

Uma Breve Introdução Teórica do Método de Kansa para Soluções Numéricas de Equações Diferenciais Parciais

Gilcélia R. de Souza¹
UFSJ, Ouro Branco, MG

Resumo. Diversos problemas em ciência e tecnologia são modelados por equações diferenciais parciais - EDP, então resolver esses problemas é solucionar essas equações. Infelizmente para um grande número de EDP não se sabe a solução analítica ou tal solução é extremamente difícil de se encontrar, por isso, há uma vasta procura por soluções numéricas. O método numérico estudado aqui é o método de Kansa que tem como pilar as funções de base radial (RBF), uma aliada quando se trata de métodos livres de malha. As principais vantagens do método de Kansa são a facilidade de implementação e ser aplicável a problemas multidimensionais.

Palavras-chave. Método de Kansa, Funções Base Radial, Equação Diferencial Parcial, Solução Numérica

1 Introdução

Muitos problemas em ciência e tecnologia são modelados por equações que estabelecem uma relação entre funções desconhecidas u e as derivadas destas funções. Equações deste tipo são chamadas Equações Diferenciais. Estamos interessados nas funções com mais de uma variável $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$, neste caso a equação diferencial é chamada de Equação Diferencial Parcial (EDP), já que podem aparecer as diferentes derivadas parciais desta função. Equações Diferenciais Parciais podem ser classificadas como: Elípticas, Parabólicas e Hiperbólicas. As equações elípticas descrevem os fenômenos de difusão estacionários, equações parabólicas descrevem os fenômenos de difusão de evolução e as equações hiperbólicas descrevem os fenômenos de transporte.

Estas EDP descrevem diferentes tipos de fenômenos que requerem diferentes técnicas para sua solução, tanto analítica quanto numérica. Neste trabalho tem-se o interesse em resolução numérica de Equações Diferenciais Parciais. Este tema é extremamente importante, pois possibilita resolver o problema mesmo que de maneira aproximada. Tais soluções são suficientemente boas aproximações para a solução do problema, ou seja, uma boa solução física dos problemas reais.

A resolução numérica de equações diferenciais pode depender de modo bastante intenso das condições de contorno. Considera-se as três condições de contorno usuais para equações diferenciais, a saber:

Condição de Dirichlet: um valor específico da variável dependente é fornecido no contorno;

Condição Neumann: um valor específico para a derivada da variável dependente (ou gradiente) é fornecido no contorno;

Condição de Cauchy ou Robin: uma combinação linear dos dois primeiros tipos é fornecida no contorno.

¹gilcelia@ufs.br

Aqui tem-se interesse na solução numérica de uma PDE genérica não linear da forma

$$\mathcal{L}u = f$$

sobre algum domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Mais precisamente, usa-se o método de colocação não simétrico com função de base radial - RBF, a saber, a função Gaussiana. Uma apresentação geral das RBFs pode ser encontrada em [7]. O método de colocação não simétrico para resolver de PDEs foi desenvolvido por Kansa [5]. Abaixo um pequeno resumo do método.

Considere o problema de valor de contorno

$$Lu = f \quad \text{em } \Omega \subset \mathbb{R}^d \tag{1}$$

$$Bu = g, \quad \text{sobre } \partial\Omega \tag{2}$$

onde L representa um operador diferencial e B é o operador que representa as condições de contorno. Outras condições de contorno também podem ser adicionadas; por exemplo, é possível usar as condições Neumann em uma parte do contorno e as condições de Dirichlet na parte restante. A ideia é encontrar uma solução aproximada \hat{u} no espaço de funções $\mathcal{S} = \text{span}\{\phi(\|\cdot - x_j\|); x_j \in \mathcal{X}\}$, sendo ϕ uma RBF de suporte global e \mathcal{X} um conjunto de n nós ou pontos de colocação em Ω , isto é, \hat{u} é dado pela expansão

$$\hat{u} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi(\|x - x_j\|). \tag{3}$$

Os coeficientes α_j são encontrados resolvendo o sistema de equações lineares $A\alpha = b$,

$$A = \begin{bmatrix} L\Phi \\ B\Phi \end{bmatrix}, \quad \alpha = \begin{bmatrix} \alpha_I \\ \alpha_B \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}.$$

Se n_I denota o número de pontos de colocação no interior de Ω e n_B o número desses pontos sobre o bordo, então $L\Phi$ é uma matriz $n_I \times n$ com entradas

$$L\Phi_{ij} = L\phi(\|x - x_j\|) |_{x=x_i},$$

$B\Phi$ é uma matriz $n_B \times n$ com entradas

$$B\Phi_{ij} = B\phi(\|x - x_j\|) |_{x=x_i},$$

α_I e α_B são os coeficientes (em (3)) correspondendo aos pontos de colocação do interior e do bordo respectivamente. Os pedaços f e g de b são obtidos analogamente pelo cálculo de f e g nos pontos de colocação.

2 As Funções Bases Radiais

O método de aproximações usando Bases de Funções Radiais, conhecido na literatura pela sigla RBF (por *Radial Basis Functions*), é utilizado para aproximar funções multivariáveis, a partir de dados dispersos. Sua implementação é facilitada por ser um método livre de malhas, pois a propriedade geométrica utilizada na definição das bases é apenas a distância entre pontos. Sendo assim, resulta ser uma metodologia bastante atraente, principalmente para aplicações em dimensões mais elevadas.

Bases radiais são da forma $\phi(r) = \phi(\|x - x_j\|)$, $x \in \mathbb{R}^d$, em que $\phi(r)$ é uma função de variável real $r \geq 0$, $\|\cdot\|$ denota a norma Euclidiana e $x_j \in \mathbb{R}^d$ são pontos dados, chamados centros. Um estudo detalhado pode se encontrado em [7]. Alguns exemplos importantes para a função básica $\phi(r)$ são:

- ▷ Splines Poliharmônicas: $\phi(r) = r^{2k-d} \log(r)$ para d par ou $\phi(r) = r^{2k-d}$ para d ímpar
- ▷ Multiquádricas de Hard: $\phi(r) = (c^2 + r^2)^{\frac{1}{2}}$,
- ▷ Multiquádricas inversas: $\phi(r) = (c^2 + r^2)^{-\frac{1}{2}}$,
- ▷ Gaussianas: $\phi(r) = e^{-cr^2}$.

3 O método de Kansa

Entre os vários tipos de métodos de colocação utilizando RBF, o método de Kansa [5], proposto no início de 1990 é o mais conhecido. Um dos principais atrativos deste método é a sua simplicidade, já que nele não é necessário nem uma fronteira (limite) nem uma discretização de domínio. Esse recurso é especialmente útil para resolver problemas de alta dimensão em geometrias complexas. O método de Kansa é especialmente atraente para resolver equações diferenciais não homogêneas.

3.1 Desvantagem do método

A determinação do *parâmetro de forma* ideal de várias RBFs ainda é o maior desafio. Uma técnica que pode ser utilizada é a chamada validação cruzada leave-one-out (LOOCV) proposta em [8] para encontrar um parâmetro de forma sub-ótima.

Outro problema potencial dos métodos de colocação RBF é o mal condicionamento da matriz resultante. Por um lado, quando o número de pontos de interpolação é aumentado, a precisão melhora, enquanto, por outro lado, o número de condicionamento se torna maior.

Eventualmente, quando o número de pontos de interpolação se torna muito grande, o número da condição torna-se enorme e a solução é interrompida. Ao usar RBFs com suporte global, como na multiquádrica (MQ) [7], a matriz resultante do método de Kansa é densa e mal condicionada. Não só tem-se um problema estabilidade, mas também o custo computacional se torna muito alto.

O método Kansa, portanto, não é adequado para a solução de problemas de larga escala que requerem o uso de um grande número de pontos de interpolação. Nos últimos anos, o método de Kansa localizado foi desenvolvido para lidar com problemas de larga escala. Pegando um pequeno número de pontos vizinhos para amostrar a solução, a matriz resultante é esparsa, permitindo o uso de um grande número de pontos de colocação. No entanto, a precisão do método localizado de Kansa é bastante baixa, pois a influência do domínio local contém apenas um pequeno número de pontos de interpolação.

3.2 Contornando o problema

Uma solução para o problema pode ser usar o método de Kansa e uma técnica de decomposição matricial para resolver problemas usando um grande número de pontos de interpolação.

Para qualquer escolha de RBF, tais discretizações apropriadas levam a sistemas lineares em que as matrizes de coeficientes possuem blocos de estruturas circulantes e que são resolvidas eficientemente por algoritmos de decomposição (MDAs) [6]. Um MDA é um método direto que reduz a solução de um problema algébrico para a solução de um conjunto de sistemas independentes de menor dimensão [1].

Esta técnica de decomposição não só nos permite lidar com matrizes de grande escala, mas também torna possível implementar a técnica do LOOCV para encontrar um bom parâmetro de forma das RBFs utilizados. Deve-se notar que a técnica LOOCV não é adequada quando o tamanho da matriz é muito grande.

Uma outra alternativa que pode ser levada em consideração é usar a técnica multinível, onde a ideia é trabalhar com bases radiais em diferentes níveis de resolução. Começando com uma aproximação menos refinada, calcula-se o resíduo. Em seguida aproxima-se o resíduo em nível seguinte, sendo o resultado somado a aproximação anterior. O processo é repetido até se obter o resultado desejado ou se alcançar o máximo nível possível.

3.3 Aplicação do método de Kansa em EDPs

Apresenta-se agora o método de Kansa para solução de Equações Diferenciais Parciais. Dado que se conhece o valor da função para um determinado conjunto de pontos x_i e fazendo uso das funções base radial (RBF) a interpolação tem a forma

$$s(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(\|x - x_j\|)$$

Utilizando a abordagem proposta por Gregory em [3] sobre o método de Kansa, assumindo que dado um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ e uma equação diferencial parcial linear da forma

$$Lu(x) = f(x), \quad x \in \Omega \tag{4}$$

com condições de fronteira de Dirichlet

$$u(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega \tag{5}$$

Para o método de colocação de Kansa, escolhe-se representar a solução aproximada \hat{u} , por uma expansão da função base radial, análoga à interpolação de dados dispersos, ou seja,

$$\hat{u}(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(\|x - x_j\|) \tag{6}$$

Substituindo a função aproximada na equação diferencial, tem-se:

$$L \left[\sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(\|x - x_j\|) \right] = f(x) \tag{7}$$

Substituindo a função aproximada nas condições de contorno

$$\left[\sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(\|x - x_j\|) \right] = g(x) \tag{8}$$

Assim, o problema se resume a um sistema linear do tipo

$$A\alpha = f \tag{9}$$

A matriz de colocação é formada pela equação diferencial (4) e pelas condições de contorno de (5).

$$A = \begin{bmatrix} L\phi \\ B\phi \end{bmatrix} \tag{10}$$

A colocação do pontos pode ser realizada através do método de Kansa (assimétrica) ou de Hermite (simétrica)

Na colocação assimétrica ocorre a aplicação dos operadores diferenciais no interior e na fronteira adota-se LI e LB para um conjunto de N pontos de colocação no domínio e na fronteira, respectivamente $n_I = N - M$ e $n_B = M$ pontos [9], resumindo em

$$LIu_h(x_i) = \sum_{k=1}^N \alpha_k LI\phi(\|x_i - \epsilon_k\|) \tag{11}$$

$$LBu_h(x_i) = \sum_{k=1}^N \alpha_k LB\phi(\|x_i - \epsilon_k\|) \tag{12}$$

sendo que α_k são, determinadas pela resolução do sistema de N equações lineares.

A característica da variante simétrica (Hermite) é a aplicação dupla dos operadores diferenciais para cada par (ponto de colocação-centro da RBF) resultando em um sistema simétrico assumindo que os pontos de colocação coincidem com as coordenadas dos centros da RBF, isso leva a solução aproximada

$$u_h(x_i) = \sum_{k=1}^{N-M} \alpha_k LI_k^\epsilon \phi(\|x_i - \epsilon_k\|) + \sum_{k=N-M+1}^N \alpha_k LB_k^\epsilon \phi(\|x_i - \epsilon_k\|) \tag{13}$$

onde LI e LB , são os operadores diferenciais no interior e na fronteira, sendo x_i um ponto genérico e ϵ_k o centro da função base radial k .

As incógnitas α_k são determinadas pela imposição das seguintes condições quando aplicado os operadores diferenciais

$$LI_j^x u_h(x_i) = \sum_{k=1}^{N-M} \alpha_k LI_j^x LI_k^\epsilon \phi(\|x_i - \epsilon_k\|) + \sum_{k=N-M+1}^N \alpha_k LI_j^x LB_k^\epsilon \phi(\|x_i - \epsilon_k\|) \tag{14}$$

para os pontos de colocação interiores e

$$LB_j^x u_h(x_i) = \sum_{k=1}^{N-M} \alpha_k LB_j^x LI_k^\epsilon \phi(\|x_i - \epsilon_k\|) + \sum_{k=N-M+1}^N \alpha_k LB_j^x LB_k^\epsilon \phi(\|x_i - \epsilon_k\|) \tag{15}$$

para os pontos de colocação na fronteira, sendo que

- $LI_j^x g(\|x - \epsilon\|)$ é uma função de ϵ quando L atua em $g(\|x - \epsilon\|)$ como função de x sendo avaliada em $x = x_j$;
- $LB_j^x g(\|x - \epsilon\|)$ é uma função de x quando L atua em $g(\|x - \epsilon\|)$ como função de ϵ sendo avaliada em $\epsilon = \epsilon_k$;

Destas técnicas apresentadas, a técnica de Hermite é mais exigente dado que os operadores, são por via de dupla aplicação, mais complexos.

Para que se obtenha um sistema de equações simétrico, é necessário fazer coincidir as posições dos pontos de colocação com a posições das funções base radial.

4 Soluções de EDPs pelo método de Kansa

Contornando as dificuldades do método pode-se prosseguir com a aplicação do método. Tomando como exemplo a equação do calor desenvolvida em [2] tem-se as equação e condições iniciais abaixo:

$$u_t = Ku_{xx}; \tag{16}$$

- Condições de contorno: $\begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(L, t) = 0 \end{cases}$
- Condição inicial: $\begin{cases} u(x, 0) = 20 \end{cases}$

A solução analítica desta equação do calor desenvolvido pelo método de separação de variáveis é:

$$u(x, t) = \frac{80}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n-1} e^{-(\frac{2n-1}{50}\pi\mu)^2 t} \operatorname{sen}\left(\frac{(2n-1)\pi x}{50}\right) \quad (17)$$

Note que no exemplo acima $x \in \mathbb{R}$.

Agora usando o método de Kansa e a base radial Gaussiana $\phi(r) = e^{-cr^2}$ ($r = \|\tilde{x} - \tilde{x}_i\|$), deseja-se que a aproximação seja do tipo

$$\hat{u}(x, t) = s = \sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(r) \quad (18)$$

Sabe-se (veja [4]) que esta aproximação pode se resumir a resolver o sistema de equações do tipo

$$A\alpha = b \quad (19)$$

Aplicando o método de Kansa à equação diferencial parcial (16), ou seja, aplicando o operador diferencial à função radial $\phi(r)$

$$L[\phi(r)]\alpha = \left[\frac{\partial\phi(r)}{\partial t} - K \frac{\partial^2\phi(r)}{\partial x^2} \right] \alpha \quad (20)$$

desenvolvendo as derivadas e assumindo a substituição de $\frac{\partial\phi}{\partial t}$ por $\frac{\partial\phi}{\partial y}$

$$\frac{\partial\phi(r)}{\partial y} = \frac{\partial e^{-cr^2}}{\partial t} = (-c^2)e^{-cr^2} * 2(y - y_j) \quad (21)$$

fazendo a segunda derivada em relação a x

$$\frac{\partial^2\phi(r)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 e^{-cr^2}}{\partial x^2} = -2c^2 e^{-cr^2} + c^4 e^{-cr^2} * 2(x - x_j)^2 \quad (22)$$

e agora substituindo as derivadas na equação (20) tem-se

$$\left[((-c^2)e^{-cr^2} * 2(y - y_j)) + K(-2c^2 e^{-cr^2} + c^4 e^{-cr^2} * 2(x - x_j)^2) \right] \alpha \quad (23)$$

A partir da equação (23) pode-se fazer a representação na forma matricial

$$\begin{bmatrix} L\phi(r)_{1,1} & L\phi(r)_{1,2} & \cdots & L\phi(r)_{1,N} \\ L\phi(r)_{2,1} & L\phi(r)_{2,2} & \cdots & L\phi(r)_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L\phi(r)_{N,1} & L\phi(r)_{N,2} & \cdots & L\phi(r)_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b(\tilde{x}_1) \\ b(\tilde{x}_2) \\ \vdots \\ b(\tilde{x}_N) \end{bmatrix} \quad (24)$$

lembre-se que $\tilde{x}_i = (x_i, y_i)$.

Tendo em mente $L\phi(r)_{i,j} = L\phi(\|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j\|)$ e substituindo as condições de contorno da equação (16), a forma matricial fica

$$\begin{bmatrix} \phi(\|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_1\|) & \phi(\|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2\|) & \cdots & \phi(\|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_N\|) \\ L\phi(\|\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1\|) & L\phi(\|\tilde{x}_2 - \tilde{x}_2\|) & \cdots & L\phi(\|\tilde{x}_2 - \tilde{x}_N\|) \\ L\phi(\|\tilde{x}_3 - \tilde{x}_1\|) & L\phi(\|\tilde{x}_3 - \tilde{x}_2\|) & \cdots & L\phi(\|\tilde{x}_3 - \tilde{x}_N\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L\phi(\|\tilde{x}_{N-1} - \tilde{x}_1\|) & L\phi(\|\tilde{x}_{N-1} - \tilde{x}_2\|) & \cdots & L\phi(\|\tilde{x}_{N-1} - \tilde{x}_N\|) \\ \phi(\|\tilde{x}_N - \tilde{x}_1\|) & \phi(\|\tilde{x}_N - \tilde{x}_2\|) & \cdots & \phi(\|\tilde{x}_N - \tilde{x}_N\|) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{N-1} \\ \alpha_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b(\tilde{x}_1) \\ b(\tilde{x}_2) \\ \vdots \\ \vdots \\ b(\tilde{x}_{N-1}) \\ b(\tilde{x}_N) \end{bmatrix} \quad (25)$$

Também deve-se considerar que $b(\tilde{x}_1)$ é avaliado quando $x = 0$ e $b(\tilde{x}_n)$ é avaliado quando $x = L$.

Nota-se que ao final do processo o que deve ser resolvido é um sistema linear, como observado anteriormente e consequentemente vê-se a simplicidade do método [5].

5 Considerações Finais

O método de Kansa tem um bom embasamento teórico e em virtude disso se mostra bastante atraente para a resolução de equações diferenciais parciais. Essa expectativa deve se confirmar após a implementação dos algoritmos e execução dos testes práticos, em um trabalho futuro, onde deseja-se desenvolver o método e comparar os resultados obtidos com a solução analítica, para medir a qualidade numérica do método. Uma outra proposta é comparar os resultados obtido a partir do método de Kansa com outros métodos numéricos.

Agradecimentos

À UFSJ.

Referências

- [1] B. Bialecki, G. Fairweather e A. Karageorghis. “Matrix decomposition algorithms for elliptic boundary value problems: A survey”. Em: **Numerical Algorithms** 56 (fev. de 2011), pp. 253–295. DOI: 10.1007/s11075-010-9384-y.
- [2] W. E. Boyce e R. C. DiPrima. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno**. 11a. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2020. ISBN: 978-1-119-38164-8.
- [3] G. E. Fasshauer. “Meshfree approximation methods with MATLAB”. Em: **World Scientific** 6 (jan. de 2007). DOI: 10.1142/6437.
- [4] G. E. Fasshauer. “Solving partial differential equations by collocation with radial basis functions”. Em: **Proceedings of Chamonix**. Vol. 1997. Citeseer. 1996, pp. 1–8.
- [5] E. J. Kansa. “Multiquadrics — A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics—II solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations”. Em: **Computers & Mathematics with Applications** 19.8 (1990), pp. 147–161. ISSN: 0898-1221. DOI: [https://doi.org/10.1016/0898-1221\(90\)90271-K](https://doi.org/10.1016/0898-1221(90)90271-K).
- [6] X-Y. Liu, A. Karageorghis e C. S. Chen. “A Kansa-Radial Basis Function Method for Elliptic Boundary Value Problems in Annular Domains”. Em: **Journal of Scientific Computing** 65 (mar. de 2015). DOI: 10.1007/s10915-015-0009-4.
- [7] M. J. D. Powell. “The Theory of Radial Basis Function Approximation in 1990”. Em: **Advances in Numerical Analysis: Wavelets, Subdivision Algorithms, and Radial Basis Functions**. Oxford University Press, abr. de 1992. ISBN: 9780198534396. DOI: 10.1093/oso/9780198534396.003.0003.
- [8] S. Rippa. “An algorithm for selecting a good parameter c in radial basis function interpolation”. Em: **Advances in Computational Mathematics** 11 (nov. de 1999), pp. 193–210. DOI: 10.1023/A:1018975909870.
- [9] C. M. Tiago e V. M. A. Leitão. “Utilização de funções base radial em problemas unidimensionais de análise estrutural”. Em: **Departamento de Engenharia Civil e Arquitetura/ICIST, Instituto Superior Técnico** (2002).