} = R_m e^{i\mu x_n} + \chi (e^{i\mu h_x} - 2 + e^{-i\mu h_x}) R_{m+\theta} e^{i\mu x_n},$$

ou seja, $R_{m+1} = R_m - 4\chi \sin^2(\mu h_x) R_{m+\theta}$, ficando

$$R_{m+1} (1 + 4\theta \chi \sin^2(\mu h_x)) = (1 - 4(1-\theta)\chi \sin^2(\mu h_x)) R_m$$

e a condição para estabilidade será

$$|R| = \left| \frac{1 - 4(1 - \theta)\chi \sin^2(\mu h_x)}{1 + 4\theta\chi \sin^2(\mu h_x)} \right| \leq 1,$$

o que se resume a

$$0 \leq 2 + 4(2\theta - 1)\chi \sin^2(\mu h_x),$$

ou melhor,

$$(1 - 2\theta)\chi \leq \frac{1}{2}. \quad (3.10a)$$

Esta condição é exactamente a encontrada para o esquema explícito quando $\theta = 0$, e é sempre válida para $\theta \geq \frac{1}{2}$ (que implica $(1 - 2\theta)\chi \leq 0$). Conclui-se que os esquemas θ são incondicionalmente estáveis quando $\theta \geq \frac{1}{2}$, e condicionalmente estáveis, sujeitos à condição (3.10a), para $\theta < \frac{1}{2}$.

3.4.3 Simulações numéricas

Para ilustrar o comportamento dos métodos, vamos considerar um exemplo académico em que fazemos a comparação com uma solução exacta (com $\kappa = 1$),

$$u(x, t) = (\sin(3x) - \cos(3x)) e^{-9t^2}, \quad (3.11)$$

e escolhemos como domínio $(-1, 1) \times (0, 1]$, pelo que as condições iniciais e nos extremos são obtidas directamente de (3.11), por exemplo, $u_0(x) = u(x, 0) = \sin(3x) - \cos(3x)$.

Começamos por testar o esquema explícito, com $h_x = 0.1$, pelo que para garantir estabilidade consideramos $h_t = 0.5(0.1)^2 = 0.005$, na situação limite prevista pela teoria, e também para um valor ligeiramente superior, $h_t = 0.0052$, onde já é previsto ocorrerem instabilidades. Essa previsão é confirmada experimentalmente, conforme podemos ver na Fig.3.4.1. Dentro da situação limite (figura à esquerda), o gráfico da aproximação é basicamente correcto, já que o erro absoluto é inferior a 0.005 ($\sim 0.5\%$), não sendo visualmente diferente do gráfico exacto. Quando ultrapassamos essa situação limite (figura à direita), ficam já bem perceptíveis oscilações que resultam da instabilidade numérica prevista teoricamente.

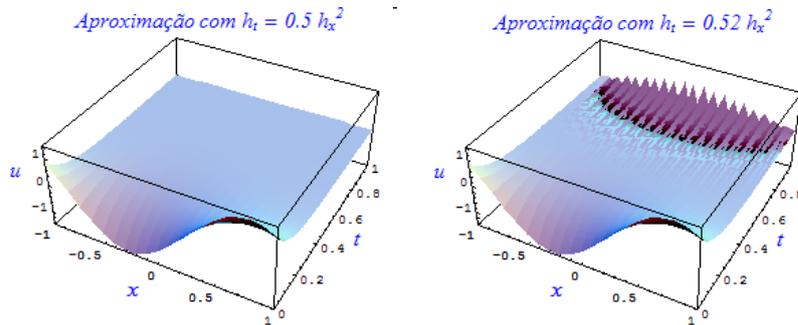


Figura 3.4.1: Gráficos com aproximações pelo esquema explícito com $h_x = 0.1$. À esquerda, uma aproximação com erro relativo inferior a 0.5%, obtida considerando $h_t = 0.005$ (dentro da situação limite para estabilidade). À direita, o aparecimento claro de oscilações espúrias, quando $h_t = 0.0052$ (fora da situação limite para estabilidade).

Conforme vimos, é possível obter boas aproximações com valores superiores h_t se usarmos esquemas implícitos. Por exemplo, considerando $h_t = h_x = 0.1$, obtemos erros $\|e_{nm}\|_\infty \leq 0.02 = 2h_t^2$ com o esquema de Crank-Nicolson, mas apenas $\|e_{nm}\|_\infty \leq 0.1 = h_t$ com o esquema implícito puro, o que está de acordo com a teoria. Para estes valores de h_t não é possível comparar com o esquema explícito, pois as instabilidades levariam a valores da ordem $|u_{nM}| \approx 10^{12}$.

- É importante notar que pode haver alguma surpresa ao reparar que com $h_t = 0.005$ e $h_x = 0.1$, o esquema de Crank-Nicolson apresenta $\|e_{nm}\|_\infty \leq 0.004$, ou seja erros semelhantes ao esquema explícito ($\|e_{nm}\|_\infty \leq 0.005$), valores que são próximos de h_t e não de h_t^2 , mas lembramos que o erro é $O(h_t^2) + O(h_x^2)$, por isso quando o termo em h_t^2 é muito baixo, passa a dominar o termo em h_x^2 , e 0.004 é próximo de $0.5h_x^2$. Por isso, quando consideramos $h_t = 0.5h_x^2$, a performance do esquema explícito é semelhante à do esquema de Crank-Nicolson, já que nessa situação para o esquema explícito temos $O(h_t) + O(h_x^2) = O(h_x^2)$, e para o esquema de Crank-Nicolson temos também $O(h_t^2) + O(h_x^2) = O(h_x^4) + O(h_x^2) = O(h_x^2)$, ficando justificados os resultados semelhantes. A vantagem dos esquemas implícitos é não necessitarem desse espaçamento reduzido na proporção $h_t = 0.5h_x^2$, mas se ele for imposto (por exemplo, para se poder fazer a comparação) então o comportamento é semelhante, e não há vantagem face ao esquema explícito.

- Podemos ver o diferente comportamento do erro, entre o esquema implícito puro, de primeira ordem, e o esquema de Crank-Nicolson, de segunda ordem, na Fig.3.4.2. Para comparação, fixámos $h_x = 0.02$, e notamos ainda que os resultados deixam de ser relevantes para $h_t \lesssim h_x^2$, pois aí o comportamento em h_x^2 não permitirá baixar o erro, já que fixámos esse valor. No caso implícito puro (gráfico à esquerda), obtemos aproximadamente $\|e\|_\infty \approx 2h_t$ revelando o comportamento linear, e no caso Crank-Nicolson (gráfico à direita), temos aproximadamente $\|e\|_\infty \approx 4h_t^2$, revelando o comportamento quadrático em h_t .

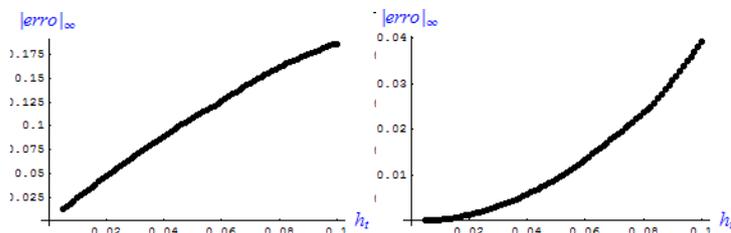


Figura 3.4.2: Gráficos com a evolução do erro em h_t fixando $h_x = 0.02$. À esquerda, evolução linear para o método implícito puro, e à direita evolução quadrática para o esquema de Crank-Nicolson.

Observação: Convém notar que computacionalmente os esquemas implícitos não apresentam um custo computacional muito maior que o explícito, já que a matriz do sistema só depende de h_t, h_x , bastando ser factorizada uma vez para os mesmos parâmetros de discretização. Para além disso, a estrutura tridiagonal dessa matriz permite uma factorização muito rápida, em $O(N)$, pelo que algum maior custo poderá ser de tempo de programação do que propriamente em tempo de execução.

No caso estudado, $h_t = 0.005, h_x = 0.1$, a implementação do esquema explícito, em *Mathematica*, demorou 0.08s, enquanto do esquema Crank-Nicolson, para os mesmos valores, demorou 0.125s. Estes valores devem ser relativizados no *Mathematica*, pois a computação explícita dos valores pode ficar mais lenta comparativamente com as rotinas internas para matrizes, já compiladas e mais rápidas.

3.5 Redução a um sistema linear de EDO's

Uma possibilidade para a resolução numérica de problemas de evolução é a sua redução a um sistema de EDO's (equações diferenciais ordinárias) por discretização prévia da parte espacial. Consideremos o caso em que $\mathcal{D}u = \partial_t u - D_x u$.

Definindo uma grelha de pontos x_1, \dots, x_n podemos efectuar uma aproximação do operador D_x através de diferenças finitas (ou outro processo). Sendo

$$D_x u(x, t) \approx \tilde{D}_x u(x, t) = \sum_{k=1}^n \alpha_k(x) u(x_k, t)$$

a equação $\mathcal{D}u = 0$ será aproximada pela discretização

$$\partial_t u - \tilde{D}_x u = 0$$

o que corresponde a um sistema linear de EDO's

$$\partial_t u_j(t) = \sum_{k=1}^n \alpha_{kj} u_k(t),$$

escrevendo $u_k(t) = u(x_k, t)$ e $\alpha_{kj} = \alpha_k(x_j)$. Podemos ainda apresentar na forma vectorial

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{A} \mathbf{u}$$

em que \mathbf{u} representa a função vectorial $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_n)$ e \mathbf{A} representa a matriz dos coeficientes da discretização espacial $\mathbf{A} = [\alpha_{kj}]$.

A resolução deste sistema linear de EDO's pode ser considerada pelo cálculo da exponencial matricial

$$\mathbf{u}(t) = \exp(t\mathbf{A})\mathbf{u}(0).$$

Observação 1: Usando a decomposição $\mathbf{A} = P^{-1}\Lambda P$, onde Λ é a matriz diagonal dos valores próprios (ou a matriz de Jordan, no caso de uma matriz não diagonalizável), temos

$$\exp(t\mathbf{A}) = P^{-1} \exp(t\Lambda) P,$$

e caso a matriz \mathbf{A} seja diagonalizável, $\exp(t\Lambda) = \text{diag}(e^{t\lambda_1}, \dots, e^{t\lambda_n})$.

Observação 2: Este processo corresponde formalmente a uma aproximação na resolução pela teoria de semigrupos. Por exemplo, no caso da equação do calor, a exponencial do operador laplaciano permite escrever a solução na forma $u(x, t) = \exp(t\Delta_x)u(x, 0)$.

Observação 3: Apesar de também ser conceptualmente simples, a redução a um sistema de EDO's não é sempre computacionalmente mais eficaz que os métodos que envolvem também a discretização em tempo, que vimos antes.

3.6 Equação das Ondas

Nesta secção consideramos a equação das ondas, que na sua forma homogénea é dada por

$$\partial_t^2 u = c^2 \Delta_x u,$$

em que c é a velocidade de propagação da onda. Iremos apenas considerar o caso unidimensional (neste caso, também conhecida como equação das cordas vibrantes).

Trata-se de uma equação hiperbólica de segunda ordem, que pode ser formulada como um sistema de equações de 1ª ordem. A aplicação dos esquemas de diferenças finitas será semelhante à anterior, havendo apenas o cuidado de considerar a sua formulação enquanto sistema, o que permite ilustrar também a aplicação destes esquemas a outros sistemas de equações diferenciais.

Consideremos o problema de Dirichlet para a equação das ondas não homogênea,

$$\begin{cases} (\partial_t^2 - c^2 \partial_x^2)u(x, t) = f(x, t), & (x, t) \in \Omega \times (t_0, t_f) & (i) \\ u(x, t_0) = u_0(x), \quad \partial_t u(x, t_0) = u_1(t), & x \in \Omega & (ii) \\ u(x, t) = u_\Gamma(x, t), & x \in \partial\Omega \times [t_0, t_f] & (iii) \end{cases} \quad (3.12)$$

Tal como no caso da equação do calor, é também possível estabelecer unicidade para o problema de Dirichlet usando a fórmula de Green. Definindo $u = u_1 - u_2$, diferença entre soluções, consideramos agora uma quantidade diferente,

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\partial_t u(x, t)|^2 + c^2 |\nabla_x u(x, t)|^2 dx.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} E'(t) &= \int_{\Omega} \partial_t^2 u(x, t) \partial_t u(x, t) dx + c^2 \int_{\Omega} \nabla_x u(x, t) \cdot \nabla_x \partial_t u(x, t) dx \\ &= c^2 \int_{\Omega} \Delta_x u(x, t) \partial_t u(x, t) dx - c^2 \int_{\Omega} \Delta_x u(x, t) \partial_t u(x, t) dx - c^2 \int_{\partial\Omega} \partial_{\mathbf{n}_x} u(x, t) \partial_t u(x, t) dx \end{aligned}$$

e como $u(x, t) = 0 \forall x \in \partial\Omega$ (pela condição de fronteira), temos também $\partial_t u(x, t) = 0$ em $\partial\Omega$, o que implica que o integral sobre $\partial\Omega$ é nulo, e assim $E'(t) = 0$. Ora isso implica $E(t)$ constante, como $\partial_t u(x, 0) \equiv 0$, e $u(x, 0) = 0 \implies \nabla_x u(x, t) = 0$, temos $E(0) = 0$ e consequentemente $E(t) \equiv 0$. Isso significa que $\partial_t u(x, t) \equiv 0$ e ainda pela condição inicial nula, temos $u \equiv 0$.

3.6.1 Caso unidimensional (1D+1T)

Por uma questão de simplificação, iremos concentrar-nos no caso unidimensional homogêneo.

Começamos por notar que dadas funções $v_R, v_P \in C^2(\mathbb{R})$ obtemos soluções particulares para a equação das ondas homogênea, na forma

$$u(x, t) = v_R(x + ct) + v_P(x - ct),$$

pois $\partial_t^2 u(x, t) = c^2(v_R''(x + ct) + v_P''(x - ct)) = c^2 \partial_x^2 u(x, t)$.

Para um problema homogêneo (3.12) em que $\Omega = \mathbb{R}$ e apenas consideramos as condições iniciais (ii), temos uma solução explícita dada pela *fórmula de d'Alembert*

$$u(x, t) = \frac{u_0(x + ct) + u_0(x - ct)}{2} + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} u_1(\tau) d\tau,$$

como pode ser visto verifica a equação e as condições iniciais. No entanto esta solução deixa de ser válida quando consideramos o problema de propagação num intervalo $\Omega = (x_a, x_b)$, em que

são também impostas condições sobre os limites (iii), conforme:

$$\begin{cases} (\partial_t - \kappa \Delta_x)u(x, t) = 0, & (x, t) \in (x_a, x_b) \times (t_0, t_f) & (i) \\ u(x, t_0) = u_0(x), \quad \partial_t u(x, t_0) = u_1(x), & x \in (x_a, x_b) & (ii) \\ u(x_a, t) = u_a(t), \quad u(x_b, t) = u_b(t), & t \in (t_0, t_f) & (iii) \end{cases} \quad (3.13)$$

Iremos apresentar esquemas para a resolução deste problema através do método das diferenças finitas aplicado a um sistema equivalente.

Separação de variáveis

Para além das soluções particulares da forma $u(x, t) = v_R(x + ct) + v_P(x - ct)$, que já vimos, é conveniente determinar as soluções particulares que se obtêm pela simples separação de variáveis, $u(x, t) = u_1(x)u_2(t)$. Neste caso obtemos

$$c^2 \frac{u_1''(x)}{u_1(x)} = \frac{u_2''(t)}{u_2(t)} = K.$$

Considerando $K = -\mu^2$ obtemos duas equações

$$\begin{aligned} u_1''(x) + \frac{\mu^2}{c^2}u_1(x) &= 0 \\ u_2''(t) + \mu^2 u_2(t) &= 0 \end{aligned}$$

o que leva a soluções do tipo

$$\begin{aligned} u_1(x) &= A_1 \cos\left(\frac{\mu}{c}x\right) + B_1 \sin\left(\frac{\mu}{c}x\right) \\ u_2(t) &= A_2 \cos(\mu t) + B_2 \sin(\mu t) \end{aligned}$$

Portanto, combinações de funções do tipo

$$u(x, t) = \cos\left(\frac{\mu}{c}x\right) \cos(\mu t), \text{ ou } u(x, t) = \sin\left(\frac{\mu}{c}x\right) \sin(\mu t)$$

serão soluções particulares da equação das ondas.

3.6.2 Sistema de 1ª ordem

No caso unidimensional é possível reduzir o operador diferencial de segunda ordem a um sistema de duas equações de primeira ordem. Em primeiro lugar, reparamos que podemos factorizar o operador das ondas numa composição de dois operadores de transporte,

$$(\partial_t^2 - c^2 \partial_x^2) = (\partial_t + c \partial_x)(\partial_t - c \partial_x),$$

(o que também põe em evidência as rectas características de inclinação $\pm c$). Assim, uma possibilidade consiste em escrever um sistema de equações de primeira ordem com incógnitas (u, v) ,

$$\begin{cases} (\partial_t - c \partial_x)u = v \\ (\partial_t + c \partial_x)v = f \end{cases}$$

em que u , primeira componente da solução, verifica a equação das ondas não homogénea.

- Alternativamente, no caso homogéneo, escrevendo

$$v = \partial_x u, \quad w = c^{-1} \partial_t u \quad (3.14)$$

deduzimos um sistema mais simples, que iremos utilizar para a discretização,

$$\begin{cases} \partial_t v = c \partial_x w \\ \partial_t w = c \partial_x v \end{cases} \quad (3.15)$$

em que a primeira equação traduz simplesmente a identidade $\partial_t \partial_x u = \partial_x \partial_t u$, e a segunda equação resulta na equação das ondas homogénea, pois

$$\partial_t w = c \partial_x v \Rightarrow \partial_t (c^{-1} \partial_t u) = c \partial_x (\partial_x u) \Rightarrow \partial_t^2 u = c^2 \partial_x^2 u$$

Note-se ainda que ambas as novas funções v e w verificam também a equação das ondas homogénea.

Considerando $\mathbf{u} = (v, w)$ o sistema (3.12) pode escrever-se na forma vectorial,

$$\partial_t \mathbf{u} = D_x \mathbf{u}$$

em que neste caso o operador diferencial D_x é de primeira ordem, $D_x(v, w) = (c \partial_x w, c \partial_x v)$.

Condições Iniciais e nos extremos

Tendo introduzido novas variáveis em (3.14), podemos obter condições iniciais e de fronteira para as variáveis (v, w) a partir das condições em u , assumindo a regularidade necessária. Assim, a condição inicial será dada por

$$\begin{aligned} v_0(x) &= v(x, 0) = \partial_x u(x, 0) = u'_0(x) \\ w_0(x) &= w(x, 0) = \frac{1}{c} \partial_t u(x, 0) = \frac{1}{c} u_1(x) \end{aligned}$$

Usando $w = \frac{1}{c} \partial_t u$ é igualmente imediato obter condições nos extremos para w ,

$$w_a(t) = \frac{1}{c} u'_a(t), \quad w_b(t) = \frac{1}{c} u'_b(t),$$

mas a condição $v = \partial_x u$ não permite o mesmo para v , pelo que se considera uma aproximação consistente com a ordem da aproximação espacial, como veremos.

Integração da solução

A expressão de u pode ser obtida directamente a partir de w através de uma integração numérica nos nós calculados,

$$u(x_n, t_m) = c w_0(x_n) + c \int_{t_0}^{t_m} w(x_n, s) ds \approx c w_{n,0} + c \sum_{k=0}^m p_k w_{nk}$$

em que p_k são os pesos da integração. Por exemplo, usando a regra dos trapézios $p_k = 1_k^* h_t$, há um erro da aproximação integral em $O(h_t^2)$, o que é suficiente para esquemas até ordem 2. Com efeito, a acumulação dos erros $O(h_t^2)$ em cada w_{nk} será somada m vezes, mas também multiplicada pelo peso em $O(h_t)$, pelo que um efeito compensa o outro.

3.6.3 Esquema explícito instável

Um esquema simples para a discretização em diferenças finitas do sistema de equações (3.15), em notação matricial,

$$\begin{cases} \partial_t v = c \partial_x w \\ \partial_t w = c \partial_x v \end{cases} \Leftrightarrow \mathcal{D}(v, w) := \begin{bmatrix} \partial_t & -c \partial_x \\ -c \partial_x & \partial_t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} = 0$$

consiste em considerar uma diferença progressiva no tempo e uma diferença centrada no espaço, ou seja, aproximamos

$$\partial_t v(x_n, t_m) = \frac{v_{n,m+1} - v_{n,m}}{h_t} + O(h_t); \quad \partial_x v(x_n, t_m) = \frac{v_{n+1,m} - v_{n-1,m}}{2h_x} + O(h_x^2).$$

Fazendo o mesmo para w , obtemos uma aproximação \mathcal{D}_h usando diferenças finitas em \mathcal{D} , e $\mathcal{D}_h(v_{nm}, w_{nm}) = 0$ leva ao sistema aproximado

$$\begin{cases} \frac{1}{h_t} (v_{n,m+1} - v_{n,m}) = c \frac{1}{2h_x} (w_{n+1,m} - w_{n-1,m}) \\ \frac{1}{h_t} (w_{n,m+1} - w_{n,m}) = c \frac{1}{2h_x} (v_{n+1,m} - v_{n-1,m}) \end{cases} \quad (3.16)$$

Esta aproximação leva a um *esquema explícito*,

$$\begin{cases} v_{n,m+1} = v_{n,m} + c \frac{h_t}{2h_x} (w_{n+1,m} - w_{n-1,m}) \\ w_{n,m+1} = w_{n,m} + c \frac{h_t}{2h_x} (v_{n+1,m} - v_{n-1,m}) \end{cases} \quad (3.17)$$

que tem consistência de primeira ordem, mas que é instável. Podemos verificar isso usando o critério de Von Neumann, com

$$v_{nm} = R_m e^{i\mu x_n}, \quad w_{nm} = S_m e^{i\mu x_n}.$$

Obtemos o sistema

$$\begin{cases} R_{m+1} e^{i\mu x_n} = R_m e^{i\mu x_n} + c \frac{h_t}{2h_x} R_m e^{i\mu x_n} (e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x}) \\ S_{m+1} e^{i\mu x_n} = S_m e^{i\mu x_n} + c \frac{h_t}{2h_x} S_m e^{i\mu x_n} (e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x}) \end{cases}$$

e a relação pode ser descrita na forma matricial

$$\begin{bmatrix} R_{m+1} \\ S_{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & i\beta_\mu \\ i\beta_\mu & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_m \\ S_m \end{bmatrix}$$

em que $i\beta_\mu = c \frac{h_t}{2h_x} (e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x})$, ou melhor,

$$\beta_\mu = c \frac{h_t}{h_x} \sin(\mu h_x).$$

Isto põe em evidência uma matriz de amplificação

$$\mathcal{M}_E = \begin{bmatrix} 1 & i\beta_\mu \\ i\beta_\mu & 1 \end{bmatrix}.$$

cuja norma deve ser menor que 1, ou melhor, cujos valores próprios devem ser inferiores a 1. É fácil ver que os valores próprios desta matriz são soluções de $(\lambda - 1)^2 + \beta_\mu^2 = 0$, ou seja

$$\lambda = 1 \pm i\beta_\mu$$

cujos módulos serão $|\lambda| = \sqrt{1 + \beta_\mu^2} > 1$. Portanto haverá incondicionalmente uma amplificação do factor inicial, e este esquema explícito é *incondicionalmente instável*.

3.6.4 Esquema implícito

Como o esquema explícito anterior é sempre instável, vamos considerar o esquema implícito que resulta da aproximação no tempo t_{m+1} , ou seja, usamos diferenças regressivas no tempo e centradas em espaço na aproximação de

$$\begin{cases} \partial_t v(x_n, t_{m+1}) = c \partial_x w(x_n, t_{m+1}) \\ \partial_t w(x_n, t_{m+1}) = c \partial_x v(x_n, t_{m+1}) \end{cases}$$

o que leva ao *esquema implícito*,

$$\begin{cases} v_{n,m+1} = v_{n,m} + c \frac{h_t}{2h_x} (w_{n+1,m+1} - w_{n-1,m+1}) \\ w_{n,m+1} = w_{n,m} + c \frac{h_t}{2h_x} (v_{n+1,m+1} - v_{n-1,m+1}) \end{cases} \quad (3.18)$$

O esquema ainda será consistente de primeira ordem, mas há que resolver um sistema linear, pois os valores de $v_{n,m+1}$ ou de $w_{n,m+1}$ só estão definidos implicitamente. Analisemos a estabilidade de acordo com o critério de Von Neumann. É fácil ver que

$$\begin{bmatrix} R_m \\ S_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -i\beta_\mu \\ -i\beta_\mu & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{m+1} \\ S_{m+1} \end{bmatrix}$$

e portanto a matriz de amplificação será agora

$$\mathcal{M}_I = \begin{bmatrix} 1 & -i\beta_\mu \\ -i\beta_\mu & 1 \end{bmatrix}^{-1}.$$

Os valores próprios de \mathcal{M}_I^{-1} serão exactamente os valores próprios de \mathcal{M}_E . Assim, os valores próprios de \mathcal{M}_I verificam $|\lambda| = \frac{1}{\sqrt{1+\beta_\mu^2}} < 1$. Concluimos que o esquema implícito puro é *incondicionalmente estável*, apresentando o inconveniente de ser necessária a resolução de um sistema em cada passo. Concluimos ainda, pelo Teorema de Lax, que este esquema tem ordem convergência 1.

3.6.5 Esquema explícitos condicionalmente estáveis

Esquema semi-implícito

Uma ideia para evitar a resolução do sistema no esquema implícito é considerar apenas uma das equações como implícita, o que permitirá obter um esquema explícito, assumindo uma certa ordem nos cálculos (de forma semelhante ao que acontece nos métodos iterativos do tipo Gauss-Seidel).

Assim, partindo das igualdades

$$\begin{cases} \partial_t v(x_n, t_m) = c \partial_x w(x_n, t_m) \\ \partial_t w(x_n, t_{m+1}) = c \partial_x v(x_n, t_{m+1}) \end{cases}$$

obtemos o *esquema semi-implícito*

$$\begin{cases} v_{n,m+1} = v_{n,m} + c \frac{h_t}{2h_x} (w_{n+1,m} - w_{n-1,m}) \\ w_{n,m+1} = w_{n,m} + c \frac{h_t}{2h_x} (v_{n+1,m+1} - v_{n-1,m+1}) \end{cases} \quad (3.19)$$

Note-se que ao exigir que a igualdade ocorra em todos os instantes t_m então também teremos no passo seguinte $\partial_t v(x_n, t_{m+1}) = c \partial_x w(x_n, t_{m+1})$, não havendo por isso qualquer problema de consistência, tratando-se ainda de um esquema de primeira ordem.

Analisando a questão da estabilidade, obtemos pelo critério de Von Neumann

$$\begin{cases} R_{m+1} = R_m + c \frac{h_t}{2h_x} S_m (e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x}) \\ S_{m+1} = S_m + c \frac{h_t}{2h_x} R_{m+1} (e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x}) \end{cases}$$

e na segunda equação podemos substituir o valor de R_{m+1} , ficando com

$$\begin{cases} R_{m+1} = R_m + i\beta_\mu S_m \\ S_{m+1} = R_m + i\beta_\mu (R_m + i\beta_\mu S_m) = i\beta_\mu R_m + (1 - \beta_\mu^2) S_m \end{cases}$$

e com a relação matricial

$$\begin{bmatrix} R_{m+1} \\ S_{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & i\beta_\mu \\ i\beta_\mu & 1 - \beta_\mu^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_m \\ S_m \end{bmatrix}.$$

A determinação dos valores próprios da matriz de amplificação reduz-se a resolver

$$(\lambda - 1)(\lambda - 1 + \beta_\mu^2) + \beta_\mu^2 = 0 \Leftrightarrow \lambda = \frac{\beta_\mu^2 - 2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\beta_\mu^2 - 2}{2}\right)^2 - 1}$$

e o discriminante é positivo se $\left(\frac{\beta_\mu^2 - 2}{2}\right)^2 > 1$, ou seja $\beta_\mu^2 > 4$. Nesse caso é claro que $|\lambda| > 1$, e portanto há instabilidade.

Resta ver o caso em que $\beta_\mu^2 \leq 4$. Neste caso temos duas raízes complexas conjugadas cujo produto é $\lambda_1 \lambda_2 = 1$, e consequentemente ambas têm módulo 1.

Neste caso há estabilidade, portanto pode falar-se em estabilidade condicional, em que a condição é $|\beta_\mu| \leq 2$.

Podemos concretizar melhor esta condição, pois

$$|\beta_\mu| = \left| c \frac{h_t}{h_x} \sin(\mu h_x) \right| \leq 2 \Rightarrow \chi = c \frac{h_t}{h_x} \leq 2$$

A condição sobre χ é também conhecida como condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Para este esquema semi-implícito garantimos estabilidade quando $\chi \leq 2$, e portanto de acordo com a consistência, pelo Teorema de Lax, é garantida a convergência de ordem 1.

Esquema de Lax

Existem outros esquemas explícitos que são condicionalmente estáveis, como o esquema de Lax, cuja ideia consiste em substituir, no esquema explícito, os valores $v_{n,m}$ e $w_{n,m}$ por uma média no espaço. A consistência não é alterada, pois conforme vimos antes, essa média é uma aproximação $O(h_x^2)$,

$$v(x_n, t_m) = \frac{v(x_{n+1}, t_m) + v(x_{n-1}, t_m)}{2} - \frac{1}{2} h_x^2 \partial_x^2 v(\xi_n, t_m).$$

Portanto, o *esquema de Lax* é explícito, dado por

$$\begin{cases} v_{n,m+1} = \frac{v_{n+1,m} + v_{n-1,m}}{2} + c \frac{h_t}{2h_x} (w_{n+1,m} - w_{n-1,m}) \\ w_{n,m+1} = \frac{w_{n+1,m} + w_{n-1,m}}{2} + c \frac{h_t}{2h_x} (v_{n+1,m} - v_{n-1,m}) \end{cases} \quad (3.20)$$

Quanto à questão da estabilidade, podemos ver que neste caso obtém-se

$$\begin{cases} R_{m+1} = \frac{1}{2}(e^{i\mu h_x} + e^{-i\mu h_x})R_m + c\frac{h_t}{2h_x}S_m(e^{iph} - e^{-iph}) \\ S_{m+1} = \frac{1}{2}(e^{i\mu h_x} + e^{-i\mu h_x})S_m + c\frac{h_t}{2h_x}R_m(e^{iph} - e^{-iph}) \end{cases}$$

o que leva à relação matricial

$$\begin{bmatrix} R_{m+1} \\ S_{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_\mu & i\beta_\mu \\ i\beta_\mu & \gamma_\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_m \\ S_m \end{bmatrix}.$$

em que $\gamma_\mu = \frac{1}{2}(e^{i\mu h_x} + e^{-i\mu h_x}) = \cos(\mu h_x)$. Assim, a matriz de amplificação \mathcal{M} tem como valores próprios

$$(\lambda - \gamma_\mu)^2 = -\beta_\mu^2 \Rightarrow \lambda = \gamma_\mu \pm i\beta_\mu.$$

Assim $|\lambda|^2 = \cos(\mu h_x)^2 + (c\frac{h_t}{h_x})^2 \sin(\mu h_x)^2 \leq 1$, é uma condição que define uma elipse com semieixos 1 e χ , pelo que a condição para estabilidade será $\chi = c\frac{h_t}{h_x} \leq 1$. Concluimos, pelo Teorema de Lax, que para $\chi \leq 1$ o esquema de Lax é convergente, de ordem 1.

Condições nos extremos

Conforme referido, as condições iniciais e as condições nos extremos, para w , podem ser obtidas directamente a partir das condições em u . Resta examinar as condições nos extremos para $v = \partial_x u$, que estão relacionadas com os esquemas considerados. Iremos considerar o esquema de Lax, mas o processo é análogo para os restantes esquemas.

No extremo x_0 , são necessários os valores $v_{0,m} = \partial_x u(a, t_m)$ para o desenvolvimento do esquema. Para esse efeito consideramos um ponto artificial x_{-1} , e usamos a aproximação da média para calcular $v_{0,m}$, mantendo a ordem de consistência 2 no espaço, ou seja

$$v_{0,m} = \frac{v_{1,m} + v_{-1,m}}{2} + O(h_x^2)$$

pelo que atribuímos

$$v_{-1,m} = 2v_{0,m} - v_{1,m}; \quad w_{-1,m} = 2w_{0,m} - w_{1,m}$$

e dessa forma os valores $v_{0,m}$ são obtidos sucessivamente por aplicação do esquema de Lax

$$\begin{aligned} v_{0,m+1} &= \frac{v_{1,m} + v_{-1,m}}{2} + c\frac{h_t}{2h_x}(w_{1,m} - w_{-1,m}) \\ &= v_{0,m} + \frac{ch_t}{h_x}(w_{1,m} - w_{0,m}). \end{aligned}$$

e os valores $v_{-1,m}, w_{-1,m}$ desaparecem no resultado final. A aplicação de um processo semelhante para o outro extremo, $v_{N,m} = \partial_x u(b, t_m)$, permite estabelecer as iterações para os valores nos extremos (esquema de Lax)

$$\begin{cases} v_{0,m+1} = v_{0,m} + \frac{ch_t}{h_x}(w_{1,m} - w_{0,m}) \\ v_{N,m+1} = v_{N,m} + \frac{ch_t}{h_x}(w_{N,m} - w_{N-1,m}) \end{cases}$$

notando que os valores $v_{0,m}, v_{N,m}$ foram já calculados na iterada anterior. Ainda que se pudessem obter expressões semelhantes para w a sua aplicação levaria a uma recursividade onde desapareceriam os valores impostos sobre os extremos. Por isso, deve considerar-se $w_{0,m} = \frac{1}{c}u'_a(t_m), w_{N,m} = \frac{1}{c}u'_b(t_m)$.

3.6.6 Esquemas de ordem 2

Esquema de Lax-Wendroff

Podemos obter um esquema explícito de ordem superior usando a expansão em série de Taylor

$$v_{n,m+1} = v_{n,m} + h_t(\partial_t v)_{n,m} + \frac{h_t^2}{2}(\partial_t^2 v)_{n,m} + O(h_t^3) \quad (3.21)$$

e substituindo $(\partial_t^2 v)_{n,m} = c^2(\partial_x^2 v)_{n,m}$, obtém-se o *esquema de Lax-Wendroff*

$$\begin{cases} v_{n,m+1} = v_{n,m} + c\frac{h_t}{2h_x}(w_{n+1,m} + w_{n-1,m}) + c^2\frac{h_t^2}{2h_x^2}(v_{n+1,m} - 2v_{n,m} + v_{n-1,m}) \\ w_{n,m+1} = w_{n,m} + c\frac{h_t}{2h_x}(v_{n+1,m} + v_{n-1,m}) + c^2\frac{h_t^2}{2h_x^2}(w_{n+1,m} - 2w_{n,m} + w_{n-1,m}) \end{cases} \quad (3.22)$$

Este esquema é explícito e tem consistência de segunda ordem, sendo ainda estável para valores de $\chi \leq 1$. Os cálculos são semelhantes, mas mais extensos, pelo que se propõem como exercício.

Esquema Leap-Frog

A tradução literal do nome deste esquema seria *salto-de-rã*, mas é de facto a designação para *salto-ao-eixo* em inglês. A designação *salto-ao-eixo* está relacionada com o aspecto da molécula do esquema, já que o valor $v_{n,m+1}$ é calculado a partir de $v_{n,m-1}$, apoiado nos valores $v_{n-1,m}$ e $v_{n+1,m}$, saltando o valor central v_{nm} .

Concretamente, consiste em considerar uma aproximação com diferenças centradas no espaço e também no tempo, o leva a um esquema com consistência de segunda ordem. É um esquema multipasso, usando dois passos no tempo, e requer uma inicialização para obter $v_{n,1}$ e $w_{n,1}$.

A expressão do esquema leap-frog é ainda explícita, dada por

$$\begin{cases} v_{n,m+1} = v_{n,m-1} + c\frac{h_t}{h_x}(w_{n+1,m} - w_{n-1,m}) \\ w_{n,m+1} = w_{n,m-1} + c\frac{h_t}{h_x}(v_{n+1,m} - v_{n-1,m}) \end{cases} \quad (3.23)$$

A estabilidade deste esquema envolve também uma recursividade a dois passos, já que usando o critério de Von Neumann,

$$\begin{cases} R_{m+1} = R_{m-1} + c\frac{h_t}{h_x}(e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x})S_m \\ S_{m+1} = S_{m-1} + c\frac{h_t}{h_x}(e^{i\mu h_x} - e^{-i\mu h_x})R_m \end{cases}$$

obtemos

$$\begin{bmatrix} R_{m+1} \\ S_{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 2i\beta_\mu \\ 2i\beta_\mu & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_m \\ S_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} R_{m-1} \\ S_{m-1} \end{bmatrix},$$

havendo neste caso uma recursividade vectorial a dois passos, que pode ser abordada como duas recursividades escalares, que são equações às diferenças.

Definindo as variáveis $T_m^+ = R_m + S_m$, $T_m^- = R_m - S_m$ obtemos

$$T_{m+1}^\pm = T_{m-1}^\pm \pm 2i\beta_\mu T_m^\pm$$

$$\begin{cases} T_{m+1}^+ = T_{m-1}^+ + 2i\beta_\mu T_m^+ \\ T_{m+1}^- = T_{m-1}^- - 2i\beta_\mu T_m^- \end{cases}$$

as equações características associadas a estas equações às diferenças são

$$r^2 = 1 \pm 2i\beta_\mu r$$

com raízes $r = \pm i\beta_\mu \pm \sqrt{1 - \beta_\mu^2}$. Se $\beta_\mu^2 \leq 1$, obtemos $|r|^2 = \beta_\mu^2 + (1 - \beta_\mu^2) = 1$, o que garante a estabilidade. Portanto para $\chi \leq 1$ temos $\beta_\mu^2 = \chi^2 \sin^2(\mu h_x) \leq 1$, e concluímos que a condição CFL que garante estabilidade é ainda $\chi \leq 1$. Como a consistência é de segunda ordem, o esquema *leap-frog* tem convergência quadrática. É um esquema muito simples e, inicializando os valores em t_1 com uma aproximação de segunda ordem, é computacionalmente mais eficaz que o esquema de Lax-Wendroff (que pode ser usado para essa inicialização).

Observação: O esquema leap-frog é instável quando aplicado à equação do calor (exercício).

Parte III

Método dos Elementos Finitos

Capítulo 4

Método de Galerkin

O objectivo deste capítulo é apresentar um método alternativo que se adequa especialmente à resolução de problemas elípticos, permitindo evitar a condicionante geométrica de submeter o domínio a aproximar a uma grelha quadriculada e permitindo também aproximar problemas em que os dados não são regulares.

A ideia essencial, desenvolvida a partir da década de 50, e que remonta a Galerkin (1915), consiste em reescrever o problema através de uma formulação variacional equivalente utilizando para esse efeito funções teste suficientemente regulares. Ao escrever o problema dessa forma, a maior regularidade das funções teste compensa uma menor regularidade da solução através de uma transferência que se centra no uso da fórmula de Green. Desta forma é possível escrever o problema numa formulação fraca que consiste numa igualdade entre uma forma bilinear (que encerra a informação acerca do operador diferencial), e uma forma linear (que contém a informação acerca dos dados do problema). O espaço das funções teste encerra também informação relacionada com a condição de fronteira. Assim, ao considerarmos o espaço H_0^1 para espaço de funções teste estamos implicitamente a exigir que se verifiquem condições de Dirichlet nulas na fronteira.

Há que distinguir dois tipos de situação, uma em que a forma bilinear é simétrica e que corresponde a minimizar um funcional (designado funcional de energia), estando assim nas condições do denominado método de Ritz, e uma outra em que não há *a priori* simetria da forma bilinear, correspondendo ao caso geral do método de Galerkin.

4.1 Formulação Variacional

Começamos por escrever a equação de Poisson usando a definição de delta de Dirac, a forma linear $\delta_x(f) = f(x)$, e usando a seguinte notação

$$f(x) = \langle f, \delta_x \rangle,$$

que nos parece mais adequada, já que é a utilizada para a dualidade nas distribuições e permitirá apresentar as formulações variacionais como uma generalização de igualdades pontuais. Note-se que $\delta_x(y) = \delta_0(y - x)$.

Desta forma, a igualdade pontual da equação de Poisson

$$\Delta u(x) = f(x), \quad \forall x \in \Omega$$

passará a escrever-se assim

$$\langle \Delta u, \delta_x \rangle = \langle f, \delta_x \rangle, \quad \forall x \in \Omega.$$

Agora, o próximo passo é generalizar esta igualdade pontual, e passar a encará-la como uma igualdade global. Com efeito, iremos passar a considerar a noção de dualidade, substituindo as funções por funcionais, escrevendo a igualdade

$$\langle \Delta u, w \rangle = \langle f, w \rangle, \quad \forall w \in V(\Omega).$$

Iremos ao longo do curso tornar mais clara esta passagem, em que deixamos os deltas de Dirac de lado, e passamos a trabalhar com funções w definidas num certo espaço de funções $V(\Omega)$. Note-se que se $V(\Omega)$ for um espaço de funções mais regulares, a maior regularidade de w permitirá considerar f num espaço dual com menor regularidade. Quando isso fizer sentido o valor de $\langle f, w \rangle$ é dado por

$$\langle f, w \rangle = \int_{\mathbf{R}^2} f(y)w(y)dy.$$

Da mesma forma, o delta de Dirac pode ser introduzido, *formalmente*, através de

$$\langle f, \delta_0 \rangle = \int_{\mathbf{R}^2} f(y)\delta_0(y)dy = f(0),$$

o que apenas pretende significar que todo o peso do integral está no ponto 0, levando por isso à noção intuitiva de que δ_0 seria nulo em toda a parte excepto em 0, onde valeria ‘infinito’! E isto implica $\int_{\mathbf{R}^2} \delta_0(y)dy = 1$.

Ora, pode mostrar-se a existência de uma sucessão de funções C^∞ , com medida unitária, μ_n (designadas por *mollifiers*), cujo suporte é cada vez mais pequeno, ou seja $\text{supp}(\mu_n) \subseteq B(0, \frac{1}{n})$, tal que

$$\langle f, \mu_n \rangle = \int_{\mathbf{R}^2} f(y)\mu_n(y)dy \longrightarrow f(0).$$

Estas funções μ_n podem ser vistas como distribuições de probabilidade¹, que têm o seu valor máximo em 0, e que, para valores de n grandes, se concentram cada vez mais próximo de 0, ignorando os valores circundantes. Uma possível interpretação intuitiva é pensar em marcar um ponto no papel com um lápis. Quanto mais afiado estiver o lápis (o que corresponde a μ_n com n grande), mais próximo estamos de marcar apenas o ponto desejado, e é claro que se tivermos um lápis pouco afiado (o que corresponde a μ_n com n pequeno) há uma larga marca que cobre vários pontos. Nesta interpretação livre, o delta de Dirac corresponde a um lápis ultra-afiado, que não deixa marca em mais nenhum ponto!

Assim, quando temos os valores $\langle f, \mu_n \rangle$ ao invés do valor $f(0)$, significa que não observamos o valor exacto no ponto zero, mas apenas observamos (com alguma miopia) uma névoa, mais concretamente o valor dado pela média ponderada das imagens dos pontos próximos de zero. Note-se que este tipo de argumento é exactamente o mesmo que foi usado na mecânica quântica e substituiu a noção pontual de partícula no espaço pela noção de nuvem, correspondente à sua distribuição de probabilidade.

Contudo, não iremos usar apenas *mollifiers*, iremos admitir observações com um maior número funções, que passaremos a designar por *funções teste*. O espaço de funções teste (designado anteriormente por $V(\Omega)$) poderá ser adaptado a cada problema de forma a que possamos extrair as vantagens pretendidas.

¹O que está na origem do nome *distribuição*.

Voltemos à igualdade (com o sinal negativo, para simplificação posterior)

$$\langle -\Delta u, w \rangle = \langle f, w \rangle, \quad \forall w \in V(\Omega).$$

Designamos uma igualdade deste tipo por *igualdade fraca* no espaço $V(\Omega)$. Se os deltas de Dirac estivessem presentes, era óbvio que se tratava de uma igualdade forte, pois poderíamos escrever imediatamente $\Delta u(x) = f(x)$. No entanto, o espaço $V(\Omega)$ é suposto ser um espaço de funções e não de distribuições! Torna-se assim claro que quanto mais pequeno for o espaço $V(\Omega)$ mais longe poderemos estar da verificação da igualdade forte.

Avançemos. Se o espaço $V(\Omega)$ contiver funções suficientemente regulares, a igualdade pode escrever-se na forma integral

$$\langle -\Delta u, w \rangle = \langle f, w \rangle \iff - \int_{\Omega} \Delta u w = \int_{\Omega} f w$$

e pela primeira fórmula de Green

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w - \int_{\partial\Omega} \partial_n v \cdot w = \int_{\Omega} f w.$$

Ora, se impusermos que no espaço $V(\Omega)$ as funções verificam $w|_{\partial\Omega} = 0$ temos

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in V(\Omega) \tag{4.1}$$

que se trata de uma equação que traduz a *formulação variacional* associada à equação de Poisson.

É claro que é preciso definir convenientemente o espaço $V(\Omega)$, mas por enquanto apenas diremos que se trata de $H_0^1(\Omega)$, um espaço de Sobolev de funções em $H^1(\Omega)$ com traço nulo na fronteira (ver apêndice). Com efeito, entre outras razões, considerar espaços clássicos de funções diferenciáveis (por exemplo, funções $C^1(\Omega)$ nulas em $\partial\Omega$) não se revela apropriado para a utilização de resultados da teoria de espaços de Hilbert. Esses espaços clássicos são espaços de Banach para a norma do máximo, mas não espaços de Hilbert, reflexivos. Ao efectuar a formulação variacional através do produto interno definido em L^2 , torna-se claro que aqui irá interessar-nos utilizar a teoria de espaços de Hilbert. Isto leva à introdução de espaços de Sobolev, que são espaços em que as derivadas existem num sentido generalizado (das distribuições). O espaço $H^1(\Omega)$ será definido como espaço de funções $L^2(\Omega)$ com derivadas em $L^2(\Omega)$ e isso garante que $\nabla w \in L^2(\Omega)^d$, o que é adequado para assegurar a existência dos integrais.

Por outro lado, ao admitirmos que as funções estejam em $H^1(\Omega)$ isso pode mesmo significar que as funções não sejam contínuas, assim torna-se necessário dar novo sentido à noção de restrição sobre a fronteira, já que tendo a fronteira medida nula, funções que seriam idênticas (a menos de um conjunto de medida nula) poderiam ter valores diferentes na fronteira. Há que introduzir a noção de traço, que generaliza a noção de restrição no caso de funções contínuas (ver apêndice).

Ao exigir que as funções teste tenham traço nulo sobre a fronteira, acabamos por ignorar qualquer contribuição na fronteira, e assim veremos que esta formulação é apenas adequada ao problema de Dirichlet homogêneo

$$(P_0) \begin{cases} -\Delta u = f & \text{em } \Omega \\ u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases}$$

Observação 1. Se considerarmos o problema de Dirichlet não homogêneo,

$$(P_1) \begin{cases} -\Delta u = f & \text{em } \Omega \\ u = g & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

podemos convertê-lo num problema homogêneo para a equação de Poisson. Para isso consideramos \tilde{g} um prolongamento de g a Ω . Esse prolongamento não é único e pode ser obtido de várias maneiras. Uma possibilidade, no caso de g aparecer dado como uma expressão, é considerar \tilde{g} como sendo a extensão natural de g , ou seja a própria expressão de g calculada para os pontos interiores. É claro que essa possibilidade é apenas admissível quando há regularidade suficiente na extensão de g .

A partir de \tilde{g} consideramos $F = \Delta\tilde{g} + f$, e assim $v = u - \tilde{g}$ é nulo na fronteira e verifica

$$-\Delta v = \Delta\tilde{g} - \Delta u = F - f + f = F$$

e conseqüentemente reduzimos o problema (P_1) a um problema de Dirichlet homogêneo,

$$\begin{cases} -\Delta v = F & \text{em } \Omega \\ v = 0 & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases}$$

A regularidade de F está assim ligada à regularidade de f e também de $\Delta\tilde{g}$, pelo que a extensão de g deve ser suficientemente regular.

Observação 2: Relativamente à passagem para a formulação variacional, podemos estabelecer uma analogia que consiste em passar do resolução do sistema em \mathbf{R}^d

$$Av = y$$

para a formulação 'fraca'

$$w^T Av = w^T y, \text{ para certos vectores } w.$$

A primeira implica a segunda, mas o contrário nem sempre é verdade, a menos que haja uma quantidade suficiente de vectores w . É claro que basta considerar $w = \mathbf{e}_i$, isto é, os vectores base, para que se obtenha uma igualdade em termos de componentes, e conseqüentemente haja uma equivalência. Mas se os vectores w considerados não gerarem uma base de \mathbf{R}^d , então a formulação fraca não implicará a forte.

Caso discreto. Podemos explorar um pouco mais a ideia anterior, aplicando ao caso do problema discreto para diferenças finitas.

Suponhamos que temos os pontos $p_{ij} = (x_i, y_j)$, ordenados com uma qualquer numeração, de forma a identificá-los simplesmente com um índice, passando assim a serem referidos apenas por p_i . Tendo já estabelecido o problema discreto relativo à equação de Poisson,

$$\begin{cases} \tilde{\Delta}u_i = f_i & \text{em } \bar{\Omega}_h, \\ u_i = 0 & \text{em } \partial\Omega_h. \end{cases}$$

já vimos que esta igualdade pode ser descrita em termos matriciais através de uma igualdade do tipo $M\mathbf{u} = \mathbf{y}$. Suponhamos agora que consideramos vectores teste \mathbf{w} definidos com valores arbitrários nos pontos p_i . Ao escrevermos $\mathbf{w}^T M\mathbf{u} = \mathbf{w}^T \mathbf{y}$, estamos a escrever a formulação

frac, que corresponderá à formulação forte se admitirmos que os vectores teste \mathbf{w} incluem ou geram a base canónica, ou seja $\mathbf{w} = \mathbf{e}_k$, vectores dados pelo delta de Kronecker, $w_i = \delta_{ik}$. Outros valores para \mathbf{w} correspondem a considerar uma soma ponderada, por exemplo, $\mathbf{w} = (0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0, 0, \dots, 0)$, implica $\mathbf{w}^T \mathbf{y} = \frac{1}{4}y_2 + \frac{1}{2}y_3 + \frac{1}{4}y_4$, e a informação aqui é essencialmente dada por y_3 , mas está misturada com os valores de y_2 e y_4 (correspondente à névoa), o que não acontece se considerarmos $\mathbf{w} = \mathbf{e}_3 = (0, 0, 1, 0, 0, 0, \dots, 0)$ que implica $\mathbf{w}^T \mathbf{y} = y_3$, ou seja, obtemos o valor exacto.

Há assim um paralelismo evidente entre o caso finito e contínuo, e que se traduz numa semelhança de papéis entre os deltas de Kronecker e Dirac. A grande diferença é que, no caso finito, se o subespaço vectorial que contém os vectores \mathbf{w} não for o próprio espaço (e consequentemente incluir a base), então não temos informação suficiente para recuperar a igualdade (forte). No caso contínuo isso é possível, graças a resultados de densidade, como veremos mais à frente.

Note-se que o caso finito de que falamos aqui, é ainda um caso de igualdades pontuais, e *não deverá ser confundido*, mais à frente, com a aproximação discreta, num espaço de dimensão finita, mas que será um espaço de funções!

4.2 Formulação abstracta

A igualdade variacional estabelecida para equação de Poisson (4.1) pode ser vista como um caso particular de uma formulação mais geral em que se utilizam formas lineares e bilineares.

Seja V um espaço vectorial. Dizemos que uma forma $b : V \times V \rightarrow \mathbf{R}$ é uma forma bilinear, se verificar as propriedades

$$\begin{aligned} b(v_1 + v_2, w) &= b(v_1, w) + b(v_2, w), & b(\alpha v, w) &= \alpha b(v, w), \\ b(v, w_1 + w_2) &= b(v, w_1) + b(v, w_2), & b(v, \alpha w) &= \alpha b(v, w). \end{aligned}$$

Dizemos que a forma é simétrica, se verificar $b(w, v) = b(v, w)$.

Reparamos que apenas faltam duas propriedades para que uma forma bilinear simétrica seja um produto interno. A primeira é que $b(v, v) \geq 0$, e a segunda que

$$b(v, v) = 0 \Rightarrow v = 0.$$

No caso de formas definidas nos complexos, $b : V \times V \rightarrow \mathbf{C}$, introduz-se a noção de forma *sesquilinear*², e nesse caso a única diferença diz respeito às propriedades

$$b(v, \alpha w) = \bar{\alpha} b(v, w), \quad b(v, w) = \overline{b(w, v)}.$$

Podemos agora estabelecer a *formulação variacional*

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \in V : \\ b(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V. \end{array} \right. \quad (4.2)$$

em que V é um espaço de Hilbert, $l : V \rightarrow \mathbf{R}$ é uma forma linear e $b : V \times V \rightarrow \mathbf{R}$ é uma forma bilinear.

²O prefixo *sesqui* vem do latim, e significa *um e meio*. Por exemplo, *sesquipedalis* significava um pé e meio.

Serão habitualmente admitidas algumas hipóteses:

- b é contínua em V , ou seja, que existe uma constante $M > 0$:

$$|b(u, v)| \leq M \|u\|_V \|v\|_V, \quad \forall u, v \in V.$$

- b é coerciva em V (ou V -elíptica), ou seja, que existe uma constante $\alpha > 0$:

$$b(v, v) \geq \alpha \|v\|_V^2, \quad \forall v \in V.$$

- l é contínua em V , ou seja, existe $C > 0$:

$$|l(v)| \leq C \|v\|, \quad \forall v \in V.$$

Exemplos:

- a) No caso da equação de Poisson, $V(\Omega) = H_0^1(\Omega)$, já vimos que

$$b(v, w) = \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla w, \quad l(w) = \int_{\Omega} f w.$$

Falta-nos verificar as hipóteses de continuidade e coercividade, mas para isso precisamos do estudo do espaço de Sobolev $H_0^1(\Omega)$ e de qual norma será adequado considerar nesse espaço. Faremos isso mais à frente.

- b) No caso de dimensão finita, para um sistema $Au = y$, escrevemos a formulação fraca $w^T Av = w^T y$, com $w \in V = \mathbf{R}^d$, e é claro que temos

$$b(v, w) = w^T Av, \quad l(w) = w^T y.$$

Se a matriz A for definida positiva temos, por definição $v^T Av > 0$, para $v \neq 0$, e portanto como se trata de um espaço de dimensão finita podemos sempre considerar $\alpha = \min_{\|w\|=1} w^T Aw > 0$ (já que a bola unitária é compacta e há mínimo), logo

$$b(v, v) = v^T Av = \frac{v^T}{\|v\|} A \frac{v}{\|v\|} \|v\|^2 \geq \alpha \|v\|^2.$$

De facto, em certo sentido, a noção de coercividade generaliza a noção, em dimensão finita, de matrizes definidas positivas.

Se a matriz A for definida positiva e também simétrica, sabemos que $b(v, w)$ define um produto interno, que podemos designar por $\langle v, w \rangle_A$ e assim a formulação variacional corresponde a encontrar u tal que

$$\langle u, w \rangle_A = \langle y, w \rangle, \quad \forall w \in \mathbf{R}^d,$$

em que designámos propositadamente o produto interno clássico por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sem o índice A , para que fique evidente que se trata de encontrar um vector u que 'seja o equivalente' a y segundo o novo produto interno. Iremos ver que este caso simétrico corresponde a um problema de minimização.

- c) Vejamos agora um exemplo resultante de uma equação diferencial ordinária em $\Omega =]0, 1[$,

$$-(p(x)u'(x))' + q(x)u(x) = f(x), \quad \forall x \in]0, 1[$$

com $p > 0, q \geq 0$ e as condições de fronteira (note-se que $\partial\Omega = \{0, 1\}$) são $u(0) = u(1) = 0$.

A forma bilinear obtida (por integração por partes) é neste caso

$$b(v, w) = \int_0^1 p(x)v'(x)w'(x) + q(x)v(x)w(x)dx,$$

e a forma linear será

$$l(w) = \int_0^1 f(x)w(x)dx.$$

O espaço de Hilbert a considerar será $H_0^1(]0, 1[)$. O espaço

$$C_0^1([0, 1]) = \{v \in C^1(]0, 1[) \cap C([0, 1]) : v(0) = v(1) = 0\},$$

não é completo para o produto interno.

4.2.1 Equivalência I (Caso simétrico - minimização de energia)

Vamos mostrar que, no caso em que a forma bilinear é simétrica, a formulação variacional corresponde a uma minimização de energia. Relembramos que esta análise é apenas válida se b for simétrica.

A equivalência entre a formulação variacional e a minimização de energia pode ser estabelecida mesmo para o caso de espaços de Banach, mas como nos interessa essencialmente o caso de espaços de Hilbert, manteremos a notação V para designar o espaço.

Seja V um espaço de Banach. Para uma forma bilinear simétrica, $b : V \times V \rightarrow \mathbf{R}$, definimos o funcional, designado por *funcional de energia*,

$$J(v) = \frac{1}{2}b(v, v) - l(v).$$

Interessa-nos estabelecer que o problema de minimizar J para qualquer $v \in V$, é equivalente a resolver o problema variacional

$$b(v, w) = l(w), \quad \forall w \in V.$$

Derivada de Fréchet de J .

Podemos calcular a derivada de Fréchet³ de J a partir da bilinearidade de b e da linearidade de l , porque

$$\begin{aligned} J(v+h) - J(v) &= \frac{1}{2}b(v+h, v+h) - l(v+h) - b(v, v) + l(v) = \\ &= b(v, h) - l(h) + \frac{1}{2}b(h, h), \end{aligned}$$

³Relembra-se aqui a noção de derivação de Fréchet de operadores em espaços de Banach (espaços normados e completos). Dados dois espaços de Banach E, F , um operador $A : E \rightarrow F$ diz-se Fréchet diferenciável num ponto $x \in E$ se existir $T \in \mathcal{L}(E, F)$:

$$\|A(x+h) - Ax - Th\|_F = o(\|h\|_E),$$

e T designa-se por A'_x . Trata-se de aproximar um operador não linear A por um outro que o é, na vizinhança de um ponto x .

Repare-se que quando os pontos são números reais, e o operador é uma simples função f , isto corresponde a exigir que há uma constante T :

$$|f(x+h) - f(x) - Th| = o(|h|)$$

essa constante é a derivada clássica, i.e. $T = f'(x)$.

Neste caso mais geral, os pontos podem ser funções, e a derivada deixa de ser uma constante para ser um operador linear, pois $T \in \mathcal{L}(E, F)$. Como é claro, se o operador for linear a derivada de Fréchet é o próprio operador!

e, devido à continuidade de b ,

$$|J(v+h) - J(v) - b(v,h) + l(h)| = \left| \frac{1}{2}b(h,h) \right| \leq M \|h\|_V^2.$$

Isto significa que, para a topologia de V , a derivada de Fréchet é

$$J'_v h = b(v,h) - l(h), \forall h \in V,$$

• Reparamos assim que se a derivada de Fréchet for nula, ou seja, $J'_v h = 0, \forall h \in V$, isso equivale a

$$b(v,h) = l(h), \forall h \in V,$$

ou seja, à formulação variacional.

Vamos agora ver que se o ponto v for mínimo de J , ou seja,

$$J(v+h) \geq J(v), \forall h \in V$$

a derivada de Fréchet J'_v tem que ser nula. Este resultado generaliza assim um facto bem conhecido.

Proposição 4.2.1 *Se v um mínimo de J então $J'_v \equiv 0$ e consequentemente*

$$b(v,h) = l(h), \forall h \in V.$$

Demonstração: Como J é Fréchet-diferenciável, temos

$$0 \leq J(v+h) - J(v) = J'_v h + o(\|h\|), \forall h \in V,$$

o que implica, para $h = \varepsilon w$, com $\|w\| = 1, \varepsilon > 0$, que

$$\frac{1}{\|h\|} (J'_v h + o(\|h\|)) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon} J'_v(w) + o(1)$$

e assim

$$0 \leq J'_v(w) + o(1) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} J'_v(w).$$

Logo, $0 \leq J'_v(w)$. Ora, isto é válido para qualquer w com norma 1, logo também para $-w$, portanto $0 \leq J'_v(-w) = -J'_v(w)$, concluímos assim que $J'_v(w) = 0$ e portanto $J'_v(h) = J'_v(w)\varepsilon = 0$. \square

Observação: É claro que poderíamos obter o resultado anterior sem falar em derivação de Fréchet, mas é conveniente estabelecer que a condição para a derivada de Fréchet ser nula corresponde exactamente à formulação variacional.

Podemos agora deduzir o seguinte resultado:

Um caso intermédio, entre os números reais e as funções, é o caso de vectores. Com efeito quando temos uma função vectorial $\mathbf{f} : \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}^q$, a derivada de Fréchet é a matriz jacobiana $J_{\mathbf{f}}$, pois a matriz T que verifica

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) - T\mathbf{h}\| = o(\|\mathbf{h}\|)$$

é justamente a matriz jacobiana calculada no ponto \mathbf{x} , ou seja, $T = J_{\mathbf{f}}(\mathbf{x})$, que sendo uma matriz é um operador linear de \mathbf{R}^d em \mathbf{R}^q .

Teorema 4.2.1 *Seja b tal que $b(w, w) \geq 0, \forall w \in V$. O ponto u é mínimo em V de*

$$J(v) = \frac{1}{2}b(v, v) - l(v)$$

se e só se verificar

$$b(u, w) = l(w), \quad \forall w \in V.$$

Demonstração: Já vimos uma das implicações na proposição anterior, a outra é trivial. Basta reparar que, sendo u solução do problema variacional, temos para qualquer $h \in V$,

$$J(u+h) - J(u) = b(u, h) - l(h) + \frac{1}{2}b(h, h) = l(h) - l(h) + \frac{1}{2}b(h, h) \geq 0. \quad \square$$

Observação 1:

a) A hipótese de b verificar $b(w, w) \geq 0, \forall w \in V$, é imediatamente garantida pela coercividade. Com efeito, exigir a coercividade é mesmo mais forte e garante que apenas haverá um mínimo, pois teremos

$$J(u+h) - J(u) \geq \frac{\alpha}{2}\|h\|_V^2$$

e a desigualdade é estrita se $h \neq 0$.

b) Repare-se que sendo b simétrica e coerciva, a forma bilinear define mesmo um produto interno! Com efeito,

$$b(v, v) \geq \alpha\|v\|_V^2, \quad \forall v \in V.$$

implica que $b(v, v) \geq 0$ e é óbvio que $b(v, v) = 0$ implica $\|v\| = 0$ e conseqüentemente $v = 0$.

Nestes casos, iremos ver que (pelo teorema de representação de Riesz) qualquer forma linear em V pode ser representada como o produto interno por um certo elemento.

Observação 2: Note-se que

$$b(v, w) = \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla w$$

verifica $b(v, v) \geq 0$, mas não define à partida um produto interno, já que $b(v, v) = 0$ não implica $v = 0$, pois as constantes também verificam $b(v, v) = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 = 0$. No entanto, este facto é contornado suprimindo as constantes não nulas do nosso espaço, impondo a condição $v = 0$ em $\partial\Omega$, o que acontece ao considerar $v \in H_0^1(\Omega)$.

Observação 3: Acabamos de mostrar que minimizar em $H_0^1(\Omega)$

$$J(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 - \int_{\Omega} v f$$

é equivalente a resolver

$$\int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in H_0^1(\Omega).$$

Esta ideia de encontrar a solução através de um processo de minimização denomina-se *método de Ritz*.

Observação 4: No caso matricial, isto corresponde a reparar que de $A\mathbf{v} = \mathbf{y}$ obtemos a formulação variacional $\mathbf{w}^T A\mathbf{v} = \mathbf{w}^T \mathbf{y}$, que será equivalente a minimizar $J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}\mathbf{v}^T A\mathbf{v} - \mathbf{v}^T \mathbf{y}$ quando a matriz A é simétrica e definida positiva.

Observação 5: No caso do exemplo c) anterior, a solução será o mínimo de

$$J(u) = \int_0^1 p(x)(u'(x))^2 + q(x)u(x)^2 - 2f(x)u(x)dx,$$

para funções $u \in H_0^1(]0, 1[)$.

4.2.2 Equivalência II (Formulações fraca e forte)

Vamos agora considerar a equivalência entre as formulações fraca e forte em casos específicos. Começamos por ver o caso que mais nos interessa, associado à equação de Poisson. Para esse efeito, é conveniente relembrar resultados básicos de distribuições e espaços de Sobolev (ver algumas notas em apêndice). Começamos por estabelecer algumas notações.

Para qualquer aberto $\Omega \subset \mathbf{R}^d$, o espaço $C_c^\infty(\Omega)$ (designado por espaço de funções teste, na teoria de distribuições, onde também se utiliza⁴ a notação $\mathcal{D}(\Omega)$) irá designar as funções $C^\infty(\Omega)$ que têm suporte compacto em Ω , ou seja, as funções infinitamente diferenciáveis em Ω que só não são nulas em subconjuntos $K \subset \Omega$ tais que \bar{K} é compacto. Na prática, isto corresponde a considerar todas as funções infinitamente diferenciáveis que são nulas numa vizinhança da fronteira (note-se que isto exclui as funções analíticas, já que estas sendo nulas numa vizinhança são nulas em Ω).

Iremos usar a notação $f = 0 \text{ a.e. } \Omega$ quando parecer importante salientar que a igualdade $f = 0$ se verifica a menos de um conjunto de medida de Lebesgue nula (o símbolo a.e. é uma abreviatura da expressão inglesa *almost everywhere*). De um modo geral, não haverá necessidade de estar sempre a referir esse facto, já que quando se trabalha em espaços de Lebesgue, a igualdade é subentendida a menos de conjunto de medida nula.

Teorema 4.2.2 *O espaço $C_c^\infty(\Omega)$ é denso em $L^p(\Omega)$, para $1 \leq p < \infty$. Em particular, se $f \in L^2(\Omega)$ e verifica*

$$\int_{\Omega} f(x)w(x)dx = 0, \forall w \in C_c^\infty(\Omega),$$

então $f = 0 \text{ a.e. } \Omega$.

Demonstração: Ver p.ex. [4]. A conclusão particular resulta de uma propriedade bem conhecida dos espaços de Hilbert. Com efeito, se H é um espaço de Hilbert e X é um seu subespaço, temos $X^\perp = \{0\} \iff \bar{X} = H$. \square

Observação. Este resultado tem bastante importância, porque permite encarar a igualdade dos funcionais com uma generalização da noção de igualdade pontual. Com efeito, quando consideramos distribuições, dizemos que $f = g$ se tivermos

$$\langle f - g, w \rangle = 0, \forall w \in C_c^\infty(\Omega),$$

e no caso em que f, g são funções $L^2(\Omega)$ (na realidade basta considerar $L_{loc}^1(\Omega)$), fica claro que isto significa

$$\int_{\Omega} (f(x) - g(x))w(x)dx = 0, \forall w \in C_c^\infty(\Omega),$$

⁴Não iremos usar habitualmente a notação $\mathcal{D}(\Omega)$ para as funções teste, mas iremos usar a notação $\mathcal{D}'(\Omega)$ para o dual (na sua topologia), já que esta é a notação mais comum para designar o espaço de distribuições.

e que pelo teorema implica $f - g = 0$ em Ω .

Vejam agora o caso da equação de Poisson.

Se considerarmos $f \in L^2(\Omega)$ e obtivermos uma função $u \in H^2(\Omega)$ (logo, $\Delta u \in L^2(\Omega)$) tal que

$$-\Delta u = f \text{ em } \Omega,$$

dizemos que u é uma *solução forte* (diremos que é *solução clássica* quando $u \in C^2(\Omega)$).

Falaremos de *solução fraca*, quando $u \in H_0^1(\Omega)$ for solução do problema variacional

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in H_0^1(\Omega).$$

Precisamos apenas de especificar o que entendemos por $H_0^1(\Omega)$, para além das informações intuitivas já adiantadas anteriormente.

Definição 4.2.1 *O espaço $H_0^1(\Omega)$ é a aderência de $C_c^\infty(\Omega)$ na topologia definida por $H^1(\Omega)$.*

É imediato que $H_0^1(\Omega)$ é um subespaço vectorial de $H^1(\Omega)$, e pela definição é um subespaço fechado para a norma induzida... no entanto não será essa norma que nos interessará considerar. É também claro que o espaço $H_0^1(\Omega)$ contém as funções teste $C_c^\infty(\Omega)$, que são nulas na fronteira. Para além disso, como as suas funções são o limite, na norma de $H^1(\Omega)$, de funções $C_c^\infty(\Omega)$ (que são nulas em $\partial\Omega$), coloca-se a questão de saber se estas funções têm traço nulo em $\partial\Omega$. A resposta intuitiva poderá ser um sim sem hesitações, mas só pode ser bem compreendida se notarmos que pelo teorema anterior também tínhamos dito que qualquer função $L^2(\Omega)$ poderia ser obtida como limite também de funções $C_c^\infty(\Omega)$, na norma $L^2(\Omega)$. Ora, as funções $L^2(\Omega)$ não têm que ter traço nulo na fronteira! Qual a diferença?

A pequena *grande* diferença está na norma que se considera! Por exemplo, é possível considerar uma sucessão de funções teste que convirja para $f = 1$ em Ω (basta pensar em funções *cut-off*⁵ numa sucessão de compactos K_n que se aproxima de Ω) mas é claro que para valores de n grandes, a distância entre a fronteira de K (onde a função vale 1) e a fronteira de Ω (onde a função vale 0) será cada vez mais pequena, pelo que a derivada irá tender para infinito. Como a derivada não será limitada, verifica-se (...) que esta sucessão não converge em $H^1(\Omega)$, não podendo pertencer a $H_0^1(\Omega)$.

Convém neste momento rever no apêndice a definição correcta de traço, algumas das suas propriedades, bem como os espaços funcionais em que é possível estabelecer a fórmula de Green.

Vamos admitir o seguinte resultado, cuja demonstração não é trivial (cf. [15]):

Lema 4.2.1 *Temos a definição equivalente*

$$H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\partial\Omega} = 0\},$$

em que $v|_{\partial\Omega}$ representa o traço de v na fronteira $\partial\Omega$ (fronteira seccionalmente C^1).

Este resultado permite justificar algumas afirmações feitas anteriormente, e podemos estabelecer os resultados de equivalência.

⁵Funções *cut-off* são funções $C_c^\infty(\Omega)$ que são nulas em todo Ω , excepto no interior de um compacto $K \subset \Omega$, onde valem 1.

Problema de Dirichlet para a equação de Poisson

Teorema 4.2.3 *Se $f \in L^2(\Omega)$ e $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ então a solução fraca e forte, do problema de Dirichlet para a equação de Poisson, coincidem.*

Demonstração:

(\Leftarrow) Esta implicação já havia sido considerada, mas repetimo-la, justificando alguns passos. Como $f \in L^2(\Omega)$ e $u \in H^2(\Omega)$, temos

$$-\Delta u = f \quad \text{æ. } \Omega,$$

o que implica

$$-\int_{\Omega} \Delta u w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in H_0^1(\Omega),$$

porque $\Delta u \in L^2(\Omega)$, $w \in L^2(\Omega)$ e todos os integrais estão bem definidos.

Pela fórmula de Green (generalizada para funções não regulares – como no apêndice), temos agora

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w - \int_{\partial\Omega} \partial_n u w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in H_0^1(\Omega),$$

note-se que todos os termos estão bem definidos, mas talvez seja importante reparar que $w|_{\partial\Omega}$, $\partial_n u|_{\partial\Omega}$ são funções de $H^{1/2}(\partial\Omega) \subset L^2(\partial\Omega)$.

Agora podemos usar o facto $w|_{\partial\Omega} = 0$, devido ao Lema anterior e concluir que

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in H_0^1(\Omega).$$

(\Rightarrow) Podemos repetir os passos no sentido inverso e obter

$$-\int_{\Omega} \Delta u w = \int_{\Omega} f w, \quad \forall w \in H_0^1(\Omega).$$

Como $C_c^\infty(\Omega) \subset H_0^1(\Omega)$, a igualdade variacional anterior é válida, em particular, para $w \in C_c^\infty(\Omega)$, portanto

$$\int_{\Omega} (\Delta u + f) w = 0, \quad \forall w \in C_c^\infty(\Omega)$$

e concluímos (pelo Teorema.4.2.2) que $\Delta u + f = 0$ æ. Ω .

A condição na fronteira $u = 0$ em $\partial\Omega$ resulta imediatamente de considerarmos sempre $u \in H_0^1(\Omega)$. \square

Observação: No teorema fica assumido implicitamente que estamos a considerar fronteiras suficientemente regulares, onde é possível aplicar os teoremas, e isso verifica-se se Ω for um aberto com fronteira seccionalmente C^1 , o que inclui domínios com cantos. No entanto, iremos ver mais à frente, que apenas conseguimos garantir que a solução esteja em $H^2(\Omega)$ (condição exigida para a equivalência) se a fronteira não tiver ‘cantos’ complicados...

Problema unidimensional

Vamos agora estabelecer a equivalência entre o problema de Dirichlet resultante de uma equação diferencial ordinária em $\Omega =]0, 1[$,

$$\begin{cases} -(p(x)u'(x))' + q(x)u(x) = f(x), \forall x \in]0, 1[, \\ u(0) = u(1) = 0. \end{cases}$$

em que $p > 0, q \geq 0, p \in C^1([0, 1]), q \in C[0, 1]$. A formulação variacional obtida foi

$$\int_0^1 p u' w' + q u w dx = \int_0^1 f w dx, \forall w \in H_0^1(]0, 1[).$$

Exercício: Verifique a equivalência entre a solução fraca e forte para .

Resolução:

(\Leftarrow) Da equação $-(p u')' + q u = f$, obtemos multiplicando por $w \in H_0^1(]0, 1[)$,

$$-\int_0^1 (p u')' w + q u w dx = \int_0^1 f w dx,$$

e aplicando integração por partes (fórmula de Green unidimensional!)

$$\int_0^1 p u' w' dx - [p u' w]_0^1 + \int_0^1 q u w dx = \int_0^1 f w dx,$$

e como $[p u' w]_0^1 = p(1)u'(1)w(1) - p(0)u'(0)w(0) = 0$, pois $w \in H_0^1(]0, 1[)$ e os traços são $w(0) = w(1) = 0$, obtemos

$$\int_0^1 p u' w' dx + \int_0^1 q u w dx = \int_0^1 f w dx.$$

(\Rightarrow) Mais uma vez, trata-se de repetir os passos no sentido inverso até que obtemos

$$\int_0^1 ((p u')' - q u + f) w dx = 0, \forall w \in H_0^1(]0, 1[),$$

e considerando, em particular, $w \in C_0^\infty(]0, 1[)$ pelo Teorema.4.2.2 temos $(p u')' - q u + f = 0$ a.e. $]0, 1[$.

4.2.3 Teoremas fundamentais

De seguida apresentamos alguns resultados fundamentais que nos permitem retirar informações valiosas acerca da existência, unicidade, e dependência contínua face aos dados das soluções fracas, soluções dos problemas variacionais. O resultado mais geral é o teorema de Lax-Milgram, já que não se exige que a forma bilinear seja simétrica, mas iremos começar por referir o caso simétrico, em que se pode fazer uma aplicação directa do teorema de Riesz. Aliás convém notar que na demonstração do teorema de Lax-Milgram iremos usar o próprio teorema de Riesz.

Em qualquer dos casos será sempre necessário assumir as hipóteses de que b é contínua e coerciva e de que l é contínua, num certo espaço de Hilbert V .

Formas Simétricas - Teorema de Riesz

Já referimos (na Observação 1b) anterior) que, se a forma bilinear for simétrica e coerciva, define um produto interno, e iremos escrever

$$\langle v, w \rangle_b = b(v, w).$$

Aliás, sendo a forma contínua e coerciva em V , isso é, neste caso, uma maneira equivalente de dizer que a norma definida por

$$\|v\|_b = \sqrt{b(v, v)}$$

é equivalente à norma de V , já que temos constantes $\alpha > 0, M > 0$:

$$\alpha \|v\|_V^2 \leq \|v\|_b^2 = b(v, v) \leq M \|v\|_V^2.$$

Recordamos agora um teorema fundamental em espaços de Hilbert.

Teorema 4.2.4 (*Representação de Riesz*). *As formas lineares contínuas num espaço de Hilbert V são sempre da forma $T(x) = \langle \tau, x \rangle$ em que τ é um elemento do espaço V . A correspondência $T \mapsto \tau$ é biunívoca, sendo mesmo uma isometria.*

Portanto, no caso de $b(v, w)$ definir um produto interno, qualquer forma linear em V pode ser representada como o produto interno por um certo elemento. Ou seja, sendo l uma forma linear em V fica garantido que existe um e um só $\tau \in V$ tal que

$$l(w) = \langle \tau, w \rangle_b, \quad \forall w \in V.$$

Isto significa que temos $l(w) = b(\tau, w)$ e portanto τ é exactamente a solução do problema variacional, ie. $u = \tau$. Como o teorema de Riesz também garante que nessas circunstâncias se trata de uma isometria, conclui-se que o problema está bem posto, tendo-se $\|u\|_V = \|l\|_{V'}$, recordando-se que a norma no dual é definida por

$$\|l\|_{V'} = \sup_{w \neq 0} \frac{|l(w)|}{\|w\|_V}.$$

Exemplo 1. *Caso discreto – matrizes simétricas definidas positivas.*

No caso em que temos $Au = y$, e em que A é uma matriz simétrica definida positiva, então

$$b(v, w) = w^T Av$$

define um produto interno, que já representámos por $\langle v, w \rangle_A$ e portanto, é claro que dada a forma linear $l(w) = w^T y = \langle y, w \rangle$, pelo teorema de Riesz existe um e um só $u \in \mathbf{R}^d$:

$$\langle u, w \rangle_A = \langle y, w \rangle, \quad \forall w \in \mathbf{R}^d.$$

Assim, definida a norma $\|v\|_A^2 = \langle v, v \rangle_A = v^T Av$, temos

$$\|l\|_A = \sup_{w \neq 0} \frac{|w^T y|}{\|w\|_A} \text{ que será igual a } \|u\|_A.$$

Exemplo 2. *Caso unidimensional.*

Consideremos agora o problema já apresentado para uma equação diferencial ordinária. A solução fraca $u \in H_0^1(]0, 1[)$ deve verificar o problema variacional com a forma bilinear

$$b(v, w) = \int_0^1 p(x)v'(x)w'(x) + q(x)v(x)w(x)dx,$$

em que $p > 0, q \geq 0, p \in C^1(]0, 1[), q \in C[0, 1]$, e com a forma linear

$$l(w) = \int_0^1 f(x)w(x)dx.$$

É claro que se trata de uma forma bilinear simétrica contínua, em $H^1(]0, 1[)$, basta ver que aplicando Cauchy-Schwarz em L^2 ,

$$\begin{aligned} |b(v, w)| &\leq \left| \int_0^1 p(x)v'(x)w'(x) \right| + \left| \int_0^1 q(x)v(x)w(x)dx \right| \leq \\ &\leq \max_{[0,1]} |p| \left| \int_0^1 v'w' \right| + \max_{[0,1]} |q| \left| \int_0^1 vw \right| \leq C(\|v'\|_{L^2}\|w'\|_{L^2} + \|v\|_{L^2}\|w\|_{L^2}) \leq \\ &\leq 2C\|v\|_{H^1}\|w\|_{H^1}, \end{aligned}$$

em que $C = \max\{\max |p|, \max |q|\}$, já que é claro que $\|v\|_{H^1} \geq \|v\|_{L^2}$ e que $\|v\|_{H^1} \geq \|v'\|_{L^2}$.

Temos também $b(v, v) \geq 0$, resta ver que define um produto interno em $H_0^1(]0, 1[)$.

Designando $m_p = \min_{x \in [0,1]} p(x), m_q = \min_{x \in [0,1]} q(x)$, temos

$$b(v, v) = \int_0^1 p(x)v'(x)^2 dx + \int_0^1 q(x)v(x)^2 dx \geq m_p \int_0^1 v'(x)^2 dx + m_q \int_0^1 v(x)^2 dx$$

e portanto

$$b(v, v) \geq \min\{m_p, m_q\} \left(\int_0^1 v'(x)^2 dx + \int_0^1 v(x)^2 dx \right) = \alpha \|v\|_{H^1(]0,1[)}^2.$$

A) Se $\alpha = \min\{m_p, m_q\} > 0$, obtemos um produto interno, porque $b(v, v) = 0$ implica $\|v\|_{H^1(]0,1[)} = 0$ e consequentemente $v = 0$ a.e. $]0, 1[$. Este produto interno é equivalente ao produto interno de $H^1(]0, 1[)$ induzido no subespaço $H_0^1(]0, 1[)$.

Estamos assim nas condições do teorema de Riesz, e podemos garantir existência, unicidade e dependência contínua dos dados em $H_0^1(]0, 1[)$.

B) Se $m_q = 0$ então $\alpha = 0$ e temos que rever o último passo. Neste caso obtemos apenas

$$b(v, v) \geq m_p \int_0^1 v'(x)^2 dx,$$

e é claro que $b(v, v) = 0$ implicaria apenas $v' = 0$. No entanto, como estamos a trabalhar no espaço H_0^1 , podemos usar o facto das funções terem traço nulo para retirar o seguinte resultado:

Exercício: (Desigualdade de Poincaré em dimensão 1). Seja $v \in C^1(]a_1, a_2[)$ com $v(a_1) = 0$, então existe $C > 0$:

$$\int_{a_1}^{a_2} v(x)^2 dx \leq C \int_{a_1}^{a_2} (v'(x))^2 dx.$$

Resolução: Esta desigualdade resulta de considerar (note-se que $v(a_1) = 0$)

$$v(x) = \int_{a_1}^x v'(y) dy$$

e portanto, aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, $|\langle 1, v' \rangle|^2 \leq \|1\|^2 \cdot \|v'\|^2$,

$$|v(x)|^2 \leq |x - a_1| \int_{a_1}^x |v'(y)|^2 dy.$$

Agora, é claro que

$$\int_{a_1}^{a_2} |v(x)|^2 dx \leq \int_{a_1}^{a_2} (x - a_1) \int_{a_1}^x |v'(y)|^2 dy dx \leq \frac{1}{2} |a_2 - a_1|^2 \int_{a_1}^{a_2} |v'(y)|^2 dy,$$

e a constante é $C = \frac{1}{2} |a_2 - a_1|^2$. A desigualdade fica assim demonstrada. \square

Portanto, agora é simples estabelecer que o resultado ainda se verifica para $v \in H_0^1([a_1, a_2])$, já que será obviamente válido para funções $C_c^\infty([a_1, a_2])$, e sabemos que uma desigualdade (não estrita) quando é válida para cada elemento de uma sucessão é válida no limite.

Logo,

$$b(v, v) = m_p \int_0^1 v'(x)^2 dx \geq \frac{m_p}{2} \int_0^1 v'(x)^2 dx + \frac{m_p}{2C} \int_0^1 v(x)^2 dx$$

e portanto temos a coercividade,

$$b(v, v) \geq \min\left\{\frac{m_p}{2}, \frac{m_p}{2C}\right\} \|v\|_{H^1}^2.$$

Desta forma podemos aplicar o teorema de Riesz ao espaço $H_0^1(\Omega)$ munido da norma induzida por $H^1(\Omega)$, já que também é possível aplicar directamente o teorema de Riesz ao espaço $H_0^1(\Omega)$ munido da seminorma, dada por

$$\|v\|_{H_0^1} = \sqrt{\int_0^1 v'(x)^2 dx}.$$

As normas são equivalentes, pois é claro que $\|v\|_{H_0^1} \leq \|v\|_{H^1}$ e vemos (pelo exercício) que

$$\|v\|_{H^1} \leq (C + 1) \|v\|_{H_0^1}^2.$$

Exercício: Verificar que a forma b é contínua e coerciva usando o produto interno de H_0^1 . Repare que a desigualdade de Poincaré é agora utilizada para mostrar a continuidade.

Exemplo 3. *Equação de Poisson.*

Para verificarmos a coercividade para o caso da equação de Poisson precisamos de aplicar um caso mais geral da desigualdade de Poincaré

Teorema 4.2.5 (*Desigualdade de Poincaré*). *Seja Ω um domínio limitado (ou pelo menos incluído numa faixa). Existe $C_\Omega > 0$:*

$$\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq C_\Omega \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Demonstração:

A demonstração é semelhante à efectuada para em dimensão 1 num exercício anterior.

Sem perda de generalidade, admitimos que Ω está na faixa $\mathbf{R}^{d-1} \times [\alpha, \beta]$, e escrevemos $x = (\bar{x}, x_d)$, com $\bar{x} \in \mathbf{R}^{d-1}$, $x_d \in [\alpha, \beta]$. Consideramos $v \in C_c^\infty(\Omega)$ prolongada por zero a \mathbf{R}^d . Assim $v(\bar{x}, \alpha) = 0$ e podemos escrever

$$v(x) = v(\bar{x}, x_d) = \int_{\alpha}^{x_d} \partial_{x_d} v(\bar{x}, t) dt.$$

Portanto, aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, $|\langle 1, \partial_{x_d} v \rangle|^2 \leq \|1\|^2 \cdot \|\partial_{x_d} v\|^2$,

$$|v(\bar{x}, x_d)|^2 \leq |x_d - \alpha| \int_{\alpha}^{x_d} |\partial_{x_d} v(\bar{x}, t)|^2 dt.$$

Agora, é claro que

$$\int_{\mathbf{R}^{d-1}} |v(\bar{x}, x_d)|^2 d\bar{x} \leq (x_d - \alpha) \int_{\mathbf{R}^{d-1}} \int_{\alpha}^{x_d} |\partial_{x_d} v(\bar{x}, t)|^2 dt d\bar{x} = (x_d - \alpha) \int_{\mathbf{R}^d} |\partial_{x_d} v(x)|^2 dx,$$

pelo que

$$\int_{\mathbf{R}^d} |v(\bar{x}, x_d)|^2 d\bar{x} \leq \int_{\alpha}^{\beta} (x_d - \alpha) \int_{\mathbf{R}^{d-1}} |\partial_{x_d} v(\bar{x}, x_d)|^2 d\bar{x} dx_d \leq \frac{(\beta - \alpha)^2}{2} \int_{\mathbf{R}^d} |\partial_{x_d} v(x)|^2 dx.$$

Como o suporte de v está em Ω , fica assim demonstrado que

$$\|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C_{\Omega} \|\partial_{x_d} v\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C_{\Omega} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}^2$$

em que a constante é $C_{\Omega} = \frac{1}{2}|\beta - \alpha|^2$. Apenas mostrámos para $v \in C_c^\infty(\Omega)$, mas como esse conjunto é denso em $H_0^1(\Omega)$, a desigualdade fica demonstrada. \square

Agora é fácil concluir que

$$b(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v$$

define um produto interno em $H_0^1(\Omega)$, já que

$$b(v, v) = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 \geq \frac{1}{C_{\Omega}} \|v\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

e portanto $b(v, v) \geq 0$ e $b(v, v) = 0$ implica $\|v\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0$ e conseqüentemente $v = 0$ a.e. Ω .

É este o produto interno natural de $H_0^1(\Omega)$, que é equivalente ao induzido por $H^1(\Omega)$, já que temos nitidamente

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \leq \|u\|_{H^1(\Omega)}^2$$

e por outro lado, pela desigualdade de Poincaré,

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2 = \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \frac{1}{2} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2C_{\Omega}} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 = \min\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2C_{\Omega}}\right\} \|u\|_{H^1(\Omega)}^2.$$

Como as topologias são equivalentes, podemos usar indistintamente um ou outro produto interno. Usando o produto interno de H^1 , a coercividade de b surgiria pela desigualdade de Poincaré, e se usarmos o produto interno de H_0^1 essa desigualdade seria aplicada para mostrar a continuidade de b .

Formas Não Simétricas - Teorema de Lax-Milgram

Até aqui vimos apenas resultados que se aplicam a formas simétricas, no entanto, podemos estabelecer um resultado mais geral (o teorema de Lax-Milgram) em que não se exige que b seja simétrica. Mostramos que basta que b seja contínua e coerciva para existir uma e uma só solução para o problema variacional em V . A demonstração irá basear-se no Teorema de Representação de Riesz e no Teorema do Ponto Fixo de Banach.

Teorema 4.2.6 (Lax-Milgram). *Consideremos uma forma bilinear b contínua e coerciva num espaço de Hilbert V . Dado $l \in V'$ existe um e um só $u \in V$:*

$$b(u, v) = l(v), \forall v \in V.$$

Para além disso, a transformação $l \mapsto u$ é um isomorfismo entre V' e V . Isto assegura que o problema variacional está bem posto para qualquer $l \in V'$.

Demonstração:

Fixando $u \in V$, definimos um funcional $b(u, \cdot)$. Como $b(u, \cdot)$ é linear e contínuo (pois a forma bilinear é contínua), temos $b(u, \cdot) \in V'$. Pelo teorema de representação de Riesz, sabemos que num espaço de Hilbert a um funcional linear contínuo $b(u, \cdot)$ está associado um elemento $\tau \in V$, como esse elemento depende de u iremos designá-lo por $\tau(u)$, de forma que

$$b(u, v) = (\tau(u), v).$$

Para além disso a aplicação $\tau : b(u, \cdot) \mapsto \tau(u)$, é uma isometria de V' em V .

Repare-se que a coercividade significa, neste caso,

$$\langle \tau(v), v \rangle = b(v, v) \geq \alpha \|v\|^2,$$

e a continuidade implica

$$\|\tau(v)\|^2 = \langle \tau(v), \tau(v) \rangle = b(v, \tau(v)) \leq M \|v\| \|\tau(v)\|,$$

ou seja, $\|\tau(v)\| \leq M \|v\|$.

O problema variacional consiste em encontrar $u \in V$ tal que $b(u, \cdot) = l$.

Pelo Teorema de Riesz, também existe um τ_l associado a $l \in V'$, podendo escrever-se então que procuramos $u \in V$ tal que se verifique

$$\tau(u) = \tau_l.$$

Trata-se de uma equação a que iremos aplicar o Teorema do Ponto Fixo de Banach, transformando-a numa equivalente,

$$u = u - \omega(\tau(u) - \tau_l),$$

em que a multiplicação pela constante $\omega \neq 0$, corresponde a uma técnica de relaxação. Existir uma só solução para equação anterior corresponde a encontrar um só ponto fixo para o operador $Gu = (I - \omega\tau)u + \omega\tau_l$, que aplica V em V .

Basta ver que existe um $\omega \neq 0$ para o qual G é uma contracção. Como G é afim, ou seja, $Gu = Tu + C$, em que $Tu = (I - \omega\tau)u$ é linear e $C = \omega\tau_l$ é constante (relativamente à variação de u), basta verificar que a norma de T é inferior a 1, ou seja,

$$\|T\|_{V'} = \sup_{v \neq 0} \frac{\|Tv\|_V}{\|v\|_V} < 1$$

Aplicando as desigualdades já obtidas,

$$\begin{aligned} \|Tv\|^2 &= \|v - \omega\tau(v)\|^2 = \|v\|^2 - 2\omega \langle \tau(v), v \rangle + \omega^2 \|\tau(v)\|^2 \leq \\ &\leq \|v\|^2 - 2\omega\alpha \|v\|^2 + \omega^2 M^2 \|v\|^2 \end{aligned}$$

É agora fácil concluir que existe $\omega \neq 0$ tal que

$$1 - 2\omega\alpha + \omega^2 M^2 < 1 \Leftrightarrow \omega^2 M^2 < 2\omega\alpha,$$

bastando considerar $0 < \omega < \frac{2\alpha}{M^2}$.

Note-se que apesar de utilizar o teorema do ponto fixo esta demonstração não é construtiva pois o operador de iteração G é construído com base na aplicação τ que provém do teorema de Riesz.... pelo que a demonstração não é construtiva. \square

4.3 Formulação Variacional Discreta

Há que proceder à escolha de um espaço de funções V onde se coloque a questão de resolver o problema variacional. As funções $v \in V$ são designadas por *funções teste*, e o espaço de funções teste é demasiado grande para admitir que pudéssemos testar, por exemplo, a condição

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v$$

para cada uma das funções $v \in V$, já que V não se trata de um espaço de dimensão finita.

A ideia será considerar espaços de dimensão finita V_h , em que o parâmetro h é um parâmetro de discretização. Quando $h \rightarrow 0$, pela teoria de interpolação que iremos desenvolver no próximo capítulo, podemos aproximar qualquer função em V por uma sucessão de funções em V_h , e assim poderemos obter uma boa aproximação, considerando h suficientemente pequeno.

Assim, associado ao problema variacional,

- Dado $l \in V'$, encontrar $u \in V$ tal que

$$b(u, v) = l(v), \quad \forall v \in V,$$

consideramos um problema variacional em dimensão finita, que designamos como *aproximação de Galerkin* e que consiste em considerar um subespaço de dimensão finita $V_h \subset V$, e encontrar um $u_h \in V_h$ tal que

$$b(u_h, v_h) = l(v_h), \quad \forall v_h \in V_h.$$

Observação 1: Ao garantir que a forma b é coerciva, e como supomos $V_h \subset V$, isso implica imediatamente que na discretização também se tenha

$$b(v_h, v_h) \geq \alpha \|v_h\|^2, \quad \forall v_h \in V_h$$

e conseqüentemente que a matriz do sistema seja definida positiva. Isto significa que podemos utilizar o método de Cholesky (quando é simétrica), o método de Gauss-Seidel ou o método SOR.

Observação 2: No caso de se tratar de uma forma bilinear simétrica designa-se também por aproximação de *Ritz-Galerkin*, já que nesse caso, corresponde à minimização do funcional $J(v) = \frac{1}{2}b(v, v) - l(v)$. Neste caso podem ser utilizados métodos de optimização para deduzir a aproximação.

4.3.1 Funções base

Como estamos a supor uma aproximação por um espaço de dimensão finita V_h , existirá uma base finita de funções

$$\psi_1, \dots, \psi_N$$

e podemos escrever qualquer função $u_h \in V_h$ como combinação linear

$$u_h = \sum_{i=1}^N u_i^h \psi_i$$

Verificando-se a relação, para $j = 1, \dots, N$

$$b(u_h, \psi_j) = l(\psi_j),$$

obtendo o sistema

$$\sum_{i=1}^m b(\psi_i, \psi_j) u_i^h = l(\psi_j), \quad \forall j = 1, \dots, m,$$

pois basta verificar para as funções base para assegurarmos que é verificado para todos os elementos de V_h devido à linearidade de l e de $b(u, \cdot)$. Matricialmente o problema pode ser escrito na forma

$$[b(\psi_i, \psi_j)]_{N \times N} [u_i^h]_{N \times 1} = [l(\psi_j)]_{N \times 1}.$$

Convém-nos considerar uma base simples, de forma a que o cálculo dos elementos da matriz e do vector seja reduzido. Isto leva à construção dessas funções através de elementos finitos, que será feita no próximo capítulo.

Exemplo. *Caso unidimensional.* Consideramos as funções teste ψ_1, \dots, ψ_n que constituem uma base unidimensional

$$\psi_i = \begin{cases} \frac{t-t_{i-1}}{t_i-t_{i-1}}, & \text{para } t \in [t_{i-1}, t_i] \\ \frac{t_{i+1}-t}{t_{i+1}-t_i}, & \text{para } t \in [t_i, t_{i+1}] \\ 0, & \text{fora de } [t_{i-1}, t_{i+1}] \end{cases}$$

A ideia consiste em aproximar a solução u , através de uma combinação linear das funções base,

$$u = \sum u_i \psi_i$$

verificando a relação $b(u, w) = l(w)$ para cada $w = \psi_i$. Isto leva a um sistema cuja matriz é *tridiagonal*.

Observação: A matriz $B = [b(\psi_i, \psi_j)]_{N \times N}$ é construída de forma particular. Como $\psi_i(x) = 0$ se x não pertencer a um elemento adjacente ao nó i , o cálculo irá reduzir-se aos elementos adjacentes aos nós i e j . Com o vector $\mathbf{y} = [l(\psi_j)]_{N \times 1}$ irá passar-se o mesmo.

Podemos agora apresentar um resultado que estabelece uma certa proporcionalidade entre a aproximação de Galerkin e a melhor aproximação possível no espaço V_h . Este resultado será crucial para estabelecermos estimativas de erro para a aproximação por elementos finitos, no capítulo seguinte.

Teorema 4.3.1 (Céa). *Consideremos u a solução do problema variacional em V e u_h a solução do problema de aproximação de Galerkin em $V_h \subset V$. Então, temos a estimativa*

$$\|u - u_h\| \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|.$$

Demonstração:

Como $b(u, v) = l(v), \forall v \in V$, em particular é verdade para $v_h \in V_h$, tendo-se assim,

$$b(u, v_h) = l(v_h) = b(u_h, v_h),$$

e então $b(u - u_h, v_h) = 0$ para qualquer $v_h \in V_h$. Portanto,

$$\alpha \|u - u_h\|^2 \leq b(u - u_h, u - u_h) = b(u - u_h, u)$$

e ainda $b(u - u_h, u) = b(u - u_h, u - v_h)$, para um qualquer $v_h \in V_h$. Assim, pela continuidade de a surge imediatamente

$$\alpha \|u - u_h\|^2 \leq b(u - u_h, u - v_h) \leq M \|u - u_h\| \|u - v_h\|, \forall v_h \in V_h.$$

Portanto

$$\|u - u_h\| \leq \frac{M}{\alpha} \|u - v_h\|, \forall v_h \in V_h$$

e a estimativa é estabelecida. \square

Capítulo 5

Interpolação por Elementos Finitos

5.1 Caso unidimensional

Já vimos o exemplo em que era construída uma base com funções teste ψ_i que eram seccionalmente lineares. Vejamos agora mais em detalhe como se poderá passar a uma construção para duas ou mais dimensões analisando melhor o caso unidimensional. Vamos definir como elemento base o segmento de referência $[0, 1]$.

Funções de forma lineares. No elemento base $[0, 1]$ definimos as funções lineares $p(x) = a + bx$, cuja base é dada pelo conjunto de funções $\{1, x\}$. Cada polinómio de primeiro grau fica bem definido pelos dois valores nos seus extremos, pelo que podemos definir uma nova base com duas funções $q_1(x) = 1 - x$, $q_2(x) = x$, que tem a característica de verificar nos pontos $z_1 = 0$, $z_2 = 1$, a seguinte propriedade

$$q_i(z_j) = \delta_{ij}$$

essas funções q_1, q_2 constituem ainda uma base do espaço de polinómios lineares, para além disso, com uma simples transformação de coordenadas, podemos definir as funções base a partir destas funções. Basta fazer essa transformação para cada um dos elementos $E_k = [x_k, x_k + h]$, em que $x_k = kh$, com $k = 0, \dots, n - 1$. Desta forma, querendo uma função base ψ_k associada ao ponto interno x_k (com $k = 1, \dots, n - 1$) escrevemos

$$\psi_k(x) = \begin{cases} p_1(x), & \text{se } x \in E_{k-1}, \\ p_2(x), & \text{se } x \in E_k, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

em que o p_2 é obtido a partir de q_2 por transformação de coordenadas, $F_k(x) = (x - x_k)/h$, fazendo

$$p_2(x) = q_2(F_k(x))$$

e da mesma forma, $p_1(x) = q_1(F_{k-1}(x))$. Assim, convém salientar que o suporte das funções teste está em dois elementos, E_{k-1} e E_k , e não apenas num deles.

Funções de forma quadráticas. Nesse caso, temos de considerar em cada um dos elementos funções quadráticas. Levando de novo o problema para o elemento de referência $[0, 1]$, devemos incluir um novo ponto, central, e ficamos com 3 nós, $z_1 = 0$, $z_2 = \frac{1}{2}$, $z_3 = 1$. Agora trata-se de encontrar 3 polinómios de segundo grau, q_1, q_2 e q_3 , de forma a que se verifiquem ainda as

condições de Lagrange $q_i(z_j) = \delta_{ij}$. Para isso, basta resolver

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \\ 0 & \frac{1}{4} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e os valores a_{ij} dão os coeficientes na base canônica para o polinômio do segundo grau. Obtemos assim os polinômios base

$$q_1(x) = 1 - 3x + 2x^2, \quad q_2(x) = 4x(1 - x), \quad q_3(x) = -x + 2x^2$$

que podemos representar graficamente na figura seguinte

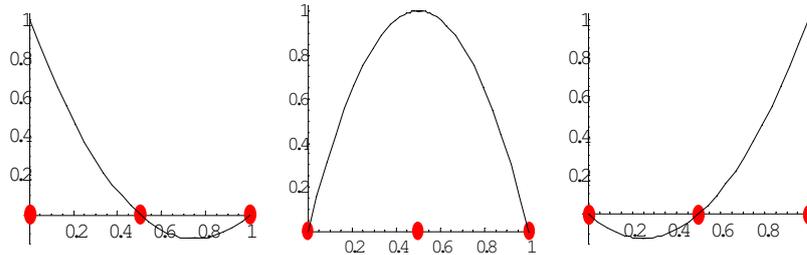


Figura 5.1.1: As 3 funções de forma de Lagrange quadráticas, no elemento de referência $[0, 1]$.

Reparamos, no entanto, que a colagem entre a primeira e a última função será acentuada pois não há colagem da derivada. Para obtermos elementos C^1 basta considerar os dois nós da extremidade, com condições nas derivadas.

Condições nas derivadas e funções de base cúbicas. Repetindo o procedimento anterior, obtêm-se 4 condições, as duas condições de Lagrange em $q(0)$ e $q(1)$, e as duas condições de Hermite em $q'(0)$ e $q'(1)$. De forma a ter um sistema bem determinado precisamos de considerar funções base cúbicas, $q(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$. Por exemplo, as quatro condições

$$q_1(0) = 1, q_1(1) = 0, q_1'(0) = 0, q_1'(1) = 0,$$

dão-nos a função $q_1(x) = 1 - 3x^2 + 2x^3$, representada na primeira figura em Fig.5.1.2. Da mesma forma exigindo agora $q_2(1) = 1$, obtemos $q_2(x) = 3x^2 - 2x^3$, representada na segunda figura. De forma semelhante, as condições $q_3'(0) = 1$ e $q_4'(1) = 1$ levam aos polinômios $q_3(x) = x - 2x^2 + x^3$ e $q_4(x) = -x^2 + x^3$, representados nas duas últimas figuras. A interpolação usando os valores das derivadas é designada *interpolação de Hermite*.

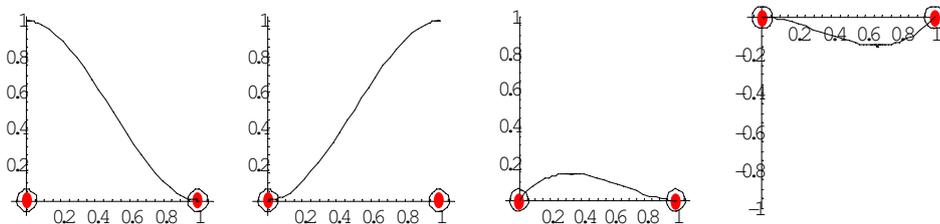


Figura 5.1.2: As 4 funções de forma de Hermite cúbicas, no elemento de referência $[0, 1]$.

Comparação entre funções base. De seguida apresentamos funções base obtidas a partir das funções de forma definidas nos três casos precedentes, o caso linear, quadrático e o caso cúbico com condições nas derivadas. Considere-se o intervalo $I = [0, 2]$ com dois elementos $E_1 = [0, 1]$ e $E_2 = [1, 2]$.

No caso linear, uma função base é representada na primeira figura em Fig.5.1.3. e resulta da colagem de funções de forma em E_1 e E_2 . Se assumirmos que as condições no extremo do intervalo são nulas, esta será a única função base ψ_1 .

No caso Lagrange quadrático, em cada um dos elementos E_1 e E_2 consideramos nós internos, em $x = 0.5 \in E_1$ e em $x = 1.5 \in E_2$. Assumindo que as condições nos extremos de I são nulas, há agora 3 funções base (ver a figura central em Fig.5.1.3). Uma delas, ψ_1 , resulta da colagem de funções de forma em E_1 e E_2 , as outras duas, ψ_2, ψ_3 (representadas a tracejado), são as funções de forma para os nós internos.

No caso Hermite cúbico, em cada um dos elementos E_1 e E_2 não há nós internos, no entanto há funções base que correspondem às condições de Lagrange e outras às condições de Hermite. Assumindo que as condições nos extremos de I são nulas, e também que a derivada é nula nesses extremos, há 2 funções base (ver a última figura em Fig.5.1.3). Ambas resultam da colagem de funções de forma em E_1 e E_2 , uma, que designamos por ψ_1 , resulta de ligar as funções q_1 e q_2 correspondentes às condições de Lagrange de forma a que função seja nula nos extremos, tome o valor 1 na ligação, e tenha a derivada nula nos extremos e na ligação. A outra, ψ_2 , representada a tracejado, liga as funções q_3 e q_4 correspondentes às condições de Hermite, de forma a que a função seja nula nos extremos e na ligação, tenha derivada nula nos extremos e derivada igual a 1 na ligação. É claro que no caso em que as condições sobre a fronteira não são nulas, o uso destas funções de forma requer não só o conhecimento do valor da função nos extremos mas também da derivada. Por exemplo, condições no extremo 0 de I implicam a utilização de duas funções base adicionais, que são as funções de forma q_1 e q_3 .

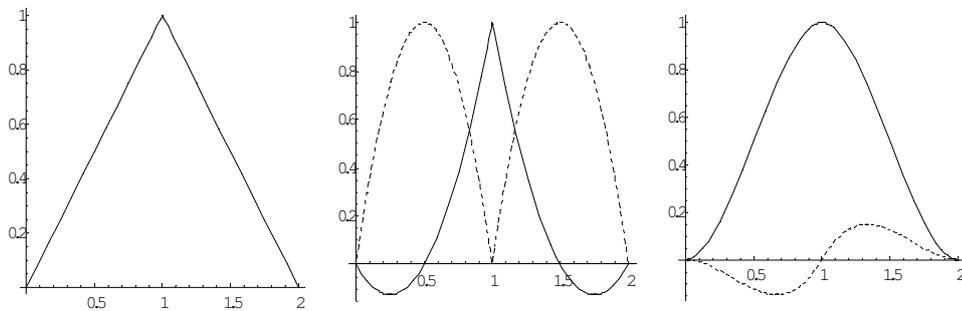


Figura 5.1.3: Funções de base para elementos de Lagrange lineares (primeira figura), elementos de Lagrange quadráticos (figura central) e elementos de Hermite cúbicos (última figura).

Exemplo. Consideremos a aproximação da função $f(x) = -2\sin(\frac{\pi}{2}x)$ no intervalo $[0, 2]$. Note-se que esta função nos extremos é nula, mas não tem derivada nula. Esta função será aproximada por $\tilde{f} = f(1)\psi_1 = -2\psi_1$ no caso Lagrange linear (Fig.5.1.4, à esquerda), por $\tilde{f} = f(1)\psi_1 + f(0.5)\psi_2 + f(1.5)\psi_3 = -2\psi_1 - \sqrt{2}\psi_2 - \sqrt{2}\psi_3$, no caso Lagrange quadrático (Fig.5.1.4, central). No caso Hermite cúbico há um problema se considerarmos a aproximação apenas com os nó ligação, pois ficamos com $\tilde{f} = f(1)\psi_1 + f'(1)\psi_2 = -2\psi_1$, o que é uma má aproximação (conforme se pode ver na Fig.5.1.4 à direita), já que pressupõe que a função teria derivadas nulas nos extremos, o que não acontece.

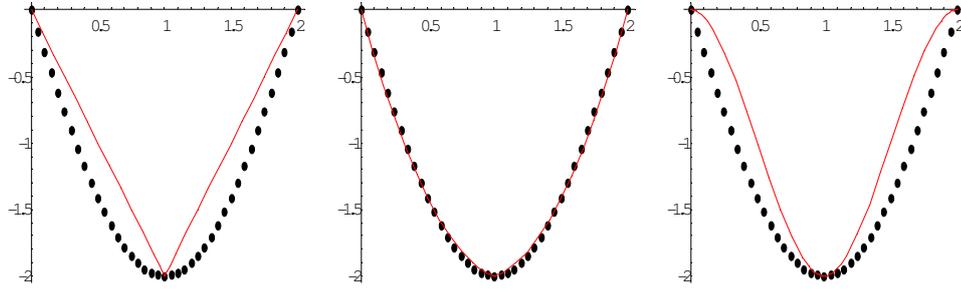


Figura 5.1.4: Aproximação de f (gráfico pontilhado) usando elementos de Lagrange lineares e quadráticos (duas primeiras figuras). Na terceira figura considera-se uma má aproximação com elementos de Hermite cúbicos em que não se teve em conta o valor da derivada na fronteira. O erro é inferior a 0.05 no caso dos elementos de Lagrange quadráticos e apenas menor que 0.5 para os outros dois.

Para efectuarmos uma aproximação correcta da função com elementos de Hermite devemos considerar duas novas funções base, ψ_3 e ψ_4 , dadas pelas funções de forma q_3 e q_4 , representadas nas duas primeiras figuras de Fig.5.1.5 ficando com

$$\tilde{f} = f(1)\psi_1 + f'(1)\psi_2 + f'(0)\psi_3 + f'(2)\psi_4 = -2\psi_1 - \pi\psi_3 + \pi\psi_4,$$

e podemos constatar que esta aproximação, apresentada na terceira figura de Fig.5.1.5 é excelente, tendo-se obtido um erro inferior a 0.025.

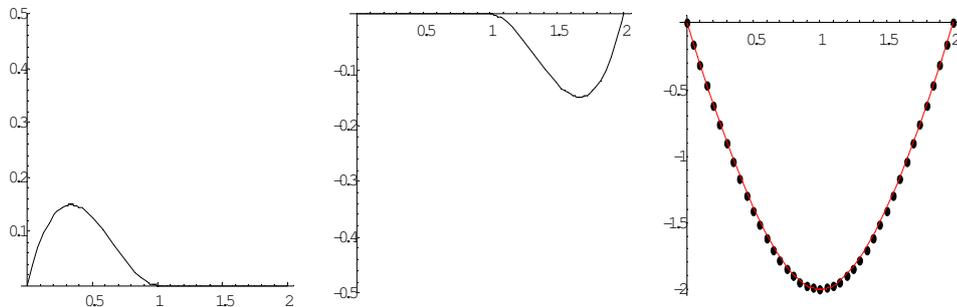


Figura 5.1.5: Aproximação correcta obtida com elementos de Hermite cúbicos (última figura), usando as duas funções base ψ_3 e ψ_4 (apresentadas nas duas primeiras figuras).

Estas aproximações por elementos finitos, que no caso unidimensional equivalem à interpolação usando *splines*, irão ser agora transportadas para o caso bidimensional, sendo depois intuitiva a generalização ao caso tridimensional.

5.2 Discretização geométrica (malhagem)

Um processo de definir espaços V_h consiste em aproximar o domínio Ω por um domínio poligonal $\tilde{\Omega}$ e dividir o domínio $\tilde{\Omega}$ em pequenos subdomínios (polígonos (em 2D) ou poliedros (em 3D)), de

forma a que o seu diâmetro seja $\leq h$. Este processo designa-se por *malhagem* (ou por *triangulação* já que o uso de triângulos é o mais vulgar).

No caso unidimensional, os domínios são intervalos e a divisão de um intervalo em pequenos elementos é trivial, consistindo na simples separação em subintervalos, como já vimos. Esses subintervalos constituem o suporte geométrico que permite efectuar a discretização geométrica no caso unidimensional, que é trivial. Menos trivial será proceder à divisão do domínio para dimensões superiores. No entanto convém ainda referir que nesses subintervalos podem não estar apenas definidos os nós das extremidades, como no caso quadrático apresentado na secção anterior em que estava definido um nó interno.

Normalmente, os subdomínios definidos na divisão são designados *elementos finitos*, mas esta noção inicial de elemento finito é apenas de cariz geométrico, e será completada com uma definição que associa ao elemento geométrico um espaço de funções e nós. Uma triangulação \mathcal{T} é o conjunto dos elementos finitos definidos nessa divisão.

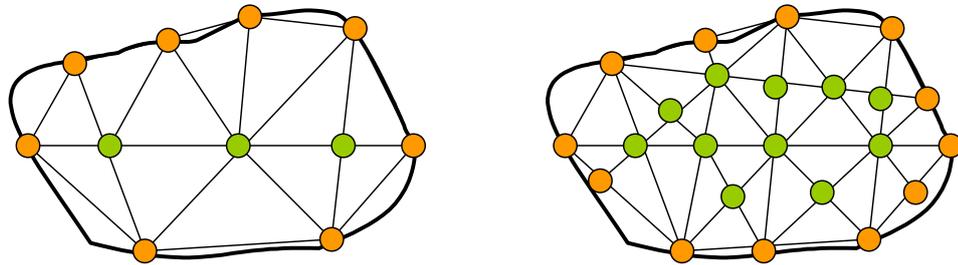


Figura 5.2.1: *Doas possíveis triangulações para um mesmo domínio. A triangulação da esquerda é mais grosseira,*

há apenas 3 nós internos e o diâmetro dos elementos é maior que na triangulação da direita (que é dita mais fina).

A aproximação por elementos finitos depende do parâmetro h que é definido pelo diâmetro. Para um certo elemento finito E (triângulo, quadrilátero ou outro) teremos

$$h_E = \text{diâmetro}(E) = \max_{x,y \in E} |x - y|.$$

O valor de h é dado pelo maior diâmetro dos elementos finitos existentes na triangulação

$$h = \max_{E \in \mathcal{T}} (h_E).$$

Normalmente indexa-se o índice h à triangulação, escrevendo-se \mathcal{T}_h .

Há algumas **condições de compatibilidade** a verificar (caso bidimensional):

- (i) Sendo E_1 e E_2 dois elementos, então a intersecção $\partial E_1 \cap \partial E_2$ poderá ser:
 - (a) – vazia, ou
 - (b) – reduzir-se a um ponto (nó comum), ou
 - (c) – reduzir-se a uma aresta comum.

Sendo ξ um nó (vértice) de E_1 , a intersecção $\xi \cap E_2$ não sendo vazia, terá sempre que ser um nó (vértice) de E_2 .

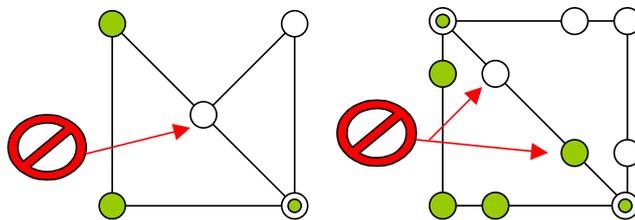


Figura 5.2.2: Casos de incompatibilidade dos elementos finitos.

(ii) Os elementos não podem degenerar. Convém mesmo que os elementos satisfaçam uma relação mínima entre uma bola interior e uma bola exterior. Ou seja, consideremos a maior bola $B_i \subseteq E$ com raio ρ_E e a menor bola $B_e \supseteq E$ com raio r_E . Devemos tentar evitar que a razão $\frac{r_E}{\rho_E}$ seja muito alta. No caso de triângulos, devemos evitar que seja muito superior a 2 (que é a situação que se verifica para um triângulo equilátero), e no caso de quadriláteros devemos evitar que seja muito superior a $\sqrt{2}$ (que é a situação que se verifica para um quadrado).

Iremos utilizar um parâmetro semelhante, denominado *parâmetro de degenerescência* do elemento,

$$\chi_E = \frac{h_E}{\rho_E}$$

que não deve ser muito alto. No caso dos triângulos este valor deve ser próximo de $2\sqrt{3}$ (valor que se obtém para um triângulo equilátero).

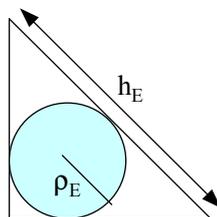


Figura 5.2.3: As quantidades ρ_E e h_E no caso de um triângulo. A razão $\chi_E = \frac{h_E}{\rho_E}$ deve ser a menor possível, o que acontece para triângulos equiláteros.

Observação: Um processo simples de avaliar a degenerescência de um triângulo consiste em avaliar a relação entre o comprimento do lado maior h e a sua altura α (tomando esse lado como base). Considerando um triângulo $E = \{a, b, c\}$, a sua área é dada por $A = \frac{1}{2}\alpha h$, e por outro lado $A = \frac{1}{2} \det(b - a, c - a)$. Assim, podemos obter $\alpha = \det(b - a, c - a)/h$. Sabendo que no caso de um triângulo equilátero $\alpha^2 + (h/2)^2 = h^2$, temos

$$\frac{h}{(\frac{1}{2}\alpha)} = \frac{4}{\sqrt{3}},$$

e considerando a aproximação $\frac{1}{2}\alpha \sim \rho$ devemos procurar que o factor

$$\tilde{\chi} = \frac{2h^2}{\det(b - a, c - a)}$$

seja o mais baixo possível, próximo de $\frac{4}{\sqrt{3}}$. É bem claro que para um valor de h fixo, obter $\tilde{\chi}$ grande significa que o valor do determinante é muito baixo, o que significa que os vectores definidos pelos lados são quase dependentes e o triângulo é degenerado.

5.2.1 Construção da Triangulação

Um dos processos mais frequentes de construir uma triangulação consiste em definir um certo número finito de pontos na fronteira do domínio e um número de pontos bastante maior no interior. A partir desses pontos (que podem ser obtidos aleatoriamente) procede-se à sua união por arestas de forma a obter triângulos. A automatização deste processo foi assunto de várias pesquisas e o detalhe envolvido sai fora do âmbito do curso. Apresentamos um processo simples de proceder à triangulação de um domínio estrelado.

- *Triangulação de um domínio estrelado.* Dada uma função $r(t)$ que parametriza a curva exterior que define o domínio, começamos por considerar um número finito de curvas interiores definidas por $r(t)h_k$, para um número finito de h_k tais que $0 < h_1 < \dots < h_m < 1$. Considerando um número finito de pontos, igualmente espaçados (angularmente) em cada uma das curvas, podemos proceder à triangulação unindo esses pontos. O número de pontos existente em cada uma das curvas interiores deve variar de forma a que os triângulos não degenerem.

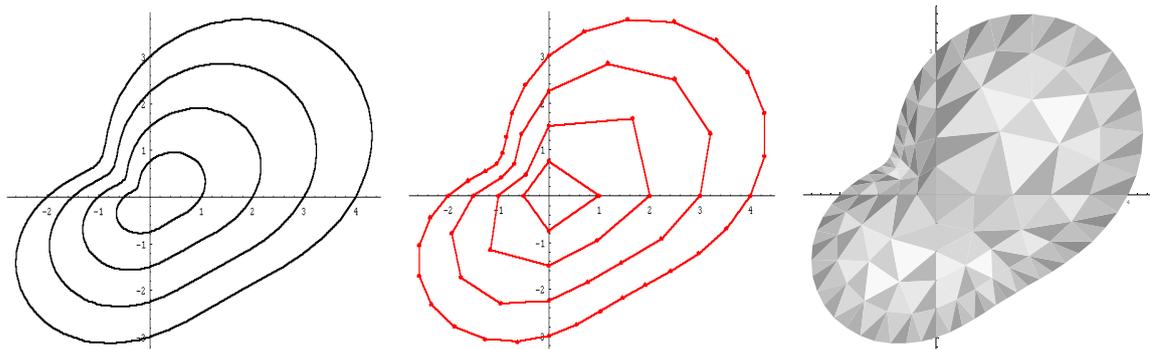


Figura 5.2.4: Construção de uma triangulação para um domínio estrelado a partir da parametrização da fronteira.

Na figura 5.2.4 foi considerada uma duplicação do número de pontos a partir da curva mais interior. Mas essa duplicação de pontos deve terminar nas curvas exteriores, assim que a distância entre os pontos da mesma curva for inferior à distância entre as curvas. Apresentamos na figura da direita o resultado da triangulação, colocando em contraste a degenerescência dos triângulos (a branco os triângulos quase equiláteros, e a escuro os que apresentam uma maior degenerescência).

- *Triangulação de Delauney.* Um processo que pode ser utilizado para construir uma triangulação, ou para a melhorar, é através de uma triangulação de Delauney. A ideia baseia-se na definição de *polígono de Voronoï*, e parte da existência de uma lista de pontos internos p_1, \dots, p_N . Associado a cada ponto p_k definimos um polígono de Voronoï V_k que é definido como sendo o

conjunto dos pontos que estão mais próximo de p_k do que de qualquer um dos outros p_1, \dots, p_N , ou seja,

$$V_k = \{x \in \mathbf{R}^2 : |x - p_k| \leq |x - p_i|, \forall i \neq k\}.$$

A triangulação de Delauney é obtida por dualidade (no sentido da teoria de grafos) com os polígonos de Voronoï e consiste em unir os pontos p_i correctos. Assim, $\{p_i, p_j\}$ define uma aresta de um triângulo se V_i e V_j têm uma aresta comum, e $\{p_i, p_j, p_k\}$ definem um triângulo se houver um ponto comum a V_i, V_j e V_k . A triangulação de Delauney é bastante usada pela sua característica seguinte: se tivermos quatro pontos $\{p_1, p_2, p_3, p_4\}$ então podemos definir dois pares de triângulos, cortando o quadrilátero pela diagonal $\{p_1, p_3\}$ ou pela diagonal $\{p_2, p_4\}$. A triangulação de Delauney é a melhor destas duas (no sentido em que os ângulos são menos agudos):

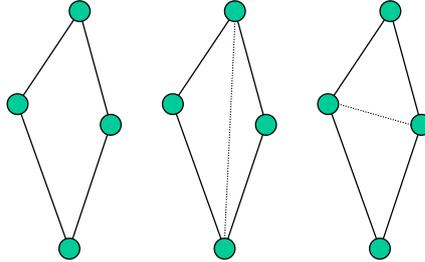


Figura 5.2.5: Dois processos para definir um par de triângulos a partir de 4 pontos. A divisão feita na figura central (onde o círculo que inclui um triângulo, inclui o outro) é pior que a da figura da direita (onde isso não acontece).

5.3 Elementos Finitos - Tripleto

Como já referimos, definimos um elemento finito não apenas como sendo um elemento geométrico, mas também associando-lhe um espaço de funções e um conjunto de nós que nos interessam para efeitos de interpolação.

Definição 5.3.1 (Ciarlet). Chamamos elemento finito ao tripleto $(E, \mathcal{P}, \mathcal{N})$, em que :

- i) E é o elemento geométrico, um conjunto compacto de \mathbf{R}^d com fronteira seccionalmente regular (normalmente triângulos ou quadriláteros em 2D, tetraedros ou prismas em 3D).
- ii) $\mathcal{P} = \langle \phi_1, \dots, \phi_m \rangle$ é um espaço de funções definidas em E que tem dimensão finita (funções de forma).
- iii) $\mathcal{N} := \{\nu_1, \dots, \nu_m\}$ é uma base para o espaço dual de \mathcal{P} (variáveis nodais).

Introduzimos ainda a noção de *triangulação* (nome abusivo, no caso de não se tratarem de triângulos), como sendo a família dos elementos finitos definidos na discretização de Ω .

Definição 5.3.2 Designamos por triangulação uma família de elementos finitos

$$\mathcal{T}_h = \bigcup_{E \subseteq \bar{\Omega}} (E, \mathcal{P}_E, \mathcal{N}_E)$$

em que o parâmetro h é definido por $h = \max h_E$.

Iremos referir esta triangulação como sendo \mathcal{T}_h ou Ω_h , revelando que se trata de uma discretização do domínio Ω .

A definição de Ciarlet é demasiado geral, e apenas nos vai interessar em certos casos concretos. O espaço \mathcal{P} será o espaço que irá conter as funções que permitem interpolação nos vários nós. As variáveis nodais correspondem, no caso dos elementos finitos mais simples (de Lagrange), aos nós de interpolação. No caso de elementos mais complicados, em que se pretende interpolar também derivadas, não chega considerar apenas os nós, já que num mesmo nó condicionamos não apenas o valor da função, mas também o valor das suas derivadas. Aparece assim a noção de variáveis nodais.

O espaço \mathcal{P}' dual de \mathcal{P} é constituído por aplicações lineares ν que transformam funções $\phi \in \mathcal{P}$ em números reais, designando-se normalmente por

$$\nu(\phi) = \langle \nu, \phi \rangle.$$

O espaço dual de um espaço de dimensão finita tem a mesma dimensão (e pode ser identificado com ele próprio), de forma que $\{\nu_1, \dots, \nu_m\}$ é uma base de \mathcal{P}' se verificarmos que são linearmente independentes. Ora, de

$$\alpha_1 \nu_1 + \dots + \alpha_m \nu_m = 0,$$

aplicando a cada elemento ϕ_j da base de \mathcal{P} , retiramos

$$\alpha_1 \nu_1(\phi_j) + \dots + \alpha_m \nu_m(\phi_j) = 0,$$

que deve implicar $\alpha_1 = \dots = \alpha_m = 0$, para que haja independência linear. Isto corresponde a ver que a matriz $M = [\nu_i(\phi_j)]_{ij}$ tem determinante não nulo.

Verificar esta última propriedade é mais fácil... Basta compreender o que significa!

5.3.1 Elementos de Lagrange Lineares

Consideramos o elemento finito triangular definido pelos vértices do triângulo

$$\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)\}$$

e por polinómios de primeiro grau

$$p(x, y) = a_0 + a_1 x + a_2 y,$$

que são definidos pela base $\phi_1(x, y) = 1, \phi_2(x, y) = x, \phi_3(x, y) = y$, isto significa que, identificando as variáveis nodais $\{\nu_1, \nu_2, \nu_3\}$ às aplicações

$$\nu_i(\phi) = \phi(x_i, y_i)$$

devemos verificar que

$$\begin{aligned} \det M &= \det \begin{bmatrix} \phi_1(x_1, y_1) & \phi_2(x_1, y_1) & \phi_3(x_1, y_1) \\ \phi_1(x_2, y_2) & \phi_2(x_2, y_2) & \phi_3(x_2, y_2) \\ \phi_1(x_3, y_3) & \phi_2(x_3, y_3) & \phi_3(x_3, y_3) \end{bmatrix} = \\ &= \det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix} \neq 0, \end{aligned}$$

efectuando os cálculos, isto significa que

$$\det \begin{bmatrix} x_1 - x_3 & y_1 - y_3 \\ x_2 - x_3 & y_2 - y_3 \end{bmatrix} \neq 0,$$

ou seja, que o triângulo não é degenerado (pois significa que os dois vectores, um definido pelos pontos 1-3, e outro pelos pontos 2-3, são linearmente independentes)!

Na realidade, aquilo que observámos foi que o sistema

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_1 + a_2y_1 = 0 \\ a_0 + a_1x_2 + a_2y_2 = 0 \\ a_0 + a_1x_3 + a_2y_3 = 0 \end{cases}$$

tem apenas a solução nula, o que será necessário e suficiente para se proceder a uma interpolação por polinómios de primeiro grau nos três pontos do triângulo! Ou seja, basta ver que $p(\mathbf{x}_1) = 0, p(\mathbf{x}_2) = 0, p(\mathbf{x}_3) = 0 \Rightarrow p \equiv 0$.

5.3.2 Elementos de Lagrange Quadráticos

Consideramos o elemento finito triangular definido pelos vértices do triângulo $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$, pelos três pontos médios dos lados $\{\mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6\} = \{(x_4, y_4), (x_5, y_5), (x_6, y_6)\}$ e por polinómios do segundo grau:

$$p(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy + a_4x^2 + a_5y^2$$

que são definidos pela base $\phi_1 = 1, \phi_2 = x, \phi_3 = y, \phi_4 = xy, \phi_5 = x^2, \phi_6 = y^2$, isto significa que, identificando as variáveis nodais $\{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \nu_5, \nu_6\}$ às aplicações

$$\nu_i(\phi) = \phi(x_i, y_i)$$

teremos uma matriz M de dimensão 6×6 .

Precisamos agora de ver que $p(\mathbf{x}_1) = 0, \dots, p(\mathbf{x}_6) = 0 \Rightarrow p \equiv 0$.

Para esse efeito iremos enunciar (mais abaixo) dois resultados sobre polinómios que permitam concluir que (i) um polinómio com duas variáveis restringido a uma recta pode ainda ser representado por um polinómio do mesmo grau mas com menos uma variável e que (ii) um polinómio com duas variáveis que se anule numa recta pode ser representado como uma multiplicação de uma variável por um polinómio com um grau inferior, através de mudança de coordenadas apropriada.

Isto permite concluir que como num dos lados do triângulo p é um polinómio de grau 2 que se anula em três pontos, então p é nulo nesse lado. Aplicando agora o resultado (ii) (ie. o lema seguinte), sabemos que $p(\mathbf{x}) = \tilde{x}_2q(\tilde{\mathbf{x}})$ em que q tem grau 1. Como p se anula nos restantes 3 pontos, que não são colineares, temos $q = 0$.

Alguns resultados sobre polinómios

Definição 5.3.3 A propriedade $p(\mathbf{x}_1) = 0, \dots, p(\mathbf{x}_m) = 0 \Rightarrow p \equiv 0$ para um polinómio de grau m designa-se unissolvência.

Proposição 5.3.1 Se p tem grau r em d variáveis então num hiperplano H (no caso $2D$, numa recta) é possível estabelecer uma mudança de coordenadas de forma a que a restrição de p a H seja um polinómio de grau r em $d - 1$ variáveis.

Demonstração: A equação que define o hiperplano será da forma $\alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_d x_d = \alpha_0$, permitindo escrever uma das componentes em função das restantes, digamos $x_1 = \frac{1}{\alpha_1}(\alpha_0 - \alpha_2 x_2 - \dots - \alpha_d x_d)$. Isso leva à substituição das potências x_1^m por $(\frac{1}{\alpha_1}(\alpha_0 - \alpha_2 x_2 - \dots - \alpha_d x_d))^m$ o que resulta em monómios de grau menor ou igual a m , não afectando assim o grau do polinómio. \square

Lema 5.3.1 Se p tem grau r e se anula num hiperplano, então podemos fazer uma mudança de coordenadas de forma a que $p(\mathbf{x}) = \tilde{x}_d q(\tilde{\mathbf{x}})$ em que q tem grau $r - 1$.

Demonstração: Consideremos o caso em que o hiperplano é $x_d = 0$, os outros casos reduzem-se a este por transformação de coordenadas. Vemos também apenas o caso mais simples $x = (x_1, x_2)$, já que nos restantes apenas se complica a notação. Temos

$$p(x_1, x_2) = \sum_{i+j=r} \alpha_{ij} x_1^i x_2^j = \sum_{i=0}^{i=r} \alpha_{i0} x_1^i + x_2 \sum_{i=0}^{i=r} \sum_{j=1}^{j=r} \alpha_{ij} x_1^i x_2^{j-1}, \quad (5.1)$$

e como neste caso o hiperplano será $x_2 = 0$, resulta

$$0 = p(x_1, 0) = \sum_{i=0}^{i=r} \alpha_{i0} x_1^i,$$

anulando a primeira parcela de (5.1). Como a segunda parcela contém a decomposição pretendida, o resultado fica provado. \square

5.3.3 Outros elementos finitos

Elementos finitos cúbicos

• *Elemento de Lagrange Cúbico.* Consideramos o elemento finito triangular definido pelos vértices do triângulo $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$, por dois pontos igualmente espaçados em cada um dos lados, ou seja 6 pontos $\{\mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6, \mathbf{x}_7, \mathbf{x}_8, \mathbf{x}_9\}$ situados no interior dos lados e pelo ponto médio no interior do triângulo, \mathbf{x}_{10} . Como funções de forma consideram-se polinómios do terceiro grau.

Exercício. Mostre a propriedade de unissolvência.

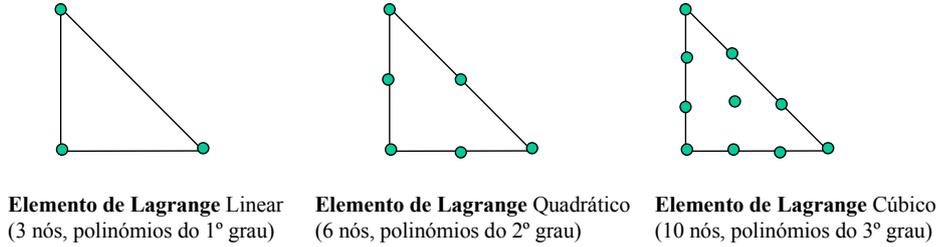


Figura 5.3.1: Colocação dos nós em alguns elementos de Lagrange (lineares, quadráticos e cúbicos).

• *Elemento de Hermite Cúbico.* Consideramos o elemento finito triangular definido pelos vértices do triângulo $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)\}$, por um ponto médio no interior do triângulo $\mathbf{x}_4 = (x_4, y_4)$, e por polinómios do terceiro grau:

$$p(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy + \dots + a_8x^3 + a_9y^3$$

que são definidos pela base $\phi_1 = 1, \phi_2 = x, \phi_3 = y, \dots, \phi_9 = x^3, \phi_{10} = y^3$. Agora, como o número de nós (4) é diferente do número de graus de liberdade no polinómio (10), as 10 variáveis nodais $\{v_1, \dots, v_{10}\}$ incluem condições sobre as derivadas

$$\begin{aligned} \nu_i(\phi) &= \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3, 4 \\ \nu_{i+4}(\phi) &= \partial_x \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i+7}(\phi) &= \partial_y \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

e teremos uma matriz M de dimensão 10×10 .

Agora, como num dos lados do triângulo p é um polinómio de grau 3 com uma única variável (pela proposição anterior) que se anula em 2 pontos, digamos \mathbf{x}_2 e \mathbf{x}_3 , que são raízes duplas, pois as derivadas também são nulas, então corresponde a 4 raízes para um polinómio de grau 3, ou seja, tem que ser nulo nesse lado $[\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3]$, logo pelo lema, $p(\mathbf{x}) = \tilde{x}_2 q(\tilde{\mathbf{x}})$. Agora $q(\tilde{\mathbf{x}})$ é um polinómio de grau 2 no lado $[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]$, nulo em \mathbf{x}_1 com derivada nula em \mathbf{x}_1 e em \mathbf{x}_2 (pode não ser nulo em \mathbf{x}_2 já que essa condição é verificada por $p(\mathbf{x}) = \tilde{x}_2 q(\tilde{\mathbf{x}})$, quando $\tilde{x}_2 = 0$). Isto significa que a derivada (um polinómio de grau 1, nulo em dois pontos) é nula, e como é nulo em \mathbf{x}_1 , temos q nulo no lado $[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]$, e pelo lema 2 podemos escrever $q(\tilde{\mathbf{x}}) = \tilde{x}_1^* q^*(\tilde{\mathbf{x}}^*)$ em que q^* é um polinómio de grau 1. Como a derivada de q^* é nula no segmento $[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3]$ apenas poderá ser uma constante. Do facto que se anula em \mathbf{x}_4 resulta $q^* = 0$.

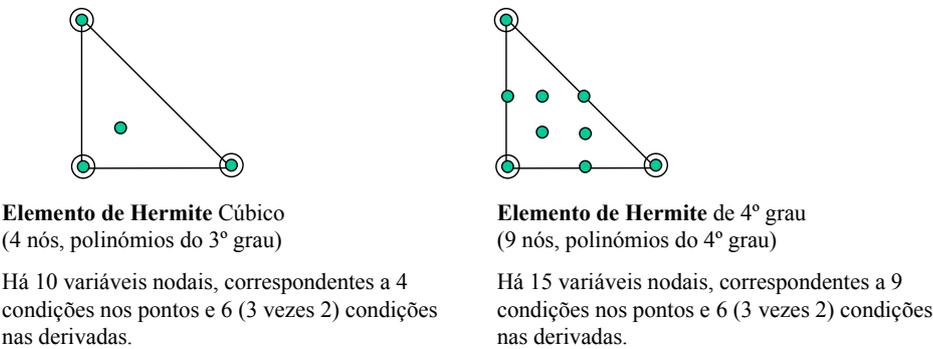


Figura 5.3.2: Elementos de Hermite com grau 3 e grau 4. O círculo que rodeia o nó significa que se considera interpolação nas derivadas.

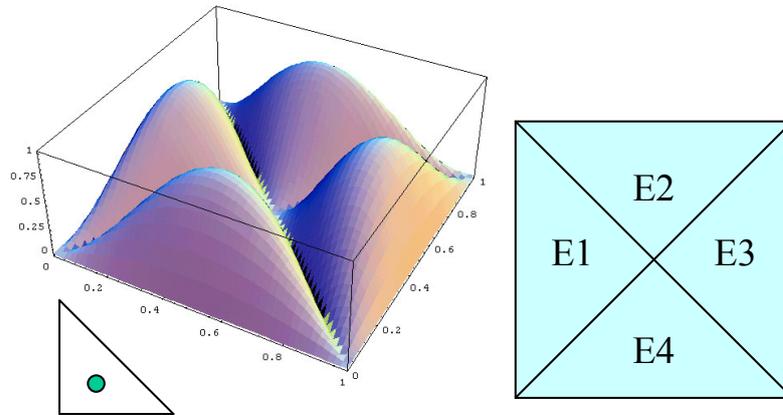


Figura 5.3.3: Apresentação de uma das dez funções base definidas no elemento de Hermite cúbico. Nesta figura é apresentada a função correspondente à variável nodal de colocação central. A mesma função foi colocada em quatro elementos diferentes E_1, E_2, E_3 e E_4 .

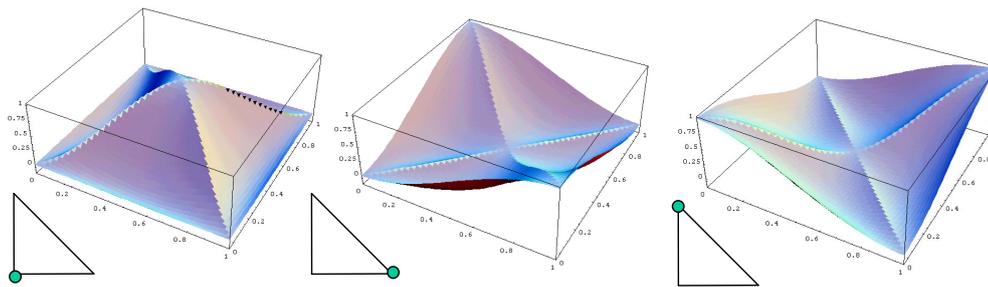


Figura 5.3.4: Continuação da figura anterior. Apresentação das funções base correspondentes às variáveis nodais de colocação nos vértices indicados.

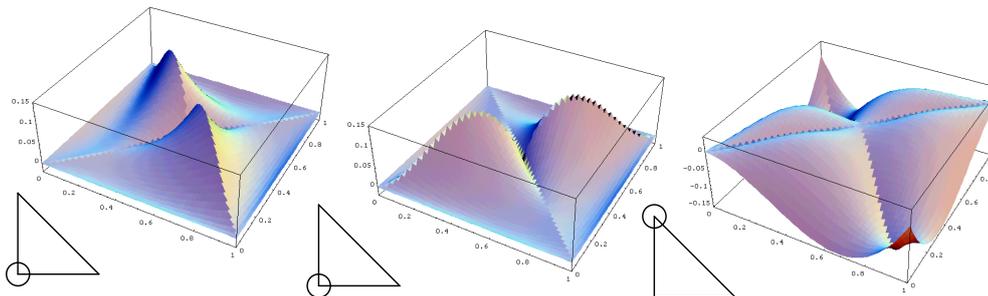


Figura 5.3.5: Continuação da figura anterior. Apresentação das funções base correspon-

dentos às variáveis nodais relativas a uma das derivadas nos vértices indicados.

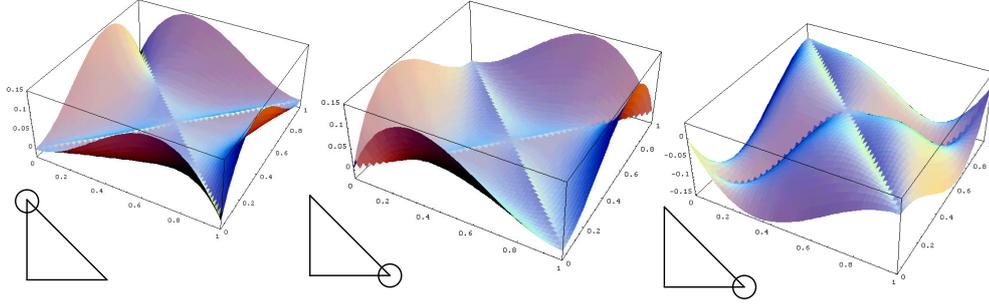


Figura 5.3.6: Continuação da figura anterior. Apresentação das funções base correspondentes às variáveis nodais relativas à outra derivada nos vértices indicados.

Elementos finitos C^1

- *Elemento de Argyris (grau 5).*

Consideramos o elemento finito triangular definido pelos vértices do triângulo $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)\}$ considerando polinómios de grau 5,

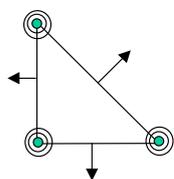
$$p(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy + \dots + a_{19}x^5 + a_{20}y^5$$

em que se incluem, para além de condições sobre os vértices, também sobre as normais,

$$\begin{aligned} \nu_i(\phi) &= \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3, \\ \nu_{i+3}(\phi) &= \partial_x \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i+6}(\phi) &= \partial_y \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i+9}(\phi) &= \partial_x^2 \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i+12}(\phi) &= \partial_y^2 \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i+15}(\phi) &= \partial_y \partial_x \phi(x_i, y_i), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \\ \nu_{i+18}(\phi) &= \partial_{n_i} \phi(x, y), \quad \text{se } i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

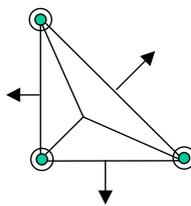
as últimas condições sobre as derivadas normais são impostas sobre os 3 lados do triângulo. Este elemento tem a particularidade de permitir a diferenciabilidade quando se unem os vários elementos (coisa que não acontecia nos anteriores), que é obtida ao impor estas três condições. Não é possível obter diferenciabilidade para a união de elementos com polinómios grau inferior a 5... pode no entanto considerar-se funções seccionalmente polinomiais no interior do triângulo (dividido em três partes) e assim com funções de forma C^1 que são seccionalmente polinómios de terceiro grau é possível obter uma colagem C^1 através do designado *elemento de Clough-Tocher*.

Elementos C^1 (diferenciáveis)



Elemento de Argiris de 5º grau
(4 nós e 3 normais, polinómios do 5º grau)

Há 21 variáveis nodais, correspondentes a 3 condições nos pontos e 6 (3 vezes 2) condições nas derivadas, 9 (3 vezes 3) nas segundas derivadas e 3 nas derivadas normais



Elemento de Clough-Tocher

(3 nós, 3 normais, as funções de forma são seccionalmente, em cada subtriângulo, polinómios do 3º grau, diferenciáveis)

Há 12 variáveis nodais, correspondentes a 3 condições nos pontos, 6 (3 vezes 2) condições nas derivadas e 3 nas derivadas normais.

Figura 5.3.7: Exemplos de elementos finitos diferenciáveis.

Note-se que ao impôr as condições sobre as segundas derivadas, garantimos que em cada um dos lados os polinómios de graus 5 tenham duas raízes triplas, o que implica que se anulem nesses lados. Seguindo o lema, descemos assim de grau 5 para grau 4, depois para grau 3 e ficamos com um polinómio de grau 2. Sobram 6 condições, que são determinadas por derivadas cruzadas nos 3 pontos e pelas três condições nas derivadas normais.

Para informação complementar consultar p.ex. [3].

Elementos finitos rectangulares

Consideremos como elemento de referência o quadrado $\hat{E} = [0, 1]^2$. Já referimos que uma transformação afim $F : \hat{E} \rightarrow E$ transforma rectas paralelas em rectas paralelas, pelo que os elementos E serão forçosamente paralelogramos. Por abuso de linguagem, são designados *elementos finitos rectangulares*, mas na realidade tratam-se de *paralelogramos*. Como já foi referido na secção anterior não se deve considerar uma malhagem com quadriláteros quaisquer (pois F não poderia ser uma aplicação afim), mas apenas com paralelogramos.

Quando se considera elementos finitos definidos através do quadrado de referência passamos a considerar o grau máximo do polinómio por componentes, ao contrário do que se considerava no caso dos triângulos. Ou seja, dado um monómio x^α , dizemos que ele tem grau $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_d$ o que corresponde a somar o grau das componentes, e diremos que ele tem grau máximo igual a $|\alpha|_\infty = \max\{\alpha_1, \dots, \alpha_d\}$, o que corresponde ao máximo grau nas componentes. Assim, definimos

$$\mathbf{Q}_m = \{p : p \text{ tem grau máximo } m\},$$

que é um conjunto que contém \mathbf{P}_m . Por exemplo, o polinómio quadrático $a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy$ é um polinómio de grau máximo 1.

O conjunto de polinómios \mathbf{Q}_m é mais adequado para trabalhar com os elementos finitos definidos por paralelogramos. Com efeito, basta pensar que queremos considerar como variáveis nodais os valores da função definidos nos 4 vértices do quadrado de referência. Nesse caso ficamos com 4 graus de liberdade que podem ser atribuídos aos 4 coeficientes de um polinómio

de grau máximo 1. A propriedade de unissolvência é facilmente demonstrada para elementos com $(m + 1)^2$ nós usando polinómios de \mathbf{Q}_m . Apresentamos alguns exemplos na figura seguinte.

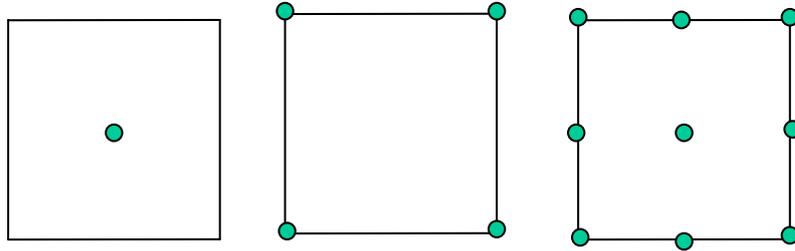


Figura 5.3.8: Elementos de Lagrange para o quadrado de referência.

Observação: Vemos que no último elemento apresentado (com 9 nós) há um nó interno que poderá não ser considerado se trabalharmos com um outro tipo de elementos, em que todos os nós são colocados sobre a fronteira do quadrado, tratam-se dos denominados elementos *serendipity*. Não considerando esse nó central, ficamos com 8 nós, o que não é adequado nem para o espaço \mathbf{P}_2 , que tem 6 graus de liberdade, nem para o espaço \mathbf{Q}_2 que tem 9. Precisamos de um outro espaço de polinómios $\mathbf{Q}_2^* = \{p(x) + ax_1^2x_2 + bx_1x_2^2 : p \in \mathbf{P}_2\}$, onde será possível mostrar a unissolvência. Os elementos *serendipity* estão assim associados a espaços de polinómios \mathbf{Q}_m^* definidos de forma semelhante.

Caso tridimensional

No caso tridimensional há uma generalização imediata destas noções, mas o cálculo torna-se obviamente mais pesado. No caso bidimensional tínhamos

$$\dim \mathbf{P}_m = \frac{1}{2}(m + 1)(m + 2),$$

o correspondia à sequência 1, 3, 6, 10, ... de graus de liberdade disponíveis para os diferentes graus de polinómios, e que correspondia ao número de nós utilizado nos elementos de Lagrange. No caso tridimensional, passamos a ter

$$\dim \mathbf{P}_m = \frac{1}{6}(m + 1)(m + 2)(m + 3),$$

e os polinómios de grau m implicam um maior número de graus de liberdade

m	Base	Graus de liberdade
0	1	1
1	$1, x, y, z$	4
2	$1, x, y, z, xy, xz, yz, x^2, y^2, z^2$	10
3	$1, x, y, z, \dots, x^3, y^3, z^3$	20

Note-se que, de um modo geral, em dimensão d temos $\dim \mathbf{P}_m = \frac{(m+d)!}{m!d!}$.

Elementos simpliciais. O simplex em dimensão 2 é o triângulo e em dimensão 3 é o tetraedro. De forma semelhante, iremos considerar tetraedros como elementos geométricos, colocando

variáveis nodais associadas aos vértices para o caso do elemento de Lagrange linear, já que os quatro vértices do tetraedro condicionam os 4 graus de liberdade de um polinómio de primeiro grau, etc.

Elementos paralelotopos. O paralelotopo em dimensão 2 é o paralelogramo e em dimensão 3 é o paralelepípedo. Mais uma vez devemos considerar neste caso o espaço dos polinómios \mathbf{Q}_m que terá dimensão $(m+1)^3$ no caso tridimensional e $(m+1)^d$ no caso geral. A colocação dos nós para os elementos de Lagrange é uma imediata generalização do que é feito a duas dimensões.

5.3.4 Elementos equivalentes afins

Pode estabelecer-se uma relação de equivalência entre elementos finitos semelhantes, que diferem apenas por uma transformação afim. Esta noção é importante porque permite transportar os cálculos para um elemento de referência.

Definição 5.3.4 *Dois elementos finitos $(E, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ e $(\hat{E}, \hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{N}})$ dizem-se equivalentes afins se existir uma aplicação afim*

$$\begin{aligned} F : \hat{E} &\longrightarrow E \\ \hat{x} &\longmapsto A\hat{x} + b \end{aligned}$$

(em que A é uma matriz invertível e b um vector qualquer) tal que:

i) $F(\hat{E}) = E$,

ou seja, F transforma o elemento \hat{E} em E , tratando-se de uma correspondência geométrica.

ii) $\hat{\mathcal{P}} = \mathcal{P}(F)$, i.e. $\forall \phi \in \mathcal{P}, \exists \hat{\phi} \in \hat{\mathcal{P}} : \phi \circ F = \hat{\phi}$,

ou seja, as funções de forma de E são as mesmas que as de \hat{E} , em pontos correspondentes, já que $\phi(F(\hat{x})) = \hat{\phi}(\hat{x})$.

iii) $\hat{\mathcal{N}}(\mathcal{P}(F)) = \mathcal{N}(\mathcal{P})$, i.e. $\forall \nu \in \mathcal{N}, \exists \hat{\nu} \in \hat{\mathcal{N}} : \hat{\nu}(\phi \circ F) = \nu(\phi), \forall \phi \in \mathcal{P}$,

ou seja, as variáveis nodais ν_i verificam, por exemplo, no caso de elementos de Lagrange:

$$\hat{\nu}_i(\phi \circ F) = \phi(F(\hat{x}_i)) = \phi(x_i) = \nu_i(\phi),$$

estabelecendo-se uma relação entre os x_i (nós de interpolação em E) e os \hat{x}_i (nós de interpolação em \hat{E}) através de $\hat{x}_i = F(x_i)$.

Observações:

i) Esta relação entre os elementos é uma relação de equivalência. Note-se que como a transformação é invertível, temos $\hat{\mathcal{P}}(F^{-1}) = \mathcal{P}$, e por isso temos também $\hat{\mathcal{N}}(\hat{\mathcal{P}}) = \mathcal{N}(\hat{\mathcal{P}}(F^{-1}))$, substituindo em iii).

ii) Se a propriedade de unissolvência for verificada para um elemento \hat{E} então ela também será verificada nos elementos equivalentes afins E . Isto simplifica o processo de verificar a unissolvência, transportando o problema para um elemento de referência onde seja mais simples a verificação.

iii) É sempre possível escolher nós apropriados de tal forma que os elementos de Lagrange de um certo grau sejam equivalentes.

iv) De notar que, partindo do triângulo de referência \hat{E} definido por $\{(0,0), (0,1), (1,0)\}$, a construção de F é bastante fácil numa triangulação. Com efeito, basta tomar um ponto do triângulo, digamos \mathbf{x}_1 , e nesse caso A é a matriz que tem como linhas $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1$ sendo

b o vector \mathbf{x}_1 . Desta forma ao ponto $(1, 0)$ do triângulo de referência corresponde \mathbf{x}_2 e ao ponto $(0, 1)$ corresponderá \mathbf{x}_3 , obviamente ao ponto $(0, 0)$ corresponderá \mathbf{x}_1 .

v) Note-se que para elementos finitos que sejam *quadriláteros quaisquer não é possível* estabelecer uma transformação linear que transforme um no outro, basta ver como exemplo, o quadrado de referência $\hat{E} = [0, 1]^2$ que não é possível transformar no quadrilátero de vértices $\{(0, 0), (0, 1), (2, 2), (1, 0)\}$. O problema resulta de haver 8 equações (4 pontos vezes 2 coordenadas) para 6 incógnitas (4 coeficientes da matriz A e 2 para o vector b). Com efeito, o *quadrado* apenas será transformado em *paralelogramos*, o que é fácil de compreender já que a ‘linearidade’ da transformação faz com que rectas paralelas continuem paralelas¹.

5.4 Interpolação Local e Global

5.4.1 Interpolação local

Consideremos um elemento finito $(E, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ como definido no parágrafo anterior. Definimos o operador de interpolação local Π_E como sendo a aplicação

$$\Pi_E : w \mapsto \sum_{i=1}^m \nu_i(w) \phi_i,$$

em que $\{\phi_1, \dots, \phi_m\}$ é a base dual de $\{\nu_1, \dots, \nu_m\}$, tendo-se assim

$$\nu_i(\phi_j) = \delta_{ij}.$$

Esta condição significa, no caso de elementos de Lagrange, que

$$\phi_j(\mathbf{x}_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j \\ 1 & \text{se } i = j \end{cases}$$

A regularidade exigida a w depende do tipo de elemento finito que se considera. Assim, para elementos finitos de Lagrange, exige-se apenas que a função esteja definida nos pontos de interpolação definidos pelo elemento. Já no caso de elementos de Hermite é exigido pelo menos que a função seja diferenciável, e no caso dos elementos de Argyris que seja bidiferenciável.

Proposição 5.4.1 *O operador Π_E é uma projecção, pois é linear e idempotente (i.e. $\Pi_E(\Pi_E w) = \Pi_E w$).*

Demonstração: A idempotência resulta da linearidade de ν , pois como

$$\Pi_E \left(\sum_{i=1}^m \nu_i(w) \phi_i \right) = \sum_{j=1}^m \nu_j \left(\sum_{i=1}^m \nu_i(w) \phi_i \right) \phi_j,$$

temos

$$\nu_j \left(\sum_{i=1}^m \nu_i(w) \phi_i \right) = \sum_{i=1}^m \nu_i(w) \nu_j(\phi_i) = \sum_{i=1}^m \nu_i(w) \delta_{ij} = \nu_j(w). \square$$

¹Através de uma transformação do tipo $F(x, y) = (a_0 + a_1x + a_2y + a_3xy, b_0 + b_1x + b_2y + b_3xy)$ já teremos 8 equações para 8 incógnitas e o problema pode ser contornado... mas a aplicação deixa de ser afim, perdendo-se as propriedades da ‘linearidade’ da transformação!

Interpolação nos Elementos de Lagrange Lineares

No caso mais simples, de *elementos de Lagrange lineares*, temos

$$\Pi_E w = \nu_1(w)\phi_1 + \nu_2(w)\phi_2 + \nu_3(w)\phi_3$$

e portanto

$$(\Pi_E w)(x) = w(\mathbf{x}_1)\phi_1(x) + w(\mathbf{x}_2)\phi_2(x) + w(\mathbf{x}_3)\phi_3(x).$$

em que $\phi_j(\mathbf{x}_i) = \delta_{ij}$.

Esta possibilidade de escrever qualquer função num triângulo através destas funções base lineares ϕ_j designa-as como *coordenadas baricêntricas*, já que se considerarmos $w_1(x, y) = x$, $w_2(x, y) = y$, funções que definem a identidade, ficamos com

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1\phi_1(\mathbf{x}) + \mathbf{x}_2\phi_2(\mathbf{x}) + \mathbf{x}_3\phi_3(\mathbf{x}),$$

em que

$$\phi_1(\mathbf{x}) = \frac{\text{area}\{\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}\}}{\text{area}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}}, \quad \phi_2(\mathbf{x}) = \frac{\text{area}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}\}}{\text{area}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}}, \quad \phi_3(\mathbf{x}) = \frac{\text{area}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}\}}{\text{area}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}},$$

usando a notação $\text{area}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$ para designar a área do triângulo formado pelos pontos $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$.

No caso de considerarmos o triângulo de referência $\hat{E} = \{(0, 0), (1, 0), (0, 1)\}$, temos

$$\phi_1(x, y) = 1 - x - y, \quad \phi_2(x, y) = 1 - y, \quad \phi_3(x, y) = 1 - x.$$

5.4.2 Interpolação global

Para além da relação de equivalência entre os elementos finitos, pode também estabelecer-se uma relação de equivalência ao nível da interpolação, para variáveis nodais diferentes, desde que dêem origem ao mesmo operador de interpolação.

Definição 5.4.1 *Os elementos finitos $(E, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ e $(\hat{E}, \hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{N}})$ dizem-se interpolacionalmente equivalentes se para qualquer $v \in \mathcal{P}$. existir $\hat{v} \in \hat{\mathcal{P}}$ tal que*

$$\widehat{\Pi}_E v = \Pi_{\hat{E}} \hat{v}.$$

Vimos que em cada elemento finito E a função interpoladora é dada por

$$\Pi_E u(x) = \sum_{i=1}^{m_E} \nu_i^E(u)\phi_i^E,$$

de tal forma que $\{\nu_1^E, \dots, \nu_{m_E}^E\}$ é base dual de $\{\phi_1^E, \dots, \phi_{m_E}^E\}$, ou seja, $\nu_i^E(\phi_j^E) = \delta_{ij}$.

No caso dos elementos finitos de Lagrange, temos $\nu_i^E(u) = u(x_i^E)$, em que x_i^E é o nó i do elemento E , e podemos escrever

$$\Pi_E u(x) = \sum_{i=1}^{m_E} u(x_i^E)\phi_i^E.$$

Definimos uma função interpoladora global Π_{Ω_h} , definida sobre a triangulação Ω_h de forma a que

$$(\Pi_{\Omega_h} u)|_E = \Pi_E u.$$

Definição 5.4.2 Dizemos que uma triangulação \mathcal{T}_h é de classe C^m se a função interpoladora global for sempre de classe C^m .

No caso dos elementos de Lagrange ou Hermite que vimos, apenas podemos garantir que a função interpoladora global seja de classe C^0 , no caso de elementos de Argyris será de classe C^1 .

5.4.3 Construção da interpolação global

Para definir a interpolação local consideramos funções de forma ϕ_k^E definidas no elemento E , mas para efeitos da interpolação global é conveniente definir funções base que são construídas usando funções de forma de um ou mais elementos.

Funções base

Reparamos que podemos definir funções base no domínio inteiro, de forma a que os nós comuns não apareçam repetidos. No caso dos elementos de Lagrange a duas dimensões, há que distinguir 3 situações²:

- (i) um nó interior pertence apenas a um triângulo;
- (ii) um nó colocado sobre um dos lados do triângulo será comum a dois triângulos (o nó tem dois *triângulos adjacentes*);
- (iii) um nó que coincide com o vértice do triângulo pode ser comum a vários triângulos (o nó tem vários *triângulos adjacentes*).

À exceção do primeiro caso, em que a função base coincide com a função de forma (sendo zero nos restantes elementos), nas restantes situações as funções base são construídas com funções de forma de dois (segundo caso), ou mais elementos (terceiro caso). É ainda interessante observar que no caso bidimensional, numa triangulação regular, o número de triângulos adjacentes a um vértice interno será em média 6 (por exemplo, numa triangulação para um quadrado é habitual considerar vértices alternadamente com 4 e 8 triângulos adjacentes).

Considerando um nó x_i comum a vários elementos $E_{i_1}, \dots, E_{i_{M_i}}$, definimos a função base ψ_i :

$$\psi_i(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \notin E_{i_k} \text{ (para } k = 1, \dots, M_i) \\ \phi_{i_k}(x) & \text{se } x \in E_{i_k} \text{ (para } k = 1, \dots, M_i) \end{cases}$$

notando que o número M_i (de triângulos adjacentes a um nó i) depende do nó que se considera. No elemento E_{i_k} haverá várias funções de forma, designamos ϕ_{i_k} a que verifica $\phi_{i_k}(x_i) = 1$. A escolha da função forma certa envolve uma questão entre numeração local e global, que abordaremos mais à frente.

Assim podemos considerar um espaço discreto, de dimensão finita, V_h , que consiste no espaço gerado pelas funções base ψ_i , definidas em todos os nós da triangulação x_1, \dots, x_N , (inclui os nós internos a cada elemento), de tal forma que

$$\psi \in V_h \Leftrightarrow \psi = \sum_{i=1}^N \alpha_i \psi_i.$$

²Em 3 dimensões haverá 4 situações, adicionando a situação de pertencer a uma aresta, onde um nó também pode pertencer a vários tetraedros.

Podemos distinguir entre os espaços $V_{h,0}$ e V_h . No espaço $V_{h,0}$ iremos considerar apenas os nós interiores, verificando-se que estas funções serão nulas sobre os nós da fronteira, daí a designação $V_{h,0}$. Ao contrário, o espaço V_h irá conter todos os nós.

- Uma condição importante a verificar é que o espaço discreto V_h deve aproximar densamente o espaço contínuo V . Para esse efeito, no próximo capítulo iremos demonstrar estimativas de erro de interpolação que garantem que funções em espaços de Sobolev podem ser aproximadas por funções interpoladoras definidas nestes espaços discretos de elementos finitos.

Exemplos de funções base

Considerando elementos definidos sobre triângulos rectângulos, é possível obter uma expressão para funções base para elementos de Lagrange de grau m , em duas dimensões. Definimos $d(x) = |x_1 - x_2|$ e a função

$$\xi(x) = \begin{cases} \|x\|_\infty, & \text{se } x_1 x_2 > 0, \\ |x_1 - x_2|, & \text{se } x_1 x_2 \leq 0 \end{cases}$$

Uma função base centrada na origem e com suporte num hexaedro

$$H = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x\|_\infty \leq 1, |x_1 - x_2| \leq 1\}$$

é dada para elementos de Lagrange de grau m pela expressão

$$\psi_0(x) = \prod_{k=1}^m \left(1 - \frac{m}{k} \xi(x)\right),$$

para $x \in H$, sendo zero caso contrário. Na Fig.5.4.1 apresentamos alguns exemplos.

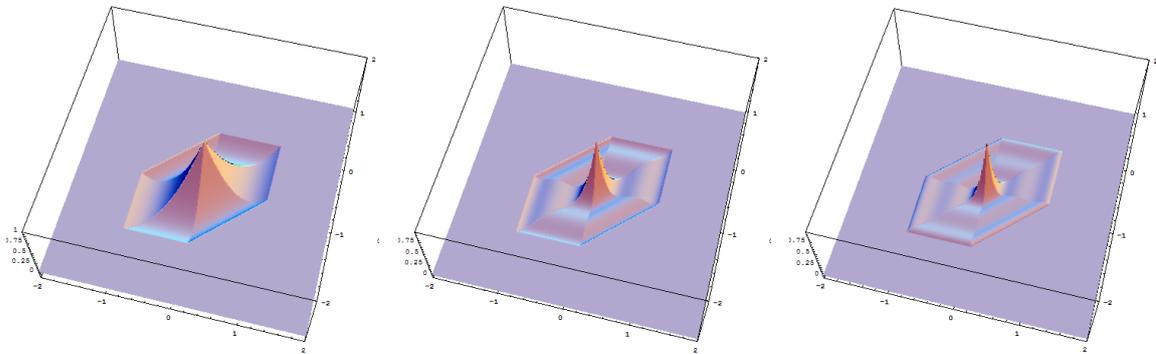


Figura 5.4.1: Função base ψ_0 definida em H para elementos de Lagrange de grau 2, 4 e 5 (respectivamente).

Na Fig.5.4.2 apresentamos ainda outras funções base usando como suporte H com elementos de Lagrange cúbicos. Estas funções base ilustram os 3 casos referidos para construção de funções base. Neste exemplo, haverá 1 função base central com 6 triângulos adjacentes (figura à esquerda, caso (iii)), 12 funções base definidas sobre lados (exemplo na figura central, caso (ii)), e 6 funções

base definidas sobre os nós internos (exemplo na figura à direita, caso (i)).

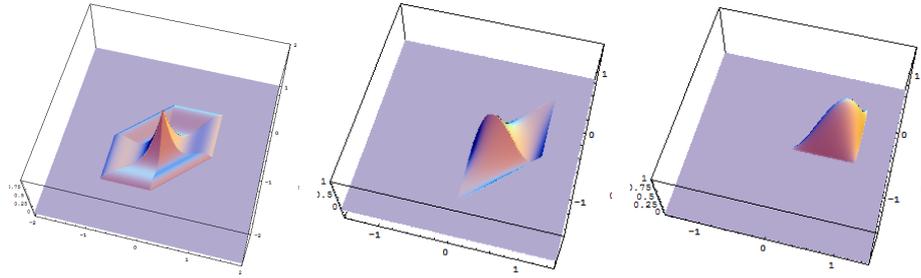


Figura 5.4.2: Os três tipos de funções base definidas em H para elementos de Lagrange de grau 3: À esquerda, a função base ψ_0 definida por funções de forma em 6 triângulos adjacentes. Ao centro, uma função base definida para um nó com dois triângulos adjacentes, usando duas funções de forma. À direita, uma função base interna a um triângulo, definida apenas por uma função de forma.

Exemplo de interpolação global

Na Fig.5.4.3 apresentamos como exemplo de interpolação global, a aproximação obtida pela interpolação com elementos de Lagrange lineares para uma triangulação definida num domínio parametrizado pela curva $r(t)(\cos(t), \sin(t))$ em que $r(t) = 2 + \frac{1}{2} \sin(2t)$. Considerámos como função a aproximar $f(x, y) = \cos(x + \exp(\frac{y}{2}))$.

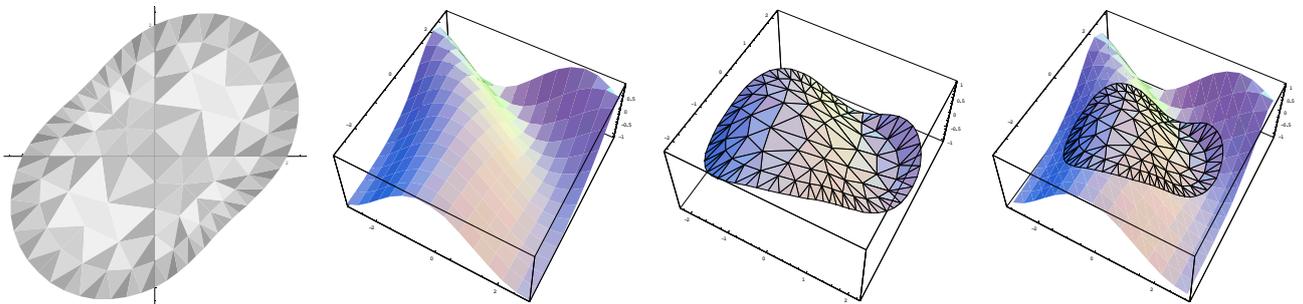


Figura 5.4.3: Os quatro gráficos representam: (i) a triangulação do domínio, (ii) a função a aproximar, (iii) a aproximação da função no domínio usando elementos de Lagrange lineares, (iv) comparação entre os valores exactos e os valores da reconstrução através da sobreposição das figuras (ii) e (iii).

Capítulo 6

Estimativas de Erro e Integração

Neste capítulo iremos demonstrar que a interpolação através de elementos finitos permite aproximar funções em espaços de Sobolev, garantindo a densidade do espaço discreto de funções discreto V_h no espaço original de funções V , justificando assim a sua utilização na formulação variacional. Essa aproximação é mesmo obtida com estimativas do erro, que são depois utilizadas para estimativas de erro para a solução no método de Galerkin, através do Lema de Céa. Finalmente, como nem sempre é possível um cálculo exacto dos integrais que aparecem na formulação variacional, consideramos ainda uma secção em que abordamos algumas regras de quadratura, e a influência que o erro poderá ter na solução.

6.1 Estimativas para o erro de interpolação

Nesta secção apresentaremos estimativas do erro de interpolação em espaços de Sobolev. Os resultados são apresentados para os espaços $H^m(\Omega) = W^{m,2}(\Omega)$, mas podem ser generalizados para os espaços $W^{m,p}(\Omega)$.

6.1.1 Espaço quociente por polinómios

Seja Ω um aberto limitado de \mathbb{R}^d , que na prática irá corresponder à parte interior de um elemento E , ou seja $E = \bar{\Omega}$. Consideremos o espaço \mathbf{P}_m de polinómios de grau menor ou igual a m , e a relação de equivalência,

$$v \sim u \Leftrightarrow v - u \in \mathbf{P}_m.$$

Esta relação de equivalência permite trabalhar com o espaço quociente $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ em que os seus elementos são as classes de equivalência definidas pela relação precedente. Assim, $\dot{v} \in H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ é um conjunto definido por um representante $v \in H^{m+1}(\Omega)$ e pelos elementos

$$\dot{v} = \{v + q : q \in \mathbf{P}_m\},$$

ou seja, as funções de $\dot{v} \in H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ são conjuntos de funções de $H^{m+1}(\Omega)$ somadas com polinómios de \mathbf{P}_m . É óbvio que qualquer elemento de \dot{v} pode ser representante da sua classe. Convém notar que o elemento nulo em $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ é

$$\dot{0} = \{q : q \in \mathbf{P}_m\}.$$

No que se segue não iremos fazer distinção entre \dot{v} e v , assumindo que quando nos referimos a v em $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ estamos a referir-nos à sua classe de equivalência \dot{v} .

No espaço $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ vamos considerar a norma

$$\|v\|_{m+1,\Omega}^* = \inf_{q \in \mathbf{P}_m} \|v - q\|_{m+1,\Omega}. \quad (6.1)$$

Note que $\|v\|_{m+1,\Omega}^* \leq \|v\|_{m+1,\Omega}$.

Exercício: Mostre que (6.1) é uma norma para a qual $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ é um espaço de Banach.

De forma semelhante podemos considerar a seminorma

$$|v|_{m+1,\Omega}^* = \inf_{q \in \mathbf{P}_m} |v - q|_{m+1,\Omega},$$

e como as derivadas de ordem $m + 1$ de polinómios de grau m são nulas, verifica-se

$$|v|_{m+1,\Omega}^* = |v|_{m+1,\Omega}.$$

É assim claro que

$$|v|_{m+1,\Omega} = |v|_{m+1,\Omega}^* \leq \|v\|_{m+1,\Omega}^*,$$

e o próximo lema mostra a existência de uma constante tal que a ‘recíproca’ se verifique. Isto permite munir o espaço $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ de uma outra norma (a seminorma) que é equivalente à norma introduzida em (6.1).

Lema 6.1.1 (Bramble-Hilbert): *Existe uma constante positiva C_Ω :*

$$\|v\|_{m+1,\Omega}^* \leq C_\Omega |v|_{m+1,\Omega}^*, \text{ para qualquer } v \in H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$$

Demonstração: Ver p.ex. [13]. Este resultado baseia-se na injeção compacta de $H^{m+1}(\Omega)$ em $H^m(\Omega)$. \square

Assim, como $|v|_{m+1,\Omega} = |v|_{m+1,\Omega}^*$, em $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ temos

$$|v|_{m+1,\Omega} \leq \|v\|_{m+1,\Omega}^* \leq C_\Omega |v|_{m+1,\Omega},$$

ou seja, a norma $\|\cdot\|_{m+1,\Omega}^*$ é equivalente à seminorma $|\cdot|_{m+1,\Omega}$ em $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$, notando que $|v|_{m+1,\Omega} = 0$ implica $\|v\|_{m+1,\Omega}^* = 0$, e a seminorma é com efeito uma norma.

Teorema 6.1.1 *Consideremos¹ $s \leq m + 1$ e seja² $\Pi \in \mathcal{L}(H^{m+1}(\Omega), H^s(\Omega))$ uma projecção para os polinómios \mathbf{P}_m , ou seja,*

$$\Pi q = q, \quad \forall q \in \mathbf{P}_m$$

Então existe uma constante $C_{\Omega,\Pi} > 0$:

$$\|v - \Pi v\|_{s,\Omega} \leq C_{\Omega,\Pi} |v|_{m+1,\Omega}, \quad \forall v \in H^{m+1}(\Omega) \quad (6.2)$$

¹Logo verifica-se a inclusão contínua $H^{m+1}(\Omega) \subseteq H^s(\Omega)$, tendo-se assim $\|w\|_{s,\Omega} \leq C_\Omega \|w\|_{m+1,\Omega}$.

²Isto é, Π é uma aplicação linear contínua $\Pi : H^{m+1}(\Omega) \rightarrow H^s(\Omega)$. Normalmente, trata-se de associar a cada função em H^{m+1} o polinómio interpolador no elemento finito. Quando $\bar{\Omega}$ é apenas um elemento finito E , esse polinómio tem toda a regularidade, mas quando há a junção de todos os polinómios, essa regularidade perde-se (e habitualmente apenas fica a continuidade) pelo que faz todo o sentido obter desde já estimativas no espaço H^s .

Demonstração:

Dado $q \in \mathbf{P}_m$, como $(\mathbf{I} - \Pi)q = 0$, temos $v - \Pi v = (\mathbf{I} - \Pi)(v - q)$. Assim, usando a norma em $\mathcal{L}(H^{m+1}(\Omega), H^s(\Omega))$,

$$\|\mathbf{I} - \Pi\|_{\mathcal{L}(H^{m+1}(\Omega), H^s(\Omega))} = \sup_{w \neq 0} \frac{\|(I - \Pi)w\|_{s, \Omega}}{\|w\|_{m+1, \Omega}}$$

$$\|v - \Pi v\|_{s, \Omega} = \|(\mathbf{I} - \Pi)(v - q)\|_{s, \Omega} \leq \|(\mathbf{I} - \Pi)\|_{\mathcal{L}(.,.)} \|v - q\|_{m+1, \Omega} \leq C_{\Pi} \|v - q\|_{m+1, \Omega}$$

em que a última desigualdade resulta de considerar $C_{\Pi} = \|(\mathbf{I} - \Pi)\|_{\mathcal{L}(.,.)}$, constante que depende de Π e Ω .

Como a desigualdade é válida para qualquer $q \in \mathbf{P}_m$, em particular é válida o ínfimo, logo

$$\|v - \Pi v\|_{s, \Omega} \leq C_{\Pi} \inf_{q \in \mathbf{P}_m} \|v - q\|_{m+1, \Omega} = C_{\Pi} \|v\|_{m+1, \Omega}^*$$

Aplicando o lema de Bramble-Hilbert, obtemos

$$\|v - \Pi v\|_{s, \Omega} \leq C_{\Omega} C_{\Pi} |v|_{m+1, \Omega}^* = C_{\Omega} C_{\Pi} |v|_{m+1, \Omega},$$

pois $|v|_{m+1, \Omega}^* = |v|_{m+1, \Omega}$. \square

Para estabelecer estimativas de erro, temos que ter em conta o parâmetro de degenerescência do elemento finito,

$$\chi_E = \frac{h_E}{\rho_E},$$

que como já vimos traduz a relação entre h_E , o diâmetro do elemento, e ρ_E o raio da maior bola incluída no elemento. Convém que este valor não seja muito superior a $2\sqrt{3}$, no caso de triangulações, já que é o valor mínimo, que se obtém para o triângulo equilátero.

Iremos usar o seguinte lema

Lema 6.1.2 *Sejam E e \hat{E} elementos finitos equivalentes afins, em que $E = F(\hat{E})$, com $F = A\hat{x} + b$. Temos*

$$\|A\| \leq \frac{h_E}{\rho_{\hat{E}}}, \quad |\det(A)| = \frac{|E|}{|\hat{E}|}, \quad (6.3)$$

em que $|E|$ é a medida (área ou volume) de E .

Demonstração: Basta ver que

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \max_{\|x\|=\rho} \left\| A \frac{x}{\rho} \right\| = \frac{1}{\rho} \max_{\|x\|=\rho} \|Ax\|.$$

Portanto, como $h_E = \max_{x, y \in E} \|x - y\| = \max_{\hat{x}, \hat{y} \in \hat{E}} \|A\hat{x} + b - A\hat{y} - b\| = \max_{\hat{x}, \hat{y} \in \hat{E}} \|A(\hat{x} - \hat{y})\|$.

Considerando $\hat{x}, \hat{y} \in \hat{E}$, tais que $\|\hat{x} - \hat{y}\| = \rho_{\hat{E}}$, temos

$$\|A\| = \frac{1}{\rho_{\hat{E}}} \max_{\substack{\|\hat{x}-\hat{y}\|=\rho_{\hat{E}} \\ \hat{x}, \hat{y} \in \hat{E}}} \|A(\hat{x} - \hat{y})\| \leq \frac{1}{\rho_{\hat{E}}} \max_{\hat{x}, \hat{y} \in \hat{E}} \|A(\hat{x} - \hat{y})\| = \frac{h_E}{\rho_{\hat{E}}}.$$

Finalmente,

$$|E| = \int_E 1 \, dx = \int_{\hat{E}} |\det(A)| \, d\hat{x} = |\det(A)| |\hat{E}|. \quad \square$$

Observação: Deste resultado, no caso bidimensional, conclui-se também que $|\det(A)| \leq \frac{h_E^2}{\pi \rho_{\hat{E}}^2}$, pois $|E| \leq h_E^2$ (já que E se encontra dentro de um quadrado com lados h_E) e porque $|\hat{E}| \geq \pi \rho_{\hat{E}}^2$ (pois \hat{E} contém uma bola com raio $\rho_{\hat{E}}$). Para outras dimensões podem estabelecer-se resultados semelhantes usando $\sigma_d = |B(0, 1)|$, definido no primeiro capítulo.

Lema 6.1.3 *Sejam E e \hat{E} elementos finitos equivalentes afins, em que $E = F(\hat{E})$, com $F(\hat{x}) = A\hat{x} + b$. Temos*

$$|\hat{v}|_{r, \hat{E}} \leq C \|A\|^r |\det(A)|^{-1/2} |v|_{r, E} \quad (6.4)$$

em que $\hat{v} = v \circ F$, para $v \in H^r(E)$ qualquer. Pelo lema anterior, conclui-se que

$$|\hat{v}|_{r, \hat{E}} \leq C \left(\frac{h_E}{\rho_{\hat{E}}}\right)^r |\det(A)|^{-1/2} |v|_{r, E}. \quad (6.5)$$

De forma análoga obtém-se

$$|v|_{r, E} \leq C \left(\frac{h_{\hat{E}}}{\rho_E}\right)^r |\det(A)|^{1/2} |\hat{v}|_{r, \hat{E}}. \quad (6.6)$$

Demonstração:

Começamos por supor que $v \in C_c^\infty(E)$. A desigualdade resulta de relacionar os integrais

$$\int_{\hat{E}} |\partial^\alpha \hat{v}|^2 \quad \text{com} \quad \int_E |\partial^\alpha v|^2,$$

em que α é um multi-índice em \mathbf{N}^d . Sendo $|\alpha| = r$, $D^r v(x)(h_1, \dots, h_s)$ denota a derivada de Fréchet, enquanto forma multilinear,

$$\partial^\alpha v(x) = D^{|\alpha|} v(x) (\underbrace{e_1, \dots, e_1}_{\alpha_1 \text{ vezes}}, \dots, \underbrace{e_n, \dots, e_n}_{\alpha_n \text{ vezes}}).$$

e temos $D^r \hat{v}(\hat{x})(h_1, \dots, h_r) = D^r v(x)(Ah_1, \dots, Ah_r)$, pelo que

$$\|D^r \hat{v}(\hat{x})\| \leq \|A\|^r \|D^r v(x)\|,$$

onde $\|D^k v(x)\| = \sup_{|h_i|=1} |D^k v(x)(h_1, \dots, h_k)|$.

Usando as desigualdades (com $c_1, c_2 > 0$),

$$c_1^2 |v|_{r, E}^2 \leq \int_E \|D^r v(x)\|^2 dx \leq c_2^2 |v|_{r, E}^2,$$

que nos indicam a equivalência entre a seminorma habitual e aquela que se obtém pela derivada de Fréchet, obtemos

$$|\hat{v}|_{r,\hat{E}}^2 \leq \frac{1}{c_1^2} \int_{\hat{E}} \|D^r \hat{v}(\hat{x})\|^2 d\hat{x} \leq \frac{1}{c_1^2} \int_{\hat{E}} \|A\|^{2r} \|(D^r v)(F(\hat{x}))\|^2 d\hat{x} = \frac{1}{c_1^2} \int_E \|A\|^{2r} \|D^r v(x)\|^2 |\det(A)|^{-1} dx,$$

logo, para $v \in C_c^\infty(E)$,

$$|\hat{v}|_{r,\hat{E}}^2 \leq \frac{1}{c_1^2} \|A\|^{2r} |\det(A)|^{-1} \int_E \|D^r v(x)\|^2 dx \leq \frac{c_2^2}{c_1^2} \|A\|^{2r} |\det(A)|^{-1} |v|_{r,E}^2.$$

A conclusão resulta da densidade de $C_c^\infty(E)$ em $H^1(E)$ que é válida desde que ∂E seja uma fronteira seccionalmente C^1 , e recursivamente a desigualdade pode ser obtida para qualquer função em $H^r(E)$. \square

Nota: Assumiremos que se as variáveis nodais $\hat{\mathcal{N}}$ incluírem condições sobre derivadas³ de ordem r então $H^{m+1}(\hat{E}) \subseteq C^r(\hat{E})$.

Teorema 6.1.2 *Consideremos ainda $s \leq m+1$. Seja $(E, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ um elemento finito equivalente afim de um elemento de referência $(\hat{E}, \hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{N}})$ de forma a que sejam interpolacionalmente equivalentes e que $\mathbf{P}_m \subseteq \hat{\mathcal{P}} \subset H^s(\hat{E})$, ou seja os polinómios de grau m pertencem às funções de forma do elemento de referência. Então, para qualquer $v \in H^{m+1}(E)$,*

$$\|v - \Pi_E v\|_{s,E} \leq C_{\hat{E}} \frac{h_E^{m+1}}{\rho_E^s} |v|_{m+1,E}. \quad (6.7)$$

Demonstração:

Pelo lema anterior aplicado a $v - \Pi_E v$, temos

$$\|v - \Pi_E v\|_{s,E} \leq C \left(\frac{h_{\hat{E}}}{\rho_E}\right)^s |\det(A)|^{1/2} \|\hat{v} - \Pi_{\hat{E}} \hat{v}\|_{s,\hat{E}},$$

já que sendo interpolacionalmente equivalentes $v - \Pi_E v = \widehat{v} - \widehat{\Pi_E v} = \hat{v} - \Pi_{\hat{E}} \hat{v}$.

Por outro lado, vimos que

$$\|\hat{v} - \Pi_{\hat{E}} \hat{v}\|_{s,\hat{E}} \leq C |\hat{v}|_{m+1,\hat{E}},$$

logo

$$\|v - \Pi_E v\|_{s,E} \leq C \left(\frac{h_{\hat{E}}}{\rho_E}\right)^s |\det(A)|^{1/2} |\hat{v}|_{m+1,\hat{E}}.$$

Ainda pelo lema, $|\hat{v}|_{m+1,\hat{E}} \leq C \left(\frac{h_E}{\rho_E}\right)^{m+1} |\det(A)|^{-1/2} |v|_{m+1,E}$ e assim obtemos

³Pelas injecções de Sobolev, $m+1-d/2 > r$.

Se não se incluírem derivadas (elementos de Lagrange) temos $r=0$ e portanto basta exigir que $m+1-d/2 > 0$ (ver apêndice). No caso bidimensional isto significa $m > 0$, o que exclui apenas as constantes. No caso de elementos de Hermite, temos pelo menos $r=1$, o que dá $m+1-d/2 > 1$, ou seja $m > d/2$. No caso bidimensional isto significa que $m > 1$, o que não constitui qualquer problema, pois os elementos de Hermite considerados envolviam obviamente polinómios de grau superior a 1.

$$\|v - \Pi_E v\|_{s,E} \leq C \left(\frac{h_{\hat{E}}}{\rho_E}\right)^s \left(\frac{h_E}{\rho_{\hat{E}}}\right)^{m+1} |v|_{m+1,E}.$$

Separando o factor $\frac{h_{\hat{E}}^s}{\rho_{\hat{E}}^{m+1}}$ que irá pertencer à constante $C_{\hat{E}}$ e o factor $\frac{h_E^{m+1}}{\rho_E^s}$, obtemos o resultado. \square

Observações:

i) A parte $\frac{h_{\hat{E}}^s}{\rho_{\hat{E}}^{m+1}}$ é encarada como constante porque bastará fixar um elemento de referência e trabalhar a partir dele.

ii) Quando consideramos espaços de Sobolev mais gerais, do tipo $W^{m,p}$, com $p \neq 2$, a condição $s \leq m + 1$ deve ser substituída por uma que permita a injeção contínua, (ver teorema de Rellich-Kondrachov, no apêndice).

Corolário 6.1.1 *Nas condições do teorema anterior, se exigirmos regularidade na triangulação, de forma a que $\chi_E < \chi < \infty$, temos a estimativa*

$$\|v - \Pi_E v\|_{s,E} \leq C \chi^s h_E^{m+1-s} |v|_{m+1,E}. \quad (6.8)$$

O que significa que se exigirmos $v \in H^{m+1}(E)$, obtemos um erro de interpolação da ordem $O(h^{m+1-s})$.

O corolário põe em evidência que os elementos não devem degenerar para que se obtenham as estimativas de erro apresentadas. É claro que um valor de χ mais elevado poderá levar a uma pior aproximação, já que a constante será mais elevada.

6.1.2 Estimativas Globais

Através das estimativas que deduzimos para a função interpoladora em cada elemento finito, passamos para o caso global em que iremos considerar uma triangulação regular Ω_h de um domínio Ω , e portanto não há degenerescência dos elementos.

Teorema 6.1.3 *Suponhamos que temos uma triangulação regular Ω_h de um domínio Ω e que $\mathbf{P}_m \subseteq \hat{\mathcal{P}} \subset H^r(\hat{E})$. Então existe $C_\chi > 0$ (independente de h) tal que*

$$\left(\sum_{E \in \Omega_h} \|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{s,E}^2 \right)^{1/2} \leq C_\chi h^{m+1-s} |v|_{m+1,\Omega}$$

onde $0 \leq s \leq \min\{m + 1, r\}$.

Demonstração:

Considerando o corolário do parágrafo anterior temos

$$\|v - \Pi_E v\|_{s,E} \leq C \chi^s h_E^{m+1-s} |v|_{m+1,E},$$

e trata-se apenas de fazer a soma, atendendo a que $(\Pi_{\Omega_h} u)|_E = \Pi_E u$. A constante é independente de h pois inclui apenas constantes relacionadas com o elemento de referência e com o parâmetro de degenerescência. \square

Corolário 6.1.2 *Consideremos uma triangulação regular Ω_h e seja $\mathbf{P}_m \subseteq \widehat{\mathcal{P}} \subset H^s(\widehat{E})$ com $0 \leq s \leq m + 1$.*

Se $v \in H^{m+1}(\Omega)$, $\Pi_{\Omega_h} \in \mathcal{L}(H^{m+1}(\Omega), H^s(\Omega))$, podemos garantir que

$$\|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{s,\Omega} \leq C h^{m+1-s} |v|_{m+1,\Omega}. \quad (6.9)$$

Portanto, se a interpolação na triangulação for contínua, temos $\Pi_{\Omega_h} v \in H^1(\Omega)$ e

$$\begin{aligned} \|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{0,\Omega} &\leq C h^{m+1} |v|_{m+1,\Omega}, \\ \|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{1,\Omega} &\leq C h^m |v|_{m+1,\Omega}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Observação 1: Basta considerar $0 \leq s \leq m + 1$, já que a regularidade das funções de forma no interior do elemento fica incluída na exigência de regularidade para o interpolador global. $\Pi_{\Omega_h} v$ será apenas seccionalmente polinomial, assim, ao exigir $\Pi_{\Omega_h} v \in H^s(\Omega)$ estamos a impor condições sobre a colagem da interpolação nos vários elementos. Quando há apenas continuidade nessa colagem, garantimos que a função e as derivadas sejam L^2 , mas já não podemos garantir que isso aconteça para as segundas derivadas, que podem incluir deltas de Dirac, já que as derivadas podem ser descontínuas. Ou seja, para uma triangulação C^0 podemos apenas obter esta estimativa se considerarmos $s = 0$ ou $s = 1$. Para considerarmos $s = 2$ seria necessário considerar triangulações C^1 , o que pode ser obtido através de elementos de Argyris, por exemplo.

Observação 2: Assumimos que $v \in H^{m+1}(\Omega)$, para que a estimativa faça sentido. Para assegurar isto, veremos no caso da resolução de equações que devem ser utilizados resultados de regularidade (ver apêndice).

No caso de uma triangulação com elementos de Lagrange lineares é claro que obtemos

$$\|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{1,\Omega} \leq C h |v|_{2,\Omega} \quad (6.11)$$

o que significa que o erro é da ordem $O(h)$ na norma H^1 , e se considerarmos a norma L^2 ,

$$\|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{0,\Omega} \leq C h^2 |v|_{2,\Omega} \quad (6.12)$$

já obtemos $O(h^2)$, assumindo que $v \in H^2(\Omega)$. Iremos ver que $H^2(\Omega)$ é a regularidade habitual da solução de um problema elíptico no caso de $f \in L^2(\Omega)$.

Exemplo

Consideremos o seguinte exemplo, em que temos o domínio $\Omega =]-\frac{\pi}{2}, 1[$ e a função a aproximar é

$$f(x) = \begin{cases} \cos(x), & \text{se } x \in [-\frac{\pi}{2}, 0[\\ 1 - x^2, & \text{se } x \in [0, 1]. \end{cases}$$

Notamos que esta função, que está representada na Fig.6.1.1, à esquerda (a cheio), é de classe C^1 , conforme se pode constatar no gráfico da sua derivada.(Fig.6.1.1, ao centro), há uma colagem dos valores em $x = 0$. Trata-se também de uma função de $H^2(\Omega)$, sendo imediato calcular

$$|f|_{2,\Omega} = \left(\int_{-\frac{\pi}{2}}^1 f''(x)^2 \right)^{1/2} = 2.6587.$$

Considerou-se a aproximação f_h por elementos de Lagrange lineares, que é representada no caso em que consideramos apenas 5 elementos na Fig.6.1.1, à esquerda (a tracejado). Aumentando o número de elementos (e consequentemente baixando o valor de h) obtemos a seguinte tabela:

h	$\ f - f_h\ _{L^2(\Omega)}$
0.514	0.05312
0.257	0.01327
0.1285	0.003308
0.0857	0.001467
0.0643	0.000824

Constata-se facilmente que a evolução do erro na norma L^2 é aproximada pela parábola $\|f - f_h\|_{L^2(\Omega)} \sim 0.2h^2$, confirmando a estimativa em $O(h^2)$ prevista pela teoria.

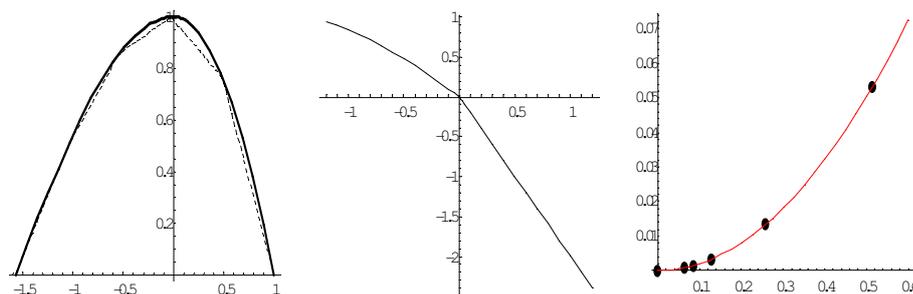


Figura 6.1.1. Aproximação de f por elementos de Lagrange lineares. À esquerda, comparação entre f e f_h . Ao centro, a derivada de f . À direita, gráfico do erro $\|f - f_h\|_{L^2(\Omega)}$ em função de h . Podemos facilmente observar que se trata de uma convergência quadrática.

- Num outro exemplo, consideramos

$$g(x) = \begin{cases} \cos(x), & \text{se } x \in [-\frac{\pi}{2}, 0[\\ 1 - x, & \text{se } x \in [0, 1]. \end{cases}$$

A função está representada em Fig.6.1.2, à esquerda (a cheio) e a sua aproximação g_h usando elementos de Lagrange lineares, com 4 elementos, é representada na mesma figura, a pontilhado. A diferença principal é que neste caso a derivada de g não é contínua no ponto zero, conforme se pode constatar no gráfico central de Fig.6.1.2, onde é visível o salto em zero. Consequentemente, a segunda derivada existirá apenas enquanto distribuição e o valor $|g|_{2,\Omega} = \|g''\|_{0,\Omega}$ não existe, pois $g \notin H^2(\Omega)$. Assim, a estimativa (6.12), em que se considerava $m = 1$, não tem lugar. Apenas podemos considerar a estimativa (6.10) usando $m = 0$, pois o valor $|g|_{1,\Omega} = \|g'\|_{0,\Omega}$ já existe.

Portanto, a teoria de interpolação apenas nos permite concluir que o erro $\|g - g_h\|_{L^2(\Omega)}$ é $O(h)$. Com efeito, fazendo testes semelhantes aos efectuados para f , para vários valores de h , podemos constatar experimentalmente que a evolução do erro em função de h deixa de ser quadrática e passa a ser linear. Com efeito, se desprezarmos o primeiro valor, em que a aproximação é ainda grosseira ($h \sim 0.5$), o gráfico do erro pode ser aproximado por uma recta, tendo-se $\|g - g_h\|_{L^2(\Omega)} \sim 0.03 h$.

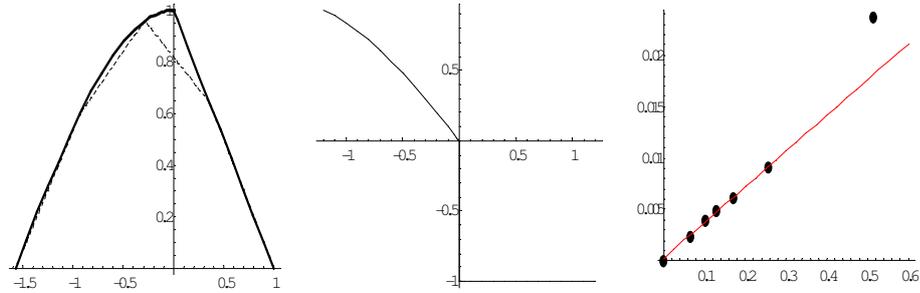


Figura 6.1.2. Gráficos semelhantes aos da figura anterior para g (figura da esquerda). O salto da primeira derivada (figura central) provoca que a convergência do método de Lagrange não seja quadrática, sendo apenas linear (na norma L^2), como se constata na figura da direita.

• Consideremos agora o exemplo de elementos de Hermite cúbicos, com a função $\gamma(x) = 1 + \cos(2x)$ no intervalo $\Omega =] -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$, representada em Fig.6.1.3, à esquerda. Como a função é analítica, não há qualquer problema com a aproximação. Com efeito, como usamos polinómios cúbicos, $m = 3$, e a ordem de convergência é 4, pois $|\gamma|_{4,\Omega} = \|\gamma^{(4)}\|_{0,\Omega}$ existe. A aproximação é excelente, mesmo considerando poucos elementos. Por exemplo, considerando 10 elementos, o erro é inferior a 0.0004, como se pode constatar na figura central de Fig.6.1.3. Finalmente, efectuando a variação do erro em função de h , podemos confirmar a ordem de convergência 4, tendo-se $\|\gamma - \gamma_h\|_{L^2(\Omega)} \sim 0.03 h^4$, como se pode constatar no gráfico log-log⁴ colocado Fig.6.1.3, à direita (linha tracejada). Nessa figura colocámos todos as linhas log-log que se obtêm para os 3 casos aqui retratados, e que representam a convergência linear de g_h para g (a preto), a convergência quadrática de f_h para f (a cinzento), e a convergência de ordem 4 de γ_h para γ (a

⁴Os gráficos log-log são obtidos por simples transformação

$$(h, e_h) \mapsto (\log h, \log e_h).$$

Como

$$e_h \sim Ch^p,$$

obtemos

$$\log e_h \sim \log C + p \log h,$$

o que traduz rectas de inclinação p . Quanto maior for a inclinação da recta, maior será a ordem de convergência p . A constante é imediatamente obtida pela exponencial do valor no qual a recta cruza o eixo das ordenadas.

tracejado).

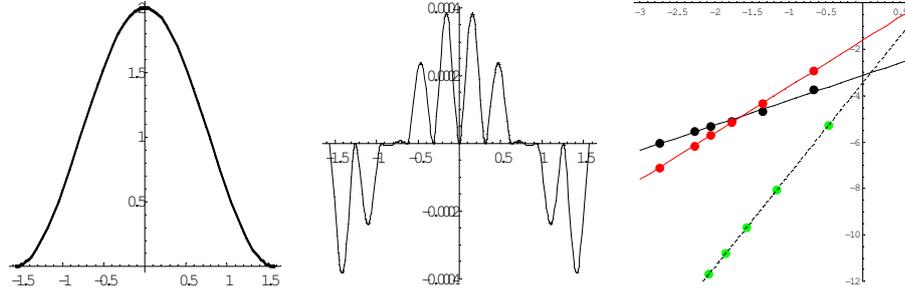


Figura 6.1.3. Gráfico da função γ (à esquerda) e do erro $\gamma - \gamma_h$ (para $h = \pi/10$, figura central). À direita, gráficos das linhas log-log que se obtêm para os 3 casos apresentados: a convergência linear no caso de g (a preto), a convergência quadrática no caso de f (a cinzento), e a convergência de ordem 4 no caso de γ (a tracejado).

Como é óbvio, se aplicássemos o método de Hermite cúbico para g continuaríamos a obter ordem de convergência linear, e para f obteríamos ordem de convergência quadrática. O problema volta a ser a regularidade. Como as funções $g \in H^1(\Omega)$, $f \in H^2(\Omega)$ não têm maior regularidade, a convergência da aproximação está condicionada. De certa maneira, podemos encarar que a ordem de convergência será dada por um mínimo entre a regularidade da função e o grau dos polinómios interpoladores (ou splines).

Observações

i) Neste exemplo unidimensional a transformação afim é simples. Com efeito, sendo $\hat{E} = [0, 1]$ e $E = [a, b]$ obtém-se imediatamente

$$F(\hat{x}) = (b - a)\hat{x} + a,$$

e também $F^{-1}(x) = \frac{x-a}{b-a}$.

ii) *Caso de elementos de Hermite cúbicos.*

Seja $\hat{\phi}_k$ uma função de forma da base dual associada à variável nodal $\hat{\nu}_k$ do elemento finito \hat{E} . Portanto, temos $\hat{\nu}_k(\hat{\phi}_k) = 1$.

No caso de estarem envolvidas derivadas,

$$\hat{\nu}_k(\hat{\phi}) = \hat{\phi}'(\hat{x}_k), \text{ e sendo } \hat{\phi}_k \text{ tal que } \hat{\nu}_k(\hat{\phi}_k) = \hat{\phi}_k'(\hat{x}_k) = 1,$$

vejamos qual a relação de $\hat{\phi}_k$ com a função de forma ϕ_k associada a ν_k , no elemento finito $E = F(\hat{E})$, e em que $x_k = F(\hat{x}_k)$.

Seja $\varphi = \hat{\phi}_k \circ F^{-1}$, então

$$\begin{aligned} 1 &= \hat{\nu}_k(\hat{\phi}_k) = \hat{\nu}_k(\varphi \circ F) = \frac{d}{d\hat{x}}\varphi(F(\hat{x}))|_{\hat{x}=\hat{x}_k} = \frac{d}{d\hat{x}}\varphi((b-a)\hat{x} + a)|_{\hat{x}=\hat{x}_k} \\ &= (b-a)\frac{d}{dx}\varphi(x)|_{x=x_k} = (b-a)\nu_k(\varphi) = \nu_k((b-a)\varphi). \end{aligned}$$

Como $\nu_k(\phi_k) = 1$, concluímos que $\phi_k = (b-a)\varphi$, ou seja

$$\phi_k = (b-a)\hat{\phi}_k \circ F^{-1}.$$

Isto é ligeiramente diferente do que se passa com as variáveis nodais de Lagrange, onde temos simplesmente $\phi_k = \hat{\phi}_k \circ F^{-1}$, e não intervém a derivada de F , que neste caso é $b-a$.

6.2 Estimativas de erro do Método de Galerkin

Convém enunciar alguns resultados de regularidade que, apesar de estarem fora do âmbito do curso, são úteis para as estimativas de erro, já que na estimativa de erro que iremos obter em (6.15),

$$\|u - u_h\|_{s,\Omega} \leq C h^{m+1-s} |u|_{m+1,\Omega},$$

intervém a regularidade da solução u .

6.2.1 Regularidade da solução

Consideremos agora operadores elípticos de segunda ordem do tipo

$$Du = a_0 u - \sum_{i,j=1}^d \partial_i(a_{ij} \partial_j u)$$

em que os coeficientes são funções que verificam $a_0 \geq 0$ com $a_0 \in C(\Omega)$ e $a_{ij} \in C^1(\Omega)$ verificam as hipóteses de elipticidade,

$$\exists \alpha > 0 : \sum_{i,j=1}^d a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \geq \alpha |\xi|^2, \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \forall x \in \Omega.$$

Vejamos o caso da equação de Poisson, $-\Delta u = f$. Sabemos pelo Teorema de Lax-Milgram que a solução pertence a $H_0^1(\Omega)$ desde que $f \in H^{-1}(\Omega)$. Ora normalmente f é uma função e não uma distribuição, portanto podemos questionar se uma maior regularidade de f não irá implicar uma maior regularidade da solução. Com efeito, se assumirmos que $f \in L^2(\Omega)$ obtemos $\Delta u \in L^2(\Omega)$, e será possível ver que as derivadas de segunda ordem estão todas em $L^2(\Omega)$. Como já sabemos que a função e as primeiras derivadas estão em $L^2(\Omega)$, pois $u \in H_0^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$, conclui-se que $u \in H^2(\Omega)$. De um modo geral, havendo regularidade do domínio, obtemos que se $f \in H^m(\Omega)$ então $u \in H^{m+2}(\Omega)$, estabelecendo-se o teorema seguinte (ver p.ex. [7]).

Teorema 6.2.1 *Consideremos um operador elíptico com coeficientes em $C^{m+1}(\bar{\Omega})$, e a fronteira $\partial\Omega$ com regularidade C^{m+2} . Se $f \in H^m(\Omega)$ e admitindo que $u \in H_0^1(\Omega)$ é a única solução fraca do problema homogêneo de Dirichlet, então $u \in H^{m+2}(\Omega)$ e tem-se a estimativa*

$$\|u\|_{m+2,\Omega} \leq C \|f\|_{m,\Omega} \tag{6.13}$$

Observações:

i) Este resultado é demasiado exigente no que diz respeito à regularidade da fronteira, já que mesmo com $m = 0$ é requerida uma fronteira $C^2(\Omega)$. No entanto, no caso do problema de Dirichlet, admitindo que os coeficientes a_{ij} pertencem a $C^1(\bar{\Omega})$, é possível melhorar os resultados (devidos a Grisvard, e.g.. [9], [15]) :

- Se Ω é um polígono convexo, e $f \in L^2(\Omega)$, então a solução $u \in H^2(\Omega)$.

Quando o polígono não é convexo, a situação é mais complicada. Este resultado ainda é válido no caso tridimensional para poliedros convexos, admitindo condições de Dirichlet nulas. No caso do problema de Neumann é possível estabelecer um resultado semelhante, mas no problema misto Dirichlet-Neumann tal resultado não é possível.

ii) O Teorema 6.2.1 analisa a regularidade da função em todo o domínio Ω . Pode-se também estabelecer que para um domínio ω , cuja aderência está estritamente contida em Ω , se tem $u \in H^{m+2}(\omega)$, independentemente da regularidade da fronteira.

iii) Em conjunção com o teorema do traço pode mostrar-se que se a fronteira for C^{m+2} , temos a seguinte estimativa

$$\|u\|_{m+2,\Omega} \leq C(\|f\|_{m,\Omega} + \|u\|_{m+3/2,\partial\Omega_0} + \|\partial_n u\|_{m+1/2,\partial\Omega_1}), \quad (6.14)$$

onde $\partial\Omega_0$ é a parte da fronteira onde são impostas condições de Dirichlet e $\partial\Omega_1$ onde são impostas condições de Neumann.

• Assim, como constatámos nos exemplos apresentados a propósito do erro de interpolação, tudo depende da regularidade de u para haver maior ou menor rapidez de convergência do método dos elementos finitos.

6.2.2 Estimativas de erro

Corolário 6.2.1 (do teorema de Céa). *Seja $V_h \subset H^s(\Omega)$ o espaço discreto definido numa triangulação regular Ω_h em que $\mathbf{P}_m \subseteq \hat{\mathbf{P}} \subset H^s(\hat{E})$. Então, se $u \in H^{m+1}(\Omega)$, existe uma constante $C > 0$ (independente de h) tal que*

$$\|u - u_h\|_{s,\Omega} \leq C h^{m+1-s} |u|_{m+1,\Omega}. \quad (6.15)$$

Demonstração:

Consequência imediata do teorema de Céa e da estimativa de erro (6.9), pois

$$\|u - u_h\|_{s,\Omega} \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_{s,\Omega} \leq \frac{M}{\alpha} \|u - \Pi_{\Omega_h} u\|_{s,\Omega} \leq C h^{m+1-s} |u|_{m+1,\Omega}. \quad \square$$

Note-se que é fundamental que $V_h \subset H^s(\Omega)$, para que façam sentido as estimativas.

No caso de se considerar uma triangulação contínua, apenas podemos considerar que as derivadas estão em $L^2(\Omega)$, logo $V_h \subset H^1(\Omega)$ e obtemos a estimativa de erro

$$\|u - u_h\|_{1,\Omega} \leq C h^m |u|_{m+1,\Omega}.$$

Temos ainda o seguinte resultado que permite estabelecer melhores majorações para a norma num espaço de Hilbert $H \supset V$. O exemplo clássico é considerar $H = L^2(\Omega)$, espaço que inclui $V = H_0^1(\Omega)$.

Lema 6.2.1 (Aubin-Nitsche) *Supondo que $V \subset H \subset V'$, em que H é um espaço de Hilbert, tem-se*

$$\|u - u_h\|_H \leq M \|u - u_h\|_V \sup_{g \in H} \left(\frac{1}{\|g\|_H} \inf_{v_h \in V_h} \|U_g - v_h\|_V \right)$$

em que $U_g \in V$ é a solução única do problema variacional

$$b(U_g, v) = \langle g, v \rangle_H, \quad \forall v \in V.$$

Como podemos obter pelas estimativas do corolário anterior

$$\|u - u_h\|_{1,\Omega} \leq C h^m |u|_{m+1,\Omega},$$

estas aplicam-se a

$$\|U_g - U_h\|_{1,\Omega} \leq C h |U_g|_{2,\Omega} \leq C h \|g\|_{0,\Omega},$$

em que $U_h \in V_h$ é a solução aproximada e $U_g \in V$ é a solução exacta do problema variacional $b(U_g, v) = \langle g, v \rangle_{L^2(\Omega)}$. No entanto é preciso assegurar que $U_g \in H^2(\Omega)$ se $g \in L^2(\Omega)$ e mesmo que o problema é regular:

Definição 6.2.1 *Seja $U_g \in V$ a solução única do problema variacional $b(U_g, v) = \langle g, v \rangle_H, \forall v \in V$. Dizemos que o problema variacional é regular se a aplicação*

$$\begin{aligned} \mathcal{B}: L^2(\Omega) &\longrightarrow H^2(\Omega) \\ g &\longmapsto U_g \end{aligned}$$

é linear contínua. Nesse caso existe $C > 0 : \|U_g\|_{2,\Omega} \leq C \|g\|_{0,\Omega}$.

Observação: O problema variacional para a equação de Poisson, bem como outros problemas elípticos definidos com operadores com coeficientes regulares são problemas regulares, como podemos concluir pelo teorema de regularidade (Teorema.6.2.1).

Admitindo a hipótese de regularidade, temos $\|U_g - U_h\|_{1,\Omega} \leq C h \|g\|_{0,\Omega}$ e podemos aplicar o lema de Aubin-Nitsche, majorando o termo

$$\sup_{g \in H} \left(\frac{1}{\|g\|_{0,\Omega}} \inf_{v_h \in V_h} \|U_g - v_h\|_{1,\Omega} \right) \leq \frac{1}{\|g\|_{0,\Omega}} C h \|g\|_{0,\Omega} = C h,$$

obtemos

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq C h \|u - u_h\|_{1,\Omega}$$

e podemos concluir o seguinte resultado:

Corolário 6.2.2 *Nas condições do corolário anterior, para um problema variacional regular, temos a estimativa de erro*

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq C h^{m+1} |u|_{m+1,\Omega}. \quad (6.16)$$

A vantagem desta última estimativa é que permite obter uma ordem de convergência mais elevada quando é avaliada a diferença na norma L^2 , resultado esperado, já que não se têm em conta as derivadas.

Exemplo. No caso de um problema elíptico como

$$\begin{cases} -\Delta u + \lambda u = f & \text{em } \Omega \\ u = g_0 & \text{em } \partial\Omega_0 \\ \partial_n u = g_1 & \text{em } \partial\Omega_1, \end{cases}$$

com $\lambda \geq 0$, e em que a fronteira é regular, temos a seguinte estimativa

$$|u|_{m+1,\Omega} \leq \|u\|_{m+1,\Omega} \leq C(\|f\|_{m-1,\Omega} + \|g_0\|_{m+1/2,\partial\Omega_0} + \|g_1\|_{m-1/2,\partial\Omega_1}).$$

Portanto, no caso de elementos de Lagrange lineares $m = 1$,

$$\begin{aligned} \|u - u_h\|_{1,\Omega} &\leq C_1 h |u|_{2,\Omega} \\ \|u - u_h\|_{0,\Omega} &\leq C_0 h^2 |u|_{2,\Omega} \end{aligned}$$

o que significa que basta exigir que $g_0 \in H^{3/2}(\partial\Omega_0)$, $g_1 \in H^{1/2}(\partial\Omega_1)$, $f \in L^2(\Omega)$ para que $|u|_{2,\Omega}$ seja limitado por uma constante.

Exigir $g_0 \in H^{3/2}(\partial\Omega_0)$ corresponde a exigir que seja o traço da função $u \in H^2(\Omega)$. Em dimensão 2, pelas injecções de Sobolev, vemos que neste caso em que $u \in H^2(\Omega)$ temos $s - d/p = 2 - 2/2 = 1 > 0$ e portanto u é pelo menos contínua, conseqüentemente g_0 , a restrição à fronteira também deve ser pelo menos contínua. Menor regularidade é exigida na condição de Neumann, pois $g_1 \in H^{1/2}(\partial\Omega_1)$ significa que é traço de uma função $H^1(\Omega)$, o que faz sentido já que como $u \in H^2(\Omega)$, as derivadas estão em $H^1(\Omega)$. No entanto deve considerar-se mesmo assim g_1 contínua, já que apesar das funções $H^1(\Omega)$ não serem necessariamente contínuas (ver apêndice), temos $s - d/p = 1 - 2/2 = 0$ e estamos no caso limite de continuidade.

6.2.3 Erro de aproximação do domínio

Até aqui apenas considerámos o caso em que Ω é um domínio poligonal e dessa forma não há erro geométrico na aproximação do domínio. No entanto, devemos também considerar o caso em que $\Omega_h \neq \Omega$, embora a análise seja mais detalhada e saia do âmbito deste curso introdutório. Referimos apenas os principais resultados, tendo em especial atenção o facto de que a aproximação do domínio impede a obtenção de estimativas de erro tão boas quanto as obtidas para os domínios poligonais. Com efeito, sendo Ω um aberto convexo de \mathbb{R}^2 com fronteira C^2 , u a solução do problema exacto e \tilde{u}_h a aproximação obtida com interpolação de Lagrange linear, com elementos finitos triangulares, ainda se obtêm as estimativas

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} \leq C h \|u\|_{2,\Omega} \text{ e } \|u - \tilde{u}_h\|_{0,\Omega} \leq C h^2 \|u\|_{2,\Omega}$$

se $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, mas quando usamos elementos de Lagrange quadráticos ou superiores, obtemos apenas

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} \leq C h^{3/2} \|u\|_{2,\Omega}$$

quando $u \in H^3(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, o que significa uma perda de $h^{1/2}$ face ao resultado obtido para elementos de Lagrange quadráticos quando não se considerava erro de aproximação geométrica do domínio.

O problema consiste no facto de se estar a utilizar uma aproximação da fronteira através das rectas que definem os triângulos, aproximação essa que é de ordem 1. Para manter a ordem a ordem de convergência esperada há que proceder a uma aproximação conveniente da fronteira, usando uma técnica designada por *isoparamétrica*. Por exemplo, no caso de elementos de Lagrange quadráticos, ao invés de se considerar F afim, que transformava o nó \hat{a}_6 do elemento de referência no nó a_6 no elemento considera-se uma função F^* quadrática que transforme o

ponto \hat{a}_6 num ponto da fronteira a_6^* , como se mostra na figura seguinte.

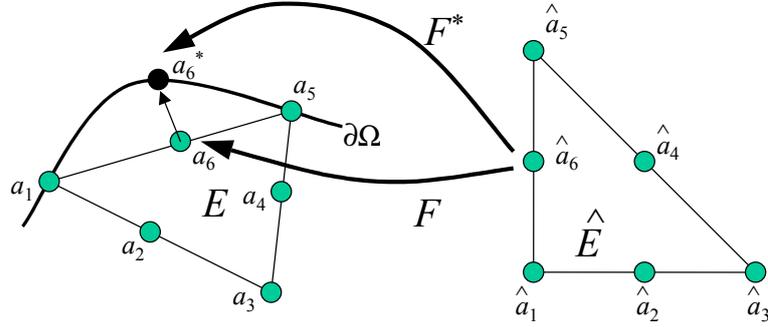


Figura 6.2.1: Aproximação da fronteira usando uma transformação quadrática F^* , definindo um elemento finito curvilíneo, o que corresponde a aproximar a fronteira por um segmento de parábola.

Ao considerar esta nova aproximação, que corresponde a considerar a deformação do triângulo de referência num elemento curvilíneo, consegue-se manter a ordem da estimativa de erro obtida para os domínios poligonais quando se utilizava elementos de Lagrange quadráticos, ou seja, a diferença $\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega}$ volta a ser um $O(h^2)$, e tem-se $\|u - \tilde{u}_h\|_{0,\Omega} = O(h^3)$. Para elementos de Lagrange de ordem superior, cúbicos, etc. deve considerar-se uma transformação F^* de forma a que a aproximação da fronteira tenha a mesma ordem.

6.3 Integração numérica

Como as formas bilinear e linear definidas na formulação variacional são normalmente dadas por integrais, pode ser necessário introduzir aproximações no cálculo desses integrais. Essa aproximação na forma bilinear pode ser dispensável se os integrais apenas envolverem polinómios, já que é fácil estabelecer a fórmula

$$\int_E p(x) dx = \int_{\hat{E}} p(F(\hat{x})) |\det A| d\hat{x}$$

e quando o elemento de referência é o triângulo (2D) tem-se simplesmente

$$\int_{\hat{E}} x_1^n x_2^m dx = \frac{n!m!}{(n+m+2)!}.$$

No entanto, quanto à forma linear, como a função f que aparece no segundo membro é arbitrária, é normalmente preciso efectuar uma integração numérica para calcular os termos

$$\int_{\hat{E}} \hat{f}(\hat{x}) \hat{p}(\hat{x}) d\hat{x}.$$

6.3.1 Integração de Gauss em cada elemento

Já falámos acerca da interpolação num elemento finito, mas outra questão que irá revelar-se importante é considerar a integração num elemento finito, já que tendo efectuado a triangulação

teremos de calcular integrais da forma

$$\int_{\Omega_h} u = \sum_{E \in \Omega_h} \int_E u.$$

Para calcular aproximadamente o integral num elemento podemos recorrer às fórmulas de quadratura de Gauss.

Para isso, tal como no caso unidimensional (em que transportamos o problema para o intervalo de referência $[-1, 1]$), consideramos um elemento de referência \hat{E} , por exemplo, o triângulo $\hat{E} = \{(0, 0), (1, 0), (0, 1)\}$, ou o quadrado $\hat{E} = [-1, 1] \times [-1, 1]$.

As fórmulas de quadratura de Gauss são do tipo

$$\int_{\hat{E}} u \sim Q(u) = \sum_{k=1}^m \hat{w}_k u(\hat{z}_k)$$

em que \hat{w}_k são designados por pesos e \hat{z}_k por pontos de Gauss.

Quando queremos calcular o integral num outro elemento E que seja equivalente afim do elemento de referência \hat{E} podemos transportar o cálculo do integral usando a mudança de variável pela transformação afim $x = F(\hat{x}) = A\hat{x} + b$, pois

$$\int_E u(x) dx = \int_{\hat{E}} u(F(\hat{x})) |\det J_F(\hat{x})| d\hat{x} = \int_{\hat{E}} u(F(\hat{x})) |\det A| d\hat{x}$$

ficando assim

$$\int_E u(x) dx \sim \sum_{k=1}^m |\det A| \hat{w}_k u(F(\hat{z}_k)),$$

ou seja, escrevendo $w_k = |\det A| \hat{w}_k$, e $z_k = F(\hat{z}_k)$, temos

$$\int_E u(x) dx \sim \sum_{k=1}^m w_k u(z_k).$$

6.3.2 Caso unidimensional

No caso unidimensional, considerando como elemento de referência o intervalo $[-1, 1]$, obtemos as fórmulas de integração de Gauss-Legendre bem conhecidas exigindo que a fórmula seja exacta para os monómios, ou seja,

$$\int_{-1}^1 x^k dx = Q(x^k).$$

Relembramos que, no caso de um único ponto, isto corresponde a dizer que

$$k = 0 \Rightarrow 2 = w_1, \quad k = 1 \Rightarrow 0 = w_1 x_1$$

e a solução é clara, $Q_1(u) = 2u(0)$, o que corresponde a uma fórmula de grau 1 e que tem um erro da ordem $O(h^2)$.

Se considerarmos dois pontos, obtemos

$$\begin{aligned} k = 0 &\Rightarrow 2 = w_1 + w_2, & k = 1 &\Rightarrow 0 = w_1x_1 + w_2x_2 \\ k = 2 &\Rightarrow \frac{2}{3} = w_1x_1^2 + w_2x_2^2, & k = 3 &\Rightarrow 0 = w_1x_1^3 + w_2x_2^3 \end{aligned}$$

cuja solução é $w_1 = w_2 = 1, x_1 = -\sqrt{1/3}, x_2 = \sqrt{1/3}$, tendo-se assim a fórmula

$$Q_3(u) = u(-\sqrt{1/3}) + u(\sqrt{1/3})$$

que é de grau 3 e que tem um erro da ordem $O(h^4)$.

Esta mesma ideia pode ser agora transportada para a integração a várias variáveis.

6.3.3 Fórmulas de Gauss para o Quadrado de Referência

Desta forma é também possível obter fórmulas de quadratura para o quadrado de referência $[-1, 1] \times [-1, 1]$, reparando que a integração é feita separadamente em cada uma das variáveis, relacionando assim com o caso unidimensional,

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 x^k y^m dx dy = \int_{-1}^1 x^k dx \int_{-1}^1 y^m dy.$$

Assim, considerando $p_1 = (0, 0)$, a fórmula $Q(u) = 4u(0, 0)$ continua a ter grau 1, pois, para $p_1 = (x_1, y_1)$ obtemos

$$\begin{aligned} k = 0 &\Rightarrow \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 1 dx dy = 4 = w_1 \\ k = 1 &\Rightarrow \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 x dx dy = 0 = w_1 x_1 \\ &\text{e também } \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 y dx dy = 0 = w_1 y_1. \end{aligned}$$

Temos ainda $\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 xy dx dy = 0 = w_1 x_1 y_1$. O resíduo de integração será $O(h^2)$, resultando do mesmo tipo de erros em cada variável.

• Para obter fórmulas de grau superior, basta considerar quatro pontos com coordenadas $x = \pm\sqrt{1/3}, y = \pm\sqrt{1/3}$.

Com efeito,

$$\begin{aligned} k = 0 &\Rightarrow \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 1 dx dy = 4 = w_1 + w_2 + w_3 + w_4 \\ k = 1 &\Rightarrow \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 x dx dy = 0 = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + w_4 x_4 \\ &\Rightarrow \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 y dx dy = 0 = w_1 y_1 + w_2 y_2 + w_3 y_3 + w_4 y_4 \\ &\text{etc...} \end{aligned}$$

é ainda uma fórmula de grau 3... repare-se que há 12 incógnitas, tendo-se um resíduo de integração de ordem $O(h^4)$.

6.3.4 Fórmulas de Gauss para o Triângulo de Referência

No caso de triângulos, as fórmulas são semelhantes. Mas vejamos como deduzir a localização de um ponto de Gauss no triângulo de referência,

$$\begin{aligned} k = 0 &\Rightarrow \int_{\hat{E}} 1 \, dx dy = 1/2 = w_1 \\ k = 1 &\Rightarrow \int_{\hat{E}} x \, dx dy = w_1 x_1 \\ &\Rightarrow \int_{\hat{E}} y \, dx dy = w_1 y_1 \end{aligned}$$

Para calcular os integrais sobre o elemento de referência, vemos que,

$$\int_{\hat{E}} f(x, y) \, dx dy = \int_0^1 \int_0^{1-x} f(x, y) \, dy dx,$$

e assim

$$\int_{\hat{E}} x = \int_0^1 \int_0^{1-x} x \, dy dx = \int_0^1 x(1-x) \, dx = \left[\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} \right]_0^1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$$

e de forma semelhante

$$\int_{\hat{E}} y = \int_0^1 \int_0^{1-x} y \, dy dx = \int_0^1 \left[\frac{y^2}{2} \right]_0^{1-x} dx = \int_0^1 \frac{(1-x)^2}{2} dx = \left[-\frac{(1-x)^3}{6} \right]_0^1 = 0 + \frac{1}{6} = \frac{1}{6}$$

Retiramos assim,

$$x_1 = \frac{1}{3}, \quad y_1 = \frac{1}{3}, \quad w_1 = \frac{1}{2}$$

e obtemos Q_1 , a fórmula que é exacta para polinómios de grau 1, usando um único ponto (o baricentro),

$$Q_1(f) = \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right),$$

notando que o resíduo desta fórmula é da ordem $O(h^2)$.

Através de outras relações,

$$\int_{\hat{E}} xy = \frac{1}{24}, \quad \int_{\hat{E}} x^2 = \frac{1}{12}, \quad \int_{\hat{E}} y^2 = \frac{1}{12}$$

podemos obter fórmulas correctas para polinómios de grau 2,

$$Q_3(f) = \frac{1}{6} \left(f\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}\right) + f\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right) + f\left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}\right) \right),$$

em que todos os pontos são interiores, ou ainda

$$Q_3(f) = \frac{1}{6} \left(f\left(\frac{1}{2}, 0\right) + f\left(0, \frac{1}{2}\right) + f\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \right),$$

com pontos sobre a fronteira. Ambas estas fórmulas têm um resíduo $O(h^3)$ (cf. [16]).

Um exemplo de fórmula exacta para polinómios com grau 3 é

$$Q_4(f) = \frac{25}{96} \left(f\left(\frac{1}{5}, \frac{1}{5}\right) + f\left(\frac{1}{5}, \frac{3}{5}\right) + f\left(\frac{3}{5}, \frac{1}{5}\right) \right) - \frac{27}{96} f\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right),$$

que tem um resíduo $O(h^4)$.

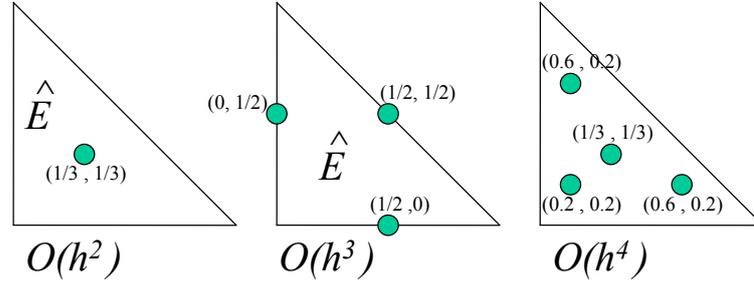


Figura 6.3.1: Alguns exemplos para a localização dos pontos de Gauss (para o triângulo de referência) e ordem de aproximação para integração numérica respectiva.

6.3.5 O erro na integração numérica

Consideramos duas soluções:

u_h – solução exacta do problema variacional discreto $b(u_h, v_h) = l(v_h), \forall v_h \in V_h$,

\tilde{u}_h – solução aproximada do problema variacional discreto $b(\tilde{u}_h, v_h) = \tilde{l}(v_h), \forall v_h \in V_h$,

em que a aproximação \tilde{l} consiste em substituir os integrais exactos por integrais aproximados.

Note-se que quer u_h , quer \tilde{u}_h , pertencem a V_h .

É imediato que, sendo \tilde{l} a aproximação de l , que corresponde a aproximar os integrais pelas regras de quadratura, temos,

$$b(u_h - \tilde{u}_h, v_h) = (l - \tilde{l})(v_h).$$

Pela coercividade de b , obtemos (fazendo $v_h = u_h - \tilde{u}_h$),

$$\alpha \|u_h - \tilde{u}_h\|_V^2 \leq (l - \tilde{l})(u_h - \tilde{u}_h),$$

ou seja

$$\|u_h - \tilde{u}_h\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|l - \tilde{l}\|_{V'}. \quad (6.17)$$

Nota: Com efeito, podemos mesmo obter

$$\|u_h - \tilde{u}_h\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \sup_{0 \neq v_h \in V_h} \frac{(l - \tilde{l})(v_h)}{\|v_h\|_V}, \quad (6.18)$$

que é uma desigualdade melhor que a anterior porque o valor $\|l - \tilde{l}\|_{V'}$ é definido como

$$\|l - \tilde{l}\|_{V'} = \sup_{0 \neq v \in V} \frac{(l - \tilde{l})(v)}{\|v\|_V}$$

e aqui o supremo seria procurado num conjunto maior $V \supset V_h$.

Lema 6.3.1 Consideremos uma fórmula de quadratura exacta para polinómios de grau M , ou seja,

$$I(p) = \int_{\hat{E}} p(x) dx = \sum_{k=1}^N \hat{w}_k p(\hat{z}_k) = Q(p).$$

Então, existe uma constante $C > 0$:

$$|I(f) - Q(f)| \leq C |f|_{C^{m+1}(\hat{E})},$$

em que a seminorma em $C^{m+1}(\hat{E})$ é definida por

$$|f|_{C^{m+1}(\hat{E})} = \max_{|\alpha|=m+1} \|\partial^\alpha f\|_{\infty, \hat{E}}.$$

Demonstração:

Como a fórmula é exacta para polinómios de grau M , ou seja, $p \in \mathbf{P}_M$, então $I(p) = Q(p)$, e portanto

$$\begin{aligned} |I(f) - Q(f)| &= |I(f-p) - Q(f-p)| = \left| \int_{\hat{E}} (f-p) - \sum_{k=1}^N \hat{w}_k (f-p)(\hat{z}_k) \right| \\ &\leq \left| \int_{\hat{E}} (f-p) \right| + \sum_{k=1}^N \hat{w}_k |(f-p)(\hat{z}_k)|. \end{aligned}$$

Por um lado $|\int_{\hat{E}} (f-p)| \leq |\hat{E}| \|f-p\|_{\infty, \hat{E}}$ e por outro lado

$$\sum_{k=1}^N \hat{w}_k |(f-p)(\hat{z}_k)| \leq C_0 \|f-p\|_{\infty, \hat{E}},$$

com $C_0 = \sum_{k=1}^N \hat{w}_k$. Somando, para qualquer $p \in \mathbf{P}_M$, obtemos

$$|I(f) - Q(f)| \leq C_1 \|f-p\|_{\infty, \hat{E}}.$$

Assim, escolhendo p o polinómio de grau M dado pelo desenvolvimento em série de Taylor em zero, retiramos imediatamente o resto de Lagrange para qualquer $x \in \hat{E}$,

$$f(x) - p(x) = \sum_{|\alpha|=M+1} \frac{x^\alpha}{\alpha!} \partial^\alpha f(\xi_\alpha),$$

com $\xi_\alpha \in \hat{E}$. Como $x \in \hat{E}$, então $|x| \leq 1$ e pela definição de seminorma em $C^{m+1}(\hat{E})$,

$$\|f-p\|_{\infty, \hat{E}} \leq \sum_{|\alpha|=M+1} \frac{1}{\alpha!} \|\partial^\alpha f\|_{\infty, \hat{E}} \leq C_2 |f|_{C^{m+1}(\hat{E})}$$

e obtém-se a estimativa. \square

Corolário 6.3.1 *Seja Q uma fórmula de integração de Gauss exacta em \hat{E} para polinômios de grau $m \geq 1$. Se $m \geq 2$, consideramos $M \geq m$. Então existe $C > 0$:*

$$\forall f \in C^{M-m+2}, \forall p \in \mathbf{P}_M, |I(fp) - Q(fp)| \leq C(|f|_{C^{M-m+2}} \|p\|_{L^2} + |f|_{C^{M-m+1}} |p|_{H^1}) \quad (6.19)$$

Demonstração: Cf. [15]. \square

Lema 6.3.2 *Seja v_h uma função de $V_h \subset H^1(\Omega)$, espaço de aproximação usando elementos de Lagrange de grau $m \geq 1$. Consideramos*

$$l(v_h) = \int_{\Omega} f v_h, \quad \tilde{l}(v_h) = \sum_{k=1}^N w_k (f v_h)(z_k)$$

em que \tilde{l} é dada por uma fórmula de quadratura exacta para \mathbf{P}_M com $M \geq 2m - 2$. Então se $f \in C^m(\Omega)$,

$$|l(v_h) - \tilde{l}(v_h)| \leq C h^m \|f\|_{C^m(\Omega)} \|v_h\|_{H^1(\Omega)}.$$

Se tivermos $M \geq 2m - 1$, podemos obter para $f \in C^{m+1}(\Omega)$,

$$|l(v_h) - \tilde{l}(v_h)| \leq C h^{m+1} \|f\|_{C^{m+1}(\Omega)} \|v_h\|_{H^1(\Omega)}.$$

Demonstração:

Pelo corolário, como $f \in C^m$, temos $M - m + 2 \geq m$, e obtemos para o elemento de referência \hat{E} ,

$$\forall p \in \mathbf{P}_M, \left| \int_{\hat{E}} \hat{f}(\hat{x}) p(\hat{x}) d\hat{x} - \sum \hat{w}_k(\hat{f}p)(\hat{z}_k) \right| \leq C \|\hat{f}\|_{C^m(\hat{E})} \|p\|_{H^1(\hat{E})},$$

em que $\hat{f} = f \circ F$. Fazendo a mudança de variável para $E = F(\hat{E})$, temos

$$\forall p \in \mathbf{P}_M, \left| \int_E f(x) p(x) dx - \sum w_k (fp)(z_k) \right| = |\det A| \left| \int_{\hat{E}} \hat{f}(\hat{x}) p(\hat{x}) d\hat{x} - \sum \hat{w}_k(\hat{f}p)(\hat{z}_k) \right|.$$

Aplicando agora as desigualdades $\|D^k \hat{v}\| \leq \|A\|^k \|D^k v\|$ obtidas no Lema 6.1.3 concluímos que

$$\|\hat{f}\|_{C^m(\hat{E})} \leq \|A\|^m \|f\|_{C^m(E)}$$

e por outro lado, efectuando a mudança de variáveis nos integrais temos $\|p\|_{H^1(\hat{E})} \leq |\det A|^{-1/2} \|p\|_{H^1(E)}$.

Pelo Lema 6.1.2 temos $\|A\| \leq \hat{C} h_E$ e portanto $\|\hat{f}\|_{C^m(\hat{E})} \leq C h_E^m \|f\|_{C^m(E)}$. Assim,

$$\|\hat{f}\|_{C^m(\hat{E})} \|p\|_{H^1(\hat{E})} \leq C |\det A|^{1/2} h_E^m \|f\|_{C^m(E)} \|p\|_{H^1(E)}$$

e obtemos

$$\forall p \in \mathbf{P}_M, \left| \int_E f(x) p(x) dx - \sum w_k (fp)(z_k) \right| \leq C |E|^{1/2} h_E^m \|f\|_{C^m(E)} \|p\|_{H^1(E)}$$

já que $|\det A| = |E|/|\hat{E}|$. Esta é a expressão para o erro em cada elemento E .

A expressão do erro $|l(v_h) - \tilde{l}(v_h)|$ é dada pela soma dos erros nos vários elementos, tendo em atenção que $h_E \leq h$ e que v_h em cada E é um polinómio $v_{h|E} \in \mathbf{P}_M$, pelo que podemos usar a estimativa anterior, ficando com

$$|l(v_h) - \tilde{l}(v_h)| \leq \sum_{E \in \mathcal{T}_h} \left| \int_E f(x) v_h(x) dx - \sum w_k(f v_h)(z_k) \right| \leq \sum_{E \in \mathcal{T}_h} C |E|^{1/2} h^m \|f\|_{C^m(E)} \|v_h\|_{H^1(E)}.$$

Finalmente, usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz para somas, $\sum a_n b_n \leq (\sum a_n^2)^{1/2} (\sum b_n^2)^{1/2}$, temos

$$\sum_{E \in \mathcal{T}_h} |E|^{1/2} \|v_h\|_{H^1(E)} \leq \left(\sum_{E \in \mathcal{T}_h} |E| \right)^{1/2} \left(\sum_{E \in \mathcal{T}_h} \|v_h\|_{H^1(E)}^2 \right)^{1/2} = |\Omega|^{1/2} \|v_h\|_{H^1(\Omega)}.$$

Portanto, como $\|f\|_{C^m(E)} \leq \|f\|_{C^m(\Omega)}$, retiramos

$$|l(v_h) - \tilde{l}(v_h)| \leq C h^m \|f\|_{C^m(\Omega)} \|v_h\|_{H^1(\Omega)}.$$

A outra desigualdade é obtida de forma semelhante, aplicando o corolário para $f \in C^{m+1}$, já que assim temos $M - m + 2 \geq m + 1$. \square

- Este resultado permite obter estimativas (considerando $v_h = 1$), para

$$|I(f) - Q(f)| = \left| \int_{\Omega} f - \sum_{k=1}^N w_k f(z_k) \right|.$$

Assim, temos

$$|I(f) - Q(f)| \leq C h^m \|f\|_{C^m(\Omega)},$$

para uma fórmula de quadratura Q exacta para polinómios de grau $M \geq 2m - 2$, no caso de $f \in C^m(\Omega)$. Assim, se $M = 0$ (a fórmula de quadratura é exacta para constantes) podemos ter $m = 1$ e se $f \in C^1$ obtemos um erro de integração $O(h)$.

No caso de $f \in C^{m+1}(\Omega)$ e $M \geq 2m - 1$, podemos obter

$$|I(f) - Q(f)| \leq C h^{m+1} \|f\|_{C^{m+1}(\Omega)}.$$

Assim, no caso em que $M = 1$ (a fórmula de quadratura é exacta para polinómios de grau 1) obtemos um erro $O(h^2)$ desde que $f \in C^2$, pois basta considerar $m = 1$ nesta segunda desigualdade.

Teorema 6.3.1 *Seja $u \in C^{m+2}(\bar{\Omega})$ a solução exacta de $-\Delta u = f$ e \tilde{u}_h a solução aproximada usando elementos de Lagrange de grau $m \geq 1$ e uma fórmula Q exacta para \mathbf{P}_M com $M \geq 2m - 2$. Temos a estimativa*

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} \leq C h^m \|u\|_{C^{m+2}(\bar{\Omega})}. \quad (6.20)$$

Se Ω é um polígono convexo, para $M \geq 2m - 1$, com $u \in C^{m+3}(\bar{\Omega})$, temos

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{0,\Omega} \leq C h^{m+1} \|u\|_{C^{m+3}(\bar{\Omega})}. \quad (6.21)$$

Demonstração: Pela fórmula (6.18) aplicada a $V = H_0^1(\Omega)$ e pelo lema anterior,

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} \leq C h^m \|f\|_{C^m(\Omega)}.$$

Aplicando a desigualdade de Poincaré estabelecemos a majoração em $\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega}$ notando também que $\|f\|_{C^m(\Omega)} = \|\Delta u\|_{C^m(\Omega)} \leq C \|u\|_{C^{m+2}(\Omega)}$. A estimativa em $\|u - \tilde{u}_h\|_{0,\Omega}$ é uma consequência de (6.16). \square

Note-se que este resultado assume regularidade na função $f \in C^m(\bar{\Omega})$ e na demonstração foi também provado que

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} \leq C h^m \|f\|_{C^m(\Omega)},$$

o que constitui uma estimativa de erro em f . Por exemplo, para $f \in C^1(\bar{\Omega})$, se trabalharmos com elementos de Lagrange lineares e usarmos uma fórmula de quadratura exacta para constantes ($M = 0$), obtemos $\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} = O(h)$. Se a função $f \in C^2$ e usarmos elementos de Lagrange quadráticos com uma fórmula exacta para polinómios de grau 2, então $\|u - \tilde{u}_h\|_{1,\Omega} = O(h^2)$.

Apesar de termos enunciado o resultado para o laplaciano, seguindo os passos da demonstração, é possível estabelecer o mesmo resultado para outros operadores elípticos, desde que os coeficientes sejam regulares ($a_{ij} \in C^m(\bar{\Omega})$).

Capítulo 7

Complementos - Método de Galerkin

7.1 Método de Galerkin-Estrutura do Sistema Linear

7.1.1 Numeração dos nós e dos triângulos

Após efectuar a triangulação há que proceder à numeração de elementos e dos nós. Há que ter em atenção que existe uma numeração global de um nó (relativa a todos os nós na triangulação) e uma numeração local (enquanto nó que define um triângulo, ou outro elemento). A numeração global de um nó pode ser dada através da numeração do triângulo e da numeração local do nó! É assim motivada a introdução de uma *matriz booleana* (constituída por zeros e uns) que permita relacionar a posição dos nós na numeração local e global.

Podemos estabelecer uma relação entre a numeração local e a numeração global através de uma aplicação

$$\Lambda_E : x_{E,j} \mapsto x_i$$

que associa o nó j do elemento E ao nó i na numeração global. A aplicação Λ_E pode ser definida através de uma matriz de zeros e uns (a matriz booleana).

Λ_E identifica-se a uma matriz de dimensão $N \times n_E$ em que n_E é o número de nós no elemento E e N é o número total de nós. A matriz transposta de Λ_E será uma sua inversa à esquerda, pois $\Lambda_E^T \Lambda_E = \mathbf{I}_{n_E \times n_E}$. Um caso típico, para elementos triangulares é considerar matrizes $N \times 3$. Por exemplo,

$$\Lambda_E^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{3 \times 7}$$

diz-nos que os vértices $x_E^{(1)}, x_E^{(2)}, x_E^{(3)}$ do triângulo E são dados através dos nós globais $x^{(1)}, x^{(4)}, x^{(3)}$, já que

$$\begin{bmatrix} x_E^{(1)} \\ x_E^{(2)} \\ x_E^{(3)} \end{bmatrix} = \Lambda_E^T \begin{bmatrix} x^{(1)} \\ \vdots \\ x^{(7)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^{(1)} \\ x^{(4)} \\ x^{(3)} \end{bmatrix}.$$

A colecção $\Lambda = \{\Lambda^{(1)}, \dots, \Lambda^{(N_E)}\}$ (aqui N_E indica o número de elementos existentes na

triangulação) dá-nos as relações entre os várias numerações locais e as numerações globais.

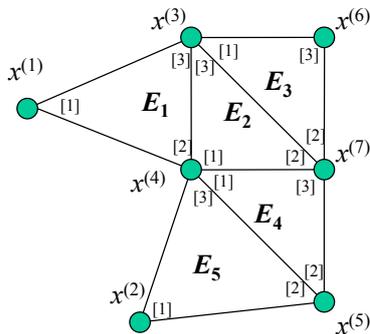


Figura 7.1.1: Numeração local dos nós (entre parêntesis rectos) e numeração global (valores de $x^{(1)}$ a $x^{(7)}$). O caso apresentado como exemplo corresponde ao elemento E_1 .

7.1.2 Sistema Linear

Vamos agora analisar o sistema linear que é obtido através da passagem da numeração local para numeração global.

Consideremos uma função escrita na base do espaço aproximado V_h ,

$$u = \sum_i u_i \psi_i$$

Verificando-se a relação,

$$b(u, w) = l(w),$$

para cada w igual à função base, obtemos o sistema

$$\sum_{i=1}^m b(\psi_i, \psi_j) u_i = l(\psi_j), \quad \forall j = 1, \dots, m,$$

pois basta verificar para as funções base $w = \psi_j$, para assegurarmos que é verificado para todos os $w \in X_m$, devido à linearidade de l e de $b(u, \cdot)$. O número de incógnitas no problema depende da dimensão do espaço aproximado V_h , que designaremos por $N = \dim(V_h)$.

$$[b(\psi_i, \psi_j)]_{N \times N} [u_i]_{N \times 1} = [l(\psi_j)]_{N \times 1}.$$

A matriz $B = [b(\psi_i, \psi_j)]_{N \times N}$ (que é por vezes designada *matriz de rigidez*) pode ser construída de forma particular. Como $\psi_i(x) = 0$, se x não pertencer a um elemento adjacente ao nó i , o cálculo irá reduzir-se aos elementos adjacentes aos nós i e j . Com o vector $\mathbf{y} = [l(\psi_j)]_{N \times 1}$ irá passar-se o mesmo. Vejamos isto, com mais detalhe, já que nos irá reduzir a um problema local.

Elementos de Lagrange

Reescrevemos

$$\psi_i(x) = \bigcup_{E=1}^{N_E} \Lambda_i^E \phi^E(x)$$

em que $\phi^E = (\phi_1^E, \dots, \phi_{n_E}^E)$ é um vector que contém todas as funções base do elemento E e Λ_i^E é a linha i da matriz booleana do elemento E . O sinal \cup significa que se percorrem todos os elementos e depois o produto da linha Λ_i^E com o vector ϕ^E faz aparecer apenas as funções base de E correspondentes ao nó i .

No caso mais simples, de elementos de Lagrange lineares num triângulo, trata-se de $\phi^E = (\phi_1^E, \phi_2^E, \phi_3^E)$ em que cada uma das componentes é uma função base local definida sobre cada um dos três vértices. Assim, se $\Lambda_i^E = [0 \ 0 \ 1]$ isto significa que a numeração local do nó i é 3, por isso, quando fazemos o produto $\Lambda_i^E \phi^E$ irá aparecer apenas ϕ_3^E .

Usando a bilinearidade da forma, obtemos

$$b(\psi_i, \psi_j) = \sum_{E=1}^{N_E} \sum_{n,m=1}^{n_E} \Lambda_{in}^E \Lambda_{jm}^E b(\phi_n^E, \phi_m^E),$$

o que significa que a forma calculada para as funções base globais ψ_i, ψ_j se resume à soma da forma calculada para as funções de base locais ϕ_n^E, ϕ_m^E desde que estas funções base indexadas por (E, n) e (E, m) correspondam a uma numeração dos nós i e j .

Podemos assim definir

$$b(\psi_i, \psi_j) = \sum_{E=1}^{N_E} \sum_{n,m=1}^{n_E} \Lambda_{in}^E B_{nm}^E \Lambda_{jm}^E,$$

em que B^E é uma matriz local $n_E \times n_E$ (no caso Lagrange linear, 3×3) para o elemento E , dada por

$$B_{nm}^E = b(\phi_n^E, \phi_m^E).$$

De forma semelhante, o segundo membro do problema variacional vem

$$l(\psi_j) = \sum_{E=1}^{N_E} \sum_{m=1}^{n_E} \Lambda_{jm}^E l(\phi_m^E),$$

e podemos definir um vector local \mathbf{y}^E de dimensão $n_E \times 1$,

$$\mathbf{y}_m^E = l(\phi_m^E).$$

O sistema global, $N \times N$ (em que N é o número global de nós),

$$B\mathbf{u} = \mathbf{y}$$

escreve-se

$$\sum_{i=1}^N \sum_{E=1}^{N_E} \sum_{n,m=1}^{n_E} \Lambda_{in}^E B_{nm}^E \Lambda_{jm}^E \mathbf{u}_i = \sum_{E=1}^{N_E} \sum_{m=1}^{n_E} \Lambda_{jm}^E \mathbf{y}_m^E$$

ou mais abreviadamente

$$\sum_{E=1}^{N_E} \Lambda^E B^E (\Lambda^E)^T \mathbf{u} = \sum_{E=1}^{N_E} \Lambda^E \mathbf{y}^E$$

Isto permite colocar em evidência a estrutura do sistema em termos de blocos de matrizes, já que a matriz resulta da soma de transformações de blocos B^E , o mesmo se passando relativamente ao vector.

Quando é os blocos B^E são iguais isto simplifica consideravelmente os cálculos, já que basta calcular um desses blocos. Isso acontece quando os coeficientes do operador elíptico são constantes e os elementos são iguais. É o caso do operador de Laplace quando se consideram elementos que diferem apenas por translação, como vemos no próximo exemplo.

Exemplo. A forma bilinear para a equação de Poisson aplicada às funções base dá-nos o valor B_{ij} da matriz de rigidez,

$$B_{ij} = b(\psi_i, \psi_j) = \int_{\Omega_h} \nabla \psi_i \cdot \nabla \psi_j.$$

Portanto, neste caso, reduzimos o cálculo a

$$\sum_{k=1}^{M_{ij}} \int_{E_{ij_k}} \nabla \psi_i \cdot \nabla \psi_j,$$

em que $E_{ij_1}, \dots, E_{ij_{M_{ij}}}$ são os M_{ij} elementos adjacentes simultaneamente aos nós i e j .

Consideremos um domínio que é um quadrado, e efectuamos uma malhagem com elementos rectangulares, que serão pequenos quadrados, tal como na discretização por diferenças finitas. A numeração utilizada nas diferenças finitas, na Fig.2.2.5, produz uma matriz tridiagonal por blocos, para o caso de uma aproximação de Lagrange com polinómios em \mathbf{Q}_1 , ou seja,

$$B = \begin{bmatrix} K & L & 0 & \cdots & 0 \\ L & K & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & L \\ 0 & \cdots & 0 & L & K \end{bmatrix},$$

em que cada bloco K ou L é ainda uma matriz tridiagonal. Curiosamente, neste caso, pode mesmo constatar-se que a resolução por elementos finitos *coincide* com a resolução por diferenças finitas!

Resolução do Sistema Linear.

Como a matriz do sistema linear é definida positiva, podemos aplicar métodos adequados à resolução desse tipo de sistemas. Por outro lado, com uma numeração conveniente dos nós podemos obter estruturas das matrizes por blocos que permitem também reduzir o tempo de cálculo na resolução do sistema. No caso em que a forma bilinear é simétrica, a matriz também fica simétrica e podem aplicar-se métodos bem adaptados a este tipo de matrizes, como o método de Cholesky. O caso simétrico, correspondendo a um problema de minimização é ainda favorável à resolução do sistema através do método do gradiente conjugado.

7.2 Outras Condições de Fronteira

7.2.1 Condição de Dirichlet não homogénea

Até aqui concentrámo-nos no problema de Dirichlet homogéneo para a equação de Poisson $-\Delta u = f$. Como já referimos no início, se tivermos condições de Dirichlet não homogéneas, $u = g$, em $\partial\Omega$, uma simples mudança de variável, $\tilde{u} = u - \tilde{g}$, para um qualquer $\tilde{g} \in H^2(\Omega)$ cujo traço em $\partial\Omega$ seja g , permite considerar $-\Delta\tilde{u} = f + \Delta\tilde{g}$ e o problema variacional

$$\begin{cases} \text{Encontrar } \tilde{u} = u - \tilde{g} \in H_0^1(\Omega) : \\ \int_{\Omega} \nabla\tilde{u} \cdot \nabla v = \int_{\Omega} (f + \Delta\tilde{g})v, \forall v \in H_0^1(\Omega) \end{cases}$$

Reparamos que o segundo integral se reduz a

$$\int_{\Omega} (f + \Delta\tilde{g})v = \int_{\Omega} f v - \int_{\Omega} \nabla\tilde{g} \cdot \nabla v,$$

e isto permite simplificar a expressão variacional

$$\int_{\Omega} \nabla\tilde{u} \cdot \nabla v = \int_{\Omega} (f + \Delta\tilde{g})v \iff \int_{\Omega} \nabla(\tilde{u} + \tilde{g}) \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v.$$

Como $u = \tilde{u} + \tilde{g}$, ficamos com o problema simplificado

$$\begin{cases} \text{Encontrar } u \in H^1(\Omega) : \\ u - \tilde{g} \in H_0^1(\Omega), \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v, \forall v \in H_0^1(\Omega). \end{cases}$$

Isto justifica a aproximação da solução do problema não homogéneo considerando ainda a formulação variacional em $H_0^1(\Omega)$ e exigindo que $u = g$ na fronteira.

Regularidade. Obtemos uma solução forte $u \in H^2(\Omega)$, quando o domínio tem fronteira regular¹ (classe C^2), ou é um polígono convexo² (caso bidimensional³), desde que $g \in H^{3/2}(\partial\Omega)$, $f \in L^2(\Omega)$.

7.2.2 Condição de Neumann

No caso do problema de Neumann homogéneo $\partial_n u = 0$, sobre $\partial\Omega$, e a solução é apenas única a menos de constante aditiva. Neste caso devemos considerar o espaço $H^1(\Omega)/\mathbf{R}$ em que considerando a relação de equivalência $u \sim v \iff u - v = c$ em que c é uma constante real.

Este espaço é um caso particular do espaços $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$. Repare-se que se $m = 0$, temos exactamente $H^1(\Omega)/\mathbf{P}_0 = H^1(\Omega)/\mathbf{R}$. Portanto podemos recuperar os resultados já provados e concluir por exemplo que a seminorma $|v|_{1,\Omega}^*$ é a seminorma $|v|_{1,\Omega}$ que é equivalente à norma (lema de Bramble-Hilbert).

¹Também se pode estabelecer o resultado para domínios de classe $C^{1,1}$, ou seja, C^1 com derivadas Lipschitz contínuas.

²Consideramos $\partial\Omega = \bigcup_{k=1}^N \Gamma_k$, em que Γ_k são segmentos de recta. Desta forma, quando escrevemos $g \in H^{3/2}(\partial\Omega)$ significa que $g|_{\Gamma_k} \in H^{3/2}(\Gamma_k)$.

³No caso tridimensional, o resultado correspondente para poliedros é válido apenas se $g = 0$ (cf. [9]).

Assim, a formulação variacional pode ser feita usando o espaço $H^1(\Omega)/\mathbf{R}$, correspondendo a

$$\begin{aligned} \text{Encontrar } u &\in H^1(\Omega)/\mathbf{R} : \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v &= \int_{\Omega} f v, \forall v \in H^1(\Omega)/\mathbf{R}. \end{aligned}$$

Não querendo voltar a repetir a equivalência entre a solução fraca e a solução forte, aqui é importante reparar como se conclui que a derivada normal é nula na fronteira, começando por notar que é necessário assumir que $u \in H^2(\Omega)$ para que o traço normal $\partial_n u \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ e assim seja uma função. A formulação variacional é também possível usando o espaço $H^1(\Omega)$, pelo que vamos supor que $u \in H^2(\Omega)$ é solução do problema

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v, \forall v \in H^1(\Omega).$$

Pela fórmula de Green temos

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = - \int_{\Omega} \Delta u v + \int_{\partial\Omega} \partial_n u v = \int_{\Omega} f v + \int_{\partial\Omega} \partial_n u v.$$

Subtraindo as duas igualdades, conclui-se que

$$\int_{\partial\Omega} \partial_n u v = 0, \forall v \in H^1(\Omega),$$

como os traços de funções $H^1(\Omega)$ são funções $H^{1/2}(\partial\Omega)$, que incluem funções $C_c^\infty(\partial\Omega)$, que são densas em $L^2(\partial\Omega)$. Concluimos que $\int_{\partial\Omega} \partial_n u v = 0, \forall v \in L^2(\partial\Omega)$, e portanto $\partial_n u = 0, \text{ a.e. } \partial\Omega$.

- *Condições não homogêneas.*

Suponhamos que $\partial_n u = g$. Neste caso a formulação variacional é ligeiramente diferente.

Da fórmula de Green obtemos,

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = - \int_{\Omega} \Delta u v + \int_{\partial\Omega} \partial_n u v = \int_{\Omega} f v + \int_{\partial\Omega} g v,$$

pelo que estabelecemos o problema variacional

$$\begin{aligned} \text{Encontrar } u &\in H^1(\Omega)/\mathbf{R} : \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v &= \int_{\Omega} f v + \int_{\partial\Omega} g v, \forall v \in H^1(\Omega)/\mathbf{R}. \end{aligned}$$

A forma bilinear é a mesma e o espaço também. A única diferença é que a forma linear passou a ser

$$l(v) = \int_{\Omega} f v + \int_{\partial\Omega} g v.$$

Regularidade. O caso do problema de Neumann é semelhante ao caso Dirichlet, obtemos uma solução forte $u \in H^2(\Omega)$, quando o domínio tem fronteira regular ou é um polígono convexo, desde que $g \in H^{1/2}(\partial\Omega), f \in L^2(\Omega)$.

7.2.3 Condições mistas Dirichlet-Neumann

• Separamos a fronteira em duas partes $\partial\Omega = \gamma \cup (\partial\Omega \setminus \gamma)$. Na parte γ consideramos condições de Dirichlet, e na parte restante condições de Neumann. Começamos por ver o caso em que ambas são nulas, ou seja

$$\begin{cases} u = 0, & \text{sobre } \gamma, \\ \partial_n u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \gamma, \end{cases}$$

o problema é colocado no espaço

$$H_{0,\gamma}^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ sobre } \gamma\},$$

que é um subespaço fechado de $H^1(\Omega)$ verificando-se $H_0^1(\Omega) \subset H_{0,\gamma}^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$.

O problema variacional consiste em encontrar $u \in H_{0,\gamma}^1(\Omega)$:

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v, \forall v \in H_{0,\gamma}^1(\Omega).$$

Exercício: Mostrar que os problemas são equivalentes se $u \in H^2(\Omega) \cap H_{0,\gamma}^1(\Omega)$. Verificar as condições de aplicabilidade do Teorema de Lax-Milgram.

Observação: Aquando da discretização, o espaço V_h é neste caso gerado também por funções base que não se anulam na fronteira, pelo que não se devem apenas considerar funções de base ψ_i para nós x_i interiores, mas também para os nós na fronteira que não tem condições de Dirichlet nulas. A condição de Neumann nula não é imposta na fronteira. Ela resulta do facto de se ter pela fórmula de Green

$$\int_{\Omega} f v = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = - \int_{\Omega} \Delta u v + \int_{\partial\Omega} \partial_n u v = \int_{\Omega} f v + \int_{\partial\Omega \setminus \gamma} \partial_n u v,$$

para $v \in H_{0,\gamma}^1(\Omega)$, já que $v = 0$ em γ . Conclui-se que,

$$\int_{\partial\Omega \setminus \gamma} \partial_n u v = 0, \forall v \in H^1(\Omega),$$

e como no caso das condições de Neumann, concluímos que $\int_{\partial\Omega \setminus \gamma} \partial_n u v = 0, \forall v \in L^2(\partial\Omega \setminus \gamma)$, e portanto $\partial_n u = 0, \text{æ. } \partial\Omega \setminus \gamma$.

• No caso em que as condições não são homogéneas, ou seja,

$$\begin{cases} u = g_0, & \text{sobre } \gamma, \\ \partial_n u = g_1, & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \gamma, \end{cases}$$

o problema variacional é colocado no espaço $H_{0,\gamma}^1(\Omega)$, e consiste em

$$\begin{cases} \text{Encontrar } u \in H^1(\Omega) : \\ u - \tilde{g}_0 \in H_{0,\gamma}^1(\Omega), \\ \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v + \int_{\partial\Omega \setminus \gamma} g_1 v, \forall v \in H_{0,\gamma}^1(\Omega). \end{cases}$$

Quando $\gamma = \partial\Omega$ obtemos a formulação variacional já encontrada para o problema de Dirichlet, e quando $\gamma = \emptyset$ encontramos a formulação variacional em $H^1(\Omega)$ para o problema de Neumann.

Regularidade. No problema de Dirichlet-Neumann há uma dificuldade com os resultados de regularidade, já que para um domínio poligonal convexo Ω , com $f \in L^2(\Omega)$ não é normalmente possível obter solução forte $u \in H^2(\Omega)$, ao contrário do que acontecia no caso do problema de Dirichlet.

7.3 Outros Problemas Elípticos

7.3.1 Bilaplaciano (equação das placas)

O método dos elementos finitos pode aplicar-se a operadores elípticos de ordem $p > 2$, como é o caso do bilaplaciano, $\Delta^2 u = \Delta(\Delta u)$. No caso bidimensional,

$$\Delta^2 u = (\partial_{xxxx}^4 + 2\partial_{xxyy}^4 + \partial_{yyyy}^4)u.$$

Um problema de fronteira clássico para o bilaplaciano é

$$\begin{cases} \Delta^2 u = f & \text{em } \Omega \\ u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \\ \partial_n u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

a que se associa a formulação variacional em $H_0^2(\Omega)$

$$\int_{\Omega} \Delta u \Delta v = \int_{\Omega} f v, \quad \forall v \in H_0^2(\Omega).$$

Esta formulação variacional pode ser obtida através de uma aplicação da fórmula de Green. Vejamos que, dado $f \in L^2(\Omega)$, se $u \in H^4(\Omega) \cap H_0^2(\Omega)$ é solução fraca (solução do problema variacional) então é também solução forte do problema.

Como $u \in H_0^2(\Omega)$, então os seus traços verificam $u = 0, \partial_n u = 0$ (ver apêndice).

Efectuando a substituição $w = \Delta u$, que é uma função de $H^2(\Omega)$, podemos considerar qualquer $v \in C_c^\infty(\Omega) \subset H_0^2(\Omega)$, para obter

$$\int_{\Omega} \Delta u \Delta v = \int_{\Omega} w \Delta v = - \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v + \int_{\partial\Omega} w \partial_n v$$

e

$$\int_{\Omega} \Delta w v = - \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v + \int_{\partial\Omega} v \partial_n w.$$

Assim,

$$\int_{\Omega} \Delta u \Delta v = \int_{\Omega} \Delta w v - \int_{\partial\Omega} v \partial_n w + \int_{\partial\Omega} w \partial_n v.$$

Como $v \in C_c^\infty(\Omega)$, as funções têm suporte compacto e os traços verificam $v = 0, \partial_n v = 0$ em $\partial\Omega$, portanto ficamos com

$$\int_{\Omega} f v = \int_{\Omega} \Delta u \Delta v = \int_{\Omega} \Delta^2 u v,$$

ou seja,

$$\int_{\Omega} (\Delta^2 u - f)v = 0, \quad \forall v \in C_c^\infty(\Omega),$$

pelo que se conclui que $\Delta^2 u - f \in L^2(\Omega)$ é uma função nula, usando o Teorema.4.2.2.

Repetindo os passos no sentido inverso, partindo de $\Delta^2 u = f$, é fácil concluir que

$$\int_{\Omega} f v = \int_{\Omega} \Delta u \Delta v, \quad \forall v \in C_c^\infty(\Omega).$$

Portanto, por densidade de $C_c^\infty(\Omega)$ em $H_0^2(\Omega)$, em que podemos estabelecer um produto interno dado por

$$\langle u, v \rangle_{H_0^2(\Omega)} = \int_{\Omega} \Delta u \Delta v,$$

temos

$$\int_{\Omega} f v = \int_{\Omega} \Delta u \Delta v, \forall v \in H_0^2(\Omega),$$

e se u é solução forte então também será solução fraca.

Observação: Referimos que em $H_0^2(\Omega)$ podemos estabelecer um produto interno dado por

$$\langle u, v \rangle_{H_0^2(\Omega)} = \int_{\Omega} \Delta u \Delta v,$$

isso resulta da generalização da desigualdade de Poincaré para $H_0^m(\Omega)$ com $m \geq 1$ (também designada desigualdade de Poincaré-Friedrichs):

• *Seja Ω um domínio conexo e limitado numa direcção. Existe uma constante $C_{m,\Omega} > 0$ tal que*

$$\|v\|_{m,\Omega} \leq C_{m,\Omega} |v|_{m,\Omega}, \quad \forall v \in H_0^m(\Omega).$$

Assim, temos uma equivalência entre a norma e a seminorma, e é fácil mostrar que

$$|v|_{2,\Omega} = \|\Delta v\|_{0,\Omega},$$

integrando por partes.

Exercício: Mostrar que o problema variacional está bem posto em $H_0^2(\Omega)$, supondo $f \in H^{-2}(\Omega)$.

7.3.2 Elasticidade linear

Consideremos o problema de Dirichlet homogéneo associado à equação da elastoestática linear

$$\begin{cases} -\Delta^* \mathbf{u} = \mathbf{f} & \text{em } \Omega, \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{sobre } \partial\Omega, \end{cases}$$

em que $\nabla^* \mathbf{u} = \boldsymbol{\sigma}_{ij}(\mathbf{u}) = \lambda \operatorname{div}(\mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$, é o tensor das tensões e em que $\Delta^* \mathbf{u} = \nabla \cdot \nabla^* \mathbf{u}$. Definindo também $\partial_n^* \mathbf{u} = \nabla^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, temos uma notação que é consistente simbolicamente com a segunda fórmula de Green, tendo-se

$$\int_{\Omega} \Delta^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - \int_{\Omega} \Delta^* \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = \int_{\partial\Omega} \partial_n^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - \int_{\partial\Omega} \partial_n^* \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}.$$

O correspondente à primeira fórmula de Green é ligeiramente diferente, pois temos

$$\int_{\Omega} \Delta^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \int_{\Omega} \nabla^* \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{v} = \int_{\partial\Omega} \partial_n^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v},$$

em que usamos a notação $\nabla^+ \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)$, quantidade que representa o tensor de deslocamentos e também é vulgarmente representada por $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{v})$. A matriz $\nabla^+ \mathbf{v}$ representa

a parte simétrica da matriz $\nabla \mathbf{v}$, notando que $\nabla \mathbf{v} = \nabla^+ \mathbf{v} + \nabla^- \mathbf{v}$, onde $\nabla^- \mathbf{v}$ representa a parte anti-simétrica dada por $\nabla^- \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T)$. Finalmente, notamos que o produto representado por $:$ é o produto tensorial, $a : b = \sum_{i,j} a_{ij} b_{ij}$.

Como podemos escrever $\nabla^* \mathbf{u} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} + 2\mu \nabla^+ \mathbf{u}$, e reparando que $\mathbf{I} : \nabla^+ \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{v}$, obtemos

$$\nabla^* \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{v} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})(\nabla \cdot \mathbf{v}) + 2\mu(\nabla^+ \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{v}),$$

havendo assim uma simetria neste termo, ou seja, $\nabla^* \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{v} = \nabla^* \mathbf{v} : \nabla^+ \mathbf{u}$, e também positividade, $\nabla^* \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{u} \geq 0$.

Assumindo que $\mathbf{v} \in H_0^1(\Omega)^d = \{\mathbf{v} \in (H^1(\Omega))^d : \mathbf{v} = 0 \text{ em } \partial\Omega\}$, tem-se

$$-\int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} + \int_{\Omega} \nabla^* \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{v} = 0$$

e fica definida a forma bilinear em $H_0^1(\Omega)^d \times H_0^1(\Omega)^d$,

$$b(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \nabla^* \mathbf{u} : \nabla^+ \mathbf{v},$$

que representa o *trabalho de deformação do sólido elástico*, e a forma linear

$$l(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v},$$

que representa o *trabalho das forças exteriores*.

Como há simetria, podemos interpretar a resolução do problema variacional como sendo a minimização da *energia potencial elástica*,

$$J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \nabla^* \mathbf{v} : \nabla^+ \mathbf{v} - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v},$$

cujos primeiro termo, que representa a *energia de deformação*, é subtraído de um segundo termo, que representa a *energia potencial das forças exteriores*.

Estamos agora no quadro funcional para aplicar a teoria desenvolvida. Convém notar que a desigualdade de Poincaré que nos foi útil para podermos mostrar a coercividade é aqui substituída pela *desigualdade de Korn*,

$$\exists C_{\Omega} > 0 : \|\mathbf{v}\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C_{\Omega} (\|\nabla^+ \mathbf{v}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{v}\|_{L^2(\Omega)}^2), \forall \mathbf{v} \in (H^1(\Omega))^d,$$

podendo obter-se (cf. [15]),

$$\exists c > 0 : \|\nabla^+ \mathbf{v}\|_{L^2(\Omega)} \geq c \|\mathbf{v}\|_{H^1(\Omega)}, \forall \mathbf{v} \in H_0^1(\Omega)^d,$$

notando que a norma L^2 da matriz $\nabla^+ \mathbf{v}$ é dada pela soma quadrática das normas L^2 de cada uma das componentes.

Esta desigualdade permite concluir que, definindo a seminorma

$$|\mathbf{v}|_{1,+,\Omega} = \|\nabla^+ \mathbf{v}\|_{L^2(\Omega)},$$

se trata uma norma equivalente à norma de $(H^1(\Omega))^d$ no espaço das funções $H_0^1(\Omega)^d$ e estamos nas condições de aplicar o método de Ritz.

Parte IV
Apêndices

Capítulo 8

Complementos de apoio

8.1 Fórmulas Integrais

Relembramos alguns operadores diferenciais importantes, usando a notação¹ $\nabla = (\partial_1, \dots, \partial_d)$

$$\text{Gradiente: } \nabla u = \mathbf{grad}(u) = (\partial_1 u, \dots, \partial_d u)$$

$$\text{Divergência: } \nabla \cdot \mathbf{u} = \text{div}(\mathbf{u}) = \partial_1 u_1 + \dots + \partial_d u_d$$

$$\text{Rotacional: } \nabla \times \mathbf{u} = \mathbf{rot}(\mathbf{u}) = (\partial_1, \dots, \partial_d) \times (u_1, \dots, u_d)$$

$$\text{Laplaciano: } \Delta u = \nabla \cdot (\nabla u)$$

e propriedades da sua composição

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{rot } \mathbf{u} &= \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) = 0, \\ \mathbf{rot } \mathbf{rot } \mathbf{u} &= \mathbf{grad } \text{div } \mathbf{u} - \text{div } \mathbf{grad } \mathbf{u}, \\ \text{ou seja, } \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \Delta \mathbf{u}. \end{aligned}$$

¹Na literatura inglesa o rotacional aparece normalmente designado por **curl**.
Relembre-se que o produto externo (tridimensional...) é dado pelo determinante

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = \det \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{bmatrix}$$

em que \mathbf{e}_i são os 3 vectores da base canónica.

Consequentemente

$$\mathbf{rot } \mathbf{v} = \nabla \times \mathbf{v} = \det \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ \partial_1 & \partial_2 & \partial_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{bmatrix}.$$

Note-se que da teoria de determinantes, podemos retirar imediatamente que $\mathbf{u} \times \mathbf{v} = -\mathbf{v} \times \mathbf{u}$, e também lembramos que $\mathbf{u} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{w})$ não é necessariamente igual a $(\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \times \mathbf{w}$, ou seja, não há associatividade no produto externo.

Isto significa, por exemplo que apesar de $\mathbf{u} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{v})$ ser sempre nulo, isso pode não acontecer com $(\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \times \mathbf{v}$. É também imediato que os produtos mistos $\mathbf{u} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v})$ e $\mathbf{v} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v})$ são sempre nulos.

Uma fórmula bastante útil e importante:

$$\mathbf{u} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w}.$$

Serão também úteis algumas propriedades imediatas para o produto de funções:

$$\begin{aligned}\nabla(uv) &= u\nabla v + v\nabla u \\ \operatorname{div}(u\mathbf{v}) &= u\operatorname{div}(\mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla u \\ \Delta(uv) &= u\Delta v + 2\nabla u \cdot \nabla v + v\Delta u.\end{aligned}$$

Enunciamos de seguida alguns teoremas do cálculo integral.

Teorema 8.1.1 (Gauss). *Seja Ω um domínio aberto limitado com fronteira $\partial\Omega$ regular (ou seja, sem ângulos, de forma a que exista sempre normal), então para uma função $u \in C^1(\bar{\Omega})$, verifica-se*

$$\int_{\Omega} \nabla u = \int_{\partial\Omega} u \mathbf{n}$$

em que n_i é a componente i do vector normal \mathbf{n} (orientado de forma a apontar sempre para o exterior do domínio Ω).

Teorema 8.1.2 (Divergência). *Nas condições anteriores, verifica-se que se tivermos uma função vectorial $\mathbf{u} \in (C^1(\bar{\Omega}))^d$*

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}) = \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}.$$

• *Caso particular:*

$$\int_{\Omega} \Delta v = \int_{\partial\Omega} \partial_n v.$$

Este é o caso particular em que consideramos $\mathbf{u} = \nabla v$, já que

$$\Delta = \operatorname{div}\nabla, \text{ e que } \mathbf{n} \cdot \nabla = \partial_n.$$

• *Casos particulares unidimensionais:*

No caso unidimensional $d = 1$, $\Omega =]a, b[$, $\partial\Omega = \{a, b\}$, tendo-se $\mathbf{n}_a = -1$, $\mathbf{n}_b = 1$, portanto como havendo uma só dimensão $\operatorname{div}(u) = u'$, temos

$$\int_{]a,b[} u' = \int_{\{a,b\}} \mathbf{n} u,$$

em que o integral é tomado no sentido de uma medida de contagem $\int_{\{a,b\}} f = f(a) + f(b)$. No caso concreto $\int_{\{a,b\}} \mathbf{n} u = \mathbf{n}_a u(a) + \mathbf{n}_b u(b) = u(b) - u(a)$, e ficamos com a usual fórmula de Barrow

$$\int_a^b u' = u(b) - u(a).$$

• *Um caso análogo discreto:*

Outro exemplo interessante é aquele em que se considera a propriedade telescópica no caso de sucessões,

$$\sum_{k=a}^{b-1} u_{k+1} - u_k = u_b - u_a,$$

usando a medida de contagem e entendendo a diferenciação como $(\mathbf{d}u)_k = u_{k+1} - u_k$, e o domínio como sendo $\Omega = \{a, \dots, b-1\}$, cuja fronteira seria neste caso $\partial\Omega = \{a, b\}$ podemos interpretar a propriedade telescópica como um caso particular do teorema da divergência².

Num caso que nos pode interessar, o análogo discreto do teorema da divergência é válido, considerando por exemplo a aproximação da derivada através de uma derivação discreta (diferença finita):

$$u' \sim \frac{u(x_k + h) - u(x_k)}{h} = \frac{u_{k+1} - u_k}{h} = (\mathbf{d}_h u)_k$$

em que $h = x_{k+1} - x_k$ é uma distância constante. Como é claro, se quisermos obter o operador inverso de \mathbf{d}_h , somos levados a considerar uma soma ('integral discreto'), já que

$$(\mathbf{d}_h u)_k = v_k \Rightarrow \frac{u_{k+1} - u_k}{h} = v_k \Rightarrow u_{k+1} = u_k + v_k h$$

ou seja,

$$u_k = h \sum_{m=0}^{k-1} v_m.$$

Ao efectuarmos este integral discreto entre a e b , somando através de N pontos igualmente espaçados $x_k = a + (b-a)\frac{k}{N}$ teremos $h = (b-a)/N$, e portanto sendo $a = x_0, b = x_N$, consideramos o integral discreto

$$\int_{\{a, \dots, b\}} v_k = h \sum_{k=0}^{N-1} v_k.$$

Assim

$$\int_{\{a, \dots, b\}} (\mathbf{d}_h u)_k = u_b - u_a,$$

já que esta igualdade corresponde no fundo a reafirmar a identidade telescópica:

$$h \sum_{k=0}^{N-1} \frac{u_{k+1} - u_k}{h} = u_b - u_a.$$

Exercício: Prove o análogo discreto do Teorema da Divergência para duas dimensões num quadrado.

- *Integração por partes:*

$$\int_{\Omega} u \nabla v = \int_{\partial\Omega} (uv) \mathbf{n} - \int_{\Omega} v \nabla u$$

resulta de

$$\int_{\Omega} u \nabla v + \int_{\Omega} v \nabla u = \int_{\Omega} \nabla (uv) = \int_{\partial\Omega} (uv) \mathbf{n}.$$

Considerando $\mathbf{v} = \nabla v$, resultam imediatamente as conhecidas fórmulas de Green, que também podem ser encaradas como fórmulas de integração por partes. Apresentamos inicialmente estas fórmulas no contexto clássico e mais à frente no contexto dos espaços de Sobolev.

²Note-se que considerar aqui $\Omega = \{a, \dots, b-1\}$ e não $\Omega = \{a+1, \dots, b\}$ ou $\Omega = \{a+1, \dots, b-1\}$ deve-se ao facto de se definir a diferenciação progressiva $(\mathbf{d}u)_k = u_{k+1} - u_k$ e não a regressiva $(\mathbf{d}u)_k = u_k - u_{k-1}$ ou a centrada $(\mathbf{d}u)_k = \frac{1}{2}(u_{k+1} - u_{k-1})$.

Teorema 8.1.3 (Fórmulas de Green) Seja $u \in C^1(\Omega)$, $v \in C^2(\bar{\Omega})$, Ω aberto limitado com fronteira regular.

$$\int_{\Omega} u \Delta v = \int_{\partial\Omega} u \partial_n v - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \quad (1^a \text{ Fórmula de Green})$$

Sejam $u, v \in C^2(\bar{\Omega})$.

$$\int_{\Omega} u \Delta v - \int_{\Omega} v \Delta u = \int_{\partial\Omega} u \partial_n v - \int_{\partial\Omega} v \partial_n u \quad (2^a \text{ Fórmula de Green})$$

Demonstração: Para a 1a. fórmula basta considerar $\mathbf{v} = \nabla v$, como já foi dito. A 2a. fórmula resulta de aplicar a primeira trocando os papéis de u e v e depois subtrair.

8.2 Espaços de Hilbert e Dualidade

Trabalhamos habitualmente com noções em espaços de Hilbert, ou seja espaços vectoriais munidos de produto interno³ que são completos (ou seja, em que as sucessões de Cauchy são convergentes na norma associada ao produto interno, isto é na norma $\|u\| = \sqrt{(u, u)}$).

Como exemplos de espaços de Hilbert temos o espaço $L^2(\Omega)$, que está munido do produto interno

$$(u, v)_0 = \int_{\Omega} u(x)v(x)dx,$$

ou os espaços de Sobolev $H^m(\Omega)$, que estão munidos de um produto interno semelhante, definido à custa das derivadas generalizadas, por exemplo em $H^1(\Omega)$ temos

$$(u, v)_1 = \int_{\Omega} u(x)v(x)dx + \int_{\Omega} \nabla u(x) \cdot \nabla v(x)dx.$$

De notar que um dos interesses dos espaços de Sobolev é justamente o facto de se poder trabalhar com um espaço que tenha produto interno e que seja completo. Com efeito, o espaço das funções contínuas $C(\Omega)$ é um espaço completo para a norma $\|u\|_{\infty} = \max_{x \in \Omega} |u(x)|$, mas esta norma não resulta de nenhum produto interno. Por outro lado, se considerarmos o produto interno definido (como em cima) por $(u, v)_0 = \int_{\Omega} u(x)v(x)dx$ verifica-se que não é um espaço completo para a norma $\|u\| = \sqrt{(u, u)_0}$, já que poderemos ter sucessões de Cauchy de funções que não convergem (nessa norma) para nenhuma função contínua... com efeito, acerca do limite dessas funções podemos dizer que pertence ainda a $L^2(\Omega)$, e é por isso que esse espaço é considerado preferencialmente.

O mesmo panorama acontece para espaços que considerem normas em que apareçam derivadas. Uma norma para $C^1(\Omega)$ será $\|u\|_{1, \infty} = \|u\|_{\infty} + \|\nabla u\|_{\infty}$, mas mais uma vez não resulta de nenhum produto interno.

Dualidade

³Algumas propriedades importantes do produto interno:

- i) Desigualdade de Cauchy-Schwarz, i.e. $|(u, v)| \leq \|u\| \|v\|$
- ii) Igualdade do paralelogramo, i.e. $\|u + v\|^2 + \|u - v\|^2 = 2(\|u\|^2 + \|v\|^2)$

Uma noção que aparece frequentemente ao longo do texto é a noção de dualidade. Para compreendermos melhor de que se trata, comecemos por relembrar que uma forma linear num espaço vectorial E é uma aplicação linear que transforma elementos de E em números reais. É assim um processo linear que permite relacionar elementos de um espaço abstracto (... eventualmente bastante complicado) com números reais. Isto traz a vantagem de passarmos a trabalhar numa estrutura 'simpática', os números reais, e aplicarmos as propriedades aí conhecidas... para além disso esta passagem assume-se linear, o que facilita muito. Outras maneiras de passar de um espaço abstracto para os reais, bem conhecidas, são efectuadas através da norma (mas aí não há linearidade) ou através de um produto interno (que constitui um exemplo de forma linear... o problema é que em muitos dos espaços não está definido o produto interno).

Sendo E um espaço de Banach (normado e completo) definimos o seu dual (topológico) E' como sendo o espaço das formas lineares (contínuas⁴) $E \rightarrow \mathbf{R}$. A noção de forma linear substitui muitas vezes a noção de produto interno, quando o espaço de Banach não é Hilbert, ou seja, quando a norma não é resultante de nenhum produto interno. Se se tratar de um espaço de Hilbert (com produto interno (\cdot, \cdot)) temos o Teorema de Representação de Riesz. Isto permite identificar o dual de um espaço de Hilbert com ele próprio.

No caso de não se tratar de um espaço de Hilbert, as formas lineares não resultam de produtos internos, generalizando-se assim a noção de produto interno, de tal forma, que é habitual escrever-se $\langle T, x \rangle$ ao invés de $T(x)$, já que se verificam as propriedades habituais dos produtos internos, por exemplo,

$$\langle \alpha T + \beta U, x \rangle = \alpha \langle T, x \rangle + \beta \langle U, x \rangle, \quad \langle T, \alpha x + \beta y \rangle = \alpha \langle T, x \rangle + \beta \langle T, y \rangle.$$

A norma definida no espaço dual E' é dada por

$$\|T\|_{E'} = \sup_{x \neq 0} \frac{|T(x)|}{\|x\|_E}.$$

Nota: No caso de espaços de Hilbert H como há uma isometria

$$\|\tau\|_H = \|T\|_{H'} = \sup_{x \neq 0} \frac{|(\tau, x)_H|}{\|x\|_H}.$$

Estas noções não são propriamente triviais, já que só são verdadeiramente úteis em espaços razoavelmente complicados, pois num espaço de dimensão finita como \mathbf{R}^d existe produto interno e as formas lineares resultam sempre da multiplicação por um vector. Com efeito, as formas lineares são sempre da forma

$$T(x_1, \dots, x_d) = \tau_1 x_1 + \dots + \tau_d x_d,$$

e é imediato que $T(x) = \tau \cdot x$, em que $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_d)$.

Sendo E um espaço vectorial, com uma base e_1, \dots, e_n, \dots define-se a base dual de E como sendo T_1, \dots, T_n, \dots :

$$T_i(e_j) = \delta_{ij}$$

e que constitui uma base de E' pois

$$T_i(x) = T\left(\sum x_j e_j\right) = \sum x_j T_i(e_j) = x_i,$$

⁴Se não assumirmos que as formas lineares são contínuas trata-se apenas do dual algébrico.

e assim qualquer forma linear é do tipo $T(x) = \tau_1 x_1 + \dots + \tau_n x_n + \dots$ logo

$$T(x) = \tau_1 T_1(x) + \dots + \tau_n T_n(x) + \dots$$

8.3 Algumas noções em Espaços de Sobolev

Para introduzirmos de forma intuitiva alguns resultados acerca de espaços de Sobolev, começamos por relembrar alguns resultados acerca de integração, acerca de espaços L^p , com especial foco para o espaço L^2 onde está bem definido o produto interno habitual.

8.3.1 Espaços L^p

Os espaços $L^p(\Omega)$ são espaços funcionais cujos elementos são funções u definidas em Ω que verificam

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |u|^p dx \right)^{1/p} < \infty,$$

onde $p \geq 1$. Incluímos ainda o espaço $L^\infty(\Omega)$ das funções u :

$$\|u\|_{\infty, \Omega} = \sup_{x \in \Omega} \text{ess } |u(x)| < \infty.$$

Todos estes espaços são espaços de Banach e se $p > 1$ o espaço dual de $L^p(\Omega)$ será $L^q(\Omega)$, em que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$.

Exemplo. Seja $\Omega =]0, 1[$, vejamos quais as condições sobre α de forma a que a função $\mu(x) = x^\alpha$ esteja em $L^p(]0, 1[)$.

Para que $f \in L^p$ é necessário que exista

$$\int_0^1 |x^\alpha|^p dx,$$

e isso acontece se o expoente verificar $\alpha p > -1$. Em particular, vemos que $\frac{1}{\sqrt{x}}$ não pertence a L^2 , pois $(x^{-\frac{1}{2}})^2$ não é integrável, no entanto $\frac{1}{\sqrt[3]{x}} \in L^2(0, 1)$, pois $(x^{-\frac{1}{3}})^2$ já é integrável. Um exemplo de função $L^2(0, 1)$ é dado na figura em anexo.

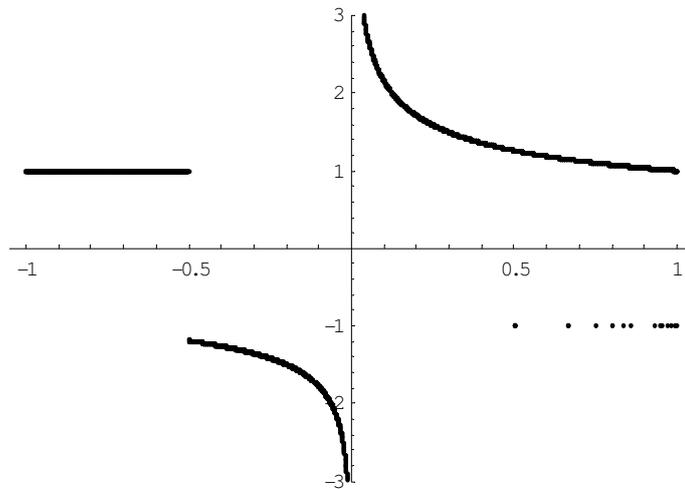


Figura 8.3.1: Gráfico da função $f(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in]-1, 0.5] \\ \frac{-1}{\sqrt[3]{x}} & \text{se } x \in]-0.5, 0[\\ 0 & \text{se } x = 0 \\ \frac{1}{\sqrt[3]{x}} & \text{se } x \in]0, 1[\wedge x \neq \frac{n-1}{n} \\ -1 & \text{se } x \in]0, 1[\wedge x = \frac{n-1}{n} \end{cases}$

Outra noção importante é a noção de traço, que no caso unidimensional pode ser encarada como a noção de limite à esquerda e à direita ponderado com a medida de Lebesgue. Reparamos que a função descrita no gráfico, para $x = -0.5$ tem como limite à esquerda 1 e como limite à direita -1 . No ponto $x = 0$, não tem limite nem à esquerda, nem à direita. Finalmente, no ponto $x = 1$ tem dois sublimites. Se considerarmos a sucessão $x_n = \frac{n-1}{n} \rightarrow 1$, obtemos $\lim f(x_n) = -1$, mas se considerarmos uma qualquer sucessão $y_n \rightarrow 1$ que não tome os valores $\frac{n}{n-1}$ então é claro que $\lim f(y_n) = 1$. Qual o traço da função em $x = -1$? Como o conjunto $\{x = \frac{n-1}{n}\}$ tem medida de Lebesgue nula, o valor considerado é 1. Note-se que pouco importa o valor definido no ponto, o valor de $f(-1)$ poderia ser qualquer. O traço da função num ponto não é uma noção localizada num único ponto, mas sim uma noção que pretende determinar o valor com significado (relativamente à medida) nesse ponto face à sua vizinhança.

As funções L^p podem nem ter traço, como é o caso de f no ponto $x = 0$. Sabemos que $f(0) = 0$, mas os traços, à esquerda ou à direita não estão definidos, pois a função tende para $-\infty$ à esquerda e para $+\infty$ à direita.

8.3.2 O espaço $H^1(a, b)$

Introduzimos agora um subespaço de $L^2(a, b)$, através da introdução de uma noção generalizada de derivada que nos permite considerar derivadas de funções não diferenciáveis no sentido clássico. A noção de derivação generalizada aparece ligada ao cálculo integral e consequentemente à medida que se considera. A ideia é considerar funções teste $\phi \in C_c^\infty(a, b)$ e aproveitar a propriedade da fórmula de integração por partes em $]a, b[$ já que essas funções, tendo suporte compacto em $]a, b[$, são nulas nos extremos. Portanto,

$$\int_a^b u'(x)\phi(x)dx = - \int_a^b u(x)\phi'(x)dx, \forall \phi \in C_c^\infty(a, b).$$

Um exemplo importante consiste em considerar $u = H$,

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq 0 \\ 1 & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

que é a denominada função de Heaviside. H não tem derivada em 0 no sentido clássico, mas generalizando a igualdade anterior podemos escrever

$$\int_{-a}^a H'(x)\phi(x)dx = - \int_{-a}^a H(x)\phi'(x)dx = - \int_{-a}^0 0\phi'(x)dx - \int_0^a 1\phi'(x)dx = -(\phi(a) - \phi(0)) = \phi(0),$$

já que ϕ tem suporte compacto em $] - a, a[$ e portanto $\phi(a) = 0$.

Para designar a derivada da função de Heaviside consideramos um símbolo δ que é o delta de Dirac, definido de forma a que

$$\int_a^b \delta(x - y)\phi(x)dx = \phi(y), \forall \phi \in C_c^\infty(a, b)$$

e reparamos que $H'(x) = \delta(x)$, fazendo $y = 0$.

Note-se que δ não é uma função, não existe nenhuma função tal que

$$\int_a^b \delta(x)\phi(x)dx = \phi(0), \quad \forall \phi \in C_c^\infty(a, b),$$

basta pensar que podemos ter ϕ com máximo absoluto em $\phi(0) = 1$ e cujo suporte seja suficientemente pequeno $[-\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}]$. Como

$$\left| \int_a^b \delta(x)\phi(x)dx \right| \leq \varepsilon \max_{x \in [-\varepsilon, \varepsilon]} |\delta(x)|,$$

caso existisse uma tal função δ o seu máximo em $[-\varepsilon, \varepsilon]$ deveria crescer de forma a evitar que o integral fosse nulo, já que deveria valer $\phi(0) = 1$. Devido a isto, na prática, é frequente encarar o delta de Dirac como uma ‘função’ que é nula para $x \neq 0$ e que ‘vale infinito’ em $x = 0$.

Derivada generalizada. A derivada generalizada consiste assim num funcional $u' : C_c^\infty(a, b) \rightarrow \mathbf{R}$ dado por

$$\langle u', \phi \rangle = - \int_a^b u(x)\phi'(x)dx,$$

reparando que é suficiente que u seja integrável para que o integral esteja bem definido.

O espaço $H^1(a, b)$. Os elementos de $H^1(a, b)$ são funções que verificam $u \in L^2(a, b)$ e cuja derivada generalizada u' se pode identificar com uma função de $L^2(a, b)$. Este espaço está munido do produto interno definido por

$$\langle u, v \rangle_{H^1(a, b)} = \int_a^b uv + \int_a^b u'v',$$

e é completo para a norma associada

$$\|u\|_1 = \left(\int_a^b |u|^2 + \int_a^b |u'|^2 \right)^{1/2}.$$

Exemplos.

1) Vejamos agora para que valores de α a função $\mu(x) = x^\alpha$ pertence a $H^1(0, 1)$. Já vimos que se $\alpha > -\frac{1}{2}$ a função $\mu \in L^2(0, 1)$. Como $\mu'(x) = \alpha x^{\alpha-1}$ é uma função, então concluímos que $\mu' \in L^2(0, 1)$ se $\alpha = 0$ ou $\alpha - 1 > -\frac{1}{2}$. Portanto temos $\mu \in H^1(0, 1)$ se $\alpha > \frac{1}{2}$ ou $\alpha = 0$.

2) A função de Heaviside não pertence a $H^1(0, 1)$ porque a sua derivada é o delta de Dirac que não pode ser identificado a nenhuma função.

Proposição. As funções de $H^1(a, b)$ são contínuas.

Demonstração.

Consideremos dois pontos $x, y \in (a, b)$, $u' \in L^2(x, y) \subset L^1(x, y)$. Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$|u(y) - u(x)|^2 = \left| \int_x^y u'(t)dt \right|^2 \leq |x - y| \int_x^y |u'(t)|^2 dt \leq |x - y| \|u\|_1^2,$$

conclui-se imediatamente a continuidade uniforme. \square

Observação. Note-se que ao dizer que as funções de $H^1(a, b)$ são contínuas, isto significa apenas que existe um representante contínuo na classe de equivalência a que a função pertence (classe que engloba as funções iguais a menos de conjuntos de medida nula). Por exemplo, a função definida em $] - 1, 1[$ por

$$f(x) = \begin{cases} |x|^{3/4} & \text{se } x \neq \frac{n-1}{n} \\ -1 & \text{se } x = \frac{n-1}{n} \end{cases}$$

pertence a $H^1(-1, 1)$ e é descontínua, mas pode ser identificada com a função contínua $\tilde{f}(x) = |x|^{3/4}$ a menos do conjunto de medida nula $\{\frac{n-1}{n} : n \in \mathbf{N}\}$. Mais uma vez, o traço de f em $x = 1$ seria 1 e não -1 .

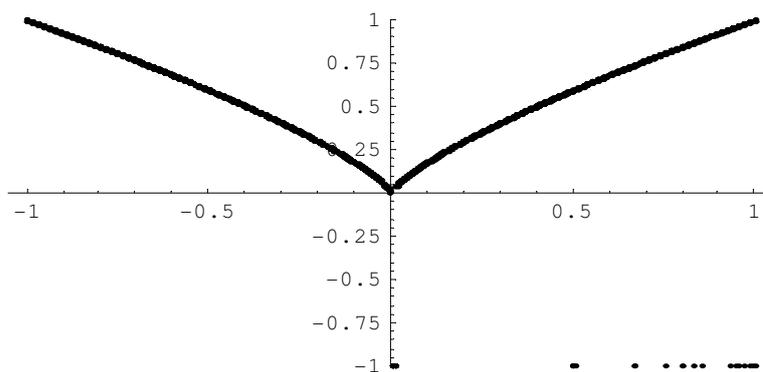


Figura 8.3.2: Gráfico de $f(x)$.

Já uma função que apresentasse uma descontinuidade com um salto (tal como a função de Heaviside) e não apenas em pontos isolados, nunca poderia pertencer a H^1 , pelo simples facto de não ser possível encontrar uma função contínua cuja a única diferença se traduzisse num conjunto de medida nula.

Reforçamos esta ideia, com um exemplo de aplicação da fórmula de Barrow para funções descontínuas. Considerando ainda f definida anteriormente, e admitindo que $f(-1) = 1, f(1) = -1$, temos $f(1) - f(-1) = -2$ e por outro lado

$$\int_{-1}^1 f'(x)dx = \int_{-1}^0 \left(-\frac{3}{4}(-x)^{-1/4}\right) + \int_0^1 \frac{3}{4}x^{-1/4} = -\left[(-x)^{3/4}\right]_{x=-1}^{x=0} + \left[x^{3/4}\right]_{x=0}^{x=1} = 0.$$

Será que esta diferença de valores significa que a fórmula não é válida? A fórmula é válida, mas é preciso interpretar correctamente os valores. Assim, se escrevermos

$$\int_{-1}^1 f'(x)dx = f(1) - f(-1)$$

o valor $f(1) - f(-1)$ deve ser calculado através dos traços e não pontualmente. Portanto, $f(1) = 1$ e não -1 ... e desta forma já obtemos $f(1) - f(-1) = 0$, como seria de esperar. Para evitar este tipo de enganos, pode também utilizar-se a notação $f(1^-)$ para designar o traço à esquerda. Com esta notação, a fórmula de Barrow escreve-se

$$\int_a^b f'(x)dx = f(b^-) - f(a^+).$$

Outra notação possível é usar γf para o traço de f . Na maior parte das vezes, em que se pode depreender o significado pelo contexto, estas notações não são usadas. É claro que este tipo de problemas apenas acontece quando se consideram funções não contínuas, já que para funções contínuas o traço é dado pelo próprio valor no ponto, não havendo qualquer confusão.

8.3.3 O espaço $H^1(\Omega)$ com $\Omega \subset \mathbf{R}^d$

No estudo que desenvolvemos interessa-nos considerar espaços de funções em domínios definidos em \mathbf{R}^2 e \mathbf{R}^3 , que constituem os exemplos mais abordados nas aplicações a problemas físicos.

O espaço $H^1(\Omega)$, com $\Omega \subset \mathbf{R}^2$, será agora definido por funções que verificam $u \in L^2(\Omega)$ e cujas derivadas generalizadas $\partial_{x_1} u, \partial_{x_2} u$ se podem identificar com funções em $L^2(\Omega)$. Este espaço está munido do produto interno definido por

$$\langle u, v \rangle_{H^1(\Omega)} = \int_{\Omega} uv + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v,$$

e é completo para a norma associada

$$\|u\|_{1,\Omega} = \left(\int_{\Omega} |u|^2 + \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \right)^{1/2}.$$

Exemplo. Vejamos agora para que expoentes α , a função $|x|^\alpha = (\sqrt{x_1^2 + x_2^2})^\alpha$ é uma função de $H^1(B(0,1))$ em que $B(0,1)$ é a bola de centro em zero e raio unitário. Para que $|x|^\alpha$ esteja em $L^2(B(0,1))$ será necessário que exista o integral

$$\int_{B(0,1)} (|x|^\alpha)^2 dx = \int_0^{2\pi} \int_0^1 r^{2\alpha} r dr d\theta = 2\pi \int_0^1 r^{2\alpha+1} r dr,$$

usando uma mudança de variáveis para coordenadas polares (r, θ) . Conclui-se assim que devemos exigir que $2\alpha + 1 > -1$, ou seja, $\alpha > -1$. Por outro lado, como o gradiente é dado por

$$\nabla |x|^\alpha = \alpha \frac{x}{|x|} |x|^{\alpha-1} = \alpha x |x|^{\alpha-2}$$

obtemos $|\nabla |x|^\alpha|^2 = \alpha^2 |x|^2 |x|^{2\alpha-4}$. Esta função é integrável se $2\alpha - 2 > -1$, ou seja se $\alpha > \frac{1}{2}$.

Podemos assim concluir que funções da forma $|x|^\alpha$ estão em $H^1(B(0,1))$ sse $\alpha > \frac{1}{2}$.

As funções de $H^1(\Omega)$ são contínuas? Ao contrário do que se passa a uma dimensão, para dimensão 2 ou superior há funções H^1 que não são contínuas.

Exemplo. Tomemos como exemplo a função

$$u(x) = |\log |x||^\alpha$$

esta função está em $L^2(B(0, \frac{1}{e}))$, pois

$$\int_{B(0, \frac{1}{e})} |\log |x||^{2\alpha} dx = 2\pi \int_0^{\frac{1}{e}} |\log(r)|^{2\alpha} r dr,$$

e com uma mudança de variável $s = -\log r$, obtém-se um integral $\int_1^{+\infty} s^{2\alpha} e^{-2s} ds$, que existe para qualquer α .

Por outro lado,

$$\nabla u(x) = \frac{x}{|x|^2} |\log|x||^{\alpha-1}.$$

e trata-se de averiguar a existência do integral

$$\int_{B(0,1)} \frac{|x|^2}{|x|^4} |\log|x||^{2\alpha-2} dx = 2\pi \int_0^1 \frac{|\log(r)|^{2\alpha-2}}{r} dr,$$

obtendo-se um integral $\int_1^{+\infty} s^{2\alpha-2} ds$. Este integral existe se $2\alpha - 2 < -1 \Leftrightarrow \alpha < \frac{1}{2}$.

Concluimos assim que se $\alpha < \frac{1}{2}$ a função $u \in H^1(B(0, \frac{1}{e}))$ e no entanto é bem claro que u não é contínua no ponto $x = 0$. Como a função tende para infinito nesse ponto, não há qualquer função contínua que possa ser o representante da sua classe.

O traço de uma função $H^1(\Omega)$.

Este exemplo é igualmente interessante para avaliarmos qual a regularidade do traço de uma tal função.

Com efeito, suponhamos que $\Omega = B(0, \frac{1}{e}) \cap \{x : x_2 > 0\}$. Na parte da fronteira $\gamma =]-\frac{1}{e}, \frac{1}{e}[\times \{0\} \subset \partial\Omega$ a função u está definida por $u(x_1, 0) = |\log|x_1||^\alpha$, que é ainda uma função descontínua, e portanto não pertence a $H^1(-\frac{1}{e}, \frac{1}{e})$.

Curiosamente reparamos que $|\log|x_1||^\alpha$ é uma função de $L^2(-\frac{1}{e}, \frac{1}{e})$ para quaisquer valores de α , pois

$$\int_0^{\frac{1}{e}} |\log|t||^{2\alpha} dt = \int_1^{+\infty} s^{2\alpha} e^{-s} ds,$$

e o integral existe para qualquer α .

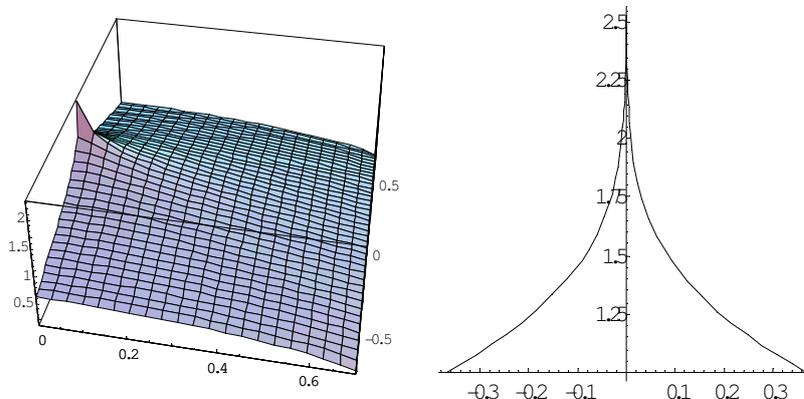


Figura 8.3.3: A função $|\log|x||^{0.45} \in H^1(\Omega)$ e o seu traço. O traço é uma função que pertence $L^2(\gamma)$, descontínua.

8.3.4 Espaços de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$

Podemos ainda definir os *espaços de Sobolev*

$$W^{m,p}(\Omega) = \{u \in L^p(\Omega) : \partial^1 u \in L^p(\Omega), \dots, \partial^m u \in L^p(\Omega)\},$$

onde $\partial^1 u$ representa o vector gradiente de u , e de um modo geral, usando a notação de multi-índice $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$, temos

$$\partial^m u = \sum_{|\alpha|=m} \partial_{x_1}^{\alpha_1} \dots \partial_{x_d}^{\alpha_d} u$$

com $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_d$.

Estes espaços $W^{m,p}(\Omega)$ são espaços de Banach para a norma

$$\|u\|_{m,p,\Omega} = \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha u\|_{0,p,\Omega}^p \right)^{1/p},$$

no caso $1 \leq p < \infty$, e no caso $p = \infty$ para a norma

$$\|u\|_{m,\infty,\Omega} = \max_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha u\|_{0,\infty,\Omega}.$$

- Quando $p = 2$, tratam-se de espaços de Hilbert, e é habitual escrever-se simplesmente

$$H^m(\Omega) = W^{m,2}(\Omega).$$

O produto interno é dado por

$$\langle u, v \rangle_{m,\Omega} = \sum_{|\alpha| \leq m} \langle \partial^\alpha u, \partial^\alpha v \rangle_{L^2(\Omega)},$$

notando que neste caso a norma se escreve simplesmente $\|u\|_{m,\Omega} = \sqrt{\langle u, u \rangle_{m,\Omega}}$.

Um espaço que nos irá interessar especialmente é $H^1(\Omega) = W^{1,2}(\Omega)$ de que já falámos.

Introduzimos também as **semi-normas** (i.e. verificam as propriedades de norma, excepto $\|u\| = 0 \Rightarrow u = 0$),

$$\begin{aligned} |u|_{m,p,\Omega} &= \left(\sum_{|\alpha|=m} \|\partial^\alpha u\|_{0,p,\Omega}^p \right)^{1/p}, \\ |u|_{m,\infty,\Omega} &= \max_{|\alpha|=m} \|\partial^\alpha u\|_{0,\infty,\Omega}. \end{aligned}$$

e é claro que $|u|_{m,p,\Omega} \leq \|u\|_{m,p,\Omega}$.

Observação: Podemos definir os espaços de Sobolev usando a transformação de Fourier

$$\mathcal{F}(u)(\xi) = \hat{u}(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbf{R}^d} u(x) e^{-ix \cdot \xi} dx.$$

Esta aplicação está bem definida para funções integráveis, i.e. $u \in L^1(\mathbf{R}^d)$, e também no espaço de distribuições temperadas⁵ $\mathcal{S}(\mathbf{R}^d)'$. A transformada de Fourier é uma isometria em $L^2(\mathbf{R}^d)$, ou seja (igualdade de Plancherel)

$$\|u\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \|\hat{u}\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}.$$

⁵Este espaço de distribuições temperadas é o dual do espaço de funções de decrescimento rápido para infinito (espaço de Schwartz)

$$\mathcal{S}(\mathbf{R}^d) = \{\phi \in C^\infty(\mathbf{R}^d) : |x^m \partial^n \phi(x)| < \infty, \forall x, \forall m, n\}$$

para uma topologia apropriada.

Estas funções admitem sempre transformação de Fourier, pelo que é possível definir para $A \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)'$ a transformada de Fourier através de

$$(\mathcal{F}A)(\phi) = A(\mathcal{F}\phi).$$

Tem-se também que a transformada inversa de Fourier é

$$\mathcal{F}^{-1}(u)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbf{R}^d} u(\xi) e^{ix \cdot \xi} d\xi$$

e portanto $\mathcal{F}^{-1}(\bar{u}) = \overline{\mathcal{F}(u)}$.

As propriedades da transformada de Fourier com a derivação permitem obter

$$\mathcal{F}(\partial_k u) = i\xi_k \mathcal{F}(u),$$

e assim, por exemplo, $\mathcal{F}(\Delta u) = \mathcal{F}(\partial_1^2 u + \partial_1^2 u) = (i\xi_1)(i\xi_1)\mathcal{F}(u) + (i\xi_2)(i\xi_2)\mathcal{F}(u) = -|\xi|^2 \mathcal{F}(u)$.

De forma mais simples, em \mathbf{R} tem-se

$$\mathcal{F}(u') = -i\xi \hat{u}, \dots, \mathcal{F}(u^{(p)}) = (-i\xi)^p \hat{u}$$

e da última relação resulta $u^{(p)} = \mathcal{F}^{-1}((-i\xi)^p \hat{u})$... assim, como faz mesmo sentido considerar $(-i\xi)^p$ para p real (ou complexo) podemos falar em derivação cuja ordem não é um número natural⁶!

Assim, podemos definir espaços de Sobolev fraccionários em \mathbf{R}^d , para um $s > 0$ qualquer:

$$H^s(\mathbf{R}^d) = \{u \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)' : (1 + |\xi|^2)^{s/2} \hat{u} \in L^2(\mathbf{R}^d)\}$$

em que a norma é

$$\|u\|_{H^s} = \|(1 + |\xi|^2)^{s/2} \hat{u}\|_{L^2}.$$

A partir desta definição de espaços $H^s(\mathbf{R}^d)$ podemos definir de maneira alternativa os espaços

$$H_0^s(\Omega) = \{v \in H^s(\mathbf{R}^d) : \text{supp } v \subset \Omega\}$$

e que se identifica com o fecho de $C_c^\infty(\Omega)$ em $H^s(\mathbf{R}^d)$, e

$$H^s(\Omega) = \{v|_\Omega : v \in H^s(\mathbf{R}^d)\},$$

ou seja, são funções para as quais existe uma extensão que está em $H^s(\mathbf{R}^d)$.

Definição 8.3.1 *O espaço $H_0^1(\Omega)$ é o fecho das funções $C_c^\infty(\Omega)$ na norma $H^1(\Omega)$. Da mesma forma, os espaços $H_0^m(\Omega)$ são o fecho das funções $C_c^\infty(\Omega)$ na norma $H^m(\Omega)$.*

8.3.5 Traço de uma função

A caracterização dos espaços $H_0^m(\Omega)$ é completada usando a noção de traço. Para esse efeito, vamos começar por definir correctamente essa noção usando o seguinte resultado:

Proposição 8.3.1 *Se $\partial\Omega$ é uma fronteira de classe C^1 então $C_c^\infty(\bar{\Omega})$ é denso em $H^1(\Omega)$.*

Note-se que a ‘pequena’ diferença reside em considerar as funções de suporte compacto em $\bar{\Omega}$ e não apenas em Ω . Desta forma, podemos encarar qualquer função $H^1(\Omega)$ aproximada por funções $C_c^\infty(\bar{\Omega})$. Faz agora sentido considerar a restrição a $\partial\Omega$ das funções $C_c^\infty(\bar{\Omega})$, e definir o traço de uma função $H^1(\Omega)$ através do limite. Isto é possível devido ao teorema do traço que pode ser estabelecido em $\bar{\Omega} = \bar{\mathbf{R}}_+^d$.

⁶Deste tipo de propriedades surge a noção de operador pseudo-diferencial. Com efeito nada impede também que se considere $\mathcal{F}^{-1}(z(\xi)\hat{u})$ em que $z(\xi)$ é uma função qualquer... desde que a integração continue a existir!

Teorema 8.3.1 (do Traço). *Seja $\partial\Omega$ é uma fronteira de classe C^1 . O operador de restrição*

$$\begin{aligned} \gamma : C_c^\infty(\Omega) &\longrightarrow L^2(\partial\Omega) \\ u &\longmapsto u|_{\partial\Omega} \end{aligned}$$

pode ser prolongado como operador contínuo (designado traço)

$$\gamma : H^1(\Omega) \longrightarrow L^2(\partial\Omega).$$

Na realidade, isto permite mesmo definir o espaço de Sobolev $H^{1/2}(\partial\Omega)$ como sendo o espaço das funções que são traços de funções $H^1(\Omega)$ em $\partial\Omega$, ou seja,

$$H^{1/2}(\partial\Omega) = \{\gamma v : v \in H^1(\Omega)\}.$$

Esta definição é consistente mesmo com a definição de espaços de Sobolev fraccionários, através do seguinte resultado, que é enunciado para traços de funções (caso $\alpha = 0$) e para traços das suas derivadas (caso $\alpha \neq 0$).

Teorema 8.3.2 *Seja $m > \alpha + 1/2$. Os operadores de traço*

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha : C_c^\infty(\bar{\mathbf{R}}_+^d) &\longrightarrow H^{m-\alpha-1/2}(\mathbf{R}^{d-1}) \\ u &\longmapsto \partial_d^\alpha u \end{aligned}$$

podem ser prolongados como operadores contínuos

$$\gamma_\alpha : H^m(\mathbf{R}_+^d) \longrightarrow H^{m-\alpha-1/2}(\mathbf{R}^{d-1})$$

Desta forma, através de cartas locais, que levam da fronteira para o hiperplano, podemos obter um resultado mais geral, aplicado a outro tipo de traços definidos através das derivadas segundo a direcção normal à fronteira. Por exemplo, o traço normal é definido pela derivada normal $\partial_n u$, e outros traços de ordem superior são obtidos considerando as derivadas $\partial_n^\alpha u$.

Corolário 8.3.1 *Se a fronteira de Ω for de classe $C^{\alpha+1}$, os operadores de traço*

$$\gamma_\alpha(u) = \partial_n^\alpha u$$

podem ser prolongados como operadores contínuos (para $m - \alpha - 1/2 > 0$)

$$\gamma_\alpha : H^m(\Omega) \longrightarrow H^{m-\alpha-1/2}(\partial\Omega).$$

Por exemplo, se tivermos uma função $u \in H^2(\Omega)$, então concluímos que o seu traço está em $H^{3/2}(\partial\Omega)$ e o seu traço normal está em $H^{1/2}(\partial\Omega)$.

Nos espaços $H^{m-1/2}(\partial\Omega)$ pode definir-se a norma

$$\|u\|_{H^{m-1/2}(\partial\Omega)} = \inf_{\substack{v \in H^m(\Omega) \\ \gamma_0 v = u}} \|v\|_{H^m(\Omega)}.$$

Normalmente não iremos escrever γu ou $\gamma_0 u$ para designar o traço, escrevendo-se usualmente $u|_{\partial\Omega}$ ou simplesmente u . Da mesma forma, ao invés de escrevermos $\gamma_1 u$ para o traço normal, escrevemos simplesmente $\partial_n u$.

Da continuidade de γ_α podemos também retirar as estimativas

$$\|u\|_{H^{1/2}(\partial\Omega)} \leq C_0 \|u\|_{H^1(\Omega)}, \text{ ou } \|\partial_n u\|_{H^{3/2}(\partial\Omega)} \leq C_1 \|u\|_{H^1(\Omega)},$$

para certas constantes $C_0, C_1 > 0$.

Estes teoremas de traço permitem ainda efectuar uma caracterização dos espaços $H_0^m(\Omega)$. Um resultado importante é

$$H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ em } \partial\Omega\},$$

mas, mais geralmente, temos o seguinte teorema.

Teorema 8.3.3 *Se a fronteira de Ω for de classe C^{m+1} ,*

$$H_0^m(\Omega) = \{u \in H^m(\Omega) : u = 0, \dots, \partial_n^{m-1} u = 0 \text{ em } \partial\Omega\}.$$

Este resultado diz-nos de forma intuitiva que as funções $H_0^1(\Omega)$ são funções em $H^1(\Omega)$ cujo traço é nulo sobre a fronteira, e as funções em $H_0^m(\Omega)$ são funções $H^m(\Omega)$ cujo seu traço e o das suas derivadas normais até ordem $m - 1$ é nulo.

Observação: Note-se que no caso em que $\Omega = \mathbf{R}^d$ há uma identificação $H^1(\mathbf{R}^d) = H_0^1(\mathbf{R}^d)$, o que pode ser compreendido intuitivamente pela ausência de fronteira.

8.3.6 Dualidade - Espaços de Sobolev negativos, $H^{-s}(\Omega)$.

Os espaços duais de $H_0^m(\Omega)$ para a topologia de $H^m(\Omega)$ são espaços de distribuições, designados por $H^{-m}(\Omega)$. Os elementos de $H^{-m}(\Omega)$ são funcionais que transformam funções de $H_0^m(\Omega)$ e que são contínuos para a topologia de $H^m(\Omega)$. Como as funções de $H_0^m(\Omega)$ são aproximadas por funções $C_c^\infty(\Omega)$, na realidade basta encarar os elementos de $H^{-m}(\Omega)$ como funcionais $C_c^\infty(\Omega) \rightarrow \mathbf{R}$ contínuos para a topologia de $H^m(\Omega)$. Ou seja, tratam-se de distribuições contínuas para a topologia de $H^m(\Omega)$.

A norma definida em $H^{-s}(\omega)$ é dada por

$$\|u\|_{H^{-s}(\omega)} = \sup_{v \in H^s(\omega)} \frac{|\langle u, v \rangle|}{\|v\|_{H^s(\omega)}},$$

em que $\langle u, v \rangle$ não representa um produto interno, mas sim a dualidade $H^{-s}(\omega) \times H^s(\omega)$.

Um espaço de Sobolev negativo que consideramos frequentemente é $H^{-1/2}(\partial\Omega)$, já que os traços de funções $H^1(\Omega)$ são funções $H^{1/2}(\partial\Omega)$, mas os traços normais podem não ser funções, são distribuições em $H^{-1/2}(\partial\Omega)$.

Com efeito, podemos considerar o exemplo da função $u(x) = |\log|x||^\alpha$, com $\alpha < 0.5$, e os seus traços sobre a fronteira $\Gamma = \{0\} \times [-1, 1]$. Já vimos que esta função tem traço não contínuo. Sabemos agora que está em $H^{1/2}(\Gamma)$ e portanto podemos concluir que o espaço $H^{1/2}(\Gamma)$ inclui funções não contínuas (o que não acontece com o espaço $H^1(\Gamma)$ que tem apenas funções contínuas). No entanto ao calcular a derivada normal,

$$\partial_n u = -\frac{\partial}{\partial x_1} (|\log|x||^\alpha) = \alpha \frac{x_1}{|x|^2} |\log|x||^{\alpha-1}$$

e como $x_1 = 0$ obtemos $\partial_n u = 0$ excepto se $x_2 = 0$, já que nesse caso a função explode! Concluimos assim que $\partial_n u$ é nulo em toda a parte excepto no zero, onde explode (tal como o delta de Dirac). Assim, esse traço normal não pode ser visto como uma função, mas sim como uma distribuição.

8.3.7 Resultados em espaços de Sobolev

Apresentamos de novo a fórmula de Green, mas no contexto dos espaços de Sobolev, pondo em evidência os espaços funcionais

Teorema 8.3.4 (*Fórmula de Green*) *Seja $u, v \in H^1(\Omega)$, Ω aberto limitado com fronteira seccionalmente de classe C^1 .*

$$\int_{\Omega} v \nabla u = \int_{\partial\Omega} uv \mathbf{n} - \int_{\Omega} u \nabla v$$

Note-se que os valores u e v em $\partial\Omega$ são os seus traços. A partir desta fórmula podem-se obter as outras duas, adequando os espaços de Sobolev. Por exemplo, para $u \in H^1(\Omega), v \in H^2(\Omega)$, obtemos

$$\int_{\Omega} u \Delta v = \int_{\partial\Omega} u \partial_n v - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v.$$

Um valor importante que determina a regularidade de um espaço de Sobolev $W^{s,p}(\Omega)$ é o índice (de Sobolev) $S = s - d/p$, em que d é a dimensão, pois supomos que $\Omega \subset \mathbf{R}^d$.

Teorema 8.3.5 (*Rellich-Kondrachov*) *Seja Ω um aberto de \mathbf{R}^d verificando a condição do cone⁷,*

- *Se $s - d/p \geq r - d/q$ então $W^{s,p}(\Omega) \subseteq W^{r,q}(\Omega)$*
- *Se $s - d/p > m$ então $W^{s,p}(\Omega) \subseteq C^m(\Omega)$*

Observação: As injecções são contínuas e compactas (se a desigualdade for estrita). A segunda injecção pode ser vista como um caso limite da primeira, já que $q \rightarrow \infty$ leva-nos ao espaço $W^{r,\infty}(\Omega)$ o que significa que estamos a considerar que as derivadas até à ordem r são limitadas pela norma do máximo... essa é exactamente a norma considerada no caso das funções C^r .

No caso ($p = 2$) dos espaços de Sobolev $H^s(\Omega)$, que nos interessa, o primeiro resultado diz apenas que $H^s(\Omega) \subset H^r(\Omega)$, com injecção contínua (e compacta) se $s > r$. Do segundo resultado podemos concluir que:

Em dimensão 1, se $s > m + 1/2$ então $H^s(\Omega) \subset C^m(\Omega)$. Em particular, vemos que o caso das funções $H^{1/2}(\Gamma)$ não serem contínuas é mesmo o caso limite... uma função que seja $H^{1/2+\varepsilon}(\Gamma)$ já seria contínua, para $\varepsilon > 0$.

Em dimensão 2, se $s > m + 1$ então $H^s(\Omega) \subset C^m(\Omega)$. Portanto também aqui o caso das funções $H^1(\Omega)$ que não são contínuas é um caso limite... uma função $H^{1+\varepsilon}(\Omega)$ será contínua, para $\varepsilon > 0$.

⁷Para um domínio verificar a condição do cone, significa basicamente que a fronteira não tem pontos de cúspidas... isto é, a fronteira pode ter cantos, mas esses cantos têm que permitir a existência de um cone, o que não acontece no caso das cúspidas, como num cardióide.

Capítulo 9

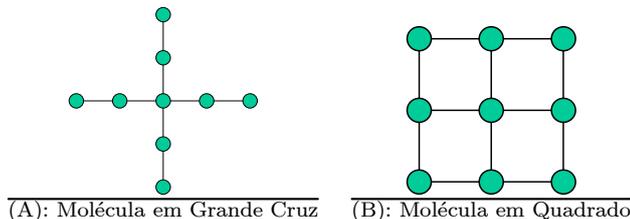
Exercícios

9.1 Diferenças finitas

1 a). Suponha que $h_x = h_y = h$. Baseado no desenvolvimento em série de Taylor, mostre que as fórmulas para aproximar a solução de $\Delta u = 0$,

$$(A) \quad u_{ij} = \frac{4}{15}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) - \frac{1}{60}(u_{i+2,j} + u_{i-2,j} + u_{i,j+2} + u_{i,j-2})$$

$$(B) \quad u_{ij} = \frac{1}{5}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) + \frac{1}{20}(u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j-1})$$



têm um erro de aproximação local de $O(h^4)$ na aproximação do laplaciano.

b) Comente acerca da implementação computacional dos métodos (A) e (B) para o problema de Dirichlet.

c) Mostre que o princípio do máximo discreto é ainda válido para a equação discreta (B). Encontre um contra-exemplo que mostre que não é válido para (A).

2. Considere as fórmulas locais para aproximação do laplaciano,

$$\Delta u_{ij} \sim \alpha_{10}^+ u_{i+1,j} + \alpha_{01}^+ u_{i,j+1} + \alpha_{10}^- u_{i-1,j} + \alpha_{01}^- u_{i,j-1} - \alpha_{00} u_{ij}$$

em que os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned} \alpha_{10}^+ &= \frac{2}{h_x^+(h_x^+ + h_x^-)}, & \alpha_{10}^- &= \frac{2}{h_x^-(h_x^+ + h_x^-)}, \\ \alpha_{01}^+ &= \frac{2}{h_y^+(h_y^+ + h_y^-)}, & \alpha_{01}^- &= \frac{2}{h_y^-(h_y^+ + h_y^-)}, \\ \alpha_{00} &= \frac{2}{h_x^+ h_x^-} + \frac{2}{h_y^+ h_y^-}, \end{aligned}$$

em que $h_x^+ = u_{i+1,j} - u_{ij}$, $h_x^- = u_{ij} - u_{i-1,j}$, $h_y^+ = u_{i,j+1} - u_{ij}$, $h_y^- = u_{ij} - u_{i,j-1}$.

(Estas fórmulas são muitas vezes utilizadas para efectuar uma aproximação de forma a considerar os pontos na fronteira).

- a) Mostre que o erro local é $O(h)$ em que $h = \max\{h_x^-, h_x^+, h_y^-, h_y^+\}$.
 b) Mostre que o princípio do máximo discreto é ainda válido.

3 a). Mostre que no caso tridimensional a aproximação da equação de Laplace por um esquema de 7 pontos,

$$u_{ijm} = \frac{1}{6}(u_{i+1,jm} + u_{i,j+1,m} + u_{ij,m+1} + u_{i-1,jm} + u_{i,j-1,m} + u_{ij,m-1})$$

envolve um erro local da ordem $O(h^2)$.

b) Deduza uma aproximação para a resolução do problema de Neumann de forma a que se mantenha um erro local da ordem $O(h^2)$

4. Considere a equação diferencial

$$\Delta u - \lambda u = f$$

em que $\lambda > 0$ é uma constante e $f \geq 0$ é uma função contínua.

a) Deduza a expressão para um método de diferenças finitas que envolva uma aproximação local de ordem $O(h^2)$.

b) Deduza uma aproximação para a resolução do problema de Neumann de forma a que se mantenha um erro local da ordem $O(h^2)$.

c) Mostre que o problema de Dirichlet discreto associado à equação está bem posto.

d) Mostre que a matriz associada à resolução do problema de Dirichlet tem a diagonal estritamente dominante. Conclua acerca da utilização de métodos iterativos para a resolução do sistema. Explícite um algoritmo para essa resolução.

5. Considere a aproximação discreta clássica do laplaciano,

$$\tilde{\Delta}u_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h^2}$$

e da mesma forma considere as aproximações

$$\tilde{\partial}_n u_{i+1,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{ij}}{h}, \quad \tilde{\partial}_n u_{i-1,j} = \frac{u_{i-1,j} - u_{ij}}{h}.$$

a) Verifique que

$$\tilde{\Delta}u_{ij} = \frac{1}{h}(\tilde{\partial}_n u_{i+1,j} + \tilde{\partial}_n u_{i-1,j} + \tilde{\partial}_n u_{i,j+1} + \tilde{\partial}_n u_{i,j-1})$$

b) Generalize o resultado anterior, de forma obter o análogo discreto do teorema de Green,

$$\sum_{(i,j) \in \Omega} \tilde{\Delta}u_{ij} = \frac{1}{h} \sum_{(i,j) \in \partial\Omega} \tilde{\partial}_n u_{ij}.$$

c) Conclua que no caso da equação de Laplace, se forem impostas condições de Neumann, $\tilde{\partial}_n u_{ij} = g_{ij}$ para pontos (i, j) na fronteira $\partial\tilde{\Omega}$, o problema discreto terá apenas solução se g_{ij} verificar

$$\sum_{(i,j) \in \partial\tilde{\Omega}} g_{ij} = 0.$$

6. Considere a equação de Laplace num quadrado $] - 1, 1[\times] - 1, 1[$, com condição de fronteira mista

$$\partial_n u = \lambda u \text{ sobre } \Gamma =] - 1, 1[\times \{-1\}$$

(em λ é uma constante) e condição de Dirichlet na restante parte da fronteira, ie. $\partial\tilde{\Omega} \setminus \Gamma$.

a) Deduza uma fórmula de aproximação local de segunda ordem num ponto da fronteira Γ .

b) Escreva um algoritmo que permita a implementação do método usando também a fórmula obtida em a).

7. Seja $\Omega =] - 1, 1[\times] 0, 1[$. Considere a aproximação do laplaciano,

$$\tilde{\Delta} u_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+2} - 2u_{i,j+1} + u_{i,j}}{h^2}$$

a) Use esta aproximação para escrever um algoritmo adequado para aproximar um problema de Dirichlet-Neumann, em que os dados de Neumann estão colocados sobre a fronteira $\Gamma =] - 1, 1[\times \{0\}$.

b) Através da separação de variáveis, indique uma função que verifique as condições

$$u = 0, \partial_n u = \frac{1}{a} \cos(ax) \text{ sobre } \Gamma.$$

c) Sendo $x_k = kh$, $y_k = kh$, e considerando $\partial_n u_{00} \simeq u_{01} - u_{00}$ verifique que o esquema numérico dá $u_{0,2} = 2h/a$ e comente a diferença com o valor $u(0, 2h) = \frac{1}{a} \sinh(2ah)$ quando $a \rightarrow \infty$.

8. Considere o esquema do quadrado

$$u_{ij} = \frac{1}{5}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) + \frac{1}{20}(u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j-1})$$

para aproximar a solução da equação de Laplace,

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{em } \Omega =] 0, 3[\times] 0, 3[\\ u(x, y) = g(x, y) = x(3 - y) & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

a) Explícite os sistemas a resolver para o problema de Dirichlet, usando o esquema anterior e o esquema clássico, considerando uma grelha com 4 pontos interiores equidistantes:

$$\begin{array}{cccc} g_{12} & g_1 & g_2 & g_3 \\ g_{11} & u_1 & u_2 & g_4 \\ g_{10} & u_3 & u_4 & g_5 \\ g_9 & g_8 & g_7 & g_6 \end{array}$$

b) Sabendo que a solução de ambos os sistemas é $u_1 = 1, u_2 = 2, u_3 = 2, u_4 = 4$, justifique a coincidência dos resultados, relacionando com a solução exacta. Justifique se ainda obteria valores coincidentes para os seguintes dados de Dirichlet em $\partial\Omega$: (i) $u(x, y) = x^2(3 - y)$, (ii) $u(x, y) = x^4(3 - y)$.

Resolução:

a) Muito sucintamente:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1/5 & -1/5 & -1/20 \\ -1/5 & 1 & -1/20 & -1/5 \\ -1/5 & -1/20 & 1 & -1/5 \\ -1/20 & -1/5 & -1/5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3/5 + 6/20 \\ 3/5 + 6/20 \\ 12/5 + 15/20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 9/10 \\ 9/10 \\ 63/20 \end{bmatrix}$$

e

$$\begin{bmatrix} 1 & -1/4 & -1/4 & 0 \\ -1/4 & 1 & 0 & -1/4 \\ -1/4 & 0 & 1 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & -1/4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3/4 \\ 3/4 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

b) Sabemos que se u for a solução exacta, e é o caso de $u(x, y) = x(3 - y)$, porque $\Delta u = 0$, então a fórmula de erro

$$\|u - u_h\|_\infty \leq Ch^2(\|\partial_x^4 u\|_\infty + \|\partial_y^4 u\|_\infty)$$

verifica-se, e como neste caso $\partial_x^4(x(3 - y)) = 0, \partial_y^4(x(3 - y)) = 0$, então o erro é nulo.

Nos casos i) e ii) a função não é solução e o raciocínio anterior não é válido!!

Aliás, vemos que não se verifica para nenhum dos casos:

i) Basta ver que se desse a solução exacta teríamos $\{u_1, \dots, u_4\} = \{1, 4, 2, 8\}$ e assim

$$Au = \begin{bmatrix} 1 & -1/5 & -1/5 & -1/20 \\ -1/5 & 1 & -1/20 & -1/5 \\ -1/5 & -1/20 & 1 & -1/5 \\ -1/20 & -1/5 & -1/5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3/5 \\ 21/10 \\ 0 \\ 27/4 \end{bmatrix}$$

o que é bastante diferente do segundo membro que se obtém $b = \{0, 27/10, 6/5, 159/20\}$.

ii) Semelhante. Obtemos $\{u_1, \dots, u_4\} = \{1, 16, 2, 32\}$ e o segundo membro fica

$$Au = \{-21/5, 93/10, -27/5, 567/20\} \neq b = \{0, 243/10, 3, 1167/20\}.$$

Situação análoga no caso do método clássico:

i) $Au = \{-1/2, 7/4, -1/4, 13/2\} \neq b = \{0, 9/4, 3/4, 15/2\}$

ii) $Au = \{-7/2, 31/4, -25/4, 55/2\} \neq b = \{0, 81/4, 3/4, 105/2\}$

9. Considere a separação de variáveis discreta

$$u_{ij} = v_i w_j.$$

Sabemos que a solução de uma equação às diferenças

$$a_{k+1} + 2B a_k + a_{k-1} = 0$$

é dada por $a_k = C_1 r_1^k + C_2 r_2^k$, em que r_1, r_2 são raízes distintas da equação do segundo grau

$$r^2 + 2Br + 1 = 0, \text{ i.e. } r = -B \pm \sqrt{B^2 - 1}$$

a) Obtenha uma expressão para as soluções de $\tilde{\Delta}u_{ij} = 0$. Em particular, obtenha que

$$u_{ij} = \left(1 + \mu \pm \sqrt{(1 + \mu)^2 - 1}\right)^i \left(1 - \mu \pm \sqrt{(1 - \mu)^2 - 1}\right)^j,$$

são soluções de $\tilde{\Delta}u_{ij} = 0$, se $\mu \geq 2$.

b) Considere a aproximação por diferenças finitas no intervalo $[0, 21] \times [0, 21]$ com dados de Dirichlet $u(x, y) = (3 + \sqrt{8})^x \cos(\pi y)$, usando $h = 1$. Mostre que a solução do problema discreto é dada por

$$u_{ij} = \left(3 + \sqrt{8}\right)^i (-1)^j.$$

Resolução

a) Temos

$$0 = \tilde{\Delta}u_{ij} = \frac{1}{h^2}(v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1})w_j + \frac{1}{h^2}v_i(w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1})$$

$$\begin{aligned} (v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1})w_j + v_i(w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1}) &= 0 \\ \frac{(v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1})}{v_i} &= \frac{-(w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1})}{w_j} = 2\mu \\ \begin{cases} v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1} = 2\mu v_i \\ w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1} = -2\mu w_j \\ v_{i+1} + (-2 - 2\mu)v_i + v_{i-1} = 0 \\ w_{j+1} + (-2 + 2\mu)w_j + w_{j-1} = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

portanto, escrevendo $\mu_1 = -1 - \mu$,

$$v_i = A_1(-\mu_1 + \sqrt{\mu_1^2 - 1})^i + A_2(-\mu_1 - \sqrt{\mu_1^2 - 1})^i,$$

e com $\mu_2 = -1 + \mu$,

$$w_j = B_1(-\mu_2 + \sqrt{\mu_2^2 - 1})^j + B_2(-\mu_2 - \sqrt{\mu_2^2 - 1})^j.$$

Em particular, temos

$$u_{ij} = \left(1 + \mu + \sqrt{(1 + \mu)^2 - 1}\right)^i \left(1 - \mu + \sqrt{(1 - \mu)^2 - 1}\right)^j$$

b) Imediato a partir do anterior. Sendo $u(x, y) = (3 + \sqrt{8})^x \cos(\pi y)$, e usando $h = 1$, os dados de fronteira irão ser da forma

$$u(i, j) = (3 + \sqrt{8})^i \cos(j\pi),$$

e agora basta reparar que $\cos(j\pi) = (-1)^j$.

Para concluir, basta referir que se trata de uma solução do problema discreto, já que do caso anterior retiramos esta expressão ao considerar $\mu = 2$.

10. Considere o problema de valores próprios

$$\begin{cases} \Delta u + \lambda u = 0 & \text{em } \Omega \\ u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

em que $\Omega = [0, 2a] \times [0, 2b]$.

a) Mostre que $u = \sin(\frac{k\pi}{2a}x) \sin(\frac{k\pi}{2b}y)$ é solução não nula do problema anterior para certos valores de λ .

b) Considerando apenas um ponto interior, determine qual a equação discreta a resolver para encontrar a aproximação dos valores próprios e compare a aproximação com o primeiro valor próprio.

Resolução.

a) Temos

$$\partial_x^2 u = \sin(\frac{k\pi}{2a}x) \sin(\frac{k\pi}{2b}y) = -(\frac{k\pi}{2a})^2 \sin(\frac{k\pi}{2a}x) \sin(\frac{k\pi}{2b}y)$$

logo

$$\Delta u = -\left(\left(\frac{k\pi}{2a}\right)^2 + \left(\frac{k\pi}{2b}\right)^2\right) u$$

portanto os valores próprios serão da forma $\lambda = \left(\frac{k\pi}{2a}\right)^2 + \left(\frac{k\pi}{2b}\right)^2$, com $k \in \mathbf{N}$.

b) Efectuando a aproximação por diferenças finitas,

$$\frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{a^2} + \frac{u_{i,j-1} - 2u_{ij} + u_{i,j+1}}{b^2} + \lambda u_{ij} = 0$$

$$\left(-2\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}\right) + \lambda\right)u_{ij} = 0$$

donde sai

$$\lambda = 2\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}\right)$$

que comparada com o primeiro valor próprio

$$\lambda = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{2b}\right)^2 \sim \frac{\pi^2}{4}\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}\right)$$

é razoável, já que a diferença entre $\frac{\pi^2}{4} \sim 2.46$ (o valor exacto) e 2 (o valor aproximado) é bastante aceitável se atendermos a que fizemos um aproximação muito grosseira.

9.2 Elementos Finitos

1. Seja $b(u, v)$ uma forma bilinear nas condições do Teorema de Lax-Milgram.

a) Mostre que se a forma bilinear for simétrica se pode obter a estimativa

$$\|u - u_h\| \leq \sqrt{\frac{M}{\alpha}} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|.$$

b) Suponha que W é denso em V e que está definida uma aplicação $R_h : W \rightarrow V_h$ tal que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|v - R_h(v)\| = 0, \forall v \in W.$$

Mostre que $\lim_{h \rightarrow 0} \|u - u_h\| = 0$.

2. Mostre que (6.1) é uma norma para a qual $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ é um espaço de Banach.

Resolução:

É claro que $\|v\|_{m+1, \Omega}^* \geq 0$. Por outro lado, $\inf_{q \in \mathbf{P}_m} \|v - q\|_{m+1, \Omega} = 0$ implica a existência de uma sucessão de polinômios $q_n \in \mathbf{P}_m$ tal que

$$q_n \rightarrow v, \text{ na norma } H^{m+1}(\Omega),$$

mas por outro lado \mathbf{P}_m é um subespaço de dimensão finita, fechado, logo $q_n \rightarrow q^*$, com $q^* \in \mathbf{P}_m$ o que implica $v = q^*$, ou seja¹, $\dot{v} = \dot{0}$.

A propriedade $\|\alpha v\|_{m+1, \Omega}^* = |\alpha| \|v\|_{m+1, \Omega}^*$ é imediata pois $\inf_{q \in \mathbf{P}_m} \|\alpha v - q\|_{m+1, \Omega} = \inf_{p \in \mathbf{P}_m} \|\alpha v - \alpha p\|_{m+1, \Omega}$, fazendo $p = q/\alpha \in \mathbf{P}_m$.

A desigualdade triangular resulta considerar sucessões de polinômios q_n e p_n tais que

$$\|v - q_n\|_{m+1, \Omega} \rightarrow \|v\|_{m+1, \Omega}^*, \quad \|w - p_n\|_{m+1, \Omega} \rightarrow \|w\|_{m+1, \Omega}^*$$

e assim,

$$\|v+w\|_{m+1, \Omega}^* \leq \|v+w-q_n-p_n\|_{m+1, \Omega} \leq \|v-q_n\|_{m+1, \Omega} + \|w-p_n\|_{m+1, \Omega} \rightarrow \|v\|_{m+1, \Omega}^* + \|w\|_{m+1, \Omega}^*.$$

A completude do espaço nesta norma resulta da completude de $H^{m+1}(\Omega)$. \square

3. Seja $u(x) = |x|^p$. Discuta os valores de s em função de p , que verificam $u \in H^s(-1, 1)$. Considere também o caso bidimensional.

4. Mostre que se os elementos finitos são equivalentes afins a um elemento de referência, basta verificar a propriedade de unissolvência para esse elemento.

5. a) Indique as variáveis nodais para o elemento de Lagrange rectangular de grau-máximo 1 considerando o elemento de referência. Explícite qual o sistema a resolver para se obter a base dual de polinômios. Verifique a propriedade de unissolvência.

b) O mesmo que em a) para o elemento de Lagrange rectangular de grau-máximo 2.

¹Note-se que $\|v\|_{m+1, \Omega}^* = 0 \Rightarrow v \sim 0$, e não $v = 0$. Como já referimos, no espaço $H^{m+1}(\Omega)/\mathbf{P}_m$ ser nulo é ser um polinômio de grau $\leq m$.

6. Considere o elemento finito bidimensional cujo elemento geométrico é um quadrilátero qualquer, em que as funções de forma são polinômios do segundo grau, e em que as variáveis nodais são definidas pelos valores da função nos vértices do quadrado $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4\}$, no centro \mathbf{x}_5 e num outro ponto arbitrário \mathbf{x}_6 .

a) Mostre que se \mathbf{x}_6 é um ponto interior que não está sobre as diagonais se verifica a propriedade de unissolvência.

b) Encontre um exemplo em que \mathbf{x}_6 está sobre uma diagonal e não se verifica a propriedade de unissolvência.

7. Considere o elemento de Lagrange linear tridimensional. Defina como elemento de referência o tetraedro $\{(0, 0, 0), (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$ e explicita a base dual associada às variáveis nodais de Lagrange.

8. Considere o caso de elementos de Lagrange quadráticos para aproximar a função v num quadrado $\Omega =]-1, 1[\times]-1, 1[$ considerando uma malhagem regular com $h < 0.1$,

$$v(x, y) = \begin{cases} x^2 + y & \text{se } x > 0 \\ y & \text{se } x \leq 0 \end{cases}, \quad w(x, y) = xy^3.$$

a) Deduza as estimativas de erro, comparando-as para as duas funções.

b) É possível encontrar uma malhagem de tal forma que nunca haja erro de interpolação para v ? e para w ?

c) A título de exercício (independente dos restantes) calcule $\|v\|_{1,\Omega}$.

9. Dada uma função $v \in H^2(\Omega)$ conhecida num círculo Ω , interpolou-se com elementos de Lagrange lineares para dois valores de h .

a) Sabe-se que a tabela de erros obtida foi aproximadamente

h	$\ v - \Pi_{\Omega_h} v\ _{1,\Omega}$
0.05	0.0125
0.01	0.0075

e admita que a desigualdade da estimativa de erro é aproximadamente uma igualdade.

i) Calcule os valores aproximados de C e tente justificar a diferença.

ii) Qual o cuidado que teria que observar de forma a que o erro para $h = 0.001$ fosse aproximadamente 0.0025?

b) Ainda para a mesma tabela de a) e admitindo que para $h = 0.05$ temos $\|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{0,\Omega} \sim 0.001$, indique uma estimativa de erro para $\|v - \Pi_{\Omega_h} v\|_{0,\Omega}$ considerando ii).

10. Deduza fórmulas de erro para Q_3 num triângulo, baseadas nas fórmulas do erro de interpolação.

11. Calcule aproximadamente o valor do integral

$$\int_E x \cos(y) \, dx dy$$

em que $E = \{(0, 0), (1, 1), (0, -1)\}$ usando a primeira fórmula Q_3 acima referida.

12. Considere o problema unidimensional

$$\begin{cases} u''(x) + au'(x) + bu(x) = \cos(\pi x) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$

- a)** Escreva uma forma bilinear associada ao problema num espaço funcional apropriado e a respectiva formulação variacional. Para que valores de a e b se pode aplicar o método de Ritz?
b) Indique valores de a e b de maneira a que a forma bilinear seja contínua e coerciva. Qual a conclusão que pode retirar quanto à solubilidade?
c) Defina os elementos finitos de Lagrange lineares para $h = 0.25$.
d) Construa o sistema para resolver com $h = 0.25$. Trata-se de uma matriz invertível?

13. Considere o problema num domínio $\Omega = B(0, 1) \subset \mathbf{R}^2$

$$\begin{cases} -\Delta u(x) + \lambda(x)u(x) = f(x) \text{ em } \Omega \\ u = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

em que $\lambda(x) = |x|^2$, $f(x) = \begin{cases} 1 \text{ em } B(0, \frac{1}{2}) \\ -1 \text{ em } B(0, 1) \setminus B(0, \frac{1}{2}) \end{cases}$

- a)** Escreva a formulação variacional associada ao problema. O problema está bem posto? Qual a regularidade que garante para u ?
b) Deduza a estimativa de erro para $\|u - u_h\|_{0,\Omega}$ usando elementos finitos de Lagrange lineares. Se utilizarmos elementos de Lagrange quadráticos podemos garantir a priori a estimativa de erro $\|u - u_h\|_{1,\Omega} = O(h^2)$? Justifique.

14. Considere o problema num domínio $\Omega \subset \mathbf{R}^2$,

$$\begin{cases} \operatorname{div}(c(x)\nabla u) = f(x) \text{ em } \Omega \\ u = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

em que c é uma função $C^\infty(\Omega)$.

- a)** Deduza as formas bilinear e linear associadas ao problema variacional.
b) Em que circunstâncias se pode aplicar o método de Ritz neste problema, ie. a minimização é equivalente à resolução do problema variacional? Qual o funcional que se minimiza?
c) Mostre que está nas condições de aplicabilidade do teorema de Lax-Milgram para certas condições de c .
d) Supondo que $f \in H^2(\Omega)$, indique qual o grau de polinómios que permite a melhor convergência.

15. Considere o quadrado $\Omega =]-1, 1[^2$ dividido pelas diagonais em 4 triângulos semelhantes. Suponha que se considera a resolução do problema

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x) \text{ em } \Omega \\ u = 0 \text{ sobre } \partial\Omega. \end{cases}$$

- a)** A partir das funções de forma indique o problema discreto que se obtém usando elementos de Lagrange lineares.
b) Considere a aproximação do integral através de uma regra de quadratura com um único ponto central em cada elemento. Explícite a solução.

16. Consideremos um operador diferencial de segunda ordem elíptico, da forma

$$Du = -\partial_x^2 u - a \partial_y^2 u + \lambda u,$$

em que as constantes a, λ são positivas. Associamos a este operador a equação

$$-\partial_x^2 u - a \partial_y^2 u + \lambda u = f$$

com $f \in L^2(\Omega)$, exigindo condições de fronteira nulas em Ω , domínio com fronteira regular.

a) Obtenha a formulação variacional, e estabeleça a equivalência entre a solução fraca e forte $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

b) Mostre que se $f \in H^{-1}(\Omega)$ existe uma única solução $u \in H_0^1(\Omega)$ e que há dependência contínua.

c) Mostre que se $u \in H^4(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ e utilizarmos elementos de Lagrange cúbicos, temos a estimativa

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq C h^4 |u|_{4,\Omega}.$$

• **Resolução.**

a) Considerando funções teste $v \in C_c^\infty(\Omega)$ obtemos a partir de

$$\int_{\Omega} -\partial_x^2 u v - \int_{\Omega} a \partial_y^2 u v + \lambda \int_{\Omega} u v = \int_{\Omega} f v$$

e através da fórmula de integração por partes, como os termos no bordo se anulam,

$$\int_{\Omega} \partial_x u \partial_x v + \int_{\Omega} a \partial_y u \partial_y v + \lambda \int_{\Omega} u v = \int_{\Omega} f v,$$

definindo-se assim a forma bilinear

$$b(u, v) = \int_{\Omega} \partial_x u \partial_x v + \int_{\Omega} a \partial_y u \partial_y v + \lambda \int_{\Omega} u v$$

a forma linear será obviamente

$$l(v) = \int_{\Omega} f v.$$

A solução fraca, será a solução $u \in H_0^1(\Omega)$ do problema variacional

$$b(u, v) = l(v), \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Equivalência. Supondo que $f \in L^2(\Omega)$ temos pelo teorema de regularidade $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Como u verifica $Du = f$ então repetimos os passos anteriores. A fórmula

$$\int_{\Omega} -\partial_x^2 u v - \int_{\Omega} a \partial_y^2 u v + \lambda \int_{\Omega} u v = \int_{\Omega} f v,$$

é válida para $v \in H_0^1(\Omega)$ pois temos $u \in H^2(\Omega)$ e assim $\partial_x^2 u \in L^2(\Omega)$ e todos os integrais existem. O facto de $v \in H_0^1(\Omega)$ garante que o traço seja nulo sobre a fronteira e podemos obter pela fórmula de integração por partes (em espaços de Sobolev)

$$\int_{\Omega} \partial_x u \partial_x v + \int_{\Omega} a \partial_y u \partial_y v + \lambda \int_{\Omega} u v = \int_{\Omega} f v,$$

o que significa que u é uma solução fraca.

Reciprocamente, como admitimos que $u \in H_0^1(\Omega)$ então a condição de Dirichlet nula é imediata, e por outro lado, tomando $v \in C_c^\infty(\Omega) \subset H_0^1(\Omega)$ e invertendo os passos, obtemos a partir de $b(u, v) = l(v)$,

$$\int_{\Omega} (-\partial_x^2 u - a \partial_y^2 u + \lambda u - f) v = 0, \forall v \in C_c^\infty(\Omega)$$

o que significa que $-\partial_x^2 u - a \partial_y^2 u + \lambda u - f = 0$ æ. Ω .

b) Iremos aplicar o teorema de Lax-Milgram em $H_0^1(\Omega)$, tendo presente que pela desigualdade de Poincaré a seminorma é uma norma neste espaço.

i) Vejamos que se trata de uma forma coerciva em $H_0^1(\Omega)$.

• Começemos por ver o caso em que $\lambda \neq 0$,

$$|b(u, u)| = \int_{\Omega} (\partial_x u)^2 + \int_{\Omega} a (\partial_y u)^2 + \lambda \int_{\Omega} u^2 \geq \min\{1, a, \lambda\} \left(\int_{\Omega} (\partial_x u)^2 + \int_{\Omega} (\partial_y u)^2 + \int_{\Omega} u^2 \right)$$

ou seja

$$|b(u, u)| \geq \alpha \|u\|_{1, \Omega}^2,$$

em que $\alpha = \min\{1, a, \lambda\} > 0$ e assim fica estabelecida a coercividade em $H^1(\Omega)$ e consequentemente em $H_0^1(\Omega)$.

• No caso em que $\lambda = 0$,

$$|b(u, u)| = \int_{\Omega} (\partial_x u)^2 + \int_{\Omega} a (\partial_y u)^2 \geq \min\{1, a\} \left(\int_{\Omega} (\partial_x u)^2 + \int_{\Omega} (\partial_y u)^2 \right),$$

ou seja,

$$|b(u, u)| \geq \alpha \|u\|_{1, \Omega}^2,$$

em que $\alpha = \min\{1, a\}$.

ii) Vejamos que se trata de uma forma contínua em $H_0^1(\Omega)$.

Basta reparar que aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz temos

$$\begin{aligned} |b(u, v)| &\leq \left| \int_{\Omega} \partial_x u \partial_x v \right| + a \left| \int_{\Omega} \partial_y u \partial_y v \right| + \lambda \left| \int_{\Omega} u v \right| \leq \\ &\leq \|\partial_x u\|_{L^2} \|\partial_x v\|_{L^2} + a \|\partial_y u\|_{L^2} \|\partial_y v\|_{L^2} + \lambda \|u\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \end{aligned}$$

e utilizando a desigualdade de Poincaré $\|u\|_{L^2} \leq C \|\nabla u\|_{L^2}$, portanto

$$|b(u, v)| \leq (1 + a + \lambda) \|\nabla u\|_{L^2} \|\nabla v\|_{L^2} = (1 + a + \lambda) \|u\|_{1, \Omega} \|v\|_{1, \Omega}.$$

Estamos assim nas condições do teorema de Lax-Milgram em $H_0^1(\Omega)$, podendo-se garantir a existência e unicidade de solução do problema em $H_0^1(\Omega)$ desde que $f \in (H_0^1(\Omega))' = H^{-1}(\Omega)$.

c) Resulta da estimativa (6.16), considerando $m = 3$, dado que se tratam de polinómios cúbicos. O facto de se assumir que $u \in H^4(\Omega)$ garante que $|u|_{4, \Omega}$ existe.

17. Considere o problema num domínio $\Omega = B(0, 1) \subset \mathbf{R}^2$

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\beta(x)\nabla u(x)) + u(x) = f(x) \text{ em } \Omega \\ u = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases}$$

em que $f(x) = \begin{cases} 1 \text{ em } B(0, 0.25) \\ -1 \text{ em } B(0, 1) \setminus B(0, 0.25) \end{cases}$

a) Escreva a formulação variacional associada ao problema, indicando as formas bilinear, linear e o espaço onde estão definidas. Qual o funcional que se pretende minimizar?

b) Imponha condições sobre β de forma a garantir que o problema esteja bem posto. Qual a regularidade que garante para u ?

c) Considere a aproximação usando elementos finitos de Lagrange lineares. Indique como calcular o integral num elemento (i, j) da matriz do sistema discreto, em que as funções base tenham apenas um triângulo comum E , tal que $F(\hat{E}) = E$, a partir das funções de forma no triângulo de referência \hat{E} .

d) Sabendo que β é um polinómio de grau q , qual o grau da fórmula de quadratura que permite obter valores exactos na matriz? Justifique.

e) Deduza a estimativa de erro para $\|u - u_h\|_{0,\Omega}$ usando elementos finitos de Lagrange lineares. Se utilizarmos elementos de Lagrange quadráticos podemos garantir a priori a estimativa de erro $\|u - u_h\|_{1,\Omega} = O(h^2)$? Justifique.

Resolução:

a) Multiplicando por uma função teste v e integrando,

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}(\beta(x)\nabla u(x))v(x) + u(x)v(x)dx = \int_{\Omega} f(x)v(x)dx$$

agora, da fórmula de integração por partes vem

$$\int_{\Omega} \beta(x)\nabla u \cdot \nabla v - \int_{\partial\Omega} \partial_n u v + \int_{\Omega} uv = \int_{\Omega} fv$$

Considerando o espaço $H_0^1(\Omega)$, temos $v = 0$ em $\partial\Omega$ e obtemos

$$\int_{\Omega} \beta(x)\nabla u \cdot \nabla v + \int_{\Omega} uv = \int_{\Omega} fv,$$

definindo a forma bilinear em $H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$

$$b(u, v) = \int_{\Omega} \beta(x)\nabla u \cdot \nabla v + \int_{\Omega} uv$$

e a forma linear em $H_0^1(\Omega)$

$$l(v) = \int_{\Omega} fv.$$

A forma bilinear é simétrica (o β em nada influi na troca de u e v), portanto o problema variacional corresponde a minimizar o funcional

$$J(v) = \frac{1}{2}b(v, v) - l(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \beta(x)|\nabla v|^2 + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |v|^2 - \int_{\Omega} fv,$$

sobre as funções v que estão em $H_0^1(\Omega)$.

b) Vamos aplicar o Teorema de Lax-Milgram. Precisamos de mostrar coercividade e continuidade de b em $H_0^1(\Omega)$ onde sabemos que a norma é a seminorma de $H^1(\Omega)$.

(i) Coercividade em $H_0^1(\Omega)$.

Sabemos que

$$b(u, u) = \int_{\Omega} \beta(x) \nabla u \cdot \nabla u + \int_{\Omega} u^2 \geq m \|u\|_{1,\Omega}^2 \geq m |u|_{1,\Omega}^2$$

em que $m = \min\{B, 1\}$, sendo $\inf_{x \in \Omega} \beta(x) = B > 0$, assumimos que β é contínua e positiva em $\bar{\Omega}$.

(ii) Continuidade em $H_0^1(\Omega)$.

Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$|b(u, v)| \leq \left| \int_{\Omega} \beta(x) \nabla u \cdot \nabla v \right| + \left| \int_{\Omega} uv \right| \leq M \|\nabla u\|_{0,\Omega} \|\nabla v\|_{0,\Omega} + \|u\|_{0,\Omega} \|v\|_{0,\Omega}$$

e pela desigualdade de Poincaré,

$$\|u\|_{0,\Omega} \|v\|_{0,\Omega} \leq C^2 |u|_{1,\Omega} |v|_{1,\Omega}.$$

Assim, temos

$$|b(u, v)| \leq (M + C^2) |u|_{1,\Omega} |v|_{1,\Omega}$$

c) Sejam ψ_i, ψ_j as funções base cujo suporte comum é apenas um certo triângulo E . O elemento (i, j) da matriz é dado por

$$b(\psi_i, \psi_j) = \int_E \beta(x) \nabla \psi_i \cdot \nabla \psi_j + \int_E \psi_i \psi_j.$$

Como há apenas um triângulo comum, não se trata de um elemento da diagonal, ou seja $\psi_i \neq \psi_j$. Assim sendo, em E , ψ_i é definida por uma função de forma φ_i diferente da função de forma φ_j que define ψ_j , a estas funções de forma diferentes em E irão corresponder funções de forma diferentes em \hat{E} , que iremos designar por $\hat{\varphi}_1$ e por $\hat{\varphi}_2$, respectivamente. Como φ_i, φ_j são polinómios do primeiro grau, o termo $\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j$ será uma constante que designamos K_{ij} .

Por outro lado temos $\varphi_i(x) = \hat{\varphi}_1(F^{-1}(x))$ e $\varphi_j(x) = \hat{\varphi}_2(F^{-1}(x))$, e portanto

$$b(\psi_i, \psi_j) = \int_E \beta(x) K_{ij} dx + \int_E \hat{\varphi}_1(F^{-1}(x)) \hat{\varphi}_2(F^{-1}(x)) dx.$$

Agora podemos levar a integração para o elemento de referência,

$$b(\psi_i, \psi_j) = \int_{\hat{E}} \beta(F(\hat{x})) K_{ij} |\det A| d\hat{x} + \int_{\hat{E}} \hat{\varphi}_1(\hat{x}) \hat{\varphi}_2(\hat{x}) |\det A| d\hat{x},$$

em que $x = F(\hat{x}) = A\hat{x} + b$ e aplicar uma fórmula de quadratura,

$$b(\psi_i, \psi_j) = \sum_{m=1}^M \hat{w}_m \beta(F(\hat{x}_m)) K_{ij} |\det A| + \sum_{m=1}^M \hat{w}_m \hat{\varphi}_1(\hat{z}_m) \hat{\varphi}_2(\hat{z}_m) |\det A|,$$

em que \hat{w}_m são os pesos e \hat{z}_m os pontos de Gauss no triângulo de referência.

Considerando por exemplo $\hat{\varphi}_1(x, y) = x$ e $\hat{\varphi}_2(x, y) = y$ e a fórmula de Gauss com os 3 pontos médios (correcta para polinómios de grau 2) obtemos:

$$b(\psi_i, \psi_j) = \sum_{m=1}^3 \frac{1}{6} \beta(F(\hat{x}_m, \hat{y}_m)) K_{ij} |\det A| + \sum_{m=1}^3 \frac{1}{6} \hat{x}_m \hat{y}_m |\det A|.$$

que será correcta se β for um polinómio de grau 2.

d) Precisamos que as fórmulas tenham pelo menos grau 2 para calcular exactamente $\int_{\hat{E}} \hat{\varphi}_1(\hat{x}) \hat{\varphi}_2(\hat{x})$.

No outro integral apenas entra a função β , logo precisamos que a fórmula tenha pelo menos grau q .

Juntando estas duas informações concluímos que o grau terá que ser $\max\{2, q\}$.

e) Como a função f apresenta uma descontinuidade em $B(0, 0.25)$ não tem derivadas regulares, no entanto podemos garantir que pelo menos é uma função $L^2(\Omega)$, e pelo teorema de regularidade concluímos que $u \in H^2(\Omega)$, pois assumimos que tem fronteira regular... é um círculo!

Estando a usar elementos de Lagrange lineares, $m = 1$, e podemos assim apresentar a estimativa

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq Ch^2 \|u\|_{2,\Omega} \leq \tilde{C}h^2,$$

já que se $u \in H^2(\Omega)$ então $\|u\|_{2,\Omega}$ é limitado por uma constante. Também temos,

$$\|u - u_h\|_{1,\Omega} \leq Ch^1 \|u\|_{2,\Omega} \leq \tilde{C}h.$$

Se usarmos elementos de Lagrange quadráticos, $m = 2$, e por isso deveríamos obter

$$\|u - u_h\|_{0,\Omega} \leq Ch^3 \|u\|_{3,\Omega}$$

e ainda

$$\|u - u_h\|_{1,\Omega} \leq Ch^2 \|u\|_{3,\Omega},$$

no entanto, como $f \notin H^1(\Omega)$, não garantimos que $u \in H^3(\Omega)$, e a norma $\|u\|_{3,\Omega}$ não é majorada por uma constante e esta estimativa não se pode aplicar a priori. Assim sendo, não podemos garantir que $\|u - u_h\|_{1,\Omega} \leq Ch^2$.

18. Considere elementos finitos triangulares definidos num triângulo de referência pelos 6 nós $\{(0, 0), (1, 0), (0, 1), (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}), (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}), (\frac{1}{6}, \frac{1}{6})\}$, em que as variáveis nodais estão definidas com condições sobre a função nos nós $\{(0, 0), (1, 0), (0, 1), (\frac{1}{4}, \frac{1}{4})\}$ e sobre a função e as derivadas nos nós $\{(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}), (\frac{1}{6}, \frac{1}{6})\}$.

a) Explícite as variáveis nodais e o sistema que permite obter a base de polinómios dual.

b) O sistema tem solução única? Justifique.

19. Considere o seguinte problema. A deflexão de uma barra é dada pela equação diferencial ordinária de quarta ordem

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(c(x) \frac{d^2 w}{dx^2}(x) \right) = f(x)$$

em que impomos as condições de fronteira:

$$\begin{cases} w(a) = \frac{dw}{dx}(a) = 0 \\ w(b) = \frac{dw}{dx}(b) = 0 \end{cases}$$

- a)** Escreva a formulação variacional associada a este problema, indicando a forma bilinear, a forma linear, o espaço de funções teste adequado e o funcional (de energia) que minimiza.
- b)** Impondo condições sobre $c(x)$ mostre que o problema está bem posto para $f \in H^{-2}(]a, b[)$.

Index

- Coeficientes de Lamé, 47
- Condição
 - de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), 76
 - de Dirichlet, 8
 - de Neumann, 8
 - de Robin, 8
- Consistência de um esquema, 62
- Convergência de um esquema, 62
- Coordenadas
 - baricêntricas, 120
 - polares, 24
- Crítério de Von Neumann, 59, 61
- Delta de Dirac, 10
- Derivada de Fréchet, 87
- Desigualdade
 - de Korn, 156
 - de Poincaré, 96
- Diferenças
 - Centradas (Primeira Ordem), 14
 - Centradas (Segunda Ordem), 15
 - Progressivas, 13
 - Regressivas, 13
- Dirac (delta de), 81
- Elemento Finito
 - curvilíneo, 138
 - de Argyris, 115
 - de Clough-Tocher, 116
 - de Hermite Cúbico, 113
 - de Lagrange Cúbico, 112
 - de Lagrange Linear, 110
 - de Lagrange Quadrático, 111
 - definição de Ciarlet, 109
 - Paralelotopo (caso 3D), 118
 - Rectangular, 116
 - Serendipity, 117
 - Simplicial (caso 3D), 117
- Equação
 - das Ondas, 9
 - de Black-Scholes, 9
 - de Laplace, 20
 - de Poisson, 7
 - de Schrodinger, 9
 - de Stokes, 49
 - do Calor, 9, 54
- Equivalentes afins (elementos finitos), 118
- Espaços de Sobolev, 169
- Esquema
 - Crank-Nicolson, 66
 - de Lax (Ondas), 76
 - Explícito (Calor), 57
 - Explícito Instavel (Ondas), 74
 - Implícito (Calor), 63
 - Implícito (Ondas), 75
 - Implícitos θ (Calor), 65
 - Lax-Wendroff (Ondas), 78
 - Leap-Frog (Ondas), 78
 - Semi-Implícito (Ondas), 75
- Estabilidade de um esquema, 61
- Forma bilinear
 - coerciva, 86
 - contínua, 86
- Fórmula
 - de Green, 162, 174
 - de integração por partes, 161
 - de Quadratura de Gauss, 139
 - para o quadrado, 140
 - para o triângulo, 141
- Formulação variacional, 85
- Função
 - Biharmónica, 46
 - cut-off, 91
 - de Heaviside, 165
 - Harmónica, 7
 - sub-harmónica, 28

Grau de uma aproximação, 11
 $H^{-m}(\Omega)$, 173
 $H^{1/2}(\partial\Omega)$, 172
 $H_0^1(\Omega)$, 91
 $H_0^m(\Omega)$
 caracterização, 173
 definição, 171
 Lei
 da Difusão de Fick, 8
 de Fourier da conductividade, 8
 de Ohm, 8
 Lema
 de Bramble-Hilbert, 125
 Matriz Booleana, 147
 Método
 de Galerkin, 99
 de Ritz, 89, 99
 de Gauss-Seidel, 40
 dos Coeficientes Indeterminados, 11
 SOR, 41
 Operador
 Bilaplaciano, 46
 de d'Alembert, 9
 de Difusão, 8
 de Laplace, 7
 de Traço, 172
 Elíptico, 19
 Parâmetro de degenerescência, 107
 Princípio
 do Máximo/Mínimo, 27, 28
 do máximo discreto, 34
 do Valor Médio, 28
 Problema
 de Cauchy, 29
 de Dirichlet, 26
 de Dirichlet-Neumann, 26
 de Neumann, 27
 Problemas
 Exteriores, 7
 Interiores, 7
 Solução
 clássica, 91
 forte, 91
 fraca, 91
 Tensor das Tensões, 47
 Teorema
 da divergência, 160
 de Céa, 101
 de Gauss, 160
 de Lax (e Lax-Richtmyer), 63
 de Lax-Milgram, 98
 de Rellich-Kondrachov, 174
 de Riesz, 94
 - desigualdade de Poincaré, 96
 do Traço, 172
 Triangulação, 108
 de Delauney, 108
 Unissolvência, 112
 $W^{m,p}$, 170

Bibliografia

- [1] Alves C.J.S., *Fundamentos de Análise Numérica I*. Secção de Folhas AEIST, 1999.
- [2] Atkinson K., *An Introduction to Numerical Analysis* (2nd. ed.). Wiley Intersc. Publ., New York, 1989.
- [3] Brenner S. C. & Scott L. R., *The Mathematical Theory of Finite Element Method*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [4] Brezis, H., *Analyse Fonctionnelle, Théorie et applications*. Masson, Paris, 1983.
- [5] Ciarlet P. G., *Numerical Analysis of the Finite Element Method*. North-Holland, New York, 1988.
- [6] Chen G. & Zhou J., *Boundary Element Methods*. Academic Press, London, 1992.
- [7] Evans, L. C., *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, Providence, 1998.
- [8] Egorov Y. V. & Shubin M. A., *Foundations of the Classical Theory of Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [9] Girault V. & Raviart P. A., *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations, Theory and Algorithms*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [10] Isaacson E. & Keller H. B., *Analysis of Numerical Methods*. Wiley Intersc. Publ., 1966.
- [11] Johnson C., *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Studentlitteratur, Lund, 1987.
- [12] Lapidus L. & Pinder G. F., *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*. Wiley Intersc. Publ., New York, 1999.
- [13] Oden J. T. & Reddy J. N., *An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements*. Wiley Intersc. Publ., , New York, 1976.
- [14] Quarteroni A. & Valli A., *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, New York, 1997.
- [15] Raviart P. A. & Thomas J. M., *Introduction à l'Analyse Numérique des Equations aux Dérivées Partielles*. Dunod, Paris, 1998.

- [16] Reddy J. N., *An Introduction to the Finite Element Method* (2nd. ed.). McGraw-Hill, New York, 1993.
- [17] Sansaulieu, L., *Calcul Scientifique*. Dunod, Paris, 2000.
- [18] Zeidler E., *Applied Functional Analysis (I)*. Springer-Verlag, New York, 1998.