

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo

IC639: Métodos Numéricos para Engenharia Civil

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	3
2	Rotacional do Gradiente de $f(x,y,z)$	3
3	Divergente de Rotacional de $\vec{f}(f_x,f_y,f_z)$	4
4	Regra da Cadeia em Funções de 2 Variáveis	5
5	Derivações em Funções Mapeamento	7
6	Sinais de Divergente e Rotacional em Campos Vetoriais	10
	6.1 Campo Vetorial 1	11
	6.2 Campo Vetorial 2	11
	6.3 Campo Vetorial 3	11
	6.4 Campo Vetorial 4	12
	6.5 Resultados	12
7	Conclusão	12
R	eferências	13
A	Repositório GitHub	13
В	Gradiente de $f(x(\xi,\eta),y(\xi,\eta))$	13

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)

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

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}$$
(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 depois substituir na Eq. (4.1).

Utilizando o Mathematica obtém-se que:

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

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.

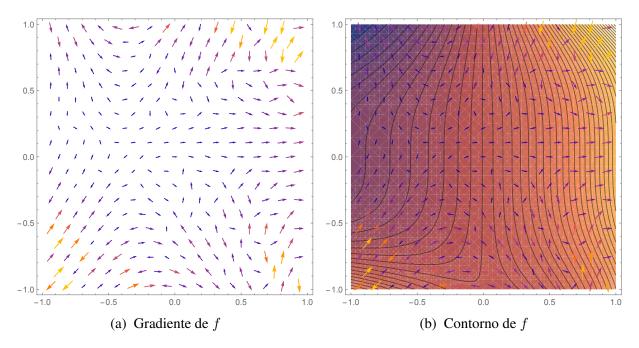


Figura 4.2: Resultados exercício 3.

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).

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

$$|Jac| = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi}.$$
 (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)

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

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

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

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} .

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

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

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.

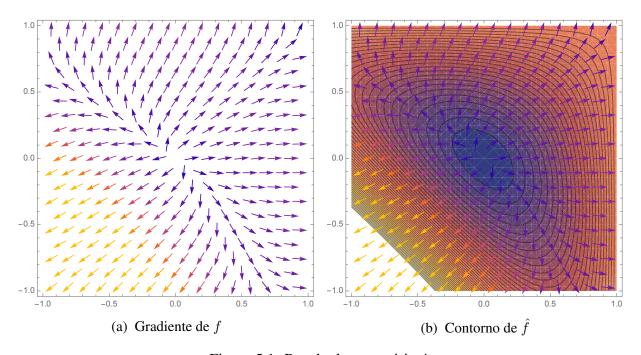


Figura 5.1: Resultados exercício 4.

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)

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

em que \vec{u} é o campo vetorial, Ω é o domínio, $\partial\Omega$ é o contorno do domínio e $\hat{\vec{n}}$ 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_-2024\$1.

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

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

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

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

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