Computação Científica II

Métodos numéricos para resolver equações diferencias

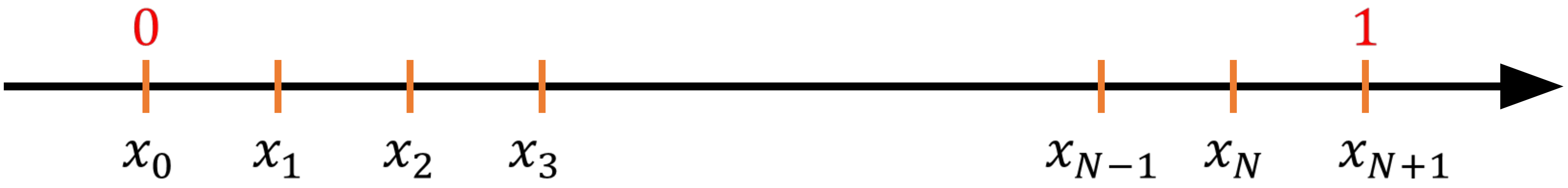
2020-PLE

Problema de valor limite

- $$-\frac{d^2u}{dt^2} = f(x) \qquad 0 < x < 1$$
  $$u(0) = 0 \qquad\qquad u(1) = 0$$

- Agora vamos resolver este problema numericamente.

- Primeiro, precisamos separar o intervalo em pontos da grade, onde calcularemos a solução.



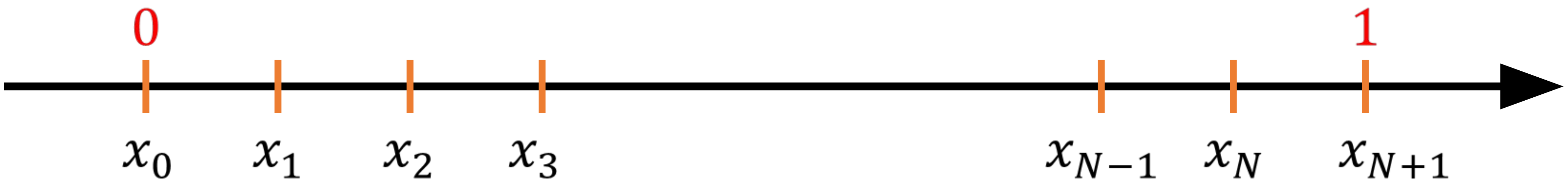
Basic Grid

- Primeiro, precisamos separar o intervalo em pontos da grade, onde calcularemos a solução.

- Observe que temos pontos internos $(x_1, \dots, x_N)$ e a solução deve ser obtida para eles.

- Também temos

$$h(N+1) = 1 \qquad\qquad x_i = hi \quad i = 0, \dots, N+1$$



Problema de teste

- $$-\frac{d^2u}{dt^2} = f(x) \qquad 0 < x < 1$$
$$u(0) = 0 \qquad\qquad u(1) = 0$$

- Podemos usar a fórmula de segunda ordem para a segunda derivada como
$$\frac{d^2u}{dt^2}(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

- Usando isso, podemos aproximar a equação principal como
$$-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1} = h^2 f(x_i)$$

Problema de teste

- Usando isso, podemos aproximar a equação principal como

$$-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1} = h^2 f(x_i)$$

- Essa relação é válida para todos os pontos internos. Para os pontos limites nós temos

$$u_0 = 0, \qquad u_{N+1} = 0$$

- Usando isso para os pontos 1 e N, teremos

$$2u_1 - u_2 = h^2 f(x_1)$$

$$2u_N - u_{N-1} = h^2 f(x_N)$$

Problema de teste

- Agora temos esse conjunto de equações

$$2u_1 - u_2 = h^2 f(x_1)$$
$$-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1} = h^2 f(x_i) \qquad i = 2, \dots, N-1$$
$$2u_N - u_{N-1} = h^2 f(x_N)$$

- Podemos escrever essas equações como $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots \\ & & \vdots & & \\ \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \cdots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \qquad f = h^2 \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N) \end{bmatrix}$$

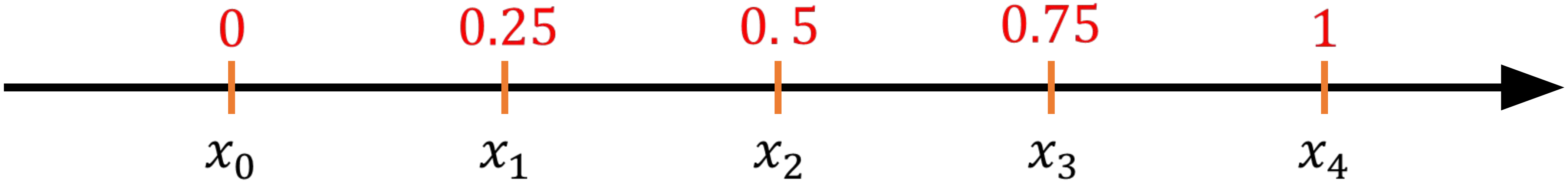
Exemplo 1

- Vamos testar este método. Queremos resolver o seguinte problema.

$$-\frac{d^2u}{dt^2} = f(x) = \sin(\pi x) \qquad 0 < x < 1$$

$$u(0) = 0 \qquad\qquad u(1) = 0$$

- Por uma questão de simplicidade, escolhemos N = 3. Portanto, a grade será como



Exemplo

- Vamos testar este método. Queremos resolver o seguinte problema.

$$-\frac{d^2u}{dt^2} = f(x) = \sin(\pi x) \qquad 0 < x < 1$$

$$u(0) = 0 \qquad\qquad u(1) = 0$$

- As equações diferenciais serão

$$-{\color{red}u_0} + 2u_1 - u_2 = h^2 \sin(\pi x_1)$$

$$-u_1 + 2u_2 - u_3 = h^2 \sin(\pi x_2)$$

$$-u_2 + 2u_3 - {\color{red}u_4} = h^2 \sin(\pi x_3)$$

Exemplo

- $$-u_0 + 2u_1 - u_2 = h^2 \sin(\pi x_1)$$
$$-u_1 + 2u_2 - u_3 = h^2 \sin(\pi x_2)$$
$$-u_2 + 2u_3 - u_4 = h^2 \sin(\pi x_3)$$

- Portanto, o sistema de equações discretizadas será

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = 0.25^2 \begin{bmatrix} \sin(\pi/4) \\ \sin(\pi/2) \\ \sin(3\pi/4) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \times \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1 \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{32} \begin{bmatrix} \sqrt{2}+1 \\ \sqrt{2}+2 \\ \sqrt{2}+1 \end{bmatrix}$$

Problema de teste

- Podemos facilmente resolver este sistema linear para obter a solução para os pontos internos.

- Preste atenção que a matriz A é uma matriz $N \times N$, simétrica, positiva definitiva e tridiagonal.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots \\ & & \vdots & & \\ \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \cdots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Problema de teste

- Vamos estudar as propriedades da matriz A. Primeiro comece com seus autovalores.

$$A = tridiag_N(-1,2,-1) = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

- O autovalor desta matriz pode ser calculado resolvendo $A\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$.

$$-u_{k-1} + 2u_k - u_{k+1} = \lambda u_k \qquad k = 1, \dots, n$$

- Nós também temos esses pontos de partida, $u_0 = u_{N+1} = 0$.

Problema de teste

- $$-u_{k-1} + 2u_k - u_{k+1} = \lambda u_k \qquad k = 1, \dots, n$$
- Nós também temos esses pontos de partida, $u_0 = u_{N+1} = 0$.
- Lembre-se dos métodos de múltiplos passos. A equação característica para esta relação é

$$\mu^2 + (\lambda - 2)\mu + 1 = 0$$

- Nós sabemos do último capítulo que

$$u_k = C_1\mu_1^k + C_2\mu_2^k$$

- Da equação característica que conhecemos $\mu_1\mu_2 = 1, \mu_1 + \mu_2 = 2 - \lambda$.

Problema de teste

- $$\mu^2 + (\lambda - 2)\mu + 1 = 0$$
- Nós sabemos do último capítulo que
$$u_k = C_1\mu_1^k + C_2\mu_2^k$$
- Da equação característica que conhecemos $\mu_1\mu_2 = 1, \mu_1 + \mu_2 = 2 - \lambda$.
- Se escrevermos a primeira raiz na forma polar como $\mu_1 = re^{i\phi}$, a segunda será
$$\mu_2 = \frac{1}{r}\, e^{-i\phi}$$

Problema de teste

- $$\mu^2 + (\lambda - 2)\mu + 1 = 0$$
- De $u_0 = 0$, temos $C_2 = -C_1$. Portanto, a solução é
$$u_k = C_1\left(\mu_1^k - \mu_2^k\right)$$
- De $u_{N+1} = 0$, temos
$$u_{N+1} = C_1(\mu_1^{N+1} - \mu_2^{N+1}) = 0 \rightarrow \left(\frac{\mu_1}{\mu_2}\right)^{N+1} = 1$$
- Ou
$$r^2 e^{2i\phi(N+1)} = 1$$

Problema de teste

- $$r^2 e^{2i\phi(N+1)} = 1$$

- Isso nos força a ter

$$r = 1, \qquad 2i\phi(N+1) = 2\pi i k \quad k = 1, \dots, N$$

Ou

$$\phi_k = \frac{\pi k}{n+1} \qquad k = 1, \dots, N$$

- Portanto, finalmente temos

$$\mu_1 = e^{i\phi}, \qquad \mu_2 = e^{-i\phi}$$

Problema de teste

- $$\mu^2 + (\lambda - 2)\mu + 1 = 0$$
- Da equação característica que temos

$$2 - \lambda = \mu_1 + \mu_2 = e^{i\phi} + e^{-i\phi} = 2\cos(\phi)$$

- Daí os autovalores são

$$\lambda_k = 2(1 - \cos(\phi_k)) = 4\sin^2\left(\frac{\phi_k}{2}\right) \qquad k = 1, \dots, N$$

- Observe que

$$\lambda_{max} = \lambda_n \approx 4 \qquad\qquad \lambda_{min} = \lambda_1 \approx \frac{\pi^2}{(n+1)^2}$$

Problema de teste

- Os autovalores são

$$\lambda_k = 2(1 - \cos(\phi_k)) = 4\sin^2\left(\frac{\phi_k}{2}\right) \qquad k = 1, \dots, N$$

- Observe que

$$\lambda_{max} = \lambda_n \approx 4 \qquad\qquad \lambda_{min} = \lambda_1 \approx \frac{\pi^2}{(n+1)^2}$$

- Todos os autovalores são reais, distintos e positivos.
- Podemos concluir que o inverso de A existe e também possui apenas elementos positivos.

Problema de teste

- Todos os autovalores são reais, distintos e positivos.
- Podemos concluir que o inverso de A existe e também possui apenas elementos positivos.
- Portanto, para qualquer número de pontos internos, esse problema tem uma solução.
- Tambem, se $f(x) \geq 0$, a solução numérica para os pontos internos também será positiva.

Observação

- A matriz A é tridiagonal.

$$A = tridiagonal_N(-1,2,-1)$$

- Computacionalmente, tem dois benefícios para nós.
- Armazenamento de computador: Nós só precisamos salvar diagonais não-zero de A. É muito menos do que armazenar uma matriz completa.
- Hora do computador: O número de operações de ponto flutuante (flops), necessárias para resolver o $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}$, é muito menor para uma matriz tridiagonal.

Observação

- Por exemplo, para uma matriz $N \times N$ completa usando a eliminação de Gauss, precisamos de cerca de $N^3/3$ flops para resolver o sistema.
- Mas o mesmo problema com a matriz tridiagonal só precisará de $5N$ operações.
- Preste atenção. Para uma matriz completa, precisamos armazenar N^2 elementos, enquanto que para uma matriz tridiagonal, precisamos apenas salvar $3N - 2$ elementos.

Exemplo 1

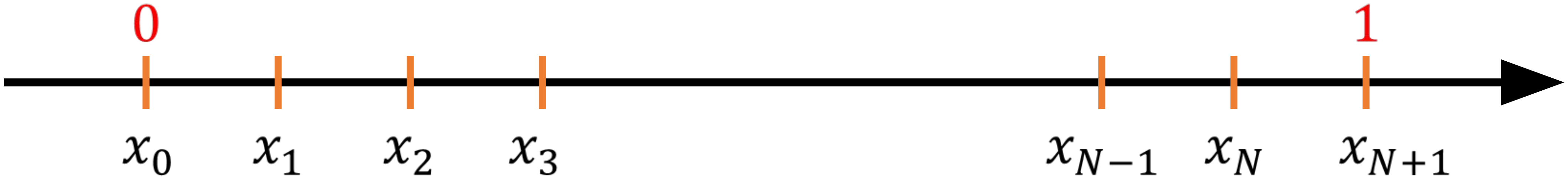
- Vamos resolver essa equação.

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = f(x) = \sin(\pi x) \qquad u(0) = 0, u(1) = 0$$

- Use o método de diferença central de segunda ordem para a derivada.

$$-\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = f(x_i)$$

$$h(N+1) = 1 \qquad\qquad x_i = hi \quad i = 0, \ldots, N+1$$



Exemplo 1

- lembre-se de que podemos escrever as equações como um sistema como $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots \\ & & \vdots & & \\ \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \cdots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \qquad f = h^2 \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N) \end{bmatrix}$$

- Execute o código para $N = 3,7,15,31,63,127$.
- Calcule o erro entre a solução exata e a solução numérica no ponto $x = 0.5$.
- Calcule a ordem do método.

A solução de um sistema linear

```
    A.append(a)
    x.append(h*i)
    #b.append(h*h*np.sin(np.pi*x[i-1]))
    ue.append(np.sin(np.pi*x[i-1])/np.pi/np.pi)
    b.append(h*h*np.exp(x[i-1]+1.0))
# solve system
u = np.linalg.solve(A, b)
u[int((N-1)/2)]-np.sin(np.pi*0.5)/np.pi/np.pi
```

Exemplo 2

Vamos resolver essa equação (Advection-Diffusion).

$$-\epsilon \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 0 \qquad u(0) = 0, u(1) = 1$$

- O primeiro termo corresponde ao transporte de difusão, enquanto o segundo termo é transporte de convecção.
- ϵ é uma constante positiva.
- A solução geral é $u(x) = C_1 + C_2 e^{x/\epsilon}$.
- Aplicando condições de contorno, a solução é

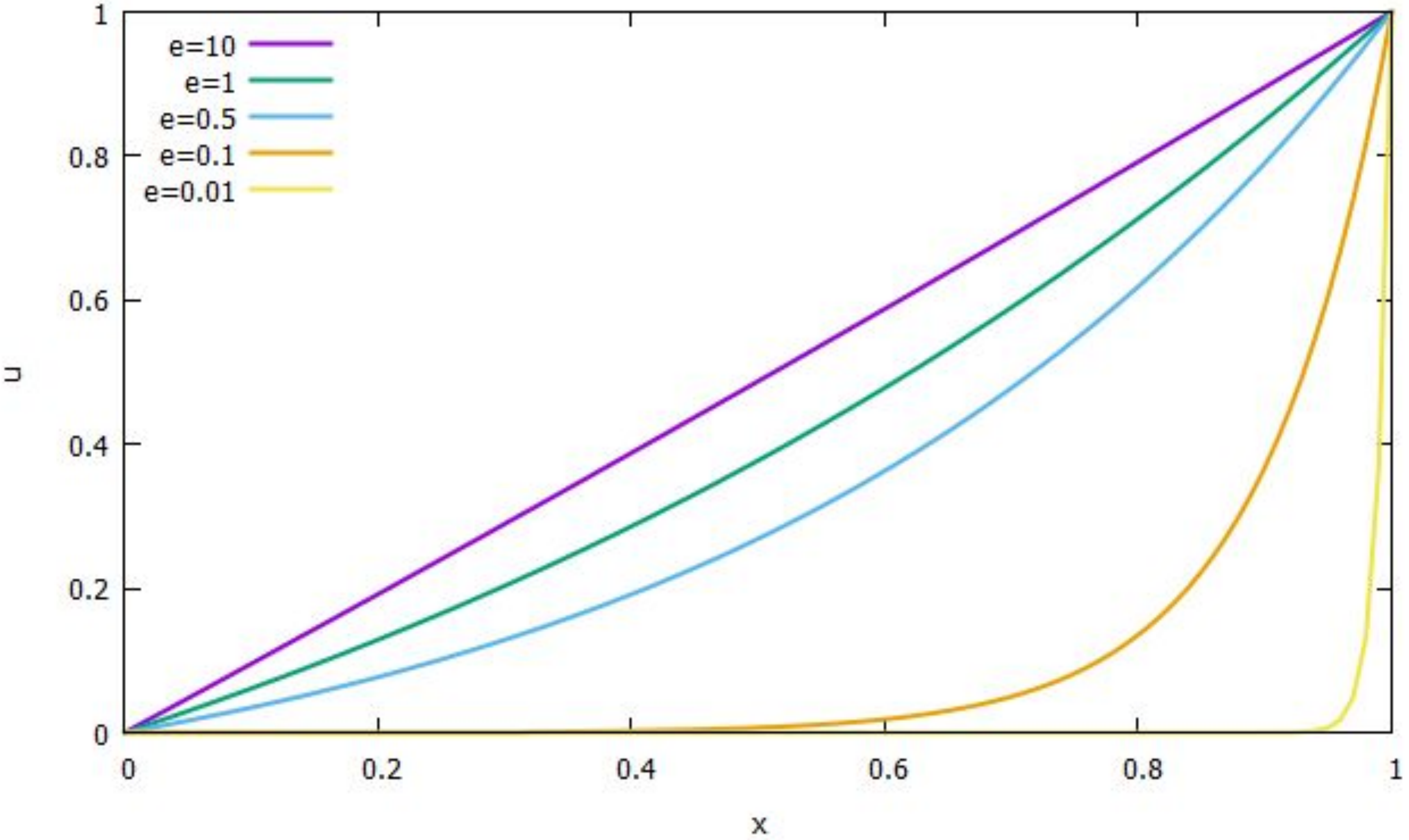
$$u(x) = \frac{e^{x/\epsilon} - 1}{x^{1/\epsilon} - 1}$$

Exemplo 2

- (Advection-Diffusion)

$$-\epsilon \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 0$$

$$u(x) = \frac{e^{x/\epsilon} - 1}{x^{1/\epsilon} - 1}$$



Exemplo 2

- $$-\epsilon \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 0 \qquad u(0) = 0, u(1) = 1$$
- Aplicando condições de contorno, a solução é
$$u(x) = \frac{e^{x/\epsilon} - 1}{x^{1/\epsilon} - 1}$$
- Para $\epsilon \gg 1$, temos $u(x) \approx x$, que é uma linha reta entre $(0,0)$ e $(1,1)$.
- Para $0 < \epsilon \ll 1$, temos $u(x) \approx e^{-(1-x)/\epsilon}$, que é quase igual a zero em todos os lugares, exceto próximo de $x = 1$, onde $u(1) = 1$. A solução faz um salto em $x = 1$.
- Dizemos que o problema tem um “boundary layer” neste ponto.

Exemplo 2

- Vamos resolver essa equação (Advection-Diffusion).

$$-\epsilon \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 0 \qquad u(0) = 0, u(1) = 1$$

- Use a diferença central para ambos os termos.

$$-\epsilon \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = 0 \qquad i = 0, \dots, N$$

- Resolva a equação para $\epsilon = 0.01$ e $h = 0.1, 0.01$.

- Plote os resultados e a solução exata.

Exemplo 2

- Vamos resolver essa equação (Advection-Diffusion).

$$-\epsilon \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 0 \qquad u(0) = 0, u(1) = 1$$

- Use a diferença central para o primeio termo e diferença backward para o ultimo.

$$-\epsilon \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = 0 \qquad i = 0, \dots, N$$

- Resolva a equação para $\epsilon = 0.01$ e $h = 0.1, 0.01$.