

Computação Científica II

Métodos numéricos para resolver equações diferenciais

2020-PLE

Invariantes Lineares e Quadráticos

- Considere o seguinte problema

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0$$

- é prático definir uma invariância linear como $B\mathbf{u}(t) = B\mathbf{u}_0$. Aqui B é uma matriz $m \times n, m < n$.
- Se diferenciarmos esse respeito invariante pelo tempo temos

$$B \frac{d\mathbf{u}}{dt} = B\mathbf{f}(t, \mathbf{u}) = 0$$

- Agora, considere que estamos usando o método de Euler anelado para resolver o problema e, em seguida, multiplique-o por B

$$B\mathbf{u}_{n+1} = B\mathbf{u}_n + hB\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) = B\mathbf{u}_n = \cdots = B\mathbf{u}_0$$

Invariantes Lineares e Quadráticos

- Considere o seguinte problema

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0 \quad B\mathbf{u}(t) = B\mathbf{u}_0$$

- Agora, considere que estamos usando o método de Euler anelado para resolver o problema e, em seguida, multiplique-o por B

$$B\mathbf{u}_{n+1} = B\mathbf{u}_n + hB\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) = B\mathbf{u}_n = \cdots = B\mathbf{u}_0$$

- Isso significa que tal invariante é automaticamente satisfeito pelo método de Euler avançado.
- O mesmo pode ser concluído para os métodos RK e multipasso lineares.

Invariantes Lineares e Quadráticos

- A invariância quadrática pode ser definida como (C é simétrico)

$$\mathbf{u}^T C \mathbf{u} = \mathbf{u}_0^T C \mathbf{u}_0$$

- Geralmente, os métodos numéricos não preservam tal invariância.
- Como uma exceção, o método do ponto médio implícito definido como

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h \mathbf{f} \left(t_n, \frac{h}{2}, \frac{\mathbf{u}_n + \mathbf{u}_{n+1}}{2} \right)$$

pode preservar essa invariância também.

- novamente é fácil mostrar que

$$\mathbf{u}^T C \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{u}^T C \mathbf{f}(t, \mathbf{u}) = 0$$

Invariantes Lineares e Quadráticos

- É fácil mostrar que para este método

$$\mathbf{u}_{n+1}^T C \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n^T C \mathbf{u}_n = \cdots = \mathbf{u}_0^T C \mathbf{u}_0$$

Aplicação prática

- A dinâmica molecular (MD) é um método de simulação computacional para estudar os movimentos físicos de átomos e moléculas, resolvendo numericamente a equação de movimento de Newton para cada átomo.

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \sum_{j=1, i \neq j}^n \mathbf{f}_{ij}$$

- Aqui nós apenas consideramos duas interações de átomos (interações de pares).
- É comum expressar forças usando função potencial.

$$\mathbf{f}_{ij} = -\frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}$$

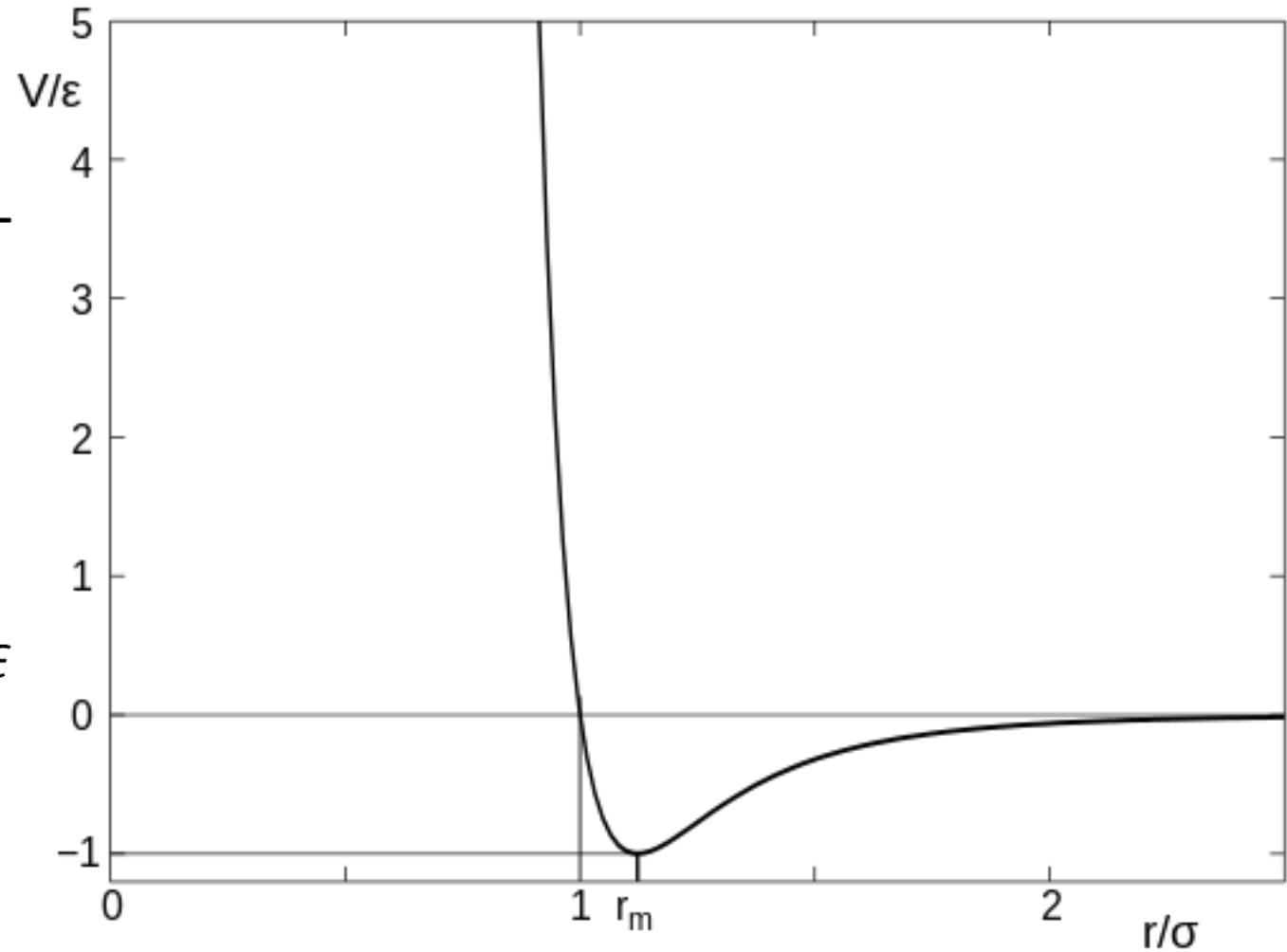
Aplicação prática

-
- Um potencial comum é Lennard-Jones.

$$u(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

Que tem dois parâmetros, ϵ (strength) e σ (length scale).

- Repulsivo / atrativo



Aplicação prática

- Para este método, a conservação da energia total na solução numérica é muito importante. Infelizmente, os métodos RK e multi-passos não preservam a energia. Assim, métodos especiais são desenvolvidos para este propósito.

- considere o seguinte problema simples

$$\dot{r} = v, \quad r(0) = 0, \quad \ddot{r} = a(r), \quad v(0) = v_0$$

- O método Verlet para resolver este problema é

$$\begin{cases} v_n = (r_{n+1} - r_{n-1})/2h \\ r_{n+1} = 2r_n - r_{n-1} + h^2 a(r_n) \end{cases}$$

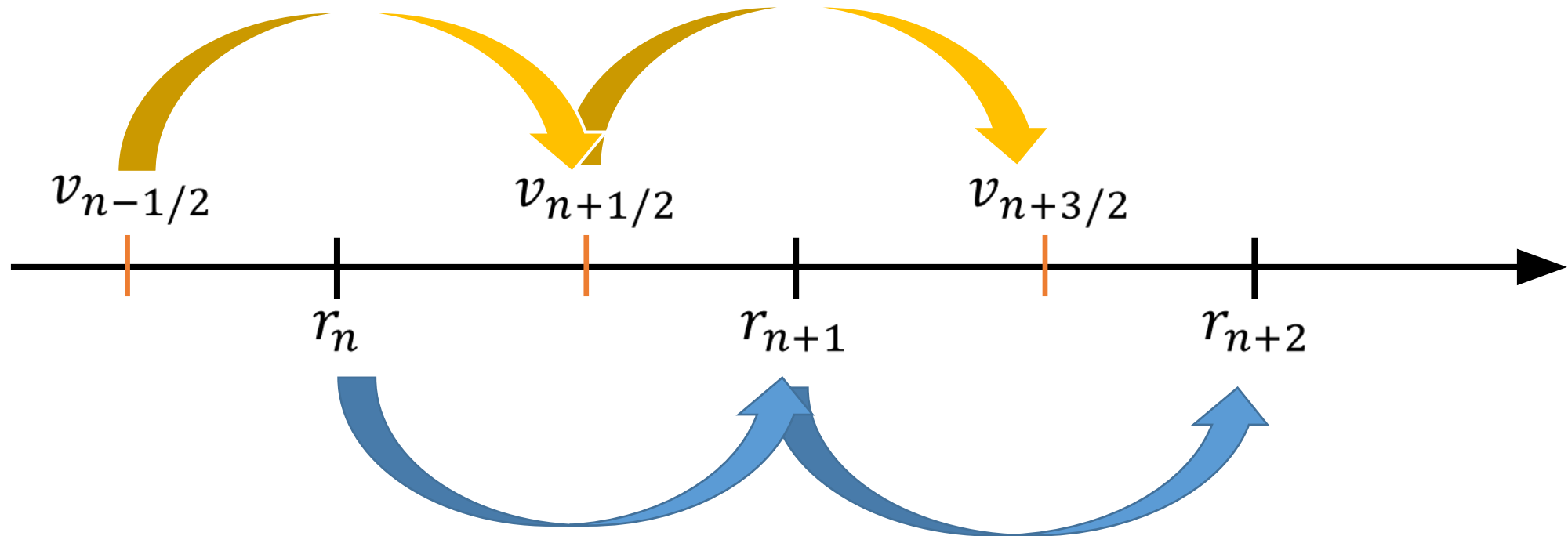
- É um método explícito. Também precisamos do r_1 para iniciar a solução.

Aplicação prática

- $\dot{r} = v, \quad r(0) = 0, \quad \ddot{r} = a(r), \quad v(0) = v_0$
- O método Leap-frog para resolver este problema é
$$\begin{cases} v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} + ha(r_n) \\ r_{n+1} = r_n + hv_{n+\frac{1}{2}} \end{cases}$$
- Novamente, é um método explícito e precisamos de uma maneira de iniciar o método.
- Notei que calculamos as velocidades e posições em diferentes momentos.

Aplicação prática

- Notei que calculamos as velocidades e posições em diferentes momentos.
- Um método é chamado “**staggered**”, se diferentes variáveis forem computadas em diferentes grades (tempo ou espaço).

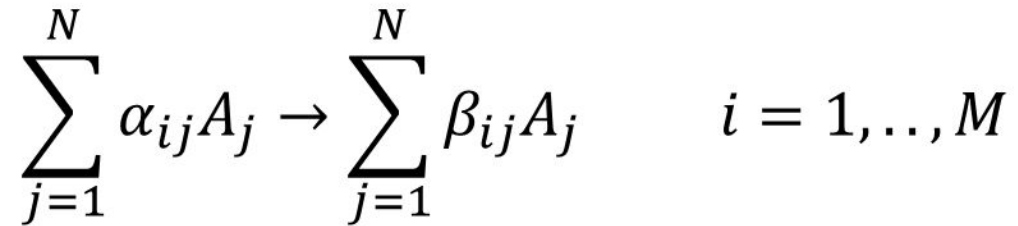


Preservando a positividade

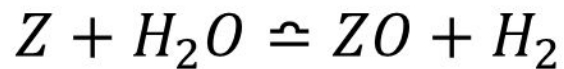
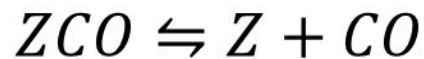
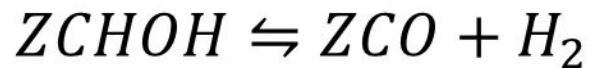
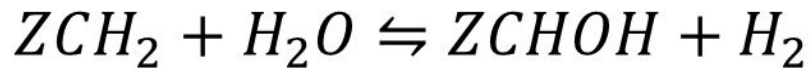
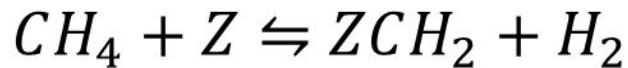
- Na simulação numérica de sistemas físicos e químicos, às vezes precisamos preservar a positividade de alguns componentes da solução.
- Por exemplo, na química e na resolução de reações, precisamos ter concentrações positivas ou precisamos ter pressão positiva.
- É não-físico e também pode causar instabilidade no método numérico.
- A situação mais difícil é o sistema de equações. Neste caso, precisamos de algum $u_i(0) \geq 0$, a solução sempre será $u_i(t) \geq 0$.
- Vamos trabalhar com um exemplo prático, reações químicas.

Exemplo

- Considere que temos M reações, contendo espécies N .



- Por exemplo



- Aqui temos reações de equilíbrio e não-equilíbrio.
- Cada reação tem uma taxa. Por exemplo, a taxa de reação da equação é

$$w = w^+ - w^-$$

$$w^+ = k^+ [c_{CH_4}] [c_Z]$$

$$w^- = k^- [c_{ZCH_2}] [c_{H_2}]$$

- Para reações de equilíbrio, temos $w^+ = w^-$.

Exemplo

- $$CH_4 + Z \rightleftharpoons ZCH_2 + H_2$$
$$ZCH_2 + H_2O \rightleftharpoons ZCHOH + H_2$$
$$ZCHOH \rightleftharpoons ZCO + H_2$$
$$ZCO \rightleftharpoons Z + CO$$
$$Z + H_2O \rightleftharpoons ZO + H_2$$
$$ZO + CO \rightleftharpoons Z + CO_2$$
$$w = w^+ - w^-$$
$$w^+ = k^+ [c_{CH_4}] [c_Z]$$
$$w^- = k^- [c_{ZCH_2}] [c_{H_2}]$$

- Para reações de equilíbrio, temos $w^+ = w^-$.
- Por reação irreparável, temos $k^- = 0$.
- k^+ e k^- são coeficientes de taxa que são normalmente expressos pela equação de Arrhenius como

$$k = k_0 \exp(-E/RT)$$

Exemplo

- $CH_4 + Z \rightleftharpoons ZCH_2 + H_2$
 $ZCH_2 + H_2O \rightleftharpoons ZCHOH + H_2$
 $ZCHOH \rightleftharpoons ZCO + H_2$
 $ZCO \rightleftharpoons Z + CO$
 $Z + H_2O \rightleftharpoons ZO + H_2$
 $ZO + CO \rightleftharpoons Z + CO_2$

- É comum formular o sistema como

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = S\mathbf{r}(\mathbf{c})$$

- Aqui, S é matriz estequiométrica ($N \times M$) e R é um vetor de taxas de reação.

- Para este sistema, a matriz S será

	$R1$	$R2$	$R3$	$R4$	$R5$	$R6$
CH_4	-1	0	0	0	0	0
H_2O	0	-1	0	0	-1	0
H_2	1	1	1	0	1	0
CO	0	0	0	1	0	-1
CO_2	0	0	0	0	0	1
Z	-1	0	0	1	-1	1
ZCH_2	1	-1	0	0	0	0
$ZCHOH$	0	1	-1	0	0	0
ZCO	0	0	1	-1	0	0
ZO	0	0	0	0	1	-1

Exemplo

- $$\begin{aligned}CH_4 + Z &\rightleftharpoons ZCH_2 + H_2 \\ZCH_2 + H_2O &\rightleftharpoons ZCHOH + H_2 \\ZCHOH &\rightleftharpoons ZCO + H_2 \\ZCO &\rightleftharpoons Z + CO \\Z + H_2O &\rightleftharpoons ZO + H_2 \\ZO + CO &\rightleftharpoons Z + CO_2\end{aligned}$$
- É comum formular o sistema como
$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = S\mathbf{r}(\mathbf{c})$$
- Aqui, S é matriz estequiométrica ($N \times M$) e R é um vetor de taxas de reação.

- Para este sistema, a vetor $\mathbf{r}(\mathbf{c})$ será
$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} k_1^+ c_{CH_4} c_Z - k_1^- c_{CH_2} c_{H_2} \\ k_2^+ c_{ZCH_2} c_{H_2O} - k_2^- c_{ZCHOH} c_{H_2} \\ k_3^+ c_{ZCHOH} - k_3^- c_{ZCO} c_{H_2} \\ k_4^+ c_{ZCO} - k_4^- c_Z c_{CO} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_{CH_4}, c_{H_2O}, c_{H_2}, c_{CO_2}, c_Z, \\ c_{ZCH_2}, c_{ZCHOH}, c_{ZCO}, c_{ZO} \end{bmatrix}^T$$

Preservando a positividade

- $$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = S\mathbf{r}(\mathbf{c})$$
- Podemos escrever essa equação na forma alternativa

$$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = K(\mathbf{c})\mathbf{c}$$

onde K é uma matriz $N \times N$.

- Agora, se usarmos o método de Euler atrasado para esse problema normalmente rígido, teremos

$$\mathbf{c}_{n+1} = \mathbf{c}_n + hK(\mathbf{c}_{n+1})\mathbf{c}_{n+1}$$

Preservando a positividade

- $$\frac{d\mathbf{c}}{dt} = S\mathbf{r}(\mathbf{c}) \quad \rightarrow \quad \frac{d\mathbf{c}}{dt} = K(\mathbf{c})\mathbf{c}$$

- Euler atrasado

$$\mathbf{c}_{n+1} = \mathbf{c}_n + hK(\mathbf{c}_{n+1})\mathbf{c}_{n+1} \quad \rightarrow \quad (I - hK(\mathbf{c}_{n+1}))\mathbf{c}_{n+1} = \mathbf{c}_n$$

- Para a matriz resultante da modelagem de reações é possível mostrar que se $\mathbf{c}_n \geq 0$ (todos os componentes), então o **inverso** de $I - hK(\mathbf{c}_n)$ também é positivo.
- Agora suponha que queremos resolver esta equação não linear usando o método de ponto fixo, como

$$(I - hK(\mathbf{c}_{n+1}^k))\mathbf{c}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{c}_n$$

Preservando a positividade

- Agora suponha que queremos resolver esta equação não linear usando o método de ponto fixo, como

$$\left(I - hK(\mathbf{c}_{n+1}^k)\right) \mathbf{c}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{c}_n$$

- Começamos a iteração com $\mathbf{c}_{n+1}^0 = \mathbf{c}_n \geq 0$. Portanto nós temos

$$\mathbf{c}_{n+1}^1 = \left(I - hK(\mathbf{c}_n)\right)^{-1} \mathbf{c}_n \geq 0$$

- Para a próxima iteração, temos

$$\mathbf{c}_{n+1}^1 \geq 0 \rightarrow \left(I - hK(\mathbf{c}_{n+1}^1)\right)^{-1} \geq 0 \rightarrow \mathbf{c}_{n+1}^2 \geq 0$$

- Portanto, usando o **método de Euler atrasado** e **as iterações de ponto fixo**, a positividade será preservada para **esse problema**.

Preservando a positividade

- Portanto, usando o método de Euler atrasado e as iterações de ponto fixo, a positividade será preservada para esse problema.
- O mesmo problema, usando o mesmo método numérico, apenas alterar as iterações de ponto fixo com o método de Newton não terá essa propriedade.

Resolva o exemplo 3.5 (P 48) com o método de Euler atrasado (ponto fixo e método de Newton) e estude a positividade da solução.

Projeto 2

- Neste projeto, precisamos resolver as equações que governam o sistema de n-body, que podem ser escritas como

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\gamma m_i m_j}{\|\mathbf{r}_{i,j}\|_2^2} \mathbf{e}_{r,ij}$$

- Estudamos esta equação nas aulas anteriores. Aqui nós apenas consideramos o caso 2D.
- Você precisa usar os métodos RK4 e Verlet para resolver este projeto.
- Comece com 2 planetas. Compare com a solução exata. Então resolva o problema dos 3 planetas (produzir a animação).

Capítulo 4

Problema de valor de contorno

- Neste capítulo, estudaremos o método numérico para resolver problemas de BVP.
- A maioria dos métodos que vamos estudar são apresentados para ODEs de segunda ordem.

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f\left(x, y, \frac{du}{dx}\right)$$

- Sabemos que a solução geral depende de duas constantes arbitrárias C_1 e C_2 .

$$u = u(x, C_1, C_2)$$

Problema de valor de contorno

- Muitos modelos físicos são apresentados como uma equação linear de ODE.

$$\frac{d^2u}{dx^2} + a(x)\frac{du}{dx} + b(x)u = c(x)$$

- A solução geral desta equação é

$$u(x) = C_1\Phi_1(x) + C_2\Phi_2(x) + u_{part}(x)$$

- Onde $\Phi_1(x)$ e $\Phi_2(x)$ são duas soluções linearmente independentes da equação homogênea ($c(x) = 0$).
- e $u_{part}(x)$ é uma solução particular da equação principal.

Problema de valor de contorno

- $$\frac{d^2u}{dx^2} + a(x)\frac{du}{dx} + b(x)u = c(x)$$
- A solução geral:
$$u(x) = C_1\Phi_1(x) + C_2\Phi_2(x) + u_{part}(x)$$
- Para encontrar C_1 e C_2 , precisamos de duas informações extras.
- No capítulo anterior, transformamos essa equação em um sistema de equações de primeira ordem como

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = u_2 \\ \frac{du_2}{dx} = f(x, u_1, u_2) \end{cases}$$

Problema de valor de contorno

- $$\frac{d^2u}{dx^2} + a(x)\frac{du}{dx} + b(x)u = c(x)$$
- No capítulo anterior, transformamos essa equação em um sistema de equações de primeira ordem como

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dx} = u_2 \\ \frac{du_2}{dx} = f(x, u_1, u_2) \end{cases}$$

- Em seguida, fornecer duas condições iniciais foi o suficiente para encontrar a solução.

$$u_1(0) = u_0^1 \quad , \quad u_2(0) = u_0^2$$

Problema de valor de contorno

- $$\frac{d^2u}{dx^2} + a(x)\frac{du}{dx} + b(x)u = c(x)$$
- Neste capítulo, queremos estudar métodos numéricos para resolver esse problema, quando as informações são fornecidas como condições de contorno. Podemos fazer isso de maneiras diferentes. Por exemplo,
- Condição de contorno de **Dirichlet**: Quando fornecemos a solução $u(x)$ nos pontos finais do intervalo da solução $[a, b]$.

$$u(a) = u_a \quad \text{and/or} \quad u(b) = u_b$$

Problema de valor de contorno

- $$\frac{d^2u}{dx^2} + a(x)\frac{du}{dx} + b(x)u = c(x)$$
- **Dirichlet:** $u(a) = u_a$ and/or $u(b) = u_b$
- Condição de contorno de **Neumann**: Quando fornecemos a derivada ($\dot{u}(x)$) em um ponto terminal

$$\frac{du}{dx}(a) = \dot{u}(a) \quad \text{and/or} \quad \frac{du}{dx}(b) = \dot{u}(b)$$

Problema de valor de contorno

- $$\frac{d^2 u}{dx^2} + a(x) \frac{du}{dx} + b(x)u = c(x)$$
- **Dirichlet:** $u(a) = u_a \quad \text{and/or} \quad u(b) = u_b$
- **Neumann:** $\frac{du}{dx}(a) = \acute{u}(a) \quad \text{and/or} \quad \frac{du}{dx}(b) = \acute{u}(b)$
- Condição de contorno de **Robin**: Quando fornecemos as informações como
$$\frac{du}{dx}(a) = \alpha_1 u(a) + \beta_1 \quad \text{and/or} \quad \frac{du}{dx}(b) = \alpha_2 u(b) + \beta_2$$

Problema de valor de contorno

- **Dirichlet:** $u(a) = u_a$ and/or $u(b) = u_b$
- **Neumann:** $\frac{du}{dx}(a) = \acute{u}(a)$ and/or $\frac{du}{dx}(b) = \acute{u}(b)$
- **Robin:** $\frac{du}{dx}(a) = \alpha_1 u(a) + \beta_1$ and/or $\frac{du}{dx}(b) = \alpha_2 u(b) + \beta_2$
- Geralmente, podemos apresentar qualquer condição de contorno **linear** como

$$\gamma_1 \frac{du}{dx}(a) = \alpha_1 u(a) + \beta_1 \quad , \quad \gamma_2 \frac{du}{dx}(b) = \alpha_2 u(b) + \beta_2$$

Problema de valor de contorno

- **Dirichlet:** $u(a) = u_a$ and/or $u(b) = u_b$
- **Neumann:** $\frac{du}{dx}(a) = \acute{u}(a)$ and/or $\frac{du}{dx}(b) = \acute{u}(b)$
- **Robin:** $\frac{du}{dx}(a) = \alpha_1 u(a) + \beta_1$ and/or $\frac{du}{dx}(b) = \alpha_2 u(b) + \beta_2$
- **linear geral:** $\gamma_1 \frac{du}{dx}(a) = \alpha_1 u(a) + \beta_1$, $\gamma_2 \frac{du}{dx}(b) = \alpha_2 u(b) + \beta_2$
- Finalmente, a condição de contorno **periódico** é quando a solução deve ser continuada periodicamente fora do intervalo da solução.

$$u(a) = u(b), \quad \frac{du}{dx}(a) = \frac{du}{dx}(b)$$

Problema de teste

- Como o problema de valor inicial, vamos iniciar o tópico com um problema de teste simples.

$$\begin{aligned} -\frac{d^2u}{dx^2} &= f(x) & 0 < x < 1 \\ u(0) &= 0 & u(1) = 0 \end{aligned}$$

- A solução geral desta equação é

$$\begin{aligned} u(x) &= C_1 + C_2x - \int_0^x F(s)ds \\ F(s) &= \int_0^s f(t)dt \end{aligned}$$

Problema de teste

- A solução geral desta equação é

$$u(x) = C_1 + C_2 x - \int_0^x F(s) ds$$

$$F(s) = \int_0^s f(t) dt$$

- Ao integrar por parte, teremos

$$\int_0^x F(s) ds = [sF(s)]_0^x - \int_0^x s \dot{F}(s) ds = \int_0^x (x - s) f(s) ds$$

Problema de teste

- A solução geral desta equação é

$$u(x) = C_1 + C_2x - \int_0^x (x - s)f(s)ds$$

- Agora considerando as condições de contorno, teremos

$$C_1 = 0, \quad C_2 = \int_0^1 (1 - s)f(s)ds$$

- Portanto,

$$u(x) = x \int_0^1 (1 - s)f(s)ds - \int_0^x (x - s)f(s)ds$$

Problema de teste

- A solução geral é

$$u(x) = x \int_0^1 (1-s)f(s)ds - \int_0^x (x-s)f(s)ds$$

$$u(x) = \int_0^1 G(x,s)f(s)ds$$

$$G(x,s) = \begin{cases} s(1-x) & 0 \leq s \leq x \\ x(1-s) & x \leq s \leq 1 \end{cases}$$

- O $G(x,s)$ é chamado de "função de **Green**".
- Preste atenção que, se $f(x) \geq 0$, a solução é $u(x) \geq 0$.

Problema de teste

- $$-\frac{d^2u}{dx^2} = f(x) \quad 0 < x < 1$$
$$u(0) = 0 \quad u(1) = 0$$
- Agora vamos resolver este problema numericamente.
- Primeiro, precisamos separar o intervalo em pontos da grade, onde calcularemos a solução.

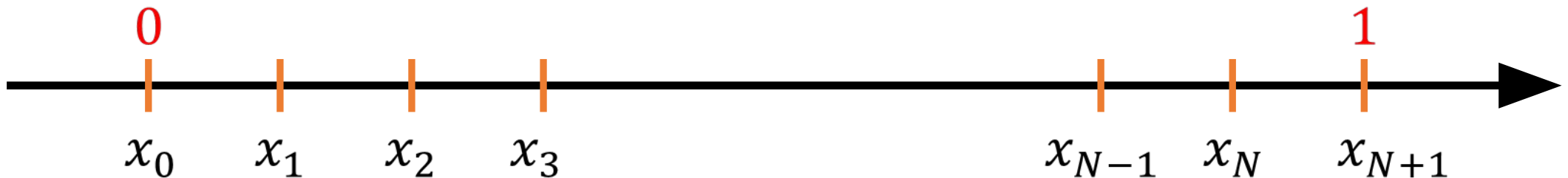


Basic Grid (G0)

- 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

$$h(N + 1) = 1$$

$$x_i = hi \quad i = 0, \dots, N + 1$$



Problema de teste

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

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

- 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

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

$$-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1} = h^2 f(x_i) \quad i = 2, \dots, N-1$$

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

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

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

$$\mathbf{f} = h^2 \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N) \end{bmatrix}$$

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.

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