

RELATÓRIO DE PESQUISA

DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MAXWELL NO CONTEXTO WAVELET

Período: **Abril a junho de 2006**

Pesquisadora: Margarete Oliveira Domingues

Instituição: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais/Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (INPE/LAC)

Local do pós-doc: , Universidade de Aveiro/Departamento de Eletrônica e Telecomunicações (UA/DETI)

Co-orientador estrangeiro: Dr. José Rocha Pereira

Projeto Principal Associado: CAPES-GRICES 142-05

Processo pós-doc: BEX0127/06-0

Sumário

1	INTRODUÇÃO	2
1.1	Estágio de desenvolvimento das atividades de pesquisa	2
1.2	Fontes e locais de desenvolvimento da pesquisa	2
1.3	Trabalhos e publicações decorrentes da pesquisa	3
1.4	Participação de seminário e outros eventos	3
1.5	Avaliação global	3
1.6	Infra-estrutura	3
2	MÉTODO SPR	3
2.1	Distribuição dos pontos por escala	4
2.2	Extensão da spr (SPRe)	4
2.3	Derivada local na SPR	5
2.4	Condição do cone	6
3	EQUAÇÕES DE MAXWELL IMPLEMENTADAS	9
3.1	Condição PEC de fronteira	9
3.2	Condição UPML+ PEC de fronteira	12
3.3	Adaptabilidade temporal	17

4	IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL	18
4.1	Código fonte	18
4.2	Avaliação da estrutura de dados para a SPR	19
4.2.1	Visualização de funções nas malhas adaptativas	19
4.2.2	Visualização de soluções da Equação de Maxwell nas malhas adaptativas	25
4.3	Região de UPML	29
5	Comentários Finais	29

1 INTRODUÇÃO

Técnicas de adaptabilidade temporal e espacial para resolução numérica de equações diferenciais parciais no contexto de análise wavelet são desenvolvidas para um modelo das Equações de Maxwell. Isso é feito no âmbito do projeto de cooperação internacional CAPES-GRICES "Estudo de Métodos Numéricos para a Resolução das Equações de Maxwell". Com essas técnicas, busca-se métodos computacionalmente eficientes e de maior aplicação a processos localizados de modelos eletrodinâmicos de interesse geral e, em especial, das Ciências Espaciais e Atmosféricas.

1.1 Estágio de desenvolvimento das atividades de pesquisa

As equações de Maxwell descrevem a evolução no tempo e no espaço de campos elétrico e magnético. Uma das maneiras mais usadas para sua simulação numérica por meio do chamado método FDTD (Finite-Difference Time-Domain) [16]. O FDTD é um esquema de diferenças finitas centradas de segunda ordem, com malhas entrelaçadas (*staggered grids*). Por se tratar de um esquema de baixa ordem, o método FDTD, para a obtenção da precisão desejada, pode requerer um refinamento excessivo das malhas entrelaçadas, o que restringe a sua aplicação, principalmente em simulações 3D. A utilização de esquemas de diferenças finitas de ordem superior, no domínio espacial, é mais vantajosa. No entanto, quando ocorrerem variações bruscas dos campos representados em pequenas regiões do domínio espacial, a introdução de estratégias adaptativas produz simulações ainda mais eficientes. Nesse sentido, investiga-se um esquema adaptativo de diferenças finitas de alta ordem, baseado em técnicas wavelet, para as equações de Maxwell conhecido como método de representação esparsa de pontos (SPR).

Neste relatório de pesquisa, apresentam-se os testes iniciais da implementação computacional do SPR bidimensional e uma primeira avaliação da performance dos algoritmos utilizados realizados no período de pós-doutoramento. Foi elaborado um código-fonte para decomposição e reconstrução da SPR e aplicação dessa técnica para as Equações de Maxwell com as condições de fronteiras UPML. Também foram iniciadas as atividades de avaliação de custo computacional do método, visualização de funções na SPR e adaptabilidade temporal.

1.2 Fontes e locais de desenvolvimento da pesquisa

O pós-doutorado foi financiado unicamente pela CAPES-GRICE. O primeiro mês do projeto foi desenvolvido no ISEL, Lisboa, com visitas frequentes a Universidade de Aveiro(UA). Nos dois meses seguintes, o projeto foi realizado no DETI/UA.

1.3 Trabalhos e publicações decorrentes da pesquisa

Um artigo foi revisado, a carta resposta foi preparado e este foi re-submetido [11]. Foi publicado um artigo sobre a visualização de funções na SPR em uma conferência [12]. Está em redação um artigo com os resultados numéricos obtidos no pós-doc [7]. Um software para evolução do modo TE das Equações de Maxwell usando as técnicas SPR foi implementado [2].

1.4 Participação de seminário e outros eventos

A pesquisadora também apresentou um seminário no IEETA/UA num workshop informal com a Universidade de S. Carlos da Espanha.

1.5 Avaliação global

Todas as etapas previstas no projeto de pós doutorado proposto foram realizadas. A pesquisadora usou seus próprios recursos computacionais para desenvolvimento da pesquisa (oriundo de seu projeto de pesquisa CNPq).

Não houve problemas na adaptação ao novo ambiente físico ou computacional. Entretanto, houve dificuldades burocráticas para a abertura da conta bancária. A carta da CAPES de apresentação não servia como justificativa para a abertura da conta-depósito. Há a necessidade de um documento equivalente ao CPF, chamado de cartão do contribuinte. Devido a mudanças da legislação recente há dificuldade de obter-se esse documento, pois há uma grande desinformação e filas de várias horas (inclusive para obter-se informações). Para o cartão de contribuinte exige-se um representante fiscal e também um comprovante de residência que é obtido somente na junta local do bairro da residência. Para esse documento exige-se duas testemunhas residentes no mesmo bairro que estejam escritas na junta (algo como o título de eleitor local) e demora alguns dias. Foram gastos aproximadamente cinco dias nessa etapa.

1.6 Infra-estrutura

A comunicação com a equipe brasileira e a equipe de Lisboa/Aveiro via "tele-conferência" feita pela internet e a presença da Dra. Gomide contribuíram para o sucesso da missão.

2 MÉTODO SPR

O método de representação esparsa de pontos é uma técnica de adaptabilidade espacial utilizada para resolução numérica de equações diferenciais parciais evolutivas cujas soluções são suaves na maior parte do domínio mas também possuem regiões não-suaves localizadas associadas a choques ou singularidades [9, 10, 1, 13]. Nessa representação são utilizados algoritmos de decomposição e reconstrução que utilizam a transformada wavelet interpolatória em multiníveis. Os coeficientes wavelets de tal transformada possuem valores mais significativos nas regiões aonde as soluções são mais irregulares. A ideia principal desse método é representar as soluções em uma malha menos refinada uniforme acrescida de um conjunto de pontos associados as posições espaciais aonde a solução apresenta as estruturas localizadas. Esse conjunto de pontos é definido por meio da eliminação dos coeficientes wavelets menores que um certo parâmetro de truncamento a ser definido. Na SPR uma função é representada apenas pelos seus valores

pontuais que estão associados a coeficientes wavelets interpolatórios significativos. Isto significa que a transformada wavelet é utilizada apenas para classificar cada ponto da grade como significativo ou não significativo.

Portanto, para representação de uma função que possui estruturas locais, passa a ser necessário apenas uma malha irregular de pontos, com mais pontos aonde os respectivos coeficientes wavelets são maiores. A representação de funções em bases interpolatórias possui as seguintes vantagens:

- Os coeficientes wavelets representam o erro de interpolação, na norma do máximo.
- Os coeficientes escalas são exatamente os valores pontuais da função representada.

Os custos computacionais do algoritmo de SPR é da ordem do número de pontos da malha irregular gerada. O processo inverso pode ser obtido interpolando cada ponto desconsiderado na representação da função dos níveis mais finos. Assim, pode-se obter a função novamente em quaisquer dos pontos da malha regular original.

Nesse tipo de representação, é mais natural utilizar métodos de diferenças finitas para a diferenciação espacial. Nesse caso, para cada ponto da SPR é calculado o operador de diferenciação pelo método de diferenças finitas centradas.

Para a utilização desse método em EDPs, em geral, também é mantida uma região de segurança entre os pontos da SPR, chamada de extensão da malha (SPRe). Nesse caso, esses pontos também são de interesse para reduzir os custos da interpolação devido a diferenciação.

Cabe ressaltar que a SPR é um método que recupera de forma rápida a função original. Além disso, quando é necessário utilizar pontos que não estão contidos nessas malhas, algoritmos de interpolação associados a malhas mais finas são utilizados.

2.1 Distribuição dos pontos por escala

O custo computacional da interpolação de pontos ausentes na SPR é função da escala em que o ponto está em relação ao nível mais refinado e se o seu stencil de interpolação está ou não presente na SPR. Em cada novo nível 3 vezes mais pontos são introduzidos na malha, assim é de se esperar que haja um número significativamente maior de pontos nas malhas mais finas, aonde se encontram as estruturas localizadas. A escolha do parâmetro de truncamento define a distribuição de pontos por escala, como pode ser observado na Figura 1. Entretanto essa escolha não altera o custo computacional de reconstrução de um ponto da SPR. A Figura 2 apresenta a distribuição de pontos na SPR por escala para o parâmetro de truncamento igual a 10^{-8} para a função pulso gaussiano e diferentes níveis de refinamento máximo L .

2.2 Extensão da spr (SPRe)

Para a evolução temporal de soluções na SPR, estende-se essa representação. Isso é feito adicionando (acrescentando), caso não existam, pontos vizinhos ao redor dos pontos da SPR. Isso é importante para o acompanhamento do deslocamento de estruturas. Na Figura 3 está esquematizado como são incluídos esses pontos para uma extensão de vizinhos no mesmo nível e no nível exatamente acima¹.

Na Tabela 1 são apresentados as percentagens de pontos que são incluídos na extensão da SPR para as funções:

¹Quando o ponto da SPR está no nível mais fino da SPR, não são incluídos vizinhos no nível exatamente acima; mas somente os do mesmo nível.

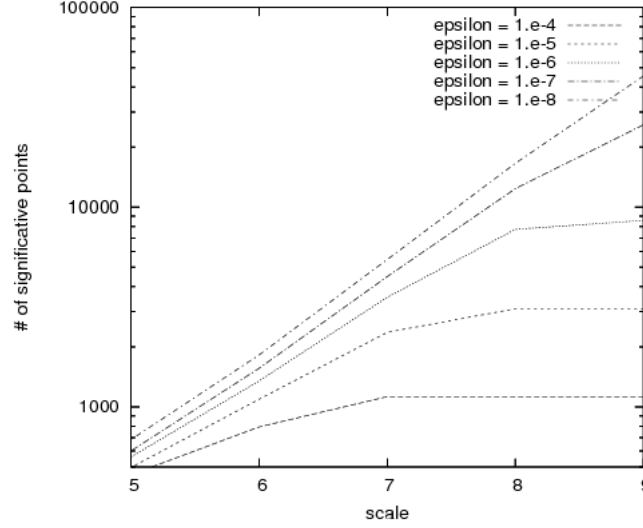


Figura 1: Distribuição de pontos por escala para diferentes parâmetros de truncamento para um nível de refinamento máximo $L = 7$, ie, uma malha de 129×129 pontos.

- a) $f(x, y) = \exp^{-150((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)}$,
- b) $f(x, y) = \exp^{-2500((x-0.3)^2 + (y-0.3)^2)} + \sin(2\pi x) + \sin(2\pi y)$ e
- c) $f(x, y) = 1 - \tanh(25x + 5y)$.

Na Figura 4, essas funções e suas respectivas SPR e SPRe são visualizadas. As SPR dessas funções possuem um número muito reduzido de pontos. Observa-se que a extensão da malha aumenta o número de pontos em relação a SPR original; embora, ainda assim, haja uma grande redução de pontos nessa representação.

Tabela 1: NÚMERO DE PONTOS UTILIZADO NA SPRe

Função	ϵ	L	ℓ_{obs}	N^2	pontos na SPR		pontos na SPRe	
					# desprezados	% utilizados	# desprezados	% utilizados
a)	10^{-04}	7	7	16641	15516	6.76041	13264	20.2933
b)	10^{-04}	7	7	16641	15866	4.65717	13620	18.154
c)	10^{-04}	7	7	16641	14198	14.6806	11385	31.5846

2.3 Derivada local na SPR

A idéia geral da introdução da derivada local é reduzir o número de operações de interpolação que são necessárias para se efetuar a derivada na escala mais fina quando o stencil de derivação não está presente. Neste caso, busca-se os vizinhos de cada ponto da SPR estendida para definir o espaçamento a ser utilizado para o stencil de derivação. Caso o espaçamento entre o ponto e os seus vizinhos, na direção da derivada que se está efetuando, seja menor que o espaçamento que esse ponto possui na sua malha de origem, esse espaçamento é usado para definir o stencil de derivação. Caso contrário, stencil de derivação é definido como sendo o stencil da malha de origem do ponto. Esse procedimento não aumenta o erro da operação de diferenciação e melhora o desempenho computacional do algoritmo.

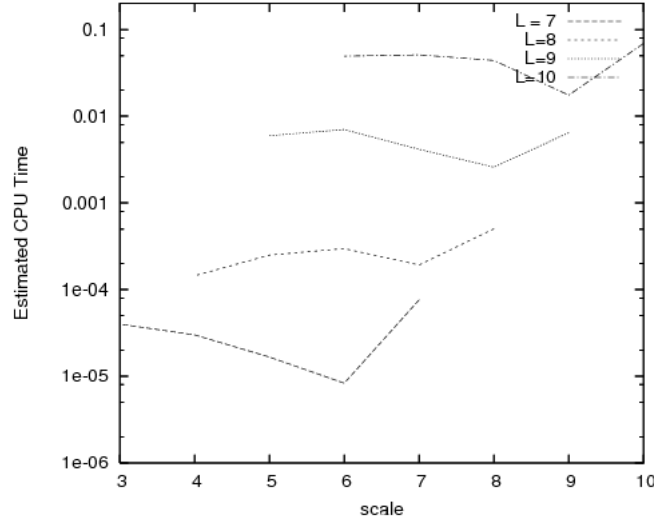


Figura 2: Estimativa do custo computacional (CPU time) de reconstrução de um ponto da SPR em diferentes níveis de escala, para diferentes níveis de refinamento máximo L e para o parâmetro de truncamento 10^{-8} .

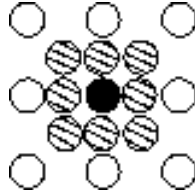


Figura 3: Esquema de inclusão de vizinhos para a extensão de um ponto na SPR. O ponto da SPR está representado pelo círculo preenchido, os vizinhos no mesmo nível pelos círculos sem preenchimento e os do nível exatamente acima pelos círculos hachurados.

2.4 Condição do cone

A condição do cone é descrita em detalhes em [7]. Impondo-se essa condição, para cada valor da função f representados na SPRe são interpolados novos valores, caso esses não existam. O que é feito da seguinte forma :

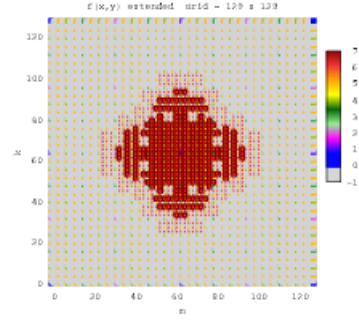
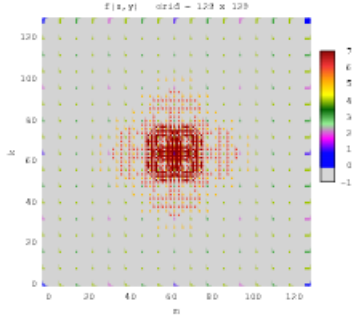
- se $f(2k+1, 2m)$ está presente na SPRe, incluem-se, então, os pontos $f(2k, 2m)$ e $f(2k+2, 2m)$, casos os últimos não estejam presentes;
- se $f(2k, 2m+1)$ está presente na SPRe, incluem-se, então, os pontos $f(2k, 2m)$ e $f(2k, 2m+2)$, casos os últimos não estejam presentes;
- se $f(2k+1, 2m+1)$ está presente na SPRe, incluem-se, então, os pontos $f(2k, 2m)$, $f(2k, 2m+2)$, $f(2k+2, 2m)$ e $f(2k+2, 2m+2)$, casos os últimos não estejam presentes.

São apresentados, a seguir, o efeito da inclusão da condição do cone após a extensão da malha e qual a redução do erro obtido na derivada neste caso. Na Tabela 2 são apresentados três exemplos do erro da derivada da função $f(x, y) = \exp^{-150((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)}$ usando a SPR, a SPRe, a SPR com a condição do cone e a SPRe com a condição do cone, para uma matriz 129×129 (16641 elements) e um parâmetro de truncamento de 10^{-04} . Para o caso da utilização do stencil de derivação na malha mais fina, o erro L_∞ é igual 0.019006.

$$a) f(x, y) = \exp^{-150((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)}$$

grid SPR

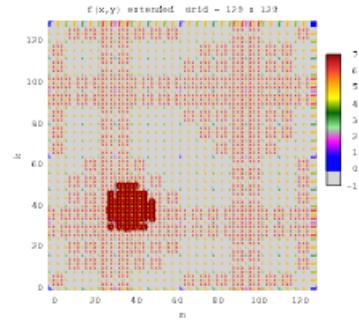
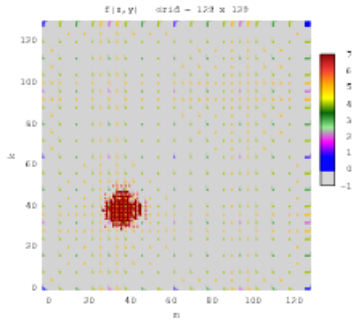
grid SPR estendida



$$b) f(x, y) = \exp^{-2500((x-0.3)^2 + (y-0.3)^2)} + \sin(2\pi x) + \sin(2\pi y)$$

grid SPR

grid SPR estendida



$$c) f(x, y) = 1 - \tanh(25x + 5y)$$

grid SPR

grid SPR estendida

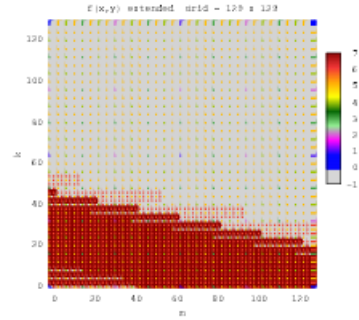
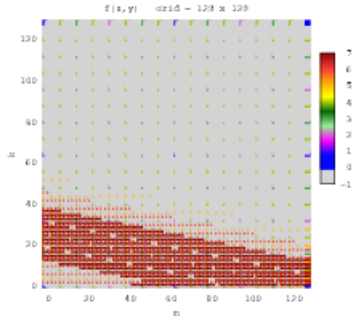
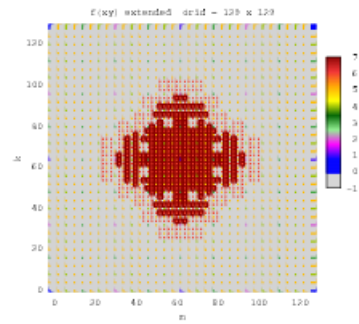
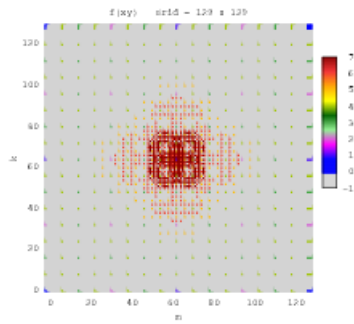


Figura 4: Visualização de funções e suas respectivas representações SPR e SPR estendida. As cores indicam a qual nível o correspondente ponto pertence. O valor 7 corresponde ao nível mais refinado nesta representação.

$$a) f(x, y) = \exp^{-150((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)}$$

SPR

SPRe



SPR + condição do cone

SPRe + condição do cone

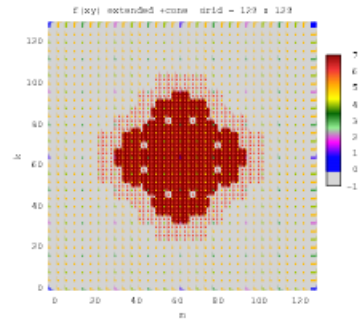
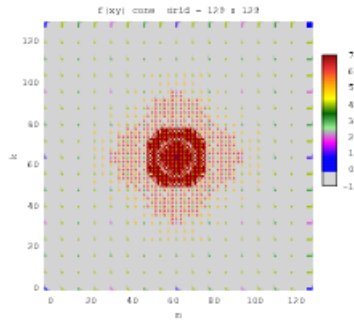


Tabela 2: ERRO NA DERIVADA DA FUNÇÃO PULSO GAUSSIANO

Método	#pontos desprezados	% pontos utilizados	Error L_∞
SPR	15516	6.7	0.078
SPRe	13264	20.29	0.019006
SPR + condição do cone	15192	8.7	0.019006
SPRe + condição do cone	12864	44.23	0.019006

3 EQUAÇÕES DE MAXWELL IMPLEMENTADAS

A formulação geral das equações de Maxwell são expressas em coordenadas cartesianas por

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} &= \nabla \times \mathbf{E} \\ \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \nabla \times \mathbf{H} \end{aligned}$$

em que

- $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$ é o vetor campo elétrico (em volts/metro),
- $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$ é o vetor campo magnético (em henry),
- ϵ é a permissividade elétrica e μ é a permeabilidade magnética.

t é o tempo, e $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$.

No modelo TE [17], que é utilizado nas simulações descritas a seguir, têm-se que

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial x} + \sigma E_y \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) - \rho' H_z \quad (3)$$

em que E_x é simétrica nas fronteiras superior e inferior, E_y é anti-simétrica nas laterais direita e esquerda, $\frac{\partial E_y}{\partial x}$ é simétrica, $\frac{\partial E_x}{\partial y}$ é anti-simétrica, $\frac{\partial H_z}{\partial y}$, $\frac{\partial H_z}{\partial x}$ são simétricas, σ é a condutividade elétrica (ohm/metro) e ρ' é designado como um equivalente a uma condutividade magnética (siemens/metro).

3.1 Condição PEC de fronteira

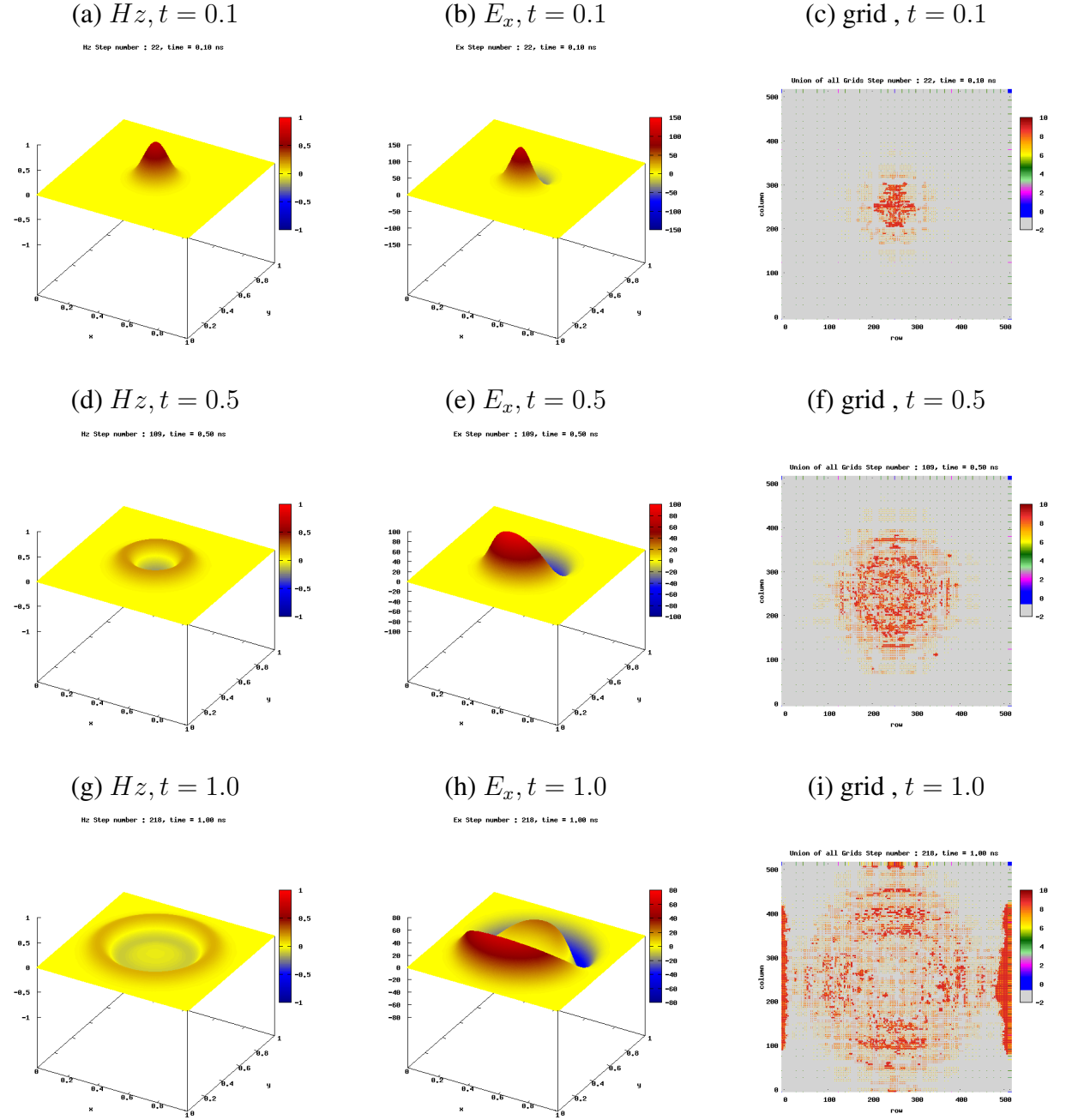
A condição de fronteira PEC impõe que as componentes tangenciais do campo elétrico sejam zero nas fronteiras, i. e.,

$$E_y(0, y, t) = E_y(1, y, t) = 0, \quad (4)$$

e

$$E_x(x, 0, t) = E_x(x, 1, t) = 0. \quad (5)$$

Este modelo foi implementado utilizando a condição PEC de fronteira. Na Figura 5 é apresentada a evolução temporal da solução para as variáveis E_x e H_z utilizando as condições de fronteira PEC. Foram usados parâmetros de truncamento 10^{-02} e 10^{-04} para o campo elétrico e magnético respectivamente, na SPR. Estão também representados os pontos na malha adaptativa utilizada para a evolução temporal. Essa malha adaptativa é a união das malhas SPRe das três variáveis.



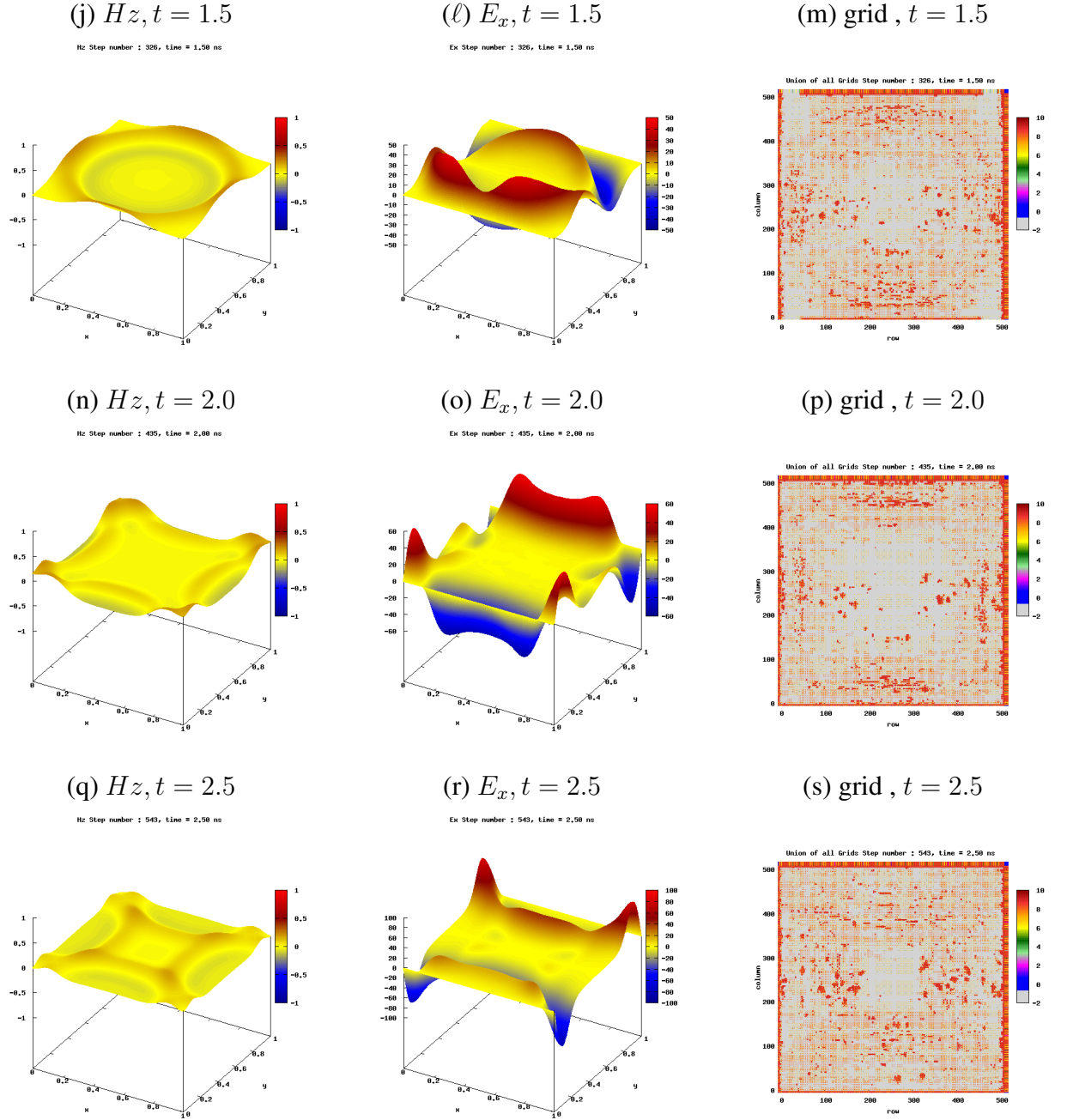


Figura 5: Evolução temporal da solução do modo TE das equações de Maxwel com condição de fronteira PEC usando malhas adaptativas 513×513 , com limiares de truncamento 0.001 para H_z e 0.01 para E_x e E_y . O CFL utilizado é 0.707. São apresentadas a solução para H_z , a solução para E_x e a visualização esquemática por níveis da malha adaptativa.

Na Figura 6 é apresentada a evolução temporal dos pontos significativos na simulação do modo TE usando a condição de fronteira PEC para malhas 257×257 e 513×513 . Observa-se que há um aumento dos pontos significativos a medida que há a reflexão das ondas da solução. Esse aumento de pontos é mais claro na malha 257×257 .

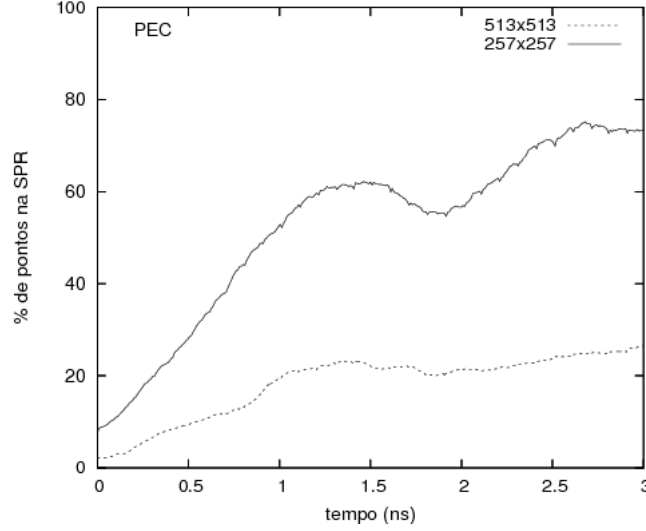


Figura 6: Evolução temporal dos pontos significativos na simulação do modo TE usando a condição de fronteira PEC.

3.2 Condição UPML+ PEC de fronteira

O modelo TE foi implementado na representação SPR utilizando a condição UPML + PEC de fronteira, como descrito em detalhes em [7]. Na Figura 7 é apresentado um esquema da malha de discretização utilizando a técnica de PML. Neste caso uma região de absorção evita que as ondas sejam refletidas para o interior do domínio.

A evolução temporal na região da UPML é realizada em duas etapas. Na primeira faz-se a evolução temporal do seguinte sistema

$$\begin{aligned} \frac{\partial \kappa^x B_z}{\partial t} + \frac{\sigma^x}{\epsilon_0} B_z &= \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial \kappa^y D_x}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon_0} D_x &= \frac{\partial H_z}{\partial y} \\ \frac{\partial D_y}{\partial t} &= - \frac{\partial H_z}{\partial x} \end{aligned} \quad (6)$$

e na segunda etapa faz-se a atualização de H_z , E_x e E_y ,

$$\begin{aligned} \mu_0 \mu_r \left(\frac{\partial \kappa^y H_z}{\partial t} + \frac{\sigma^y}{\epsilon_0} H_z \right) &= \frac{\partial B_z}{\partial t} \\ \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{\partial \kappa^x D_x}{\partial t} + \frac{\sigma^x}{\epsilon_0} D_x \\ \epsilon_0 \epsilon_r \left(\kappa^x \frac{\partial E_y}{\partial t} + \frac{\sigma^x}{\epsilon_0} E_y \right) &= \frac{\partial \kappa^y D_y}{\partial t} + \frac{\sigma^y}{\epsilon_0} D_x \end{aligned} \quad (7)$$

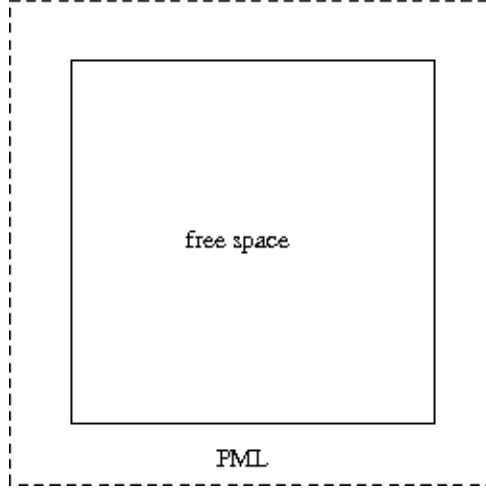


Figura 7: Esquema da região da PML.

Na região do espaço livre (ou seja, na condição de vácuo), têm-se que

$$D_x = \epsilon_0 E_x, \quad D_y = \epsilon_0 E_y, \quad B_z = \epsilon_0 H_z, \quad (8)$$

assumindo que $\epsilon_r = \mu_r = 1$, $\sigma^x = \sigma^y = 0$ e $\kappa^x = \kappa^y = 1$. Na região de PML, σ deve ser uma função crescente de zero a um valor σ_{max} .

Na Figura 8 é apresentada a evolução temporal da solução para as variáveis E_x e H_z utilizando as condições de fronteira UPML+PEC, sendo:

$$\sigma(\rho) = \sigma_{max} \left(\frac{\rho}{\gamma} \right)^q$$

em que

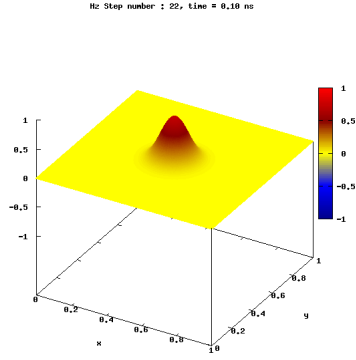
$$\sigma_{max} = \frac{q+1}{150\pi\sqrt{\epsilon_r}ds},$$

q é a ordem de decaimento da condutividade na PML e $ds = dx$ ou dy é o espaçamento local da malha. O parâmetro $\kappa = \kappa^x = \kappa^y = 1$ no vácuo e $\kappa = \kappa_{max} \geq 1$ na fronteira PEC do domínio. O crescimento de κ na PML é dado por

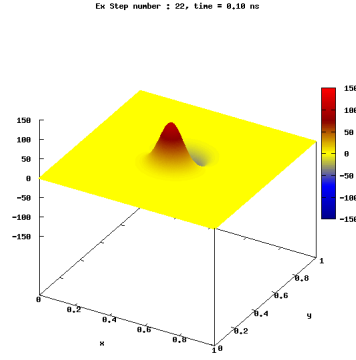
$$\kappa(\rho) = 1 + (\kappa_{max} - 1) \left(\frac{\rho}{\gamma} \right)^q.$$

Nas simulações é utilizado $q = 4$ e $\kappa_{max} = 1$ e parâmetros de truncamento 10^{-02} e 10^{-04} para o campo elétrico e magnético respectivamente, na SPR. Estão também representados os pontos na malha adaptativa utilizada para a evolução temporal. Essa malha adaptativa é a união das malhas SPRe das três variáveis.

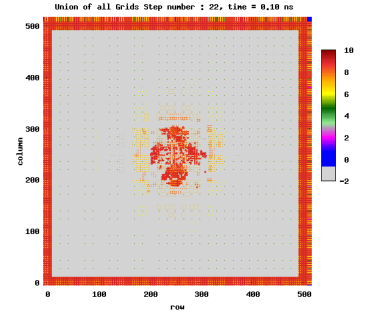
(a) $H_z, t = 0.1$



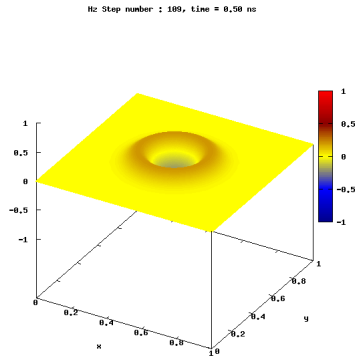
(b) $E_x, t = 0.1$



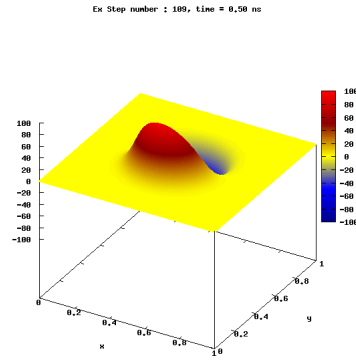
(c) grid, $t = 0.1$



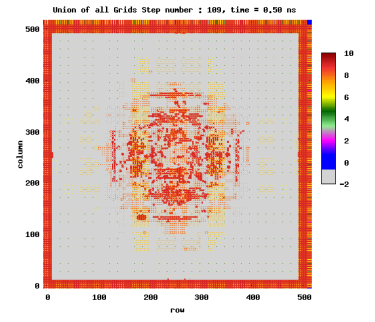
(d) $H_z, t = 0.5$



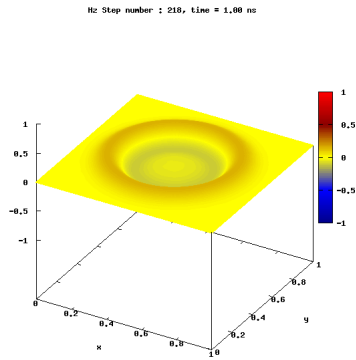
(e) $E_x, t = 0.5$



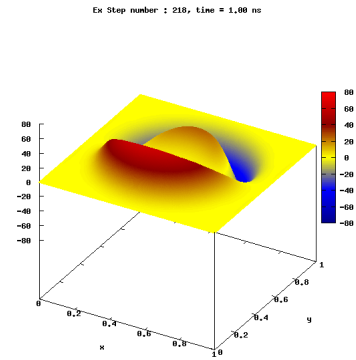
(f) grid, $t = 0.5$



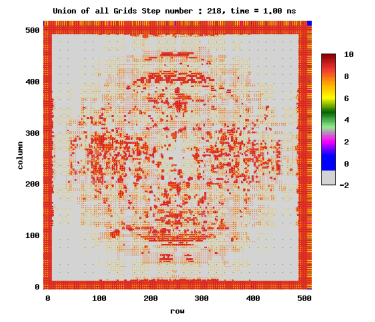
(g) $H_z, t = 1.0$



(h) $E_x, t = 1.0$



(i) grid, $t = 1.0$



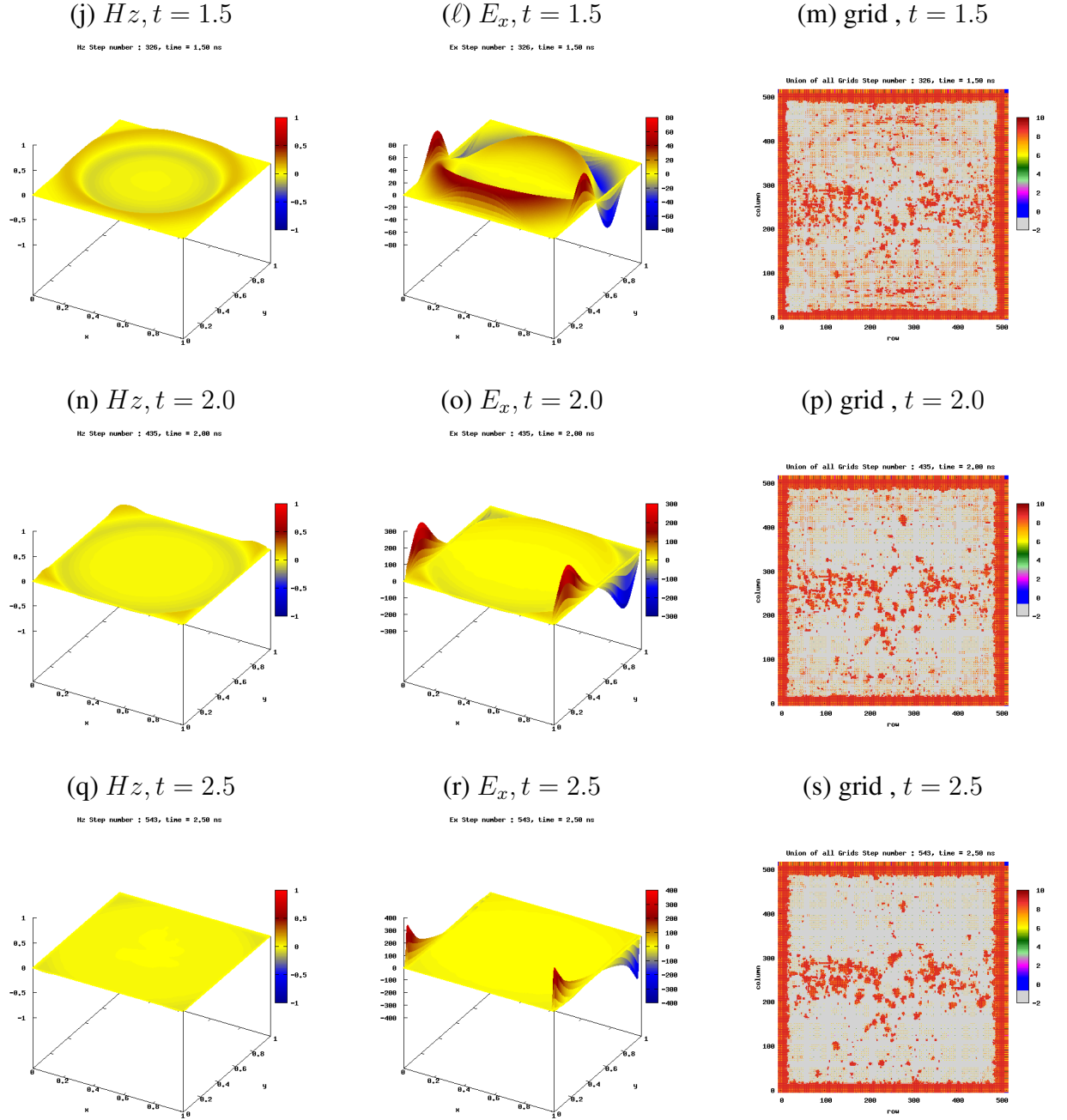


Figura 8: Evolução temporal da solução do modo TE das equações de Maxwell com condição de fronteira UPML+PEC usando malhas adaptativas 513×513 , com limiares de truncamento 0.001 para H_z e 0.01 para E_x e E_y . O CFL utilizado é 0.707. São apresentadas a solução para H_z , a solução para E_x e a visualização esquemática por níveis da malha adaptativa.

Na Figura 9 é apresentada a evolução temporal dos pontos significativos na simulação do modo TE usando a condição de fronteira UPML+PEC para malhas 257×257 e 513×513 . Observa-se que há uma redução dos pontos significativos a medida que a PML absorve as ondas da solução. Essa redução de pontos é mais clara na malha 257×257 .

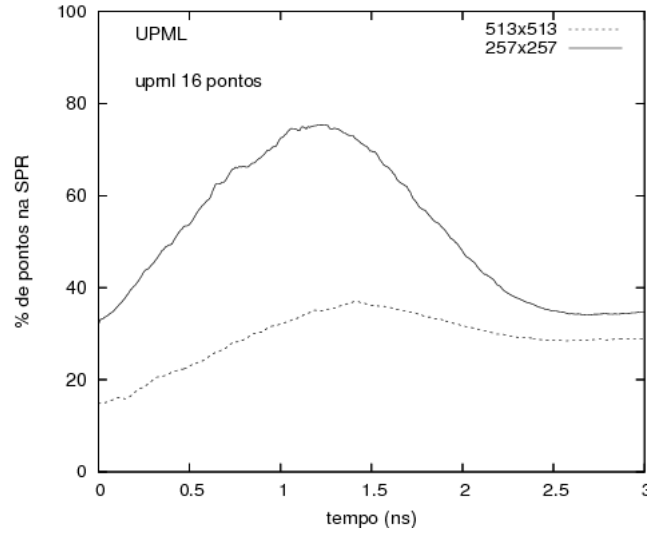


Figura 9: Evolução temporal dos pontos significativos na simulação do modo TE usando a condição de fronteira UPML+PEC.

Comparando duas evoluções temporais dos pontos significativos em simulações do modo TE usando condição de fronteira UPML+PEC e PEC para malhas 257×257 , observa-se que há uma redução dos pontos significativos a medida que a PML absorve as ondas da solução para o caso UPML+PEC e um contínuo aumento de pontos na condição PEC a medida que a fronteira é atingida (Figura 10).

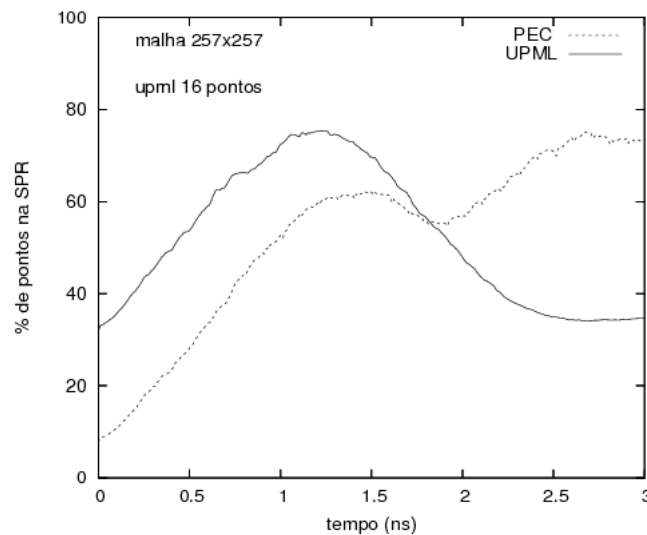


Figura 10: Duas evoluções temporais dos pontos significativos em simulações do modo TE usando condição de fronteira UPML+PEC e PEC.

3.3 Adaptabilidade temporal

Para o modelo TE com condições de fronteira PEC utilizou-se também o método de Runge Kutta Fehlberg com os coeficientes de Cash e Karp de ordem 4(5) para uma adaptabilidade temporal. Maiores detalhes desse tipo de abordagem podem ser obtidos de [3, 14].

Há várias formas de se introduzir a adaptabilidade temporal num esquema explícito. Foi utilizado uma extensão do método de Runge-Kutta-Fehlberg (RKF) para EDP [3, 6]. A idéia básica é usar dois esquemas Runge-Kutta que sejam criados pelas mesmas funções mas possuam ordens diferentes. A comparação de ambos resulta no erro de truncamento que é então utilizado como um controlador do erro local ao se alterar o passo de tempo. Em meados da década de 60, Fehlberg foi o primeiro a propor esse método. Ele propôs um método de quinta ordem cuja a função gerada também poderia obter um esquema de ordem quatro [4, 5, 15].

Usando a notação usual de EDO, é considerado $\frac{du}{dt} = D(t, u)$ nas seqüência. Para as fórmulas de Runge-Kutta de ordem $p-1$

$$\tilde{u}^{m+1} = \tilde{u}^m + \sum_{i=1}^p \tilde{b}_i \kappa_i + \mathcal{O}((\Delta t)^p) \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \Delta t D(c_1 \Delta t, \tilde{u}^m) \\ \kappa_2 &= \Delta t D(c_2 \Delta t, \tilde{u}^m + a_{21} \kappa_1) \\ &\dots \\ \kappa_p &= \Delta t D(c_p \Delta t, \tilde{u}^m + a_{p1} \kappa_1 + \dots + \tilde{u}^m + a_{pp-1} \kappa_{p-1}) \end{aligned} \quad (10)$$

Então para o método RKF, usam-se dois métodos de Runge-Kutta: um de ordem p ,

$$\hat{u}^{m+1} = \hat{u}^m + \sum_{i=1}^{p+1} \hat{b}_i \kappa_i + \mathcal{O}((\Delta t)^{p+1}) \quad (11)$$

e outro de ordem $p-1$, gerando $\tilde{u}^{m+1}$ (eq. 9). O erro de truncamento é então descrito como:

$$\delta_{old} := \hat{u}^{m+1} - \tilde{u}^{m+1} = \sum_{i=1}^p \left(\hat{b}_i - \tilde{b}_i \right) \kappa_i, \quad (12)$$

Pela construção do método, δ_{old} é proporcional a $(\Delta t)^p$. Usando um passo de tempo Δt_{old} , um erro δ_{old} é produzido e, similarmente, um novo passo de tempo Δt_{new} produz um erro $\delta_{desired}$. Dessa forma ambos estão relacionados da seguinte forma:

$$\frac{\Delta t_{new}}{\Delta t_{old}} = \left| \frac{\delta_{desired}}{\delta_{old}} \right|^{1/p}$$

logo,

- se $\delta_{old} < \delta_{desired}$, então o passo de tempo pode ser aumentado;
- se $\delta_{old} \geq \delta_{desired}$, então o passo de tempo deve ser reduzido .

Esse procedimento permite ajustar automaticamente o passo de tempo de acordo com a precisão desejada. Dois aspectos precisam ser observados nesse método: o primeiro deles é que $(\Delta t)_{new}$ deve crescer lentamente para manter a precisão desejada ao longo do tempo; o outro é que em EDP normalmente não há como guardar a solução anterior para um possível

recomeço por questões de memória. Nesse sentido, um fator de segurança ($\mathcal{S}$) para limitar o crescimento da solução é introduzido. Assim, $(\Delta t)_{new}$ é escolhido tal que

$$-\frac{\mathcal{S}}{2} \leq \frac{(\Delta t)_{new} - (\Delta t)_{old}}{(\Delta t)_{old}} \leq \frac{\mathcal{S}}{2}$$

Para evitar que uma má escolha dos parâmetros de estabilidade da EDP faça com que se perca muito tempo de CPU, nos passos iniciais um decaimento exponencial é introduzido $\mathcal{S} = \mathcal{S}(t)$, i.e.,

$$\mathcal{S}(t) = (\mathcal{S}_0 - \mathcal{S}_{min}) \exp\left(-\frac{t}{\Delta t}\right) + \mathcal{S}_{min}.$$

Isso significa que é permitido uma variação de 10% do passo de tempo nos primeiros passos e depois de alguns poucos passos apenas 1% da variação é permitida.

Na Figura 11 é apresentada a variação do passo de tempo obtido pela adaptabilidade temporal RKF 4(5), usando os coeficientes de Cash e Karp numa simulação do modo TE usando a técnica SPR com condição de fronteira PEC. Neste exemplo, no início da simulação há uma escolha não adequada de passo de tempo que vai sendo corrigida no transcorrer da evolução temporal.

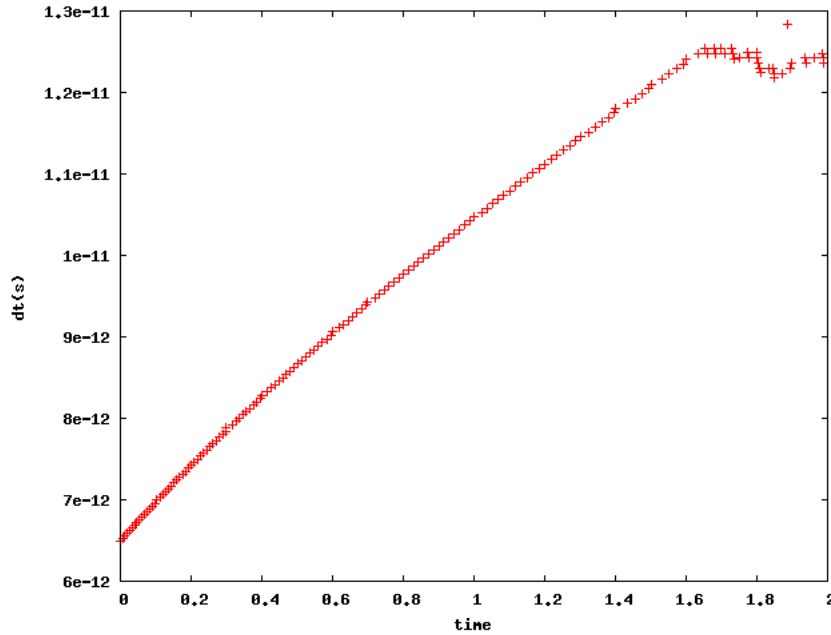


Figura 11: Variação do passo de tempo no decorrer da simulação do modo TE para o método RKF 4(5), usando os coeficientes de Cash e Karp para uma malha 257×257 .

4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

4.1 Código fonte

O código fonte para decomposição e reconstrução da SPR e aplicação dessa técnica para EDPs foi reestruturado da linguagem C para a linguagem C^{++}/OOP e a biblioteca BLITZ++. Esta reestruturação visa facilitar uma futura estrutura de dados baseada na STL/C++. Com essa

reestruturação foi possível ampliar o tamanho das malhas mais refinadas e com isso avaliar melhor o potencial desse método. Além da reestruturação do código foram incluídas as seguintes funções:

- cálculo da escala local do ponto;
- tratamento de fronteiras rígidas na decomposição SPR;
- tratamento diferenciado para a interpolação de um ponto e para a reconstrução da malha toda;
- implementação do método de Runge Kutta de 4a. ordem para a evolução temporal das Equações de Maxwell, para Maxwell com PEC e com UPML;
- implementação do método de Runge Kutta Fehlberg 4(5) para a evolução temporal das Equações de Maxwell com PEC;
- implementação da derivada na escala local;
- implementação de funções para uma estimativa de custo de CPU.
- função de visualização da grade da SPR;
- função de visualização da grade da SPR com a escala local do ponto;
- função de avaliação do número de pontos utilizados na representação SPR;
- leitura de dados externos para a condição inicial ou função a ser decomposta na SPR;
- função de inclusão da condição do cone.

Foram também incluídos um sistema de revisão de versão para o código fonte (CVS), criados um projeto KDE para a compilação e depuração do código e um sistema de documentação (doxygen). Um manual de referência do programa implementado também foi redigido e encontra-se em anexo.

4.2 Avaliação da estrutura de dados para a SPR

Para avaliação das estratégias de otimização e escolha das estruturas de dados do método SPR a seguir são apresentadas várias soluções de interesse e sua representação esparsa associada.

4.2.1 Visualização de funções nas malhas adaptativas

Nesta seção são estudadas as representações de funções analisando-se as relações entre o grau de esparsidade, estrutura multinível da representação e o parâmetro de truncamento. Este estudo faz parte do trabalho apresentado em [12].

Nas Figuras 12, 13 e 14 são apresentadas visualizações tridimensionais de três funções que apresentam estruturas localizadas e a representação dos pontos das malhas adaptativas bidimensionais, com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento $\epsilon = 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}$, referentes a uma malha regular de 1025×1025 pontos.

Pulso Gaussiano Na Figura 12 está representado graficamente a função tipo pulso gaussiano suave

$$f(x, y) = 3 \exp^{-150((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)}, \quad (13)$$

em que se percebe a localização da singularidade em torno do ponto $(0.5, 0.5)$. Na Figura 13 é apresentada a visualização 3D da função tipo pulso gaussiano bem localizada

$$f(x, y) = \exp^{-2500((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)} + \text{sen}(2\pi x) + \text{sen}(2\pi y), \quad (14)$$

em que se percebe uma localização espacial em torno do ponto $(0.5, 0.5)$.

Na Tabela 3 estão apresentados os valores das reduções do número de pontos utilizado na SPR para diferentes parâmetros truncamento em uma malhas regulares de 33×33 até 4097×4097 pontos. Observa-se nessa tabela que para as malhas mais refinadas 1, 5% ou menos dos coeficientes são necessários na representação esparsa. O nível máximo da decomposição L_{max} é atingido para todos os valores de truncamento analisados no caso da função tipo gaussiana bem localizada com a função seno. No caso da função tipo *pulso* gaussiano suave, a representação da função não necessitaria uma malha tão refinada quanto a utilizada, pois o nível máximo de decomposição não atingiu a resolução da malha mais refinada utilizada.

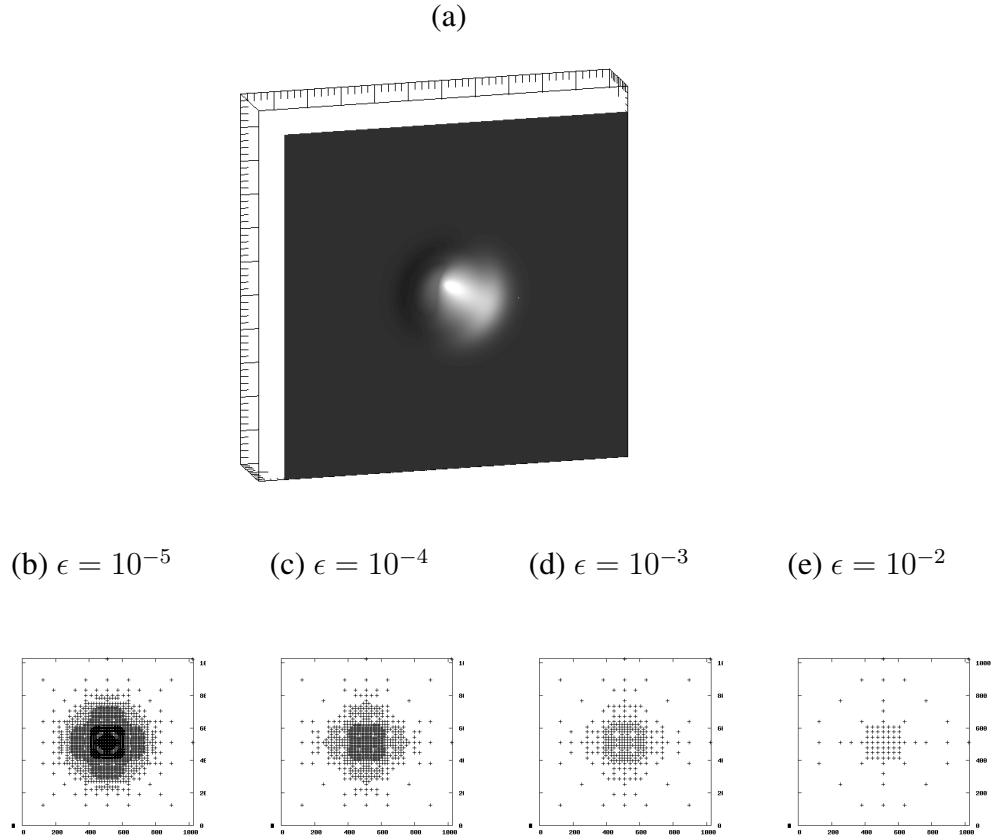


Figura 12: (a) Visualização 3D da função tipo *pulso* gaussiano suave (vista frontal). (b, c, d, e) Pontos das malhas adaptativas que representam esta função com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento ϵ , referentes a uma malha regular de 1025×1025 pontos.

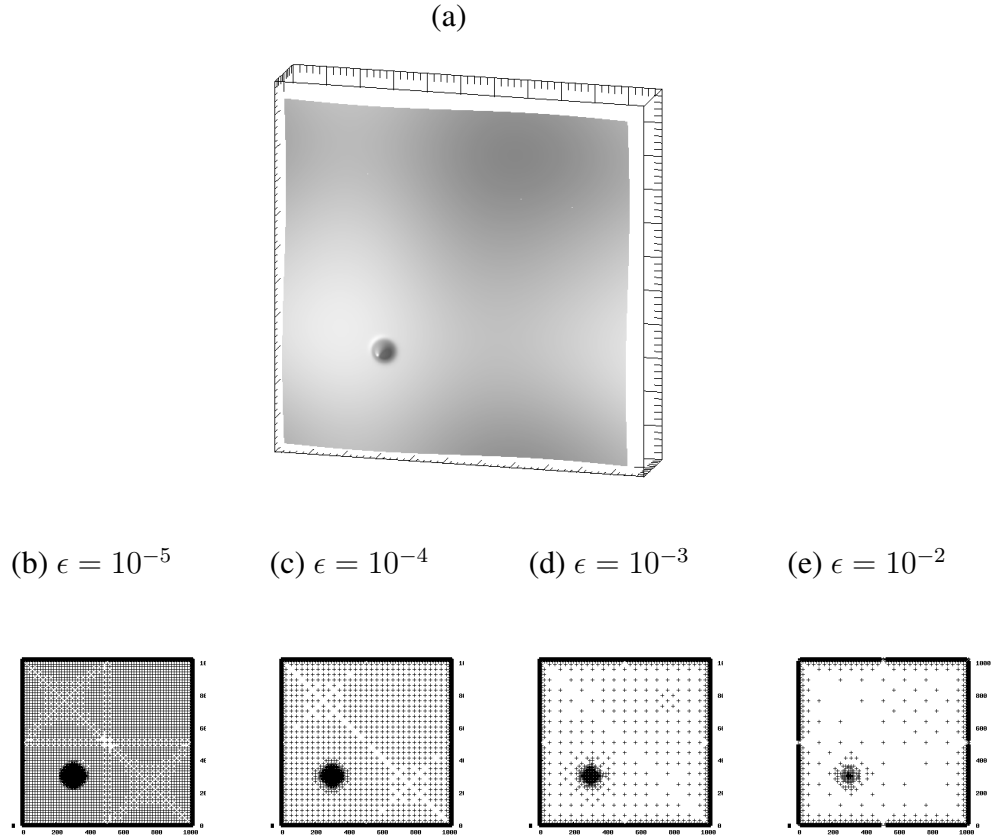


Figura 13: (a) Visualização 3D da função tipo *pulso* gaussiano bem localizado (vista frontal). (b, c, d, e) Pontos das malhas adaptativas que representam esta função com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento ϵ , referentes a uma malha regular de 1025×1025 pontos.

Tabela 3: NÚMERO DE PONTOS UTILIZADO NA SPR PARA A FUNÇÃO GAUSS/SIN

ϵ	L	L_{max}	N^2	$\#NAN$	$\%NotNAN$	RMS
10^{-01}	5	5	1089	1055	3.1	0.0246591
10^{-02}	5	5	1089	991	9.0	0.00610137
10^{-03}	5	5	1089	841	22.8	0.00045333
10^{-04}	5	5	1089	651	40.2	0.000173524
10^{-05}	5	5	1089	66	93.9	1.43332e-05
10^{-01}	6	6	4225	4185	0.95	0.0266
10^{-02}	6	6	4225	4095	3.1	0.00660851
10^{-03}	6	6	4225	3924	7.1	0.000469282
10^{-04}	6	6	4225	3653	13.5	0.001476179
10^{-05}	6	6	4225	2948	30.2	1.38258e-05
10^{-01}	7	7	16641	16601	0.2	0.0278639
10^{-02}	7	7	16641	16477	1.0	0.00689039
10^{-03}	7	7	16641	16244	2.4	0.00304157
10^{-04}	7	7	16641	15870	4.6	0.000273405
10^{-05}	7	7	16641	15142	9.0	1.3908e-05
10^{-01}	8	8	66049	66009	0.1	0.0281158
10^{-02}	8	8	66049	65887	0.2	0.00701885
10^{-03}	8	8	66049	65537	0.8	0.00310337
10^{-04}	8	8	66049	64910	1.7	0.000277727
10^{-05}	8	8	66049	63982	3.1	7.84892e-05
10^{-01}	9	9	263169	263129	0.02	0.0282762
10^{-02}	9	9	263169	263008	0.06	0.00708661
10^{-03}	9	9	263169	262664	0.2	0.00313455
10^{-04}	9	9	263169	261698	0.6	0.000279936
10^{-05}	9	9	263169	259860	1.3	0.000111105
10^{-01}	10	10	1050625	1050586	0.004	0.0283777
10^{-02}	10	10	1050625	1050460	0.02	0.00712165
10^{-03}	10	10	1050625	1050121	0.05	0.0031503
10^{-04}	10	10	1050625	1049136	0.14	0.000281117
10^{-05}	10	10	1050625	1046526	0.4	0.000144916

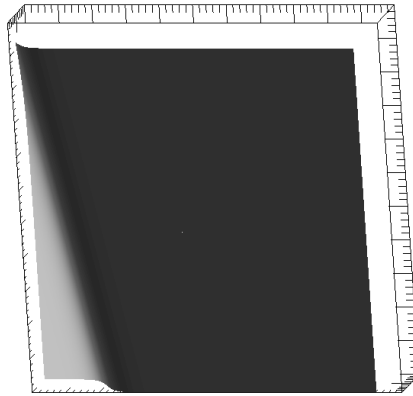
Frente Oblíqua Na Figura 14 é apresentada uma representação 3D da função tipo frente oblíqua

$$f(x, y) = 1 - \tanh(25x + 5y). \quad (15)$$

Observa-se nessas figuras que os pontos nas malhas adaptativas estão concentrados nas regiões aonde a função apresenta a frente..

Na Tabela 4 estão apresentados os valores das reduções do número de pontos utilizado na SPR para diferentes parâmetros truncamento em uma malhas regulares de 33×33 até 4097×4097 pontos. Observa-se nessa tabela que para as malhas mais refinadas 2% ou menos dos coeficientes são necessários na representação esparsa. O nível máximo da decomposição L_{max} é atingido para todos os valores de truncamento.

(a)



(b) $\epsilon = 10^{-5}$

(c) $\epsilon = 10^{-4}$

(d) $\epsilon = 10^{-3}$

(e) $\epsilon = 10^{-2}$

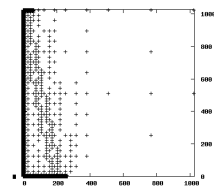
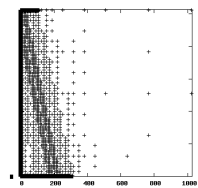
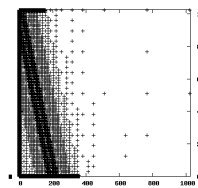
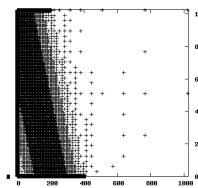


Figura 14: (a) Visualização 3D da função tipo frente oblíqua (vista frontal). (b, c, d, e) Pontos das malhas adaptativas que representam esta função com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento ϵ , referentes a uma malha regular de 1025×1025 pontos.

Tabela 4: NÚMERO DE PONTOS UTILIZADO NA SPR PARA A FRENTE OBLÍQUA.

ϵ	L	L_{max}	N^2	$\#NAN$	$\%NotNAN$	RMS
10^{-01}	5	5	1089	993	8.8	0.0260291
10^{-02}	5	5	1089	877	19.5	0.00171374
10^{-03}	5	5	1089	820	24.7	0.000168414
10^{-04}	5	5	1089	741	31.9	6.039×10^{-06}
10^{-05}	5	5	1089	667	38.8	1.05562×10^{-06}
10^{-01}	6	6	4225	4124	2.39	0.0286898
10^{-02}	6	6	4225	3880	8.2	0.00183829
10^{-03}	6	6	4225	3542	16.2	0.000151176
10^{-04}	6	6	4225	3342	20.9	5.36269×10^{-05}
10^{-05}	6	6	4225	3080	27.1	1.9479×10^{-06}
10^{-01}	7	7	16641	16540	0.6	0.0293937
10^{-02}	7	7	16641	16296	2.1	0.00174386
10^{-03}	7	7	16641	15512	6.8	0.000233705
10^{-04}	7	7	16641	14335	13.8	4.8435×10^{-05}
10^{-05}	7	7	16641	13469	19.1	1.90126×10^{-06}
10^{-01}	8	8	66049	65947	0.2	0.0289166
10^{-02}	8	8	66049	65705	0.5	0.00203484
10^{-03}	8	8	66049	64937	1.7	0.000222775
10^{-04}	8	8	66049	62593	5.2	4.67146×10^{-05}
10^{-05}	8	8	66049	58074	12.1	2.0667×10^{-06}
10^{-01}	9	9	263169	263067	0.04	0.0290304
10^{-02}	9	9	263169	262826	0.1	0.00200811
10^{-03}	9	9	263169	262054	0.4	0.000219618
10^{-04}	9	9	263169	259727	1.3	4.55498×10^{-05}
10^{-05}	9	9	263169	255095	3.1	2.32409×10^{-06}
10^{-01}	10	10	1050625	1050523	0.01	0.0290922
10^{-02}	10	10	1050625	1050275	0.03	0.00194528
10^{-03}	10	10	1050625	1049500	0.1	0.000237638
10^{-04}	10	10	1050625	1047182	0.3	4.48943×10^{-05}
10^{-05}	10	10	1050625	1042574	0.8	2.33859×10^{-06}
10^{-01}	11	11	4198401	4198297	0.002	0.028914
10^{-02}	11	11	4198401	4198050	0.008	0.00192889
10^{-03}	11	11	4198401	4197277	0.03	0.00021576
10^{-04}	11	11	4198401	4194958	0.08	4.458×10^{-05}
10^{-05}	11	11	4198401	4190350	0.19	2.32252×10^{-06}
10^{-01}	12	12	16785409	16785302	0.0006	0.0284326
10^{-02}	12	12	16785409	16785058	0.002	0.00192514
10^{-03}	12	12	16785409	16784285	0.007	0.000214825
10^{-04}	12	12	16785409	16781971	0.02	4.44593×10^{-05}
10^{-05}	12	12	16785409	16777370	0.05	2.32186×10^{-06}

4.2.2 Visualização de soluções da Equação de Maxwell nas malhas adaptativas

Simulações dos campos elétricos e magnéticos do modelo transversal elétrico (TE) das Equações de Maxwell são apresentadas a seguir usando o FDTD clássico com condições de fronteira UPML [16]. A condição inicial é um impulso Gaussiano semelhante ao apresentado na seção anterior. As simulações são realizadas com uma grade espacial de 1000×1000 pontos geradas pelo programa de Susan Hagness [8].

CORRIGIR: Na Figura 15 são apresentadas a componente do campo elétrico para o instante 1000 dt, para um cilindro dielétrico com uma permissividade relativa de 5, um cilindro é um condutor de cobre e uma parede dielétrica com uma permissividade relativa de 5, respectivamente. Nas Figuras 16, 17 e 18 são visualizadas a SPR dessas três simulações, para o campo elétrico e magnético. Observa-se nessas figuras que os pontos nas malhas adaptativas estão concentrados nas regiões aonde a função apresenta os cilindros ou a parede, respectivamente. Apesar de nas visualizações a SPRs parecerem poucos esparsas, isso na verdade não ocorre, sendo que menos de 3% dos pontos são representados no pior caso.

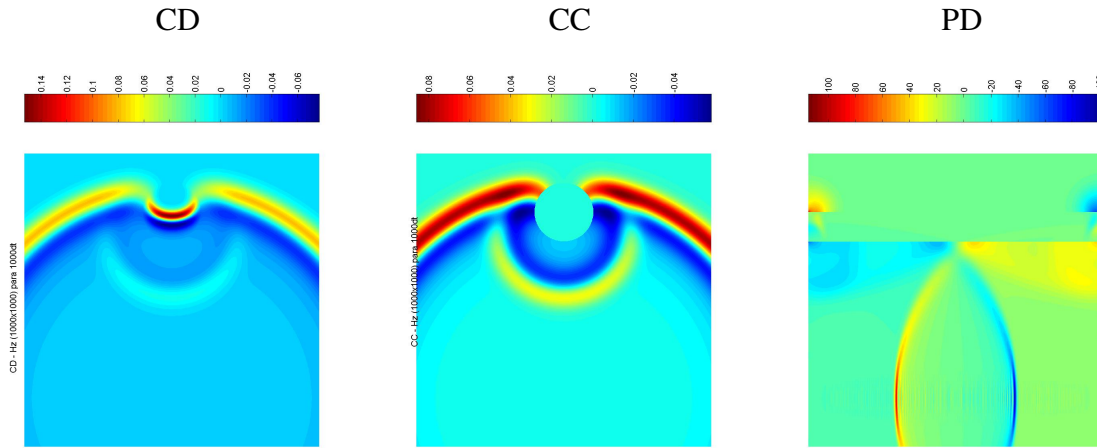


Figura 15: Componente do campo elétrico para o instante 1000 dt, para um cilindro dielétrico (CD) com uma permissividade relativa de 5, um cilindro é um condutor de cobre (CC) e uma parede dielétrica (PD) com uma permissividade relativa de 5.

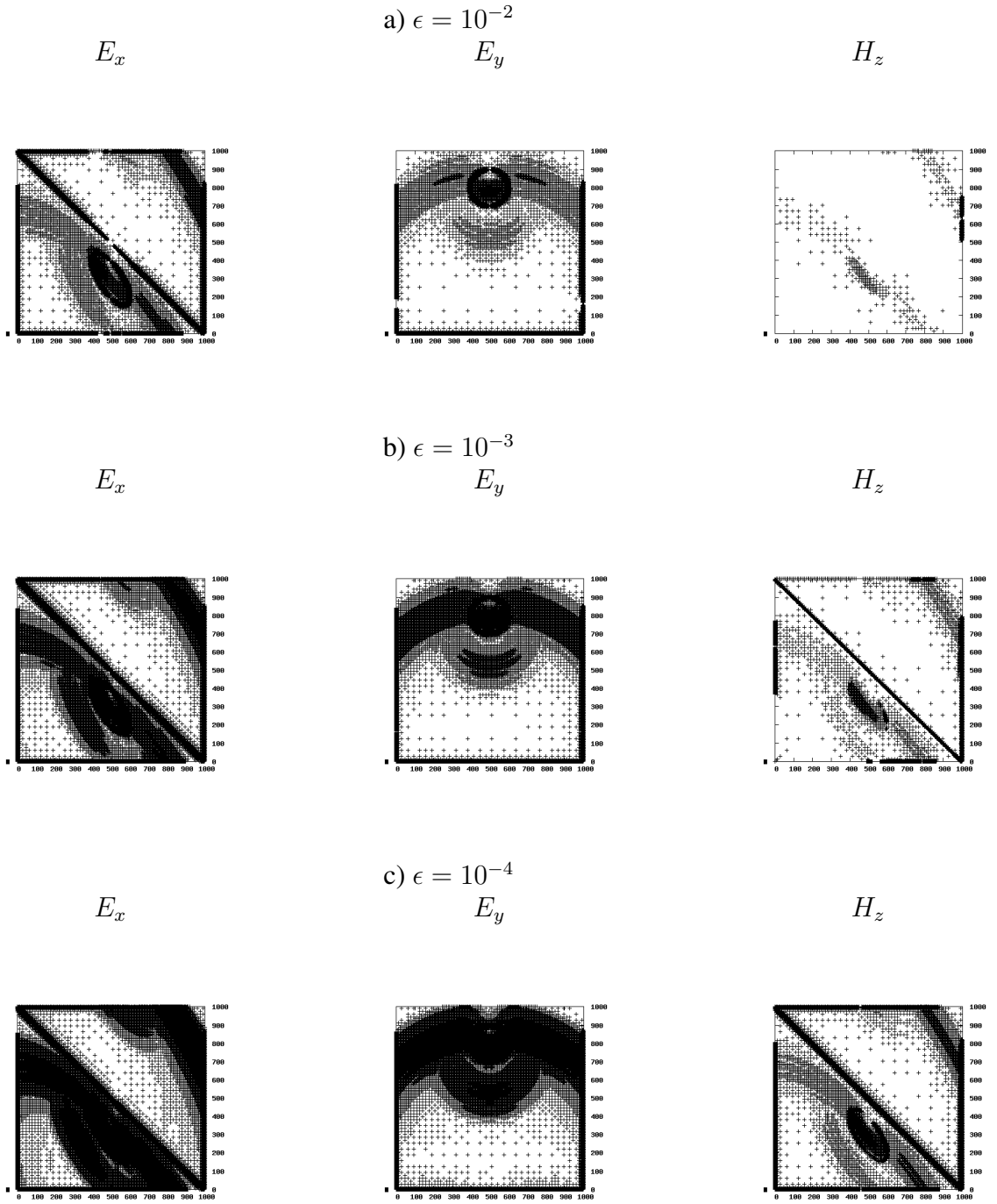


Figura 16: Pontos das malhas adaptativas que representam a simulação de um cilindro é dielétrico com uma permissividade relativa de 5 com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento ϵ , referentes a uma malha regular de 1000×1000 pontos.

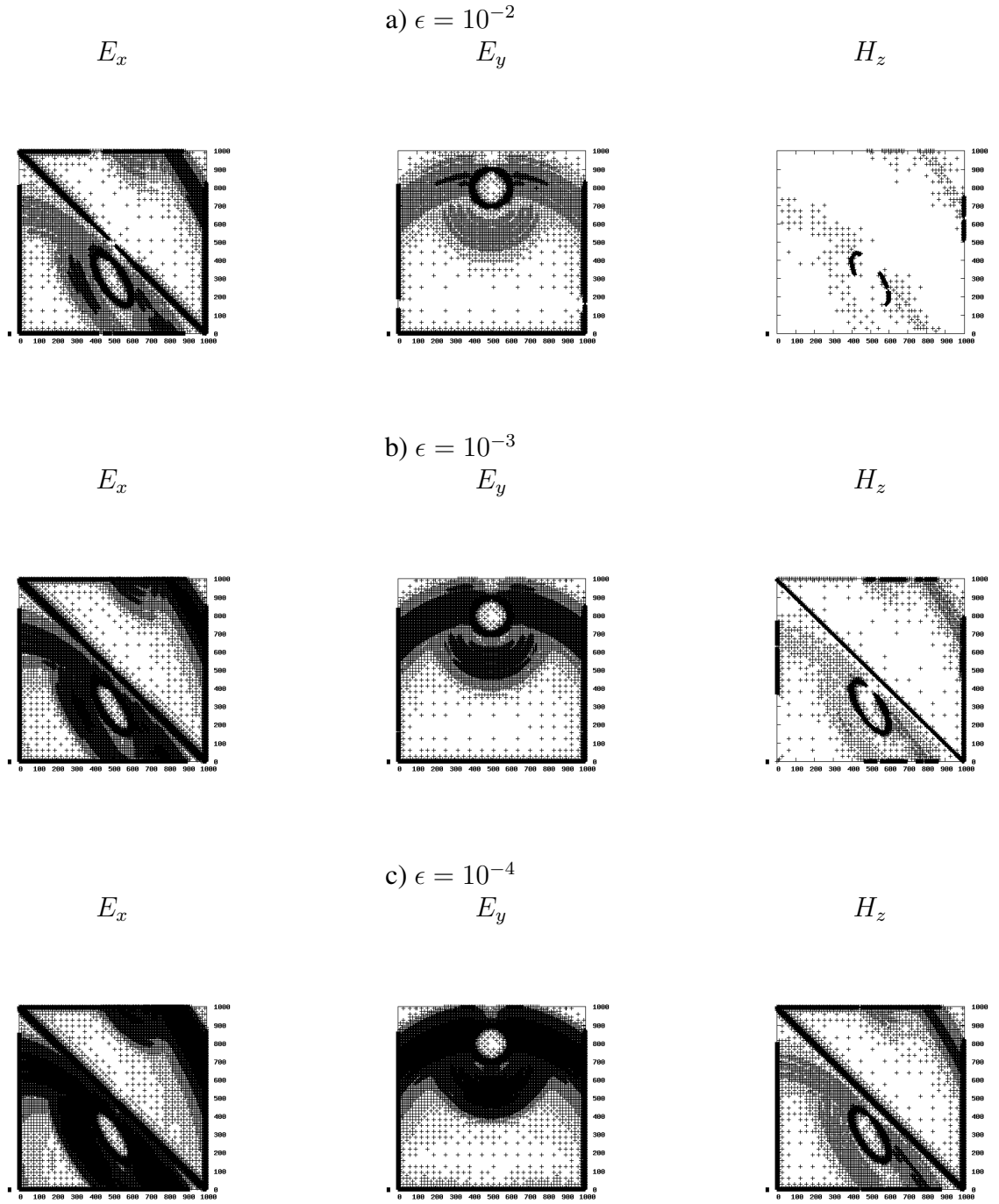


Figura 17: Pontos das malhas adaptativas que representam a simulação de um cilindro de cobre com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento ϵ , referentes a uma malha regular de 1000×1000 pontos em um tempo final 1000 dt .

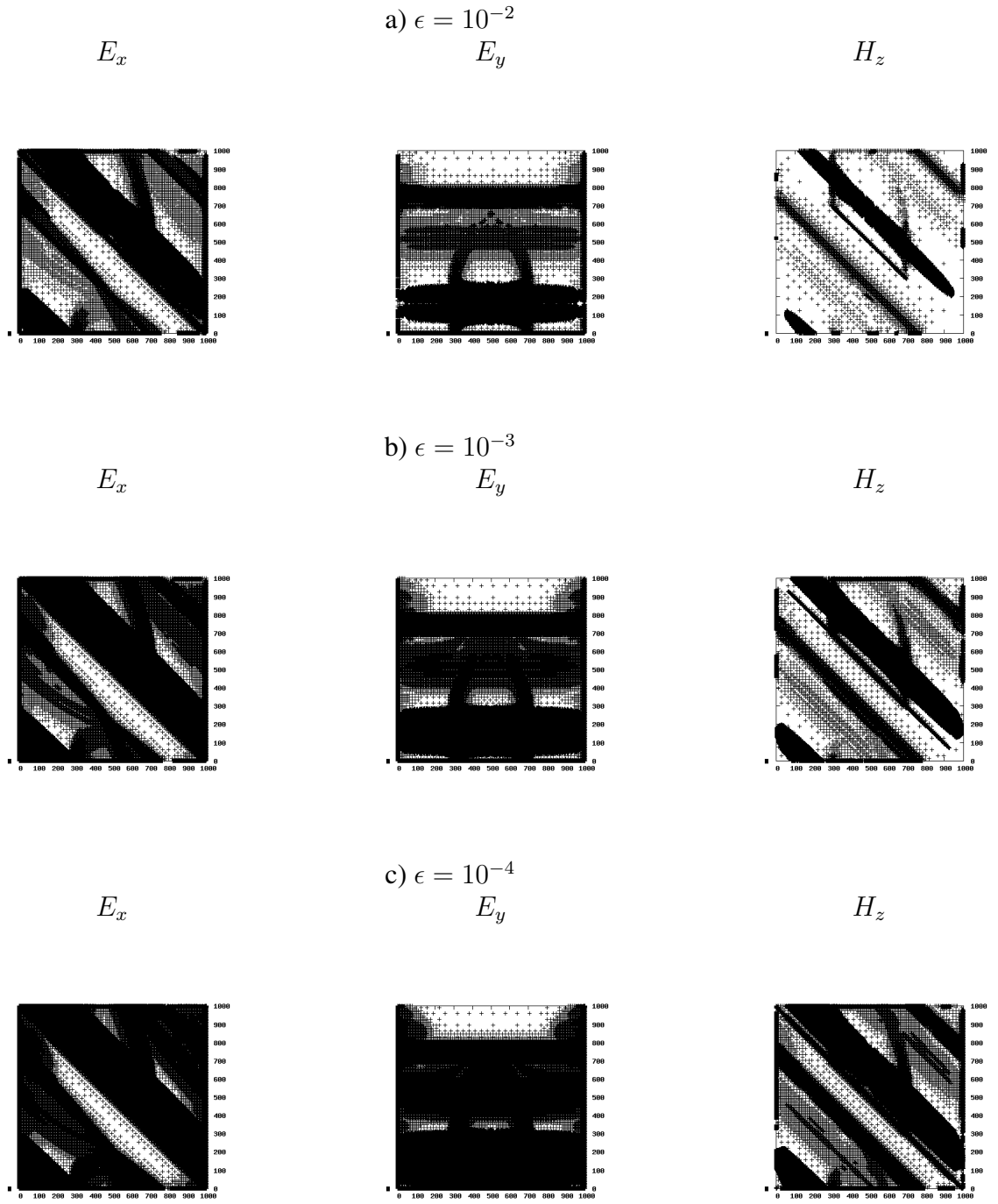


Figura 18: Pontos das malhas adaptativas que representam a simulação de uma parede dielétrica com uma permissividade relativa de 5 com ordem de interpolação $M = 4$ e parâmetros de truncamento ϵ , referentes a uma malha regular de 1000×1000 pontos em um tempo final 1000 dt.

4.3 Região de UPML

Na implementação realizada a região de UPML não se representa a solução usando a SPR. Não é necessário o armazenamento das variáveis B_z, D_x, D_y fora da região da PML, pois elas podem ser escalonadas nas variáveis H_z, E_x, E_y . Na Figura 19 é apresentado um esquema de armazenamento da malha de discretização. Foi criada uma classe para lidar com esse tipo de dado.

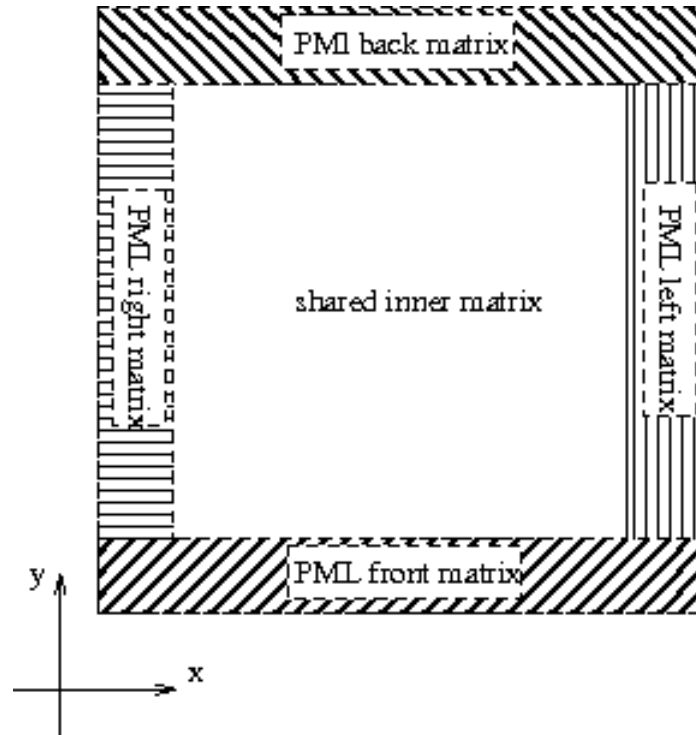


Figura 19: Esquema de armazenamento dos dados na região da PML.

5 Comentários Finais

O desenvolvimento desse projeto de pós-doc permitiu:

- melhorias na visualização SPR de funções bidimensionais;
- elaboração e implementação de um software em OOP/C++ para resolução das Equações de Maxwell no modo TE no contexto SPR;
- inclusão de fronteiras PEC e UPML+PEC;
- inclusão de um modelo de adaptabilidade temporal;
- documentação do software desenvolvido;
- avaliação da estrutura de dados a ser implementada para uma redução da memória utilizada.

Com o desenvolvimento desse trabalho foram realizados a redação de artigos, seminários e experimentos numéricos.

Esse projeto também permitiu uma maior integração entre as equipes envolvidas, e fomento de novas possibilidades de pesquisa. Isso de imediato resultou na redação de um projeto utilizando a SPR em aplicações atmosféricas e espaciais submetido ao edital universal do CNPq/2006, pela pesquisadora.

Referências

- [1] M. O. DOMINGUES. *Análise Wavelet na Simulação Numérica de Equações Diferenciais Parciais com Adaptabilidade Espacial*. PhD thesis, UNICAMP, Campinas, SP, oct 2001.
- [2] M. O. DOMINGUES, P. J. FERREIRA, S. M. GOMES, A. GOMIDE, J. R. PEREIRA, and P. PINHO. 2D-WSPR code for solving time evolutionary edp. version OOP/C++ 0.36, Jun, 2006.
- [3] M. O. DOMINGUES, O. ROUSSEL, and K. SCHNEIDER. Global time step control in adaptative multiresolution methods for PDEs. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2006. (submetido).
- [4] E. Fehlberg. New high-order Runge–Kutta formulas with step size control for systems of first order and second order differential equation. *Z. Angew. Math. Mech.*, 44(T17-T29), 1964.
- [5] E. Fehlberg. Klassische Runge–Kutta Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle. *Computing*, 4(93-106), 1969.
- [6] L. Ferm and P. Löstedt. Space-time adaptive solution of first order PDEs. *J. Sci. Comput.*, 26(1):83 – 110, 2006.
- [7] S. M. GOMES, M. O. DOMINGUES, P. PINHO, P. J. FERREIRA, A. GOMIDE, and J. R. PEREIRA. High order adaptive finite-difference scheme for the Maxwell’s Equations. (em redação).
- [8] S. HAGNESS. 2-D FDTD TE code with PML absorbing boundary conditions. version Matlab feb., 2000.
- [9] M. HOLMSTRÖM. *Wavelet Based Methods for Time Dependent PDEs*. PhD thesis, University of Uppsala, 1997.
- [10] M. HOLMSTRÖM. Solving hyperbolic PDEs using interpolating wavelets. *SIAM-JSC*, 21(2):405–420, 1999.
- [11] P. PINHO, M. O. DOMINGUES, P. J. FERREIRA, S. M. GOMES, A. GOMIDE, and J. R. PEREIRA. Interpolating wavelets and adaptive finite difference schemes for solving maxwell’s equations: Gridding effect. (submetido a IEEE Transaction on Magnetics).
- [12] P. PINHO, M. O. DOMINGUES, P. J. FERREIRA, S. M. GOMES, J. R. PEREIRA, and A. GOMIDE. Representação de funções usando o spr. In *Livro de Resumos do Encontro da Sociedade Portuguesa de Matemática(EnSpam)*, ISEL, Lisboa, 2006. Sociedade Portuguesa de Matemática.

- [13] P. R. T. PINHO. *Resolução das equações de Maxwell por análise multiresolução usando wavelets interpolatórias*. PhD thesis, Universidade de Aveiro, dec 2004.
- [14] L. F. Shampine and A. Witt. A simple size selection algorithm for ode codes. *J. Comp. Appl. Math.*, 62:345–354, 1995.
- [15] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*, volume 12 of *Text in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2nd edition, 1991.
- [16] A. Taflove. *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time Domain Method*. Norwood, MA, 1998.
- [17] A. Taflove. *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time Domain Method*. Norwood, MA, 1998.