PDE elípticas
Um método direto

Apresentação 9 — Aula Teórica 12

Física Computacional

Departamento de Física
Universidade de Aveiro

20 ou 21 de maio de 2019

Eq. de Poisson a duas dimensões: um método direto

No Trabalho 9, vamos resolver numericamente a equação de Poisson a duas dimensões, num domínio quadrado,

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

usando um método direto. O problema é discretizado numa grelha numérica de M_x pontos segundo x, espaçados por Δx, e M_y pontos segundo y, espaçados por Δy.

Na aula anterior, considerámos o caso em que temos condições fronteira de Dirichlet nos limites exteriores do domínio. Para simplificar, usámos $\Delta x = \Delta y = h$. Como o domínio é quadrado, isto implica que $M_x = M_y = M$.

Definimos ainda $m = M - 2$.

Eq. de Poisson a duas dimensões: um método direto

Usando aproximações de diferenças finitas centradas de segunda ordem para as segundas derivadas, obtém-se a seguinte equação para um ponto interior de índices (i, j):

$$-4V(i,j) + V(i+1,j) + V(i-1,j) + V(i,j+1) + V(i,j-1) = h^2 f(i,j) \quad (1)$$

Considerando um exemplo simples, em que $M = 6$ e $m = 4$, temos a seguinte matriz de valores V:

$$\begin{pmatrix} V(1,1) & V(1,2) & V(1,3) & V(1,4) & V(1,5) & V(1,6) \\ V(2,1) & V(2,2) & V(2,3) & V(2,4) & V(2,5) & V(2,6) \\ V(3,1) & V(3,2) & V(3,3) & V(3,4) & V(3,5) & V(3,6) \\ V(4,1) & V(4,2) & V(4,3) & V(4,4) & V(4,5) & V(4,6) \\ V(5,1) & V(5,2) & V(5,3) & V(5,4) & V(5,5) & V(5,6) \\ V(6,1) & V(6,2) & V(6,3) & V(6,4) & V(6,5) & V(6,6) \end{pmatrix}$$

Os elementos a vermelho têm valores conhecidos: são as condições fronteira. Os elementos a preto são incógintas: para cada um deles, existe uma equação (1).

Eq. de Poisson a duas dimensões: um método direto

Para poder escrever o problema na forma de um sistema de equações $\boldsymbol{A\phi} = \boldsymbol{b}$, ordenamos as incógnitas com um único índice n. Altera-se também o símbolo para as coisas ficarem mais claras. A matriz anterior fica

$$\begin{pmatrix} V(1,1) & V(1,2) & V(1,3) & V(1,4) & V(1,5) & V(1,6) \\ V(2,1) & \phi(1) & \phi(2) & \phi(3) & \phi(4) & V(2,6) \\ V(3,1) & \phi(5) & \phi(6) & \phi(7) & \phi(8) & V(3,6) \\ V(4,1) & \phi(9) & \phi(10) & \phi(11) & \phi(12) & V(4,6) \\ V(5,1) & \phi(13) & \phi(14) & \phi(15) & \phi(16) & V(5,6) \\ V(6,1) & V(6,2) & V(6,3) & V(6,4) & V(6,5) & V(6,6) \end{pmatrix}$$

O índice n para um dado $\phi(n)$ é dado por

$$n = (i-2)m + j - 1. \tag{2}$$

Eq. de Poisson a duas dimensões: um método direto

Vimos que para pontos que não têm como vizinho qualquer condição fronteira obtemos uma equação

$$\phi(n-m) + \phi(n-1) - 4\phi(n) + \phi(n+1) + \phi(n+m) = h^2 f(i,j). \tag{3}$$

Quando pelo menos um dos pontos vizinhos é condição fronteira, o número de incógnitas da equação reduz-se. Para $n = 5$, por exemplo, vem

$$\phi(1) - 4\phi(5) + \phi(6) + \phi(9) = h^2 f(3,2) - V(3,1). \tag{4}$$

Com esta informação, foi possível escrever a matriz $\boldsymbol{A}$ para o nosso exemplo simples.

Matriz A

$$
\boldsymbol{A} =
$$

$$
\left[\begin{array}{cccc:cccc:cccc:cccc}
-4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hdashline
1 & 0 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hdashline
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
\hdashline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4
\end{array}\right]
$$

Escrita da matriz esparsa A no MATLAB

A matriz tem uma estrutura por blocos, que torna muito fácil escrevê-la para um m genérico.

Há um problema evidente: o número de elementos da matriz $\boldsymbol{A}$ é proporcional a m^4. Para uma divisão em 1000 intervalos segundo cada uma das direções x ou y, fica-se com uma matriz com cerca de 10^{12} elementos, que poderia ocupar mais do que 7 TB de memória.

Felizmente, a matriz é esparsa, ou seja, a maior parte dos seus elementos são zero, e o MATLAB permite guardar este tipo de matrizes num formato que reduz em muito o uso de memória.

Os pormenores práticos da escrita da matriz esparsa $\boldsymbol{A}$ no MATLAB serão abordados no enunciado do Trabalho 9.

Escrita do vetor b para condições fronteira $V = 0$

Vamos voltar a estudar a equação para os pontos que não têm como vizinho uma condição fronteira:

$$\phi(n-m) + \phi(n-1) - 4\phi(n) + \phi(n+1) + \phi(n+m) = h^2 f(i,j). \qquad (3)$$

A componente b_n do vetor é obviamente dada por

$$b(n) = h^2 f(i,j). \qquad (5)$$

Escrita do vetor b para condições fronteira $V = 0$

Para o caso em que pelo menos um dos pontos vizinhos é condição fronteira, a situação é mais complicada. Para $n = 5$, por exemplo, vem

$$\phi(1) - 4\phi(5) + \phi(6) + \phi(9) = h^2 f(3,2) - V(3,1). \tag{4}$$

A linha correspondente da matriz $\boldsymbol{A}$ vai ter menos elementos diferentes de zero, mas isso já foi levado em conta na sua escrita.

Para escrever o elemento $b(n)$ correspondente, vai ser necessário adicionar termos extra a $h^2 f(i,j)$.

Vamos começar por estudar o caso em que todas as condições fronteira exteriores são dadas por $V = 0$ (Problema 9.1). Nesta situação, todos os elementos de $\boldsymbol{b}$ são iguais a $h^2 f(i,j)$.

Escrita da solução $V(i, j)$

Depois de termos escrito a matriz esparsa **A** e o vetor **b** no nosso programa MATLAB a solução para o sistema de equações é obtida através de algoritmos otimizados através de

```
phi=A\b;
```

Para analisar e representar graficamente a solução, convém voltar à representação $V(i, j)$. É fácil de confirmar que no MATLAB isso pode ser feito com o ciclo

```
for n=1:m^2
     V(floor((n-1)/m)+2,rem(n-1,m)+2)=phi(n);
end
```

Escrita do vetor b para condições fronteira de Dirichlet gerais

Adiámos há pouco o estudo do problema da escrita do vetor $\boldsymbol{b}$ quando as condições fronteira de Dirichlet não são dadas por por $V = 0$. Vamos voltar ao nosso exemplo:

$$\begin{pmatrix} V(1,1) & V(1,2) & V(1,3) & V(1,4) & V(1,5) & V(1,6) \\ V(2,1) & \phi(1) & \phi(2) & \phi(3) & \phi(4) & V(2,6) \\ V(3,1) & \phi(5) & \phi(6) & \phi(7) & \phi(8) & V(3,6) \\ V(4,1) & \phi(9) & \phi(10) & \phi(11) & \phi(12) & V(4,6) \\ V(5,1) & \phi(13) & \phi(14) & \phi(15) & \phi(16) & V(5,6) \\ V(6,1) & V(6,2) & V(6,3) & V(6,4) & V(6,5) & V(6,6) \end{pmatrix}$$

É fácil de perceber que, depois de ter sido criado um vetor $\boldsymbol{b}$ com elementos $h^2 f(i,j)$, é necessário adicionar termos extra aos elementos $b(n)$ correspondentes aos $\phi(n)$ da segunda e da penúltima linhas e da segunda e da penúltima colunas.

Escrita do vetor *b* para condições fronteira de Dirichlet gerais

O código que acerta os elementos correspondentes à penúltima coluna é

```
j=M-1;
for i=2:M-1
    n=m*(i-2)+j-1;
    b(n)=b(n)-V(i,j+1);
end
```

É fácil escrever o código equivalente para a segunda linha, para a penúltima linha e para a segunda coluna.

A maneira com se obtém depois a solução do problema está explicada no slide 10.