

---

# Solução estacionária da EDP de Defeitos de Radiação por métodos numéricos

**Davi Lazzari**, (232847) - Métodos Computacionais da Física C - UFRGS

---

Porto Alegre, 27 de novembro de 2015

## Trabalho

O trabalho consiste em comparar a solução da equação de difusão de Defeitos de Radiação para diferentes métodos numéricos e diferentes condições de contorno. O que se busca, mais especificamente, é comparar a solução estacionária da equação.

Equação da difusão de defeitos por radiação:

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial x^2} - S \mathbf{f} + \mathbf{s}(x) \quad (1)$$

**Condições de Contorno:**  $f_0 = 0$  e  $f_L = 0$

## Método de Thomas

O método de Thomas é um método numérico para encontrar-se uma solução na qual a transformação aplicada resulta em algo conhecido. Basicamente o que se faz é inverter uma matriz sem realmente precisar invertê-la.

Como busca-se a solução no ponto de equilíbrio, tem-se que o sistema encontra-se em um estado estacionário, logo,  $f(x + \Delta X) \approx f(x) \rightarrow \partial f / \partial x = 0$ . Assim:

$$D \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial x^2} - S \mathbf{f} + \mathbf{s}(x) = 0 \rightarrow \left( D \frac{\partial^2}{\partial x^2} - S \right) \mathbf{f} = -\mathbf{s}(x) \quad (2)$$

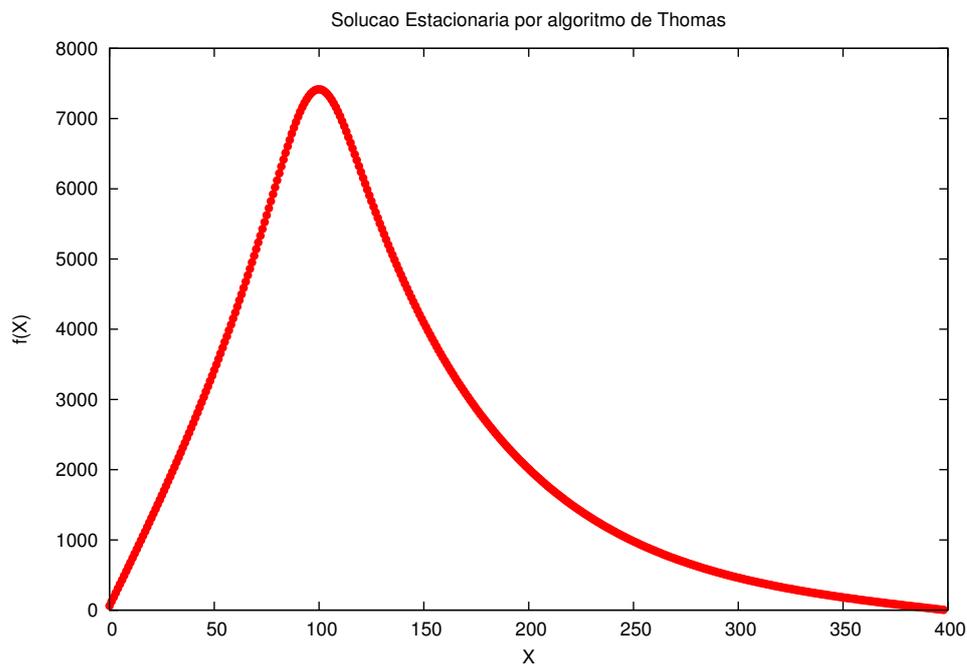
o primeiro termo da equação é um operador de derivação subtraído de um sumidouro (*sink*) aplicado em um vetor. O que se tem na verdade é o termo de fonte  $\vec{s}(\vec{x})$  que é dado por uma gaussiana. Quando abre-se o termo para o

espaço discreto, tem-se  $\partial x \rightarrow \Delta x$  e a respectiva equação (omitindo-se o termo  $-S$  e  $D$ ):

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{f(x - \Delta x, t) - 2f(x, t) + f(x + \Delta x, t)}{(\Delta x)^2} \quad (3)$$

que em forma matricial, apresenta elementos apenas na diagonal principal, na diagonal abaixo (elementos de  $x - \Delta x$ ) e na diagonal acima da principal (elementos de  $x + \Delta x$ ). Por escalonamento, resolvem-se o sistema, mantendo  $\vec{f}(\vec{x})$  como incógnita em função de  $\vec{s}(\vec{x})$ .

E a solução da EDP é apresentada na *Figura 1*.



**Figura 1:** *Solução estacionária para a equação de Difusão de Defeitos por Radiação pelo Algoritmo de Thomas*

O programa utilizado para gerar-se esta solução tem como condições para a fonte:  $s_0 = 10$ ,  $\sigma = 10$  e centrada em  $x_0 = 100$ ; para o sumidouro utilizou-se  $S = 0.0002$  em uma rede de 400 pontos.

## **Foward Time Central Space (FTCS)**

Este método baseia-se na discretização do tempo e do espaço, assim o que ele faz não é uma solução única para o caso estacionário, mas sim a evolução

temporal da solução. Discretiza-se o tempo então através do método de Euler, onde avança-se  $\Delta t$  no tempo:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} \quad (4)$$

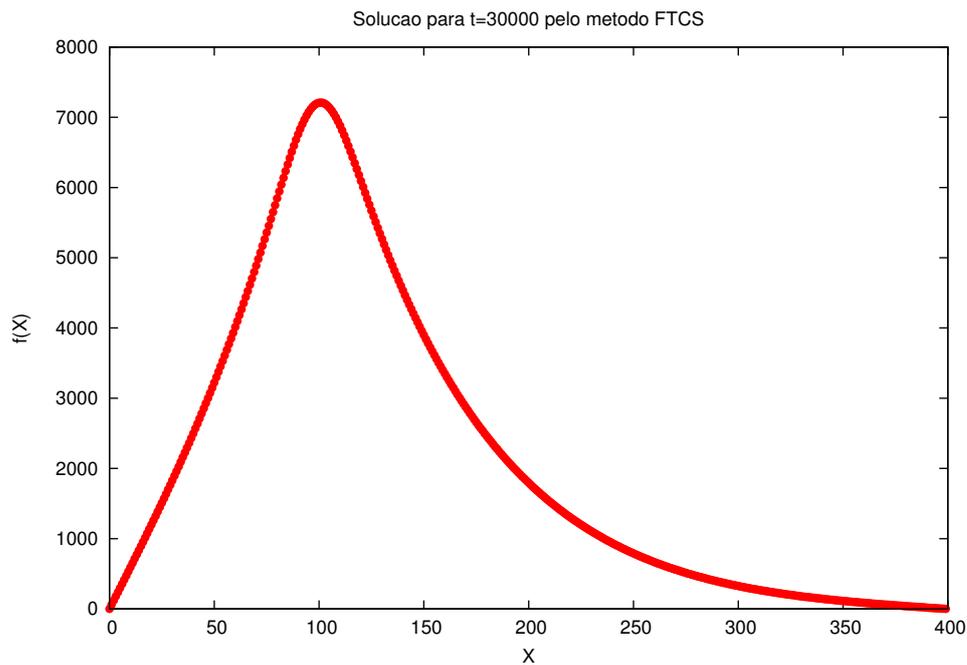
Substitui-se então as *Equações 3 e 4* na *Equação 1* e assumindo uma notação mais compacta, obtém-se:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = D \frac{f_{j-1}^n - 2f_j^n + f_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} - S\mathbf{f} + \mathbf{s}(x) \quad (5)$$

isolando-se o  $f_j^{n+1}$

$$f_j^{n+1} = f_j^n + \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} (f_{j-1}^n - 2f_j^n + f_{j+1}^n) - S\mathbf{f} + \mathbf{s}(x) \quad (6)$$

Assim, para encontrar a solução estacionária, itera-se a equação para um tempo suficientemente grande. Iterando-se para tempo igual 30000, com as condições iniciais já citadas, obtém-se então a solução da *Figura 2* que se assemelha muito com a obtida pelo método de Thomas.



**Figura 2:** Solução para a equação de Difusão de Defeitos por Radiação pelo Método FTCS para tempo = 30000 (estacionária)

## Método de Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson baseia-se em uma organização algébrica das equações, de modo a se acompanhar a evolução temporal das soluções. Obtém-se a seguinte equação:

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{E}^{-1}(\mathbf{M} \cdot \mathbf{f}^n + dt \cdot \mathbf{s}) \quad (7)$$

Onde  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{M}$  são matrizes tridiagonais bem determinadas, com seus termos constantes dependentes de  $\Delta t$ ,  $\Delta x$ ,  $D$  e  $S$ .

Nota-se então que o termo entre parenteses no lado esquerdo é um vetor, facilmente determinado pela multiplicação da matriz  $\mathbf{M}$  pelo vetor do tempo atual da iteração  $\mathbf{f}^n$  somado ao vetor de fonte. Definindo este vetor como um  $\boldsymbol{\psi}^n$ , tem-se que:

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{E}^{-1}\boldsymbol{\psi}^n \rightarrow \mathbf{E} \cdot \mathbf{f}^{n+1} = \boldsymbol{\psi}^n \quad (8)$$

como a matriz tridiagonal  $\mathbf{E}$  e o vetor  $\boldsymbol{\psi}^n$  são conhecidos, busca-se o vetor  $\mathbf{f}^{n+1}$ ; mas, observa-se ainda que a forma da equação é a mesma que fora resolvida na *Equação 2*, ou seja, pode-se resolver a partir do método de Thomas.

Infelizmente, o programa para o cálculo da equação de Difusão de Defeitos por Radiação pelo método de Crank-Nicolson não funcionou como deveria. O que se teve foi um comportamento para tempos iniciais próximo ao do método FTCS, porém, não se chegou em uma solução estacionária, o que ocorreu foi uma divergência por parte da equação.

## Análise de Estabilidade

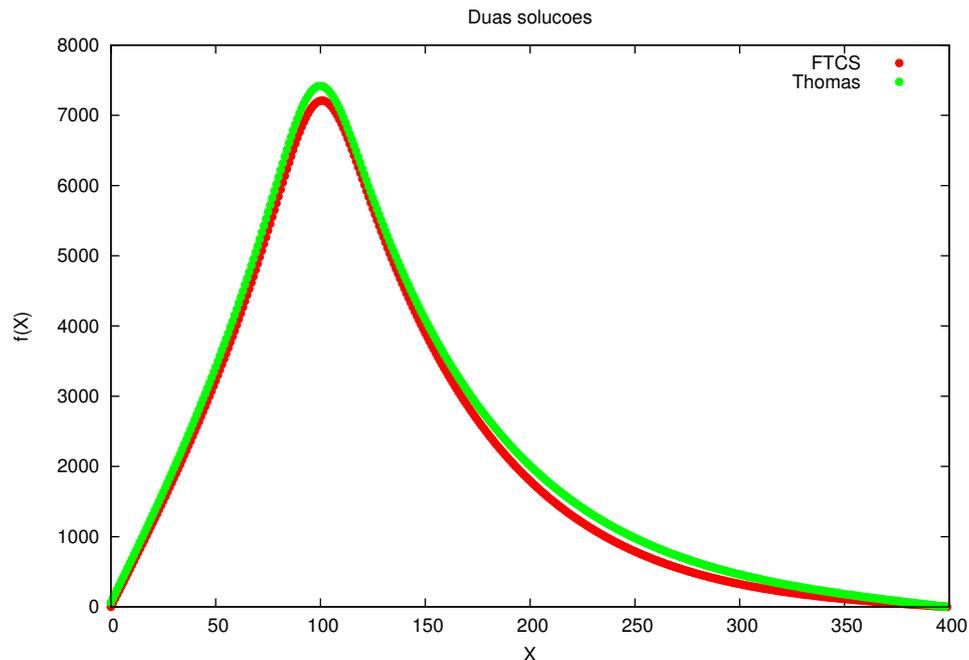
Deve-se falar em estabilidade apenas para os dois métodos que demandavam uma evolução temporal, visto que para a solução estacionária apenas uma iteração resolvia a equação.

O método FTCS é um método muito bom pela facilidade de sua implementação e pela não obrigatoriedade no uso de matrizes e principalmente na inversão delas. Entretanto, o método demanda que o termo multiplicativo  $k \equiv D\Delta t/(\Delta x)^2$  seja menor que 1/2 e assim, a amplitude do modo de fourier associado não divirja, o que determina que  $dt$  seja muito pequeno, e conseqüentemente, a convergência se dê de forma muito lenta.

Já para o método de Crank-Nicolson este problema não ocorre, ele é organizado de tal maneira em que o  $dt$  seja basicamente um parâmetro livre. Assim, por mais que se demande muito mais tempo computacional para resolver as

equações matriciais, os passos de tempo podem ser muito maiores, auxiliando numa rápida convergência do método.

Assim, pode-se comparar na *Figura 3* as duas soluções obtidas pelos dois primeiros métodos. Percebe-se que o pico da solução para o método FTCS é menor que para a obtida pelo algoritmo de Thomas, supõe-se assim que essa diferença seja devida ao tempo utilizado, não suficiente para se chegar no estado estacionário.



**Figura 3:** Tipos de organização de discos para ocupação do espaço.

## Condições de Contorno: $f_0 = f_L$

### Método de Sherman-Morrison

O método de Sherman-Morrison é um método que se aproxima do algoritmo de Thomas no sentido de funcionar para inverter uma matriz, com a grande diferença de que funciona para uma matriz qualquer, não apenas para matrizes tridiagonais.

A questão é que ao se usar condições de contorno periódicas, surgem dois

termos nas diagonais opostas da matriz, e então há de se resolver o sistema para esta nova matriz.

O algoritmo de Sherman-Morrison baseia-se na consideração de uma matriz como uma combinação de matrizes com vetores, o que seria equivalente a um método de perturbação de uma matriz. Fala-se assim até em *ranks* (ordens) de perturbação para a matriz.

Basicamente, a forma proposta pelo algoritmo é a seguinte:

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \quad (9)$$

onde  $\mathbf{u}$  e  $\mathbf{v}$  são vetores quaisquer,  $\mathbf{A}$  é uma matriz inversível e  $1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u} \neq 0$ .