Universidade Federal do Espírito Santo
DI
$1^{\underline{o}}$ Trabalho de Algoritmos Numéricos II - 2016/1

Método das Diferenças Finitas Aplicado a Problemas Bidimensionais

Data de entrega: 22 de abril de 2016

1 Introdução

O estudo da equação de transporte, também denominada equação da advecção-difusão-reação, continua sendo um ativo campo de pesquisa, uma vez que essa equação é de fundamental importância nos problemas relacionados a aerodinâmica, meteorologia, oceanografia, hidrologia, engenharia química e de reservatórios. A equação de transporte tem características bastante peculiares que fazem com que sua resolução por meios numéricos seja dificultada em situações onde o problema é fortemente convectivo. Por isso, diversos métodos têm sido desenvolvidos e aplicados, com a intenção de superar as dificuldades numéricas impostas por esta equação.

A equação de transporte bidimensional pode ser definida por:

$$-k\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)+\beta_x(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}+\beta_y(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}+\gamma(x,y)u=f(x,y) \quad \text{em } \Omega \tag{1}$$
$$u=g \quad \text{em } \Gamma_g$$
$$k\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}=c(h-u) \quad \text{em } \Gamma_h$$

sendo u a grandeza física a ser avaliada, k 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 $a\le x\le b$ e $c\le y\le d\}$. 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.

2 Objetivos do trabalho

O objetivo desse trabalho é verificar como a forma de armazenamento das estruturas resultantes pela discretização da equação de transporte por diferenças finitas pode impactar no tempo de processamento.

Dessa forma, deve ser implementado em C um código de diferenças finitas para problemas bidimensionais modelados pela equação de transporte, considerando:

- Aproximação de 2^a ordem para as derivadas na equação.
- Aproximação de 1^a ordem para as derivadas nas condições de contorno.
- Método SOR (*Sucessive Over Relaxation*) para solução do sistema linear resultante implementando duas versões:
  - matriz pentadiagonal resultante armazenada em uma estrutura com apenas cinco colunas não nulas ou cinco vetores para cada coluna não nula;
  - código totalmente livre de matriz, isto é, as operações linha a linha do método SOR serão executadas a partir de comandos de atribuição.

A seguir descrevemos um conjunto de experimentos para validação e análise.

3 Experimentos Sugeridos

Para cada problema exemplo que será apresentado a seguir, deverão ser realizados testes computacionais. Cada teste deverá ser realizado utilizando seu código implementado em C, considerando um conjunto de discretizações seguindo a Tabela 1.

n	**m**	**Ordem do Sistema Linear**
n	$=$ m	2500
n	$\neq$ m	2500
n	$=$ m	10000
n	$\neq$ m	10000
n	$\neq$ m	500000
n	$=$ m	1000000
n	$\neq$ m	10000000

Table 1: Valores Sugeridos de n e m referentes aos testes computacionais

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 equação (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.

Validação 2 - Problema com solução conhecida

Determine a solução aproximada para $u(x, y)$ em $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ considerando na Eq. (1):

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

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

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

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. Este exemplo tem por a elaboração de um conjunto de testes para testar a acuidade da solução aproximada.

Aplicação Física 1 - 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 equação (5). Detalhes sobre a definição do modelo matemático podem ser encontrados em (White,2003) [1], disponível na página do curso.

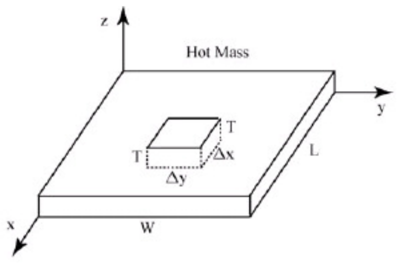

Figure 1: Geometria do Resfriador 2d.

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

[1] R. E. White, *Computational Modeling with Methods and Analysis*, Department of Mathematics, North Carolina State University, 2003

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:

$$\begin{aligned} u(x,0) &= 70 \\ u(x,W) &= 70 \\ u(0,y) &= 200 \\ k\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(L,y) &= c(u_{ref} - u(L,y)) \end{aligned} \tag{6}$$

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 $u(x, y)$. Considere uma segunda versão desse experimento substituindo a condição de contorno mista pela condição de valor prescrito $u(L, y) = 70$. O que se pode dizer das soluções encontradas em cada caso?

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:

$$\nabla.\mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \tag{7}$$

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:

$$\mathbf{v} = -k\nabla p \tag{8}$$

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. (7) tem-se:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = -k\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}\right) = f \tag{9}$$

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,2003).

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

$$-k\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 p}{\partial y^2}\right) = \begin{array}{l} 0 \text{ quando } (x,y) \text{ não for poço} \\ R_w \text{ quando } (x,y) \text{ for poço} \end{array} \quad \text{em } \Omega. \tag{10}$$

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

$$\begin{aligned} -k\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = &\quad 0 \qquad \text{para } y=c \text{ e } y=d \\ p = &\quad p_{ref} \qquad \text{para } x=a \text{ e } x=b \end{aligned} \tag{11}$$

Encontre a pressão $p(x,y)$ e a velocidade $\mathbf{v}(x,y) = (v_x(x,y), v_y(x,y))$ (Eq. (8)),

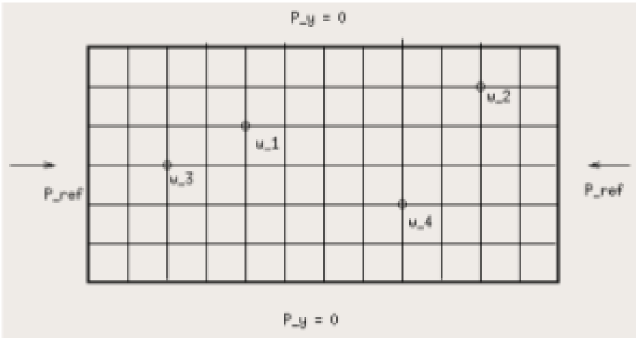

Figure 2: Esquema do Escoamento em Águas Subterrâneas - Exemplo com 4 poços.

considerando ∇p aproximado por diferenças finitas de primeira ordem, sendo: $\Omega = (0,5000)\times(0,1000)$, dois poços localizados 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 e que o número total de incógnitas seja comparável aquelas descritas na Tab. 1. Faça a gráfico da pressão e da velocidade.

4 Estrutura do Relatório

O relatório deve ser escrito observando as normas do padrão ABNT. A divisão do relatório deve ser de acordo com as seguintes seções:

- **Introdução:** apresentar a estrutura do trabalho e os objetivos.
- **Método das Diferenças Finitas:** um pequeno resumo descrevendo todas as técnicas e ordens de aproximação consideradas.
- **Implementação:** onde serão apresentados a estrutura e partes significativas do código comentado.
- **Experimentos Numéricos:** onde serão apresentados os exemplos testes utilizados, tanto as entradas para os experimentos bem como tabelas e gráficos das respectivas saídas geradas pelas soluções.
- **Conclusão:** onde serão discutidos os resultados obtidos.

5 Considerações gerais sobre o trabalho

- O sistema linear oriundo da discretização da equação (1) deve ser resolvido pelo método SOR para um parâmetro de relaxação ω e critério de convergência adequados (por exemplo: $\omega = 1.6$ e $tol = 10^{(-1)}$, considerando as duas formas de armazenamento conforme descrito na seção 2.

- Para discutir a acuidade da solução deve ser usado a validação 2, variando n e m conforme descrito na Tabela 1 e calculando o erro dado em (4).

- Para cada aplicação física discuta a qualidade da solução considerando diferentes malhas, conforme Tabela 1. Faça o gráfico da solução aproximada para algumas configurações. Não é necessário apresentar todos os gráficos da soluções obtidas conforme a Tabela 1.

- Em relação a medição dos tempos, apresente tabelas e gráficos que representem cada linha da Tabela 1. (Tamanho da instância × Tempo de execução).

- Os códigos fonte e o Relatório devem ser enviados por e-mail para luciac@inf.ufes.br até o dia 22/04/2015. O assunto do e-mail deve ser AN2161:TRAB1:<nome> para os alunos de Algoritmos Numéricos II e CC151:TRAB1:<nome> para os alunos de Computação Científica contendo, em anexo, um arquivo do tipo TRAB1<nome>.zip. Neste caso <nome> deve conter o nome e último sobrenome (por exemplo, AN2161:TRAB1:Lucia Catabriga)

- Caso o arquivo seja enviado múltiplas vezes, apenas a última versão enviada será considerada.