

RESOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS ATRAVÉS DE FUNÇÕES DE BASE RADIAL

CON10-2021

Monção, Thyago de Lellys Faria, thylellys@yahoo.com.br¹
Oliveira, Waldir de, waldir@unifei.edu.br²

¹Marinha do Brasil – MB, Ilha do Mocanguê Pequeno, s/n, Niterói/RJ,

²Universidade Federal de Itajubá – UNIFEI, Avenida BPS, 1303, Pinheirinho, Itajubá/MG.

***Resumo:** Neste artigo, funções de base radial utilizadas para interpolação de dados espalhados são aplicadas na resolução numérica de equações diferenciais parciais, resultando em uma técnica de solução sem malha para domínios regulares ou irregulares e de quaisquer dimensões. Uma breve introdução sobre funções de base radial é apresentada e depois dois métodos de colocação, assimétrico e simétrico, para a solução numérica de equações diferenciais parciais são expostos. Dois tipos de funções de base radial são utilizados: multiquádrica inversa e gaussiana. Para uma discussão mais clara, as técnicas propostas são aplicadas em equações diferenciais parciais elípticas do tipo Poisson, com condições de contorno de Dirichlet e mistas, que possuem solução analítica disponível, permitindo uma fácil verificação dos resultados numéricos obtidos.*

***Palavras-chave:** função de base radial, equação diferencial parcial, sem malha*

1. INTRODUÇÃO

A representação matemática de um fenômeno físico, em geral, resulta em equações diferenciais parciais. Na maioria dos casos, a solução dessas equações só é possível por meio de análise numérica as quais podem ser resolvidas por meio de diversos métodos numéricos, como diferenças finitas, elementos finitos, volumes finitos e elementos de contorno. Esses métodos requerem a utilização de malha (discretização do domínio e contorno) onde as funções são aproximadas localmente. A construção de uma malha apropriada em duas ou três dimensões não é um processo trivial.

Nos últimos anos, tem sido observado um aumento significativo no interesse da comunidade científica pelos chamados métodos sem malha. Nesta última década, em particular, nota-se um avanço no desenvolvimento de métodos sem malha que utilizam funções de base radial (RBF-*Radial Basis Function*) na solução numérica de diversos tipos de equações diferenciais parciais. Neste contexto, os créditos iniciais da aplicação do método de colocação podem ser dados ao trabalho de Kansa (1990) que utilizou RBF como solução aproximada de equações diferenciais parciais. Em linhas gerais, o método de Kansa apresenta diversas vantagens sobre outros métodos numéricos, como aqueles mencionados acima. O método de colocação proposto por Kansa é realmente sem malha, no qual os pontos de colocação podem ser escolhidos livremente (não existe qualquer tipo de conectividade entre os pontos), e independente da dimensão espacial do problema, o que facilita muito a extensão do método para resolução de problemas que envolvem dimensões maiores. O método de Kansa é popularmente conhecido como método assimétrico. Uma outra abordagem, conhecida como método simétrico (ou método de Hermite), foi proposta por Fasshauer (1997) e utilizada por Larsson (2003) e Power (2002).

Neste artigo, são apresentados os dois métodos de colocação, assimétrico e simétrico, para a solução de equações diferenciais parciais elípticas do tipo Poisson, com condições de contorno de Dirichlet e mistas. Duas RBFs infinitamente suaves são utilizadas, a multiquádrica inversa e a gaussiana. Dois exemplos são apresentados, com o objetivo principal de comparar os resultados numéricos obtidos através da aplicação dos métodos assimétrico e simétrico, utilizando as RBFs multiquádrica inversa e gaussiana. Para esta comparação, diversos pontos de colocação são adotados e, para todos os casos, um único valor do fator de forma é utilizado.

2. FUNÇÕES DE BASE RADIAL

Funções de base radial são aquelas que apresentam simetria radial, ou seja, dependem apenas (além de alguns parâmetros conhecidos) da distância $r = \|x - x_j\|$ entre o centro da função e o ponto genérico x , podendo ser escrita genericamente na forma $\varphi(r)$. Com uma definição tão geral assim, existirão infinitas funções deste tipo. A RBF pode

também depender de um fator de forma, ε , e, neste caso, $\varphi(r)$ é substituído por $\varphi(r, \varepsilon)$. Algumas RBFs comumente utilizadas são apresentadas na Tab. (1).

Tabela 1. Algumas funções de base radial comumente utilizadas.

Multiquádrica (MQ)	$\sqrt{1 + (\varepsilon r)^2}$
Multiquádrica Inversa (IMQ)	$1/\sqrt{1 + (\varepsilon r)^2}$
Gaussiana (G)	$e^{-(\varepsilon r)^2}$
Spline de Placa Fina (TPS)	$ r ^n \ln r $, n par

3. ANÁLISE NUMÉRICA

Nesta seção, são apresentados primeiramente os dois métodos de colocação, assimétrico e simétrico, em seguida, dois exemplos com os resultados numéricos obtidos e, por fim, alguns comentários sobre os exemplos.

3.1 Método Assimétrico (Kansa)

Na interpolação de dados, é fornecido um conjunto de dados $\{x_i, f_i\}$, $i = 1, \dots, N$, $x_i \in \mathfrak{R}^s$, onde os valores f_i podem ser obtidos por uma função $f: \mathfrak{R}^s \rightarrow \mathfrak{R}$. O objetivo, portanto, é encontrar um interpolante da forma

$$P_f(x) = \sum_{j=1}^N c_j \varphi(\|x - x_j\|), \quad x \in \mathfrak{R}^s, \quad (1)$$

tal que

$$P_f(x_i) = f_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2)$$

A solução deste problema é obtida através da resolução de um sistema de equações algébricas lineares, $A c = f$, onde a matriz A é dada por

$$A_{ij} = \varphi(\|x_i - x_j\|), \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (3)$$

A matriz A é não-singular para uma grande variedade de tipos de funções de base radial (Kansa e Hon, 2000), incluindo as multiquádricas inversas e as gaussianas.

Esta mesma idéia pode ser utilizada para solução de equações diferenciais parciais, ou seja, dado um domínio $\Omega \subset \mathfrak{R}^s$ e uma equação diferencial parcial elíptica da forma

$$Lu(x) = f(x), \quad \text{em } \Omega, \quad (4)$$

com condição de contorno de Dirichlet,

$$u(x) = g(x), \quad \text{em } \partial\Omega. \quad (5)$$

No método de colocação de Kansa, a solução aproximada \hat{u} é representada por uma expansão análoga àquela utilizada para a interpolação de dados, Eq. (1), ou seja,

$$\hat{u}(x) = \sum_{j=1}^N c_j \varphi(\|x - \xi_j\|). \quad (6)$$

Como é de costume, por formalidade, os centros $\Xi = \{\xi_1, \dots, \xi_N\}$ e os pontos de colocação $X = \{x_1, \dots, x_N\}$ são distinguidos, apesar de coincidirem fisicamente. Na Eq. (6), $N = N_I + N_B$ representa o número total de pontos de colocação, onde N_I é o número de pontos no domínio e N_B o número de pontos no contorno, $\varphi(r, \varepsilon)$ é a função de base radial e c_j são os coeficientes incógnitos.

A matriz que é obtida, quando se combina a equação diferencial, Eq. (4), e a condição de contorno, Eq. (5), nos pontos de colocação X , assume a forma

$$A = \begin{bmatrix} \tilde{A}_L \\ \tilde{A} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

onde os dois blocos são obtidos por

$$(\tilde{A}_L)_{ij} = L\varphi(\|x - \xi_j\|)|_{x=x_i}, \quad x_i \in I, \quad \xi_j \in \Xi, \quad (8a)$$

$$\tilde{A}_{ij} = \varphi(\|x_i - \xi_j\|), \quad x_i \in B, \quad \xi_j \in \Xi. \quad (8b)$$

O conjunto X dos pontos de colocação pode ser dividido no conjunto I dos pontos do domínio e no conjunto B dos pontos do contorno. O problema está bem posto se o sistema de equações algébricas lineares, $A c = f$, apresenta solução única.

Modificações na condição de contorno, Eq. (5), implica em simples mudança em algumas linhas da matriz \tilde{A} na Eq. (7) bem como nos elementos correspondentes do vetor lado direito, f .

3.2 Método Simétrico (Hermite)

O método de colocação simétrico se baseia no método de interpolação de Hermite. Considera-se a mesma equação diferencial parcial elíptica, Eq. (4), com a mesma condição de contorno, Eq. (5), do item anterior. Para que seja possível que se aplique a interpolação de Hermite e, assim, garantir a não-singularidade da matriz de colocação, a expansão aproximada para a função incógnita, u , assume a seguinte forma

$$\hat{u}(x) = \sum_{j=1}^{N_I} c_j L^\xi \varphi(\|x - \xi_j\|)|_{\xi=\xi_j} + \sum_{j=N_I+1}^N c_j \varphi(\|x - \xi_j\|), \quad (9)$$

onde N_I representa o número de pontos no interior de Ω , $N = N_I + N_B$ onde N_B representa os pontos no contorno $\partial\Omega$ e L^ξ é o operador diferencial da equação diferencial parcial, Eq. (4).

Após impor as condições de colocação, segue que

$$L\hat{u}(x_i) = f(x_i), \quad x_i \in I, \quad (10)$$

$$\hat{u}(x_i) = g(x_i), \quad x_i \in B, \quad (11)$$

com a matriz dos pontos de colocação, A , representada da forma

$$A = \begin{bmatrix} \hat{A}_{LL^\xi} & \hat{A}_L \\ \hat{A}_{L^\xi} & \hat{A} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Os quatro blocos são gerados do seguinte modo

$$(\hat{A}_{LL^\xi})_{ij} = LL^\xi \varphi(\|x - \xi_j\|)|_{x=x_i, \xi=\xi_j}, \quad x_i, \xi_j \in I, \quad (13a)$$

$$(\hat{A}_L)_{ij} = L\varphi(\|x - \xi_j\|)|_{x=x_i}, \quad x_i \in I, \quad \xi_j \in B, \quad (13b)$$

$$(\hat{A}_{L^\xi})_{ij} = L^\xi \varphi(\|x_i - \xi_j\|)|_{\xi=\xi_j}, \quad x_i \in B, \quad \xi_j \in I, \quad (13c)$$

$$\hat{A}_{ij} = \varphi(\|x_i - \xi_j\|), \quad x_i, \xi_j \in B, \quad (13d)$$

onde nas Eqs. (13) estão identificados os dois conjuntos de pontos de colocação $X = I \cup B$ e dos centros Ξ .

A matriz A na Eq. (12) é não-singular, para uma escolha apropriada de φ . Outro ponto a favor da abordagem de Hermite é que a matriz A é simétrica, ao contrário da matriz A na Eq. (7) que não é simétrica. Esta propriedade é de grande valor para uma implementação eficiente do método de colocação. Vale notar que, embora a matriz A agora seja composta por quatro blocos, ela permanece do mesmo tamanho ($N \times N$) da matriz A na Eq. (7) obtida pelo método de Kansa. Entretanto, a matriz de colocação simétrica requer funções de base radial mais suaves do que as do método de Kansa, o que não é vantajoso para solução de equações diferenciais parciais não-lineares.

3.3 Exemplos Numéricos

Nos dois exemplos-testes seguintes, os problemas foram restringidos aos casos de aplicação de equações diferenciais parciais elípticas do tipo Poisson que apresentassem solução analítica conhecida, com o intuito de fácil verificação dos resultados obtidos.

Exemplo 1

Considera-se a seguinte equação diferencial parcial de Poisson com condições de contorno de Dirichlet,

$$\nabla^2 u(x, y) = -\frac{5}{4}\pi^2 \sin(\pi x) \cos\left(\frac{\pi y}{2}\right), \quad (x, y) \in \Omega = [0, 1]^2,$$

$$u(x, y) = \sin(\pi x), \quad (x, y) \in \Gamma_1,$$

$$u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_2,$$

onde $\Gamma_1 = \{(x, y): 0 \leq x \leq 1, y = 0\}$ e $\Gamma_2 = \partial\Omega \setminus \Gamma_1$. Para este caso, pode ser verificado facilmente que a solução exata é dada por

$$u(x, y) = \sin(\pi x) \cos\left(\frac{\pi y}{2}\right).$$

Os métodos assimétrico e simétrico foram implementados utilizando um programa em MATLAB e, em cada um dos métodos, foram utilizadas RBFs dos tipos multiquádrica inversa e gaussiana com o mesmo fator de forma ($\varepsilon = 3$). Assim, os resultados obtidos são apresentados abaixo.

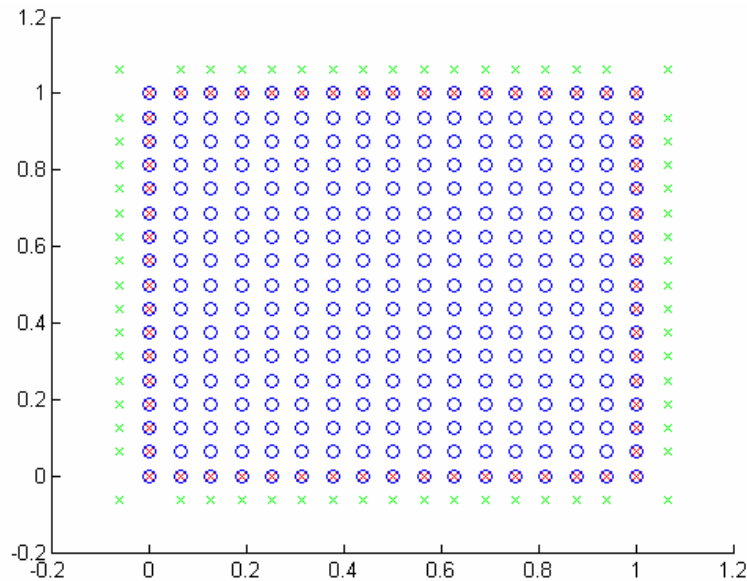


Figura 1. Pontos de colocação (interno: azul, contorno: vermelho) e os centros (interno: azul, contorno: verde) para 289 pontos internos

Tabela 2. Solução do Exemplo 1 pelo método assimétrico (Kansa).

N (Pontos no interior)	Multiquádrica inversa (IMQ)		Gaussiana (G)	
	Erro RMS	Erro MAX	Erro RMS	Erro MAX
9	1,526456e-001	2,883793e-001	1,981675e-001	3,451847e-001
25	6,096534e-003	1,368355e-002	7,199931e-003	1,548491e-002
81	8,071271e-004	2,288896e-003	1,947108e-004	4,669284e-004
289	3,219110e-005	9,686490e-005	3,413579e-007	3,001901e-006

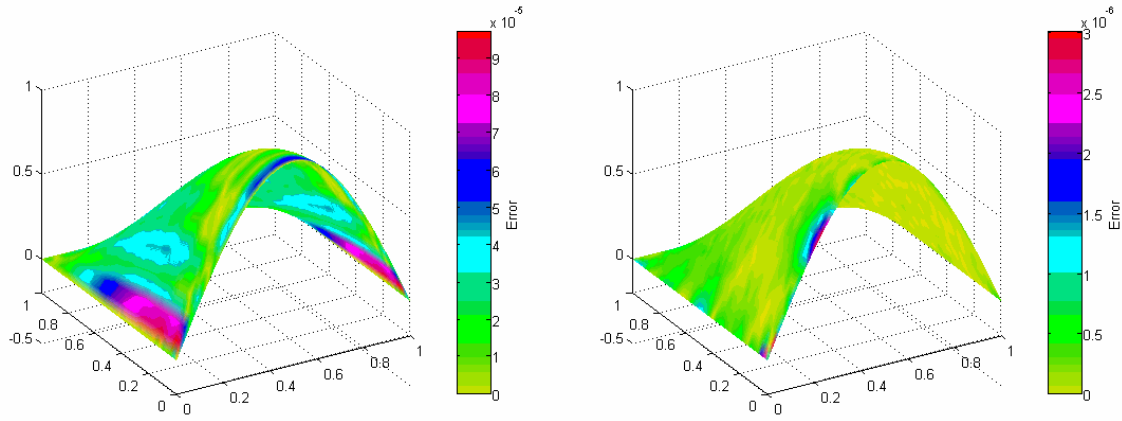


Figura 2. Solução do Exemplo 1 pelo método assimétrico, utilizando RBFs dos tipos multiquádrica inversa (esquerda) e gaussiana (direita), com $\varepsilon = 3$ e $N = 289$ pontos no interior.

Tabela 3. Solução do Exemplo 1 pelo método simétrico (Hermite)

N (Pontos no interior)	Multiquádrica inversa (IMQ)		Gaussiana (G)	
	Erro RMS	Erro MAX	Erro RMS	Erro MAX
9	2,806897e-001	5,440547e-001	4,088188e-001	7,726983e-001
25	1,583948e-001	3,100889e-001	7,704584e-003	1,641233e-002
81	8,650782e-004	2,639934e-003	2,272289e-004	5,328331e-004
289	3,962654e-005	1,229717e-004	2,655253e-006	2,363774e-005

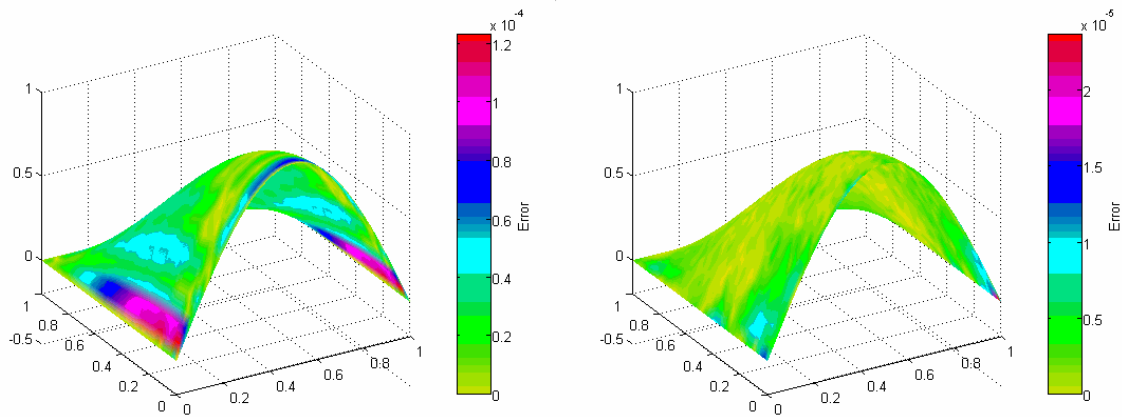


Figura 3. Solução do Exemplo 1 pelo método simétrico, utilizando RBFs dos tipos multiquádrica inversa (esquerda) e gaussiana (direita), com $\varepsilon = 3$ e $N = 289$ pontos no interior.

Exemplo 2

Considera-se agora a seguinte equação diferencial parcial de Poisson com condições de contorno mistas,

$$\nabla^2 u(x, y) = -5,4x, \quad (x, y) \in \Omega = [0, 1]^2,$$

$$\frac{\partial}{\partial n} u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_1 \cup \Gamma_3,$$

$$u(x, y) = 0, 1, \quad (x, y) \in \Gamma_2,$$

$$u(x, y) = 1, \quad (x, y) \in \Gamma_4,$$

onde

$$\Gamma_1 = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, \quad y = 0\},$$

$$\Gamma_2 = \{(x, y) : x = 1, \quad 0 \leq y \leq 1\},$$

$$\Gamma_3 = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, \quad y = 1\},$$

$$\Gamma_4 = \{(x, y) : x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1\}.$$

Para este problema, a solução exata é dada por

$$u(x, y) = 1 - 0,9x^3.$$

Analogamente, os métodos assimétrico e simétrico foram implementados utilizando um programa em MATLAB e, em cada um dos métodos, foram utilizadas RBFs dos tipos multiquádrica inversa e gaussiana com o mesmo fator de forma ($\varepsilon = 3$). Assim, os resultados obtidos são apresentados abaixo.

Tabela 4. Solução do Exemplo 2 pelo método assimétrico (Kansa).

N (Pontos no interior)	Multiquádrica inversa (IMQ)		Gaussiana (G)	
	Erro RMS	Erro MAX	Erro RMS	Erro MAX
9	1,250626e-001	1,850277e-001	3,310424e-001	4,814038e-001
25	9,913477e-003	2,777059e-002	2,568257e-002	5,040789e-002
81	3,533749e-003	7,603914e-003	1,640369e-003	3,467337e-003
289	3,322387e-004	7,319851e-004	1,240122e-006	3,130964e-006

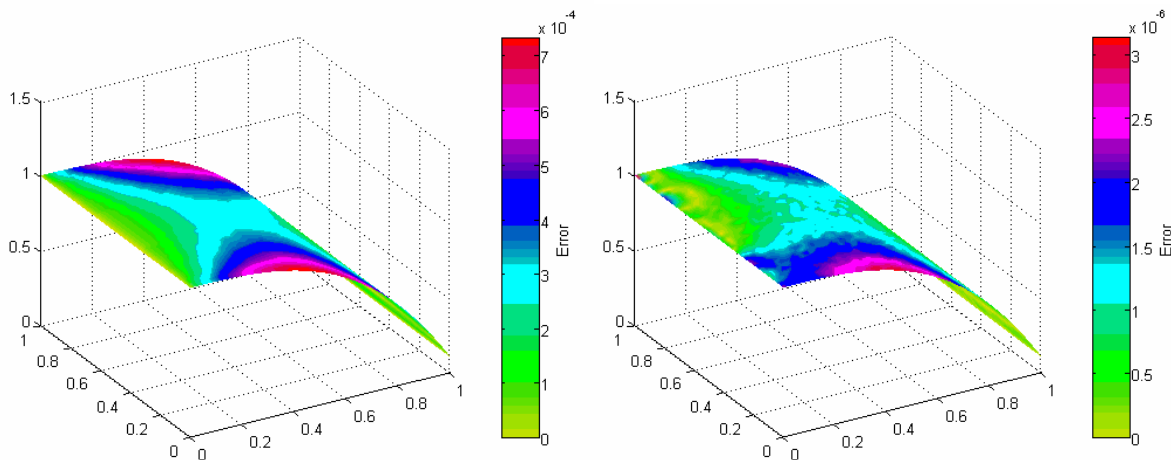


Figura 4. Solução do Exemplo 2 pelo método assimétrico, utilizando RBFs dos tipos multiquádrica inversa (esquerda) e gaussiana (direita), com $\varepsilon = 3$ e $N = 289$ pontos no interior.

Tabela 5. Solução do Exemplo 2 pelo método simétrico (Hermite).

N (Pontos no interior)	Multiquádrica inversa (IMQ)		Gaussiana (G)	
	Erro RMS	Erro MAX	Erro RMS	Erro MAX
9	2,802003e-001	3,965792e-001	7,653536e-001	1,101844e+000
25	1,795134e-001	2,586947e-001	2,587376e-002	4,946156e-002
81	4,268661e-003	8,947359e-003	1,893772e-003	4,006507e-003
289	4,063021e-004	8,967751e-004	6,984280e-007	1,736188e-006

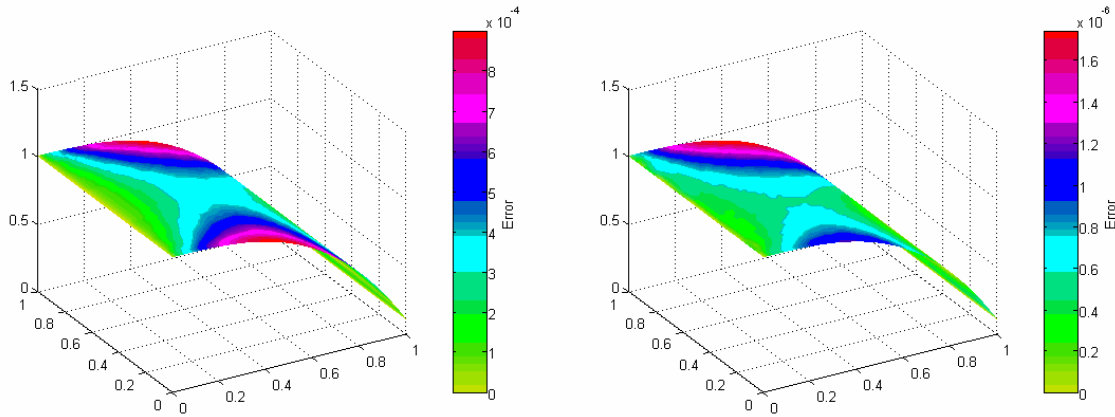


Figura 5. Solução do Exemplo 2 pelo método simétrico, utilizando RBFs dos tipos multiquádrica inversa (esquerda) e gaussiana (direita), com $\varepsilon = 3$ e $N = 289$ pontos no interior.

3.4 Comentários Sobre os Exemplos

Apesar de relativamente simples, os dois exemplos apresentados mostram o potencial das RBFs na resolução numérica de equações diferenciais parciais elípticas pelo método de colocação. Como mostram as Tabs. (2) e (3), para o Exemplo 1, e Tabs. (4) e (5), para o Exemplo 2, os menores erros (para $N = 289$) ocorreram para a RBF gaussiana, ao utilizar o método assimétrico. Em todos os casos, foi utilizado um único valor do fator de forma, $\varepsilon = 3$. Não é objetivo deste artigo analisar o efeito da variação do fator de forma, ε , o qual, para um determinado problema, depende da RBF utilizada, do número total de pontos, N , e também da distribuição desses pontos no contorno e no domínio. De fato, a proposta principal deste artigo é comparar os métodos assimétrico e simétrico.

4. CONCLUSÕES

Dois métodos de colocação, assimétrico e simétrico, foram apresentados para a solução de equações diferenciais parciais elípticas. Dois exemplos numéricos foram apresentados referentes a equações diferenciais parciais do tipo Poisson, com condições de contorno de Dirichlet e mistas. Nestes exemplos foram utilizadas as RBFs multiquádrica inversa e a gaussiana. Diversos pontos de colocação foram adotados e, para todos os casos, um único valor do fator de forma foi utilizado. Nos dois exemplos, o método assimétrico (Kansa) apresentou resultados um pouco melhores do que o método simétrico (Hermite).

Uma vantagem da abordagem de Hermite sobre a de Kansa, é que as matrizes de colocação resultantes da aplicação do método são simétricas, se todos os centros coincidirem com os pontos de colocação. Por esse motivo, a quantidade de cálculos pode ser consideravelmente reduzida utilizando um *solver* para sistemas simétricos. Em contrapartida, o método de Kansa requer menos derivadas da função básica, sendo assim, de implementação mais simples.

5. REFERÊNCIAS

- Fasshauer, G.E., 1997, "Solving Partial Differential Equations by Collocation with Radial Basis Function", Surface Fitting and Multiresolution Methods, A. Le Méhauté, C. Rabut, and L. L. Schumaker (eds.), Vanderbilt University Press, Nashville, pp. 131-138.
- Kansa, E.J., 1990, "Multiquadrics – a Scattered Data Approximation Scheme with Applications to Computational Fluid Dynamics II", Computers and Mathematics with Applications, 19, pp. 147-161.
- Kansa, E.J. and Hon, Y.C., 2000, "Circumventing the Ill-conditioning Problem with Multiquadric Radial Basis Functions: Applications to Elliptic Partial Differential Equations", Computers and Mathematics with Applications, 39, pp. 123-137.
- Larsson, E., 2003, "A Numerical Study of Some Radial Basis Function based Solution Methods for Elliptic PDEs", Computers and Mathematics with Applications, 46, pp. 891-902.
- Power, H., 2002, "A Comparison Analysis between Unsymmetric and Symetric Radial Basis Function Collocation Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations", Computers and Mathematics with Applications, 43, pp. 551-583.

6. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.