Projeto 3: O problema planar de Bratu

Vitor Mazal Krauss

Resumo

Neste trabalho, resolvemos a equação planar de Bratu em uma dimensão com os métodos das diferenças finitas e identificamos a dificuldade deste método na resolução do problema. Também propomos um método de shooting com uma componente de 'swarm intelligence' para contornar esta dificuldade e resolver numericamente o problema.

1. INTRODUÇÃO

O chamado Problema Planar de Bratu em uma dimensão é dado pelo seguinte problema de valor de contorno:

$$\begin{cases} u_{xx} + \lambda e^u = 0 \text{ em } \Omega \\ u = 0 \text{ em } \partial \Omega \end{cases}$$

Este problema foi originalmente usado como modelo para distribuição de temperatura de materiais em combustão [1] e foi resolvido por Bratu [2] em 1914. Sua solução analítica é dada por [1, 5]

$$u(x) = 2 \ln \frac{\cosh(\alpha)}{\cosh(\alpha(1-2x))}$$

onde α satisfaz que $\cosh(\alpha) = \frac{4}{\sqrt{2\lambda}}\alpha$.

Além disso, o problema de Bratu também aparece em outras aplicações [3], como na teoria de combustão em modelos de ignição de combustíveis, na transferência de calor por meio de radiação térmica e no modelo de Chandrasekhar para expansão do universo [4].

1.1. Comportamento das soluções

Temos que a solução analítica do problema de Bratu depende do parâmetro α [5] que satisfaz $\cosh(\alpha) = \frac{4}{\sqrt{2\lambda}}\alpha$. Seja $h(\alpha) = \cosh(\alpha) - \frac{4}{\sqrt{2\lambda}}\alpha$. Vale, segundo [5], que existe $\lambda^* \approx 3.5138$ tal que para $\lambda < \lambda^*$ h tem duas soluções distintas, para $\lambda = \lambda^*$ h tem uma única solução e que para $\lambda > \lambda^*$ não existem soluções. Assim, para $\lambda < \lambda^*$ o problema de Bratu tem duas soluções distintas. Isso certamente representa uma dificuldade para a maioria dos métodos numéricos que possam vir a ser utilizados na solução deste problema, pois eles não são, originalmente, capazes de fornecer duas soluções distintas para um mesmo problema.

A seguir vamos implementar o método das diferenças finitas para resolução numérica do problema e estudar as dificuldades deste método diante da existência de duas soluções. Em seguida, vamos propor um método de shooting que é capaz de contornar esta dificuldade, ou seja, que fornece, numericamente, as duas soluções para o problema(nos casos em que há de fato duas soluções).

2. Soluções numéricas

2.1. Diferenças finitas

Como primeiro método adotamos o método das diferenças finitas considerando a aproximação $\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{2h^2}$ para a segunda derivada. Dado o intervalo $\Omega=[a,b]$, adotamos uma partição regular $\mathscr{P}=\{x_0,\ldots,x_{N-1}\}$, onde $x_0=a$ e $x_{N-1}=b$. Com isso, obtemos o seguinte esquema esquema de diferenças finitas:

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + e^{u_i} = 0, \ \forall i = 1, \dots, N-2$$
$$u_0 = u_{N-1} = 0$$

Este esquema nos dá um sistema de equações não lineares e pode ser computacionalmente resolvido de diversas maneiras.

2.1.1. Exemplo. Tomamos $\lambda=1$ e $\Omega=[0,1]$. Observe que, como $1<\lambda^*$, então para este valor o problema apresenta duas soluções analíticas. Por ora, vamos considerar apenas uma solução numérica e a sua solução analítica correspondente.

Na *Figura 1* apresentamos o gráfico da solução por diferenças finitas do problema de Bratu no intervalo [0,1] com $\lambda=1$ e também da respectiva solução analítica.

Na *Tabela 1* apresentamos o erro absoluto entre a solução numérica e a analítica no ponto médio de Ω , além do tempo de execução para cada tamanho de passo e a ordem estimada do método.

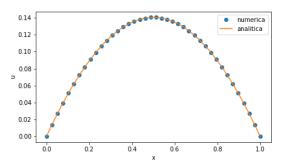


Fig. 1: Soluções numérica e analítica do problema de Bratu com $\lambda=1$ por diferenças finitas.

dt	erro	tempo(s)
$ 2^{-7} $	$8.82e^{-7}$	0.0787
$ 2^{-8} $	$2.18e^{-7}$	0.252
2^{-9}	$5.44e^{-8}$	1.02
2^{-10}	$1.35e^{-8}$	4.97
2^{-11}	$3.39e^{-9}$	27.23

Ordem estimada do método: 2.05

Tab. 1: Erro e tempo de execução para cada valor de dt para solução do problem de Bratu com $\lambda = 1$ por diferenças finitas.

2.1.2. A falha do método. Agora nós vamos estudar onde o método falha. Como vimos anteriormente, para $\lambda < \lambda^*$ o problema tem duas soluções distintas. Evidentemente, o método das diferenças finitas fornece apenas uma aproximação para cada ponto da partição e, portanto, falha, no sentido de que fornece apenas uma solução aproximada, quando sabemos que na verdade existem duas soluções. Uma questão relevante é o que causa com que o método "escolha" uma solução no lugar de outra. Lembramos que para este esquema de diferenças finitas é necessário resolver um sistema não linear para encontrar a solução aproximada da equação diferencial. Com efeito, os algoritmos para resolução de sistemas não lineares são, em geral, baseados em encontrar a raíz de uma função vetorial e, de fato, estes algoritmos têm, em sua maioria, uma dependência muito grande no seu valor inicial, a partir do qual o algoritmo vai iterativamente gerar pontos mais próximos de uma raíz. No caso em que a função tem mais de uma raíz, diferentes valores iniciais vão possivelmente levar a diferentes resultados. É justamente isso que leva o nosso método de diferenças finitas a falhar. A falha do método não está no esquema de diferenças finitas em si, mas no método que ele utiliza para resolver o sistema não linear. Dependendo do valor inicial que tomarmos para solução do sistema acabaremos em uma solução e não na outra.

Na Figura 2 apresentamos o gráfico das soluções numéricas $u^h(x)$ em função do valor inicial v_0 para o método de resolução do sistema. Note que existem dois intervalos disjuntos dos valores de v_0 tais que o método das diferenças finitas aproxima uma solução distinta em cada um destes intervalos. De fato, há ainda um terceiro intervalo nos quais o método não aproxima corretamente nenhuma das duas possíveis soluções. Neste intervalo, por conta do valor inicial v_0 , o método para encontrar a solução do sistema não converge, pelo menos em um tempo tolerável, para nenhuma raíz e a solução acaba sendo incorreta.

Na *Figura 3* apresentamos os gráficos das duas soluções, tanto numéricas quanto analíticas, do Problema de Bratu com $\lambda=1$. Para obter as duas soluções numéricas, foi necessário tomar valores iniciais nos dois intervalos identificados na *Figura 2* e para as soluções analíticas, encontrar as duas soluções distintas de $\cosh(\alpha)=\frac{4}{\sqrt{2}}\alpha$.

2.2. Método de shooting

Propomos uma versão do método de shooting com uma componente "swarm intelligence" para aproximar as duas possíveis soluções do Problema de Bratu.

Primeiramente, na equação $u_{xx} + \lambda e^u = 0$, definimos as

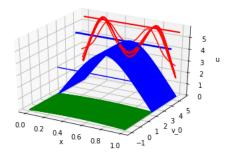


Fig. 2: Soluções por diferenças finitas em função do valor inicial para o método de resolução do sistema.

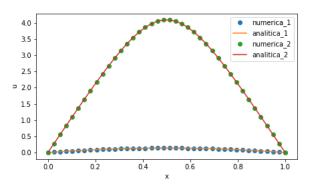


Fig. 3: As duas possíveis soluções numéricas e analíticas do Problema de Bratu com $\lambda=1$ pelo método de diferenças finitas.

variáveis

$$v_1 = u , v_2 = u_x$$

e com isso obtemos o seguinte sistema diferencial de primeira ordem

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_2 \\ -\lambda e^{v_1} \end{bmatrix}$$

com condições iniciais
$$\begin{bmatrix} 0 \\ u_x(a) \end{bmatrix}$$
.

Como o valor de $u_x(a)$ não é conhecido, usamos o método de shooting: Supomos valores s para $u_x(a)$ e aplicamos o método de Runge-Kutta 4 para o sistema acima com condição inicial $\begin{bmatrix} 0 & s \end{bmatrix}^T$ no intervalo Ω . Como a condição de fronteira é u(b)=0, consideramos o erro $e_s=|u^h(b)|$, que é o valor absoluto da solução numérica no ponto x=b. Dada uma tolerância $\delta>0$, se $e_s<\delta$ então aceitamos o valor s como valor de $u_x(a)$. Também adicionamos uma componente de "ant collony optimization". Inicializamos uma lista s^0 com vários valores s_i^0 . Na iteração n, para cada valor de s_i^n fazemos uma aproximação por RK4 e consideramos o erro e_i^n . Calculados o valores de e_i^n , podemos fazer um ajuste secante no valor de s_i :

$$s_i^{n+1} \leftarrow s_i^n - e_i^n \frac{e_i^n - e_i^{n-1}}{s_i^n - s_i^{n-1}}$$

Agora, adicionamos um termo de "feromônio" ao ajuste. Este termo atrai os s_i^n para o valor de s_*^n que minimiza o erro e_*^n . Assim, propomos o seguinte ajuste:

$$s_i^{n+1} \leftarrow s_i^n - e_i^n \frac{e_i^n - e_i^{n-1}}{s_i^n - s_i^{n-1}} - e_i^n \frac{s_*^n - s_i^n}{\exp\left\{\left|s_*^n - s_i^n\right|\right\}}$$

Como há duas soluções para o Problema de Bratu, cada uma com um valor diferente para $u_x(a)$, esperamos que ao final tenhamos os valores de s_i^N concentrados em torno de dois valores. Assim, para obter apenas dois valores para s, aplicamos o algoritmo de "K-Means" para na lista \mathbf{s}^N . Finalmente, para os dois valores obtidos pelo K-Means usamos novamente Runge-Kutta para obter as duas soluções do Problema de Bratu.

O algoritmo é resumido a seguir.

Algorithm 1 Método de shooting para o Problema de Bratu

```
Input: \lambda, \delta, s_0

\mathbf{s}^0 \leftarrow \mathbf{s}_0

\mathbf{e}^0 \leftarrow \mathbf{e}_0

while \max(\mathbf{e}) > \delta do

for s_i^n in \mathbf{s}^n do

u_i^n \leftarrow \mathrm{RK4}(s_i^n)

e_i^n \leftarrow |u_i^n(1)|

end for

s_*^n = \arg\min_{s_i^n} \mathbf{e}^n

for s_i^{n+1} in \mathbf{s}^{n+1} do

s_i^{n+1} \leftarrow s_i^n - e_i^n \frac{e_i^n - e_i^{n-1}}{s_i^n - s_i^{n-1}} - e_i^n \frac{s_*^n - s_i^n}{\exp\left\{|s_*^n - s_i^n|\right\}}

end for

end while

\mathbf{S} = \mathrm{KMeans}(\mathbf{s}^N)

return [\mathrm{RK4}(s) \text{ for } s \text{ in } \mathbf{S}]
```

2.2.1. Exemplo. Na *Figura 4* apresentamos o gráfico das duas soluções numéricas dadas pelo nosso shooting method e sua comparação com as soluções analíticas.

Na *Tabela 2* apresentamos os erros absoluto e relativo entre a solução numérica e a analítica no ponto médio de Ω usando o método de shooting proposto.

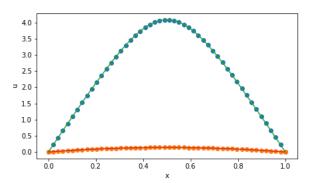


Fig. 4: As duas possíveis soluções numéricas e analíticas do Problema de Bratu com $\lambda = 1$ pelo método de shooting.

3. Conclusão

Utilizamos o método das diferenças finitas para resolver numericamente o Problema de Bratu. Consideramos um esquema de diferenças finitas de ordem teórica 2 e obtemos

	Solução 1	Solução 2
Erro absoluto	0.00325867	0.00063898
Erro relativo	0.0007966	0.0045471

Tab. 2: Erro absoluto e relativo entre a solução numérica e analítica no ponto médio do intervalo pelo método de shooting.

aproximadamente 2.05 como ordem estimada do método. Analisamos de forma mais detalhada a existência de duas soluções distintas para certos valores de λ e propomos um método de shooting para contornar esta dificuldade. Com efeito, para obter duas soluções distintas pelo método das diferenças finitas teríamos que testar diferentes valores iniciais para o algoritmo que resolve o sistema não linear. O problema disso é que não há de fato uma maneira de determinar qual valor inicial seria necessário para obter cada solução, ou seja, teríamos que testar sequencialmente diversos valores iniciais e resolver o sistema para cada um. Pararíamos quando tivéssemos duas soluções distintas, o que levaria muito tempo. Em alternativa, propomos um método de shooting que, baseado em algoritmos de 'ant colony optimization', testa vários valores iniciais de forma concorrente e os ajusta com um passo secante e um fator de feromônio, que o atrai para o valor inicial que minimiza o erro. Assim, o método de shooting também testa valores, porém ele faz isso de uma maneria mais eficiente, sabendo, de certa forma, onde ele deve procurar. Além disso, apesar deste método utilizar o Runge-Kutta 4, que é de ordem 4, a ordem do método de shooting em si é aproximadamente 1.6, que é a ordem do método secante usado para encontrar os devidos valores iniciais. Afinal, apesar de apresentar uma ordem ligeiramente menor que as diferenças finitas, o método de shooting proposto é capaz de mais rapidamente fornecer as duas soluções distintas do Problema Planar de Bratu.

Referências

- [1] A. M. Wazwaz, *A First Course in Integral Equations*, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 2015.
- [2] G. Bratu, Sur les equation integrals non-lineaires, Bull. Math. Soc. France, 42 (1914), pp. 113-142.
- [3] S. G. Venkatesh, S. K. Ayyaswamy, S. Raja Balachandar, The Legendre wavelet method for solving initial value problems of Bratu-type, Computers & Mathematics with Applications, v.63 n.8, p.1287-1295, April, 2012.
- [4] S. Chandrasekhar, An Introduction to the Study of Stellar Structure, Dover Publications, New York, N.Y, 1958.
- [5] A. Mohsen, A simple solution of the Bratu problem, Computers & Mathematics with Applications, v.67 n.1, p.26-33, January, 2014.