UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo

Lista 1

Derivadas, Gradiente, Divergente e Rotacional

Aluno:

Carlos Henrique Chama Puga - 195416

Docentes:

Porf. Dr. Philippe Devloo

Dr. Giovane Avancini

Campinas

2024

Sumário

1 Introdução

A primeira lista da disciplina de Métodos Numéricos compreende uma revisão de cálculo, abordando temas como, regra da cadeia e os operadores gradiente, divergente e rotacional. A seguir, uma breve descrição do que foi discutido em aula.

A regra da cadeia é uma técnica utilizada para diferenciar funções compostas por outras funções. O operador gradiente, quando aplicado em uma função escalar, gera um vetor que aponta para a direção de maior crescimento da função. O operador divergente representa a densidade volumétrica de fluxo que sai de um campo vetorial de um volume infinitesimal em torno de um ponto. Por fim, o operador roatcional pode ser definido como a densidade de circulação de um campo vetorial em torno de um ponto, representado pelo vetor cuja direção e magnitude denotam o eixo e a magnitude da circulação máxima.

A lista foi dividida em cinco exercícios, cada um abordando um dos temas supracitados. A seguir, serão apresentados os exercícios e suas respectivas soluções. Realça-se que, durante toda a realização dos exercícios, usou-se as referências (1) e (2) para consulta.

2 Rotacional do Gradiente de $f(x, y, z)$

Seja $f(x, y, z)$ uma função escalar. O gradiente de f é dado pela Eq. (2.1)

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right). \tag{2.1}$$

A partir de ∇f, pode-se calcular o rotacional de ∇f, dado pela Eq. (2.2)

$$\nabla \times (\nabla f) = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \end{vmatrix}, \tag{2.2}$$

em que $\hat{i}$, $\hat{j}$ e $\hat{k}$ são os vetores unitários nas direções x, y e z, respectivamente.

Calculando o rotacional de ∇f, tem-se que

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}\right)\hat{i} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}\right)\hat{j} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}\right)\hat{k},$$

como as derivadas parciais são comutativas (Teorema de Clairaut), tem-se que

$$\nabla \times (\nabla f) = \vec{0}.$$

3 Divergente de Rotacional de $\vec{f}(f_x, f_y, f_z)$

Seja $\vec{f}(f_x, f_y, f_z)$ uma função vetorial. Seu rotacional é dado pela Eq. (3.1)

$$\nabla \times \vec{f} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ f_x & f_y & f_z \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_z}{\partial y} - \frac{\partial f_y}{\partial z} \\ \frac{\partial f_x}{\partial z} - \frac{\partial f_Z}{\partial x} \\ \frac{\partial f_y}{\partial x} - \frac{\partial f_x}{\partial y} \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

O divergente de $\nabla \times \vec{f}$ é dado pela Eq. (3.2)

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{f}) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f_z}{\partial y} - \frac{\partial f_y}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f_x}{\partial z} - \frac{\partial f_z}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial f_y}{\partial x} - \frac{\partial f_x}{\partial y}\right), \tag{3.2}$$

distribuindo as derivadas parciais obtém-se

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{f}) = \frac{\partial^2 f_z}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 f_y}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 f_x}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 f_z}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 f_y}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 f_x}{\partial z \partial y},$$

como pelo Teorema de Clairut, as derivadas cruzadas são iguais

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{f}) = 0. \tag{3.3}$$

4 Regra da Cadeia em Funções de 2 Variáveis

O exercício 3 foi feito utilizando o *software* `Mathematica` e o código utilizado pode ser encontrado no Apêndice A.

O gradiente de f em relação às coordenadas paramétricas ξ e η é dado pela regra da cadeia, expressa pela Eq. (4.1)

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \\ \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \tag{4.1}$$

logo, basta evaluar as derivadas parciais $\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$, $\frac{\partial x}{\partial \xi}$, $\frac{\partial x}{\partial \eta}$, $\frac{\partial y}{\partial \xi}$ e $\frac{\partial y}{\partial \eta}$ e depois substituir na Eq. (4.1).

Utilizando o `Mathematica` obtém-se que:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = e^x + y^3 e^{\sin\left(xy^3\right)} \cos\left(xy^3\right) \\ \frac{\partial f}{\partial y} = 3y^2 e^{\sin\left(xy^3\right)} \cos\left(xy^3\right) \\ \frac{\partial x}{\partial \xi} = -2\xi \sin\left(\xi^2\right) + 5 \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} = \cos\left(\eta + 1\right) \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} = 3\xi^2 \cos\left(\xi^3\right) \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} = -2\eta \sin\left(\eta^2\right) + 7. \end{cases}$$

Dados a complexidade e o tamanho das funções que compõem o gradiente, optou-se por apresentar um trecho do código utilizado em que o gradiente é calculado. Dado o tamanho das equações que compõemm o gradiente da função, optou-se por colocá-lo no Apêndice B.

Apresenta-se a comparação entre os resultados obtidos pela regra da cadeia programada e pelas funções nativas do `Mathematica`

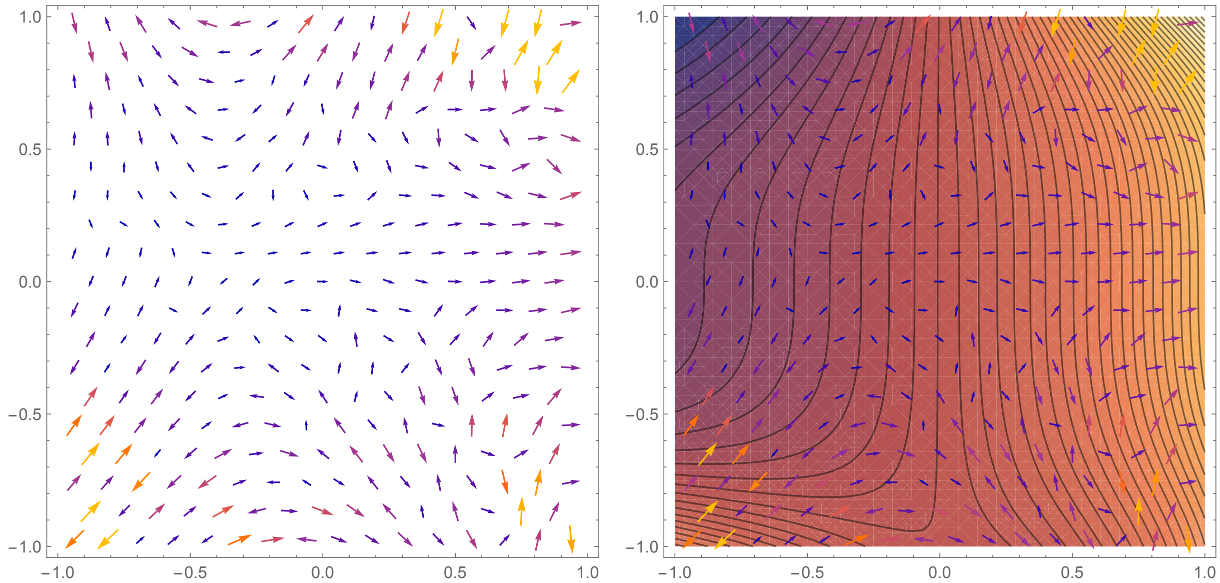
```
gradF = Grad[f, {ξ, η}];
% // TeXForm

gradChainF = {dfdξ, dfdη};

gradChainF - gradF // Simplify
{0, 0}
```

Figura 4.1: Comparação entre gradientes: $gradF$ - `Mathematica` e $gradChainF$ - Regra da Cadeia.

Como mostrado pela Fig. 4.1, os resultados alcançados pela regra da cadeia e pelo `Mathematica` são iguais, já que a diferença entre os gradientes é nula. Tal fato confirma que a implementação da regra da cadeia está correta. Por fim, plota-se os gráficos do gradiente de $f(x(\xi,\eta), y(\xi,\eta))$ na Fig. 4.2.



(a) Gradiente de f (b) Contorno de f

Figura 4.2: Resultados exercício 3.

5 Derivações em Funções Mapeamento

Para o exercício 4 também foi utilizado o *software* `Mathematica` para realizar os cálculos. A seguir a linha de pensamento base para o desenvolvimento do exercício.

Sabe-se que x e y são funções diferenciáveis em ξ e η. Com isso, os infinitesimais $d\xi$ e podem ser $d\eta$ transformado em dx e dy pela Eq. (5.1).

$$\begin{bmatrix} dx \\ \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ \\ d\eta \end{bmatrix}. \tag{5.1}$$

A matriz contendo as derivadas parciais da transformação de coordenadas é chamada de matriz jacobiana (Jac). Invertendo o sistema de equações (5.1) tem-se a Eq. (5.2), usada para encontrar as derivadas parciais de ξ e η em função de x e y.

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ \\ d\eta \end{bmatrix} = Jac^{-1} \begin{bmatrix} dx \\ \\ dy \end{bmatrix}, \tag{5.2}$$

sendo que o inverso da Jacobiana pode ser obtido conforme Eq. (5.3).

$$Jac^{-1} = \frac{1}{|Jac|} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \\ -\frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix}, \tag{5.3}$$

com $|Jac|$ sendo o determinante da matriz jacobiana dado pela Eq. (5.4).

$$|Jac| = \frac{\partial x}{\partial \xi}\frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta}\frac{\partial y}{\partial \xi}. \tag{5.4}$$

Analagamente à Eq. (5.1), pode-se escrever $d\xi$ e $d\eta$ como

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ \\ d\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ \\ dy \end{bmatrix}. \tag{5.5}$$

Comparando as eqs. (5.1), (5.2) e (5.3) obtém-se as definições das derivadas parciais, mostradas na Eq. (5.6)

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{|Jac|}\frac{\partial y}{\partial \eta} \\ \frac{d\eta}{dx} = -\frac{1}{|Jac|}\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{d\xi}{dy} = -\frac{1}{|Jac|}\frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{d\eta}{dy} = \frac{1}{|Jac|}\frac{\partial x}{\partial \xi} \end{cases}. \tag{5.6}$$

Finalmente, pode-se aplicar a regra da cadeia para encontrar o gradiente de

f com relação a ξ e η em função de x e y conforme Eq. (5.7).

$$\nabla \hat{f} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{f}}{\partial x} \\ \\ \frac{\partial \hat{f}}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{dx} + \frac{\partial \hat{f}}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{dx} \\ \\ \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{dy} + \frac{\partial \hat{f}}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{dy} \end{bmatrix} \tag{5.7}$$

A partir da Eq. (5.7) pode-se calcular o gradiente de $\hat{f}$ em função de ξ e η. A seguir, os resultados obtidos pelo código em `Mathematica`. Realça-se que o código na íntegra pode ser encontrado no Apêndice A.

Primeiramente, apresentam-se as derivadas parciais de $\hat{f}$ com relação a ξ e η

$$\begin{cases} \frac{d\hat{f}}{d\xi} = \frac{1}{4}(\eta-1)(-\eta-\xi-1) - \frac{1}{4}(\eta-1)(\xi-1) \\ \frac{d\hat{f}}{d\eta} = \frac{1}{4}(\xi-1)(-\eta-\xi-1) - \frac{1}{4}(\eta-1)(\xi-1) \end{cases},$$

as derivadas parciais de x e y com relação a ξ e η

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{1}{4}(-2\eta\xi + 2\xi + 4) \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} = \frac{1}{4}\left(1-\xi^2\right) \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} = \frac{1}{4}\left(1-\eta^2\right) \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} = \frac{1}{4}(4 - 2\eta(\xi-1)) \end{cases}.$$

e o determinante da matriz jacobiana

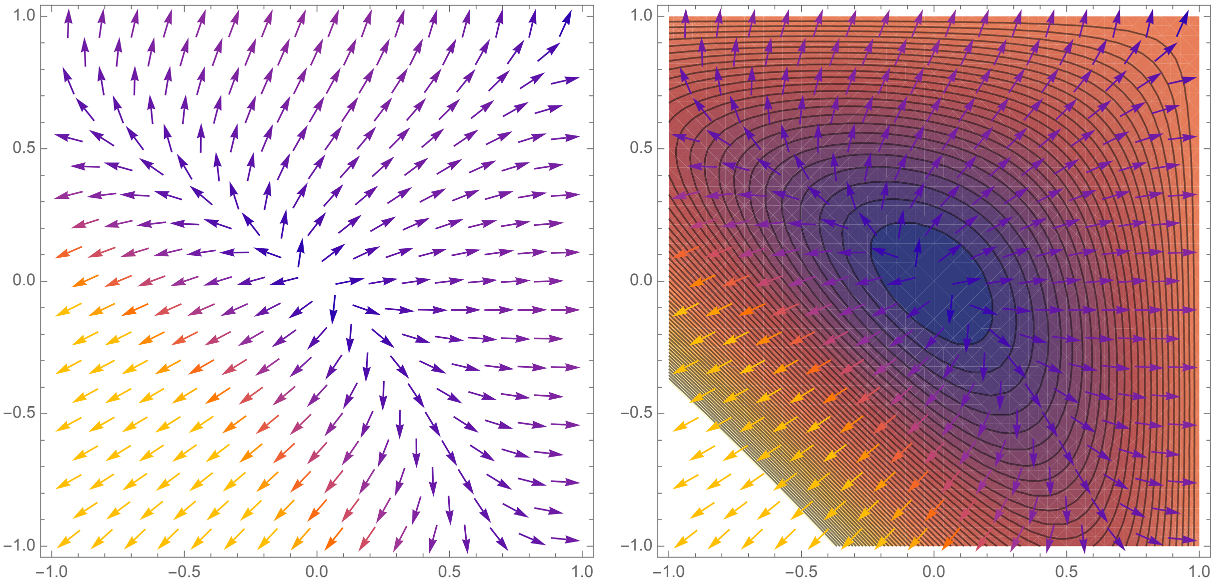
$$|Jac| = \frac{1}{16}\left(\eta^2\left(3\xi^2 - 4\xi + 1\right) - 4\eta\left(\xi^2 + 3\xi - 2\right) + \xi^2 + 8\xi + 15\right)$$

Com os resultados das derivadas parciais, calcula-se o grdiente de $\hat{f}$.

$$\frac{d\hat{f}}{dx} = \frac{2(\eta-1)(\eta(\xi-1)-2)(\eta+2\xi)}{\eta^2\left(3\xi^2-4\xi+1\right) - 4\eta\left(\xi^2+3\xi-2\right) + \xi^2 + 8\xi + 15} + \\ + \frac{1}{16}(\xi-1)\left(\xi^2-1\right)(2\eta+\xi)$$

$$\frac{d\hat{f}}{dy} = \frac{(\xi - 1)\left(\eta^2(3\xi - 1) - \eta(5\xi + 7) - 2\xi\right)}{\eta^2\left(3\xi^2 - 4\xi + 1\right) - 4\eta\left(\xi^2 + 3\xi - 2\right) + \xi^2 + 8\xi + 15}$$

Por fim, apresenta-se na Fig. 5.1 o gráfico do gradiente de $\hat{f}$ em função de x e y e seu contorno no domÃnio.



(a) Gradiente de f (b) Contorno de $\hat{f}$

Figura 5.1: Resultados exercício 4.

6 Sinais de Divergente e Rotacional em Campos Vetoriais

Os sinais do divergente e do roatcional de cada campo vetorial foi estimado visualmente, já que não foram passadas as equações dos campos vetoriais. Utilizando o Teorema de Gauss, pode-se tranformar a integral do divergente do campo vetorial no volume, na integral do campo vetorial no contorno, conforme Eq. (6.1)

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{u}\, d\Omega = \int_{\partial\Omega} \vec{u} \cdot \vec{\hat{n}}\, dS. \tag{6.1}$$

em que $\vec{u}$ é o campo vetorial, Ω é o domínio, $\partial\Omega$ é o contorno do domínio e $\vec{\hat{n}}$ é o vetor normal unitário que aponta para fora do contorno.

Com o Teorema de Gauss, pode-se avaliar o sinal do divergente no contorno para todos os casos propostos. O rotacional será analisado no domínio como um todo, a partir da aparência do campo vetorial. Os campos são individualmente analisados nas seções 6.1 - 6.4 e os resultados são sumarizados na Seção 6.5.

6.1 Campo Vetorial 1

O primeiro campo possui vetores paralelos ao eixo x, em $y = 0$ e ao eixo y, em $x = 0$. Em adição, nas fronteiras, $x = 3$ e $y = 3$, os vetores estão saindo do domínio, resultando em um divergente positivo.

O paralelismo observado anteriormente aponta que o campo provavelmente é composto por vetores da família $\vec{u} = (\alpha x, \beta y, 0)$, em que α e β são constantes reais. O rotacional de um campo dessa família é nulo, já que $\nabla \times \vec{u} = \nabla \times (\alpha x, \beta y, 0) = 0$. Ainda leva-se em consideração que o campo não apresenta rotação aparente.

6.2 Campo Vetorial 2

Como as equações dos vetores do segundo campo não são de fácil suposição, as discussões são feitas de maneira qualitativa.

O campo possui apenas vetores saindo de todos os contornos do domínio, o que resulta em um divergente positivo. O campo apresenta rotação no sentido anti-horário, indicando um rotacional positivo.

6.3 Campo Vetorial 3

O terceiro campo possui campos vetoriais entrando e saindo do domínio, o que, a princípio, resultaria em um divergente nulo. No entanto, nota-se que a magnitude dos vetores que entram é menor que a magnitude dos vetores que saem, resultando em um divergente positivo.

O campo apresenta rotações iguais, mas opostas ao longo de seu domínio, resultando em um rotacional nulo.

6.4 Campo Vetorial 4

O quarto e último campo apresenta vetores de mesma magnitude entrando e saindo pelos contornos, o que resulta em um divergente nulo. Também nota-se rotações iguais, mas opostas ao longo do domínio, resultando em um rotacional nulo.

6.5 Resultados

Os resultados são apresentados resumidamente na Tabela 1.

Tabela 1: Sinais do divergente e do rotacional para cada campo vetorial.

Campo Vetorial	**Divergente**	**Rotacional**
1	Positivo	Nulo
2	Positivo	Positivo
3	Positivo	Nulo
4	Nulo	Nulo

7 Conclusão

Para o primeiro módulo de métodos numéricos foi realizado uma breve revisão de derivadas, regra da cadeia e dos operadores gradiente, divergente e rotacional. Esses temas são de suma importância por comporem, na maioria das vezes, as equações diferenciais que se deseja resolver.

Com os exercícios 1 e 2, pôde-se provar e compreender propriedades fundamentais entre os operadores gradiente, divergente e rotacional. Os exercícios 3 e 4 foram responsáveis por abordarem a regra da cadeia em funções com mais de uma variável. Em especial, o exercício 4 se assemelha muito com funções mapeamento, que são amplamente utilizadas em integração numérica e problemas de elementos finitos, temas que ainda serão abordados no curso.

O exercício 5 treina uma visão mais prática dos conceitos de divergente e rotacional. Ao não passar as equações dos campos vetoriais, o exercício se torna mais desafiador, já que é esperada a capacidade de identificar o comportamento do campo vetorial apenas visualmente. Por fim, conclui-se que o módulo foi de grande valia para a compreensão dos conceitos fundamentais de cálculo vetorial e que serão de grande importância para o desenvolvimento do curso.

Referências

1 STEWART, J. Essential calculus: Early transcendentals. Brooks/Cole, a part of the Thomson Corporation, 2007.

2 BECKER, E.; CAREY, G.; ODEN, J. Finite elements: An introduction. Prentice-Hall, n. v. 1, 1981.

A Repositório *GitHub*

O código fonte deste relatório e dos programas utilizados para a resolução dos problemas propostos estão disponíveis no repositório *GitHub* do autor. O repositório pode ser acessado através do link CarlosPuga14/MetodosNumericos_-2024S1.

B Gradiente de $f(x(\xi,\eta), y(\xi,\eta))$

A seguir apresenta-se o gradiente de $f(x(\xi,\eta), y(\xi,\eta))$

$$\nabla f = \left(\frac{df}{d\xi}, \frac{df}{d\eta}\right), \text{ em que:}$$

$$
\frac{df}{d\xi} = 9e^{\sin\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)}\xi^2\cos(\xi^3)\cos\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)
$$
$$
\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\xi^2)+\sin(\xi^3)\right)^2+\left(5-2\xi\sin(\xi^2)\right)
$$
$$
\left(e^{5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)}+e^{\sin\left((5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta))\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3}\cos\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)\right.,
$$
$$
\left.\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)^3\right)\right) \tag{B.1}
$$

$$
\frac{df}{d\xi} = 3e^{\sin\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)}
$$
$$
\cos\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)
$$
$$
\left(7+2\eta\sin(\eta^2)\right)\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^2+cos(1+\eta)
$$
$$
\left(e^{5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)}+e^{\sin\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)}\cos\left(\left(5\xi+\cos(\xi^2)+\sin(1+\eta)\right)\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right)\right.
$$
$$
\left.\left(7\eta-\cos(\eta^2)+\sin(\xi^3)\right)^3\right) \tag{B.2}
$$