**Ciências e Tecnologias Espaciais**

**Sensores e Atuadores Espaciais**

**Métodos Numéricos e Aplicações em Clusters I – Básico**

**Lista de Exercícios 5**

Professor: Angelo Passaro

Aluno: Lucas Kriesel Sperotto

31 de Maio de 2012

**1** – Resolver equação de Laplace para o problema de placa quadrada com condições de contorno = 100, = 50, = 50, = 75, através do método “**Fixed Random Walk**”, baseando-se nos capítulos 2 e 4 da referência [1].

**Modelagem Matemática:**

Como exposto em [1], a aplicação do método “Fixed Random Walk” (FRW) envolve três passos:

1. Obter as probabilidades transitórias resultantes da equação de diferenças finitas equivalente a equação diferencial que descreve o problema.
2. Usar números aleatórios juntamente com as probabilidades transitórias para direcionar vários caminhos aleatórios na região de solução e registrar o potencial final de cada percurso aleatório.
3. Encontrar a média estatística dos potenciais registrados no passo 2.

Para o passo 1, a modelagem matemática da equação e Laplace deve-se desenvolver a equação de forma semelhante ao método de diferenças finitas. Entretanto a grande diferença reside nos termos probabilísticos inerentes aos métodos de Monte Carlo. Tomando a equação de Laplace para material homogêneo:

Substituindo as derivadas de diferenças finitas considerando e iguais:

Substituindo pelas contribuições probabilísticas de cada contribuição:

Onde . No método FRW a partícula de avaliação de move-se nas quatro direções com probabilidade ¼. Para definir o caminho da partícula no domínio [1] faz uso de um conjunto de valores aleatórios e define quatro subconjuntos com tamanhos idênticos onde cada subconjunto de valores é responsável por deslocar a partícula em uma direção.

No momento que a partícula alcança uma aresta com condição de contorno, a probabilidade é computada juntamente com o valor da condição de contorno para contribuir no valor de . Para avaliar corretamente o valor de , várias partículas devem ser lançadas do ponto e suas contribuições adicionadas em .

Pode-se reescrever a equação anterior como:

onde é o numero total partículas e é o valor da condição de contorno alcançada pela partícula.

Uma outra forma de desenvolver o raciocínio é pensar na seguinte equação:

onde é a probabilidade da partícula atingir a condição de contorno e é o valor da condição de contorno alcançada pela partícula.

Esta equação pode ser reescrita na forma de um somatório:

onde é o numero total de partículas, é o numero de faces com condição de contorno e é o numero de passos para alcançar a face . Note que é a probabilidade de a partícula alcançar a borda com condição de contorno. Esta equação é idêntica a equação (4).

**Modelagem computacional:**

A modelagem em JAVA requer o uso de classes, entretanto o diagrama da Figura 1 mostra claramente uma implementação puramente procedural já que nenhuma classe apresentada se configura como um objeto. Este tipo de implementação se justifica pela rápida codificação do método e por nenhuma exigência do exercício sobre uma modelagem orientada a objetos.



Figura 1 - Diagrama de classes.

A classe “MonteCarlo” é a classe principal, nela é gerada a malha de pontos onde a solução será calculada. Os pontos gerados são uniformemente espaçados, entretanto o método não exige essa distribuição já que o calculo do da aproximação em um ponto independe do calculo dos demais pontos.

Na classe “MonteCarloAppl” está o método que encontra o potencial para cada pondo da malha. Uma classe para escrita dos arquivos de resultados foi desenvolvida, entretanto pela semelhança com as classes já mostradas em exercícios anteriores a mesma foi suprimida do diagrama.

A classe “Compare” é uma classe utilitária usada para comparação de variáveis do tipo *double*. E por fim, a classe “RandomTest” possui métodos para testar os números aleatórios gerados pela biblioteca JAVA.

**Resultados:**

Para a geração de números aleatórios a biblioteca JAVA fornece a classe “Random” que gera números aleatórios usando como semente a hora da maquina. Primeiramente foi levantado medidas da uniformidade dos números gerados, para mensurar a uniformidade [1] comenta que uma das formas é executar o teste de “momento”. Na tabela 1 encontra-se o erro percentual do momento para e diferentes valores de calculado pela expressão (7).

Como esperado pela definição do Momento, o erro diminui à medida que a quantidade de números aleatórios usados aumenta.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **Tabela 1 - Erro obtido para a medida de Uniformidade (Momento)**   |  |  | | --- | --- | | Números Gerados | Erro (%) | | 125 | 5,114 | | 625 | 6,293 | | 3.125 | 1,145 | | 15.625 | 0,096 | |

A distribuição das condições de contorno na placa quadrada pode ser visto na figura 2. Executado simulação para diferentes valores de e cada simulação foi executada 10 vezes para se tomar a média das execuções como resultado final. Este passo foi usado, pois foram percebidas diferenças significativas dos valores de cada ponto entre simulações consecutivas. Na figura 3 tem-se a distribuição da temperatura para .

Note que ao comparar a solução por FRW (Figura 3) com a solução por diferenças finitas da figura 4 qualitativamente há uma boa representação da distribuição de calor na placa.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Figura 2 - Detalhes do Teste. | **Figura 3 - Resultado Obtido com "FRW".** | |
| Figura 4 - Resultado Obtido com Diferenças Finitas. | | Tabela 2 - Comparação entre o erro em relação à referência e o erro estimado.   |  |  |  | | --- | --- | --- | | Numero de passos | Erro máximo (%) | Erro máximo estimado (%) | | 125 | 1,55 | 2,052 | | 625 | 1,05 | 0,951 | | 3.125 | 0,53 | 0,364 | | 15.625 | 0,48 | 0,207 | | |

De forma a avaliar quantitativamente os resultados dois testes foram executados. Primeiro foi calculada a estimativa de erro pela expressão (8) com intervalo de confiança de 95%, e em segunda instância calculado o erro ponto a ponto em relação à solução por diferenças finitas.

onde é a dispersão e é o valor na tabela de distribuição de Student para a confiança usada.

Na tabela 2 encontra-se o resultado para os diferentes valores de N usados, o erro máximo percentual máximo obtido em relação à solução por Diferenças Finitas e o máximo valor da estimativa de erro.

Note que com poucas partículas, o erro estimado é praticamente o dobro do erro obtido, já para um numero maior de partículas o erro estimado é praticamente a metade do erro obtido. Pode-se atribuir essa diferença ao intervalo de confiança usado, acredito que este valor deva ser diferente para cada numero de partículas usadas, já que para poucas partículas deve-se ter uma confiança menor e para muitas partículas uma confiança maior.

**Conclusões:**

O método de “Fixed Random Walk” é um método bastante interessante do ponto de vista da curiosidade. Apesar do erro em relação à solução por diferenças finitas ser pequeno, o método FRW é bastante lento se comparado a outras abordagens numéricas já estudadas na disciplina. Outro fator que considero negativo é a instabilidade da solução e ainda ter de executar a simulação mais de uma vez para retirar a média dos valores multiplica o tempo de execução que já não é pequeno dependendo do numero de partículas usadas.

Claro que deve haver aplicações que necessitem deste tipo de método e que não possuam solução numérica simples. Para finalizar o trabalho gostaria de citar uma frase de Albert Einstein “Deus não joga dados...” por qual motivo os físicos o fazem?

**2** – Resolver equação de Laplace para o problema de placa quadrada com condições de contorno = 100, = 50, = 50, = 75, através do método “**Floating Random Walk**”, baseando-se nos capítulos 2 e 5 da referência [1].

No método “Fixed Random Walk” o tamanho dos passos é fixo, já no método “Floating Random Walk” o tamanho dos passos varia, e mais, o ângulo que o passo toma em relação ao ponto inicial também varia entre um passo e outro.

O Método “Floating Random Walk” parte do principio de que a variável de estado em um dado ponto é obtida, para duas dimensões, pela integral fechada da variável de estado no limite de um círculo com raio definido a partir do ponto de interesse.

Para a aplicação deste método toma-se a coordenada do ponto de interesse e calcula-se a coordenada da partícula no final de um passo pelas seguintes expressões:

onde é o raio definido como a menor distância a uma dada condição de contorno e é um ângulo aleatório.

Esse cálculo é repetido até que a partícula atinja a condição de contorno, varias partículas são lançadas e o valor da variável de interesse no ponto é calculado pela expressão (4) mostrada no exercício anterior.

A modelagem computacional é a mesma do apresentado no exercício anterior, apenas um método foi incluído na classe “MonteCarloAppl”.

**Resultados:**

Os passos para testar o método “Floating Random Walk” são exatamente os mesmos do exercício anterior. Foram escolhidos diferentes números de partículas, e para cada numero diferente de partícula, foi tomado como resultado final a média entre dez execuções consecutivas.

Tendo em mão a média de cada execução para cada ponto, pode-se calcular a variância da variável de interesse e se estimar o erro. O resultado mostrado na Tabela 3 para cada valor diferente de partícula é do máximo valor do erro entre todos os pontos, e na terceira coluna o valor do máximo erro estimado com intervalo de confiança de 95%. Uma checagem pontual mostrou que o maior erro estimado não coincide com o ponto com maior erro calculado com relação à solução por diferenças finitas.

Tabela 3 - Comparação entre o erro em relação à referência e o erro estimado.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Numero de passos | Erro máximo (%) | Erro máximo estimado (%) |
| 125 | 1,89 | 0,676 |
| 625 | 0,84 | 0,287 |
| 3.125 | 0,50 | 0,140 |
| 15.625 | 0,16 | 0,060 |

|  |  |
| --- | --- |
| Figura 5 - Resultado Obtido com 125 partículas | Figura 6 - Resultado Obtido com 625 partículas |
| Figura 7 - Resultado Obtido com 3.125 partículas | Figura 8 - Resultado Obtido com 15.625 partículas |

A distribuição da temperatura calculada pelo método “Floating Random Walk” para 125, 625, 3.125, 15.625 partículas encontram-se respectivamente nas figuras 5 a 8. Note que só é possível perceber alguma diferença no resultado da figura 5. Isso se dá pelo pequeno erro obtido.

**Conclusões:**

O método “Floating Random Walk” retornou um erro menor que o “Fixed Random Walk”, entretanto pode-se notar que o erro estimado está muito longe do erro obtido. Acredito que um atrativo deste método é que o usuário só precisa escolher o numero de partículas a ser usado, já no “Fixed Random Walk” o usuário deve definir o tamanho do passo.

Tabela 4 - Avaliação do tempo computacional para os dois métodos usados nesta lista de exercícios.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Numero de passos | Tempo de Execução - Fixed Random Walk (ms) | Tempo de Execução - Floating Random Walk (ms) |
| 125 | 112.510 | 551 |
| 625 | 611.858 | 2.558 |
| 3.125 | 3.876.362 | 17.316 |
| 15.625 | NA | 87.406 |

Um comparativo do tempo computacional entre os dois métodos foi efetuado (Tabela 4), porém no método “Fixed Random Walk” o tamanho do passo influencia e muito nesta medida, mas não tem grande impacto na solução.

Apesar do tempo de execução e do erro obtido para o método “Floating Random Walk” ser muito inferior se comparado ao “Fixed Random Walk”, não se pode afirmar qual realmente é o melhor. Como ambos os métodos são probabilísticos, mesmo tomando uma média de dez execuções as soluções e os erros estimados variam muito entre duas rodadas.

Gostei de realizar esta segunda etapa do exercício, pois pude perceber que os métodos de Monte Carlo permitem uma infinidade de brincadeiras e experiências na cozinha numérica, dependendo apenas do gosto do cliente.

**Referências:**

[1] SADIKU, M. N. O. Monte Carlo Methods for Electromagnetics. United States of America: CRC Press. 2009.

[2] http://pt.wikipedia.org/wiki/Distribui%C3%A7%C3%A3o\_t\_de\_Student, acessado em 29 de Maio de 2012.