Física Computacional

Resolução do Exercício 4 do Exame Teórico de Recurso 2016/2017

1.

a) Vamos chamar $\phi(i, j)$ aos valores da variável dependente no domínio discretizado. Os valores iniciais são:

1.0	2.0	3.0	4.0
0.0	0.0	0.0	6.0
1.0	3.0	5.0	7.0

No processo de relaxação, todos os pontos da periferia são condições fronteira que não vão mudar: só os valores de $\phi(2, 2)$ e $\phi(2, 3)$ é que vão (espera-se) convergindo recursivamente.

Sabemos que em cada iteração do método de Jacobi aplicado à equação de Laplace a duas dimensões o novo valor de $\phi(i, j)$ num ponto é a média aritmética dos valores antigos dos 4 pontos vizinhos: $\phi(i, j-1)$, $\phi(i, j+1)$, $\phi(i-1, j)$ e $\phi(i+1, j)$. No método de Gauss–Seidel, se já houver valores novos de ϕ nos pontos vizinhos são estes que vão ser usados no cálculo da média.

Vamos supor que iríamos usar o método de Gauss–Seidel para a primeira iteração de $\phi(2, 2)$: como é o primeiro cálculo desta iteração, ainda nenhum dos vizinhos pode ter um valor novo. Nesta primeira iteração:

$$\phi_{\mathrm{GS}}^{\mathrm{new}}(2, 2) = (0.0 + 0.0 + 2.0 + 3.0)/4 = 5/4 = 1.25.$$

Usando a nomenclatura do slide 12 da Apresentação 5, vamos calcular a diferença d entre o valor novo e o valor antigo quando se aplica o método de Gauss–Seidel:

$$d(2, 2) = \phi_{\mathrm{GS}}^{\mathrm{new}}(2, 2) - \phi^{\mathrm{old}}(2, 2) = 1.25 - 0.0 = 1.25\,.$$

De acordo com o enunciado, ao fim da primeira iteração os novos valores são

1.0	2.0	3.0	4.0
0.0	2.0	6.4	6.0
1.0	3.0	5.0	7.0

O método que foi usado de facto teve como resultado

$$\phi^{\mathrm{new}}(2, 2) - \phi^{\mathrm{old}}(2, 2) = 2.0 - 0.0 = 2.0,$$

o que é maior que a variação que resultaria da aplicação do método de Gauss–Seidel. Isto dá a entender que o método usado é o de sobre-relaxação sucessiva. Vamos determinar o valor de α:

$$
\begin{aligned}
\phi_{\text{SRS}}^{\text{new}}(2,2) &= \phi^{\text{old}}(2,2) + \alpha\, d(2,2) \\
\alpha &= \frac{\phi_{\text{SRS}}^{\text{new}}(2,2) - \phi^{\text{old}}(2,2)}{d(2,2)} \\
\alpha &= \frac{2.0 - 0.0}{5/4} = \frac{8}{5} = 1.6\,.
\end{aligned}
$$

Só falta verificar se, com $\alpha = 1.6$, $\phi_{\text{SRS}}^{\text{new}}(2,3)$ nos dá o resultado do enunciado, 6.4. Note que para este cálculo vamos já usar o novo valor de $\phi(2,2)$, que é igual a 2.0.

$$
\begin{aligned}
\phi_{\text{SRS}}^{\text{new}}(2,3) &= \phi^{\text{old}}(2,3) + \alpha\, d(2,3) \\
&= \phi^{\text{old}}(2,3) + \alpha\,\left(\phi_{\text{GS}}^{\text{new}}(2,3) - \phi^{\text{old}}(2,3)\right) \\
&= 0.0 + 1.6 \cdot \left[(2.0 + 6.0 + 3.0 + 5.0)\,/4 - 0.0\right] \\
&= 1.6 \cdot (16.0/4) = 1.6 \times 4.0 = 6.4.
\end{aligned}
$$

b) Quando o o método de Gauss–Seidel, aplicado a um dado problema, converge, o método de sobre-relaxação ($\alpha > 1$) é usado para acelerar a convergência.

Para problemas em que o método de Gauss–Seidel não converge, pode-se tentar alcançar a convergência usando o método de sub-relaxação ($\alpha < 1$). Note que não estudámos nenhum caso deste tipo nesta unidade curricular.