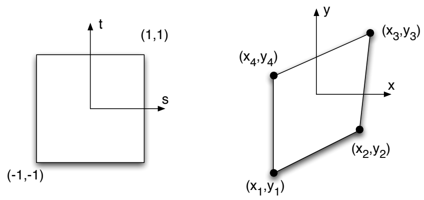
INF1608 – Análise Numérica

Projeto: Mapeamento entre Espaço Paramétrico e Espaço Físico

Prof. Waldemar Celes
Departamento de Informática, PUC-Rio

Descrição

Em muitas simulações numéricas, o domínio de interesse é subdividido em pequenos elementos (células). Um exemplo é o uso de células quadrilaterais em 2D e células hexaédricas em 3D. Para facilitar o cálculo de propriedades no interior destas células, converte-se o espaço físico (x, y) da célula para o espaço paramétrico (s, t) , e vice-versa. O espaço paramétrico é regular e varia de -1 a 1. Funções de forma são usadas para mapear propriedades e posições do espaço paramétrico para o espaço físico. No caso 2D, ilustrado na figura, as funções de forma N_i usadas para mapear o espaço paramétrico no espaço físico são dadas por:



$$
\begin{aligned}
N_1 &= \frac{1}{4}(1-s)(1-t) \\
N_2 &= \frac{1}{4}(1-s)(1+t) \\
N_3 &= \frac{1}{4}(1+s)(1+t) \\
N_4 &= \frac{1}{4}(1+s)(1-t)
\end{aligned}
$$

Assim, qualquer dado atribuído aos vértices pode ser interpolado no interior do elemento, conhecendo-se as coordenadas paramétricas:

$$\alpha(s,t) = \sum_{i=1}^{4} N_i \alpha_i$$

Por exemplo, dada a coordenada paramétrica de um ponto (s, t), a coordenada no espaço físico desse ponto é dada por:

$$x = f(s,t) = \sum_{i=1}^{4} N_i x_i \quad \text{e} \quad y = g(s,t) = \sum_{i=1}^{4} N_i y_i$$

onde x_i e y_i correspondem as coordenadas dos vértices.

O problema existe quando se deseja o mapeamento inverso: dado um ponto no espaço físico (x, y), qual a coordenada paramétrica (s, t) correspondente? Recai-se num sistema não linear.

Uma forma de resolver este problema é transformá-lo num problema de determinação de raízes simultâneas, e daí usar o método de Newton-Raphson. As funções cujas raízes (s,t) queremos determinar são:

$$u(s,t) = x - f(s,t) = 0$$
$$v(s,t) = y - g(s,t) = 0$$

O método de Newton-Raphson para determinação de raízes simples é:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

No caso do elemento quadrilátero, trabalhamos com funções de duas variáveis e, portanto, a derivada da função é expressa pela matriz Jacobiana:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial s} & \frac{\partial u}{\partial t} \\ \frac{\partial v}{\partial s} & \frac{\partial v}{\partial t} \end{bmatrix}$$

E a iteração de Newton-Raphson, para o nosso problema, é expressa por:

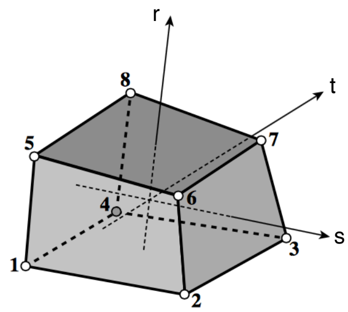
$$\begin{bmatrix} s_{i+1} \\ t_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_i \\ t_i \end{bmatrix} - J^{-1} \begin{bmatrix} u(s_i,t_i) \\ v(s_i,t_i) \end{bmatrix}$$

Tarefa

Usando o método de Newton-Raphson para determinação de raízes de funções, implemente um procedimento para determinar a coordenada paramétrica (s,t) de uma célula quadrilateral dada sua coordenada no espaço físico (x,y).

Para testar sua implementação, gere aleatoriamente coordenadas paramétrica (s,t), calcule as coordenadas físicas (x,y) correspondentes, usando as funções de forma, e verifique se dadas estas coordenadas físicas, as coordenadas paramétricas são encontradas com precisão.

Estenda seu método para calcular coordenadas paramétricas a partir de coordenadas físicas para células hexaédricas em 3D, sabendo que as funções de forma são dadas por:



$$N_1 = \frac{1}{8}(1-s)(1-t)(1-r)$$
$$N_2 = \frac{1}{8}(1-s)(1+t)(1-r)$$
$$N_3 = \frac{1}{8}(1+s)(1+t)(1-r)$$
$$N_4 = \frac{1}{8}(1+s)(1-t)(1-r)$$
$$N_5 = \frac{1}{8}(1-s)(1-t)(1+r)$$
$$N_6 = \frac{1}{8}(1-s)(1+t)(1+r)$$
$$N_7 = \frac{1}{8}(1+s)(1+t)(1+r)$$
$$N_8 = \frac{1}{8}(1+s)(1-t)(1+r)$$

Análise

Ao desenvolver seu trabalho e testá-lo, procure, baseado em experimentos computacionais, responder as seguintes perguntas:

- Quantas iterações em média são necessárias para a determinação das raízes dentro de uma determinada tolerância?
  - Considerando como estimativa inicial o centro do elementos: $(s, t) = (0, 0)$
  - Considerando como estimativa inicial coordenadas (s, t) geradas aleatoriamente no intervalo $[-1, 1]$
- O método funciona para pontos fora do elemento? Por exemplo, considere pontos cujas coordenadas paramétricas estão no intervalo $[-2, 2]$. Quantas iterações em média são necessárias?
- O método funciona para células degeneradas? Uma célula é degenerada quando dois vértices são coincidentes; neste caso, o quadrilátero se degenera num triângulo, mas os 4 vértices são mantidos (dois coincidentes).
- Quais as respostas das perguntas equivalentes às de cima para o caso 3D?