Computação Científica II

Métodos numéricos para resolver equações diferencias

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?

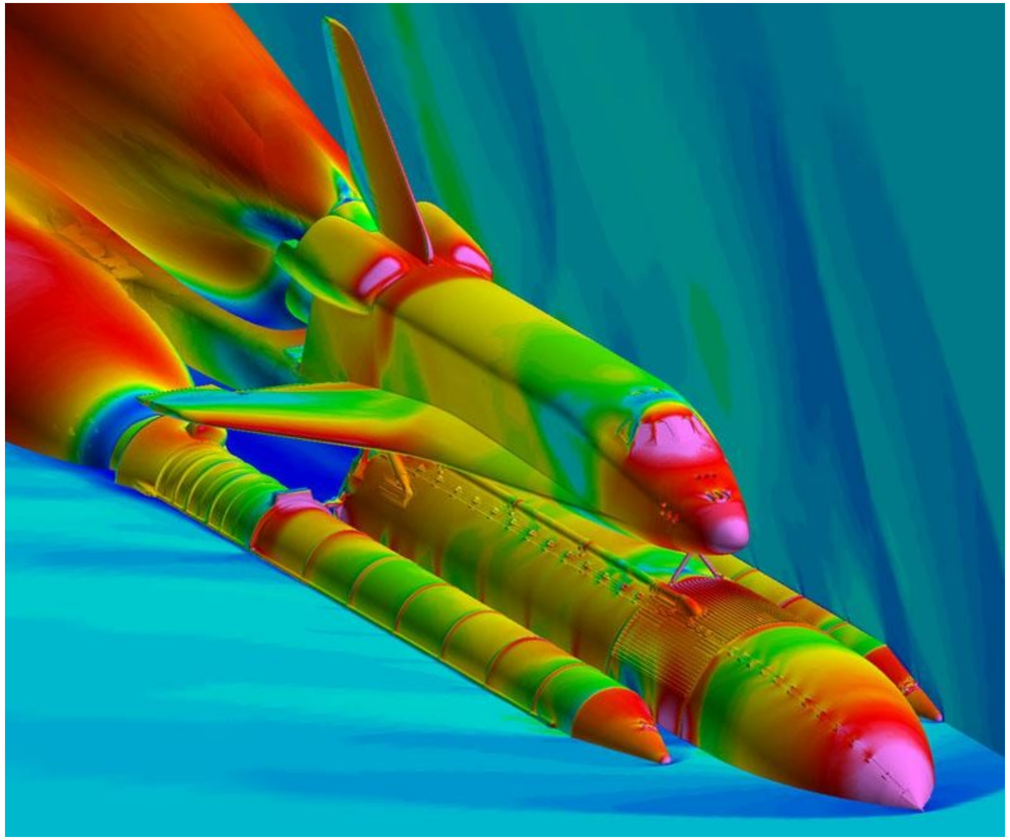
- Física
  - Mecânica clássica, Termodinâmica, dinâmica de fluidos, transferência de calor, mecânica sólida, mecânica quântica,...
- Química
  - Reacções, decaimento radioativo, ...
- Engenharia
  - Mecânica, químico, civil, aeroespacial, naval, ...
- Biologia
  - Crescimento populacional, resposta do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

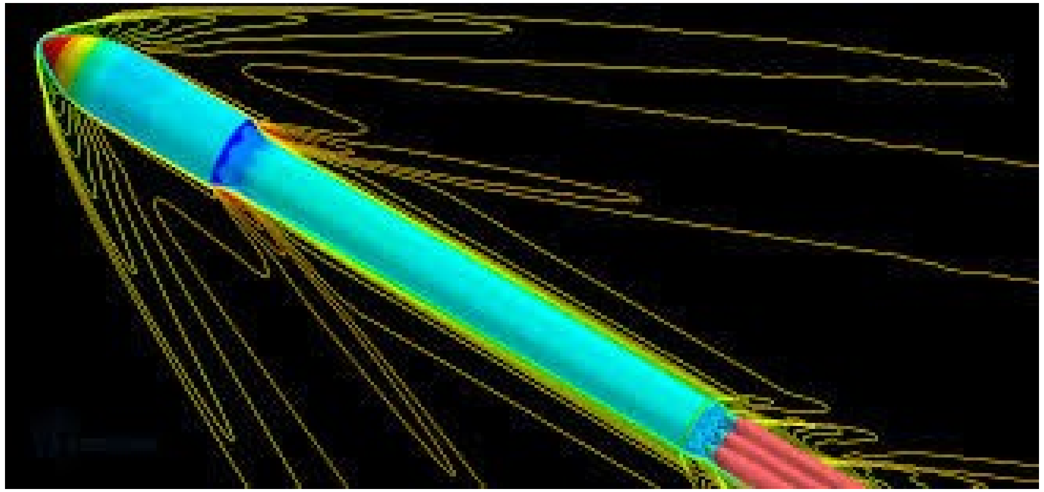
Onde os encontramos?

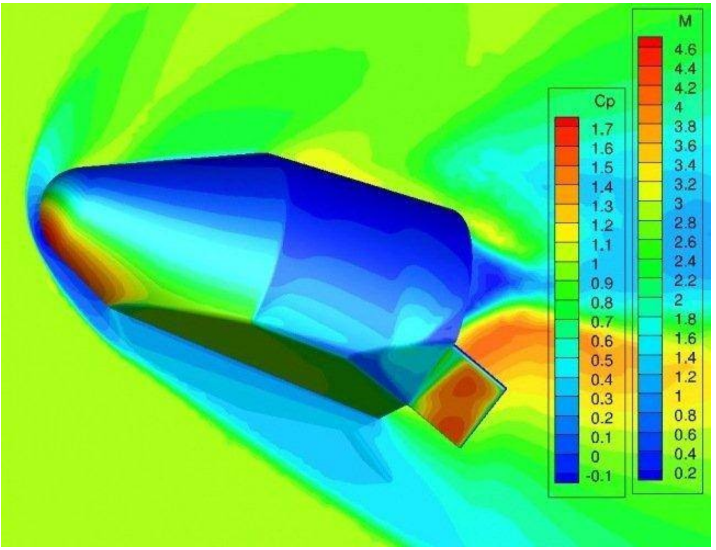
- De quase 200 anos atrás, até agora, e para o futuro previsto, a maior parte da física e engenharia depende de equações diferenciais.

- 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)

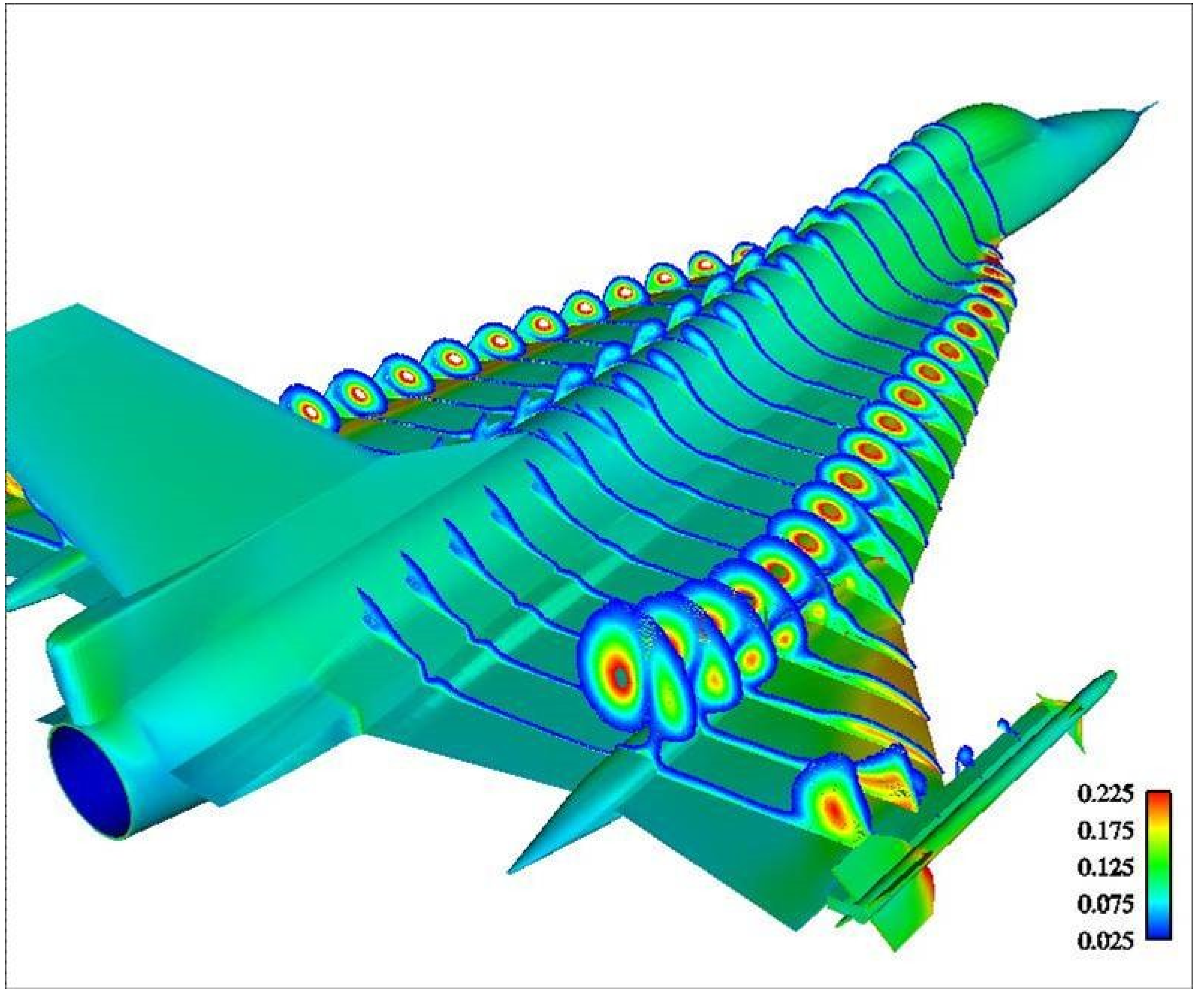
Onde os encontramos?

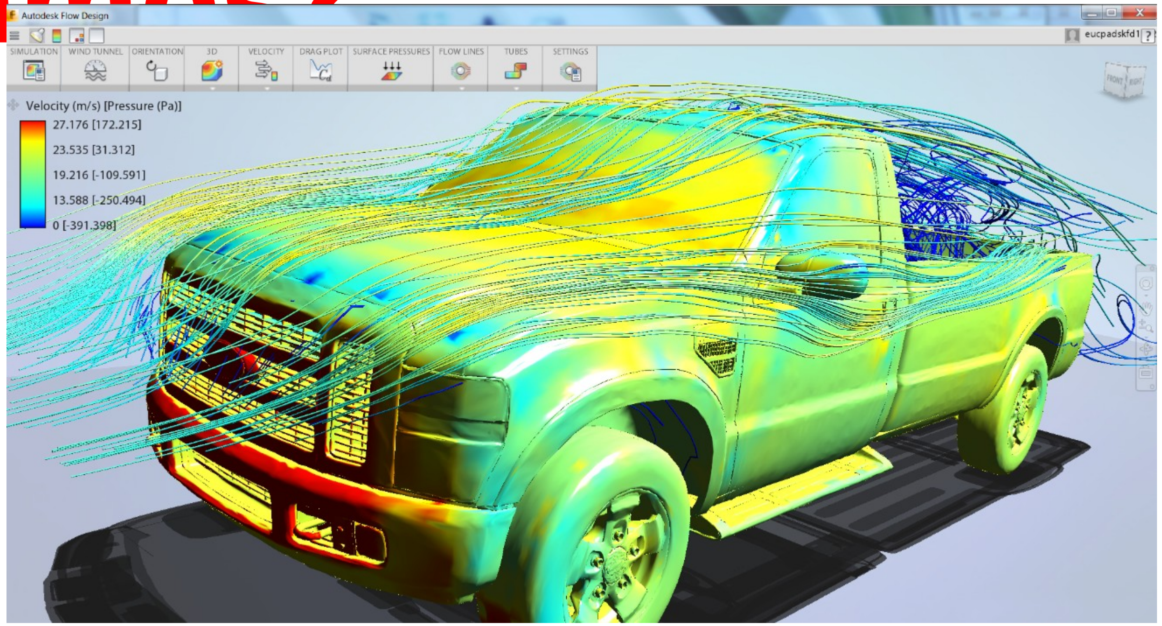




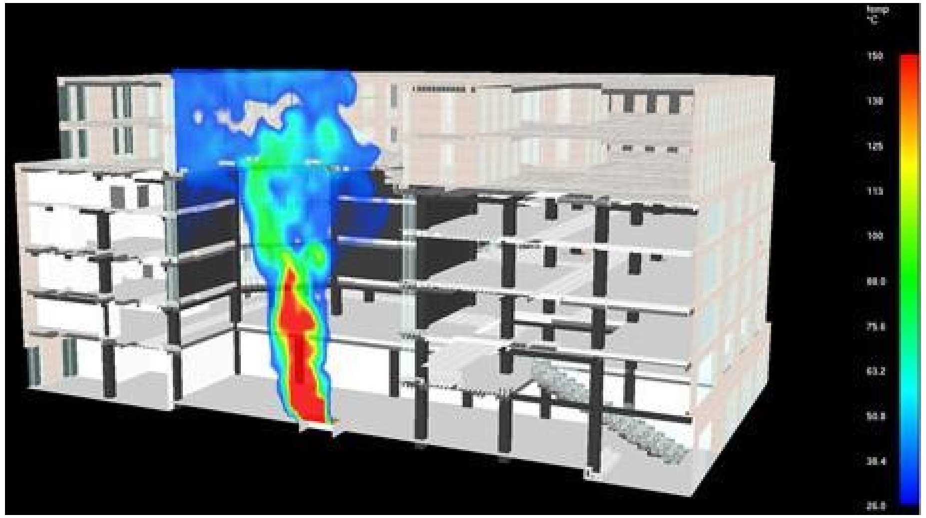


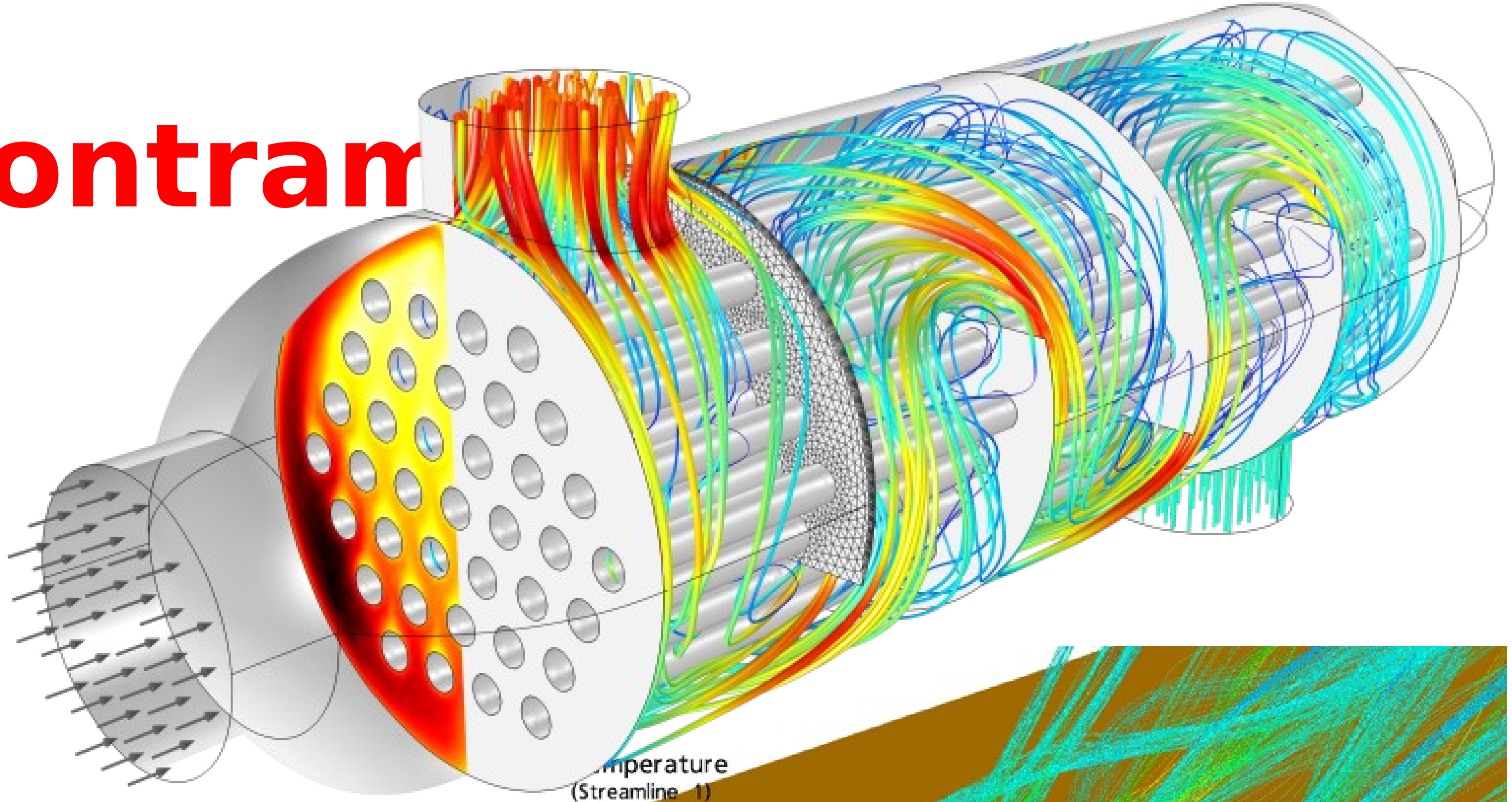
Onde os encontramos?

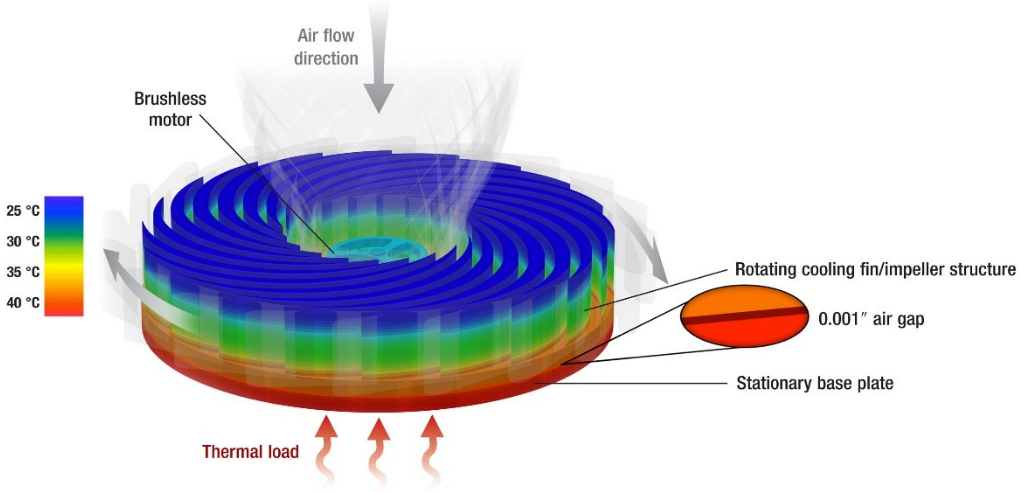


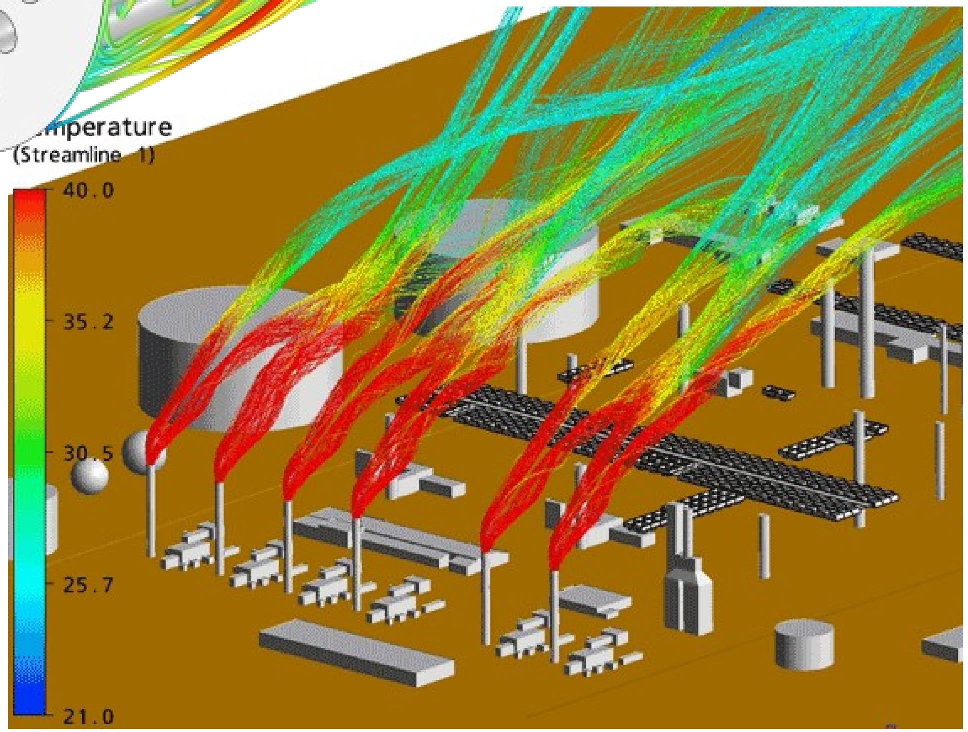


Onde os encontram

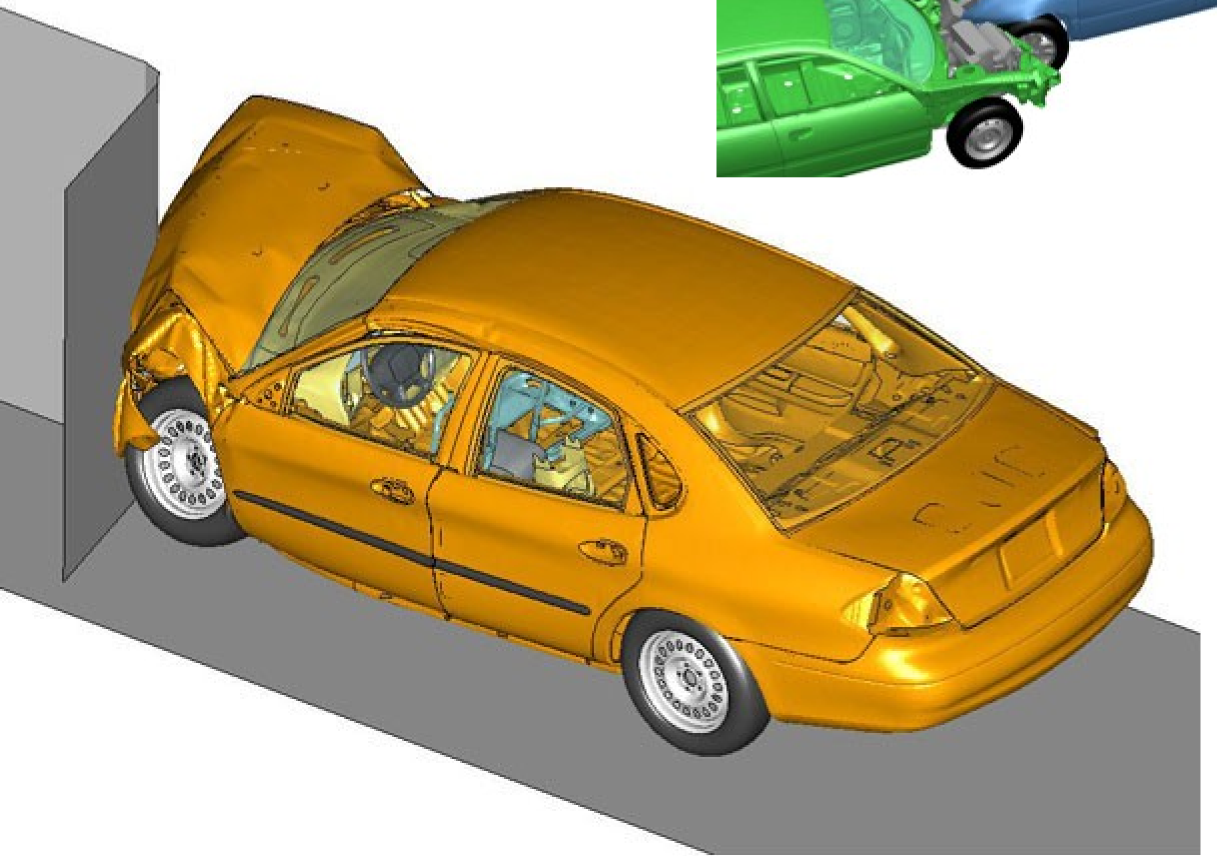


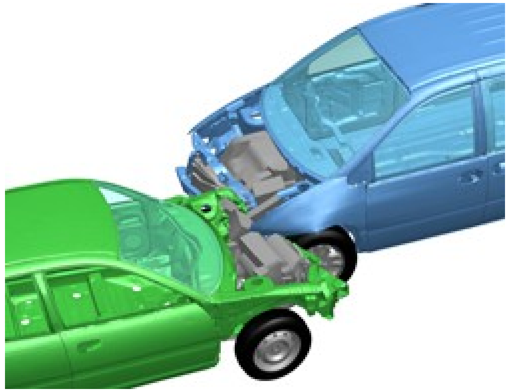


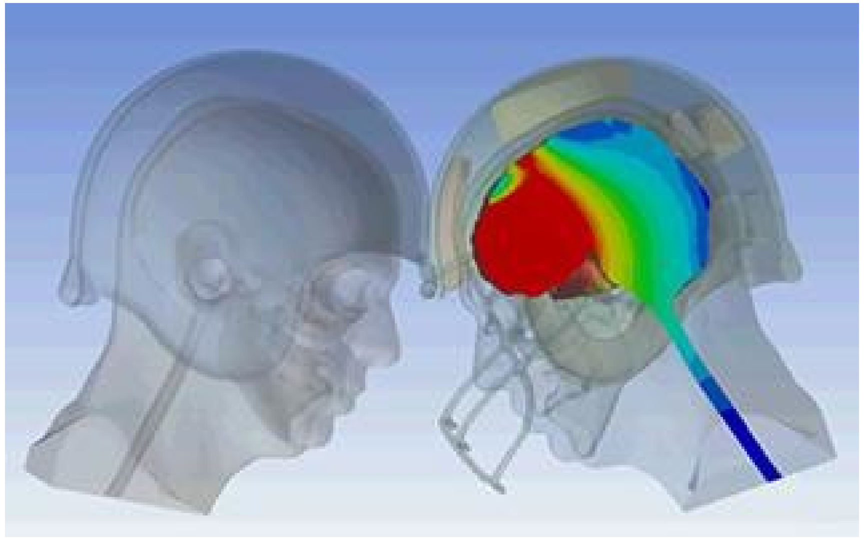


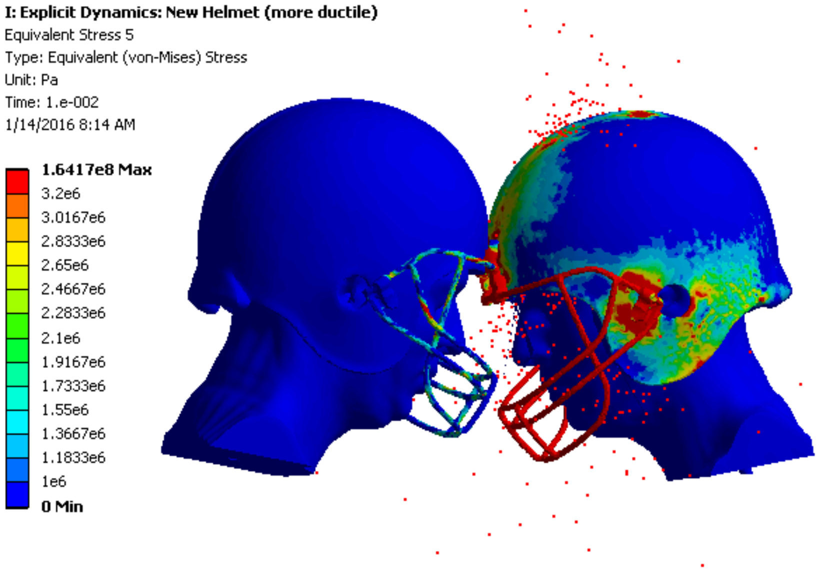


Onde os encontramos?

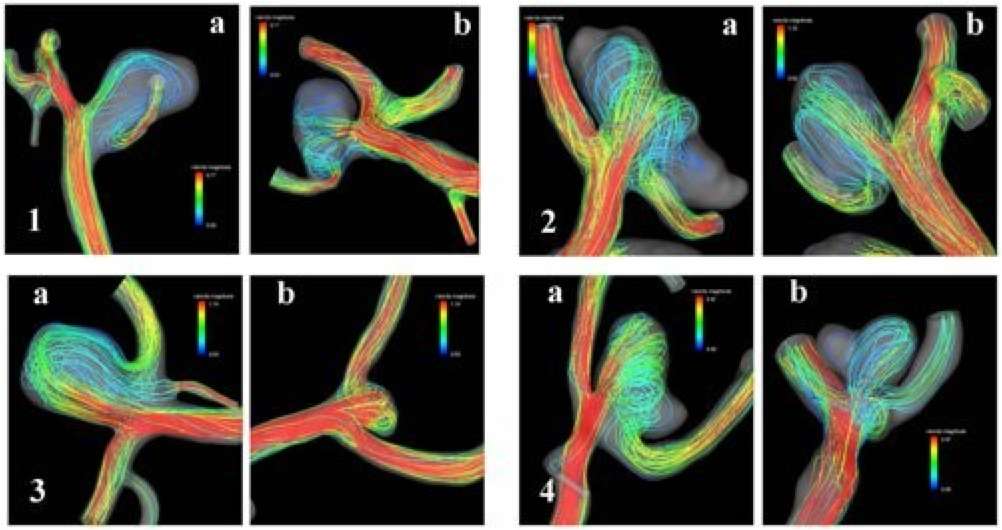


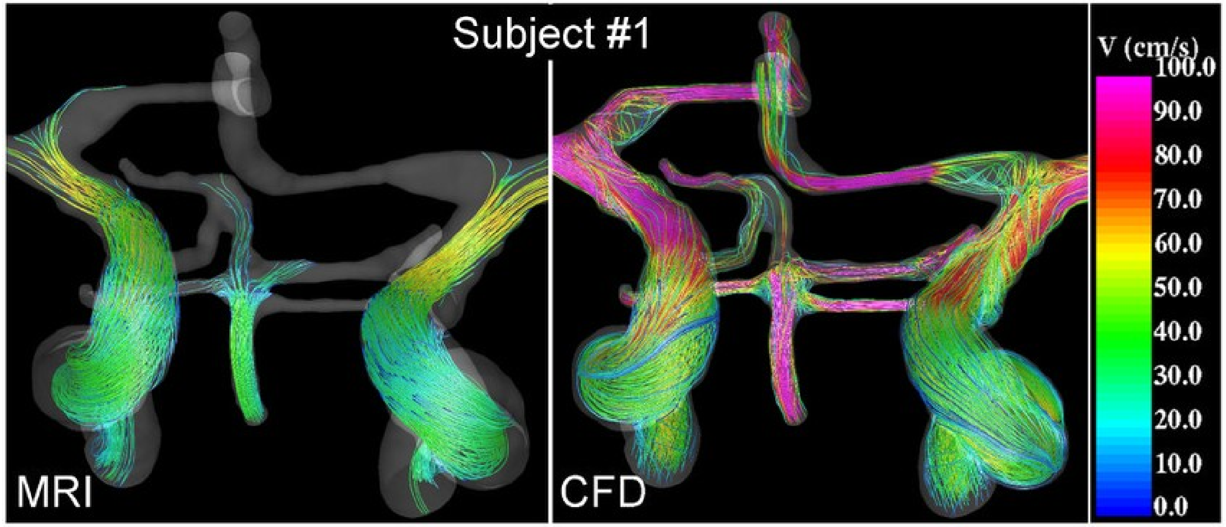


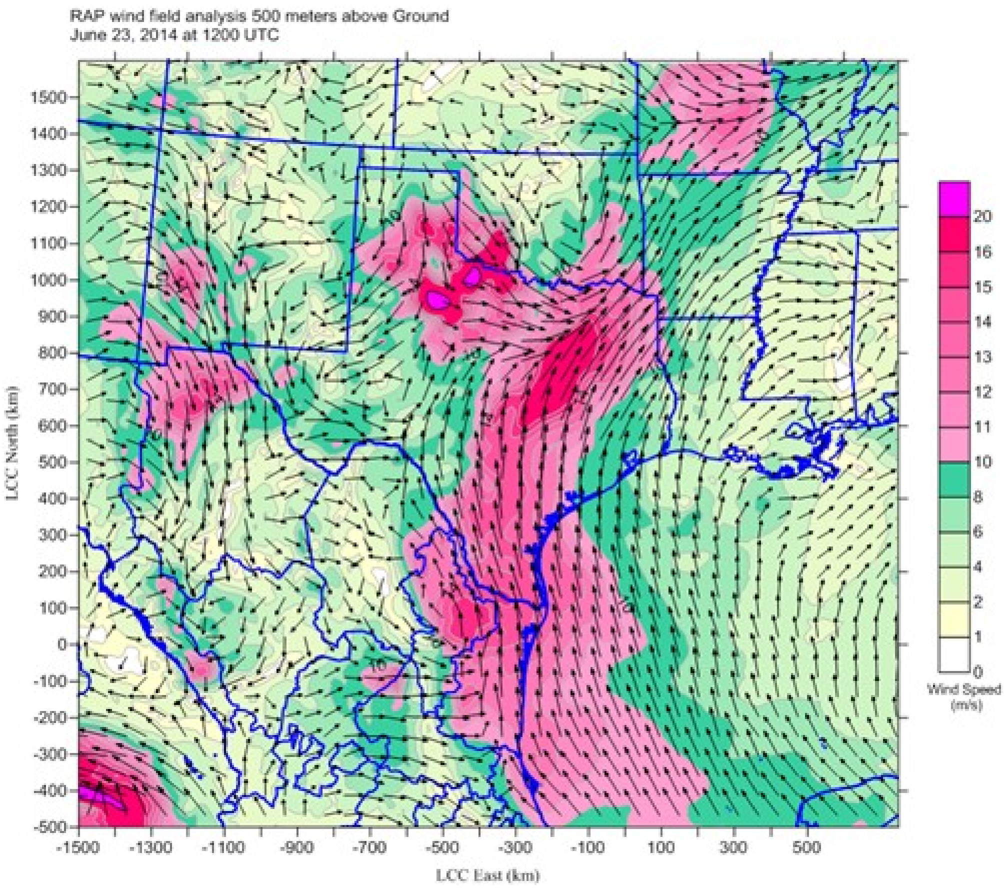




Onde os encontramos?







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)

Capitulo	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.ll.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 substancia 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

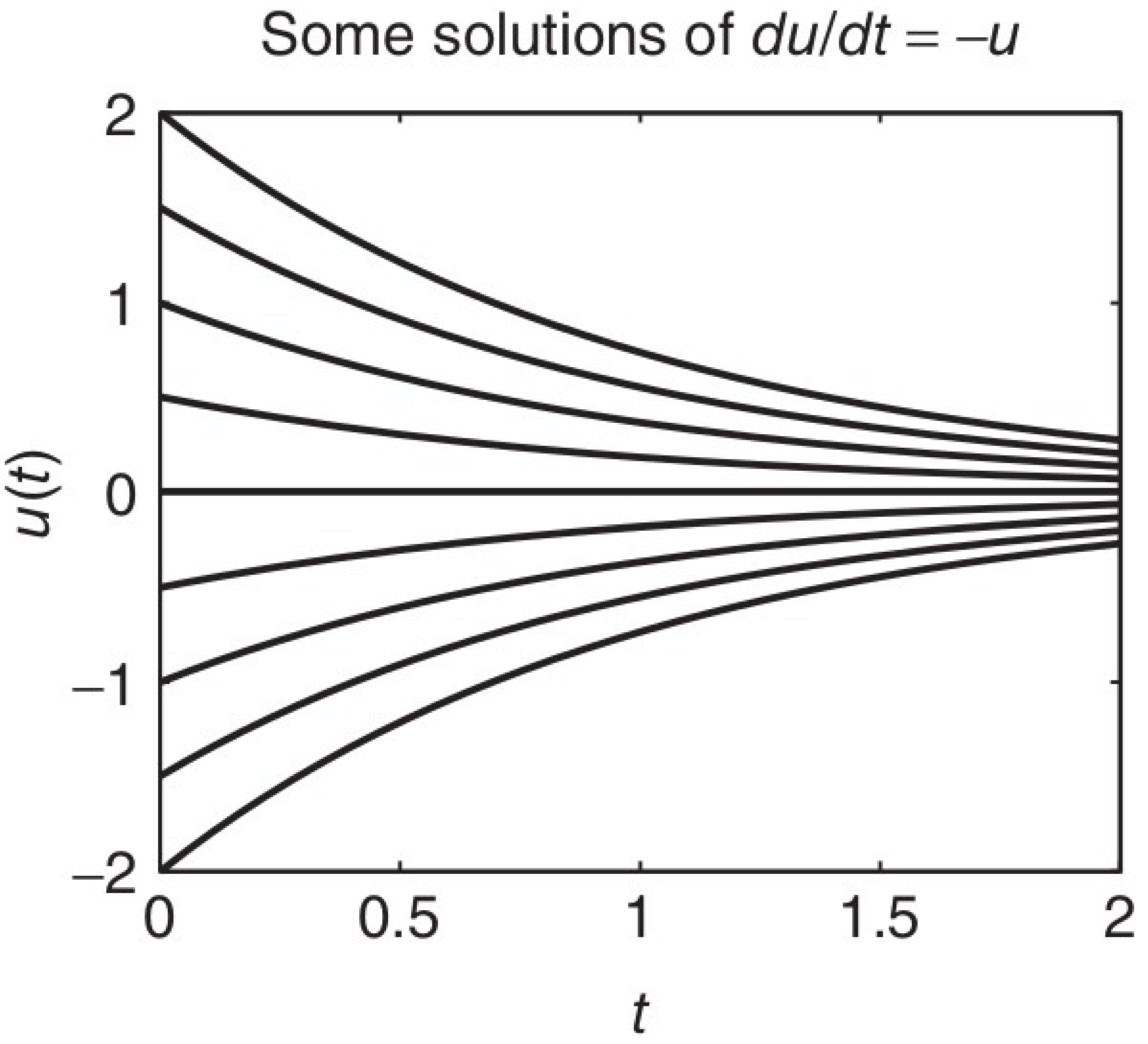
- $$\frac{du}{dt} = au$$

- Podemos resolver essa analiticamente. A solução pode ser escrita explicitamente como uma fórmula algébrica.

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

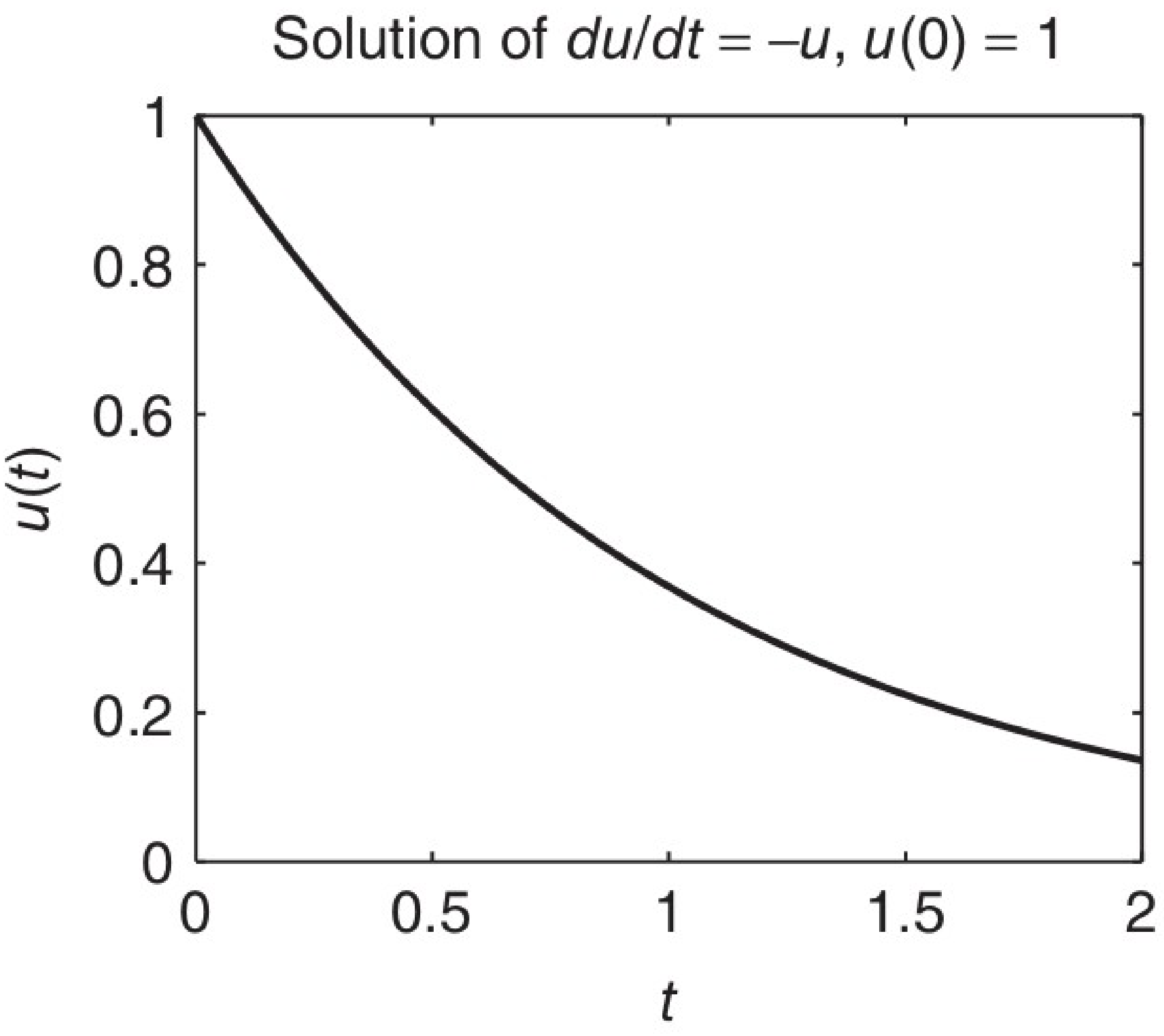
Onde C é uma constante.

- Chamamos esta solução, solução geral.



Definições Primárias

- $$\frac{du}{dt} = au \quad \rightarrow \quad u(t) = C\ e^{at}$$
- Se sabemos C, obtermos 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

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

onde a é uma constante real.

- Agora a função u depende de duas variáveis $u = u(t, x)$.
- 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 a.
- Esta equação tem um nome, equação de advecção.

https://www.youtube.com/watch?v=ujNGaQKap98

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:
$$\begin{aligned} F(y) &= y & \rightarrow \quad u(x,t) &= x - at \\ F(y) &= e^{-y^2} & \rightarrow \quad u(x,t) &= e^{-(x-at)^2} \\ F(y) &= \sin(y) & \rightarrow \quad u(x,t) &= \sin(x - at) \end{aligned}$$
- 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.

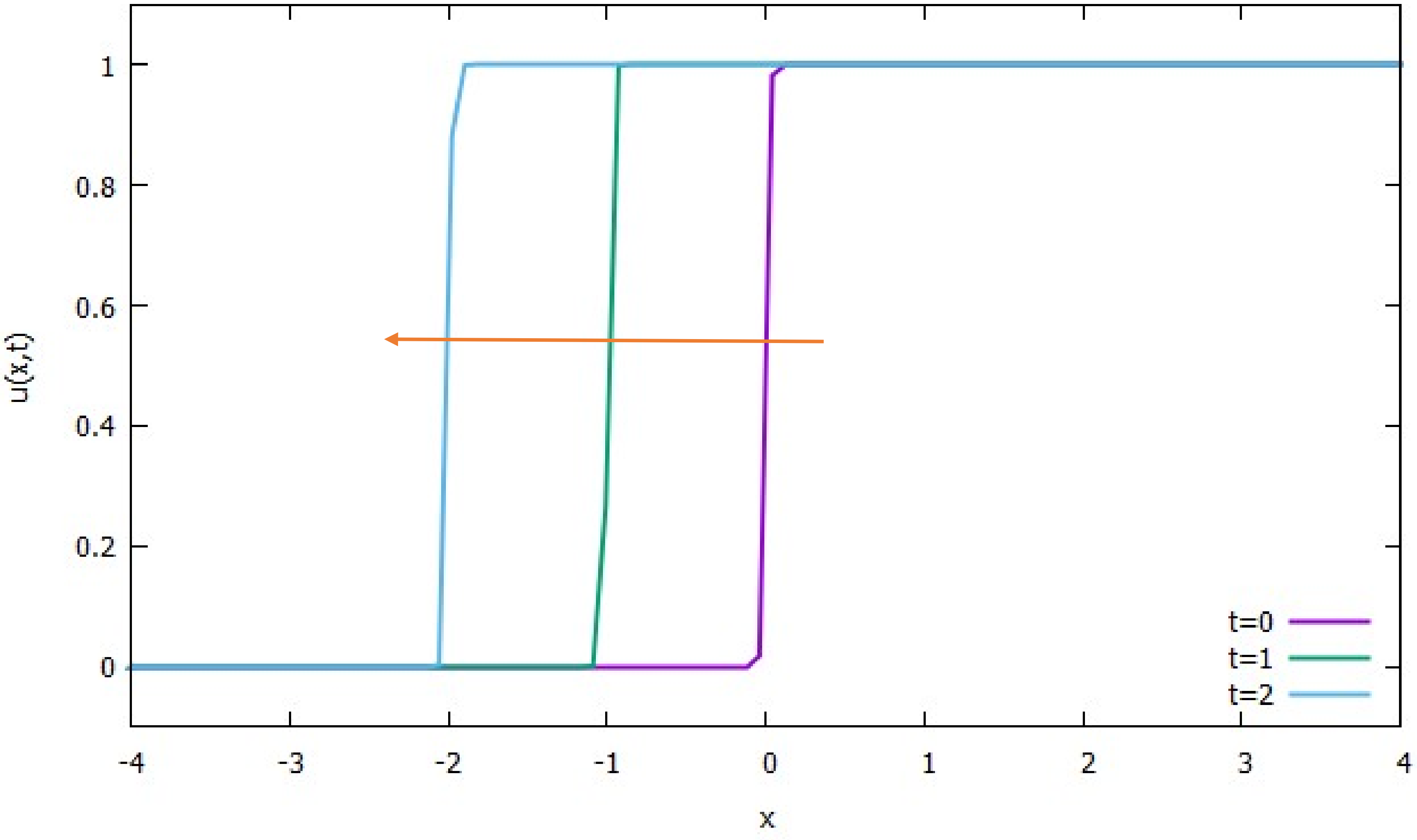
Vamos experimentar!

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

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

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

Velocidade negativa



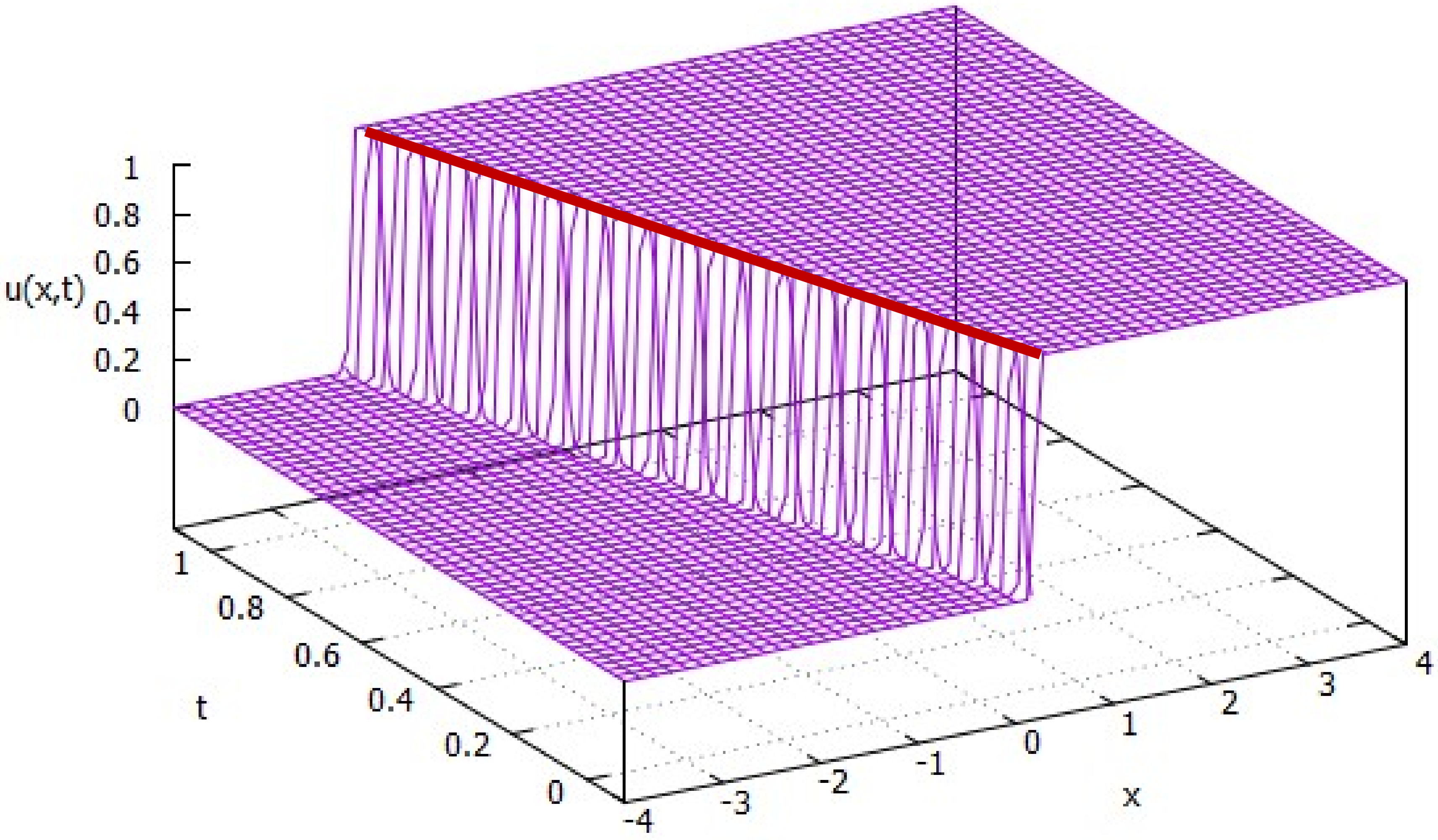
Vamos experimentar!

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

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

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

Velocidade negativa

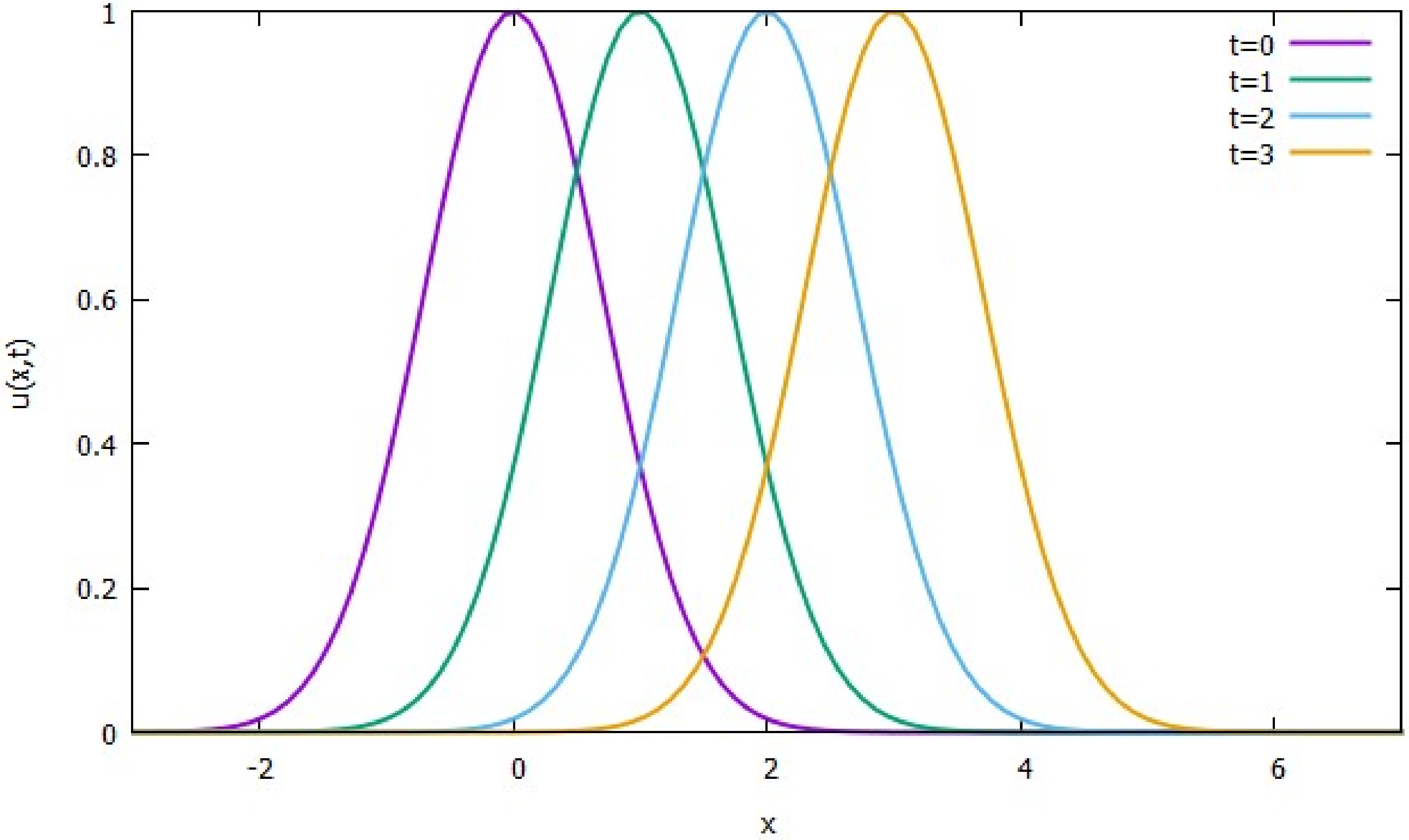


Vamos experimentar!

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

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

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

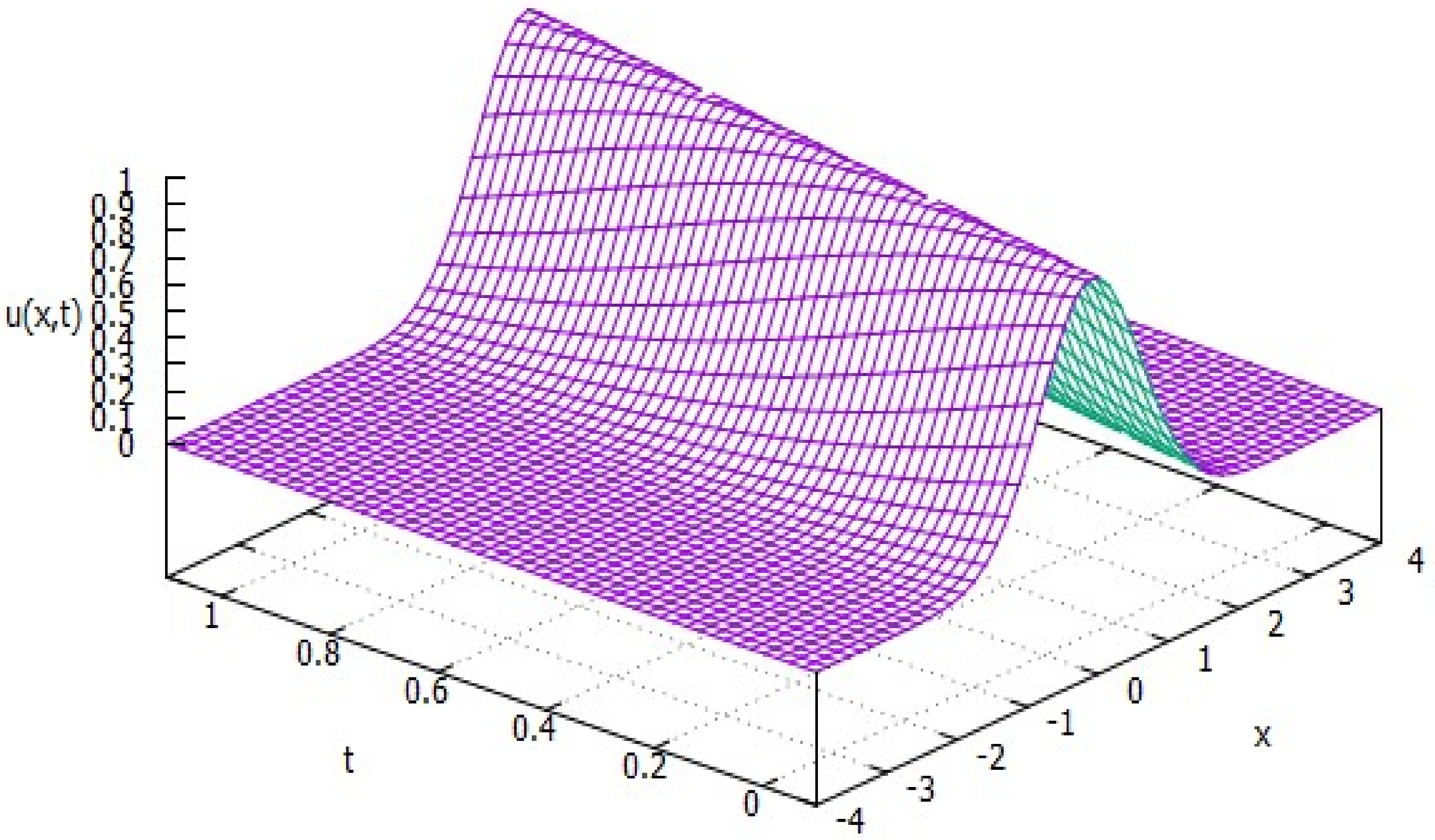


Vamos experimentar!

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

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

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



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).

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

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.

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

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t) = 0$$

visualização

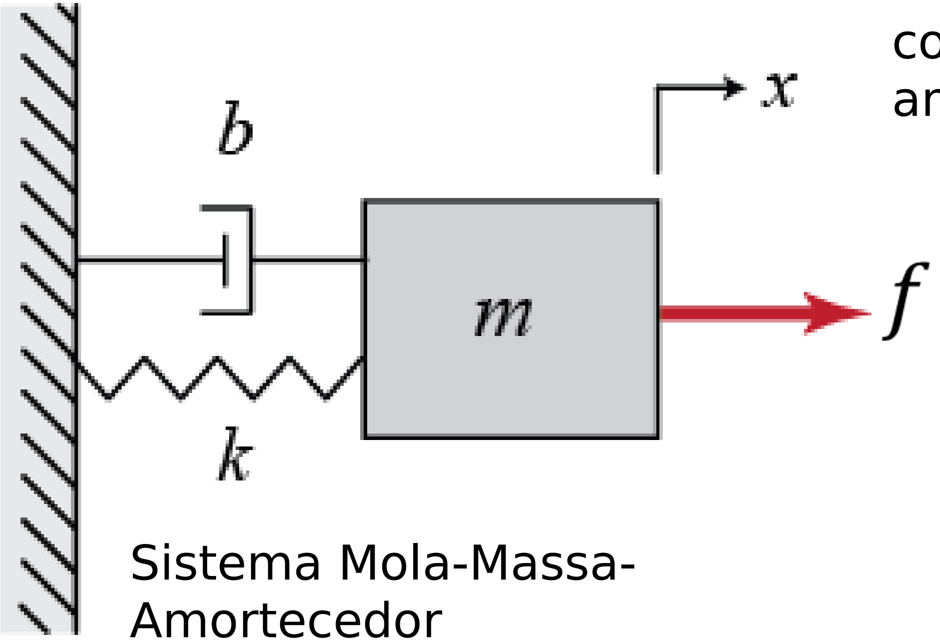
Equação de vibração

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

Mola constante

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

coeficiente de amortecimento



Sistema Mola-Massa-Amortecedor

Segunda lei de Newton $F = ma$

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

aceleração $ma = m\frac{d^2x}{dt^2}$

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

$$x(0) = x_0 \ (posição\ inicial)$$

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

- 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

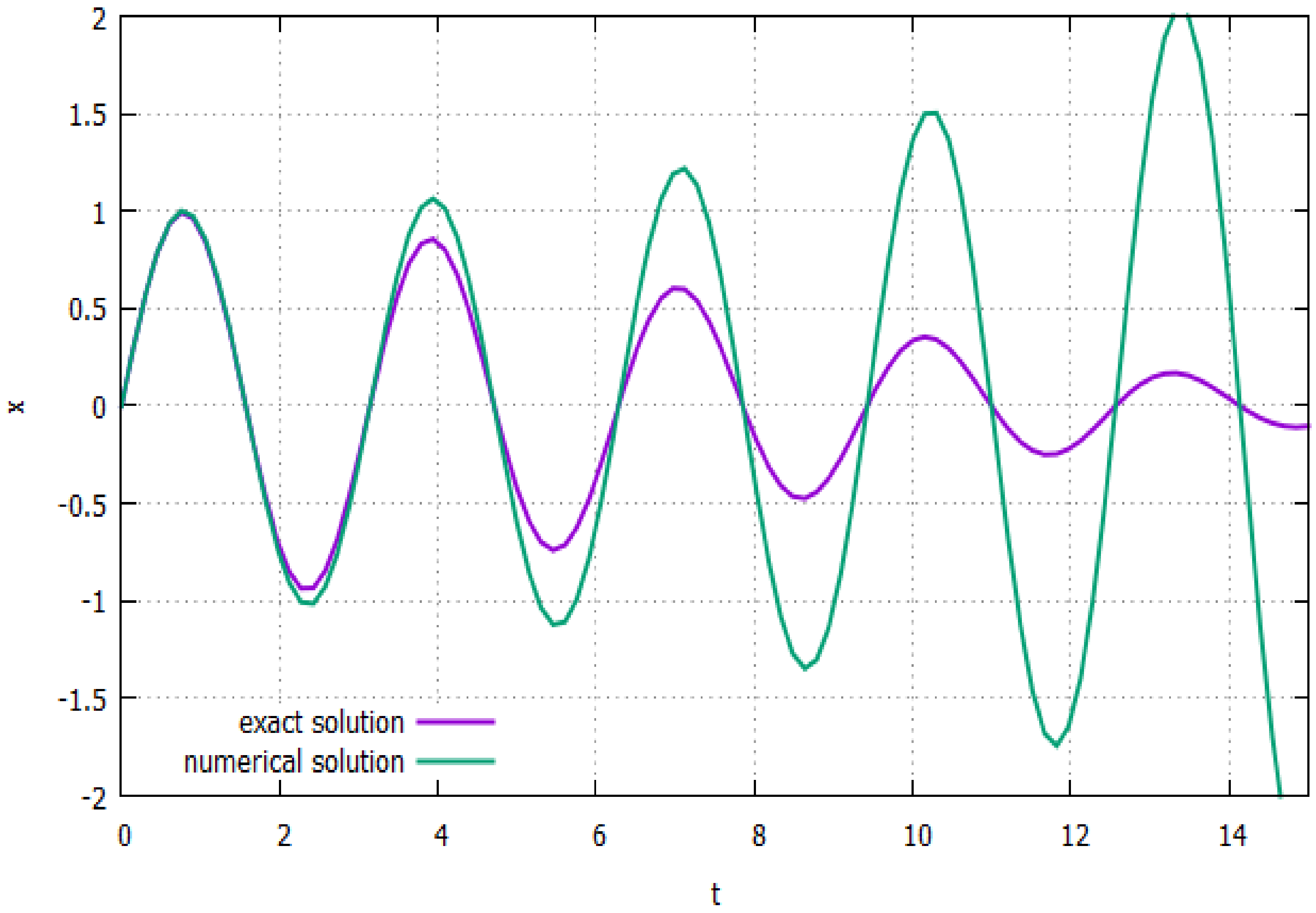
- $$m\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + kx = f(t)$$
- Condições iniciais, como

$$x(0) = x_0 \qquad \frac{dx}{dt}(0) = v_0$$

- 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.

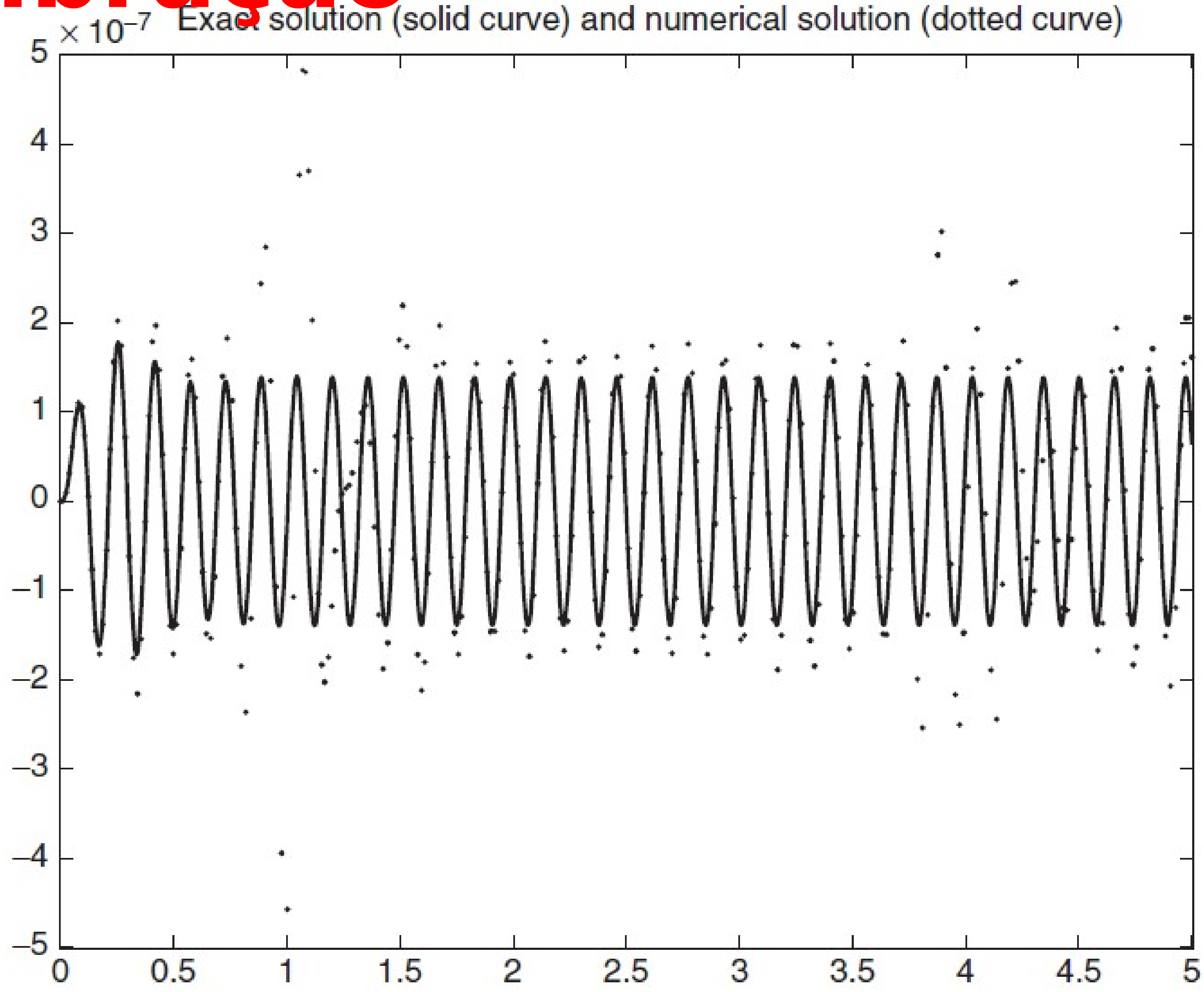
Equação de vibração

- $$m\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + kx = 0$$
  - 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.