Física Computacional 2020/21

Trabalho Prático de Avaliação Contínua

Métodos Iterativos

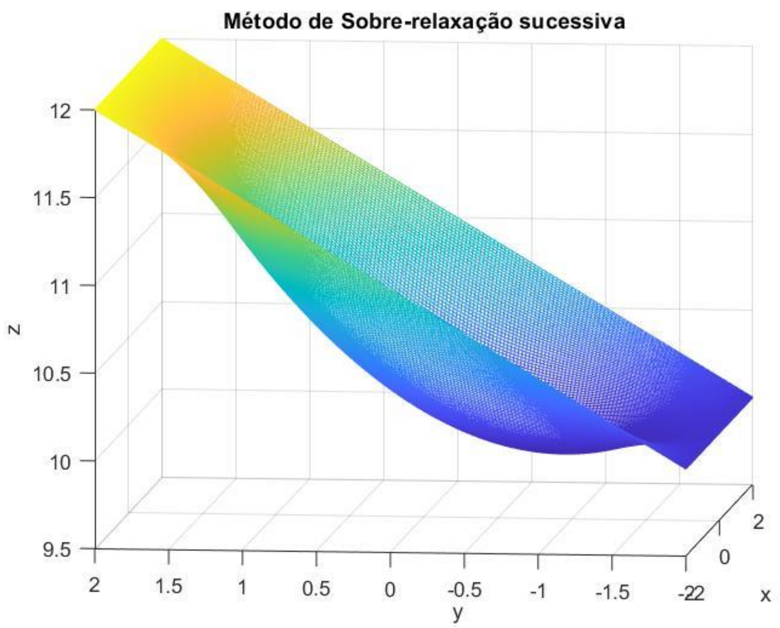

Figura 1 - Método SOR alínea A3)

12 de junho de 2020

Gonçalo Freitas, NºMec 98012

Hugo Amaral, NºMec 98224

Turma: PL7

Índice

Sumário

Este trabalho tinha como principais objetivos determinar o perfil de uma membrana que é solução de uma equação de *Poisson* por 3 métodos iterativos. Verificar a proporcionalidade, para o *Método de Gauss-Siedel*, entre o Número de Iterações a M^2 e a proporcionalidade entre o Tempo de Cálculo e M^4, sendo M o comprimento dos nossos vetores x e y. Os outros objetivos era calcular a área total da membrana e o seu gradiente e estudar alteração que a adição de uma nova condição, neste caso, inicial provoca na nossa solução final, calculando o gradiente desta nova solução. Por fim tínhamos como objetivo final estudar a relação entre a nova solução e o módulo do seu gradiente para o ponto $(0, y)$.

Para a resolução deste trabalho tivemos em conta os slides da Aula 8 assim como o Trabalho Prático 8 deste ano letivo disponibilizados no *Elearning*.

Para a alínea A reparamos que há acordo nos resultados obtidos e também na rapidez de convergência dos métodos para com o esperado. A alínea B permitiu nos verificar, com alguma precisão, as proporcionalidades pretendidas.

Na alínea C obtivemos um valor para a área da membrana dentro do esperado e um comportamento do gradiente, com base na definição de gradiente, esperado também.

Para as últimas alíneas verificamos que a adição de uma nova condição altera a nossa solução e que o valor adicionado não se altera ao longo das iterações, o que não seria de esperar para um ponto exceto se este pertencesse a fronteira, contudo o seu gradiente comporta-se como esperado.

Por fim, reparamos que o módulo do gradiente segue uma distribuição semelhante a z exceto nos pontos perto de $y = 0$. Neste ponto reparamos que quando o valor de z aumenta o valor do modulo do gradiente aumenta, existindo um máximo para z e um mínimo para o modulo do gradiente em $y = 0$.

Os gráficos dos perfis da membrana foram obtidos usados a função $mesh$ do *Matlab* e não a função $meshc$ pois a primeira parecia permitir uma mais fácil visualização dos resultados. Contudo, o código anexado esta implementado para fazer os gráficos usando ambas funções.

Introdução

A Equação de *Poisson* é uma equação diferencial que ocorre com frequência em muitas áreas. Na impossibilidade de resolver exatamente a equação por métodos de análise matemática, a alternativa é calcular numericamente a solução de cada problema concreto e tal implica a resolução de um sistema de equações lineares.

Os métodos para resolver sistemas de equações lineares dividem-se em duas categorias: métodos diretos e métodos iterativos. Os primeiros, como é o caso do método de eliminação de Gauss, permitem obter a solução do sistema após um número finito de operações aritméticas e são numericamente mais eficientes para sistemas com poucas equações, obtendo-se soluções exatas apenas afetadas por erros de arredondamento. Os métodos iterativos produzem uma sucessão de aproximações que, idealmente, converge para um limite que é a solução procurada e são numericamente eficientes para um grande número de equações cuja matriz é diagonalmente dominante (muitos dos casos que resultam da discretização de equações diferenciais).

Neste trabalho vamos utilizar 3 métodos iterativos, *Método de Jacobi, Método de Guass-Siedel* e o *Método da Sobre-Relaxação Sucessiva (S.O.R)* para resolver o seguinte problema.

Considerando uma membrana fina que tem as suas arestas fixas a uma estrutura retangular de arame. Tanto a coordenada x como a coordenada y da membrana têm valores entre $\frac{-L}{2}$ e $\frac{L}{2}$, com L=4. Dadas condições de fronteira e uma força, $f(x,y)$, o perfil da membrana é solução da seguinte equação, $\frac{\partial^2 z(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z(x,y)}{\partial y^2} = f(x,y)$ em que f é a força a que a membrana está sujeita na parte central na membrana.

O objetivo é determinar o perfil da membrana com as condições usando os 3 métodos iterativos já referidos. Para tal prosseguimos da seguinte forma. O perfil em $(x_j\ , y_i)$ é aproximado por $z(j,i)$. Usando diferenças finitas centradas para aproximar as segundas derivadas, obtemos $\frac{\partial^2 z(j,i)}{\partial x^2} \sim \frac{z(j+1,i)-2z(j,i)+z(j-1,i)}{\Delta x^2}$ e $\frac{\partial^2 z(j,i)}{\partial y^2} \sim \frac{z(j,i+1)-2z(j,i)+z(j,i-1)}{\Delta y^2}$.

Se $\Delta x = \Delta y = h$ a equação para $z(j,i)$ nos pontos interiores fica $-4z(j,i) + z(j+1,i) + z(j,i+1) + z(j,i-1) = h^2 f(j,i)$.

Para o *Método de Jacobi* pode se escrever simplesmente, para todos os pontos que não pertencem a fronteira, como:

$$z^{k+1}(j,i) = \frac{1}{4}[z^k(j+1,i) + z^k(j-1,i) + z^k(j,i+1) + z^k(j,i-1) - h^2 f(j,i)]$$

Para o *Método de Gauss-Siedel* escreve-se semelhante ao *Método de Jacobi* alterando z^k para z^{k+1}. Já para o Método SOR escrevemos para esses pontos:

$$z^{k+1}(j,i) = (1-\alpha)z^k + \frac{\alpha}{4}[z^{k+1}(j+1,i) + z^{k+1}(j-1,i) + z^{k+1}(j,i+1) + z^{k+1}(j,i-1) - h^2 f(j,i)]$$

O valor de α que minimiza o número de iterações necessárias para atingir a convergência,α_{opt}, depende do tipo problema, do número de dimensões deste e do tipo de condições fronteira. Para a equação de *Poisson* num domínio retangular, pode-se mostrar que: $\alpha_{opt} \sim 2 - \frac{2\pi}{M}$, em que M é o comprimento dos nossos vetores x e y. Geralmente utiliza-se um valor de $\alpha = \alpha_{opt}$ pois permite resolver o problema com menos iterações, ou seja, mais rapidamente.

Métodos e Resultados

Como não nos era dado indicações sobre o passo de h, x e y e sobre a condição de convergência utilizamos $h = x = y = 0.025$ para os passos e para a condição de convergência calculamos o valor máximo da matriz $\|z_{new} - z_{old}\|$, e consideramos que convergia quando este valor fosse menor que uma dada tolerância, ou seja, quando $\max\left(abs(z_{new} - z_{old})\right) < tol$ quer dizer que o método convergiu sendo z_{new} a nossa solução, sendo *z* a nossa matriz de valores e tol a nossa tolerância, igual a 1.0×10^{-6}.

- ## Alínea A

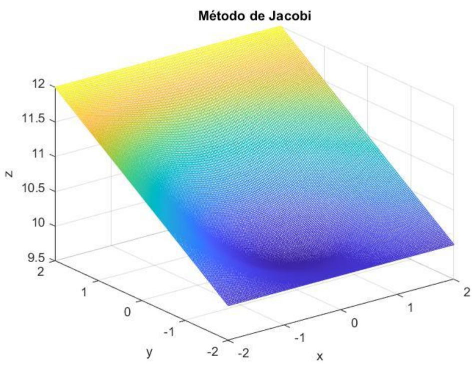

Figura 2 - Método de Jacobi

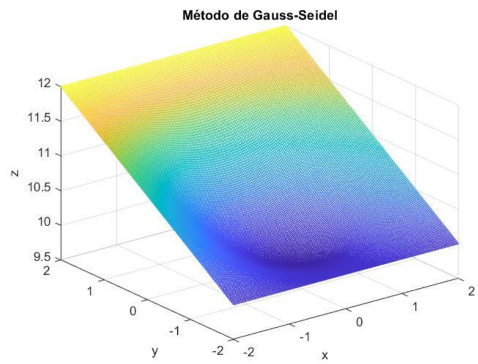

Figura 3 - Método de Gauss-Siedel

Como podemos ver pelos gráficos das figuras os resultados são idênticos apenas havendo diferença no número de iterações em que o *Método da Sobre-Relaxação sucessiva (S.O.R)* apresenta o menor valor, logo apresenta também um tempo de execução mais curto. Foram obtidos valores de números de iterações de necessárias de 41986, 22794, 484, para a alínea *A1*, *A2* e *A3*, respetivamente. Esta diferença no número de iterações pode ser explicada pelo facto de o Método de *Gauss-Siedel* convergir muito mais rapidamente (aproximadamente em metade de iterações) do que o Método de *Jacobi* e de o Método *S.O.R* ser considerado a partir do Método de *Gauss-Siedel.*

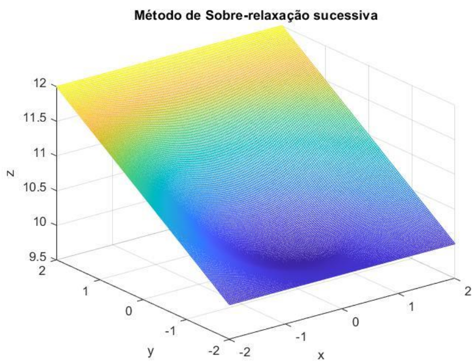

Figura 4 - Método S.O.R. $\alpha_{opt} = 1.9610$

Analisando a nossa solução z_new reparamos que para as posições de fronteira os valores se mantinham constante ao longo de todas as iterações e se mantinham iguais aos valores definidos inicialmente, pelas condições de fronteira. Isto permite-nos concluir que os métodos estão a ser bem aplicados pois estes apenas alteram os valores dos pontos que não pertencem a fronteira, tal como referido na Introdução.

Para a alínea A3 teve que se ter em atenção o valor de α_{opt}, valor este que minimiza o número de iterações e, por sua vez, nos permite obter a solução mais rapidamente, dai, em geral, usar-se este valor para α. Na Introdução foi referido o valor teórico deste α_{opt}, mas, para verificar a veracidade da nossa afirmação resolvemos o nosso problema, para valores de α perto deste α_{opt} procurando qual o valor de α que minimiza o número de iterações, tendo sido obtido um $\alpha = 1.9610$ que é exatamente igual a $\alpha_{opt} = 2 - \frac{2\pi}{M}$, tal como esperado.

- ## Alínea B

Considerando duas variáveis proporcionais K e N, sabemos que a equação que as relaciona pode ser do tipo $K = N^n, n \in \mathbb{R}$. Aplicando logaritmos vem $\mathrm{Ln}(K) = Ln(N^n)$ que é igual a $Ln(K) = nLn(N)$. Logo para a alínea B1 quando fazemos $Ln(Nº\ de\ iterações) = Ln(M^2)$, fica $Ln(Nº\ de\ iterações) = 2Ln(M)$, ou seja, fazendo o gráfico de $Ln(Nº\ de\ iterações)$ em função de $Ln(M)$ esperamos que tenha um declive igual a 2. Da mesma maneira, quando fazemos o gráfico de $Ln(Tempo\ de\ cálculo)$ em função de $Ln(M)$ esperamos um declive igual a 4, para a alínea B2 .

Para o cálculo do Tempo de Cálculo usou-se a função $tic\ toc$ do *Matlab*. Contudo é preciso ter em consideração que, ao contrário do número de iterações, o tempo de cálculo pode variar cada vez que se corre o código. Existem vários fatores que alteram este tempo, como o uso do computador para outras atividades enquanto o programa corre que ao sobrecarregar o computador pode fazer com que o tempo de cálculo aumente. Contudo, será de esperar que, a menos que o computador seja fortemente sobre carregado, este tempo não varie muito. Para procurar uma solução o mais exata possível correu-se o código e deixou se o computador apenas a trabalhar com o *Matlab* aberto. Obtendo-se os seguintes resultados.

Da figura 5 obtemos, usando a função $polyfit$ do *Matlab*, um declive de 1.8528 tendo, então um $Erro(\%) = \frac{|2-1.8528|}{2} \times 100 = 7.4\ \%$ pois o declive pretendido era 2. Da figura 6 obtemos um declive de 3.8674 com um erro associado de $Erro(\%) = 3.3\ \%$ visto que 4 era o declive pretendido. Contudo, como estes resultados são precisos, podemos afirmar que o Número de Iterações é proporcional a M^2 e que o Tempo de Cálculo (s) é proporcional a M^4.

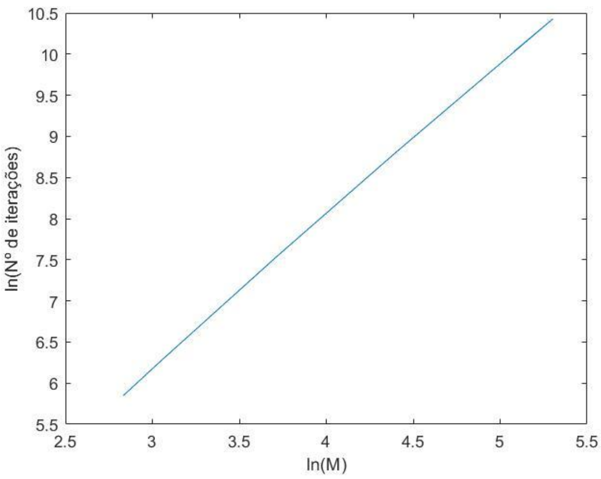

Figura 5 - $Ln(Nº\ de\ iterações)$ em função de $Ln(M)$

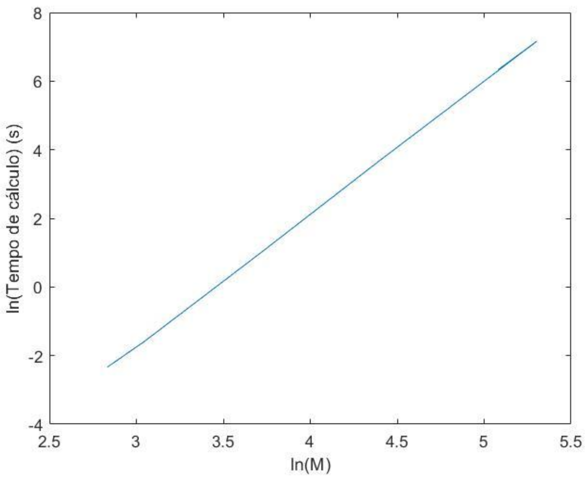

Figura 6 - $Ln(Tempo\ de\ cálculo)\ (s)$ em função de $Ln(M)$

- ## Alínea C

Foi obtido um valor de $A = 19.5417$ (unidades de área) para o valor da área total da membrana. Este valor encontra-se dentro do esperado, pois olhando para os gráficos conseguimos determinar o volume, V, da "caixa" onde o perfil esta representado $V = 12 \times 4 \times 4 = 192$ (unidades de volume), logo seria de esperar que o valor de A fosse um valor menor do que o valor de V.

Pelas figuras 1,2,3 e 4 vemos que existe uma depressão no gráfico do perfil da membrana. Analisando a figura 7 reparamos que o gradiente, nos pontos perto da depressão, segue na direção desta, tal como esperado, pois a direção do gradiente num ponto (x, y) apontará para onde a inclinação é maior, ou seja, onde existe uma maior variação de valores (escalares) em relação a uma mesma distância, que é, para estes pontos, a direção da depressão.

A direção do gradiente pode ser determinada ao ampliar o gráfico da figura 7 num ponto e analisando as setas visíveis.

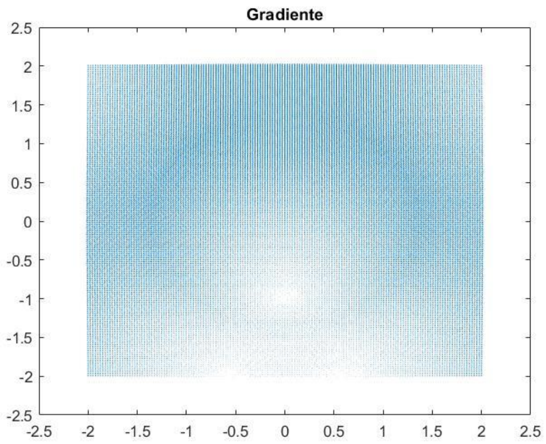

Figura 7 - Gradiente de z

- ## Alínea D

Como temos $\frac{-L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ e $\frac{-L}{2} \leq y \leq \frac{L}{2}$ sabemos que o índice correspondente a posição $(0,0)$ é o índice do meio do nosso vetor x e y. Após encontrar esse índice e adicionando a condição $z(0,0) = 11$ ao código já implementado na alínea A3 obtemos o gráfico apresentado na figura ao lado e um número de iterações de 483.

Reparamos que o valor de $z(0,0) = 11$ se mantém constante ao longo das iterações. Como este ponto não pertence a fronteira seria de esperar que este valor se alterasse ao longo do método.

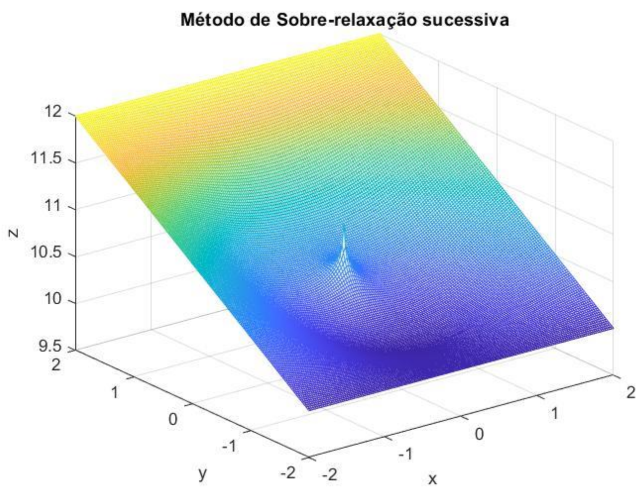

Figura 8 - Método SOR com a nova condição

- Alínea E

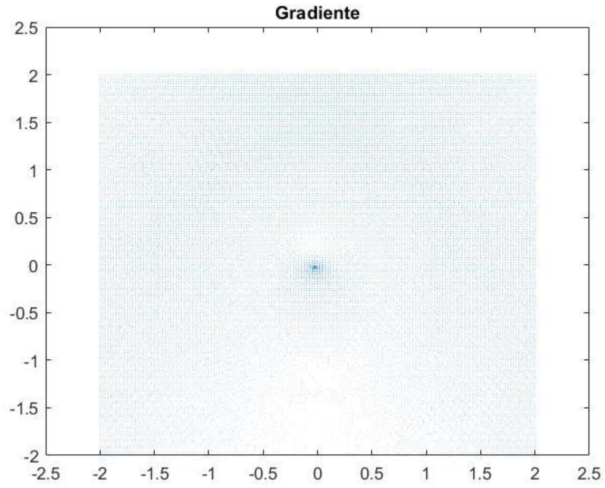

Figura 9 - Gradiente de z com a nova condição

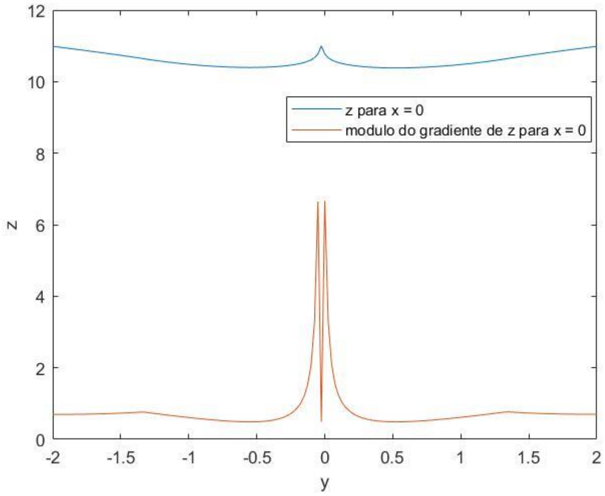

Figura 10 - Comparação de z e módulo do gradiente para x = 0

A figura 7 representa o gradiente com a adição da nova condição. O gráfico corresponde ao esperado pois, considerando a definição de gradiente já referida em C, nos pontos próximos do pico ($z(0,0)$) o gradiente apresenta direção no sentido do pico.

A figura 8 representa $z(0, y)$ e $\|grad\_z(0, y)\|$. Analisando o gráfico, verificámos que o valor do módulo do gradiente é sempre menor do que o valor de z para todos os pontos e, reparamos que o valor de z e do modulo do gradiente seguem uma distribuição semelhante exceto nas redondezas do ponto $y = 0$. Perto deste ponto o módulo do gradiente diminui quando z aumenta, atingido um mínimo, aproximadamente 0.5, para o módulo de gradiente e um máximo, igual a 11, para z em $y = 0$.

Discussão e Conclusão

Com as alíneas A foi nos possível verificar que os 3 métodos iterativos obtêm a mesma solução, contudo existe diferença do número de iterações e do tempo de cálculo sendo o *Método da sobre-relaxação sucessiva (S.O.R)* o que permite a obtenção da solução com menos iterações e menos tempo de cálculo e o *Método de Jacobi* o que permite a obtenção mais lenta de valores e com mais iterações. Estes resultados são os esperados tendo em conta que o *Método de Gauss-Siedel* converge muito mais rapidamente do que o *Método de Jacobi* e de o *Método S.O.R* ser considerado a partir do *Método de Gauss-Siedel*.

Na alínea B foi possível verificar a proporcionalidade entre o Número de Iterações a M^2 e a proporcionalidade entre o Tempo de Cálculo e M^4, sendo M o comprimento dos nossos vetores x e y. Contundo é necessário ter em atenção o cálculo do Tempo de Cálculo pois este pode variar cada vez que o código é corrido devido a muitos fatores como, por exemplo, a utilização simultânea do computador enquanto se corre o código.

Na alínea C obtivemos o valor da área do perfil da membrana e o gradiente da função. O comportamento do gradiente da função foi tal como esperado, com base na definição de gradiente.

Na alínea D obtivemos o gráfico semelhante ao da alínea A, no entanto com um pico em $z(0,0)$, o valor do pico mantém se constante ao longo das iterações o que não seria de esperar pois o ponto (0,0) não pertence a fronteira.

Na alínea E obtivemos o gradiente da função da alínea D, este tem uma concentração no pico $z(0,0)$, como esperado. Concluímos também que o modulo do gradiente varia de forma igual, mas sempre com valores inferiores, a z exceto nos pontos pertos de $y = 0$, ponto onde reparamos que o módulo do gradiente se comporta de forma inversa ao valor de z, quando z aumenta este diminui.

Assim, concluímos, que os objetivos deste trabalho foram atingidos com alguma precisão e que os resultados estão dentro do esperado exceto o resultado obtido em D que se esperava um resultado diferente dado ao ponto não pertencer a fronteira.

Bibliografia

Slides Aula TP 8 2020/21 disponibilizados no *Elearning*

Trabalho Prático 8 2020/21

https://pt.khanacademy.org/math/multivariable-calculus/multivariable-derivatives/partial-derivative-and-gradient-articles/a/the-gradient