Ciências e Tecnologias Espaciais Sensores e Atuadores Espaciais

Métodos Numéricos e Aplicações em Clusters I — Básico

Lista de Exercícios 2

Professor: Angelo Passaro Aluno: Lucas Kriesel Sperotto 1 – Desenvolver as equações de diferenças para a equação de Poisson assumindo $\Delta x \neq \Delta y$.

Vamos assumir a equação de Poisson para duas dimensões:

$$\nabla^{2}u = f(x,y) \Rightarrow \frac{\partial^{2}u}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}u}{\partial y^{2}} = f(x,y)$$

$$\begin{array}{c} \mathbf{D} \\ \mathbf{D} \\ \mathbf{D} \end{array}$$

Figura 1 - Região da "grade" de diferenças finitas. Pontos em preto representam a intersecção das linhas da grade (pontos onde a solução é aproximada). Pontos em vermelho representam pontos auxiliares para a aproximação das derivadas.

Tomando o domínio da figura 1 podemos escrever as derivadas usando os pontos auxiliares:

Tomando o dominio da figura 1 podemos escrever as derivadas usando os pontos adximares.			
Em X	Em Y		
$\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right _{A} \cong \frac{\mathbf{u}_{1} - \mathbf{u}_{P}}{\mathbf{h}_{x}}$	$\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}} \right _{B} \cong \frac{\mathbf{u}_{2} - \mathbf{u}_{P}}{\mathbf{h}_{y}}$		
$\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right _{C} \cong \frac{\mathbf{u}_{P} - \mathbf{u}_{3}}{\mathbf{h}_{x}}$	$\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}} \right _{D} \cong \frac{\mathbf{u}_{P} - \mathbf{u}_{4}}{\mathbf{h}_{y}}$		
$\left. \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}^2} \right _P \cong \frac{\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \Big _A - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \Big _C}{\mathbf{h}_x} = \frac{\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_3 - 2\mathbf{u}_P}{\mathbf{h}_x^2}$	$\left \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}^2} \right _P \cong \frac{\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}} \right _B - \left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}} \right _D}{\mathbf{h}_y} = \frac{\mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_4 - 2\mathbf{u}_P}{\mathbf{h}_y^2}$		

Substituindo as derivadas na equação de Poisson:

$$\frac{\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_3 - 2\mathbf{u}_P}{\mathbf{h}_x^2} + \frac{\mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_4 - 2\mathbf{u}_P}{\mathbf{h}_y^2} = f(x, y)$$

Resolvendo:

$$\frac{u_1 h_y^2 + u_3 h_y^2 - 2u_p h_y^2 + u_2 h_x^2 + u_4 h_x^2 - 2u_p h_x^2}{h_x^2 h_y^2} = f(x, y)$$

$$u_1h_y^2 + u_3h_y^2 - 2u_Ph_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 - 2u_Ph_x^2 = f(x,y)h_x^2h_y^2$$

$$u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 = 2u_Ph_y^2 + 2u_Ph_x^2 + f(x,y)h_x^2h_y^2$$

$$u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 - f(x,y)h_x^2h_y^2 = 2u_P(h_y^2 + h_x^2)$$

Obtemos a equação de diferenças para a aproximação da solução no ponto P:

$$\frac{u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 - f(x,y)h_x^2h_y^2}{2(h_y^2 + h_x^2)} = u_P$$

Considerando o lado direito da equação de Poisson igual a zero:

$$\frac{u_1h_y^2 + u_3h_y^2 - 2u_Ph_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 - 2u_Ph_x^2}{h_x^2h_y^2} = 0$$

Resolvendo:

$$u_1h_y^2 + u_3h_y^2 - 2u_ph_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 - 2u_ph_x^2 = 0$$

$$u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 = 2u_ph_y^2 + 2u_ph_x^2$$

$$u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2 = 2u_p(h_y^2 + h_x^2)$$

Obtemos a equação de diferenças para a aproximação da solução no ponto P:

$$\frac{u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2}{2(h_y^2 + h_x^2)} = u_P$$

2 – Obter uma expressão para a condição de contorno de Neumann não coincidente com o reticulado.

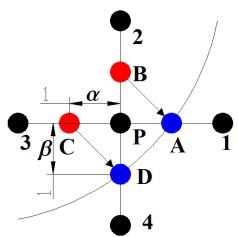


Figura 2 - Região da "grade" de diferenças finitas com detalhe da fronteira com condição de Neumann não coincidente com o reticulado. Pontos em preto representam a intersecção das linhas da grade (pontos onde a solução é aproximada). Pontos em azul representa a intersecção da fronteira com a linha do reticulado. Pontos em vermelho representam pontos auxiliares para a aproximação das derivadas.

[2] define

$$\alpha = \frac{x_P - x_C}{h}, \beta = \frac{x_P - x_D}{h}, \gamma = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$$

e

$$\left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} \right|_{D} = \frac{\mathbf{u}_{D} - \mathbf{u}_{C}}{\gamma h}$$

Com uma interpolação linear encontra:

$$\mathbf{u}_C = \alpha \mathbf{u}_3 + (1 - \alpha)\mathbf{u}_P$$

Dessa forma pode escrever:

$$\mathbf{u}_D = \alpha \mathbf{u}_3 + (1 - \alpha)\mathbf{u}_P + \gamma h \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{D}$$

E finalmente usar essa definição para escrever a equação de diferenças para a segunda derivada:

$$\left. \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}^2} \right|_{\mathbf{p}} = \frac{2}{\mathbf{h}^2} \left(\frac{\mathbf{u}_D}{\beta(\beta+1)} - \frac{\mathbf{u}_P}{\beta} + \frac{\mathbf{u}_2}{\beta+1} \right)$$

3 – Resolver o problema de difusão de calor estacionário (CC definidas pelo aluno), utilizando aproximações de primeira ordem e estudar o uso do parâmetro de sobre relaxação.

A equação de difusão de calor em coordenadas cartesianas para duas dimensões em regime estacionário e sem fontes associadas ao problema:

$$\nabla^2 u = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Podemos escrever a equação de diferenças finitas como a obtida no exercício 1:
$$\frac{u_1h_y^2 + u_3h_y^2 + u_2h_x^2 + u_4h_x^2}{2(h_y^2 + h_x^2)} = u_P$$

Em seguida definir um resíduo para a variável de estado no ponto P:

$$R_P = u_{P,k} - u_{P,k-1}$$

 $R_P=u_{P,k}-u_{P,k-1}$ Onde k representa a iteração do método de Jacobi. Definindo um valor inicial (k=0) para os nós podemos reescrever a equação de resíduo como:

$$R_P = \left(\frac{(u_1 + u_3)h_y^2 + (u_2 + u_4)h_x^2}{2(h_y^2 + h_x^2)}\right) - u_P$$

Obtendo:

$$u_{P,k} = R_P + u_{P,k-1}$$

 $u_{P,k}=R_P+u_{P,k-1}$ Para uma convergência mais rápida utilizamos o parâmetro de sobre relaxação que entra como um fator multiplicativo no resíduo.

$$u_{P,k} = \boldsymbol{\alpha} R_P + u_{P,k-1}$$

Onde α é o parâmetro de sobre relaxação variando no intervalo $(1 < \alpha < 2)$. Para geometrias quadradas, o valor ideal de α pode ser obtido pela expressão:

$$\alpha_{ideal} = \frac{2}{1 + \sin\left(\frac{\pi}{p}\right)}$$

Tendo definidas as equações partimos para a modelagem da geometria. Tomando uma placa quadrada ou retangular com condições de contorno de Dirichlet nas bordas (C1, C2, C3 e C4) e gerando uma "grade regular" de pontos sobre essa placa obtemos algo semelhante ao mostrado na figura 3.

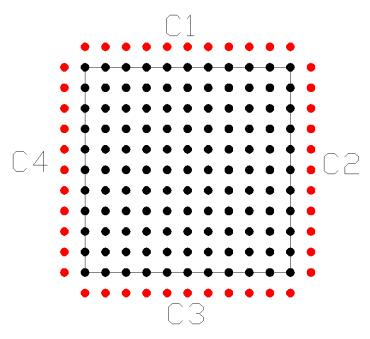


Figura 3 - Detalhe da placa com as condições de contorno.

Na figura 3 os pontos em preto representam os pontos onde a solução será calculada, os pontos em vermelho representam as condições de contorno. Codificado a "grade" de pontos como uma matriz, onde os elementos das bordas da matriz representam as condições de contorno. O laço para percorrer a matriz no cálculo das aproximações é definido apenas nos índices da matriz que representam os pontos em preto.

Para a modelagem computacional do método na linguagem de programação JAVA tomei como base o artigo da questão 4, gerando o diagrama de classes da figura 4. A classe "Malha" é um tipo de dado abstrato que guarda informações referentes à malha gerada. No método "setParametrosDaMalha()" devemos definir o numero de pontos na placa e a precisão da solução.

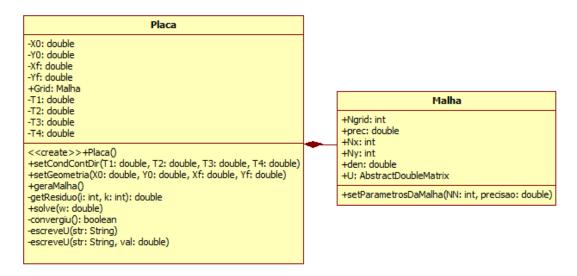


Figura 4 - Diagrama de classes.

A classe "Placa" possui os seguintes métodos:

- *Placa()*: Construtor padrão para o objeto Placa.
- *setCondContDir()*: Método para entrar com os valores das condições de contorno nas bordas da placa.
- *setGeometria()*: Método para entrar com as coordenadas iniciais e finais da placa.
- *geraMalha()*: Método que cria a matriz de pontos (U) com os dados da malha e impõe as condições de contorno.
- getResiduo(): Método que calcula o resíduo em um dado ponto i, j fornecido.
- *solve()*: Aproxima as soluções pelo método de Jacobi. Deve-se passar o valor do parâmetro de sobre relaxação.
- escreve U(): Método que salva em arquivo o sistema resolvido.

Terminada a codificação partimos para os testes e análise do parâmetro de sobre relaxação. Para a primeira análise usamos uma placa com condição de contorno C1 = C2 = C3 = C4 = 10, valor inicial $u_0 = 0$ para todos os pontos, precisão igual a 1E - 10 e dois casos variando o numero de pontos: um com 121 pontos na placa e outro com 10201 pontos. Resultados expostos nos gráficos 1 e 2.

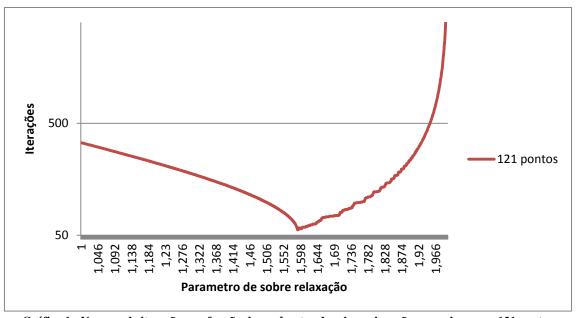


Gráfico 1 - Numero de iterações em função do parâmetro de sobre relaxação para placa com 121 pontos

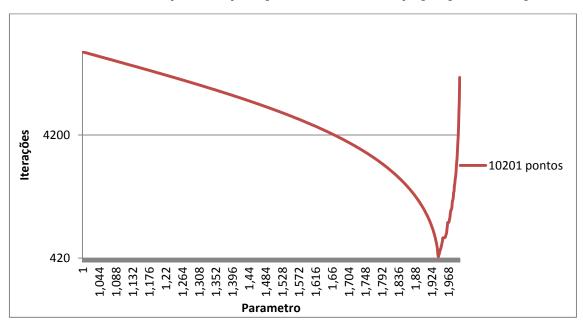


Gráfico 2 - Numero de iterações em função do parâmetro de sobre relaxação para placa com 10201 pontos

Para ambos os casos o comportamento do numero de iterações é semelhante, ela possui um comportamento logarítmico antes de atingir o ponto mínimo, e um comportamento exponencial após o ponto mínimo.

Tabela 1 - Parâmetro de sobre relaxação calculado e parâmetro encontrado nos testes.

Numero de Pontos	Ideal	Encontrado
121	1.5603	1.59 a 1.592
10201	1.939	1.941

Uma leve diferença no parâmetro de sobre relaxação foi encontrada se comparado com o valor ideal (Tabela 1). Nota-se que a diferença é maior para o caso com um menor numero de pontos.

Para valores de condição de contorno de Dirichlet diferentes entre si, o comportamento das iterações em função do parâmetro de sobre relaxação é similar ao mostrado anteriormente.

No artigo o autor usa como valor inicial das variáveis a média das condições de contorno $(u_0 = (C1 + C2 + C3 + C4)/4$. Testes revelaram que não houve alteração alguma no numero de iterações (para o caso com 10201 pontos e parâmetro de sobre relaxação igual a 1.941). O que se deve ao fato de mesmo de não podermos definir um chute inicial que esteja próximo à solução em um dado ponto, neste caso a solução pode estar próxima de alguns pontos, mas longe mais longe de outros pontos em relação chute inicial igual a zero.

4 – Apresentar um resumo crítico do artigo "Modelagem computacional em problemas de eletrostática: efeito de campos de borda em capacitores cilíndricos finitos".

O artigo em questão mostra passo a passo como obter uma solução numérica para um problema simples, mas diferente do que é geralmente encontrado na literatura. Este problema é um capacitor cilíndrico finito e com tampas. Seu argumento para dar mérito ao trabalho reside no fato de que a solução analítica encontrada na literatura para o cálculo da capacitância trata apenas de capacitores infinitos não considerando o efeito do acumulo de carga nas bordas dos capacitores finitos.

Com a solução numérica por diferenças finitas da equação de Laplace em coordenadas cilíndricas é possível tratar o domínio finito do capacitor, impor as condições de contorno (tanto de Dirichlet como Neumann) e tratar as tampas do capacitor de forma simples.

Tendo mostrada a modelagem geométrica de forma simplificada (otimizando o uso de memória e numero de cálculos usando apenas uma parte do domínio) o autor demonstra a modelagem matemática do problema, como obter as equações de diferenças e tratar as condições de contorno e como encontrar as soluções pelo método de iterativo de relaxação sucessiva. Em sequencia o autor desenvolve a modelagem computacional fornecendo uma ferramenta (software, código fonte) para a resolução numérica deste problema.

No final o autor faz uma interpretação física dos resultados e demonstra a clara diferença entre a solução analítica (aproximada para este problema) e a solução numérica. Onde fica claro que com a solução numérica consegue-se representar mais fielmente o comportamento físico da capacitância.

Concordo com a conclusão do autor que dado o grande avanço computacional e disponibilidade de softwares livres para visualização de resultados, o tempo gasto em uma solução numérica é bastante compensador se comparada ao esforço na busca de uma alguma soluções analítica mesmo que aproximada.

Pude perceber que o autor cometeu um erro no fluxograma e nos comentários do código fonte fornecido. Ele confundiu a imposição das condições de contorno de Dirichlet e Neumann, trocando os nomes das mesmas. Creio que posso criticar a modelagem computacional, o autor poderia fazer uso de classes, e definir melhor os conceitos de malha e cilindro. A "struct" MALHA apenas serve de repositório para algumas informações da malha, em minha opinião ela não representa uma malha propriamente dita, sendo mais bem representada se a matriz U fosse seu dado membro.

Referências:

- [1] CHAPRA, Steven C; CANALE, Raymond P. **Métodos Numéricos para Engenharia**. Trad. Helena Castro. São Paulo: McGraw-Hill, 2008.
- [2] MATTHEIJ, R.M.M. RIENSTRA, S.W. THIJE BOONKKAMP, J.H.M. ten. **Partial Differential equations Modeling, Analysis, Computation**, SIAM Monographs on Mathematical Modeling and Computation, 2005.
- [3] XAVIER Jr., Ademir J. Modelagem Computacional em Problemas de Eletrostática: Efeito de Campos de Borda em Capacitores Cilíndricos Finitos. **Revista Brasileira de Ensino de Física.** V. 29, n. 2, p. 241-249, 2007.