

Computação Científica II

Métodos numéricos para resolver equações diferenciais

2020-PLE

scientific.computing.II.2018@gmail.com

Lembrete

- O que é uma equação diferencial?
 - É uma relação entre uma função e seus derivados.

- Por exemplo para função $u(t)$

$$\frac{du}{dt} = au$$

- Ou para função $u(t, x)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

- Ou para função $u(t, x, y)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

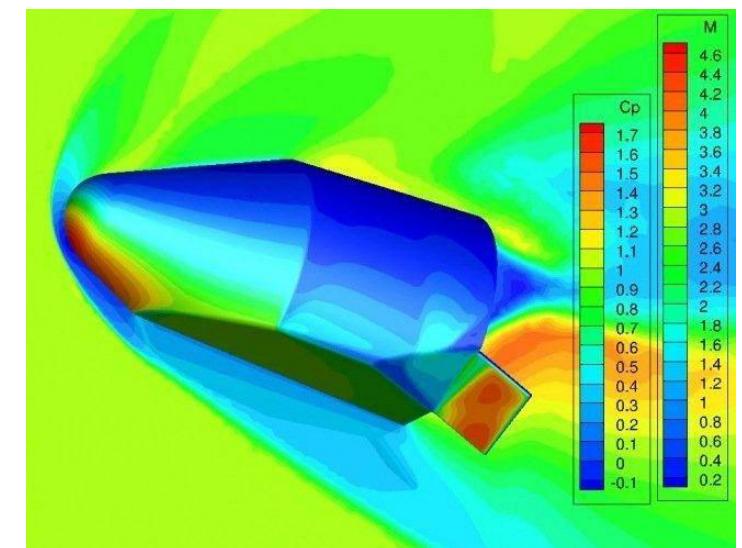
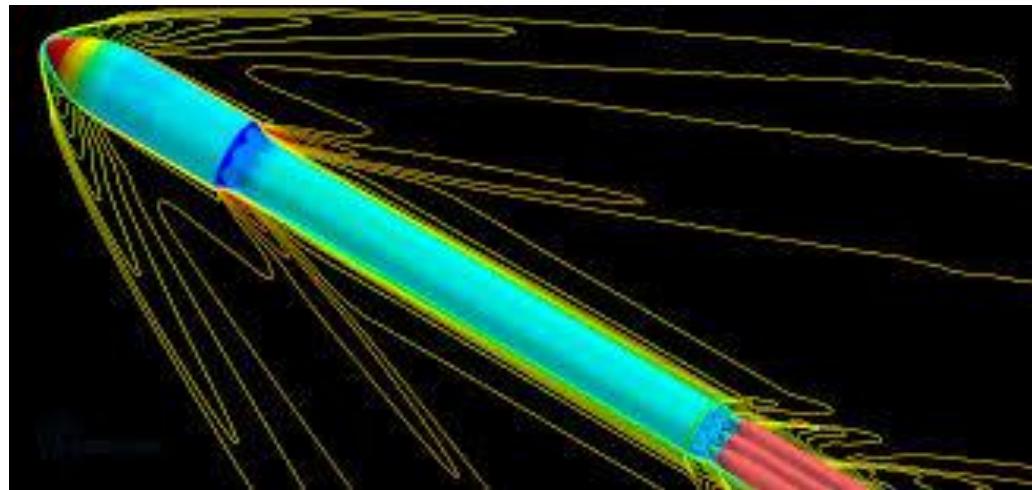
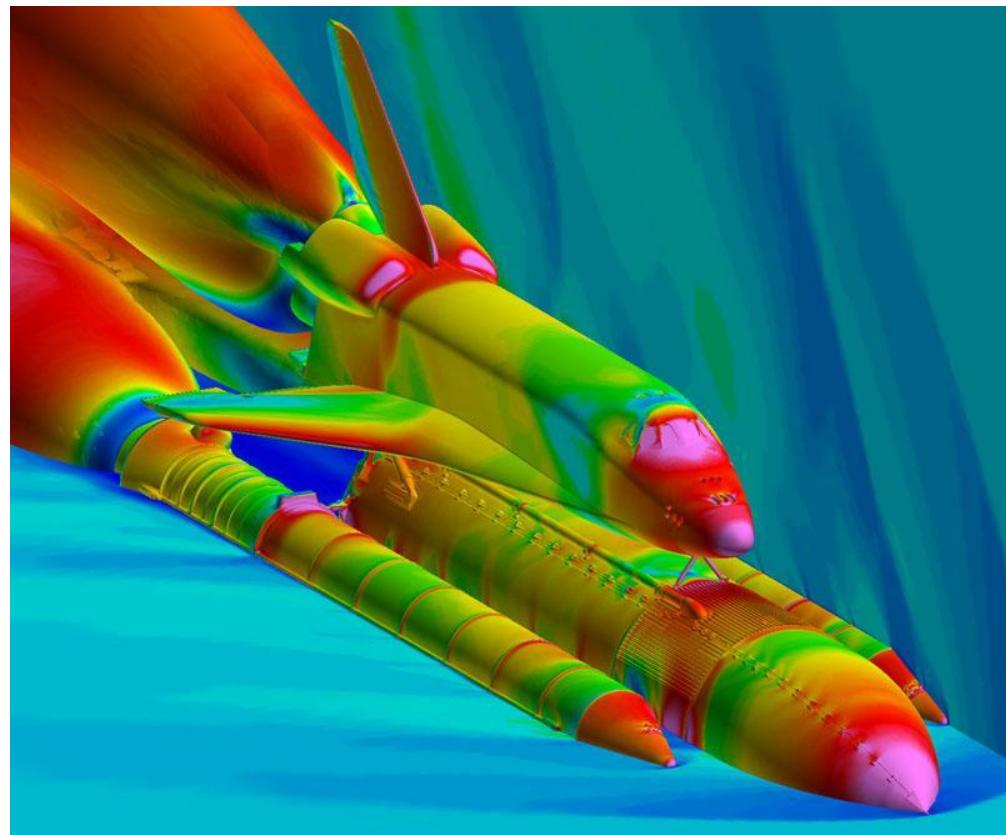
Onde os encontramos?

- Física
 - Mecânica clássica, Termodinâmica, dinâmica de fluidos, transferência de calor, mecânica sólida, mecânica quântica,...
- Química
 - Reacções, decaimento radioativo, ...
- Engenharia
 - Mecânica, químico, civil, aeroespacial, naval, ...
- Biologia
 - Crescimento populacional, resposta do neurônio, ...
- Economia
 - Crescimento econômico, relação publicidade-venda, ...

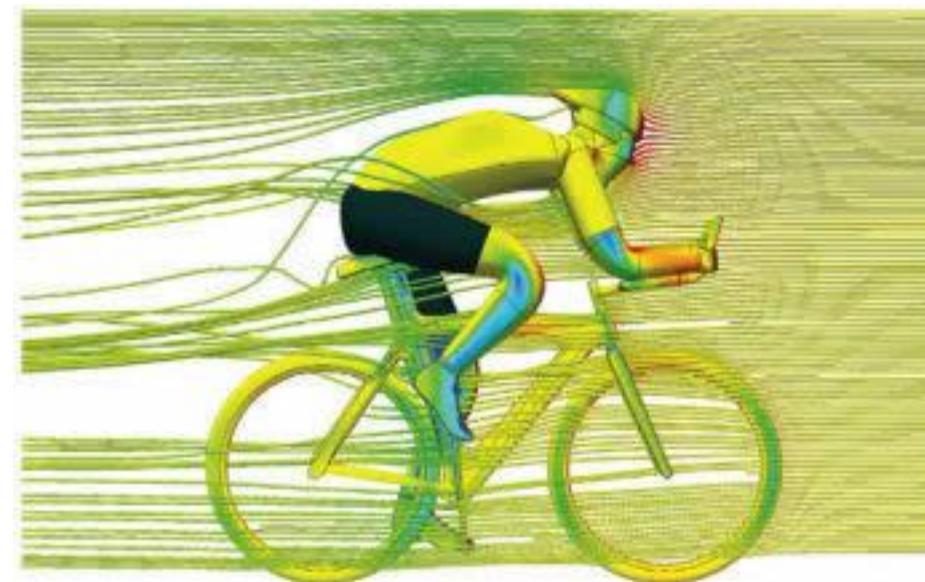
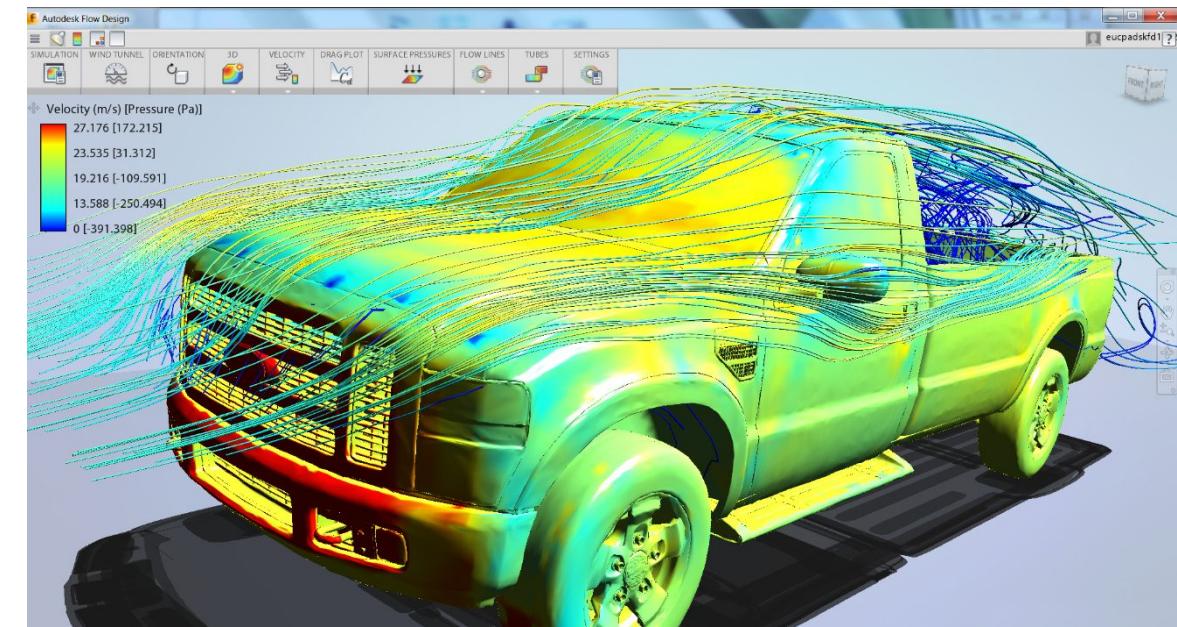
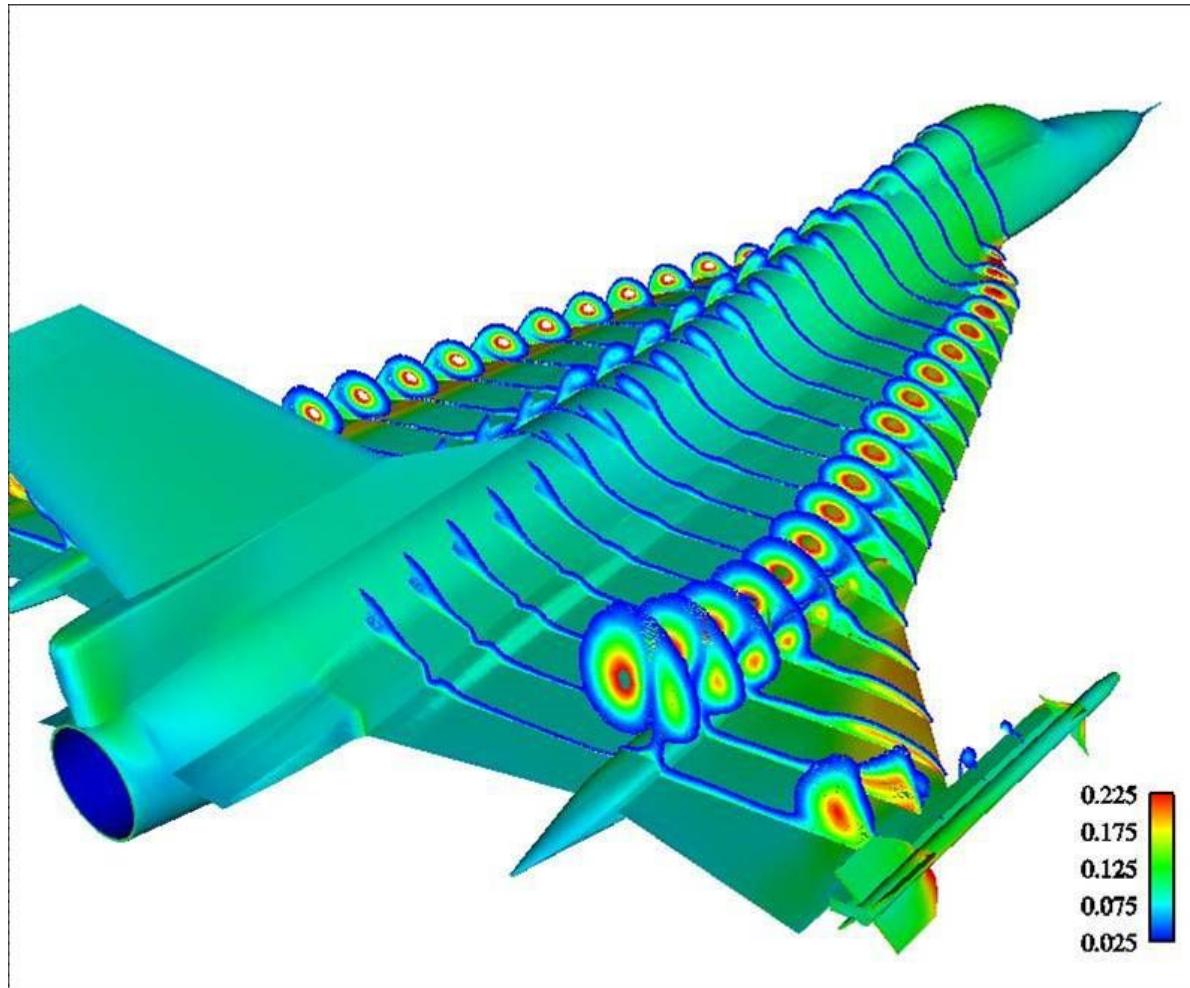
Onde os encontramos?

- De quase 200 anos atrás, até agora, e para o futuro previsto, a maior parte da física e engenharia depende de equações diferenciais.
- Isaac Newton (1642-1727)
- Leibniz (1646-1716)
- James Bernoulli (1654-1705) ; John Bernoulli (1667-1748)
- Joseph Louis Lagrange (1736-1813)
- Jean Le Rond d'Alembert (1717-1783)

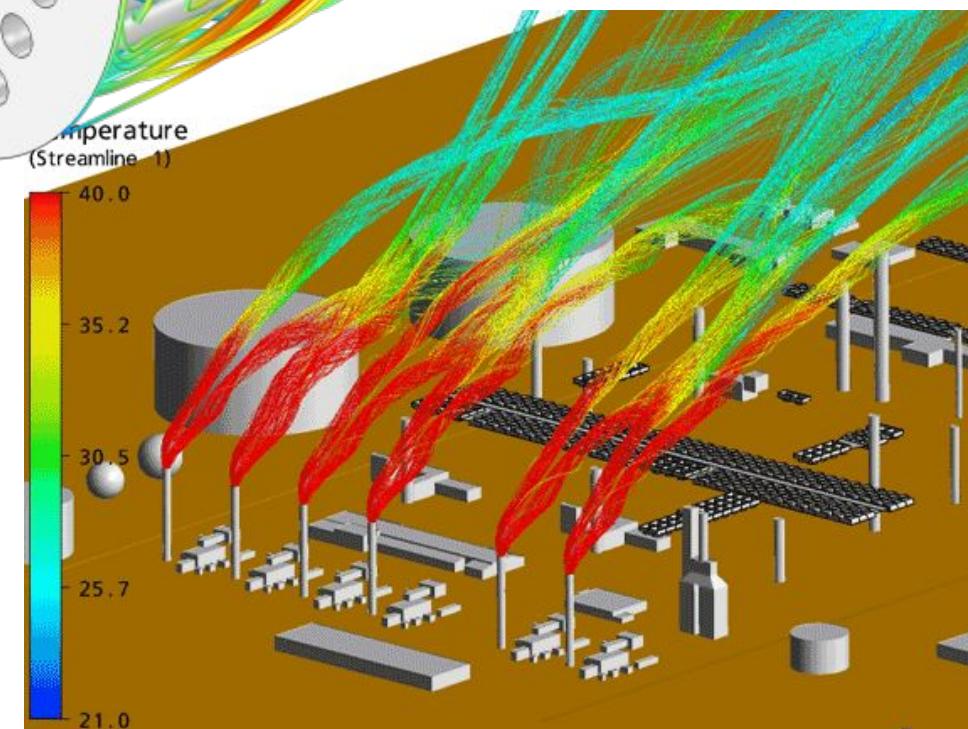
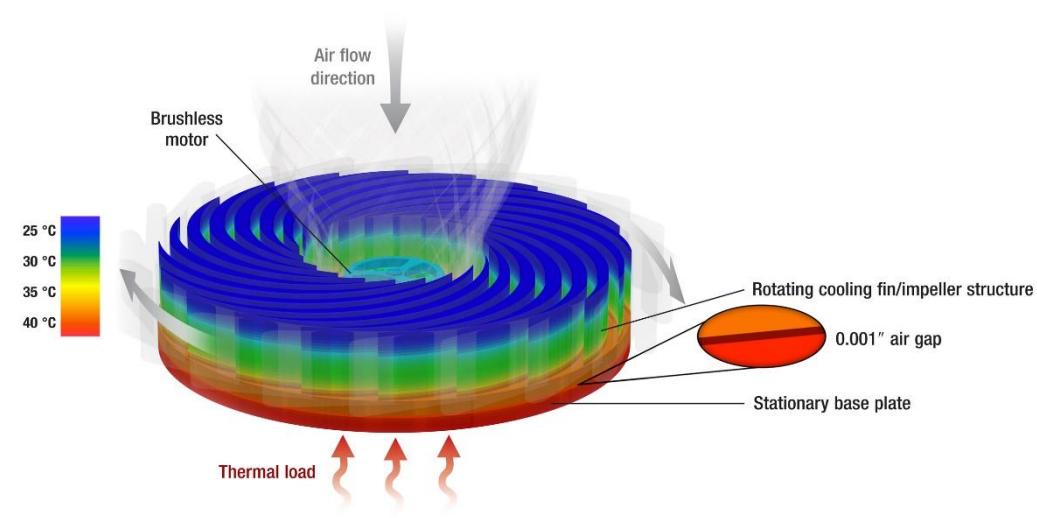
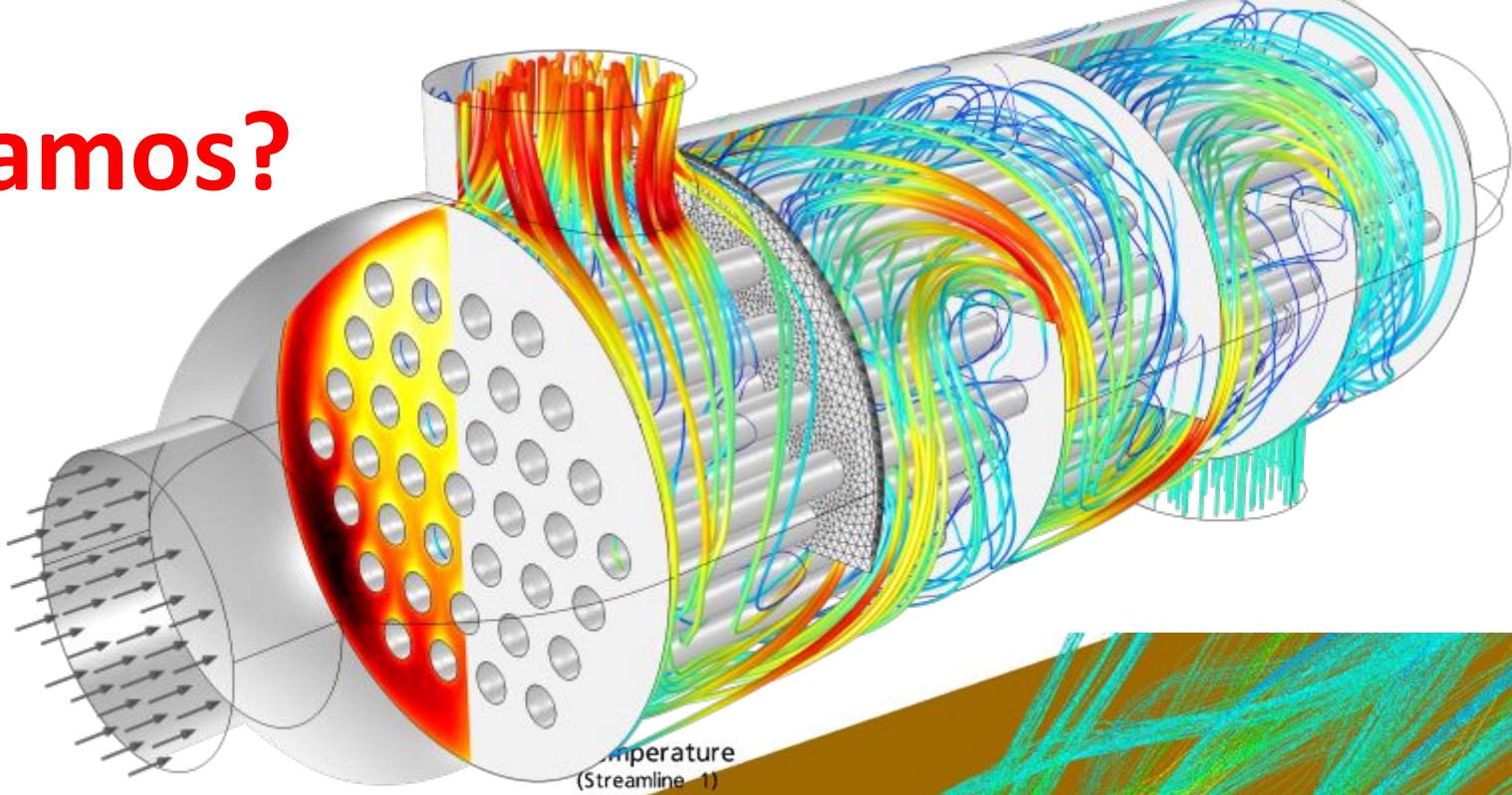
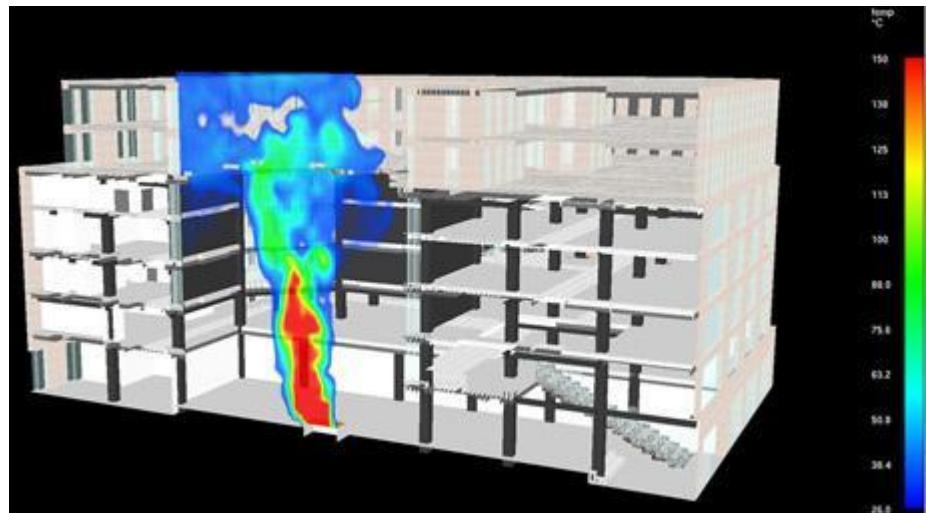
Onde os encontramos?



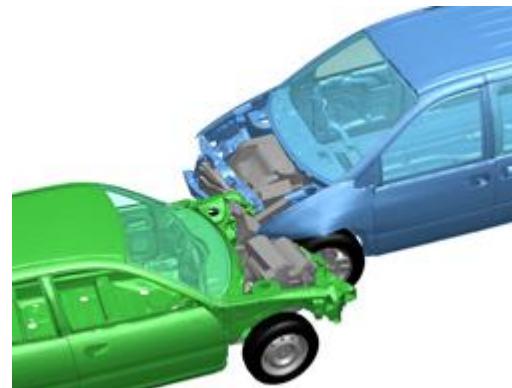
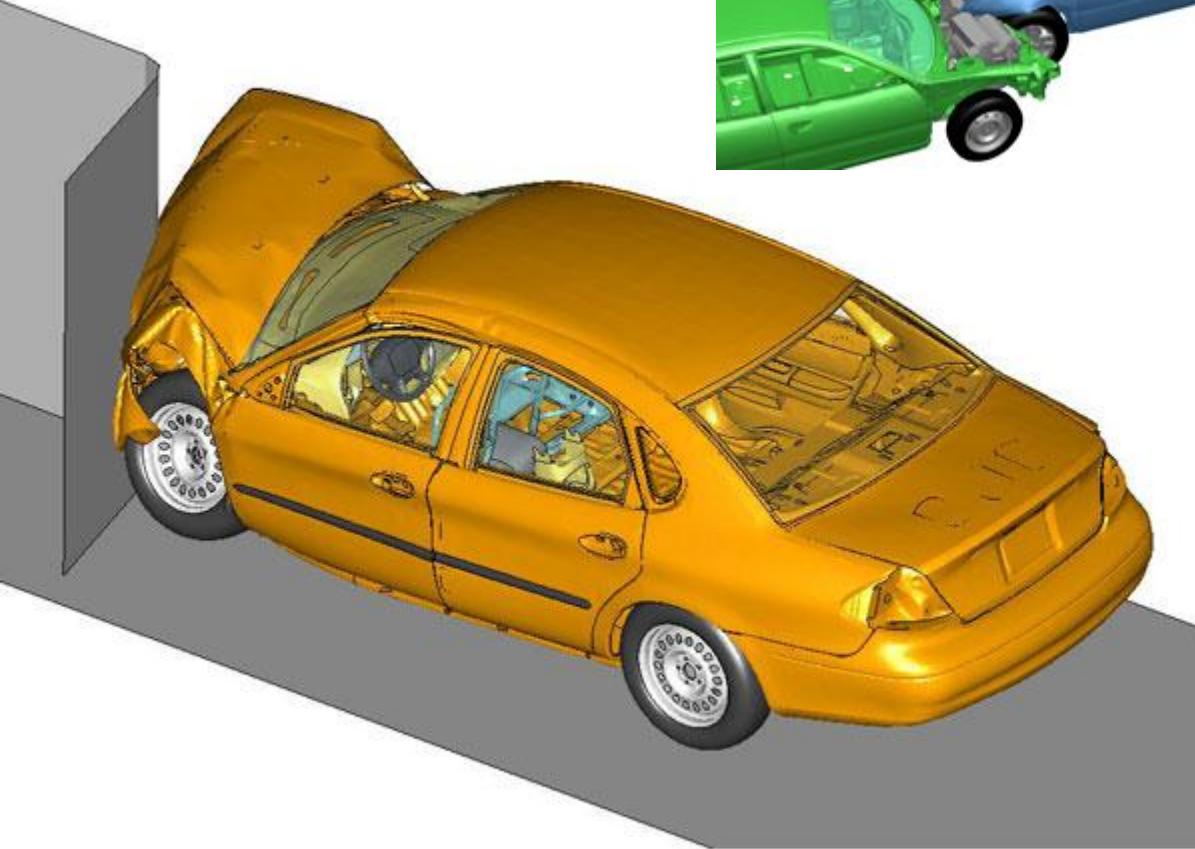
Onde os encontramos?



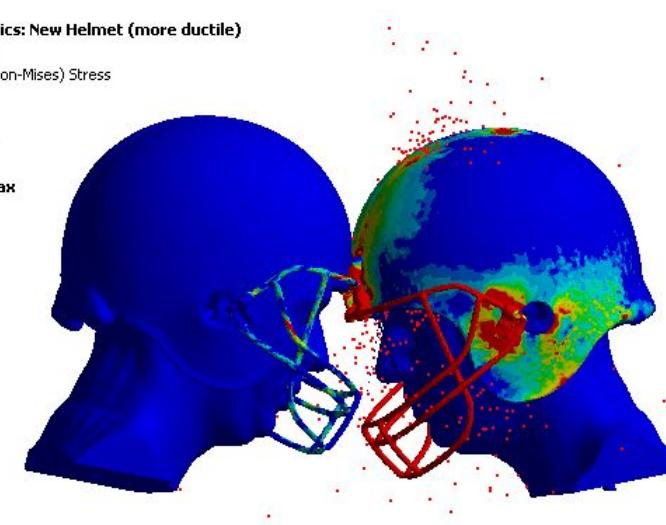
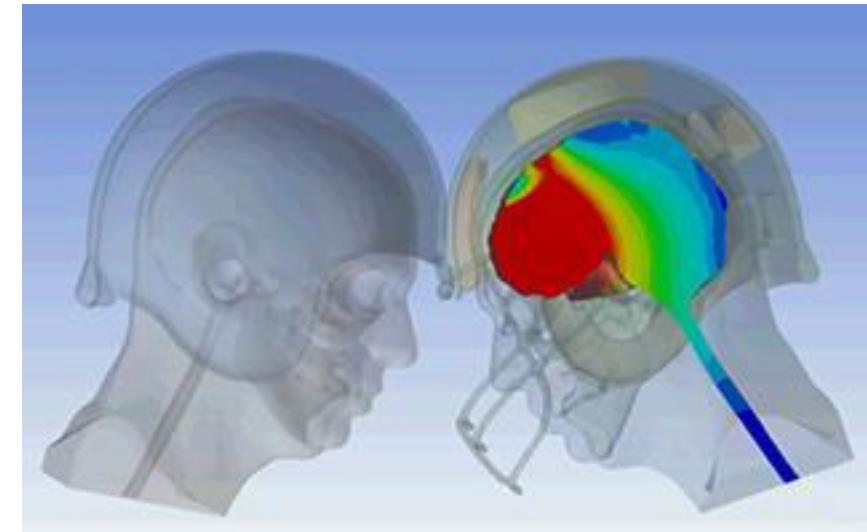
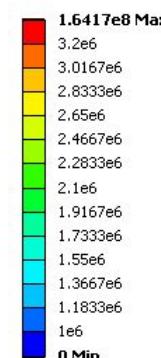
Onde os encontramos?



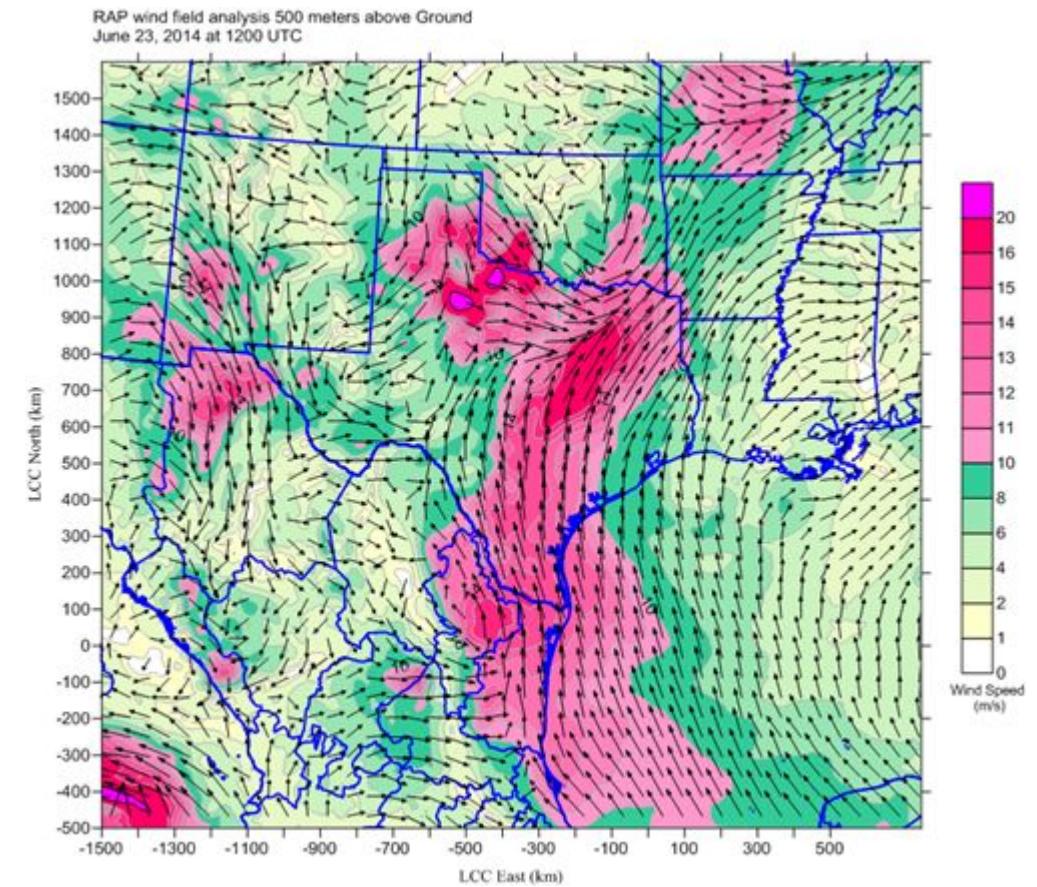
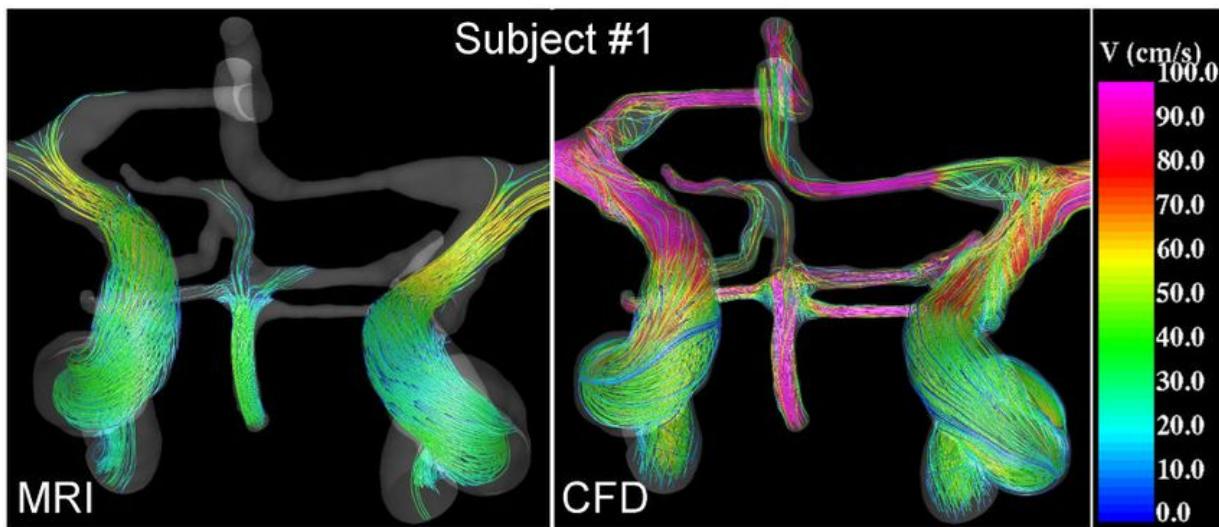
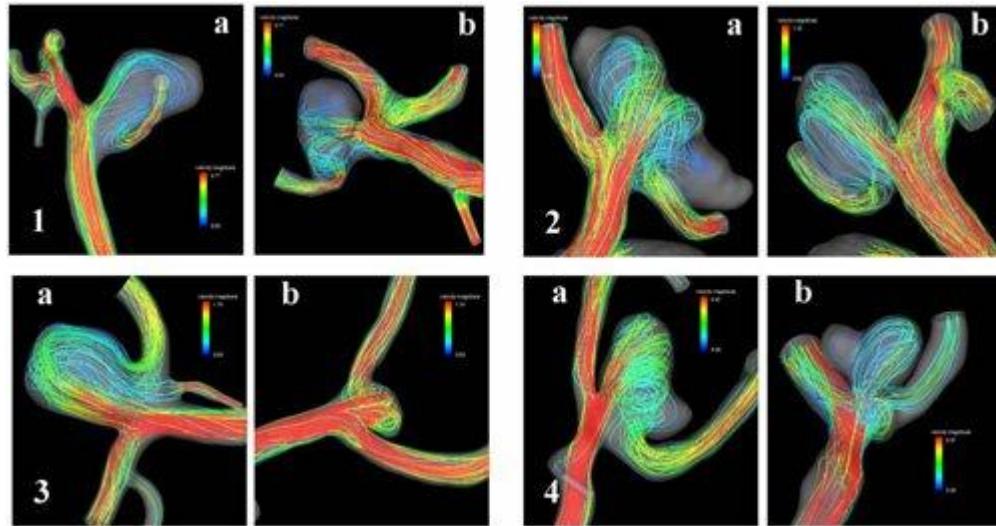
Onde os encontramos?



I: Explicit Dynamics: New Helmet (more ductile)
Equivalent Stress 5
Type: Equivalent (von-Mises) Stress
Unit: Pa
Time: 1.e-002
1/14/2016 8:14 AM



Onde os encontramos?



Onde os encontramos?

Nós não estamos falando de aprendizado de máquina e IA. Estamos falando de equações apresentadas principalmente há dois séculos.

Os computadores e supercomputadores são desenvolvidos para resolver essas equações!



Este curso

- Nosso livro é
INTRODUCTION TO COMPUTATION AND MODELING FOR DIFFERENTIAL EQUATIONS (LENNART EDSBERG)

Capítulo	Tópico
1	Introdução
2	Equações diferenciais ordinárias
3	Métodos numéricos para problemas de valor inicial
4	Métodos numéricos para problemas de valor de contorno
5	Equações diferenciais parciais
6	Métodos numéricos para equações diferenciais parciais parabólicas
7	Métodos numéricos para equações diferenciais parciais elípticas
8	Métodos numéricos para equações diferenciais parciais hiperbólicas

Este curso

- Nosso livro é
INTRODUCTION TO COMPUTATION AND MODELING FOR DIFFERENTIAL EQUATIONS (LENNART EDSBERG)
- Usaremos **Google Sheets** e **Jupyter notebook (python)** neste curso. Vou ensinar o básico sobre esses dois para você. Mas para tópicos mais avançados, você deve aprender sozinho.
- Você pode devolver os exercícios e os projetos no **Jupyter notebook**. Caso contrário, basta retornar em formato **pdf**.
- Eu prefiro gráficos com matplotlib (Jupyter) ou gnuplot.
- Você não pode usar o **matlab, maple ou mathematica** para exercícios e projetos.

Este curso

Prova escrita (25)

Exercícios (28)

- Capitulo 1 & 2 (4)
- Capitulo 3 (4)
- Capitulo 4 (4)
- Capitulo 5 (4)
- Capitulo 6 (4)
- Capitulo 7 (4)
- Capitulo 8 (4)

Projetos (47)

- Prj 1 (7)
- Prj 2 (7)
- Prj 3 (10)
- Prj 4 (23)

Você deve **upload** os exercícios e projetos no **Google Classroom**.

Como sempre, faça o projeto muito melhor e ganhe mais pontos.

Este curso

- O email do curso é

scientific.computing.II.2018@gmail.com

Vamos resolvê-los!

- Vamos começar pela equação mais simples

$$\frac{du}{dt} = au,$$

onde a é uma constante real.

- Esta equação é frequentemente usada para modelar o crescimento de uma população ($a > 0$) ou a decadência de uma substância radioativa ($a < 0$).
- se a função u depende apenas de uma variável (aqui $u = u(t)$), a equação diferencial é chamada ordinária.

Equações Diferenciais Ordinárias (EDO)

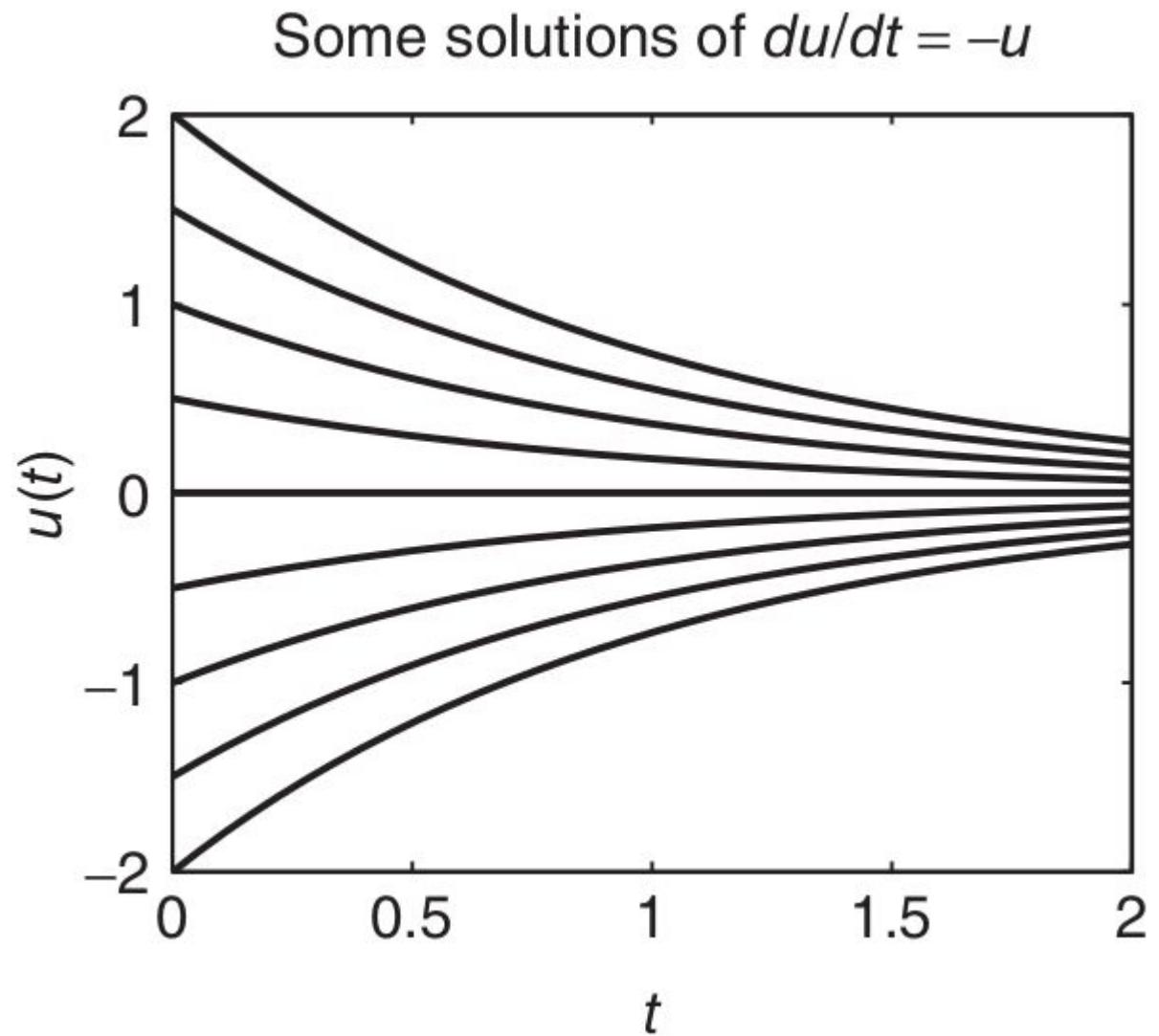
Definições Primárias

- $\frac{du}{dt} = au$
- Podemos resolver essa analiticamente.
A solução pode ser escrita explicitamente como uma fórmula algébrica.

$$u(t) = C e^{at}$$

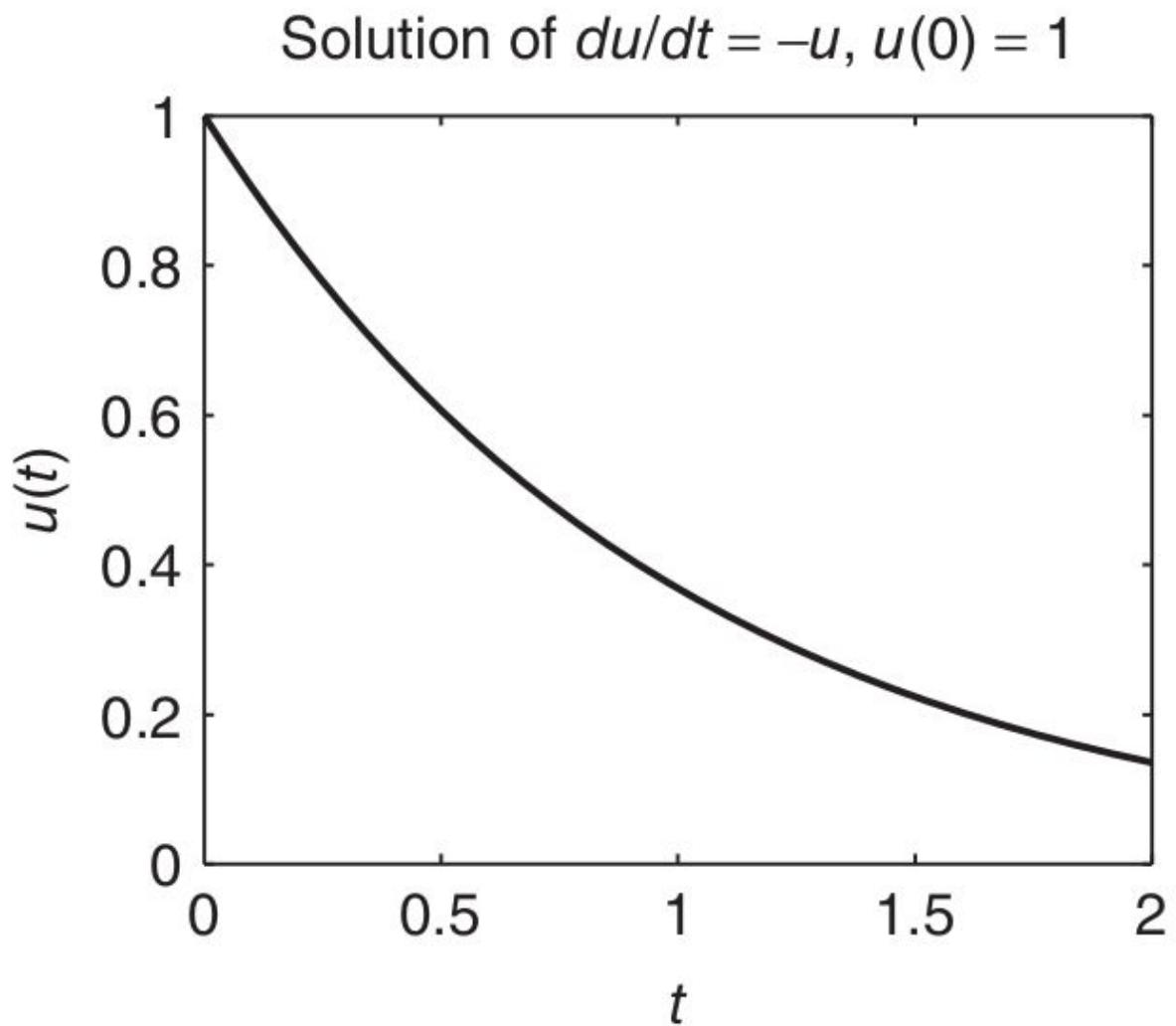
Onde C é uma constante.

- Chamamos esta solução, **solução geral**.



Definições Primárias

- $\frac{du}{dt} = au \rightarrow u(t) = C e^{at}$
- Se sabemos C , obtemos uma solução única.
- Essa solução é chamada **solução particular**.
- A constante C pode ser determinada selecionando um ponto (t_0, u_0) no plano (t, u) , pelo a curva da solução deve passar.
- Chamamos esse ponto, **ponto inicial**.
- Uma equação diferencial com uma condição inicial (ponto inicial) é chamada de **problema de valor inicial**.



Vamos resolvê-los!

- Em geral, não é possível encontrar solução analítica de uma equação diferencial. Por exemplo,

$$\frac{du}{dt} = t^2 + u^2.$$

- Pergunta: é impossível resolver analiticamente ou não sabemos a solução?
- Para este tipo de problemas, usamos métodos numéricos.
- Quase todos problemas em engenharia pertencem a esse grupo!

Vamos resolvê-los!

- Vamos tornar o problema um pouco mais difícil

$$\frac{du}{dt} + \color{red}{a} \frac{du}{dx} = 0,$$

onde $\color{red}{a}$ é uma constante real.

- Agora a função $\color{red}{u}$ depende de duas variáveis $\color{red}{u} = u(t, x)$.
- Quando a função depende de mais de uma variável, chamamos de **equação diferencial parcial (EDP)**.
- Fisicamente descreve a evolução da temperatura ($u(x, t) = T(x, t)$) transportada ao longo do eixo de x por uma velocidade constante $\color{red}{a}$.
- Esta equação tem um nome, **equação de advecção**.

Vamos resolvê-los!

- $\frac{du}{dt} + a \frac{du}{dx} = 0,$

- A solução geral desta equação é

$$u(x, t) = F(x - at)$$

onde F é uma função **arbitrária**.

- Por exemplo:

$$F(y) = y \quad \rightarrow \quad u(x, t) = x - at$$

$$F(y) = e^{-y^2} \quad \rightarrow \quad u(x, t) = e^{-(x-at)^2}$$

$$F(y) = \sin(y) \quad \rightarrow \quad u(x, t) = \sin(x - at)$$

- É uma família muito grande.
- Alguém sabe o que são chamados $x - at$? (Supersonic flow)

Vamos resolvê-los!

- $$\frac{du}{dt} + a \frac{du}{dx} = 0,$$
- A solução geral desta equação é
$$u(x, t) = F(x - at)$$
- Para encontrar uma solução específica, precisamos de mais dois dados. O primeiro como antes é a **condição inicial**.
- O outro é **condição de contorno**. Por exemplo $u(t, x_0) = 1$.
- Portanto, para resolver o EDP, precisamos de mais dados.

Vamos resolvê-los!

- $$\frac{du}{dt} + a \frac{du}{dx} = 0,$$
- A solução geral desta equação é
$$u(x, t) = F(x - at)$$
- Se a equação é válida para todo x ($-\infty < x < \infty$) e nós sabemos a condição inicial ($u(x, 0) = u_0(x)$), então a solução particular será

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

- Isso significa que a função inicial (u_0) se propaga pela velocidade a .

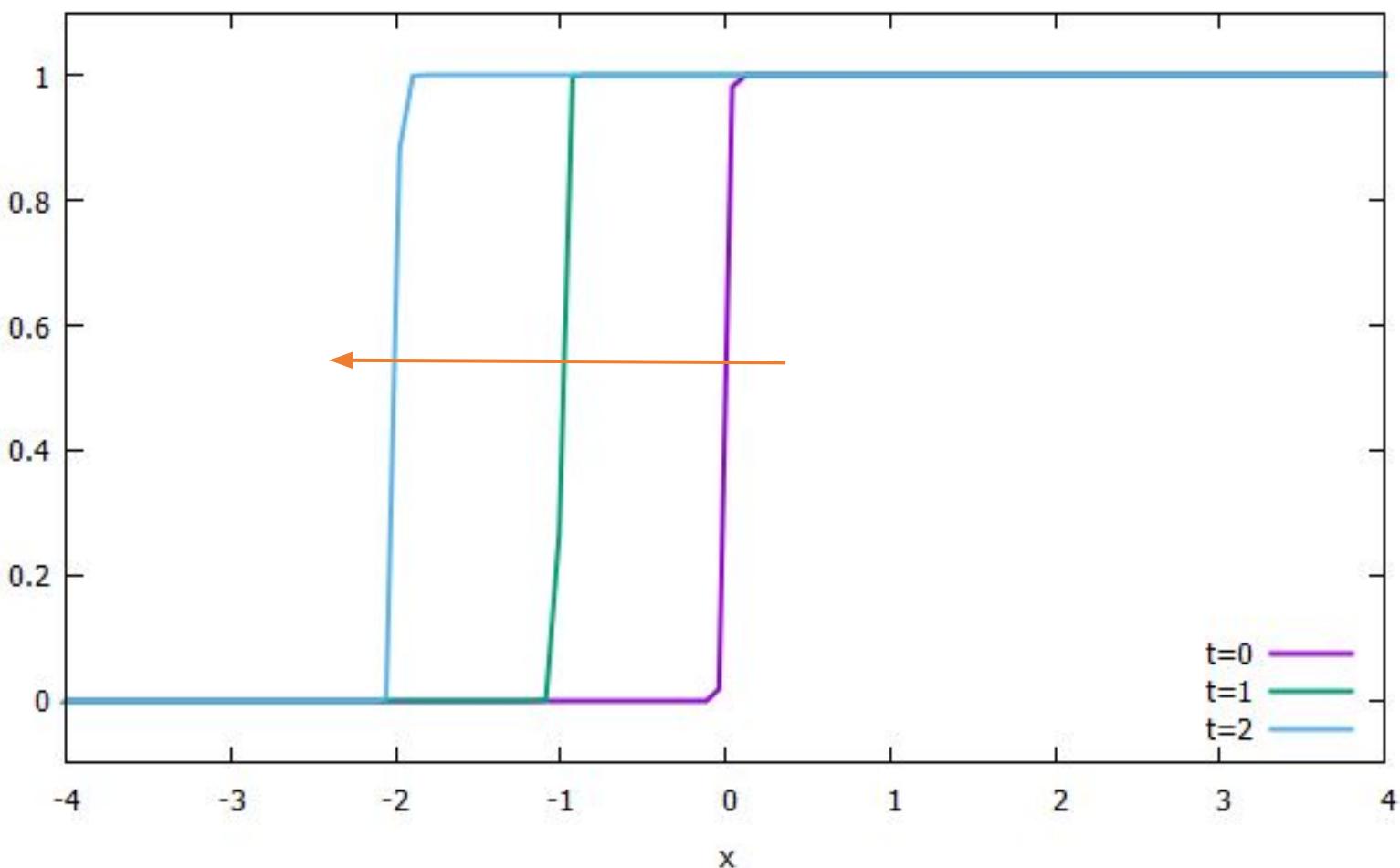
Vamos experimentar!

- $\frac{du}{dt} + a \frac{du}{dx} = 0$

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

$$u_0(y) = \begin{cases} 0 & y < 0 \\ 1 & y \geq 0 \end{cases}$$

Velocidade negativa



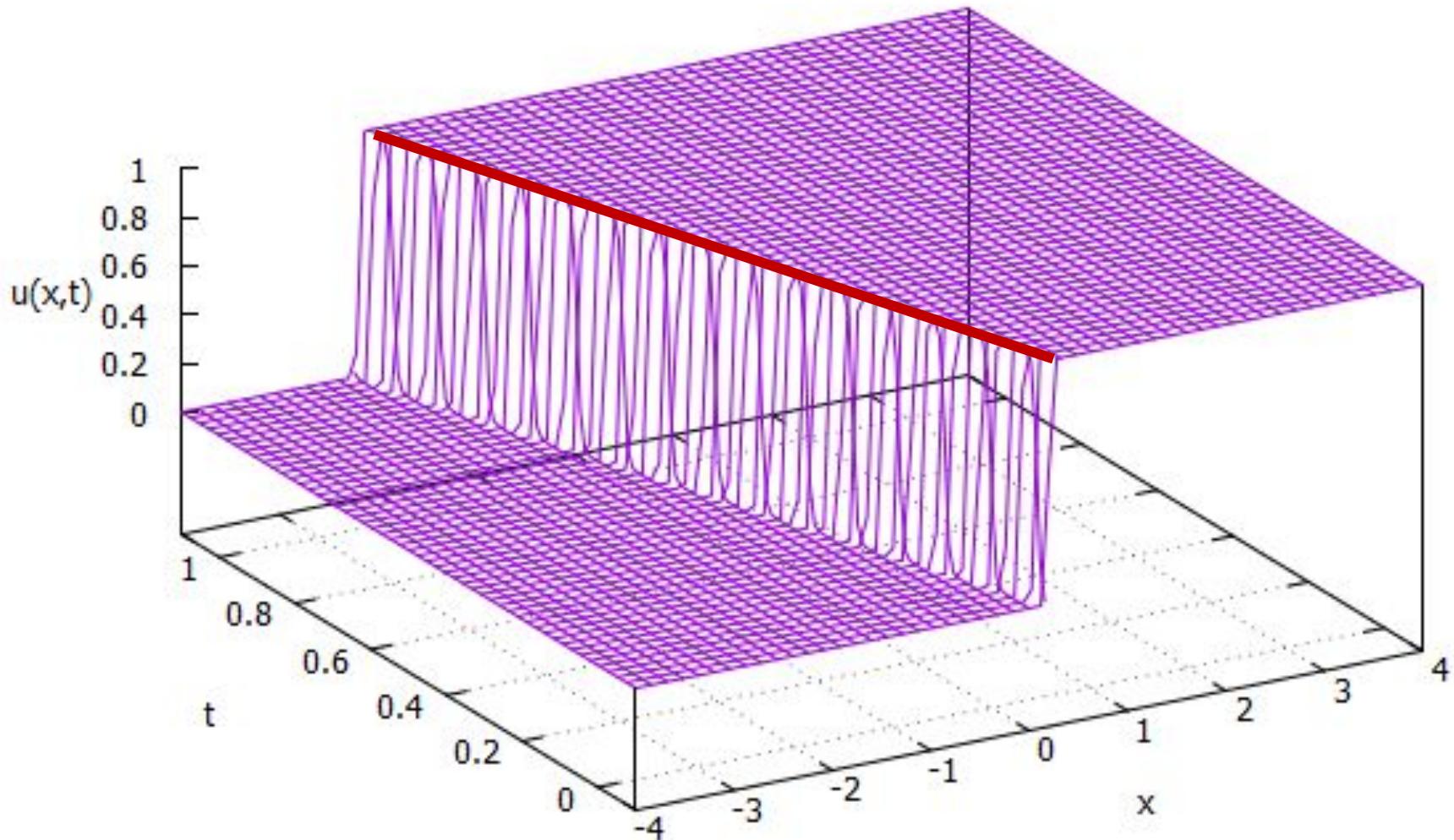
Vamos experimentar!

- $\frac{du}{dt} + a \frac{du}{dx} = 0$

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

$$u_0(y) = \begin{cases} 0 & y < 0 \\ 1 & y \geq 0 \end{cases}$$

Velocidade negativa

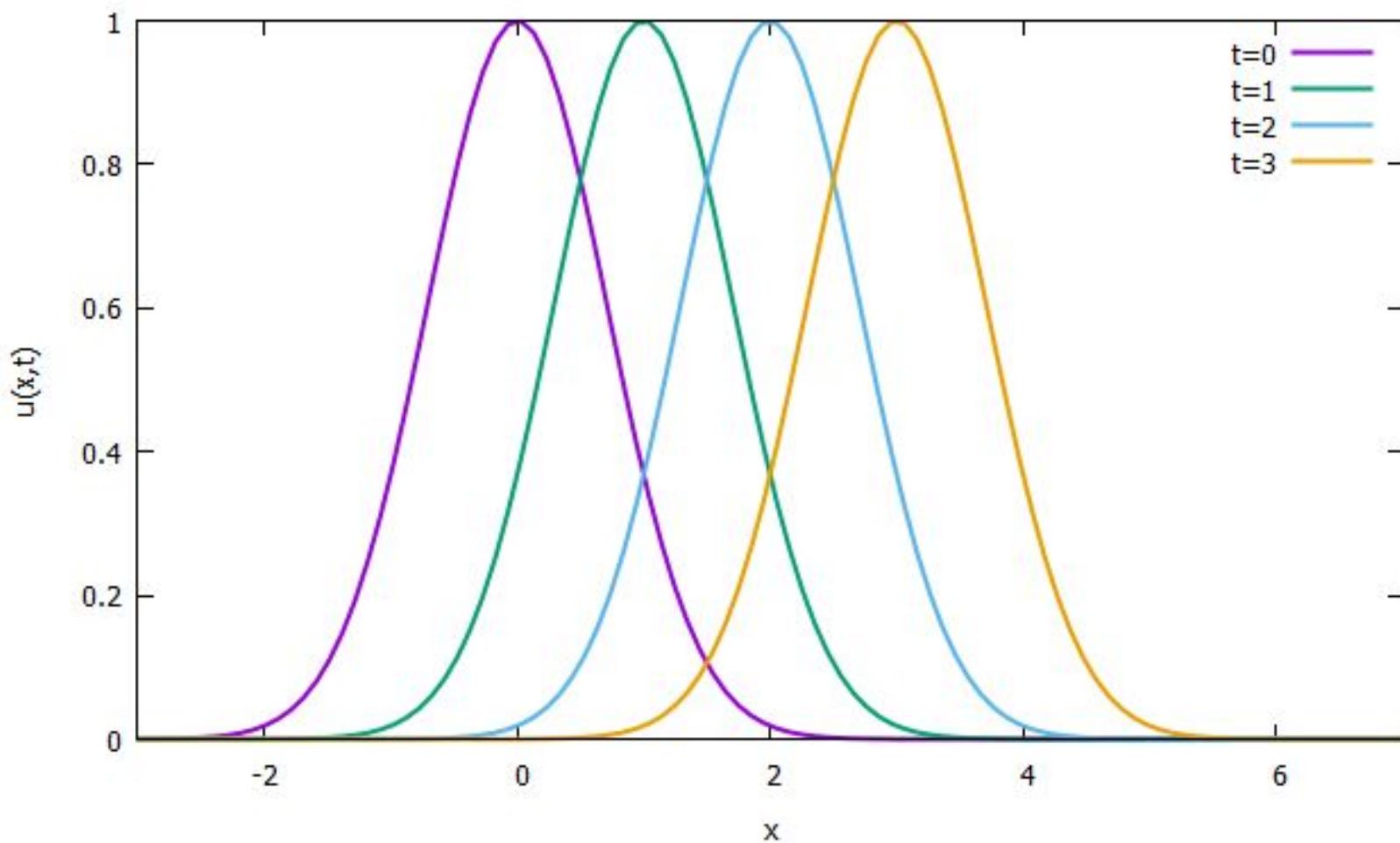


Vamos experimentar!

- $\frac{du}{dt} + \textcolor{red}{a} \frac{du}{dx} = 0$

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

$$u_0(y) = e^{-y^2}$$

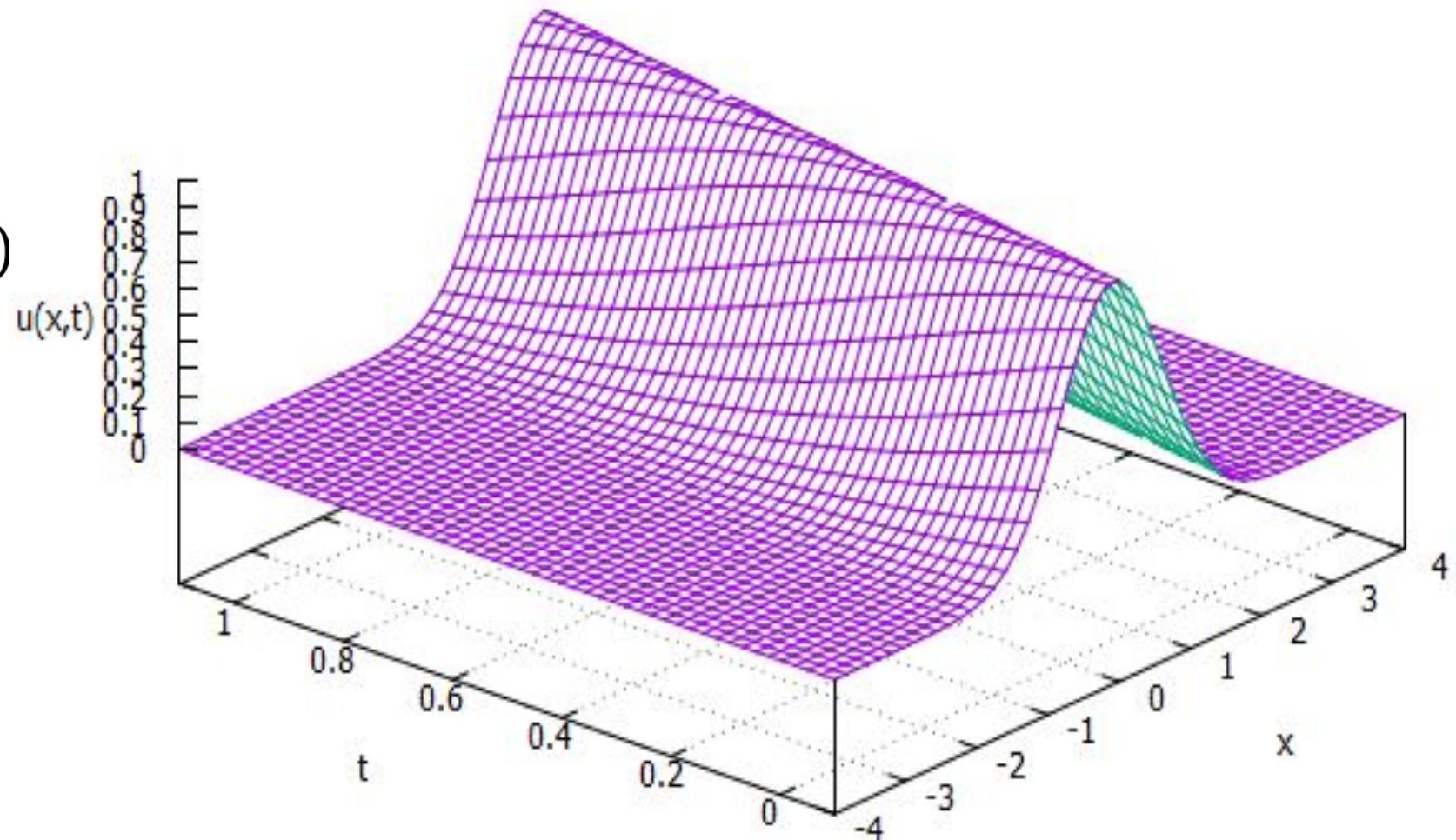


Vamos experimentar!

- $\frac{du}{dt} + a \frac{du}{dx} = 0$

$$u(x, t) = u_0(x - at)$$

$$u_0(y) = e^{-y^2}$$



Equações diferenciais parciais

- A maioria dos EDPs só pode ser resolvida com métodos numéricos.
- Somente para classes muito especiais de EDP, é possível encontrar uma solução analítica.
- Muitas vezes, é sob a forma de séries infinitas
 - Equação de calor e método do Fourier.
- Importante desafio científico é resolver alguns EDPs como o Navier-Stokes (**sistema de equações**).

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(x, t) + \mathbf{u}(x, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(x, t) = -\nabla p(x, t) + \nu \Delta \mathbf{u}(x, t) + \hat{\mathbf{f}}(x, t) \\ \nabla \cdot \mathbf{u}(x, t) = 0 \end{cases}$$

Equações diferenciais parciais

- The Clay Mathematics Institute of Cambridge
 - The Millennium Prize Problems (\$1 million)
- Navier–Stokes Equation:

This is the equation which governs the flow of fluids such as water and air. However, there is no proof for the most basic questions one can ask: do solutions exist, and are they unique? Why ask for a proof? Because a proof gives not only certitude, but also understanding.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \nu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t)$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0$$

visualização

- O gráfico que vimos é uma maneira de visualizar os resultados.
- Quando temos um problema de valor inicial, um gráfico 2D ($u - t$) é suficiente para representar todos os resultados.
- Para a equação de Advecção, plotar os resultados em 3D ($u - (t, x)$) foi o suficiente.
- Mas para EDPs com mais de duas variáveis, como devemos visualizar?
- Para um sistema de equações, o que devemos fazer?

Visualização é um campo científico.

- Pessoas treinadas nisso e pesquisas sobre as formas de visualizar os resultados.
- Uma boa visualização pode até nos ajudar entender a física ou encontrar uma solução analítica.

Equação de vibração

- A vibração (vibrações mecânicas, elétricas e sonoras) pode ser modelada por esta equação

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = f(t)$$

Mola constante

coeficiente de amortecimento

Segunda lei de Newton

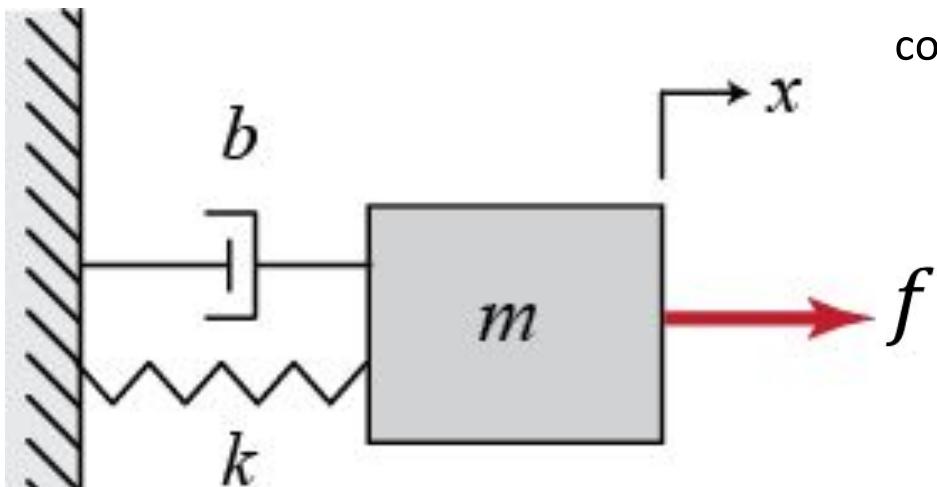
$$F = ma$$

força = força externa - resistência

$$F = f - kx - b \frac{du}{dt}$$

aceleração

$$ma = m \frac{d^2x}{dt^2}$$



Sistema Mola-Massa-Amortecedor

Equação de vibração

- A vibração (vibrações mecânicas, elétricas e sonoras) pode ser modelada por esta equação

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = f(t)$$

- Para resolver essa equação, precisamos de duas condições iniciais, como

$$x(0) = x_0 \text{ (posição inicial)}$$

$$\frac{dx}{dt}(0) = v_0 \text{ (velocidade inicial)}$$

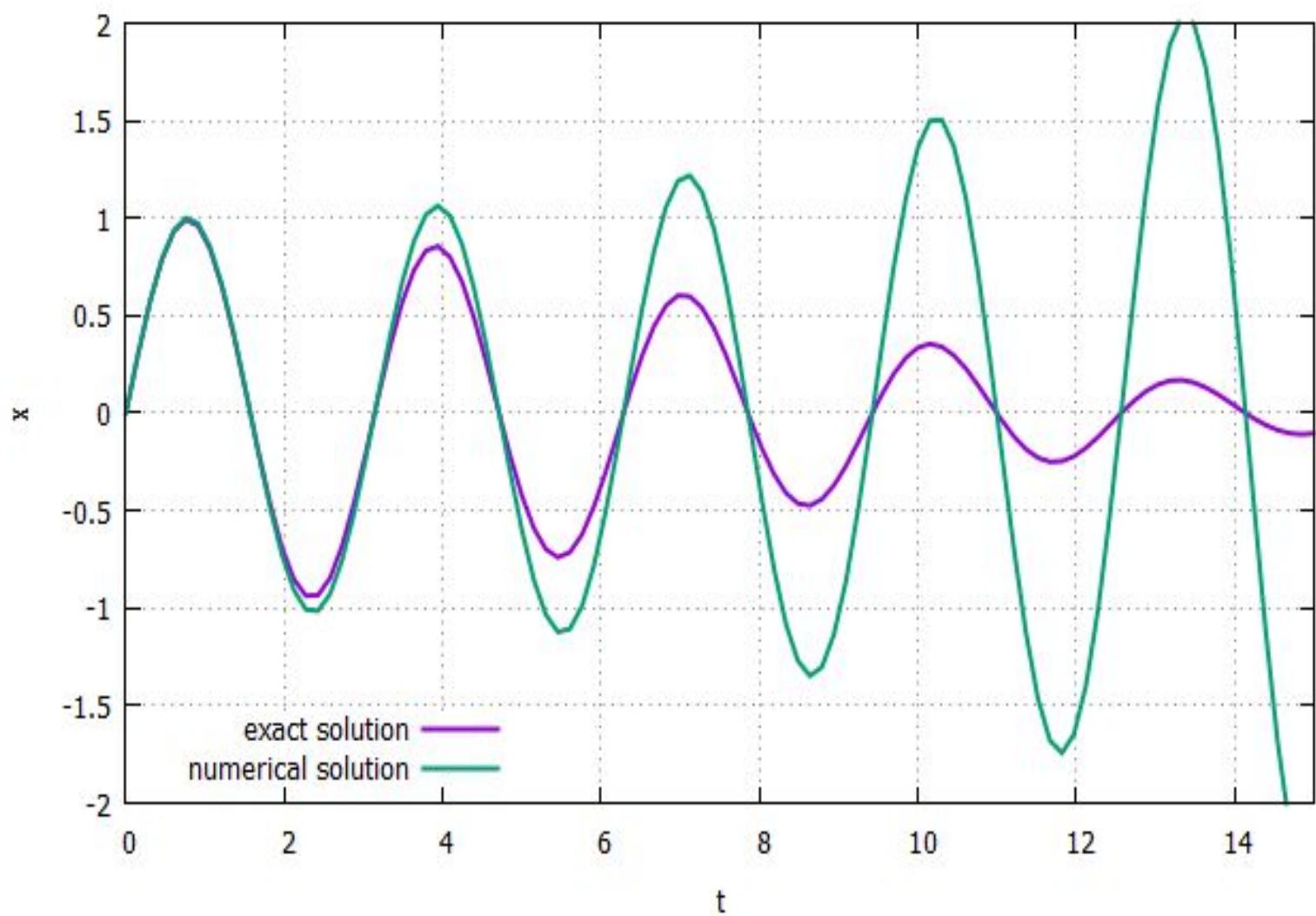
- Ainda é uma equação ordinário, porque x depende apenas do t ($x = x(t)$).
- Mas é a equação de segunda ordem, porque temos derivada de segunda ordem.
- Cinco parâmetros m, b, k, x_0, v_0 são chamados de **parâmetros do problema**.

Equação de vibração

- $$m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = f(t)$$
- Condições iniciais, como
$$x(0) = x_0 \quad \frac{dx}{dt}(0) = v_0$$
- Cinco parâmetros m, b, k, x_0, v_0 são chamados de **parâmetros do problema**.
- Resolvendo numericamente esta equação, com as condições iniciais é um exemplo de **simulação** de um processo mecânico.
- Um método numérico robusto é aquele que nos dá bons resultados para uma grande variedade de **parâmetros**.

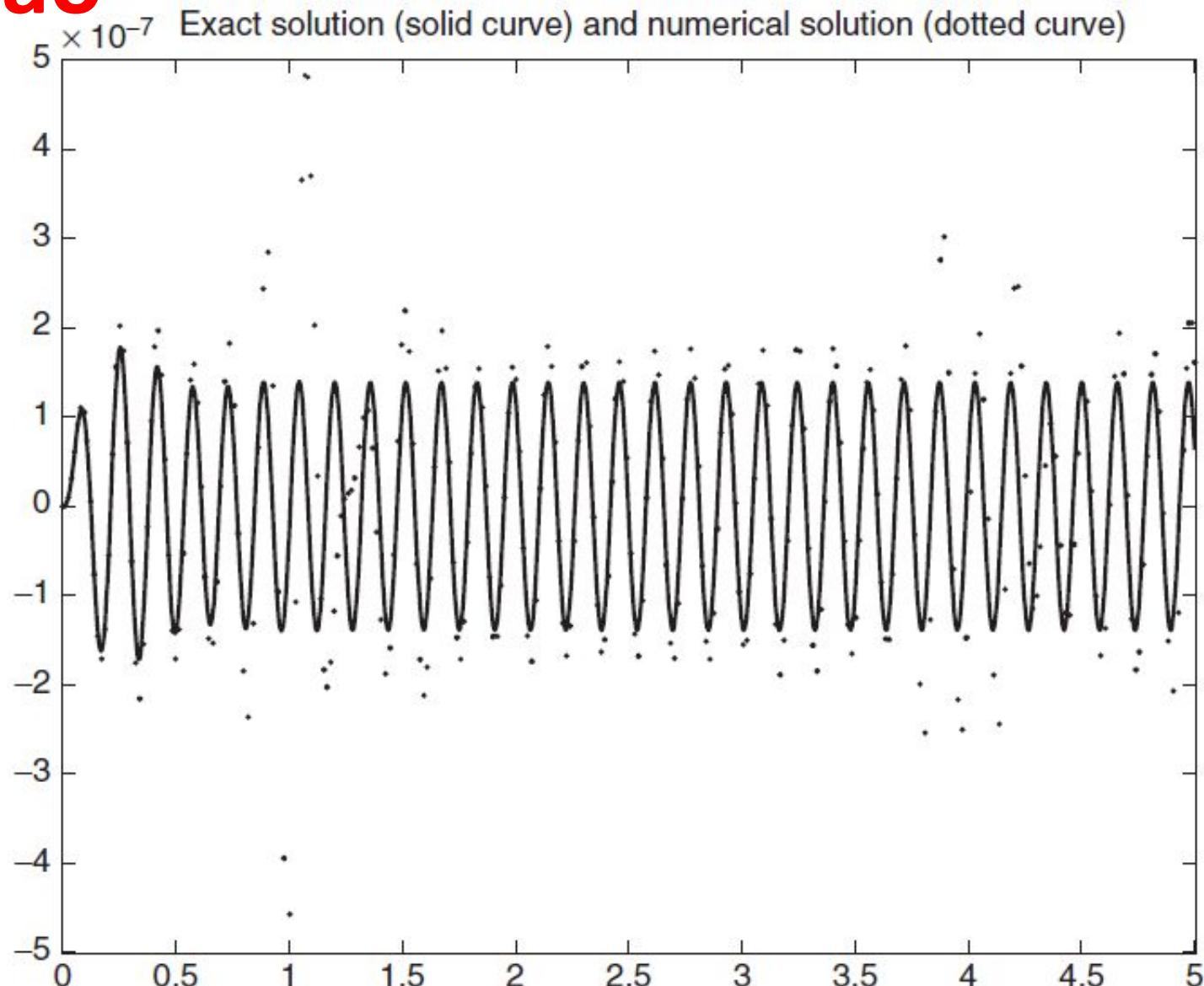
Equação de vibração

- $m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = 0$
- Vamos ver uma simulação numérica.
- Finalmente deve parar de se mexer, por causa do amortecedor.
- A solução numérica explode.
- nós chamamos de método **instável**.



Equação de vibração

- $m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = f(t)$
- Desta vez, a solução numérica se comporta da mesma forma que a solução exata.
- Mas não está perto da solução exata.
- Aqui falamos sobre a **precisão** da solução numérica.



Este curso

- Este curso cobrirá
 - Física e modelagem de fundo,
 - Propriedades matemáticas da equação diferencial,
 - Métodos e solução numérica,
 - Softwares comerciais para resolver equações diferenciais,
 - Visualização.