

IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO DOUGLAS-RACHFORD

DIOGO ROCHA

ABSTRACT. Neste trabalho implementou-se o algoritmo Douglas-Rachford para a equação de calor usando diferenças finitas em três dimensões.

1. TEORIA

1.1. Modelos discretos para a difusão não-estacionária. Introduzo neste relatório o conceito de difusão não estacionária , um processo físico, a fim de modelar a convergência para um estado estacionário , um ponto fixo. Consideremos a equação parabólica unidimensional:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Theta}{\partial t} = k \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2}; 0 \leq x \leq 1 \\ \Theta(0, t) = \Theta(1, t) = 0 \\ \Theta(x, 0) = \sin \pi x = \Theta_0(x) \end{array} \right\}$$

Para três dimensões

$$\Theta(x, y, z, 0) = \sin \pi x \sin \pi y \sin \pi z = \Theta_0(x, y, z)$$

A variável dependente $\Theta(x, y, z, t)$ representa a temperatura e a constante k pode ser interpretado como coeficiente de difusão.

O método de discretização usado neste trabalho precisa apenas da condição inicial $\Theta(x, y, z, 0)$, no entanto , para a equação de calor usando separação de variáveis sabemos que $\Theta(x, y, z, t) = e^{-3k\pi^2 t} \sin \pi x \sin \pi y \sin \pi z$. Esta solução decai para um estado de equilíbrio e na ausência de uma fonte de calor , teremos valor nulo.

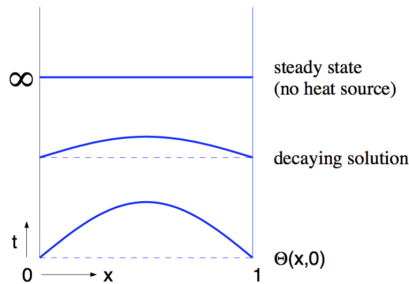


FIGURE 1.1. A solução inicial decai exponencialmente para zero (em estado de equilíbrio).

1.2. Operador de difusão para uma dimensão. $A = \frac{k}{\Delta x^2} (E - 2I + E^{-1})$

Para diferentes tipos de condições de fronteira. Temos:

1.2.1. *Condições de fronteira de Dirichlet:* Consideramos $\Theta_0(0)=a$; $\Theta_N = b$. Assim as equações para os pontos fronteira são: $\frac{d\Theta_1}{dt} = \frac{k}{\Delta x^2}(a - 2\Theta_1 + \Theta_2)$ e

$$\frac{d\Theta_{N-1}}{dt} = \frac{k}{\Delta x^2}(b - 2\Theta_{N-1} + \Theta_{N-2})$$

O sistema linear é:

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{k}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \Theta_{N-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{ka}{\Delta x^2} \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{kb}{\Delta x^2} \end{bmatrix}.$$

1.2.2. *Condições de fronteira de Neumann:* Vamos assumir que $\frac{\partial \Theta}{\partial x} |_{0} = a$ e $\Theta_N = b$. Para a condição de fronteira de Neumann temos:

$$\frac{1}{\Delta x}(\Theta_1 - \Theta_0) = a \Rightarrow \Theta_0 = \Theta_1 - a\Delta x, \text{ e}$$

$$\frac{d\Theta_1}{dt} = \frac{k}{\Delta x^2}(\Theta_0 - 2\Theta_1 + \Theta_2) = \frac{k}{\Delta x^2}(-\Theta_1 + \Theta_2 - a\Delta x).$$

O sistema linear correspondente é :

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{k}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \Theta_{N-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{ka}{\Delta x} \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{kb}{\Delta x^2} \end{bmatrix}.$$

As condições fronteira de Cauchy satisfazem as de Dirichlet e Neumann.

1.3. **Domínio multi-dimensional espaço-tempo.** Num domínio a duas dimensões demonstrarei como se obtém os modelos discretos de difusão. Consideremos a equação de difusão não estável num domínio Ω , ver figura1 , com uma fonte de calor $q(x, t)$, ou seja,

$$(1.1) \quad \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \nabla^2 \Theta + q$$

$$(1.2) \quad \Theta(x, y, t) = 0 \text{ em } \partial \Omega$$

$$(1.3) \quad \Theta(x, y, 0) = \Theta_0(x, y) \text{ em } \Omega$$

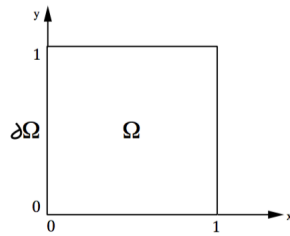


FIGURE 1.2. Domínio de duas dimensões.

1.4. ADI para problemas estacionários. Os métodos ADI (Alternating-Direction-Implicit Method) podem ser usados para resolver sistemas de uma equação elíptica estacionária, como

$$(1.4) \quad \Theta_{xx} + \Theta_{yy} = q$$

Podemos assumir que $[A_x + A_y]\Theta = q$, onde A_x, A_y são operadores discretos nas direções x e y, respectivamente. Como consequência apresentarei a discretização em 3 dimensões através do método Douglas- Rachford.

1.5. Algoritmo Douglas-Rachford para três dimensões. O algoritmo Douglas-Rachford é um método implícito para três dimensões (espaciais) e representa-se desta forma, onde A_x, A_y, A_z é o operador Laplaciano na direção correspondente e q uma fonte de calor:

$$\begin{aligned} (A_x + \rho_n I)\Theta^* &= -(A_x + 2A_y + 2A_z - \rho_n I)\Theta^n + 2q \\ (A_y + \rho_n I)\Theta^{**} &= -(A_x + A_y + 2A_z - \rho_n I)\Theta^n - A_x\Theta^* + 2q \\ (A_z + \rho_n I)\Theta^{n+1} &= -(A_x + A_y + A_z - \rho_n I)\Theta^n - A_x\Theta^* - A_y\Theta^{**} + 2q \end{aligned}$$

De salientar que o valor ρ_n é um valor que para cada iteração foi aumentado no algoritmo.

2. IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO

Alguns conceitos são importantes para perceber a implementação do algoritmo como a própria discretização do tempo, moléculas computacionais. Foi usado ferramentas do numpy já implementadas que ajudaram à rapidez da construção do algoritmo, como o roll (usado nas moléculas computacionais), o linalg que fez o cálculo de ψ^{n+1} num sistema $L\psi^{n+1} = b$, onde L é um operador (por exemplo, $(A_x + \rho_n I)$) e b uma função conhecida.

3. RESULTADOS

3.1. Com condições de fronteira Dirichlet. Para estas condições aplicou-se $\Theta_0(0)=0.2$; $\Theta_N = 0.2$, e q (fonte de calor) como um esfera situado no centro do domínio tridimensional.

Obteve-se o resultado esperado. Para o valor da função de onda no centro do domínio tridimensional observou-se um decaimento exponencial como previsto pela solução analítica. Para 100 iterações, consegue-se observar um valor de convergência.

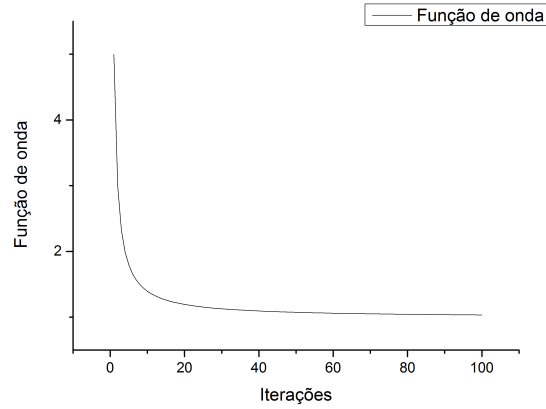


FIGURE 3.1. Decaimento exponencial da função de onda no centro do domínio

Como teste ao valor teórico evidenciamos o mesmo comportamento. No entanto, o fator tempo não é usado no algoritmo Douglas-Rachford, apenas é utilizado um fator ρ_n que não é o tempo, por isso não foi calculado o erro diretamente.

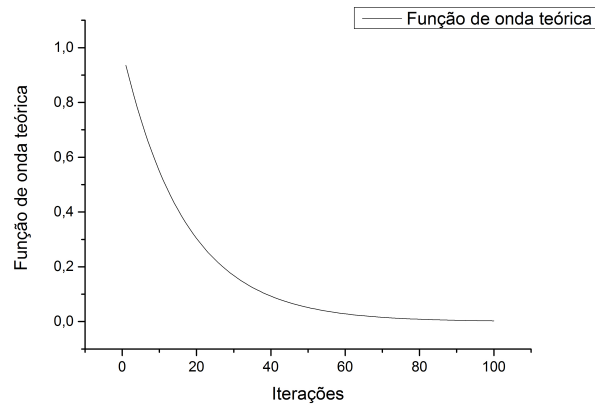
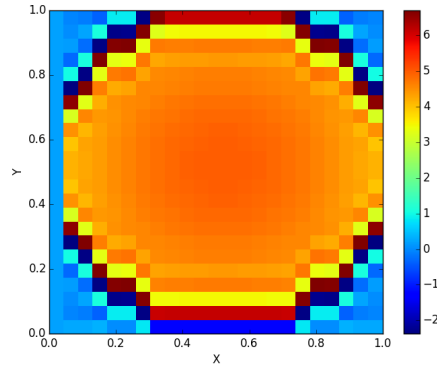
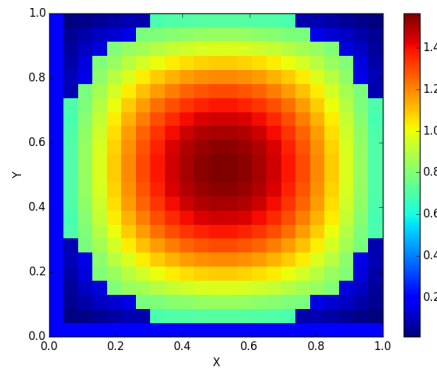
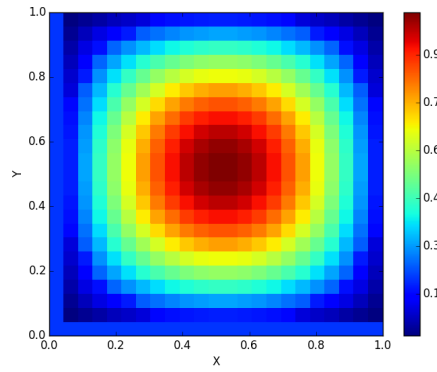


FIGURE 3.2. Valor teórico da função de onda com decaimento exponencial para $q = 0$

Além de ser possível observar a discretização no tempo, observou-se um pico de maior temperatura no centro do domínio com simetria esférica.

FIGURE 3.3. Representação da função de onda em $t=0$ em $(x,y,z=0.5)$ FIGURE 3.4. Função de onda correspondente a 8 iterações em $(x,y,z=0.5)$ FIGURE 3.5. Função de onda correspondente a 100 iterações no plano $(x,y,z=0.5)$

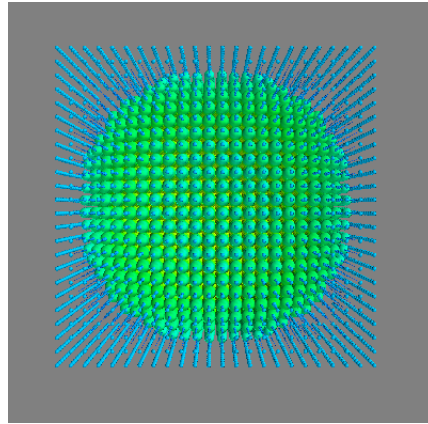


FIGURE 3.6. Representação Mayavi onde se verifica que a distribuição tem simetria esférica.

O programa implementado e a representação Mayavi do python permite verificar o carácter esférico da função de onda e verificar interactivamente os pontos calculados.

3.2. Diferenças com condições de fronteira Dirichlet /Neumann /Cauchy.

Com a alteração das condições de fronteira pode-se verificar algumas alterações como se pode ver na figura seguinte. A valor da constante a necessário aos cálculos foi de $a = 0.2$.

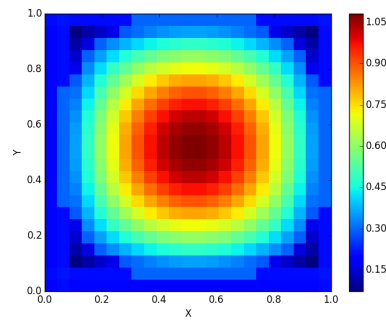


FIGURE 3.7. Função de onda com 46 iterações para as condições de fronteira de Cauchy

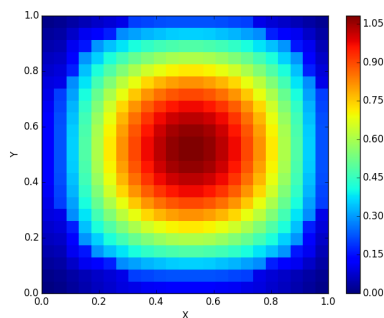


FIGURE 3.8. Função de onda para 46 iterações referente às condições de fronteira de Neumann.

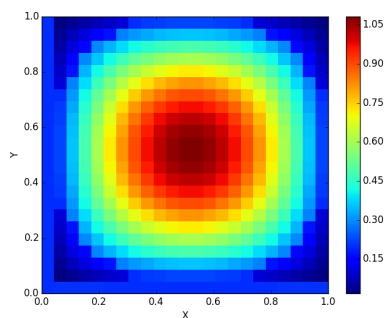


FIGURE 3.9. Função de onda para 46 iterações para condições de fronteira Dirichlet.

A maior diferença incide nos pontos fronteira , no resto do domínio poucas alterações foram verificadas, com uma fonte de calor no centro do domínio.

CONCLUSÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

Verificou-se que o método Douglas-Rachford é eficiente no uso da discretização do tempo aplicado à equação de calor. Para $\rho_n = C > 0$, $C \subseteq \mathbb{R}$ verificou-se a convergência dos resultados. Usou-se poucos pontos da grelha de pontos , caso contrário o programa demoraria muito tempo para obter resultados que onde se podesse ver a função de onda evoluindo no tempo. Verificou-se que o valor teórico converge para zero sem fonte de calor e a forma da curva (decaimento exponencial) é a mesma do método da discretização Douglas-Rachford. Pode-se concluir que o método foi implementado de maneira correta.

REFERENCES

- [1] Jim Douglas and H.H. Rachford. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables. *American Mathematical Society*, 1955.
- [2] George Em Karniadakis ; Robert M. Kirby II. *Parallel Scientific Computing in C++ and MPI*. Cambridge University Press, 2003.

- [3] Wenyuan Liao. A high-order adi finite difference scheme for a 3d reaction-diffusion equation with neumann boundary condition. *Wiley Online Library*, 2011.
- [4] Johannes Hofaker Ring. A python library for solving partial differential equations. Master's thesis, University of Oslo, 2007.