

Universidade Federal do Espírito Santo
6^o Exercício Computacional de Computação
Científica Algoritmos Numéricos II - 2019/1

Problema de Valor no Contorno - 2D

Data de entrega: 18 de junho de 2019

Introdução

A equação da advecção-difusão-reação, também conhecida como equação de transporte, é de fundamental importância nos problemas relacionados a aerodinâmica, meteorologia, oceanografia, hidrologia, engenharia química e de reservatórios. Considere a equação de transporte bidimensional estacionária:

$$\begin{aligned} -\kappa \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \beta_x(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + \beta_y(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + \gamma(x, y)u &= f(x, y) \quad \text{em } \Omega \quad (1) \\ u &= g \quad \text{em } \Gamma_g \\ -\kappa \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} &= c(u - h) \quad \text{em } \Gamma_h \end{aligned}$$

sendo u a grandeza física a ser avaliada, κ o coeficiente de difusão, $\beta_x(x, y)$ e $\beta_y(x, y)$ as velocidades nas direções x e y respectivamente, $\gamma(x, y)$ o coeficiente de reação, $f(x, y)$, o termo de fonte ou sumidouro, g , h e c funções e constante reais conhecidas.

O domínio de todos os experimentos serão definidos por: $\Omega = \{(x, y) \text{ tal que } a \leq x \leq b \text{ e } c \leq y \leq d\}$. O domínio discretizado constitui o conjunto de pontos (x_i, y_j) tais que:

$$\begin{aligned} x_i &= a + (i - 1)h_x, \quad i = 1, \dots, n; \quad h_x = \frac{b - a}{n - 1} \\ y_j &= c + (j - 1)h_y, \quad j = 1, \dots, m; \quad h_y = \frac{d - c}{m - 1} \end{aligned}$$

n e m representam, respectivamente, o número de incógnitas na direção x e na direção y , totalizando $N = n * m$ incógnitas.

Objetivos do trabalho

O custo computacional dos métodos iterativos está relacionado com a rapidez de convergência dos métodos e com o número de operações de ponto flutuante necessário para calcular cada iteração. A forma de armazenar a matriz dos coeficientes é fundamental para obter custo computacional reduzido. A matriz resultante do problema de valor no contorno discretizado por diferenças finitas é pentadiagonal. Este trabalho tem por objetivo observar o comportamento de métodos iterativos estacionários e não estacionários considerando estratégias otimizadoras distintas para cada classe de métodos.

Descrição

Escreva duas funções no octave para resolver o PVC: uma função para resolver o sistema linear resultante pelo método SOR e outra função para resolver o sistema linear resultante pelo método GMRES. As funções devem receber como dados de entrada:

- Dados do domínio: a, b, c, d .
- Número de incógnitas em cada região: n, m .
- Parâmetro w para o método SOR.
- Número de vetores para o restart k para o método GMRES.
- Tolerância $rtol$.
- Número máximo de iterações (ou ciclos) $maxit$.

Os dados físicos do problema: $\kappa, \beta_x(x, y), \beta_y(x, y), \gamma(x, y), f(x, y), g(x, y), c$ e h . podem ser organizados em uma função que caracteriza cada experimento.

Método Iterativo estacionário SOR:

O método SOR deve ser implementado livre de matriz. Assim a expressão geral do métodos SOR:

$$u_I^{k+1} = \frac{w}{a_{II}} \left(f_I - \sum_{J=1}^{I-1} a_{IJ} * u_J^{k+1} - \sum_{J=I+1}^N a_{IJ} * u_J^k \right) + (1 - w) * u_I^k$$

deve levar em conta que:

- os coeficientes a_{IJ} não devem ser armazenados em uma estrutura matricial. (Dica: use os coeficientes d_I, b_I, a_I, c_I, e_I da discretização por diferenças finitas para calcular as iterações)
- a complexidade de cada iteração não deve ser superior a $\Theta(N)$

Método iterativo não estacionário GMRES:

- A função `gmres` do Octave deve ser usada considerando que a matriz dos coeficientes esparsa (Dica: use o comando `A = sparse(N,N)` para gerar uma matriz esparsa de ordem N e preencha somente as posições não nulas da matriz)
- Utilize número de vetores para o restart e preconditionadores adequados para acelerar a convergência do método GMRES.

Para cada problema exemplo que será apresentado a seguir, deverão ser realizados testes computacionais, considerando um conjunto de discretizações seguindo a Tabela 1.

n	m	Ordem do Sistema Linear
n	= m	2500
n	≠ m	2500
n	= m	10000
n	≠ m	10000
n	≠ m	500000
n	= m	1000000

Table 1: Valores Sugeridos de n e m referentes aos testes computacionais

Validação 1 - Problema simples com solução trivial

Determine a distribuição de calor em uma chapa de metal, com faces termicamente isoladas e com espessura desprezível, sendo que a temperatura é conhecida em todas as faces da chapa. Neste caso a Eq. (1) é dada por:

$$-\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (2)$$

para (x, y) no domínio $\Omega = (a, b) \times (c, d)$. Considerando condições de contorno:

$$\begin{aligned} u(a, y) &= T_0 \\ u(x, c) &= T_0 \\ u(x, d) &= T_0 \\ u(b, y) &= T_0 \end{aligned}$$

espera-se que os valores no interior da placa sejam iguais a T_0 em todos os pontos de discretização. Para testar seu programa varie o número de incógnitas n e m , e as dimensões da placa a , b , c e d . Este exemplo pode te ajudar a testar quase todos os detalhes da implementação. Não é necessário apresentá-lo no relatório, mas se a sua solução para esse teste não estiver correta todo o resto estará errado.

Validação 2 - Problema com solução conhecida

Determine a solução aproximada para $u(x, y)$ em $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ considerando na Eq. (1):

$$\begin{aligned} k &= 1 \\ \beta_x(x, y) &= 1 \\ \beta_y(x, y) &= 20y \\ \gamma(x, y) &= 1 \\ f(x, y) \text{ tal que } u(x, y) &= 10xy(1-x)(1-y)e^{x^{4.5}} \text{ é a solução exata} \end{aligned} \quad (3)$$

e sabendo que $u(x, y) = 0$ no contorno de Ω . Para este experimento considere a seguinte expressão para o erro cometido:

$$erro = \max_{i=1, \dots, n; j=1, \dots, m} |u_{i,j} - u(x_i, y_j)| \quad (4)$$

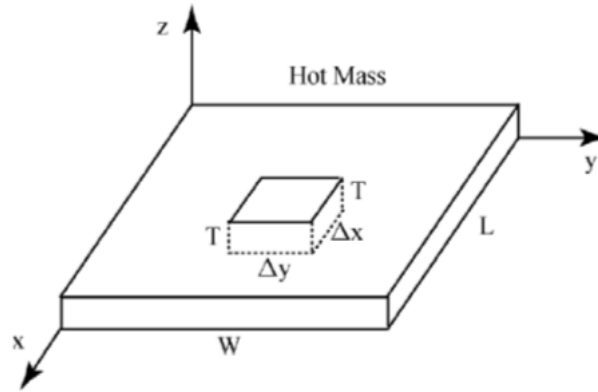


Figure 1: Geometria do Resfriador 2d.

Para encontrar a função $f(x, y)$ você deve derivar a função $u(x, y)$ e montar o lado esquerdo da expressão (1). Para auxiliar considere a possibilidade de usar um *software* para o cálculo simbólico de derivadas. Este exemplo tem por objetivo a testar a acuidade da solução aproximada.

- Faça o gráfico de $u(x, y)$ para uma escolha adequada de n e m .
- No relatório apresente uma tabela com o valor do erro encontrado para as dimensões sugeridas na Tab. 1 e o tempo de processamento para os dois métodos iterativos e respectivas estratégias de armazenamento.
- Como poderíamos verificar a ordem de convergência do método das diferenças finitas para problemas bidimensionais?

Aplicação Física 1 - Resfriador bidimensional

Considere o problema de resfriar uma massa aquecida como mostra a Fig. 1. Exemplos podem incluir o resfriamento de chips de computadores ou amplificadores elétricos. O modelo matemático que descreve a transferência de calor nas direções x e y é dado pela Eq. (5). Detalhes sobre a definição do modelo matemático podem ser encontrados em (White, 2004)¹.

$$-k \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{2c}{T} u = \frac{2c}{T} u_{ref} \quad \text{em} \quad \Omega = (0, L) \times (0, W) \quad (5)$$

onde k é a condutividade térmica (considerada aqui constante), c é o coeficiente de transferência de calor, T é a altura do resfriador, u_{ref} é a temperatura de referência. Encontre a temperatura no interior do resfriador considerando as seguintes condições

¹R. E. White, COMPUTATIONAL MATHEMATICS - Models, Methods, and Analysis with MATLAB and MPI with Methods and Analysis, CHAPMAN & HALL/CRC, 2004.

de contorno:

$$\begin{aligned}
 u(x, 0) &= 70 \\
 u(x, W) &= 70 \\
 u(0, y) &= 200 \\
 -k \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(L, y) &= c(u(L, y) - u_{ref})
 \end{aligned} \tag{6}$$

e os seguintes parâmetros físicos adimensionalizados: $T = 2$, $L = W = 1$, $k = 1$, $u_{ref} = 70$. Considere o coeficiente de transferência de calor $c = 1$.

- Faça o gráfico de $u(x, y)$ para uma escolha adequada de n e m .
- Considere uma segunda versão desse experimento substituindo a condição de contorno mista pela condição de valor prescrito $u(L, y) = 70$.
- O que se pode dizer das soluções encontradas em cada caso?
- Apresente uma tabela comparando o tempo de processamento para os dois métodos iterativos e respectivas estratégias de armazenamento.
- Enriqueça sua análise com gráficos e tabelas que auxiliem a entender o comportamento dos métodos para esse problema específico.

Aplicação Física 2 - Escoamento em Águas Subterrâneas

O escoamento de um fluido em um meio poroso sob certas condições pode ser modelado por equações diferenciais similares aquelas que regem a transferência de calor em estado estacionário (Equação de Poisson). O escoamento em meio poroso é regido por uma lei empírica denominada *Lei de Darcy* que é similar a *Lei de Transferência de calor de Furiier* levando os escoamentos a possuírem equações equivalentes.

A compressibilidade de um fluido indica a quantidade de massa que passa por um volume infinitesimal em uma unidade de tempo. Matematicamente a compressibilidade é regida pelo divergente da velocidade:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \tag{7}$$

onde $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$ é a velocidade do escoamento em um domínio bidimensional. Se o fluido for incompressível $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Por outro lado, a *Lei de Darcy* estabelece que:

$$\mathbf{v} = -k \nabla p \tag{8}$$

onde p e k são, respectivamente, pressão e condutividade hidráulicas. Em geral k depende de p , porém se o meio poroso for saturado, a condutividade pode ser considerada constante. Acoplando a *Lei de Darcy* com a Eq. (7) tem-se:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = -k \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) = f \tag{9}$$

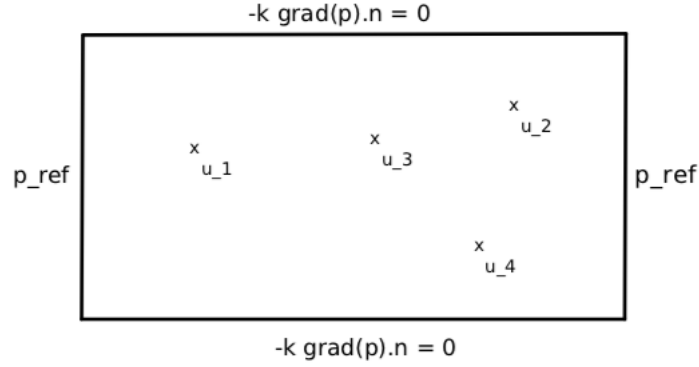


Figure 2: Esquema do Escoamento em Águas Subterrâneas - Exemplo com 4 poços.

Considere um meio poroso superficial saturado retangular no plano xy com pelo menos um poço. Nas faces superior e inferior do retângulo assuma que não exista fluxo na direção do contorno. Porém, considere um amplo abastecimento das fronteiras esquerda e direita de tal forma que a pressão seja conhecida. Detalhes sobre a definição do modelo matemático podem ser encontrados em (White, 2004).

O modelo de um escoamento em águas subterrâneas considerando as condições descritas acima pode ser modelado por:

$$-k \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) = \begin{cases} 0 & \text{quando } (x, y) \text{ não for poço} \\ R_w & \text{quando } (x, y) \text{ for poço} \end{cases} \quad \text{em } \Omega. \quad (10)$$

A Fig. 2 apresenta um esquema com 4 poços. As condições de contorno podem ser sumarizadas em:

$$\begin{aligned} -k \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} &= 0 & \text{para } y = c \text{ e } y = d \\ p &= p_{ref} & \text{para } x = a \text{ e } x = b \end{aligned} \quad (11)$$

Encontre a pressão $p(x, y)$ e a velocidade $\mathbf{v}(x, y) = (v_x(x, y), v_y(x, y))$ (Eq. (8)), considerando ∇p aproximado por diferenças finitas de primeira ordem, sendo: $\Omega = (0, 5000) \times (0, 1000)$, dois poços localizados em $u_1 = (x_1, y_1)_w = (1500, 600)$ e $u_2 = (x_2, y_2)_w = (3200, 250)$, sendo $R_w = -250$, $k = 1$ e $P_{ref} = 100$. Escolha os números de incógnitas (n e m) tal que os poços u_1 e u_2 sejam pontos incógnitas.

Experimentos Específicos

- Apresente o gráfico da pressão e o campo de velocidade (Dica: faça uma pesquisa como traçar gráficos tridimensionais de valores reais e de vetores no Octave).
- Defina um número de incógnitas em cada direção ($n \times m$) de forma que você obtenha dois tamanhos de problemas: *pequeno* e *grande*.
- Apresente uma tabela comparando o tempo de processamento para os dois métodos iterativos e respectivas estratégias de armazenamento.
- Enriqueça sua análise com gráficos e tabelas que auxiliem a entender o comportamento dos métodos para esse problema específico.

1 Estrutura do Relatório

O relatório deve ser escrito observando as normas do padrão ABNT. A divisão do relatório deve ser de acordo com as seguintes seções:

- **Introdução:** apresentar a estrutura do trabalho e os objetivos.
- **Método das Diferenças Finitas:** um pequeno resumo descrevendo todas as técnicas e ordens de aproximação consideradas.
- **Implementação:** onde serão apresentados a estrutura e partes significativas do código comentado.
- **Experimentos Numéricos:** onde serão apresentados os exemplos testes utilizados, tanto as entradas para os experimentos bem como tabelas e gráficos das respectivas saídas geradas pelas soluções.
- **Conclusão:** onde serão discutidos os resultados obtidos.

Os códigos fonte e o relatório devem ser enviados por e-mail para luciac@inf.ufes.br até o dia 18/06/2019. O assunto do e-mail deve ser CC191:EXE6:<nome1><nome2> em anexo, um arquivo do tipo CC191:EXE6:<nome1><nome2>.zip.