



Problema de Sturm-Liouville – Alternativa para Determinação dos Autovalores.

Larissa R. Vieira, Renato F. Cantão, Antonio L. Venezuela

DFQM - Depto de Física, Química e Matemática - UFSCar, Campus Sorocaba

Rodovia João Leme dos Santos (SP-264), Km 110

Bairro do Itinga - Sorocaba - São Paulo - 18052-780

E-mails: larissarochevieira@gmail.com, rfcantao@ufscar.br, alvenez@ufscar.br

1 Introdução

Muitos fenômenos da Engenharia e Física são modelados pela equação de transporte de massa juntamente com condições de fronteira apropriadas. Para resolver este tipo de equação diferencial parcial são utilizados métodos numéricos e métodos numérico-analíticos (híbridos). No caso de usarmos um método híbrido, recaímos no problema de autovalor ou problema de Sturm-Liouville [3], dado por:

$$\frac{d}{dr} \left(g^{-1}(r) \frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} \right) + \lambda^2 f(r) g^{-1}(r) W(r) \psi(r) = 0 \quad (1)$$

para $r_0 \leq r \leq 1$, $r_0 \ll 1$, com condições homogêneas de Dirichlet:

$$\psi(r_0) = 0 \quad (2)$$

$$\psi(1) = 0 \quad (3)$$

sendo λ e ψ , respectivamente, o autovalor e a autofunção relativos ao λ . Nas Equações (2) e (3) podemos utilizar outras condições de contorno, tais como as condições de Neumann e mistas.

As funções f e g são definidas de acordo com o a equação de transporte de massa inicial relativamente ao sistema de coordenadas, a saber:

- Sistema de coordenadas polares: $f(r) = g(r) = \frac{1}{r}$.
- Sistema de coordenadas retangulares: $f(r) = g(r) = 1$.
- Sistema de coordenadas cilíndricas: $f(r) = 1$ e $g(r) = \frac{1}{r}$.

A função W é chamada de *função peso*, para a qual definimos somente o caso $W(r) = 1$.

Se considerarmos o sistema de coordenadas cilíndricas $W(r) = 1$, a Equação (1) será a Equação de Bessel de ordem zero. No caso de $W(r) = 1$ e do sistema de coordenadas serem polares ou cilíndricas, a autofunção, ψ , relativa ao autovalor λ , é dada pela combinação linear das funções de Bessel de primeira e segunda classes, respectivamente, J_0 e Y_0 .

No desenvolvimento da técnica híbrida, ocorrem dificuldades computacionais relacionadas à determinação dos autovalores. Os comandos que calculam raízes de polinômios, por exemplo (no caso da linguagem Python [2, 4], `scipy.optimize.newton` ou `scipy.optimize.bisect`), exigem que seja dado um chute inicial próximo à raiz, ou um intervalo contendo a raiz. Usualmente, fixamos o valor de π , contudo detectamos que, em muitos problemas modelados pela equação de transporte de massa, isto leva a sérios erros no perfil de concentração.

Uma alternativa para eliminar esta dificuldade foi a determinação de um intervalo de comprimento fixo, $I \subset \mathbb{R}$, sendo $A_i A_{i+1}$ segmento da reta Ox e $A_i A_{i+1} = I_i = I, \forall i \in \mathbb{N}^*, I_i \cap I_{i+1} = \emptyset$, e $\bigcup_{i=1}^{\infty} I_i = \mathbb{R}_+$, tal que cada autovalor $\lambda_i \in I_i$ e o valor \bar{x}_{i+1} do ponto de abscissa A_{i+1} é o chute inicial no método de Newton para determinação da raiz λ_i .

Considerando a Equação (1), respectivamente, em coordenadas cilíndricas e coordenadas polares, sendo $W(r) = 1$ e a condição da Equação (2), as autofunções são dadas por:

$$\Psi(r) = -Y_0(\lambda)J_0(\lambda r) + J_0(\lambda)Y_0(\lambda r) \quad (4)$$

$$\Psi(r) = -2Y_0(2\lambda)J_0(2\lambda\sqrt{r}) + 2J_0(2\lambda)Y_0(2\lambda\sqrt{r}). \quad (5)$$

Os autovalores λ das Equações (4) e (5) são determinados usando a condição da Equação (1). Assim:

$$-Y_0(\lambda)J_0(\lambda r_0) + J_0(\lambda)Y_0(\lambda r_0) = 0 \quad (6)$$

$$-2Y_0(2\lambda)J_0(2\lambda\sqrt{r_0}) + 2J_0(2\lambda)Y_0(2\lambda\sqrt{r_0}) = 0. \quad (7)$$

As funções de Bessel de primeira e segunda classe, respectivamente, são dadas por:

$$J_0(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (x)^{2n}}{2^{2n} (n!)^2} \quad (8)$$

e

$$Y_0(x) = \frac{2}{\pi} \left[\left(\gamma + \ln \frac{x}{2} \right) J_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{2^{2m} (n!)^2} H_n x^{2n} \right] \quad (9)$$

sendo $H_n = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n}$ e γ a constante de Euler-Máscheroni.

Na Equação (9) temos o logaritmo natural, que foi expandido em série de Taylor nas proximidades do ponto x_0 , ou seja:

$$h(x) = \sum_{m=0}^{\infty} h^{(m)}(x_0) \frac{(x-x_0)^m}{m!} \quad (10)$$

com $h(x) = \ln \frac{x}{2}$.

Substituindo as Equações (8)-(10) nas Equações (6)-(7), obtemos a equação polinomial na variável λ do tipo:

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m \lambda^m = 0 \quad (11)$$

onde $a_m, m = 1, 2, 3, \dots$ são os coeficientes do polinômio.

Tomando somente as raízes reais deste polinômio, se considerarmos a função polinomial definida por $p(\lambda) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \lambda^m$, o conjunto solução para $p(\lambda) = 0$ será $S = \{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m, \dots\}$, sendo $\lambda_i, i = 0, 1, 2, \dots$ os autovalores reais, com $0 < \lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m < \dots$.

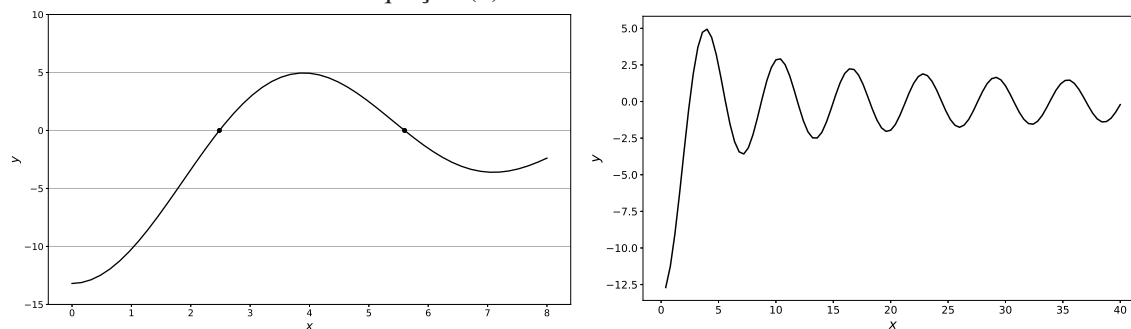
Inicialmente truncamos a expansão dada pela Equação 10, como sendo M , tal que $|b_{M,m} - b_{M-1,m}| < \epsilon$, sendo $b_m, m = 0, 1, 2, \dots$, os coeficientes da expansão de Taylor de h e a precisão (ou erro de truncamento), $\epsilon, \epsilon \ll 1$. Com isso, tomamos o truncamento M também para as Equações (8)-(9). Assim, o polinômio p fica bem definido no intervalo $[0, x_0]$, com x_0 como o raio de convergência de h .

Consideremos os intervalos $[0, \frac{x_0}{3}]$ e $[\frac{x_0}{3}, \frac{2x_0}{3}]$. Por meio do método de Newton para determinação de zeros de função, os autovalores iniciais são calculados como segue: se o valor inicial é $x_0/3$, determinamos λ_0 e se o valor inicial é $2x_0/3$, determinamos λ_1 . No eixo Ox , consideremos o ponto A_0 cujo valor da abscissa é λ_0 e o ponto A_1 cujo valor da abscissa é λ_1 . Finalmente, definimos o segmento fixo $I = A_0 A_1$ de comprimento $d, d = \lambda_1 - \lambda_0$.

2 Análise e discussão

Foram gerados dois gráficos para coordenadas cilíndricas (em outras coordenadas os resultados são análogos). A Figura 1 mostra, à esquerda, o gráfico do polinômio $p(\lambda)$ no intervalo $[0, 9]$. À direita, temos o gráfico gerado pela Equação (6) onde são mostrados os autovalores (ou raízes).

Figura 1: Gráficos relativos às Equações (6) e (11) em coordenadas cilíndricas. No gráfico da esquerda consideramos $x_0 = 9$ e $M = 20$ na Equação (11) e obtivemos $\lambda_0 \approx 2,4821$, $\lambda_1 \approx 5,6018$ e $d \approx 3,1196$. À direita temos os zeros relativos à Equação (6).



3 Conclusão

Conforme o sistema de coordenadas, geramos intervalos de comprimentos fixos d (Figura 1, à esquerda) e estes, por sua vez, auxiliaram na determinação dos autovalores (Figura 1, à direita) por meio do método de Newton. Aplicamos o processo da técnica híbrida para resolver problemas relativos ao transporte de massa nas coordenadas cilíndricas e polares. Os resultados obtidos para perfil de concentração estão em concordância com o fenômeno físico.

4 Agradecimentos

À FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo), processo 15/16106-8.

Referências

- [1] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno, 10ª Edição, LTC, 2015.
- [2] T. S. Developers, SageMath, the SageMathematics Software System (Version 7.2), <http://www.sagemath.org>, 2016.
- [3] Q. Kong, H. Wu, A. Zettl, Sturm-Liouville Problems with Finite Spectrum, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 263 (2), 2001, ISSN 0022-247X, doi:10.1006/jmaa.2001.7661.
- [4] F. Pérez, B. E. Granger, IPython: a System for Interactive Scientific Computing, Computing in Science and Engineering 9 (3) (2007) 21-29, ISSN 1521-9615, doi:10.1109/MCSE.2007.53, URL <http://ipython.org>.