Universidade Federal do Espírito Santo
6º Exercício Computacional de Computação Científica / Algoritmos Numéricos II - 2021 EARTE

Problema de Valor no Contorno - 2D

Introdução

A equação da advecção-difusão-reação, também conhecida como equação de transporte, é de fundamental importância nos problemas relacionados a aerodinâmica, meteorologia, oceanografia, hidrologia, engenharia química e de reservatórios. Considere a equação de transporte bidimensional estacionária:

$$-\kappa\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)+\beta_x(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}+\beta_y(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}+\gamma(x,y)u=f(x,y) \quad \text{em } \Omega \tag{1}$$

$$u = g \quad \text{em } \Gamma_g$$

$$-\kappa\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = c(u-h) \quad \text{em } \Gamma_h$$

sendo u a grandeza física a ser avaliada, κ o coeficiente de difusão, $\beta_x(x,y)$ e $\beta_y(x,y)$ as velocidades nas direções x e y respectivamente, $\gamma(x,y)$ o coeficiente de reação, $f(x,y)$, o termo de fonte ou sumidouro, g, h e c funções e constante reais conhecidas.

O domínio de todos os experimentos serão definidos por: $\Omega = \{(x,y)$ tal que $a \leq x \leq b$ e $c \leq y \leq d\}$. O domínio discretizado constitui o conjunto de pontos (x_i, y_j) tais que:

$$x_i = a+(i-1)h_x, \quad i=1,\ldots,n; \quad h_x=\frac{b-a}{n-1}$$

$$y_j = a+(j-1)h_y, \quad j=1,\ldots m; \quad h_y=\frac{d-c}{m-1}$$

n e m representam, respectivamente, o número de incógnitas na direção x e na direção y, totalizando $N = n*m$ incognitas.

Objetivos do Exercício Computacional

Este trabalho tem por objetivo observar o comportamento do método das diferenças finitas para aproximar problemas de valor no contorno bidimensionais em domínios retangulares, considerando armazenamento esparso das matrizes resultantes e uso de métodos iterativos não estacionários com precondicionamento adequado.

Descrição

Escreva uma função no octave para resolver o PVC, tendo como entrada de dados:

- Dados do domínio: a, b, c, d.
- Número de incognitas em cada direção: n, m.

- Número de vetores para o restart k para o método GMRES.
- Tolerência $rtol$.
- Número máximo de iterações (ou ciclos) $maxit$.

Os dados físicos do problema: κ, $\beta_x(x,y)$, $\beta_y(x,y)$, $\gamma(x,y)$, $f(x,y)$, $g(x,y)$, c e h podem ser organizados em uma função que caracteriza cada experimento.

A função `gmres` do Octave deve ser usada considerando que a matriz dos coeficientes esparsa (Dica: use o comando `A = sparse(N,N)` para gerar uma matriz esparsa de ordem N e preencha somente as posições não nulas da matriz). Utilize número de vetores para o restart e precondicionadores adequados para acelerar a convergência do método GMRES.

Validação 1 - Problema simples com solução trivial

Determine a distribuição de calor em uma chapa de metal, com faces termicamente isoladas e com espessura desprezível, sendo que a temperatura é conhecida em todas as faces da chapa. Neste caso a Eq. (1) é dada por:

$$-\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)=0 \quad \text{em} \quad \Omega \tag{2}$$

para (x,y) no domínio $\Omega=(a,b)\times(c,d)$. Considerando condições de contorno:

$$\begin{aligned} u(a,y) &= T_0 \\ u(x,c) &= T_0 \\ u(x,d) &= T_0 \\ u(b,y) &= T_0 \end{aligned}$$

espera-se que os valores no interior da placa sejam iguais a T_0 em todos os pontos de discretização. Para testar seu programa varie o número de incógnitas n e m, e as dimensões da placa a, b, c e d. Este exemplo pode te ajudar a testar quase todos os detalhes da implementação. Não é necessário apresentá-lo no relatório, mas se a sua solução para esse teste não estiver correta todo o resto estará errado.

Análise Assintótica do Erro Cometido

Faça uma análise assintótica do erro cometido para o problema de valor no contorno (1) com solução $u(x,y)$ em $\Omega=(0,1)\times(0,1)$ considerando:

$$\begin{aligned} k &= 1 \\ \beta_x(x,y) &= 1 \\ \beta_y(x,y) &= 20y \\ \gamma(x,y) &= 1 \\ f(x,y) \text{ tal que } u(x,y) &= 10xy(1-x)(1-y)e^{x^{4.5}} \text{ é a solução exata} \end{aligned} \tag{3}$$

e sabendo que $u(x,y)=0$ no contorno de Ω. Para este experimento considere a seguinte expressão para o erro cometido:

$$E=\max_{i=1,\ldots,n;j=1,\ldots,m}|u_{i,j}-u(x_i,y_j)| \tag{4}$$

Para encontrar a função $f(x, y)$ você deve derivar a função $u(x, y)$ e montar o lado esquerdo da expressão (1). Para auxiliar considere a possibilidade de usar um *software* para o cálculo simbólico de derivadas. Para facilitar considere um conjunto de testes tal que $m = n$, portanto $h_x = h_y = h$. Assim podemos obter $log(E) = log(C) + plog(h)$ da mesma forma que nos problemas unidimensionais. Verifique a ordem de convergência do PVC dado.

Aplicação Física - Resfriador bidimensional

Considere o problema de resfriar uma massa aquecida como mostra a Fig. 1. Exemplos podem incluir o resfriamento de chips de computadores ou amplificadores elétricos. O modelo matemático que descreve a transferência de calor nas direções x e y é dado pela Eq. (5). Detalhes sobre a definição do modelo matemático podem ser encontrados em (White, 2004)[1].

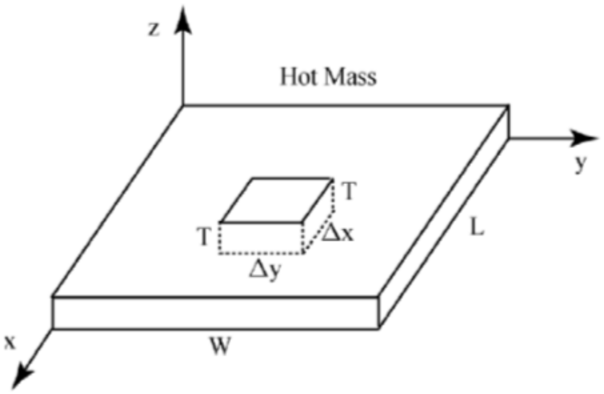

Figure 1: Geometria do Resfriador 2d.

$$-k\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + \frac{2c}{T}u = \frac{2c}{T}u_{ref} \quad \text{em} \quad \Omega = (0, L) \times (0, W) \tag{5}$$

onde k é a condutividade térmica (considerada aqui constante), c é o coeficiente de transferência de calor, T é a altura do resfriador, u_{ref} é a temperatura de referência. Encontre a temperatura no interior do resfriador considerando as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= 70 \\ u(x, W) &= 70 \\ u(L, y) &= 70 \\ u(0, y) &= 200 \end{aligned}$$

e os seguintes parâmetros físicos adimensionalisados: $T = 2$, $L = W = 1$, $k = 1$, $u_{ref} = 70$. Considere o coeficiente de transferência de calor $c = 1$.

- Faça o gráfico de $u(x, y)$ para uma escolha adequada de n e m.

[1] R. E. White, COMPUTATIONAL MATHEMATICS - Models, Methods, and Analysis with MATLAB and MPI with Methods and Analysis, CHAPMAN & HALL/CRC, 2004.

- Considere as seguintes condições de contorno alternativas para o experimento:
  - Condições de valor e fluxo prescritos:

$$\begin{aligned} -k\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(x,0) &= 0 \\ -k\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(x,W) &= 0 \\ u(L,y) &= 70 \\ u(0,y) &= 200 \end{aligned}$$

  - Condições de valor prescrito e condição mista:

$$\begin{aligned} u(x,0) &= 70 \\ u(x,W) &= 70 \\ u(L,y) &= 70 \\ -k\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(0,y) &= c(u(L,y) - u_{ref}) \end{aligned}$$

  O que se pode dizer das soluções encontradas em cada caso?

- Apresente uma tabela comparando o tempo de processamento para as diferentes configurações de condição de contorno. Varie m e n obtendo diferentes ordens de grandeza do sistema resultante.

- Escolha a melhor configuração do Método GMRES em termos de tempo do processamento e compare com a solução pelo método direto para dois tamanhos de discretização (um *pequeno* e outro *grande*).

- Enriqueça sua análise com gráficos e tabelas que auxiliem a entender o comportamento das diferentes situações.

Aplicação Física 2 - Escoamento em Águas Subterrâneas

O escoamento de um fluido em um meio poroso sob certas condições pode ser modelado por equações diferenciais similares aquelas que regem a transferência de calor em estado estacionário (Equação de Poisson). O escoamento em meio poroso é regido por uma lei empírica denominada *Lei de Darcy* que é similar a *Lei de Transferência de calor de Furrier* levando os escoamentos a possuírem equações equivalentes.

A compressibilidade de um fluido indica a quantidade de massa que passa por um volume infinitesimal em uma unidade de tempo. Matematicamente a compressibilidade é regida pelo divergente da velocidade:

$$\nabla.\mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \tag{6}$$

onde $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$ é a velocidade do escoamento em um domínio bidimensional. Se o fluido for incompressível $\nabla.\mathbf{v} = 0$. Por outro lado, a *Lei de Darcy* estabelece que:

$$\mathbf{v} = -k\nabla p \tag{7}$$

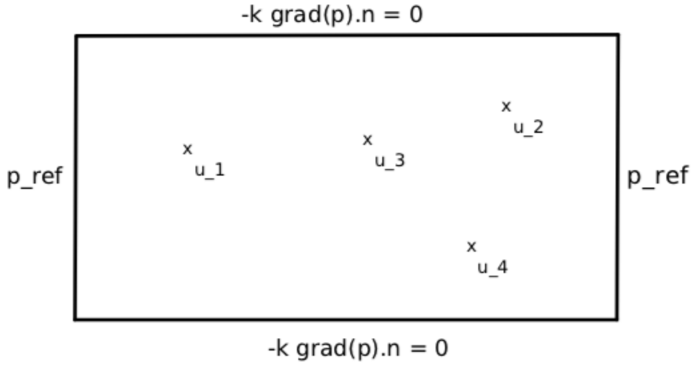

Figure 2: Esquema do Escoamento em Águas Subterrâneas - Exemplo com 4 poços.

onde p e k são, respectivamente, pressão e condutividade hidráulicas. Em geral k depende de p, porém se o meio poroso for saturado, a condutividade pode ser considerada constante. Acoplando a *Lei de Darcy* com a Eq. (6) tem-se:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = -k\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}\right) = f \tag{8}$$

Considere um meio poroso superficial saturado retangular no plano xy com pelo menos um poço. Nas faces superior e inferior do retângulo assuma que não exista fluxo na direção do contorno. Porém, considere um amplo abastecimento das fronteiras esquerda e direita de tal forma que a pressão seja conhecida. Detalhes sobre a definição do modelo matemático podem ser encontrados em (White, 2004).

O modelo de um escoamento em águas subterrâneas considerando as condições descritas acima pode ser modelado por:

$$-k\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}\right) = \begin{array}{l} 0 \text{ quando } (x,y) \text{ não for poço} \\ R_w \text{ quando } (x,y) \text{ for poço} \end{array} \quad \text{em } \Omega. \tag{9}$$

A Fig. 2 apresenta um esquema com 4 poços. As condições de contorno podem ser sumarizadas em:

$$\begin{aligned} -k\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = &\quad 0 \qquad \text{para } y = c \text{ e } y = d \\ p = &\quad p_{ref} \qquad \text{para } x = a \text{ e } x = b \end{aligned} \tag{10}$$

Encontre a pressão $p(x,y)$ e a velocidade $\mathbf{v}(x,y) = (v_x(x,y), v_y(x,y))$ (Eq. (7)), considerando ∇p aproximado por diferenças finitas de primeira ordem, sendo: $\Omega = (0,5000) \times (0,1000)$, dois poços localidados em $u_1 = (x_1, y_1)_w = (1500, 600)$ e $u_2 = (x_2, y_2)_w = (3200, 250)$, sendo $R_w = -250$, $k = 1$ e $P_{ref} = 100$. Escolha os números de incógnitas (n e m) tal que os poços u_1 e u_2 sejam pontos incógnitas.

Experimentos Específicos

- Apresente o gráfico da pressão e o campo de velcidade (Dica: faça uma pesquisa como traçar gráficos de vetores no Octave).
- Defina um número de incógnitas em cada direção ($n \times m$) de forma que você obtenha dois tamanhos de problemas: *pequeno* e *grande*.

- No relatório apresente uma tabela com os dois tamanhos de problemas: *pequeno* e *grande*, contendo o tempo de processamento para executar a função `pvc2d.m` com a solução do sistema linear pelo método direto e pelo método GMRES.

1 *Relatório

Escreva um relatório com suas conclusões sobre os objetivos listados acima. Postar no Classroom os fontes `.m` e uma cópia em pdf do relatório.