



Universidade Estadual de Campinas
FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO
DEPARTAMENTO DE MICROONDAS E ÓPTICA
UNICAMP – FEEC – DMO, CAMPINAS – SP, C.P. 6101, CEP 13083-970

Elementos finitos com resolução simplificada de sistemas de equações lineares para dispositivos fotônicos

Tese de Doutorado

Autor: Kleucio Claudio

Orientador: Prof. Dr. Hugo E. Hernández Figueroa

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia Elétrica e de
Computação da Universidade de Campinas como parte dos
requisitos necessários para a obtenção do Título de Doutor em
Engenharia Elétrica

Campinas
Maio 2010

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

C571e	<p>Claudio, Kleucio Elementos finitos com resolução simplificada de sistemas de equações lineares para dispositivos fotônicos / Kleucio Claudio. --Campinas, SP: [s.n.], 2010.</p> <p>Orientador: Hugo Enrique Hernández-Figueroa. Tese de Doutorado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação.</p> <p>1. Métodos dos elementos finitos. 2. Fotônicos. 3. Equações lineares. 4. Métodos iterativos (Matemática). I. Hernández-Figueroa, Hugo Enrique. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação. III. Título.</p>
-------	---

Título em Inglês: Finite elements with simplified solutions of linear systems of equations for photonic devices

Palavras-chave em Inglês: Finite element method, Photonic, Linear equations, Iterative methods (Mathematics)

Área de concentração: Telecomunicações e Telemática

Titulação: Doutor em Engenharia Elétrica

Banca examinadora: Antonio Romeiro Sapienza, Kleber Zuza Nóbrega, Marcos Sérgio Gonçalves, Leonardo Lorenzo Bravo Roger

Data da defesa: 24/05/2010

Programa de Pós Graduação: Engenharia Elétrica

COMISSÃO JULGADORA - TESE DE DOUTORADO

Candidato: Kleucio Claudio

Data da Defesa: 24 de maio de 2010

Titulo da Tese: "Elementos Finitos com Resolução Simplificada de Sistemas de Equações Lineares para Dispositivos Fotônicos"

Prof. Dr. Hugo Enrique Hernandez Figueroa (Presidente):

Prof. Dr. Antonio Romeiro Sapienza:

Prof. Dr. Kleber Zuza Nóbrega:

Prof. Dr. Marcos Sérgio Gonçalves:

Prof. Dr. Leonardo Lorenzo Bravo Roger:

Resumo

O método de elementos finitos é largamente empregado na modelagem de problemas de eletromagnetismo.

A modelagem implícita deste método recai em resolver sistemas de equações lineares esparsas, esta etapa é de alto custo computacional. Este trabalho propõe alternativas com o objetivo de melhorar o desempenho computacional das aplicações provenientes de formulações via elementos finitos, através do aproveitamento de soluções de sistemas de equações lineares por métodos direto e iterativo, para simular dispositivos ópticos com as características físicas alteradas constantemente.

Na solução dos sistemas de equações, utilizou-se o método direto com *Small Rank Adjustment* e o método iterativo gradiente bi-conjugado estabilizado preconditionado com análises de reaproveitamento do preconditionador ILUT.

Nos estudos desenvolvidos obteve-se um melhor desempenho computacional quando se utilizou o método iterativo. Estes resultados são de grande importância na área de otimização de dispositivos fotônicos tais como acopladores, filtros, demultiplexadores, etc, pois a otimização destes dispositivos consiste em avaliar várias configurações do espaço de busca, implicando em resolver vários sistemas de equações lineares similares provenientes do método de elementos finitos.

Abstract

The Finite Element Method is one of the most popular numerical tools in electromagnetics.

Implicit schemes require the solution of sparse linear equation systems, this step demands a lot of computational time. This work proposes alternatives enhancements to obtain better computational performance of such implicit schemes. This was made through the improvement of direct and iterative methods, for problems which may be interpreted as perturbations of a given original one. This is very important specially in the optimization process of devices, due to the fact that one needs to solve many linear systems with little changes at each step, to explore the search space, so many perturbed linear systems are solved to obtain the optimum device. For direct methods the *Small Rank Adjustment* technique was used, while for iterative methods, the Preconditioned Gradient Stabilized Biconjugate Method reusing the preconditioner, were adopted.

The applications were focused on the design of photonic devices, like couplers, filters, demultiplexers, etc.

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus antepassados.

Agradecimentos

Agradeço a todos que contribuíram de alguma forma para o desenvolvimento deste trabalho, em especial ao Prof. Hugo e à Profa. Marli pela orientação, pela oportunidade de aprendizado durante o período de pesquisas na pós-graduação e delineamento dos trabalhos realizados.

Agradeço aos colegas Marcos, Cosme, Carlos Henrique e Gilliard, pelo suporte nos desenvolvimentos dos códigos e na discussão teórica.

Agradeço à minha família pelo apoio, incondicional, inclusive financeiro, para que fosse realizado este trabalho, o qual terá espaço para futuros desenvolvimentos de muitas pessoas.

Agradeço à Capes, uma importante instituição do Estado brasileiro, pelo apoio financeiro.

Agradeço a Deus pelas intuições ao longo dessa caminhada.

Índice de figuras

Figura 2.1 – Elemento triangular quadrático com identificação dos nós primários e secundários.	5
Figura 2.2 - Exemplo de malha de elementos triangulares quadráticos.	6
Figura 2.3 – Estrutura de simulação com PMLs.	10
Figura 3.1 – Diagrama de fluxo TDBPM.....	23
Figura 3.2 – Malha de elementos triangulares lineares	24
Figura 3.3 - Malha de elementos triangulares quadráticos.....	25
Figura 3.4 – Malha de elementos lineares alteradas, elaborada no GID.	30
Figura 3.5 – Ilustração da aplicação da decomposição incompleta em intervalos fixos de comprimento de onda.	31
Figura 4.1 – Grade óptica.	38
Figura 4.2 – Pulso inicial, modo TE, módulo da componente E_x , para índices de 125 na grade, 1.55 no guia e $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$	39
Figura 4.3 – Coeficiente de reflexão da grade para modo TE, componente E_x , com índice de refração entre de 1.45 e $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$	40
Figura 4.4 - Pulsos incidentes e refletidos para grade óptica com $n= 1.25$ a 1.8 e $\lambda=1.5\mu\text{m}$, (a) ILUT sempre com montagem de todos os elementos, (b) ILUT sempre com remontagem dos elementos modificados, (c) ILUT em $n=1.25$ com montagem de todos os elementos, (d) ILUT em $n=1.25$ com remontagem dos elementos modificados	41
Figura 4.5 – Envoltória e curvas de níveis na grade óptica, Modo TE, módulo da componente E_x , com índice de refração de 1.25, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – (a) $20\Delta t$, (b) $60\Delta t$, (c) $120 \Delta t$, (d) $180 \Delta t$, (e) $240 \Delta t$	42
Figura 4.6 - Envoltória e curvas de níveis na grade óptica, Modo TE, módulo da componente E_x , com índice de refração de 1.45, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – (a) $20\Delta t$, (b) $60\Delta t$, (c) $120 \Delta t$, (d) $180 \Delta t$, (e) $240 \Delta t$	43
Figura 4.7 - Envoltória e curvas de níveis na grade óptica a, Modo TE, módulo da componente E_x , com índice de refração de 1.80, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – (a) $20\Delta t$, (b) $60\Delta t$, (c) $120 \Delta t$, (d) $180 \Delta t$, (e) $240 \Delta t$	44
Figura 4.8 - Grade óptica com índice $n = 1.25$, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – $20\Delta t$, $60\Delta t$, $120 \Delta t$, $180 \Delta t$, $240 \Delta t$, (a) montagem de todos os elementos com ILUT para todos os materiais, (b) ILUT somente para $n=1.25$ e remontagem dos elementos alterados.	45
Figura 4.9 - Grade óptica com índice $n = 1.45$, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – $20\Delta t$, $60\Delta t$, $120 \Delta t$, $180 \Delta t$, $240 \Delta t$, (a) montagem de todos os elementos com ILUT para todos os materiais, (b) ILUT somente para $n=1.25$ e remontagem dos elementos alterados.	46
Figura 4.10 - Grade óptica com índice $n = 1.80$, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – $20\Delta t$, $60\Delta t$, $120 \Delta t$, $180 \Delta t$, $240 \Delta t$, (a) montagem de todos os elementos com ILUT para todos os materiais, (b) ILUT somente para $n=1.25$ e remontagem dos elementos alterados.	47
Figura 4.11 – Guia Canal	48
Figura 4.12 – Campo inicial	48
Figura 4.13 – Grade óptica	49
Figura 4.14 – Campo inicial com a análise de corte nas iterações do método iterativo.....	51
Figura 4.15 - Campo Inicial – tempo total	52

Figura 4.16 – Tempo médio para cortes nas iterações do método iterativo.....	53
Figura 4.17 – Tempo total para cortes nas iterações do método iterativo.....	53
Figura 4.18 – ILUT com reinício por acúmulo de tempo.	54
Figura 4.19 – Tempo médio para cortes com intervalos uniformes.....	55
Figura 4.20 - Tempo total para cortes com intervalos uniformes.	55
Figura 4.21 - Comparações entre o caso convencional e recursos de aproveitamento de soluções.	56
Figura 4.22 – Comparativo do tempo acumulado.	57
Figura 4.23 – Coeficiente de Reflexão da grade para modo TE, componente E_x e $\lambda = 1.5 \mu m$. 58	
Figura 4.24 Método direto x Iterativo com remontagem e reaproveitamento da ILUT – curvas de níveis do modo TE, componente E_x e índices de refração entre 1.2 e 3.35.....	59
Figura 4.25 - Método direto x Iterativo com remontagem e reaproveitamento da ILUT – modo TE, componente E_x	60
Figura 4.26 – Erro relativo entre ME28 e Método iterativo com recursos.	61
Figura 4.27 – Esforço computacional do método iterativo com ILUT	62
Figura 4.28 – Desempenho temporal do método iterativo com ILUT.	63
Figura 4.29 – SMR tempos médio por comprimento de onda	64
Figura 4.30 – Análise de desempenho em função da dimensão de R	65
Figura 4.31 - Método direto x SMR com remontagem – curvas de níveis do modo TE, componente E_x	66
Figura 4.32 - Método direto x SMR com remontagem – Modo TE, componente E_x	67
Figura 4.33 – Erro relativo ME28 x SMR.....	68
Figura 4.34 – Tempos de SMR com variação dos índices	69

Índice de tabelas

Tabela 2.1 – Valores referentes às PMLs.....	12
Tabela 3.1 - Fronteira	25
Tabela 3.2 – Não-fronteira	25
Tabela 3.3 – Fronteira nó primário.....	26
Tabela 3.4 - Fronteira nó secundário.....	26
Tabela 3.5 – Não-fronteira nó primário.....	26
Tabela 3.6 – Não-fronteira nó secundário	26
Tabela 4.1 – Desempenho com comparação direta - $\lambda = 1.5 \mu m$	49
Tabela 4.2 – Desempenho com comparação cruzada dos recursos - $\lambda = 1.5 \mu m$	49
Tabela 4.3 – Comparativo dos métodos em relação ao método com corte fixo.....	57
Tabela 4.4 – Coeficientes da análise da dimensão de R	65

Lista de Símbolos

A	Matriz de coeficientes.
R	Matriz dos elementos alterados
x	Vetor solução do sistema linear.
b	Vetor independente.
x, y, z	Coordenadas espaciais.
w	Largura do pulso.
Δt	Passo de propagação temporal.
N	Dimensão da matriz A , equivalente ao número de nós da malha.
N_z	Números de valores não-nulos.
r	Dimensão da matriz R .
l_{fil}	Parâmetro de preenchimento.
$droptol$	Parâmetro de estabilidade.
N	Índice de refração.
Λ_0	Comprimento de onda.
z_0	Posição central do pulso em relação à direção z .
ϕ	Campo elétrico ou magnético escalar.
N_i^e	Função de interpolação i do elemento e .
Φ	Campo elétrico ou magnético vetorial.
Δ^e	Área do elemento e .
L_i^e	Função de base nodal linear associada ao nó i do elemento e .
ρ	Densidade de carga elétrica.

σ	Condutividade elétrica.
ρ_c	Distância entre o baricentro do elemento ao início da PML.
d	Espessura da PML.
ω_0	Frequência central do campo eletromagnético.
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo.
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo.
ϵ_r	Permissividade elétrica relativa.
μ_r	Permeabilidade magnética relativa.
\vec{E}	Campo elétrico vetorial.
\vec{H}	Campo magnético vetorial.
\vec{D}	Densidade de fluxo elétrico.
\vec{B}	Densidade de fluxo magnético.
\vec{J}	Densidade de fluxo de corrente elétrica.
n	Índice de refração

Sumário

Capítulo 1 Introdução	1
Capítulo 2 Elementos finitos e métodos de solução de sistemas de equações lineares.....	4
2.1 Soluções Numéricas	4
2.2 Métodos de Elementos Finitos	4
2.2.1 <i>Formulação</i>	5
2.2.2 <i>Equações de onda</i>	8
2.2.1.2 <i>Camadas Perfeitamente Casadas (PMLs)</i>	10
2.2.3 <i>Elementos finitos no domínio da frequência</i>	12
2.2.4 <i>Elementos finitos no domínio do tempo</i>	15
2.3 Sistemas de equações lineares	17
2.3.1 <i>Métodos diretos e iterativos</i>	17
Capítulo 3 Algoritmos e recursos de aproveitamento de soluções.....	22
3.1 Estrutura de dados	22
3.2 Rotinas principais	24
3.2.1 – <i>Topologia</i>	24
3.2.2 - <i>Designação</i>	27
3.2.3 – <i>PML</i>	28
3.2.4 - <i>Elementar</i>	28
3.2.5 - <i>Montagem</i>	28
3.2.6 - <i>Aplicação das condições de contorno – Aplicacond</i>	29
3.2.7 - <i>Eliminando linhas e colunas nulas – Squash</i>	29
3.3 Aproximações.....	29
3.3.1 - <i>Método Iterativo</i>	29
3.3.2 - <i>Método Direto</i>	32
Capítulo 4 Resultados.....	36
4.1 – Poisson.....	37
4.2 - Domínio do tempo	38
4.3 - Domínio da frequência.....	48
4.3.1 - <i>Guia Canal</i>	48
4.3.2 - <i>Grade de Bragg</i>	49
4.3.3 - <i>Método Iterativo biconjugado estabilizado com aproveitamento de decomposição ILUT e remontagem</i>	50
4.3.4 - <i>Small Rank Adjustment (SMR)</i>	63
4.3.5 - <i>Análise de dimensão de R</i>	64
4.3.6 - <i>Comparativo das soluções entre os métodos: Direto e SMR</i>	65
Capítulo 5 Conclusões.....	72
Trabalhos Futuros.....	74
Bibliografia.....	75
Publicações associadas à tese	79
Anexo I.....	80

Capítulo 1

Introdução

A solução de equações diferenciais parciais através do método de elementos finitos implícito necessita resolver sistemas de equações lineares, esta etapa do método consiste em um alto custo computacional e por esse motivo é objeto de estudos para obtenção de códigos com melhores desempenhos.

Em algumas aplicações, é necessária uma análise ampla de um dispositivo fotônico, na qual algumas características físicas são modificadas. Um exemplo deste fato é a otimização, ou simplesmente um estudo sobre o comportamento de um dispositivo. Nestes casos podem ocorrer situações em que os sistemas de equações lineares provêm de uma malha em que apenas alguns elementos são modificados, então seria interessante que cálculos realizados nas soluções dos sistemas lineares fossem reaproveitados em análises posteriores.

Em Jiao [1], é elaborado um estudo com o recurso *Small Rank Adjustment* (SMR) [2], para otimização de dispositivos fotônicos com formulações baseadas em funções de Wannier [3]. Este recurso será estudado nesta tese, porém os sistemas lineares, aqui obtidos, são provenientes de dispositivos modelados pelo Método dos Elementos Finitos (MEF) [4], [5].

O desenvolvimento deste trabalho está diretamente relacionado à programação do método de elementos finitos (MEF), pois a alteração das características físicas implica em uma modificação da matriz de coeficientes do sistema de equações lineares. O completo domínio de programação do MEF se fez necessário para a identificação da matriz R , referente às características modificadas, e em quais linhas e colunas, na matriz global A , seriam inseridos os coeficientes de R .

O processo de inserção de R em A é dividido em duas etapas: montagem e desmontagem, onde os elementos modificados e seus respectivos nós são identificados, determinando com quais elementos da malha estes se relacionam.

A partir da identificação dos nós modificados, ocorre a desmontagem: desmontam-se os valores antigos referentes aos elementos modificados, após a desmontagem ocorre a montagem: onde são inseridos os valores novos referentes a matriz R .

Este processo permite a introdução de um novo recurso, tal que não seja necessário montar toda a matriz global A em cada alteração do material, pois se desmontam os valores antigos referentes aos elementos alterados e montam-se os valores novos de R em A , que resulta em economia de tempo computacional.

A identificação da matriz R está associada ao método direto de aproveitamento da inversa da matriz original A e solução do sistema linear por SMR , pois nesse caso é necessário o cálculo decomposições LU das matrizes R e da matriz inicial A , referente ao problema sem as modificações nas características físicas. Para os métodos iterativos [6] não é necessário o cálculo da decomposição LU da matriz de coeficientes do sistema linear, pois estes métodos trabalham com refinamentos de soluções em um processo de aproximações sucessivas até que o critério de parada, pré-estabelecido, seja satisfeito.

Os métodos iterativos tornam-se mais robustos quando é preconditionado, os preconditionadores possuem um alto custo computacional.

O preconditionador é uma matriz que permite melhorar a convergência do método iterativo, uma vez que tem a função de diminuir o número de condição da matriz de coeficientes, tornando os autovalores mais uniformes. O número de condição de uma matriz pode ser definido como o módulo do quociente entre o autovalor máximo e o mínimo da matriz de coeficientes.

Para os métodos iterativos, propõe-se o reaproveitamento do preconditionador. Neste caso, avaliam-se várias possibilidades de reaproveitamento, a eficiência desta aproximação em relação ao desempenho computacional e a precisão da solução.

Em [7] foi estudado o método iterativo Biconjugado Estabilizado Precondicionado (BCGS) [9] e as particularidades em [8]. Em [8] fez-se um estudo comparativo completo entre os métodos iterativos baseados no espaço de Krylov. Neste estudo, o BCGS destacou-se como sendo o mais eficiente, o preconditionador empregado foi o *Incomplete LU Threshold* (ILUT) [10], [11].

Os códigos implementados foram sendo validados paulatinamente começando com a Equação de Poisson [12], a propagação no domínio do tempo [13] e finalizando com a solução no domínio da frequência [14]. Tanto para o caso do domínio do tempo, bem como para o domínio da frequência, o dispositivo para as análises foi uma grade óptica.

Para o domínio da frequência foi realizada uma análise mais detalhada com vistas ao desempenho e precisão do método, variando-se o índice de refração da grade e a frequência. A análise em várias frequências foi necessária para determinar o gráfico do coeficiente de reflexão.

Comparou-se o desempenho computacional entre os métodos direto, iterativo sem aproveitamento do preconditionador e o método iterativo com aproveitamento do preconditionador, remontou-se, neste último, somente os elementos modificados. Para o método iterativo sem aproveitamento da ILUT e método direto foram analisados com o recurso de remontagem dos elementos alterados e sem este recurso. Para o caso do método iterativo com remontagem e aproveitamento da ILUT, foi analisada estratégias de aplicação da ILUT. Para a melhor estratégia foi verificada a precisão em relação ao método direto, bem como o alcance em relação à intensidade das alterações no índice de refração da grade. Finalizando a análise no domínio da frequência é investigado a escalabilidade do método.

A escalabilidade é apresentada aqui sendo o comportamento do tempo computacional do método à medida que se aumenta o número de nós do dispositivo discretizado.

A aproximação por SMR foi aplicada para o domínio da frequência, neste caso a ME28 [15] auxiliou no cálculo da inversa da matriz através da decomposição LU. O método SMR foi verificado quanto à aplicabilidade em relação ao número de elementos modificados. Para isso determinou-se a dimensão da matriz R , tal que acima desta dimensão o método SMR deixou de ser vantajoso em relação a ME28.

O Capítulo 2 trata do método de elementos finitos e dos métodos de solução de sistemas de equações lineares. O Capítulo 3 apresenta as principais rotinas implementadas, o Capítulo 4 trata das aplicações e análises, comentadas acima. O Capítulo 5 apresenta as Conclusões. Em seguida têm-se Trabalhos Futuros, Bibliografia e finalizando com Anexo.

Capítulo 2

Elementos finitos e métodos de solução de sistemas de equações lineares

2.1 Soluções Numéricas

A solução de problemas de valor de contorno em casos complexos é difícil de ser encontrada analiticamente ou em alguns casos podem ser até impossível. Nestes casos as técnicas numéricas de solução são de grande importância.

Seja um domínio Ω a região de interesse de solução da equação diferencial, a solução analítica estende-se a todos os pontos do domínio Ω , enquanto técnicas numéricas estendem-se as soluções a alguns pontos do domínio. Assim há uma aproximação nos resultados ao passar de um domínio contínuo para um domínio discreto de dimensão finita.

2.2 Métodos de Elementos Finitos

O método de elementos finitos é uma das técnicas numéricas de soluções de problemas de valores de contorno aplicados à física-matemática. O método de elementos finitos utilizados neste trabalho resulta em um sistema de equações lineares com n incógnitas, então se passa de um domínio computacional de infinitas variáveis para um domínio finito C^n com n variáveis [4], [16].

O método de elementos finitos é uma técnica relativamente nova, inicialmente proposta na década de 40 e seu uso iniciou-se nos anos 50 em projetos de aeronaves, desde então sua aplicação se expande para outras áreas das engenharias sendo aplicado nas diversas áreas do conhecimento, inclusive na solução de problemas de eletromagnetismo [4], [5].

O nome elementos finitos foi utilizado inicialmente por [17].

O método de elementos finitos necessita de discretização de um dado domínio Ω de interesse, podendo assumir as seguintes características [4], [16]:

- Quanto à forma:
Triangulares, quadrangulares, tetraédricos, etc.
- Quanto as funções de bases:
Quadráticas, lineares, nodais e de arestas, etc.
- Quanto ao tratamento das malhas:
Adaptativos e não-adaptativos, etc.
- Quanto à dimensão do elemento:
1D, 2D e 3D.

As características listadas acima são as principais, assim esta lista não é fechada.

Este trabalho tratará de elementos finitos triangulares, quadráticos, nodais, não-adaptativos e 2D. No próximo tópico apresenta-se a formulação básica e nos seguintes a aplicação em problemas no domínio do tempo e da frequência [4].

2.2.1 Formulação

Os elementos considerados nas implementações deste trabalho são mostrados na

Figura 2.1, denominados elementos quadráticos. Os elementos quadráticos são compostos por nós primários e secundários, os primeiros se localizam nos vértices do triângulo e os secundários são os nós intermediários, estes são vistos na Figura 2.1, localizados ao centro das arestas dos triângulos e estão sem preenchimento.

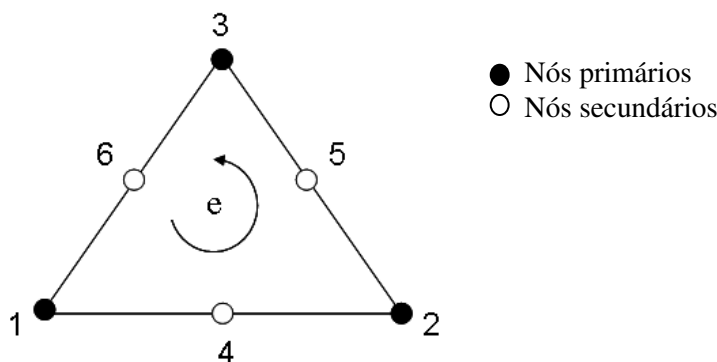


Figura 2.1 – Elemento triangular quadrático com identificação dos nós primários e secundários.

Os nós dos elementos possuem duas identificações, uma local e outra global. A identificação local, mostrada na

Figura 2.1 é realizada no sentido anti-horário, esta identificação será utilizada pela matriz local de dimensão 6x6, que se refere ao elemento. A identificação global, mostrada na Figura 2.2, é utilizada para a montagem da matriz global A , esta numeração é fundamental na forma da esparsidade da matriz. No Capítulo 3, é mostrado o processo de montagem em maiores detalhes.

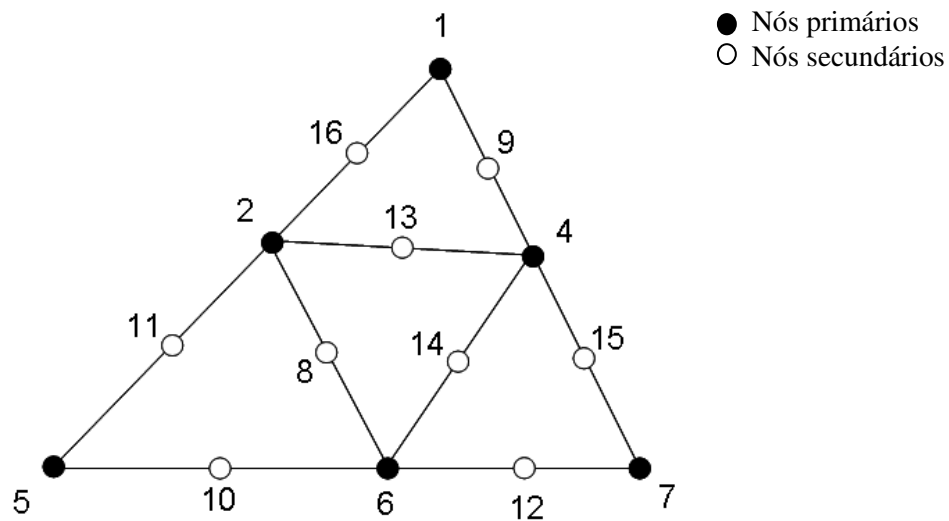


Figura 2.2 - Exemplo de malha de elementos triangulares quadráticos.

A esparsidade das matrizes resultante interfere no desempenho do método, pois no momento da solução do sistema linear via método direto aparecerá *fill-ins* [18], que são coeficientes nulos da matriz e que se tornaram não-nulos na matriz decomposta. A presença dos *fill-ins* aumenta significativamente o consumo de memória e esforço computacional. A numeração dos elementos é realizada no momento da confecção da malha, feita no programa computacional GID [19]. Após esta etapa, a esparsidade pode ser tratada por métodos de ordenamento da matriz, que consiste em arranjar as linhas e colunas de forma a minimizar os *fill-ins* no processo de decomposição LU da matriz. No item 2.3 tratar-se deste tema.

Com o domínio discretizado, a função desconhecida Φ , será aproximada através de funções de interpolação, para cada elemento. Esta função desconhecida pode ser o campo elétrico ou o campo magnético. As formulações apresentadas são extraídas de [4].

Para cada elemento define-se a função Φ^e expressa em (2.1).

$$\Phi^e(x, y) = a^e + b^e x + c^e y + d^e x^2 + b^e xy + c^e y^2, \quad (2.1)$$

onde os coeficientes $a^e, b^e, c^e, d^e, e^e, f^e$ pode ser determinado impondo (2.1) nos seis nós obtendo (2.2).

$$\Phi^e(x, y) = \sum_{j=1}^6 N_j^e(x, y) \Phi_j^e, \quad (2.2)$$

onde Φ_j^e é dado por (2.3).

$$\begin{aligned} \Phi_1^e(x, y) &= a^e + b^e x_1 + c^e y_1 + d^e x_1^2 + e^e x_1 y_1 + f^e y_1^2 \\ \Phi_2^e(x, y) &= a^e + b^e x_2 + c^e y_2 + d^e x_2^2 + e^e x_2 y_2 + f^e y_2^2 \\ \Phi_3^e(x, y) &= a^e + b^e x_3 + c^e y_3 + d^e x_3^2 + e^e x_3 y_3 + f^e y_3^2 \\ \Phi_4^e(x, y) &= a^e + b^e x_4 + c^e y_4 + d^e x_4^2 + e^e x_4 y_4 + f^e y_4^2 \\ \Phi_5^e(x, y) &= a^e + b^e x_5 + c^e y_5 + d^e x_5^2 + e^e x_5 y_5 + f^e y_5^2 \\ \Phi_6^e(x, y) &= a^e + b^e x_6 + c^e y_6 + d^e x_6^2 + e^e x_6 y_6 + f^e y_6^2 \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde em $x_i, y_i, i = 1, \dots, 6$, se referem às coordenadas dos nós do elemento e , assim omitiu-se por simplificação o sobrescrito e .

A função de interpolação N_j^e é definida por (2.4).

$$\begin{aligned} N_j^e(x, y) &= (2L_j^e - 1)L_j^e, \quad j = 1, 2, 3 \\ N_4^e(x, y) &= 4L_1^e L_2^e, \\ N_5^e(x, y) &= 4L_2^e L_3^e \\ N_6^e(x, y) &= 4L_3^e L_1^e \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde L_j^e é dado por (2.5).

$$L_j^e(x, y) = \frac{1}{2\Delta^e} (a_j^e + b_j^e x + c_j^e y), \quad j = 1, 2, 3, \quad (2.5)$$

onde Δ^e é a área do elemento e .

A função de interpolação assume a condição expressa em (2.6)

$$N_i^e(x_j, y_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.6)$$

No próximo tópico, estudou-se as equações de onda para o domínio da frequência e do tempo, bem como a forma discreta destas equações via método dos elementos finitos nas quais serão utilizadas as funções de interpolação (2.3).

2.2.2 Equações de onda

Equações de Maxwell completas:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \quad (2.8)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (2.9)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.10)$$

\vec{E} - Campo elétrico (V/m)

\vec{H} - Campo magnético (A/m)

\vec{D} - Densidade de fluxo elétrico (C/m²)

\vec{B} - Densidade de fluxo magnético (Wb/ m²)

\vec{J} - Densidade de fluxo de corrente elétrica (A/m²)

ρ - Densidade de carga elétrica (C/m³)

Neste trabalho, as equações de Maxwell [20] são aplicadas ao domínio óptico, em materiais dielétricos sem fontes e cargas, em um meio sem perdas e não-magnéticos. Portanto, as equações de Maxwell resultam em (2.11)-(2.14).

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.11)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.12)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \quad (2.13)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.14)$$

Considerando as relações constitutivas do material:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}, \quad (2.15)$$

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}, \quad (2.16)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética no espaço livre em [H/m], ϵ_0 é a permissividade elétrica no espaço livre em [F/m] e ϵ_r é a permissividade elétrica relativa.

Considerando os campos elétricos e magnéticos com variações temporais na forma harmônica dado por $e^{i\omega t}$, onde ω_0 é frequência angular, atuando em um meio dielétrico não-magnético, portanto $\mu_r = 1$ e seguem ((2.17)-(2.20).

$$\nabla \times \vec{E} = -i\omega_0 \mu_0 \vec{H} \quad (2.17)$$

$$\nabla \times \vec{H} = i\omega_0 \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \quad (2.18)$$

$$\nabla \cdot \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} = 0 \quad (2.19)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.20)$$

Das equações de Maxwell é possível obter as equações de onda para meios não-homogêneos no domínio da frequência e do tempo [21], [22], [23].

2.2.1.2 Camadas Perfeitamente Casadas (PMLs)

As camadas perfeitamente casadas (PMLs - *Perfectly Matched Layers*) são recursos numéricos que permitem a simulação de radiação das ondas eletromagnéticas em um meio infinito, num domínio computacional finito. PMLs são camadas que absorvem os campos elétrico e magnético. Ao truncar o domínio computacional as PMLs, permitem um melhor desempenho computacional.

Berenger apresentou as PMLs [24] em 1994, esta consiste em uma interface entre dois meios, onde um deles tem perdas na direção perpendicular a direção de propagação e sem reflexões. Na Figura 2.3 é mostrada uma ilustração das PMLs [4].

Neste trabalho, utiliza-se as PMLs obtidas dos trabalhos [25], [26], em problemas no domínio da frequência.

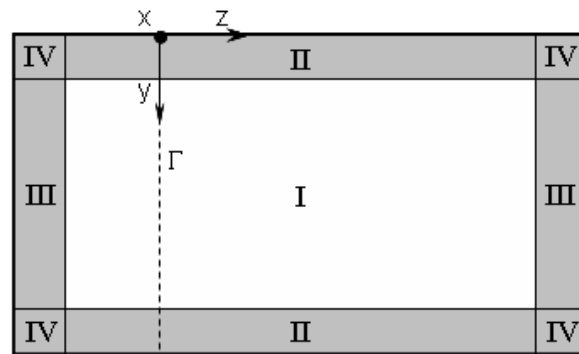


Figura 2.3 – Estrutura de simulação com PMLs.

O operador vetorial ∇ nas PMLs assume uma forma modificada, conforme mostrado em (2.21).

$$\nabla_s = s_y \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + s_z \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad (2.21)$$

Domínio da frequência:

Considerando as equações de Maxwell com operador modificado tem-se:

$$\nabla_s \times \vec{E} = -i\omega\mu_0 s \vec{H} \quad (2.22)$$

$$\nabla_s \times \vec{H} = i\omega\epsilon_0 \epsilon s \vec{E} \quad (2.23)$$

$$\nabla_s \cdot \epsilon \vec{E} = 0 \quad (2.24)$$

$$\nabla_s \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.25)$$

Aplicando o produto vetorial em (2.22) e utilizando (2.23) tem-se a equação de onda

$$\nabla_s \times \nabla_s \times \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} n^2 s \vec{E} \quad (2.26)$$

A equação para o campo magnético pode ser obtida de maneira análoga.

$$\nabla_s \times \frac{1}{\epsilon} (\nabla_s \times \vec{H}) = \frac{\omega^2}{c^2} s \vec{H} \quad (2.27)$$

Domínio do Tempo

No domínio do tempo as equações de onda com PML são obtidas de maneira análoga à (2.26) e (2.27) e são mostradas em (2.28) e (2.29).

$$\nabla_s \times \nabla_s \times \vec{E} = -\frac{n^2}{c^2} s \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (2.28)$$

$$\nabla_s \times \frac{1}{\epsilon} (\nabla_s \times \vec{H}) = \frac{s}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} \quad (2.29)$$

Os valores de s_y , s_z e s assumem os valores mostrados na Tabela 2.1.

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>
s_y	1	1	s
s_z	1	S	1

Tabela 2.1 – Valores referentes às PMLs

Em [13], [24] é os valores de s são definidos como em (2.30).

$$s = \begin{cases} 1 - j \frac{3}{2k_0 n d} \left(\frac{\rho_c}{d} \right)^2 \ln(R_r^{-1}) & \text{em II, III e IV,} \\ 1 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.30)$$

II, III e IV são as regiões demonstradas na Figura 2.3.

Onde ρ_c é a distância do baricentro de cada elemento da camada de PML até o início da PML e d é a espessura da PML. O coeficiente de reflexão R_r , ajustável, é definido em [24]. Nas simulações aqui estudadas, utilizou-se o valor mostrado em (2.31).

$$R_r = 10^{-4} \quad (2.31)$$

2.2.3 Elementos finitos no domínio da frequência

Neste trabalho são utilizadas estruturas 2D, conforme mostrada na Figura 2.3. Neste caso, a equação de onda é obtida das equações de Maxwell que resultam em (2.32) [13], [14].

$$s_y \frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{s_y}{s} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + s_z \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{s_z}{s} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + s k_0^2 q \Phi = 0 \quad (2.32)$$

Para o modo TE:

$$\Phi = E_x, p = 1, q = n^2.$$

Para o modo TM:

$$\Phi = H_x, p = 1/n^2, q = 1,$$

onde n , é o índice de refração, E_x e H_x são os campos elétrico e magnético perpendiculares ao plano y - z .

Discretizando a região de análise em elementos triangulares nodais, aproxima-se a função contínua por (2.33).

$$\Phi = \{N\}^T \{\Phi\}_e, \quad (2.33)$$

onde $\{N\}$ é a função de forma aplicada, e $\{\Phi\}_e$ é o vetor nodal do campo.

Considera-se na formulação o eixo z como sendo a direção de propagação, define-se um plano de incidência Γ perpendicular ao eixo z , seja Ω o domínio de interesse, rodeado por paredes metálicas com camadas de PMLs. O domínio Ω é dividido por Γ em dois subdomínios Ω_1 e Ω_2 e aplicando o método de Galerkin [4], [27] em (2.32) tem-se (2.34). A forma matricial (2.47) representa o problema discretizado.

O sistema linear obtido é dado por:

$$A\{\Phi\} = \sum_e' \int_e p \frac{s_y}{s} \{N\}_\Gamma \left(\frac{\partial \Phi_1}{\partial z} - \frac{\partial \Phi_2}{\partial z} \right) d\Gamma, \quad (2.34)$$

onde a matriz de coeficientes é mostrada em (2.35).

$$A = \sum_e \iint_e p \frac{s_y}{s} \left(\frac{\partial \{N\}}{\partial y} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial y} \right) + p \frac{s_z}{s} \left(\frac{\partial \{N\}}{\partial z} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z} \right) - sk_0^2 q \{N\} \{N\}^T dydz, \quad (2.35)$$

onde $\{\Phi\}$ é o vetor solução do sistema que representa os valores nodais do campo elétrico ou magnético, \sum é um somatório de todos os elementos e \sum_e' representa o somatório dos elementos que compartilham Γ . Nestas formulações, considera-se que dentro de cada elemento os valores de s_y , s_z , s , p , q são constantes. O termo $\{N\}$ é a função de forma.

Os campos nos subdomínios Ω_1 e Ω_2 são definidos por (2.36).

$$\Phi_i = \Phi_{in,i} + \Phi_{esp,i} \quad (2.36)$$

onde $i=1, 2$ identifica os subdomínios e $\Phi_{in,i}, \Phi_{esp,i}$ são respectivamente os campos incidente e espalhado nos subdomínio Ω_i . Em Γ a condição de continuidade dos campos elétricos e magnéticos são dadas por (2.37).

$$\frac{\partial \Phi_{esp,1}}{\partial z} = \frac{\partial \Phi_{esp,2}}{\partial z} \quad (2.37)$$

Reescrevendo (2.34) tem-se (2.38).

$$A\{\Phi\} = \sum_e \int_e p \frac{S_y}{S} \{N\}_\Gamma \left(\frac{\partial \Phi_{in,1}}{\partial z} - \frac{\partial \Phi_{in,2}}{\partial z} \right) d\Gamma \quad (2.38)$$

Considerando campos incidentes modais de ordem m tem-se (2.39).

$$\Phi_{in,i} = \sum_m A_m f_m(y) \exp(-1^i j \beta_m z) \quad i=1, 2 \quad (2.39)$$

Onde A_m é a amplitude, f_m a função do modo fundamental e β_m é a constante de propagação.

Substituindo (2.39) em (2.38), considerando a simetria dos campos incidentes nas direções $+z$ e $-z$ para garantir a continuidade dos campos elétrico e magnético em Γ .

Os termos exponenciais dos dois subdomínios podem ser considerados idênticos, por simetria, resultando no sistema de equações lineares (2.40).

$$A\{\Phi\} = [B]\{\Psi\}_\Gamma, \quad (2.40)$$

onde a matriz B e o vetor Ψ são dados por (2.41) e (2.42).

$$[B] = \sum_e \int_e p \frac{S_y}{S} \{N\}_\Gamma \{N\}_\Gamma d\Gamma \quad (2.41)$$

$$\{\Psi\}_\Gamma = -2 \sum_m j A_m \{f_m\}_\Gamma \beta_m \quad (2.42)$$

2.2.4 Elementos finitos no domínio do tempo

Das equações de Maxwell (2.1)-(2.4) modificadas com o operador ∇_s , e considerando um domínio 2D tem-se a equação de onda (2.43) [13].

$$S_y \frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{S_y}{S} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial y} \right) + S_z \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{S_z}{S} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial z} \right) + s \frac{q}{C^2} \frac{\partial^2 \bar{\Phi}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.43)$$

Onde a função $\bar{\Phi}$ é definida por (2.44).

$$\bar{\Phi}(y, z, t) = \Phi(y, z, t) \exp(j\omega_0 t) \quad (2.44)$$

Substituindo (2.44) em (2.43) resulta em (2.45).

$$S_y \frac{\partial}{\partial y} \left(p \frac{S_y}{S} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + S_z \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{S_z}{S} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) - s \frac{q}{C^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - 2js \frac{\omega_0 q}{C^2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + s \frac{\omega_0^2 q}{C^2} \Phi = 0 \quad (2.45)$$

onde c é a velocidade da luz no espaço livre.

Aplicando o método de Galerkin, tem-se a formulação discreta para o domínio temporal, representada em (2.46).

$$\left(K + \frac{\omega_0^2}{C^2} M \right) - \frac{1}{C^2} \frac{d^2 \{\Phi\}}{dt^2} - 2j \frac{\omega_0}{C^2} \frac{d\{\Phi\}}{dt} = 0, \quad (2.46)$$

onde as matrizes K e M em (2.46) são dadas por (2.47) e (2.48).

$$K = \sum_e \iint_e -p \frac{s_y^2}{s} \left(\frac{\partial \{N\}}{\partial y} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial y} \right) - p \frac{s_z^2}{s} \left(\frac{\partial \{N\}}{\partial z} \frac{\partial \{N\}^T}{\partial z} \right) dydz \quad (2.47)$$

$$M = \sum_e \iint_e sq \{N\} \{N\} dydz \quad (2.48)$$

Aplicando a recorrência de Padé e considerando a equação TDBPM de ângulo largo, a qual se aplica aos pulsos ópticos de banda larga [13], resulta em (2.49).

$$\left(K + \frac{\omega_0^2}{C^2} M \right) - \frac{1}{C^2} \overline{M} \frac{d\{\Phi\}}{dt} - 2j \frac{\omega_0}{C^2} \frac{d\{\Phi\}}{dt} = 0, \quad (2.49)$$

onde \overline{M} é dado em (2.50).

$$\overline{M} = M - \frac{C^2}{4\omega_0^2} \left(K + \frac{\omega_0^2}{C^2} M \right) \quad (2.50)$$

Aplicando o algoritmo de Crank-Nicholson [28] em (2.49), resulta no sistema de equações lineares definido em (2.51).

$$A_i \{\Phi\}_{i+1} = B_i \{\Phi\}_i, \quad (2.51)$$

onde as matrizes A_i e B_i são (2.52) (2.53) .

$$A_i = -2j \frac{\omega_0}{C^2} \overline{M}_i + 0.5\Delta t \left(K_i + \frac{\omega_0^2}{C^2} M_i \right) \quad (2.52)$$

$$B_i = -2j \frac{\omega_0}{C^2} \overline{M}_i - 0.5\Delta t \left(K_i + \frac{\omega_0^2}{C^2} M_i \right), \quad (2.53)$$

onde Δt representa o passo temporal, que deve ser escolhido tal que os erros de aproximação não interfiram nos resultados.

Para a análise via TDBPM o passo temporal de 1fs é suficiente, conforme [13], [29], [30].

Com as formulações discretas estabelecidas em (2.51), (2.52) e (2.53), o próximo passo é estudar os métodos de soluções dos sistemas de equações lineares.

Os sistemas equações lineares consistem em um gargalo para o método de elementos finitos nodais (MEF). Assim a solução destes é uma etapa do MEF de grande interesse quando na busca de redução do esforço computacional.

2.3 Sistemas de equações lineares

Os sistemas obtidos da formulação FEM deste trabalho são representados por matrizes esparsas e hermitianas [4].

Os métodos de solução de sistemas de equações lineares classificam-se em dois métodos:

- Métodos diretos.
- Métodos iterativos.

Cada um desses métodos possui suas vantagens e desvantagens que dependem da dimensão das matrizes, o tipo de problema, número de condição da matriz, esparsidade do sistema obtido, etc. Essas características interferem em dois tipos de recursos computacionais que são capacidade de processamento e quantidade de memória computacionais. Porém, no caso do método iterativo, tem-se o número de condição da matriz como um limitador.

Nos casos em que o número de condição é expressivo, torna-se necessário utilizar preconditionadores, observando que nem sempre é trivial uma escolha que se encaixe ao problema particular que se pretende resolver.

2.3.1 Métodos diretos e iterativos

Os métodos diretos são aqueles derivados da decomposição gaussiana, estes possuem soluções exatas e são robustos, isto é, com grande aplicabilidade e precisão de solução. São exemplos de métodos diretos:

- Eliminação Gaussiana [31].
- Decomposição de Cholesky [32].
- Decomposição LU [32].
- Método frontal e multifrontal [18].

O método direto empregado nesta tese foi a decomposição LU, através da sub-rotina ME28 [15].

Os Métodos Iterativos podem ser classificados como estacionários e não estacionários [6], [33].

São exemplos de métodos iterativos estacionários:

- Jacobi [10], [31].
- Gauss Seidel [10], [31], [34].
- SOR [10], [31].

Os métodos iterativos não-estacionários são aqueles que podem ser escritos da forma:

$$x_i = Cx_{i-1} + b, \quad (2.54)$$

onde C é uma matriz $n \times n$, b é um vetor constante e x_i é o vetor solução na iteração i .

E não-estacionários:

- Gradiente Conjugado [35], [36].
- Gradiente Conjugado Quadrático [9].
- Gradiente Biconjugado [6].
- Gradiente Biconjugado Estabilizado [6], [9].

Os métodos não-estacionários são baseados no espaço de Krylov [37]. Estes métodos têm o espaço de busca dado por (2.54), com projeções ortogonais e biortogonais, os métodos tratam de minimizar os resíduos [7], [6], [9].

$$K(r_0, A) = [r_0, A r_0, A^2 r_0, A^3 r_0, \dots, A^{k-1} r_0] \quad k = 1, 2, 3 \dots \quad (2.55)$$

O método gradiente biconjugado quadrático apresentado por Sonneveld [38] é derivado do método biconjugado. Esta versão de Sonneveld possui uma convergência mais rápida, mas ainda possui instabilidades [33]. Em 1992 Vorst [9], apresenta o Gradiente Biconjugado Estabilizado, este método mais estável corrigiu as instabilidades do método gradiente biconjugado quadrático, aumentando significativamente as aplicações que utilizam os métodos iterativos, principalmente para os problemas de grande porte [7], [8].

Os métodos iterativos são métodos que buscam uma solução por aproximações sucessivas através do refinamento de uma solução inicial. Assim, a solução obtida não é exata. A eficiência deste método é fortemente dependente do problema aplicado e do preconditionador utilizado.

Os preconditionadores são matrizes que auxiliam na solução do sistema de equação linear tornando a matriz de coeficientes do sistema em uma matriz com um menor número de condição. A matriz mais bem condicionada é a matriz identidade, com número de condição 1. À medida que a matriz “distancia-se” da identidade o valor do número de condição aumenta, ou também, as matrizes bem condicionadas ocorrem quando seus autovalores são uniformes. Neste trabalho as matrizes de coeficientes são originadas de formulações de elementos finitos 2D nodais, com número de condição da ordem de 10^5 .

O método iterativo empregado foi o gradiente biconjugado estabilizado preconditionado da sub-rotina Lírrios [7] e o preconditionador ILUT (*Incomplete LU Thereshold*) [10]. É mostrado abaixo o algoritmo da ILUT, o qual foi retirado de [10].

```

for i = 1 : n
    w = a(i,*) # Linha i é atribuída ao vetor w
    for k = 1, ..., i-1 and wk ≠ 0
        w(k) = w(k) / a(k,k)
        aplique regra droptol para w(k)
    if w(k) ≠ 0 then
        w = w - w(k)* u(k,*)
    end if
    end
    aplique a regra lfil à linha w
    l(i, j) = w(j) j=1, ..., i-1
    u(i, j) = w(j) j=i, ..., n
    w = 0 # reinicia vetor w
end

```

A decomposição ILUT possui dois parâmetros *lfil* e *droptol*, o primeiro controla o preenchimento da matriz e o segundo a estabilidade do método. Isto ocorre pelo fato do *droptol* eliminar pequenos valores.

Os valores aceitos obedecem (2.55).

$$|val| < norma(a_{i,:}) * droptol, \quad (2.56)$$

onde *val* é o valor dos coeficientes da matriz, os quais irão permanecer na decomposição quando obedecer (2.56).

O pseudocódigo do método iterativo gradiente biconjugado estabilizado preconditionado utilizado é visto abaixo. Este algoritmo é discutido com detalhes em [6], [9] e foi extensamente estudado na tese de mestrado [7] e comparado em [8]. A Matriz *M* refere-se ao preconditionador, *r* ao vetor dos resíduos, α representa o passo na direção de busca definida pelo vetor *p*.

Este algoritmo é uma das evoluções mais estáveis e versáteis dos métodos baseados no espaço de Krylov, e aplica-se a sistemas com matrizes hermitianas, não-simétricas e não-hermitianas.


```

Calcule  $r^0 = b - Ax^0$  para algum vetor inicial  $x^0$ 
Escolha  $\underline{r}$  (por exemplo  $\underline{r} = r^0$ )
for  $i=1,2,\dots$ 
   $\rho_{(i-1)} = \underline{r}^t r^{(i-1)}$ 
  if  $\rho_{(i-1)} = 0$ , o método falhou
    if  $i = 1$ 
       $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
    else
       $\beta_{i-1} = (\rho_{(i-1)} / \rho_{(i-2)}) (\alpha_{(i-1)} / \omega_{(i-1)})$ 
       $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} (p^{(i-1)} - \omega_{(i-1)} v^{(i-1)})$ 
    endif
    resolver  $M \underline{p} = p^{(i)}$ 
     $v^{(i)} = A \underline{p}^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{(i-1)} / \underline{r}^t v^{(i)}$ 
     $s = r^{(i-1)} + \alpha_i v^{(i)}$ 
    verifique a norma de  $s$ ; se for pequena suficiente faça
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \underline{p}^{(i)}$  pare
    resolver  $M \underline{s} = s$ 
     $t = A \underline{s}$ 
     $\omega_i = t^{(i-1)} / \underline{r}^t t$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \underline{p}^{(i)} + \omega_i \underline{s}$ 
     $r^{(i)} = s + \omega_i \underline{r}$ 
    Verifique a convergência continue se necessário;
    Se  $\omega_i$  for  $\neq 0$  então continue
end

```

Deste ponto em diante métodos iterativos não-estacionários é citado simplesmente como métodos iterativos.

Os métodos iterativos são requisitados quando a memória computacional é crítica e o método direto falha neste requisito. Quando se utiliza o método iterativo com um condicionador que se adapta perfeitamente ao problema tratado, existe grande chance do sistema linear ser resolvido com um menor tempo computacional.

A decomposição LU incompleta (ILUT) aqui utilizada, é considerada o gargalo computacional para o método iterativo. E nos métodos diretos, o gargalo é o cálculo da decomposição LU. Quando se pretende resolver vários sistemas de equações lineares de uma mesma estrutura com características físicas modificadas, é de imensa valia reaproveitar cálculos já efetuados, por exemplo, a decomposição LU incompleta.

No próximo capítulo, apresenta-se um recurso relacionado ao processo computacional do método de elementos finitos e dois recursos associados aos métodos de solução de sistemas de equações lineares, sendo um relacionado ao método iterativo e outro associado ao método direto.

Capítulo 3

Algoritmos e recursos de aproveitamento de soluções

Neste capítulo, inicia-se com a estrutura de dados utilizada nas implementações e em seguida serão discutidas as rotinas básicas de um programa de elementos finitos.

Será apresentado um recurso de melhoria de desempenho associada ao processo de montagem dos elementos, para problemas repetitivos, com pequenas alterações das propriedades físicas, dois recursos de aproveitamento de soluções: um associado ao método iterativo e outro associado ao método direto.

3.1 Estrutura de dados

As matrizes obtidas da formulação de elementos finitos são esparsas. Assim, o armazenamento destes dados e os cálculos em nível de programação fazem uso desta particularidade, a fim de economizar memória e processamento computacional.

As matrizes são armazenadas em três vetores, A , $ivect$, $jvect$ e $crow$ onde os valores não-nulos são armazenados em A , a linha em $ivect$, coluna em $jvect$ e a posição de início da linha i é armazenada na posição i do vetor $crow$, em $crow(N+1)$ é armazenado número de valores não nulos armazenados. Seja exemplo em (3.1). O tratamento esparsa é mostrado em (3.2).

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 3 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

$$A = [1 \ 2 \ 3 \ 2 \ 1 \ 4 \ 4 \ 3] \quad (3.2)$$

$$ivect = [1 \ 1 \ 2 \ 3 \ 3 \ 3 \ 4 \ 4]$$

$$jvect = [1 \ 3 \ 2 \ 1 \ 3 \ 4 \ 3 \ 4]$$

$$crow = [1 \ 3 \ 4 \ 7 \ 9]$$

A Figura 3.1 apresenta um diagrama das rotinas implementadas aplicado ao problema de propagação de ondas eletromagnéticas no domínio temporal com um tempo total de simulação T , para avaliação do comportamento de uma grade óptica cujos índices variam de 1 a NG .

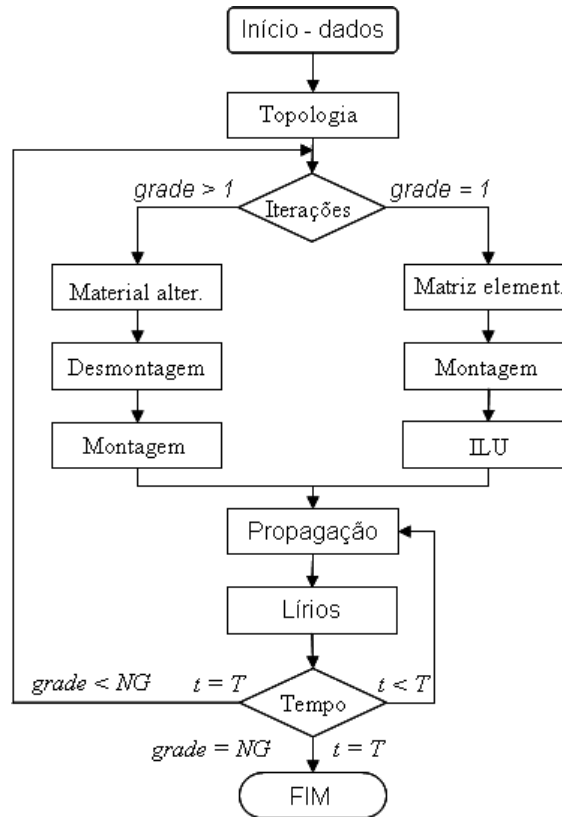


Figura 3.1 – Diagrama de fluxo TDBPM

Primeiramente determina-se a topologia do problema com o uso da malha de elementos finitos através do programa computacional GID [19]. No início atribui-se os valores dos índices de refração aos materiais da grade. Com auxílio dos vetores $Ivect$, $Jvect$ e $Crow$ a matriz global A é montada. Em seqüência, calcula-se a decomposição incompleta da matriz A . Nas próximas soluções, quando há variações nos índices dos materiais, é realizada a desmontagem dos elementos alterados na matriz A . Em seguida, realiza-se a montagem somente das alterações. Em seqüência tem-se a propagação da onda e a solução do sistema linear via método iterativo em Lírios [7]. Caso o tempo de propagação seja igual a T , verifica-se se a grade é igual à NG (variável de número total de índices de refração avaliados), se não, reinicia o processo, se sim o termina.

3.2 Rotinas principais

3.2.1 – Topologia

A rotina topologia da Figura 3.1 será responsável por determinar os vetores *crow* e *ivect*, este último é determinado indiretamente, pois primeiro determina-se o vetor *crow* e a partir deste define-se o vetor *ivect*.

A rotina topologia é executada antes de qualquer outra, pois ao calcular os valores de *A* já se sabe em quais posições inseri-los.

Outras saídas desta sub-rotina são os vetores que indicam quantos elementos compartilham um determinado nó e também quais são esses elementos. Estas saídas auxiliam no controle da estabilidade do método para que não permita a existência de elementos degenerados, ou seja, elementos triangulares com ângulos internos menores que 15° , esses elementos degenerados geram erros nas soluções numéricas, portanto este controle é essencial para uma solução correta na simulação numérica.

O vetor *crow* é de fundamental importância, pois auxilia a sub-rotina montagem com a definição do início de cada linha no vetor que armazena a matriz *A* na forma esparsa.

A topologia é dependente da malha. A malha empregada pode ser constituída de elementos triangulares lineares ou quadráticos, conforme a Figura 3.2 e Figura 3.3, respectivamente.

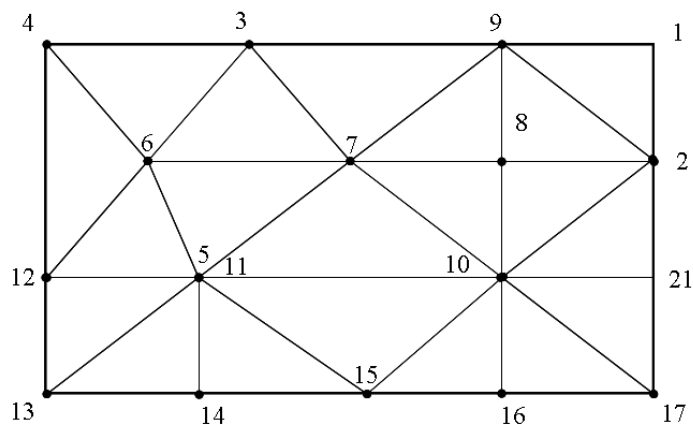


Figura 3.2 – Malha de elementos triangulares lineares

Tanto no caso linear quanto no caso quadrático o nó de uma malha pode estar na fronteira ou não estar na fronteira. Levando isto em consideração, determina-se a expressão algébrica de valores não-nulos de A correspondente ao nó i . Esta expressão é dada em função do número de elementos k que compartilham o nó i . Os resultados para o caso linear na Tabela 3.1 e para o caso quadrático na Tabela 3.2.

<i>Nó</i>	<i>Nº elementos (k)</i>	<i>Valores não-nulos</i>	<i>Expressão algébrica</i>
1	1	3	$k + 2$
3	3	5	$k + 2$
4	2	4	$k + 2$

Tabela 3.1 – Fronteira

<i>Nó</i>	<i>Nº elementos (k)</i>	<i>Valores não-nulos</i>	<i>Expressão algébrica</i>
6	5	6	$k+1$
7	6	7	$k+1$
8	4	5	$k+1$

Tabela 3.2 – Não-fronteira

Os nós possuem as classificações: fronteira ou não-fronteira e primários ou secundários, no caso de elementos quadráticos, os quais foram utilizados neste trabalho. Os nós primários definem as arestas dos triângulos e os nós secundários localizam-se na aresta entre os dois nós primários, conforme mostrado na Figura 3.3.

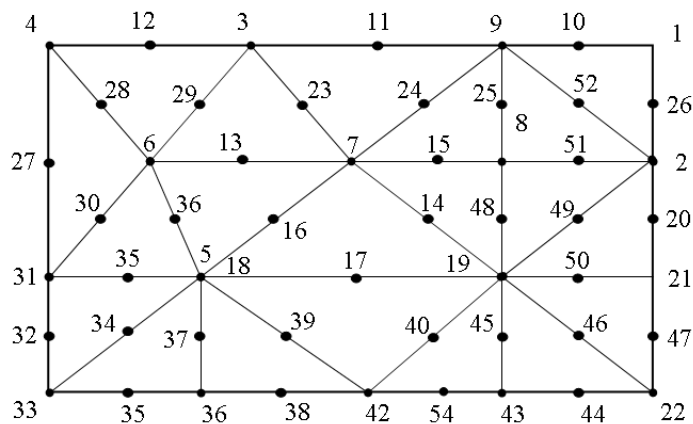


Figura 3.3 - Malha de elementos triangulares quadráticos

Fazendo uma análise da malha de maneira análoga ao caso dos elementos lineares, determinou-se a expressão algébrica que representa o número de valores não-nulos atribuídos na matriz global conforme a Tabela 3.3, Tabela 3.4, Tabela 3.5 e Tabela 3.6.

<i>Nó</i>	<i>Nº elementos (k)</i>	<i>Valores não- nulos</i>	<i>Expressão algébrica</i>
1	1	6	$3k + 3$
3	3	12	$3k + 3$
4	2	9	$3k + 3$

Tabela 3.3 – Fronteira nó primário

<i>Nó</i>	<i>Nº elementos (k)</i>	<i>Valores não- nulos</i>	<i>Expressão algébrica</i>
10	1	6	6
11	1	6	6
12	1	6	6

Tabela 3.4 - Fronteira nó secundário

<i>Nó</i>	<i>Nº elementos (k)</i>	<i>Valores Não- nulos</i>	<i>Expressão algébrica</i>
6	5	16	$3k + 1$
7	6	19	$3k + 1$
8	4	13	$3k + 1$

Tabela 3.5 – Não-fronteira nó primário

<i>Nó</i>	<i>Nº elementos (k)</i>	<i>Valores não- nulos</i>	<i>Expressão algébrica</i>
13	2	9	9
15	2	9	9
14	2	9	9

Tabela 3.6 – Não-fronteira nó secundário

Nas tabelas 3.4 e 3.6 são mostrados os valores não-nulos para o nó secundário, nota-se que estes permaneceram constantes, com 6 e 9 contribuições respectivamente.

Todas as expressões algébricas definidas nas Tabelas 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 podem ser provadas via indução finita.

Após estas análises, tem-se o pseudocódigo da sub-rotina topologia para encontrar o vetor *crow*, o qual definirá as posições onde se iniciam cada uma das linhas da matriz *A* armazenada em forma de vetor de valores não-nulos.

```

faça  l = 1, Número de nós
        k = nelnos(l)
        se linear então
            se l não está na fronteira então
                crow(l+1) = crow(l) + k + 1
            senão
                crow(l+1) = crow(l) + k + 2
                i=i+1
            end if
        se não-linear então
            se nó_primário então
                se l não está na fronteira então
                    crow(l+1) = crow(l) + 3*k + 1
                senão
                    crow(l+1) = crow(l) + 3*k + 3
                    i = i+1
                fim se
            senão
                se nó_secundário então
                    crow(l+1) = crow(l) + k + 7
                senão
                    crow(l+1) = crow(l) + k + 5
                    i = i+1
                fim se
            fim se
        fim se
fim faça

```

Além do vetor *crow* no pseudocódigo acima, a sub-rotina topologia tem como saída adicional o vetor *elno*, o vetor $elno(crowtop(k))$ até $elno(crowtop(k+1) - 1)$, inclusive, possuem todos os elementos que compartilham o nó *k*.

3.2.2 – Designação

Dado um nó *I* de um elemento *IEL*, a rotina designação consiste em determinar todos os outros nós de *IEL* que irão contribuir para o nó *I*. Esta sub-rotina tem como saída o vetor indexa que contém todos os nós de um determinado elemento *IEL*. Se o elemento for linear o vetor indexa tem dimensão 3 e no caso quadrático a dimensão será 6.

3.2.3 – PML

A sub-rotina PML tem como saída três vetores de dimensão igual ao número de elementos da malha. Esses vetores correspondem aos valores de s , s_y e s_z . Esta sub-rotina é auxiliada por uma que calcula o centro de massa de cada elemento, este irá auxiliar o cálculo dos valores da PML em cada elemento, determinando a distância d entre cada elemento e a interface de início da PML.

3.2.4 – Matrizes Elementares

As matrizes elementares são montadas a partir do vetor *indexa*, tem-se para um elemento linear uma matriz 3×3 e para um elemento quadrático uma matriz 6×6 . Os valores da matriz elementar são calculados conforme [4]. Ressalta-se que os valores indicados em [4], para o caso quadrático, merecem ressalvas, pois possuem erros nas componentes (1,4), (2,5), (1,6) decorrentes das integrações, as quais foram refeitas.

3.2.5 - Montagem

Após o cálculo da matriz elementar, deve-se inseri-la na matriz global, a sub-rotina que faz essa tarefa será a montagem. Na Montagem, utiliza-se o vetor *indexa* para determinar a linha e coluna de inserção dos valores da matriz elementar adicionando-os a matriz global.

No exemplo abaixo é mostrado o vetor *indexa* (3.3), a matriz elementar correspondente (3.4) e em (3.5) tem-se as posições na matriz global A em que os coeficientes de a serão inseridos.

$$\textit{indexa} = [3 \quad 5 \quad 6] \tag{3.3}$$

$$a = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \tag{3.4}$$

$$a = \begin{bmatrix} A(3,3) & A(3,5) & A(3,6) \\ A(5,3) & A(5,5) & A(5,6) \\ A(6,3) & A(6,5) & A(6,6) \end{bmatrix} \tag{3.5}$$

3.2.6 - Aplicação das condições de contorno – *Aplicacond*

A formulação do método dos elementos finitos está diretamente ligada às condições de contorno. As condições de contorno essenciais são impostas através da sub-rotina *aplicacond*. As entradas são a matriz e o vetor do lado direito do sistema tendo como saídas os mesmo vetores, porém alterados pelas condições de contorno, os vetores *ivect* e *jvect* permanecem inalterados. Os nós que pertencem ao contorno terão seus valores nulos exceto na diagonal, e o vetor lado direito assumirá o valor imposto pela condição de contorno ou atualizado posições correspondentes [4].

3.2.7 - Eliminando linhas e colunas nulas – *Squash*

Após inserir as condições de contorno, as linhas e colunas correspondentes da matriz *A* podem ser eliminadas, esse procedimento é realizado pela sub-rotina *Squash*, a utilização desta sub-rotina não é obrigatória, porém esta diminui a dimensão da matriz, liberando espaço de memória computacional, bem como proporciona uma economia de processamento. As entradas principais são os vetores *A*, *ivect*, *jvect*, as saídas são esses vetores alterados mais um outro vetor (*ij_splash*) que permite o retorno aos vetores com a dimensão original da matriz. As implementações baseou-se em uma linguagem estruturada Fortran 90 sob licença GNU no Linux e Fortran 90 da Digital no Windows XP.

3.3 Aproximações

3.3.1 - Método Iterativo

O método iterativo utilizado foi o Gradiente Biconjugado Estabilizado Precondicionado (BCGS) [9], o qual é um método não-estacionário que tem como base de busca o espaço de Krylov.

O preconditionador utilizado foi a decomposição ILUT incompleta [10]. A sub-rotina de solução do sistema de equações lineares utilizada nesta etapa foi desenvolvida na dissertação de mestrado [7]. O custo computacional de solução através do BCGS está diretamente relacionado ao preconditionador [10].

Na Figura 3.4, ilustra um exemplo de uma malha linear, onde os elementos 5, 6, 7, 8, 11 e 27 foram alterados. Resolvendo o problema sem as alterações é necessário executar a decomposição ILUT. Após realizar a modificação nos elementos citados acima, seria necessário recalculer novamente o preconditionador ILUT aumentando o tempo total de processamento. O recurso desenvolvido neste trabalho permite o reaproveitamento da primeira decomposição ILUT. E ainda fazer somente a montagem dos elementos alterados aproveitando a matriz já montada para o problema original.

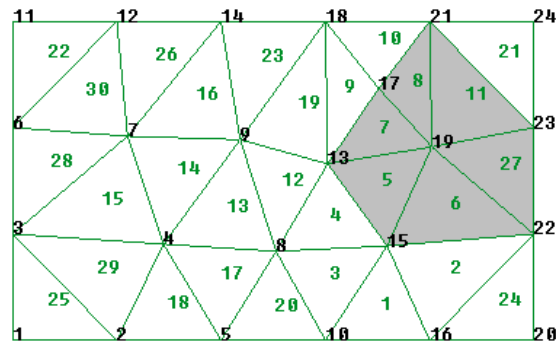


Figura 3.4 – Malha de elementos lineares alteradas, elaborada no GID.

Em [33], tem-se uma afirmação interessante sobre a escolha de um preconditionador “... um bom preconditionador para resolver um sistema linear esparsa pode ser visto como uma combinação de arte e ciência...”. Considerando que a decomposição é incompleta, já é uma aproximação da decomposição LU, então se estabeleceu que a primeira decomposição incompleta fosse válida também para as subseqüentes modificações. Isto desde que fossem realizadas pequenas alterações nas características físicas das malhas, ou ainda na onda eletromagnética incidente.

Para deixar esta aproximação mais eficiente ao invés de aplicarmos uma primeira decomposição a todos os sistemas de equações lineares subseqüentes, define-se que será permitida algumas aplicações da decomposição ILUT ao longo do processo de simulação. Esta flexibilidade permitirá um código mais eficiente e com melhor desempenho, à medida que será realizado um estudo de estratégias de aplicação do preconditionador.

Na Figura 3.5 é mostrada uma ilustração da aplicação da ILUT na simulação de uma grade óptica no domínio da frequência, onde o preconditionador é aplicado à medida que o comprimento de onda é modificado no decorrer da simulação, o comprimento de onda modificado para determinar o coeficiente de reflexão.

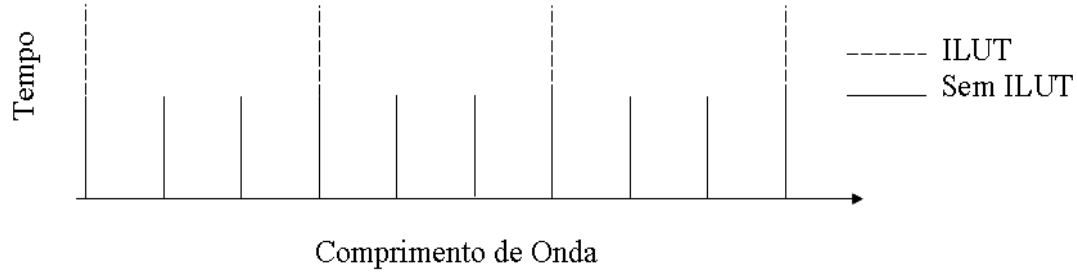


Figura 3.5 – Ilustração da aplicação da decomposição incompleta em intervalos fixos de comprimento de onda.

Propõe-se três tipos de estratégias de aplicação da ILUT:

a) Corte ótimo

O método iterativo caracteriza-se por ser um efetuar refinamentos do vetor solução do sistema de equações lineares, executando iterações repetidamente até que se obtenha a convergência, ou que atinja um número máximo de iterações. A eficiência é medida pelo número de iterações, quanto menor mais eficiente.

A estratégia de corte ótimo, proposta aqui, é realizada com uma análise no número de iterações do método iterativo. Primeiramente se aplica a ILUT no problema inicial e a aproveita nas próximas alterações, quando isso é feito os números de iterações aumentam e o tempo computacional também. Então se determina que: quando o número de iterações (*iter*) atingir um valor máximo (*corte_máx*), deve-se recalculer a ILUT.

Sinteticamente tem-se:

se iter maior que corte_máx, então executa-se a ILUT.

Fez-se a análise para encontrar o corte_ótimo através de um gráfico *tempo* × *corte_máx*.

b) Corte acumulado

O corte é realizado com base no tempo acumulado das soluções dos sistemas de equações lineares. Neste caso aplica-se a primeira ILUT, e o tempo computacional da solução de cada sistema de equação linear é acumulado em uma variável, somando-se os tempos computacionais das soluções. Quando este somatório for maior que o tempo computacional necessário para realizar a decomposição ILUT, então se executa novamente a decomposição ILUT. Posteriormente armazena-se o tempo computacional e zera-se a variável do tempo acumulado, iniciando-se novamente a estratégia.

Sinteticamente tem-se o processo de decisão:

*se tempo acumulado maior que tempo da ILUT imediatamente anterior,
então executa-se uma nova ILUT*

c) Corte fixo

O corte fixo é uma estratégia aplicada quando a ILUT é realizada em intervalos fixos de comprimento de onda.

Na aplicação no domínio da frequência foi analisado o dispositivo para vários comprimentos de onda com a finalidade de elaborar o gráfico do coeficiente de reflexão. Então entre um dado comprimento de onda máximo e mínimo foi avaliada qual a dimensão ótima do intervalo para aplicação da ILUT, que fornece o menor tempo computacional de simulação. Na Figura 3.5 é mostrada uma ilustração desta estratégia.

3.3.2 - Método Direto

Para a solução do sistema obtido via método direto, utiliza-se a sub-rotina ME28 [15]. O recurso empregado foi o “*Small Rank Adjustment*”(SMR) [1], [2]. Em [1] esta aproximação foi realizada em sistemas de equações lineares obtidos por expansão do campo em bases de Wannier [3]. Neste trabalho toma-se esta sugestão e aplica-se o SMR na solução dos sistemas de equações lineares obtidos pela formulação do método de elementos finitos 2D. Para tanto foi implementado o FEM de maneira a ser identificada a matriz R , que corresponde às alterações das características dos elementos.

Small rank adjustment é dado por (3.6).

$$(A + \bar{R})^{-1} = A^{-1} - A^{-1}X(R^{-1} + X' A^{-1} X)^{-1} X' A^{-1} \quad (3.6)$$

Onde $A: N \times N$ é a matriz de coeficientes, correspondente ao problema original (sem as alterações), $R: r \times r$ é equivalente a $\bar{R}: N \times N$ e correspondem ao complemento às contribuições em A dos elementos alterados.

Após efetuar as modificações dos elementos a matriz $(A + \bar{R})$ é exatamente a mesma matriz de coeficientes caso fosse realizada toda a montagem da matriz novamente.

Para efeito de simplificação define-se C em (3.7).

$$C = X(R^{-1} + X' A^{-1} X)^{-1} X' \quad (3.7)$$

A matriz $X: N \times r$ refere-se à matriz unitária dos nós pertencentes aos elementos alterados.

Substituindo C em (3.6) tem-se (3.8).

$$(A + R)^{-1} = A^{-1} - A^{-1} C A^{-1} \quad (3.8)$$

Seguem dois sistemas de equações: (3.9) é o original e (3.10) é o alterado, onde R representa os valores devido as alterações das características físicas realizadas nos elementos.

$$Ay = b \quad (3.9)$$

$$(A + R)x = b \quad (3.10)$$

Isolando x em (3.10) tem-se (3.11).

$$x = (A + R)^{-1} b \quad (3.11)$$

Substituindo (3.8) em (3.11) resulta em (3.12).

$$x=(A^{-1}-A^{-1}CA^{-1})b \quad (3.12)$$

Multiplicando (3.12) por A e utilizando (3.10) tem-se (3.13) - (3.15).

$$Ax=(I-CA^{-1})b \quad (3.13)$$

$$Ax=b-CA^{-1}b \quad (3.14)$$

$$Ax=b-Cy \quad (3.15)$$

Reescrevendo (3.15), tem-se a expressão do sistema de equações equivalente a (3.10) em (3.16).

$$Ax=b-X(R^{-1}+X^tA^{-1}X)^{-1}X^ty \quad (3.16)$$

Em (3.16) tem-se dois cálculos de inversa de matrizes, a inversa de R não será necessária, como é mostrado em (3.17). A matriz A , referente aos elementos da malha original, é calculada indiretamente pela decomposição LU a qual é obtida somente uma vez, então (3.16) resulta em (3.17).

$$Ax=b-X(I_R+X^tU^{-1}L^{-1}XR)^{-1}RX^t \quad (3.17)$$

onde I_R é a matriz identidade de dimensão r .

Nota-se que em (3.17), A é a matriz original, x é a solução referente ao problema com as alterações das características físicas dos elementos e o vetor lado direito b modificado devido às alterações.

Como a decomposição LU de A , foi calculada na primeira vez para o problema original, então é necessário apenas a solução dos sistemas triangulares em (3.17) quando os elementos são alterados, conforme as equações de (3.18) à (3.21), onde \bar{b} representa o vetor lado direito de (3.17).

Resolve-se primeiro o sistema de equações triangular inferior (3.20), obtendo-se \bar{w} e resolvendo (3.21) tem-se a solução de (3.18).

$$Ax = \bar{b} \tag{3.18}$$

$$LUx = \bar{b} \tag{3.19}$$

$$L\bar{w} = \bar{b} \tag{3.20}$$

$$Ux = \bar{w} \tag{3.21}$$

As rotinas de multiplicações (vetor \times matriz), (vetor \times vetor) , (escalar \times vetor), soma e subtração entre vetores foram implementadas em [7], estas rotinas foram reaproveitadas aqui.

Capítulo 4

Resultados

Os códigos de elementos finitos implementados foram validados inicialmente através da avaliação da equação de Poisson.

Nos itens subsequentes foram analisados o desempenho computacional para problemas implementados no domínio do tempo e no domínio da frequência.

O método iterativo utilizado foi o Gradiente Biconjugado Estabilizado Precondicionado (Bicgstab). O preconditionador foi a Decomposição LU Incompleta *Threshold* (ILUT).

No Anexo I, tem-se um trabalho que tratou da escalabilidade dos métodos iterativos do espaço de Krylov, este foi realizado no início do doutoramento. Os resultados obtidos apóiam a opção pelo método BCGS, pois além de ser o método mais estável é também o que apresentou uma melhor escalabilidade.

Os resultados de desempenho temporal obtidos neste trabalho representam valores médios de sete instâncias.

Os códigos foram implementados na linguagem Fortran 90 em ambiente Linux sob licença GNU e para o sistema operacional Windows XP utilizou-se o F90 da Digital.

4.1 – Poisson

A aplicação das equações de Poisson em eletromagnetismo é obtida pelo estudo do potencial devido a duas cargas.

$$\epsilon \nabla^2 U = -\rho \quad (4.1)$$

Em (4.1) ϵ é a permissividade elétrica, U é o potencial elétrico e ρ é a densidade de carga.

Na Figura 4.1, temos a distribuição do potencial elétrico em um plano condutor em (a) e o mesmo plano com duas linhas condutoras em (b), na extremidade superior do plano é aplicado uma tensão de 1V. O gráfico é apresentado com as curvas de níveis e a respectiva distribuição do potencial em 3D.

Os sistemas lineares desta aplicação foram resolvidos através do método iterativo (BCGS) preconditionado com a ILUT. A decomposição ILUT do problema com duas cargas foi a mesma decomposição aplicada quando não existiam as cargas. Isto mostrou que o aproveitamento da ILUT funcionou, estudos mais detalhados estão nos tópicos seguintes.

Pode-se visualizar os resultados, nas duas situações a convergência do método iterativo ocorreu em duas iterações para as duas situações, ressaltando-se que fora utilizado o mesmo preconditionador.

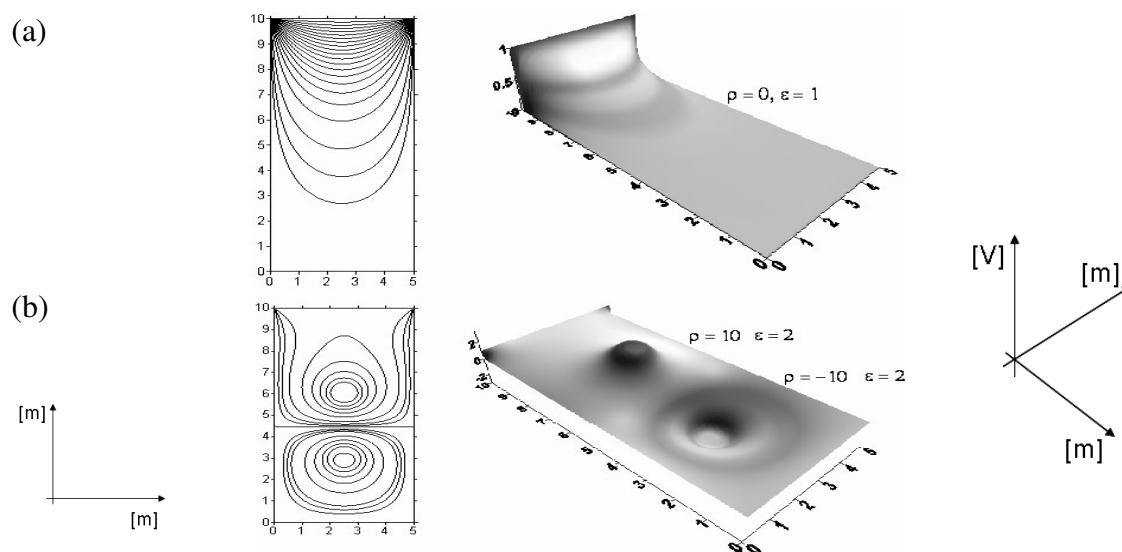


Figura 4.1- Distribuição do potencial elétrico em um plano condutor: (a) sem cargas e (b) com duas cargas.

4.2 - Domínio do Tempo

Time domain beam propagation method (TDBPM) [13], apresentado no Capítulo 3 é aplicado a uma grade óptica rodeada por PML, mostrado na Figura 4.1. Esta simulação possui um tempo de propagação total de 220 fs dividido em 256 passos.

$$\phi(y, z, t = 0) = \phi_0(y) \exp\left[-\left(\frac{z - z_0}{W_0}\right)^2\right] \exp[-j\beta(z - z_0)] \quad (4.2)$$

O pulso inicial é dado por (4.2), onde z_0 é a posição central do um modo transversal fundamental (ϕ_0) [40] e uma Gaussiana na direção longitudinal (z), β é a constante de propagação e W é a frequência angular. O comprimento de onda utilizado foi de $1.5\mu\text{m}$. A malha quadrática foi obtida utilizando o programa computacional GID, constituída de 48429 nós e 23924 elementos.

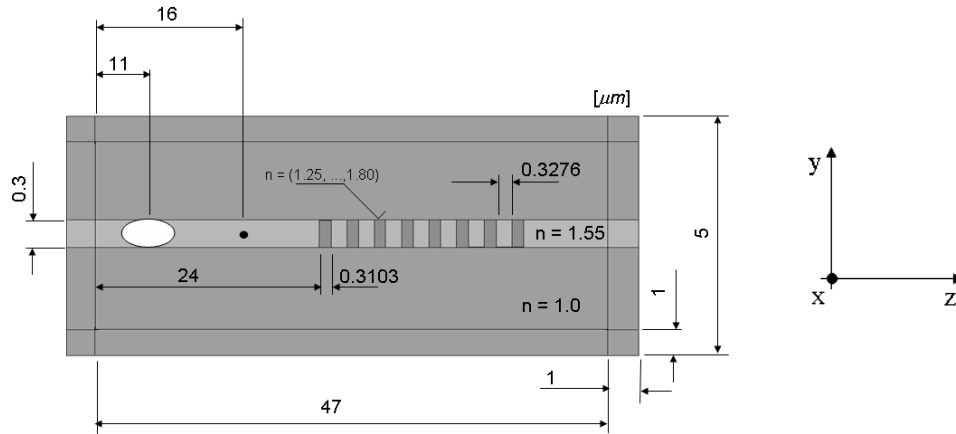


Figura 4.1 – Grade óptica.

O pulso (4.2) é iniciado em $z_0 = 11\mu\text{m}$, em $16\mu\text{m}$ refere-se ao ponto de observação dos pulsos incidente e refletido.

Nesta aplicação variou-se o índice de refração da grade de 1.25 a 1.8, o método de solução utilizado foi o BCGS com preconditionador ILUT. Analisou-se em quatro situações: com a decomposição ILUT somente no primeiro índice de refração (1.25), a cada modificação do índice de refração, com montagem de toda a matriz e com a remontagem de apenas os elementos com os novos índices. Na Figura 4.2, é mostrado o pulso inicial aplicado à grade com índice de refração igual a 1.25.

Na Figura 4.2, é mostrado o pulso inicial aplicado à grade com índice de refração igual a 1.25.

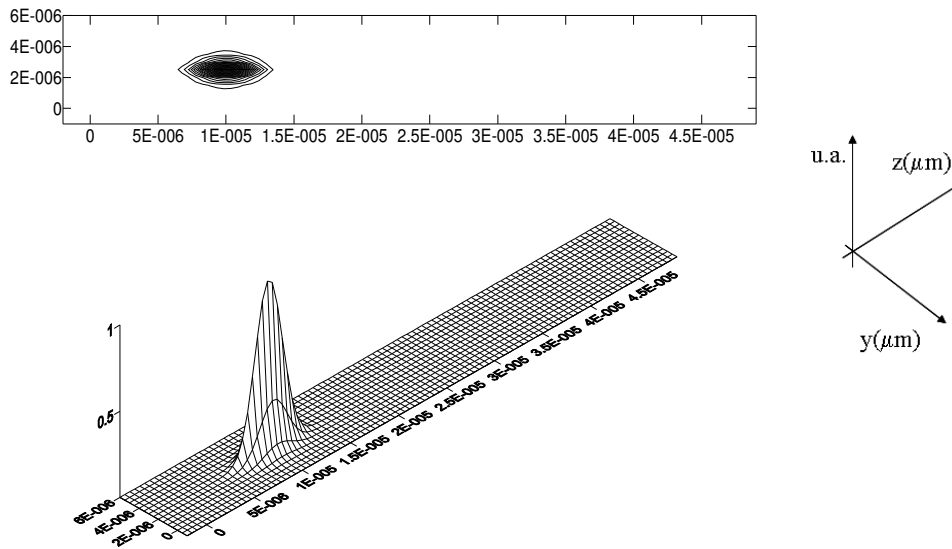


Figura 4.2 – Pulso inicial, modo TE, módulo da componente E_x , para índices de 125 na grade, 1.55 no guia e $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$.

Em termos de desempenho computacional, o tempo ganho com o aproveitamento da ILUT foi diluído nos números de passos temporais, não ocorrendo ganhos significativos, pois a decomposição ILUT é realizada apenas no primeiro passo temporal do primeiro índice de refração dos 14 analisados.

Ao aproveitar a decomposição ILUT tem-se um acréscimo temporal em cada passo de propagação e como os números de passos são elevados a economia pelo aproveitamento é consumida ao resolver os sistemas de equações lineares com um tempo mais elevado.

Este acréscimo no tempo de solução ocorre devido ao aumento nos números de iterações por estar utilizando uma decomposição ILUT aproximada no método iterativo. Para esta simulação os parâmetros de controle de preenchimento: L_{fil} e de estabilidade: $Droptol$ da ILUT influenciavam significativamente no desempenho computacional do método.

Na Figura 4.3, é mostrado o gráfico do coeficiente de reflexão para índice de refração da grade de 1.45. Este resultado concorda muito bem com o obtido em [13].

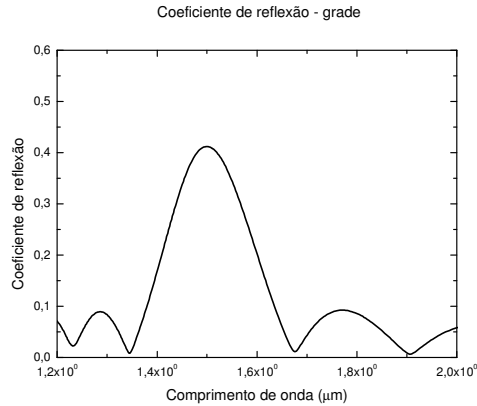


Figura 4.3 – Coeficiente de reflexão da grade para modo TE, componente E_x , com índice de refração entre de 1.45 e $\lambda = 1.5 \mu\text{m}$.

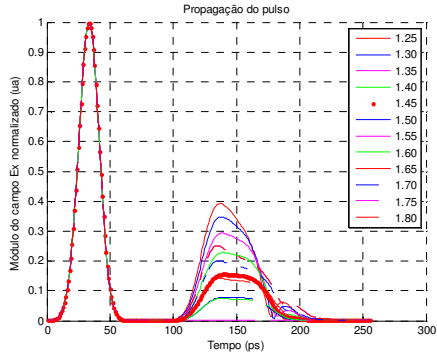
Na Figura 4.4, os pulsos incidentes e refletidos no ponto de observação demonstram que os recursos de remontagem e aproveitamento da ILUT são concordantes com o método tradicional o qual utilizaria a montagem de todos os elementos e aplicação da ILUT a cada alteração do dispositivo.

Os resultado apresentados na Figura 4.4, foram obtidos em um computador Athlon X2 5600, 4GB de RAM e sistema operacional Windows XP.

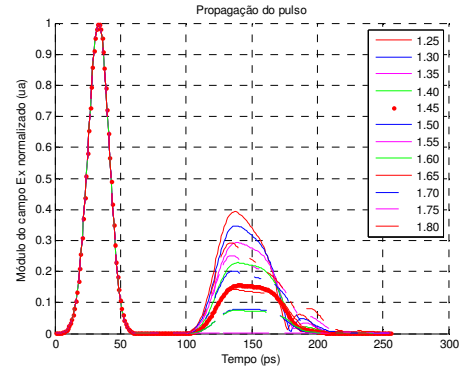
As Figura 4.5, Figura 4.6 e Figura 4.7 referem-se à grade com índices 1.25, 1.45, 1.80 obtidos com método convencional, isto é aplicando a ILUT a cada modificação do índice de refração com a montagem de toda a matriz.

Nas figuras 4.8, 4.9 e 4.10, no item a) são mostradas as curvas de níveis para os índices de refração: 1.25, 1.45 e 1.8 com método convencional (ILUT a cada alteração de índice de refração sem remontagem) e no item b) tem-se a versão que utilizou os recursos propostos e todos os resultados foram concordantes em todos os índices de refração avaliados. Estes resultados mostraram o bom funcionamento dos recursos propostos de remontagem e aproveitamento da ILUT.

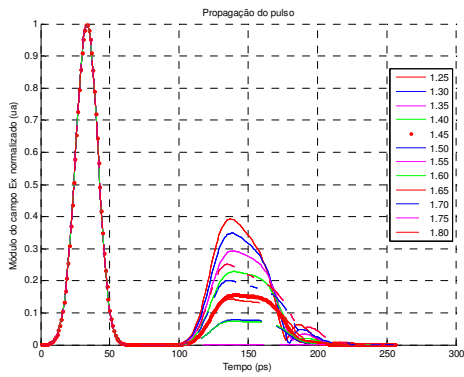
Ressalta-se que para índice de refração de 1.8 é um dos piores casos, pois a decomposição incompleta empregada neste caso foi a mesma ILUT do índice de refração de 1.2. Os resultados obtidos também foram concordantes.



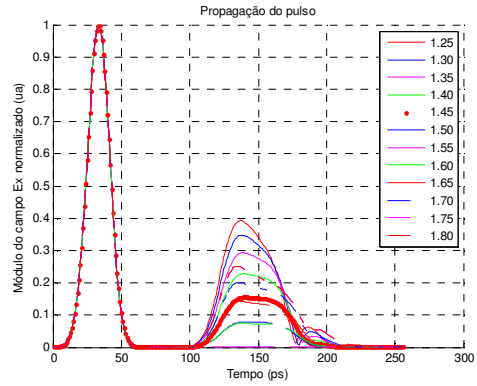
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.4 - Pulsos incidentes e refletidos para grade óptica com $n = 1.25$ a 1.8 e $\lambda = 1.5 \mu m$, (a) ILUT sempre com montagem de todos os elementos, (b) ILUT sempre com remontagem dos elementos modificados, (c) ILUT em $n=1.25$ com montagem de todos os elementos, (d) ILUT em $n=1.25$ com remontagem dos elementos modificados

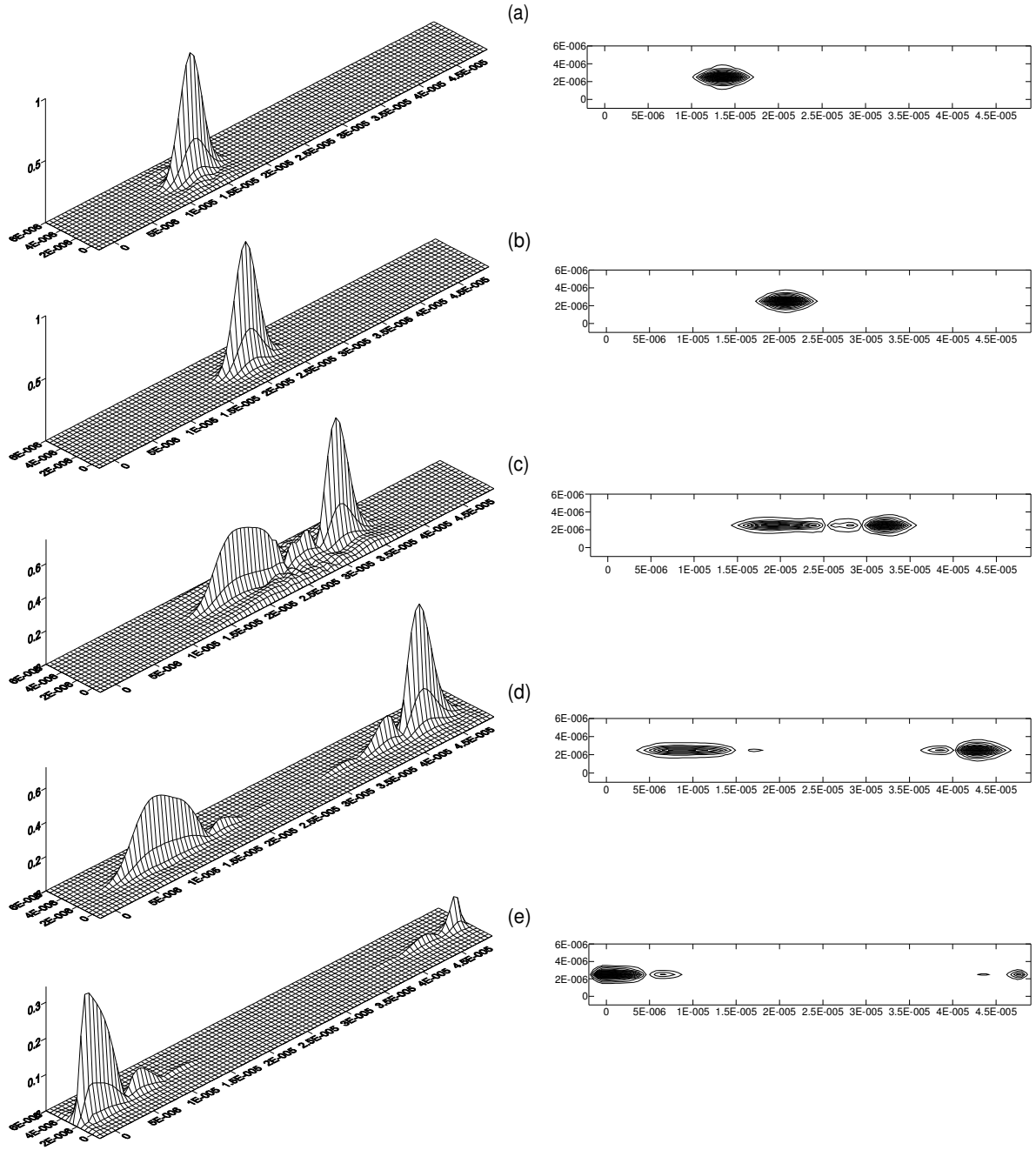
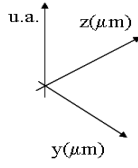


Figura 4.5 – Envoltória e curvas de níveis na grade óptica, Modo TE, módulo da componente E_x , com índice de refração de 1.25, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – (a) $20\Delta t$, (b) $60\Delta t$, (c) $120\Delta t$, (d) $180\Delta t$, (e) $240\Delta t$.

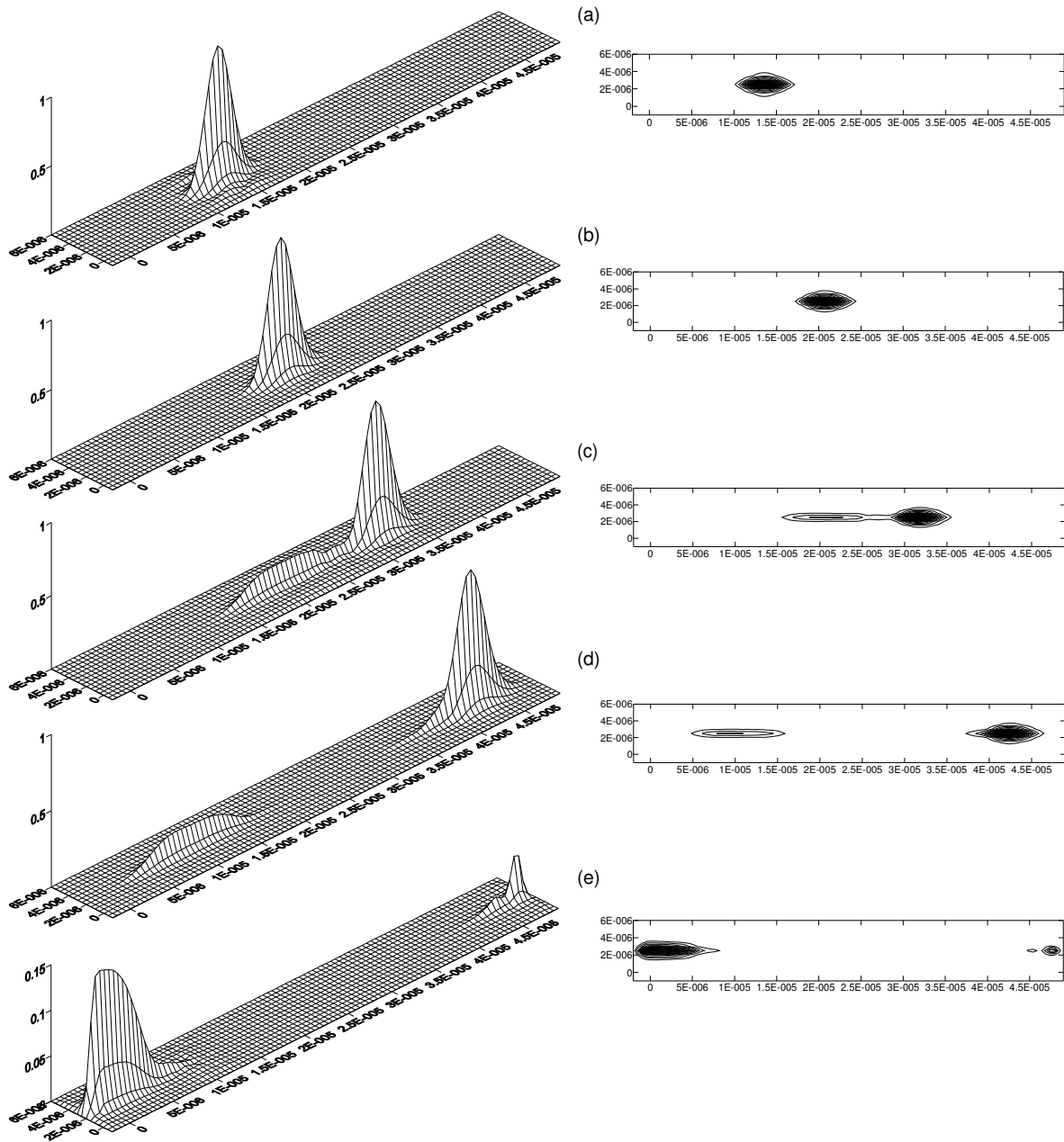
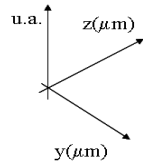


Figura 4.6 - Envoltória e curvas de níveis na grade óptica, Modo TE, módulo da componente E_x , com índice de refração de 1.45, $\lambda=1.50\mu m$, $\Delta t = 220/256fs$ – (a) $20\Delta t$, (b) $60\Delta t$, (c) $120\Delta t$, (d) $180\Delta t$, (e) $240\Delta t$.

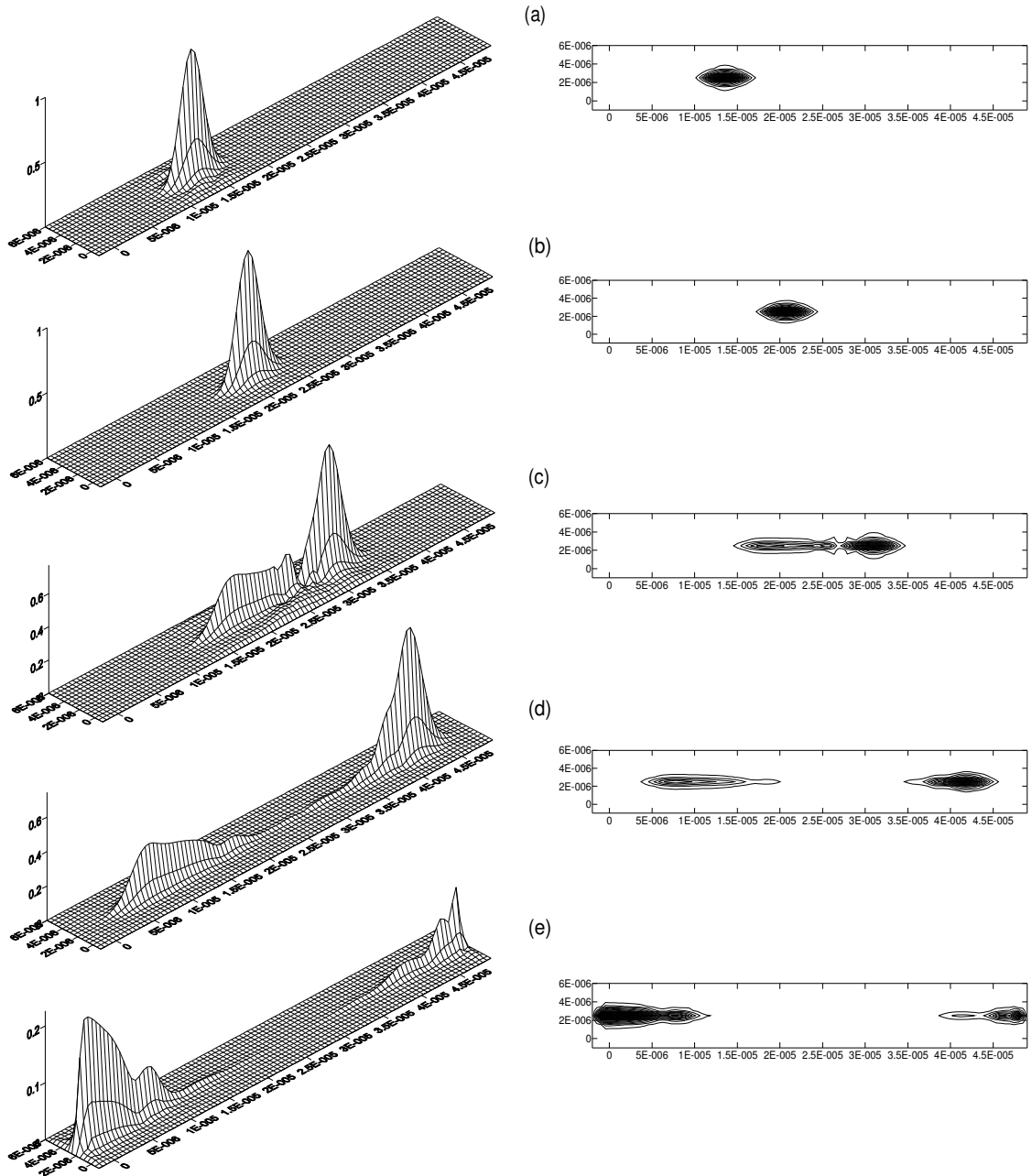
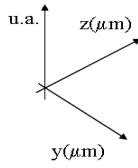


Figura 4.7 - Envoltória e curvas de níveis na grade óptica com índice de refração de 1.80, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s$ – (a) $20\Delta t$, (b) $60\Delta t$, (c) $120\Delta t$, (d) $180\Delta t$, (e) $240\Delta t$. a, Modo TE, módulo da componente E_x ,

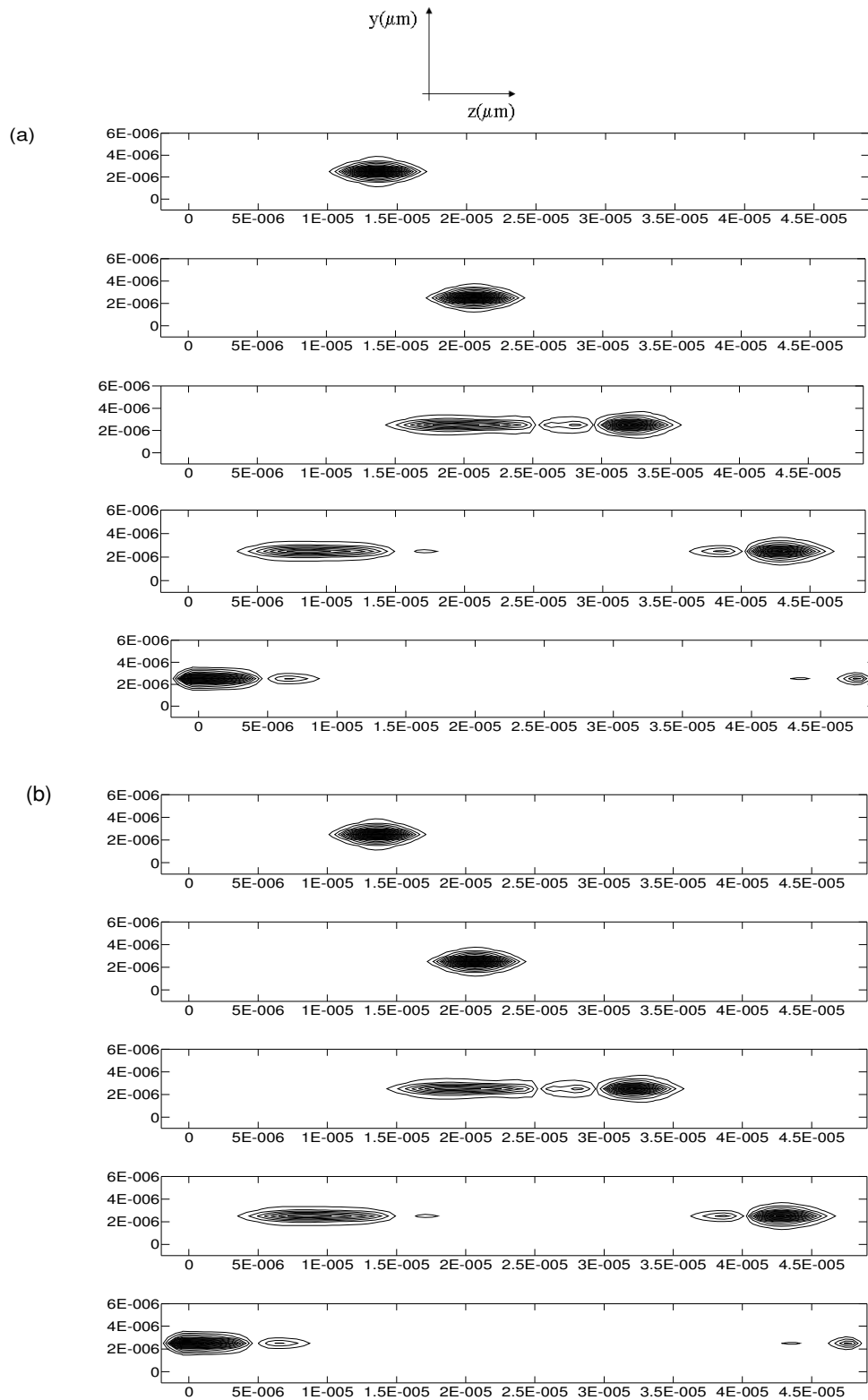


Figura 4.8 - Grade óptica com índice $n = 1.25$, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s - 20\Delta t, 60\Delta t, 120\Delta t, 180\Delta t, 240\Delta t$, (a) montagem de todos os elementos com ILUT para todos os materiais, (b) ILUT somente para $n=1.25$ e remontagem dos elementos alterados.

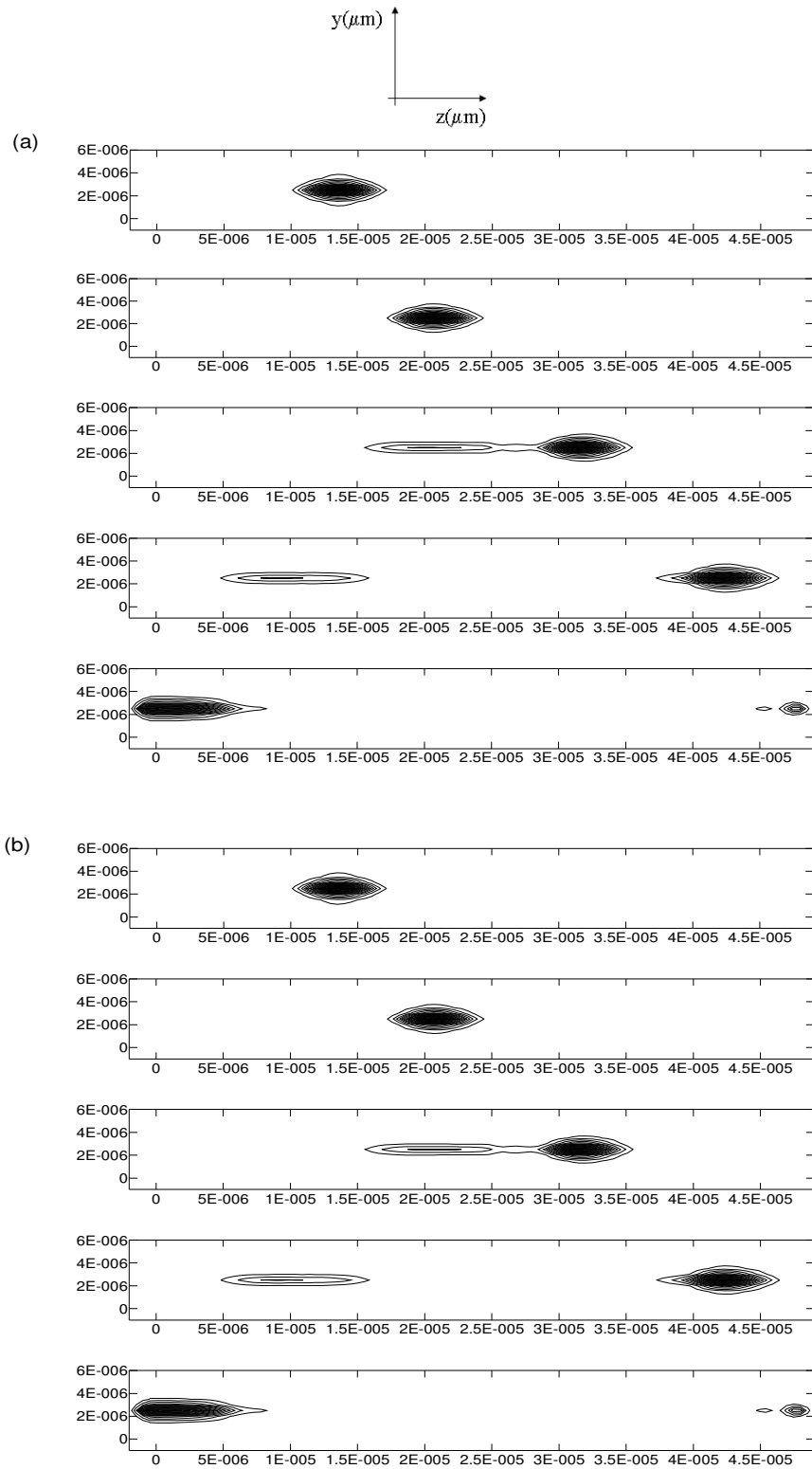


Figura 4.9 - Grade óptica com índice $n = 1.45$, $\lambda=1.50\mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s - 20\Delta t, 60\Delta t, 120\Delta t, 180\Delta t, 240\Delta t$, (a) montagem de todos os elementos com ILUT para todos os materiais, (b) ILUT somente para $n=1.25$ e remontagem dos elementos alterados.

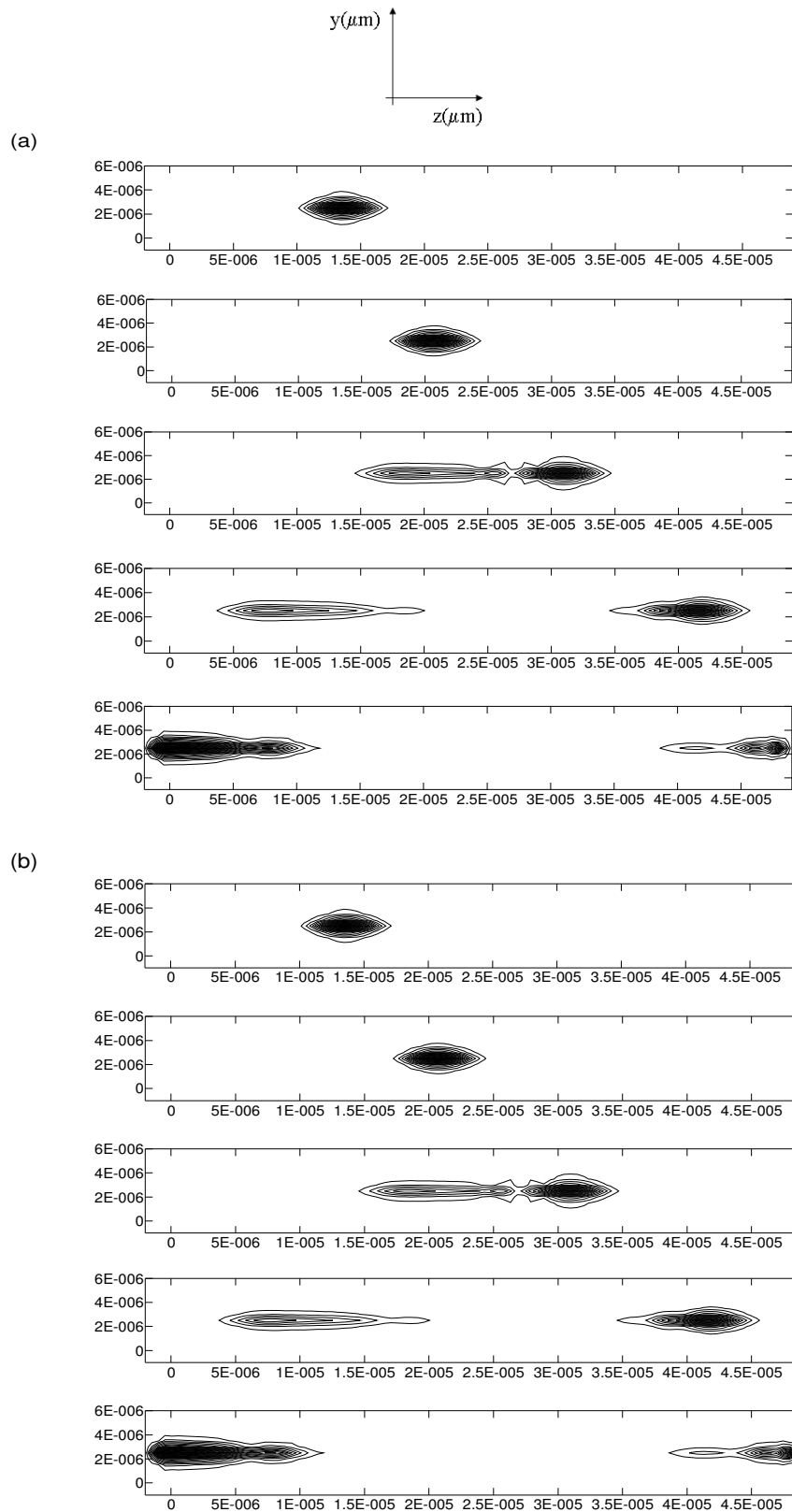


Figura 4.10 - Grade óptica com índice $n = 1.80$, $\lambda = 1.50 \mu\text{m}$, $\Delta t = 220/256f s - 20\Delta t, 60\Delta t, 120\Delta t, 180\Delta t, 240\Delta t$, (a) montagem de todos os elementos com ILUT para todos os materiais, (b) ILUT somente para $n=1.25$ e remontagem dos elementos alterados.

4.3 - Domínio da frequência

4.3.1 - Guia Canal

Para dar início à validação dos códigos aqui implementados realizou-se de maneira similar a [14], utilizando um guia canal com o modo fundamental TE em um plano ao centro da estrutura perpendicular a direção de propagação z , com comprimento de onda de $1,55\mu\text{m}$, o domínio é delimitado por PMLs, esta estrutura pode ser visto na Figura 4.11. A malha da estrutura foi desenvolvida no programa computacional GID com 35759 nós e 17698 elementos.

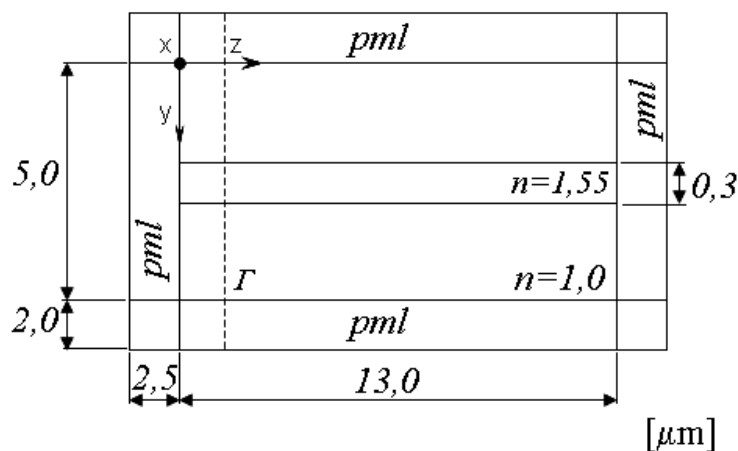


Figura 4.11 – Guia Canal

A Figura 4.12 mostra que as camadas perfeitamente casadas funcionaram muito bem absorvendo o modo fundamental, este resultado concordou com aquele obtido por [14].

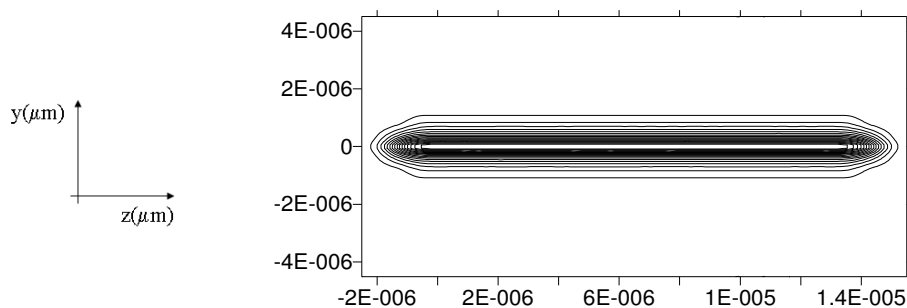


Figura 4.12 – Campo inicial

4.3.2 - Grade de Bragg

Nesta aplicação realizou-se análises de desempenho de todos os recursos mostrados no Capítulo 3. Na Figura 4.13 tem a ilustração da grade a ser utilizada. Esta estrutura foi também estudada em [14].

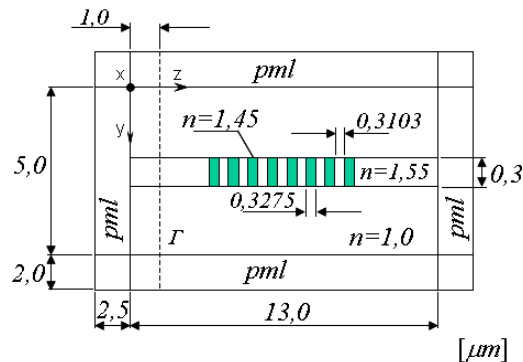


Figura 4.13 – Grade óptica

Nas Tabelas 4.1 e 4.2 abaixo são mostrados os resultados obtidos para índices entre 1.3 e 1.75 com variação de 0.05, e $\lambda = 1.55\mu m$. Tomando 10 amostras para todos os índices, apresenta-se os resultados nas tabelas abaixo.

Inicialmente compara-se na Tabela 4.1 os resultados na horizontal e vertical, esta comparação denomina-se de comparação direta. Na Tabela 4.2, é realizada a comparação entre o melhor e o pior caso, que corresponde em uma análise na direção diagonal, a esta se denomina de comparação cruzada.

	Remontagem(s)	Montagem completa (s)	Comparação (%)
ILUT	476.12 ± 0.01	483.69 ± 0.01	1.57
Sem ILUT	213.18 ± 0.01	221.77 ± 0.01	3.87
Comparação (%)	55.23	54.15	

Tabela 4.1 – Desempenho com comparação direta - $\lambda = 1.5\mu m$

	Remontagem (s)	Montagem completa (s)	Comparação (%)
ILUT	476.12 ± 0.01	483.69 ± 0.01	55.01
Sem ILUT	213.18 ± 0.01	221.77 ± 0.01	
Comparação (%)	55.93		

Tabela 4.2 – Desempenho com comparação cruzada dos recursos - $\lambda = 1.5\mu m$

O recurso de aproveitamento da ILUT com remontagem obteve o melhor desempenho, com um ganho de 55,93% onde a ILUT foi aplicada a cada alteração e montando-se toda matriz de coeficientes.

Nas próximas avaliações o método iterativo será utilizado com os recursos de remontagem e aproveitamento da ILUT, a solução por SMR também utilizará o recurso de remontagem. Os resultados de todos os recursos serão comparados com os obtidos com a sub-rotina ME28.

4.3.3 - Método Iterativo biconjugado estabilizado com aproveitamento de decomposição ILUT e remontagem

Na grade óptica apresentada na Figura 4.13, foi realizadas as análises de desempenho dos recursos propostos. Analisou-se a grade em 250 comprimentos de onda no intervalo entre 1.2 μm e 1.8 μm , com variações do índice de refração do material da grade de 1.20 até 1.85 com intervalos de 0.05. O campo inicial é calculado para um comprimento de onda $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$. Para efeitos de cálculos do coeficiente de reflexão o campo foi tomado a 9 μm da parede da PML no centro do guia.

Ao utilizar o recurso de aproveitamento da decomposição ILUT foi necessário, estudar a possibilidade de efetuar algumas decomposições à medida que se alterava o comprimento de onda ou o material. Isto ocorreu pelo fato do comprimento de onda interferir significativamente no processo de solução.

Serão avaliadas as três estratégias para o reinício do preconditionador ILUT, corte nas iterações, corte por acúmulo e corte fixo nos comprimentos de onda.

O corte nas iterações consiste em aplicar a decomposição quando o número de iterações do método atingir um valor máximo pré-determinado, os cortes variam de 8 a 75 iterações.

O corte por acúmulo consiste em aplicar a decomposição quando o tempo de simulação acumulado, referente ao método iterativo, exceder o custo computacional para obter o preconditionador ILUT imediatamente anterior, conforme detalhado no Capítulo 3.

E finalizando, o corte fixo nos comprimentos de onda é estabelecido em intervalos fixos de comprimento de onda. O corte fixo foi mostrado com mais detalhes no Capítulo 3.

Campo Inicial

Para o campo inicial, aplicado ao guia de onda da Figura 4.11, fez-se a análise do corte nas iterações, pretendendo minimizar o tempo computacional.

Na Figura 4.14, tem-se o tempo computacional médio para cada corte adotado no cálculo para os 250 comprimentos de onda. Nota-se que o corte realizado com 13 iterações do método iterativo corresponde ao tempo médio mínimo.

Na Figura 4.15, o tempo total é mostrado em função do corte (número de iterações para calcular a decomposição incompleta). O tempo total mínimo para a análise dos 250 comprimentos de onda foi de 484,24s.

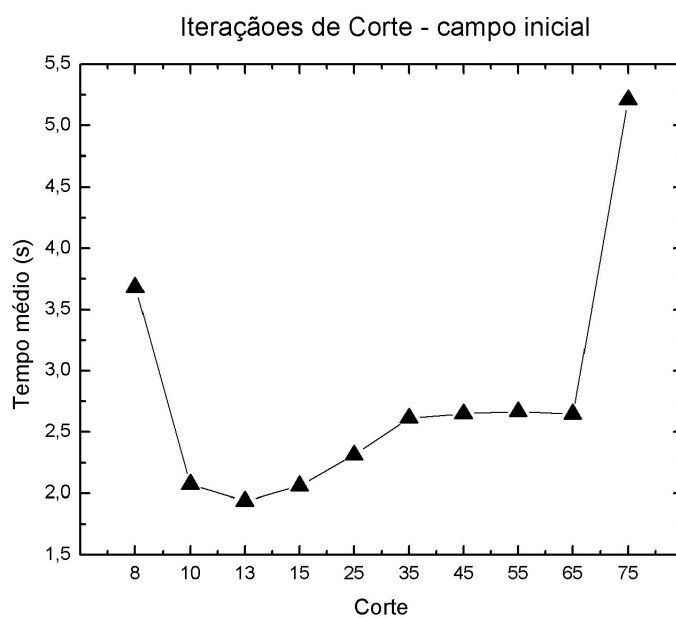


Figura 4.14 – Campo inicial com a análise de corte nas iterações do método iterativo

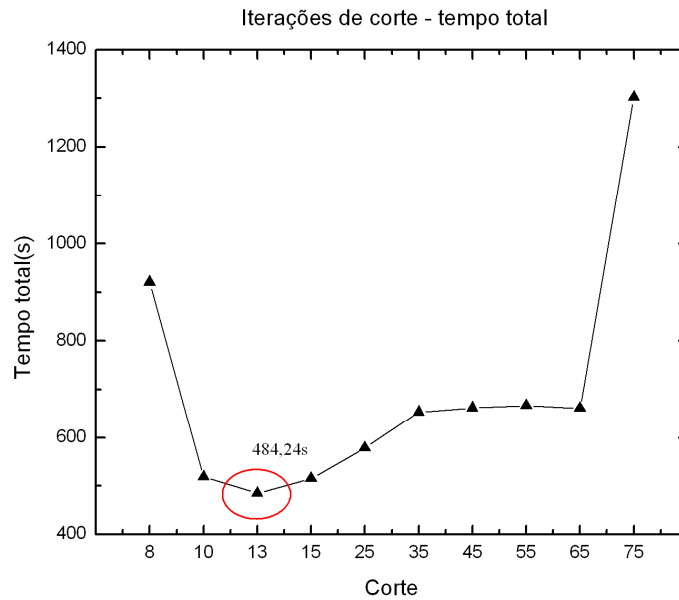


Figura 4.15 - Campo Inicial – tempo total

Espalhamento para 250 frequências

Após o cálculo do valor do campo incidente, será realizada a análise de desempenho para o campo quando se coloca a grade óptica, a qual foi mostrada na Figura 4.13.

Na Figura 4.16, é apresentado os tempos médios, para a análise da grade em 250 comprimentos de onda no intervalo entre 1.2 μm e 1.8 μm , com variações do índice de refração do material da grade de 1.20 até 1.85 com intervalos de 0.05. A média de sete simulações para cada ponto de corte (número de iterações do método iterativo). O desempenho ótimo foi obtido com a aplicação da decomposição incompleta a cada 15 iterações.

Na Figura 4.17, é gráfico similar ao apresentado na Figura 4.16, porém este apresenta o tempo total médio para as 250 frequências, em cada corte. Este tempo total médio refere-se a uma média de sete amostras, para cada corte. O tempo total mínimo obtido é destacado, este foi de 7119,36 s com aplicação da ILUT a cada 15 iterações.

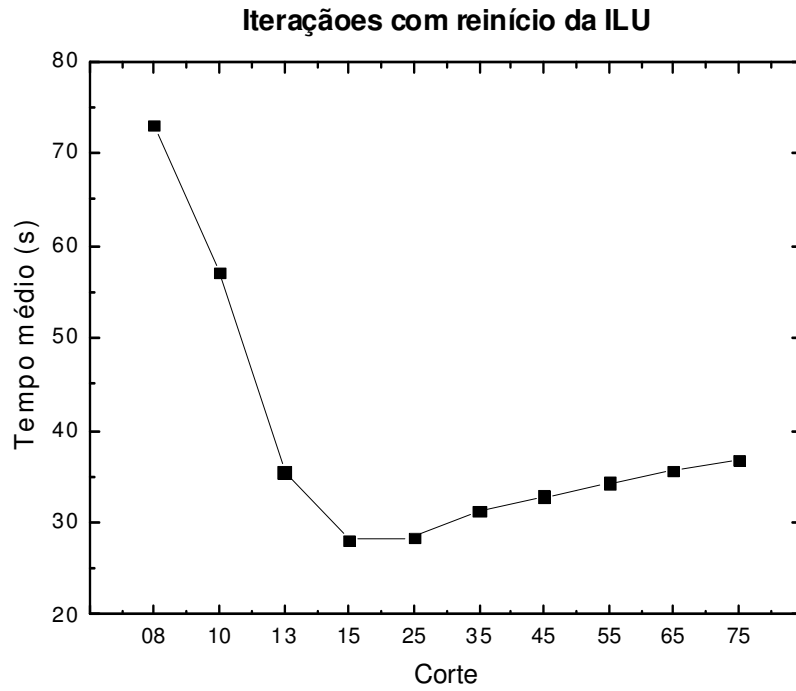


Figura 4.16 – Tempo médio para cortes nas iterações do método iterativo.

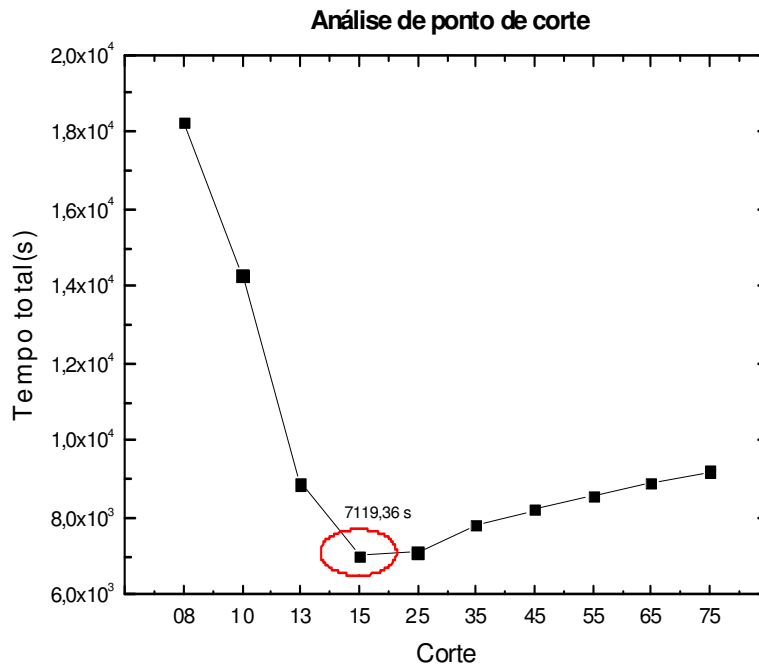


Figura 4.17 – Tempo total para cortes nas iterações do método iterativo.

A aplicação da decomposição incompleta por acúmulo é mostrada na Figura 4.18.

Na Figura 4.18, a aplicação da decomposição ILUT ocorreu sempre que o tempo computacional excedeu-se ao tempo gasto para efetuar a ILUT imediatamente anterior. Neste caso consegue-se um tempo computacional de 7114,58 s.

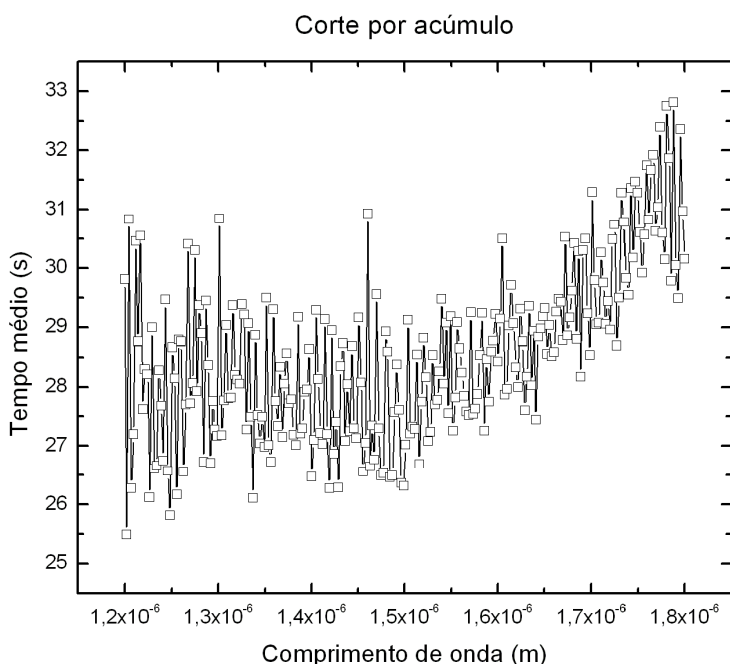


Figura 4.18 – ILUT com reinício por acúmulo de tempo.

Na Figura 4.19 e Figura 4.20, tem-se os resultados realizados com cortes fixos de intervalos de comprimento de onda.

Na Figura 4.20, obteve-se um tempo médio por comprimento de onda de 26,21 s.

Nota-se nas Figura 4.19 e Figura 4.20 que existe um intervalo de comprimento de onda ótimo em torno de $0.0375 \mu m$. Assim é fundamental uma análise como realizada para determinar o valor ótimo que determina o melhor desempenho computacional.

Os tempos totais obtidos são mostrados na Figura 4.20, o tempo total mínimo obtido foi de 6551,3751s.

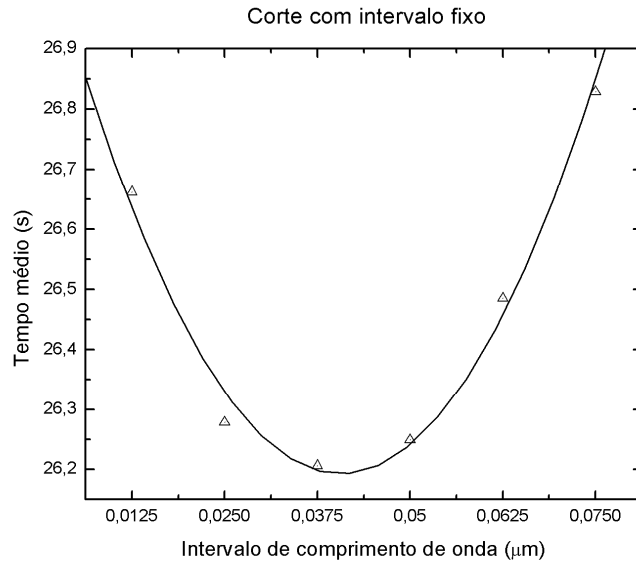


Figura 4.19 – Tempo médio para cortes com intervalos uniformes.

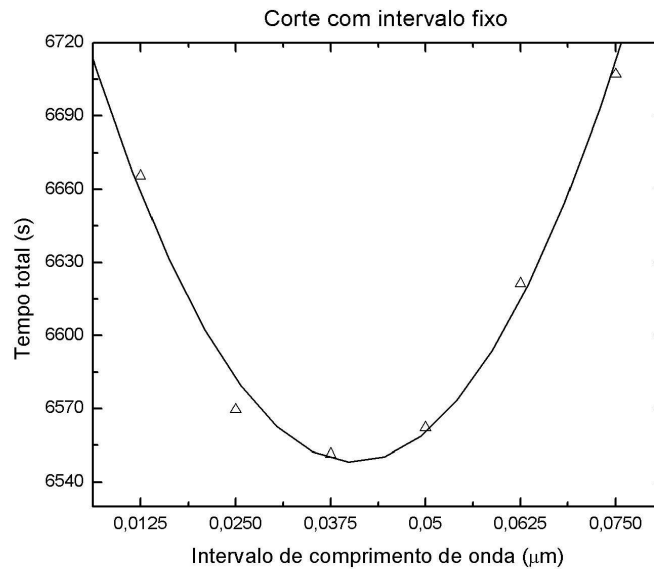


Figura 4.20 - Tempo total para cortes com intervalos uniformes.

Nas figuras 4.21 e 4.22, temos uma visualização comparativa de desempenho de do método iterativo e recursos avaliados, estas figuras permitem concluir como os recursos propostos estão se comportando, à medida que se varia o comprimento de onda na grade da Figura 4.13.

São apresentados, nas figuras 4.21 e 4.22, os tempos computacionais quando se executa a decomposição ILUT a cada modificação da matriz, tanto devido ao material, bem como devido à alteração de comprimento de onda. Na Figura 4.22, tem-se os tempos computacionais acumulados no decorrer da avaliação dos comprimentos de ondas.

As figuras 4.21 e 4.22 consideraram os valores de ótimos das estratégias de corte, obtidos anteriormente. Nota-se que os recursos de aproveitamento da ILUT com a remontagem da matriz obtiveram um desempenho bem distinto daqueles onde estes recursos não foram empregados.

Um outro resultado mostrado na Figura 4.21 é o ganho com a remontagem, embora não muito significativo.

Na Figura 4.22, nota-se que existe uma grande diferença nas inclinações das retas, demonstrando que os recursos propostos possuem uma boa distinção dos convencionais.

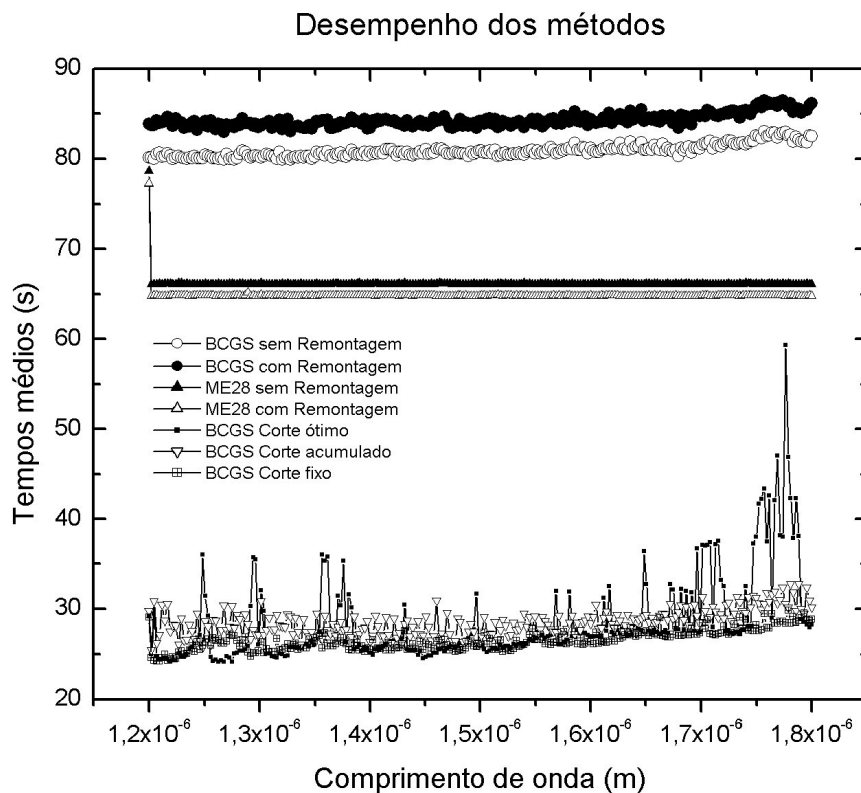


Figura 4.21 - Comparações entre o caso convencional e recursos de aproveitamento de soluções.

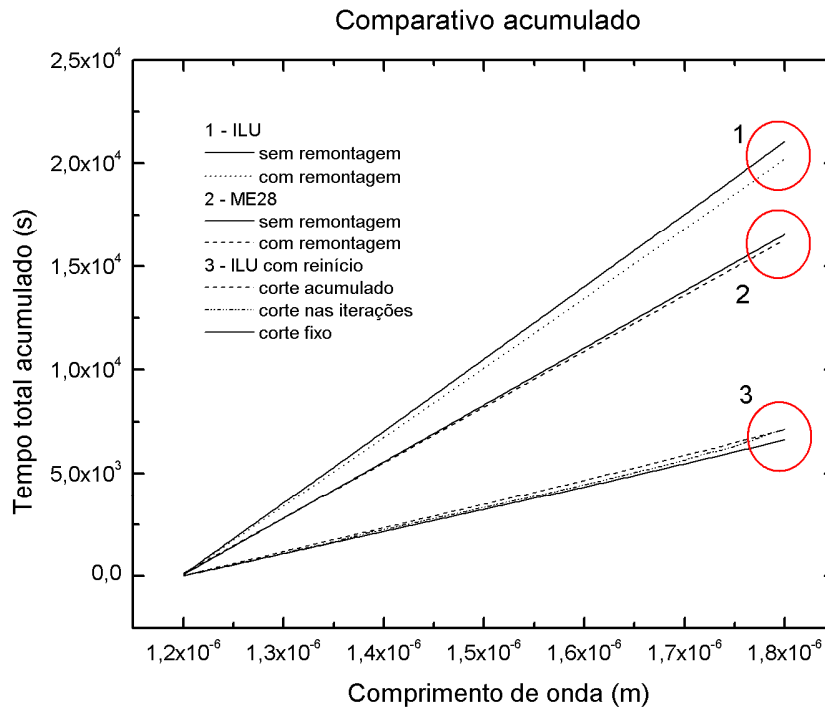


Figura 4.22 – Comparativo do tempo acumulado.

Na Tabela 4.3, tem-se a comparação quantitativa entre os recursos. O pior caso ocorre quando se aplica o método iterativo com ILUT a cada modificação. Neste caso, o tempo total é de 21071,06 s e com reinício fixo tem-se um tempo computacional de 6551,38 s, a economia computacional foi de 69%.

<i>Métodos</i>	<i>Tempos (s)</i>	<i>Diferença</i>
Iterat.	21071,06 ± 23,16	3.2163
Iterat. c/ remontagem	20219,64 ± 0,72	3.0863
ME28	16547,11 ± 2,78	2.5257
ME28 c/ remontagem	16223,49 ± 2,56	2.4763
Iterat. c/ corte iter.	7119,36 ± 1,55	1.0860
Iterat. c/ corte acum.	7114,58 ± 2,50	1.0867
Iterat. c/ corte fixo	6551,38 ± 1,65	1

Tabela 4.3 – Comparativo dos métodos em relação ao método com corte fixo.

Coefficiente de reflexão

O coeficiente de reflexão obtido para a grade da Figura 4.13 mostrado na Figura 4.23, o intervalo de λ variando entre $1,2\mu\text{m}$ e $1,8\mu\text{m}$. Este resultado é confirmado por [14].

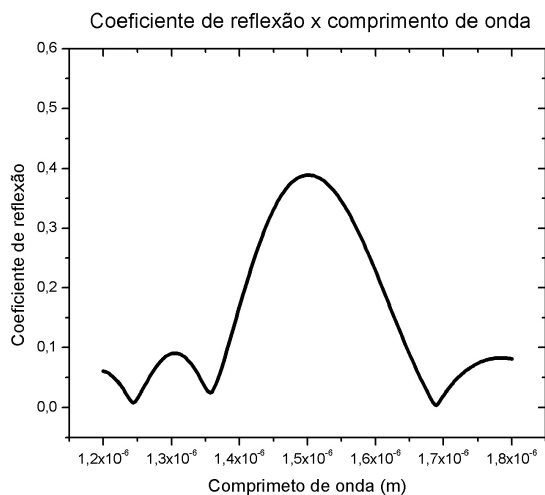


Figura 4.23 – Coeficiente de Reflexão da grade para modo TE, componente E_x e $\lambda = 1,5 \mu\text{m}$.

Com os valores dos campos incidentes e refletidos calculou-se a curva do coeficiente de reflexão, segundo (4.3), para a grade com índice de refração de 1.45.

$$Cr = \text{abs}\left(\frac{et}{ei}\right) - 1 \quad (4.2)$$

Com o resultado da Figura 4.23, as implementações realizadas são novamente validadas, o que proporciona a confiabilidade no código e nos recursos de aproveitamento da ILUT.

Comparativo das soluções entre os métodos direto e iterativo

Pretende-se agora verificar a abrangência dos recursos para índices de refração maiores, será considerada a grade óptica apresentada na Figura 4.13. Nas Figura 4.24 e Figura 4.25, expõe-se as soluções obtidas para um comprimento de onda fixo ($1,5\mu\text{m}$), nesta análise o índice de refração variou entre 1.2 e 3.35, com intervalos de 0.05.

Aplicou-se para solução via método iterativo com apenas uma decomposição ILUT, e para o método direto utilizou-se a sub-rotina ME28. Pretende-se com essa análise verificar se os recursos propostos são confiáveis.

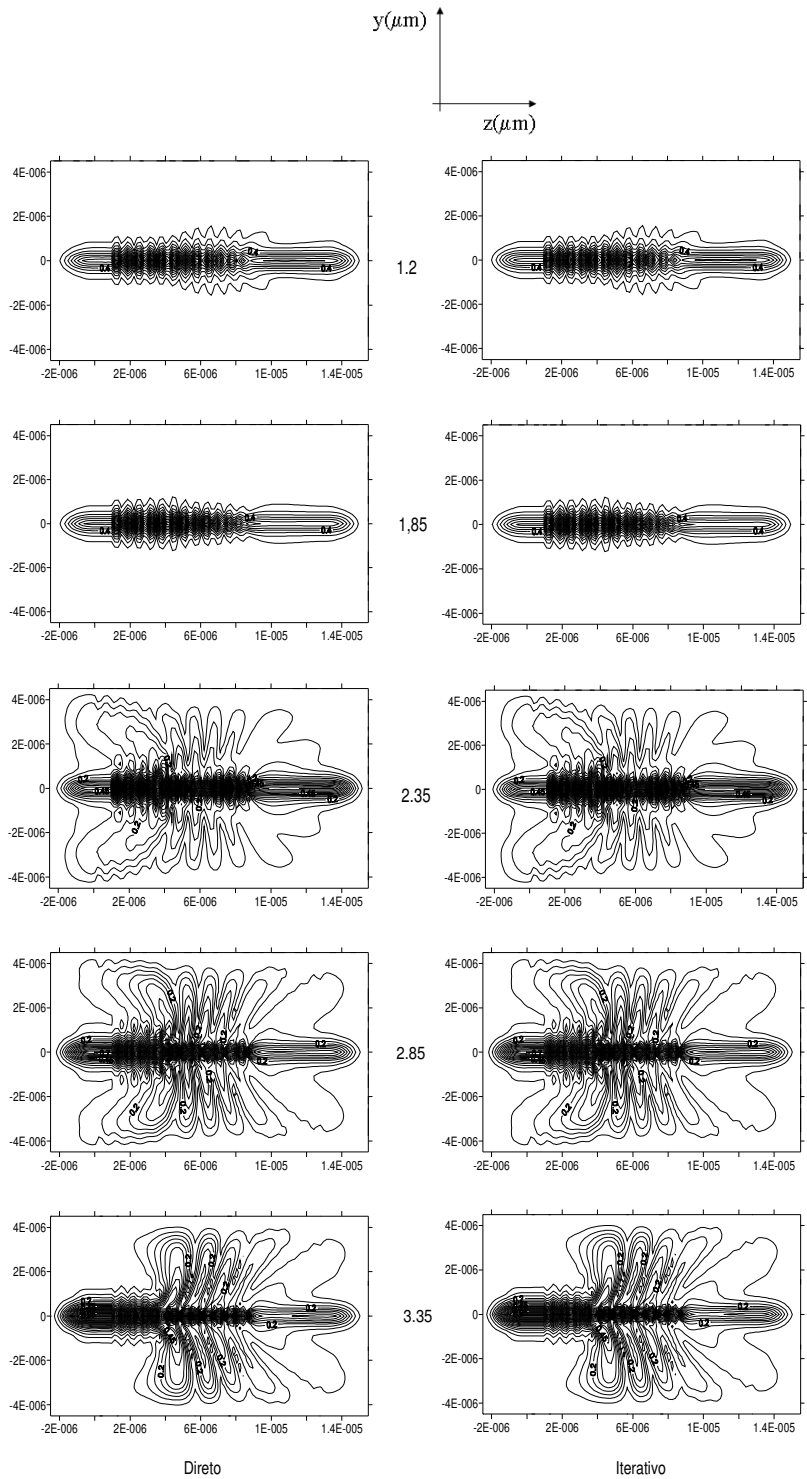


Figura 4.24 Método direto x Iterativo com remontagem e reaproveitamento da ILUT – curvas de níveis do modo TE, componente E_x e índices de refração entre 1.2 e 3.35.

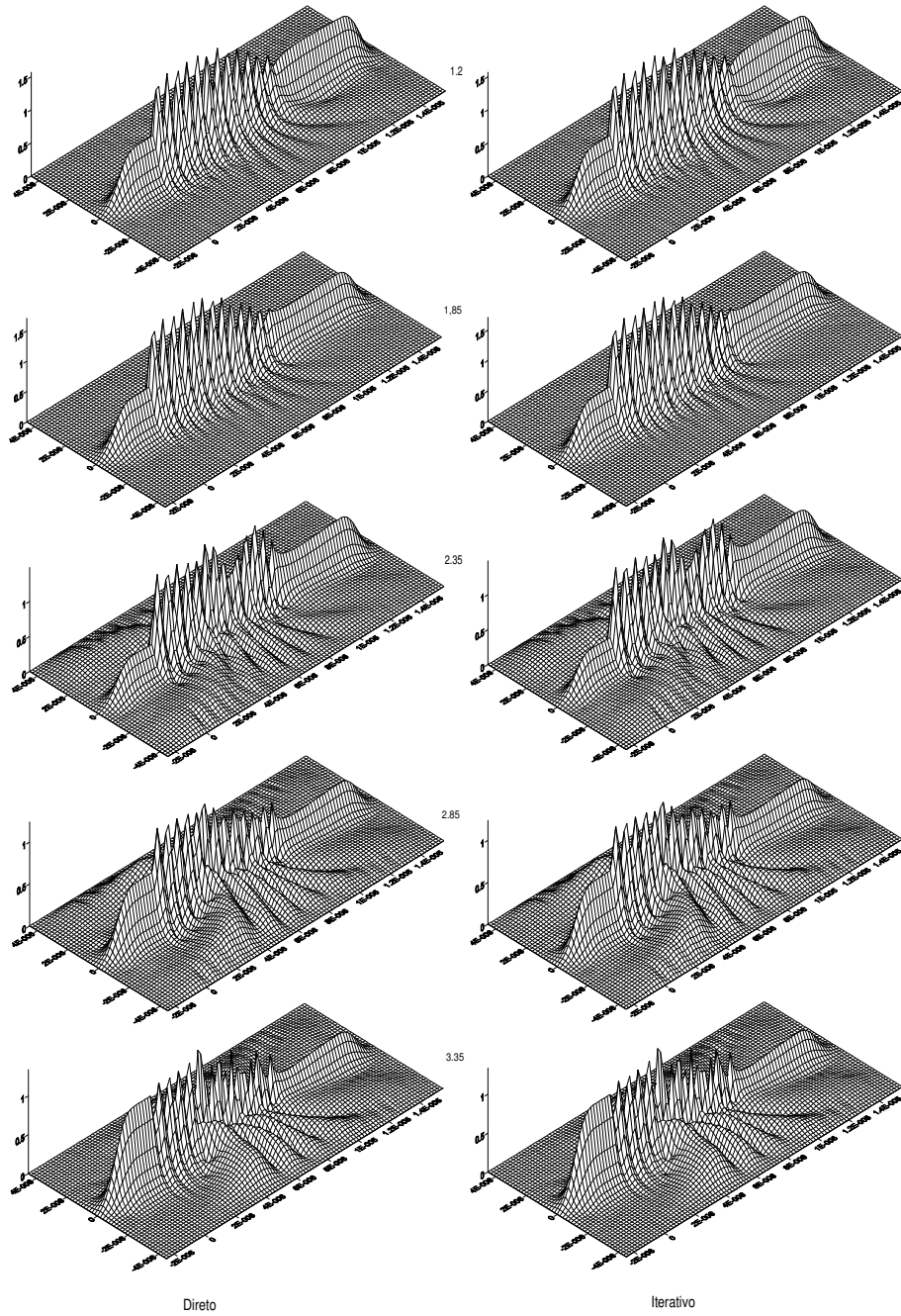
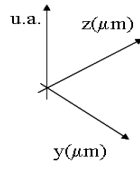


Figura 4.25 - Método direto x Iterativo com remontagem e reaproveitamento da ILUT – modo TE, componente E_x .

Os resultados apresentados nas Figura 4.24 e Figura 4.25 demonstram de maneira visual a concordância entre os métodos direto e iterativo, o qual utiliza a remontagem da matriz de coeficientes dos elementos alterados mais o aproveitamento da decomposição ILUT.

Com a finalidade de verificar com mais confiabilidade estes resultados é realizado o cálculo do erro relativo entre os métodos direto e iterativo com recursos de aproveitamento da ILUT e remontagem, estes são apresentados na Figura 4.26.

O erro relativo é definido por (4.3).

$$E_{rel} = \frac{|x_{me28} - x_{iter}|}{|x_{me28}|}, \quad (4.3)$$

onde x_{me28} e x_{iter} são as soluções obtidas pelo método direto e pelo método iterativo, respectivamente.

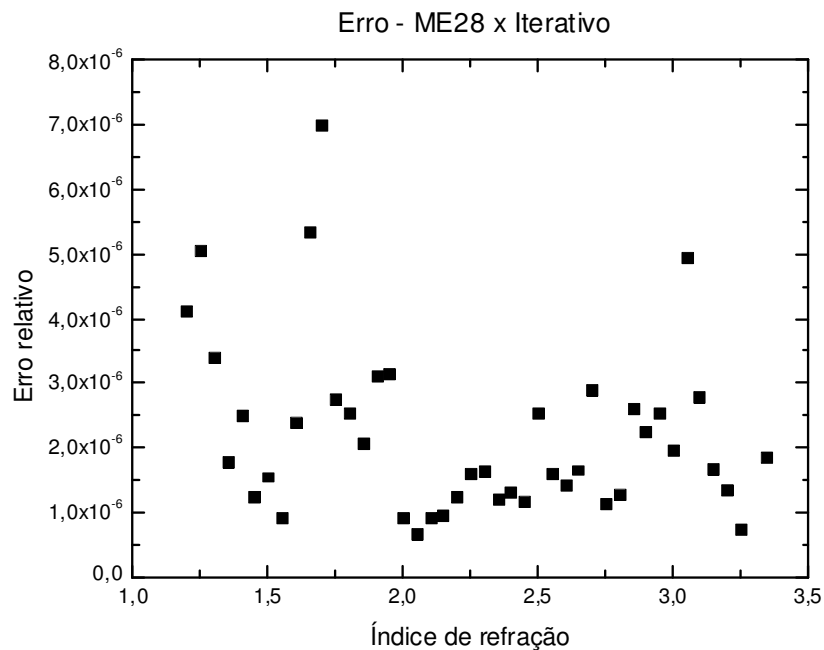


Figura 4.26 – Erro relativo entre ME28 e Método iterativo com recursos.

O erro relativo obtido é da ordem de 10^{-6} , o qual é aceitável em se tratando do método iterativo, uma vez que este sempre encontra uma solução aproximada do sistema de equações lineares.

Na Figura 4.27, é mostrado o número de iterações para a convergência do método iterativo em função do índice de refração da grade, onde tem-se uma evolução quase exponencial.

A Figura 4.28 mostra o tempo de simulação para cada índice de refração.

Conclui-se das Figuras 4.27 e 4.28 que para grandes variações dos índices seria interessante a aplicação da ILUT mais de uma vez, conforme realizado nas seções anteriores deste capítulo.

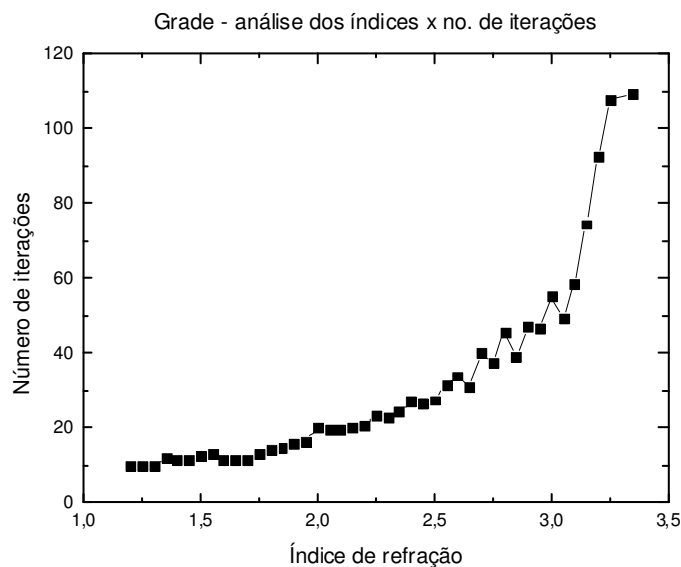


Figura 4.27 – Esforço computacional do método iterativo com ILUT

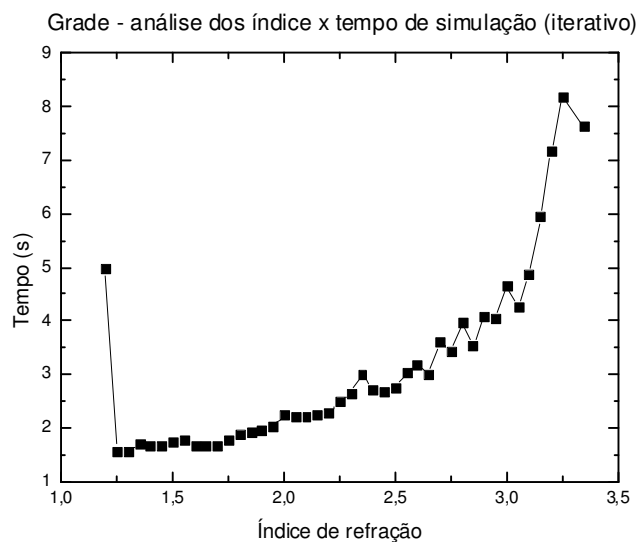


Figura 4.28 – Desempenho temporal do método iterativo com ILUT.

4.3.4 - Small Rank Adjustment (SMR)

Com *Small Rank Adjustment* analisou-se a grade da Figura 4.13 em 250 comprimentos de onda no intervalo entre 1.2 μm e 1.8 μm , com variações do índice de refração do material da grade de 1.20 até 1.85 com intervalos de 0.05. Estes dados são os mesmos que aqueles empregados com método iterativo no tópico 4.3.3.

Os resultados de desempenho da aproximação por *SMR* são mostrados na Figura 4.29. O tempo médio de simulação apresentado, é obtido da média de sete amostras de tempo de simulação computacional para cada comprimento de onda.

O tempo de simulação total foi de $106.450,05\text{s} \pm 691,48\text{s}$ e uma média de $425,80 \pm 2,76$ s. A matriz R , que são referentes aos elementos alterados, possui uma dimensão de 648.

Para este caso, nota-se que são necessários maiores estudos, uma vez que o custo computacional, para o *SMR* está associado à dimensão da matriz R . Isto ocorre devido a decomposição LU, obtida pela ME28.

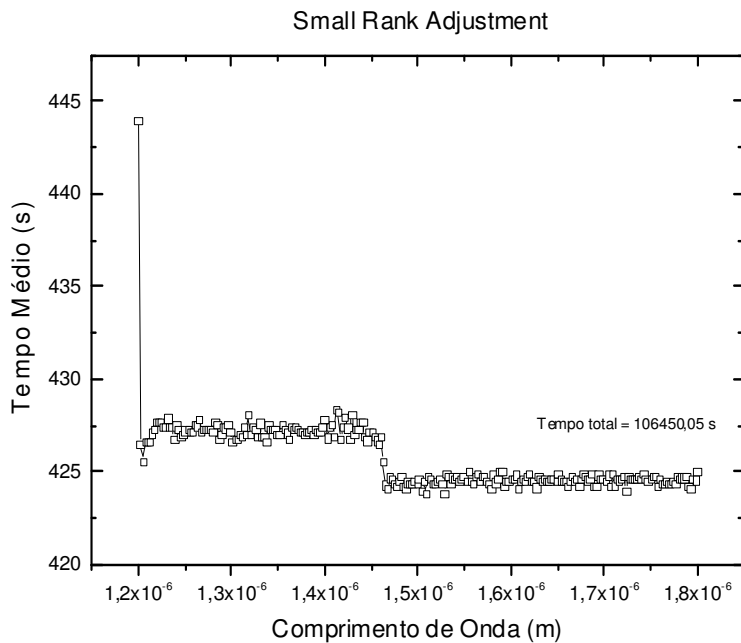


Figura 4.29 – SMR tempos médio por comprimento de onda

Segue no próximo tópico, uma análise da dimensão da matriz alterada R . Pretende-se verificar qual a máxima dimensão admitida para que haja vantagem na utilização deste tipo de aproximação em relação à sub-rotina ME28.

4.3.5 - Análise de dimensão de R

Após os testes de desempenho via SMR percebeu-se que a dimensão de R poderia influenciar no desempenho, então realizou-se a análise para a grade da Figura 4.13. O resultado desta análise é mostrado na Figura 4.30.

A Figura 4.30 mostra que quando a dimensão da matriz de elementos modificados (R) é maior que 107 é mais conveniente, resolver o sistema linear diretamente com a ME28. A dimensão 107 de R representa 0.3% da dimensão da matriz A . Na Tabela 4.4, a e b são coeficientes da reta, definida pela equação (4.4), que representam o custo computacional da aplicação da solução do sistema via SMR .

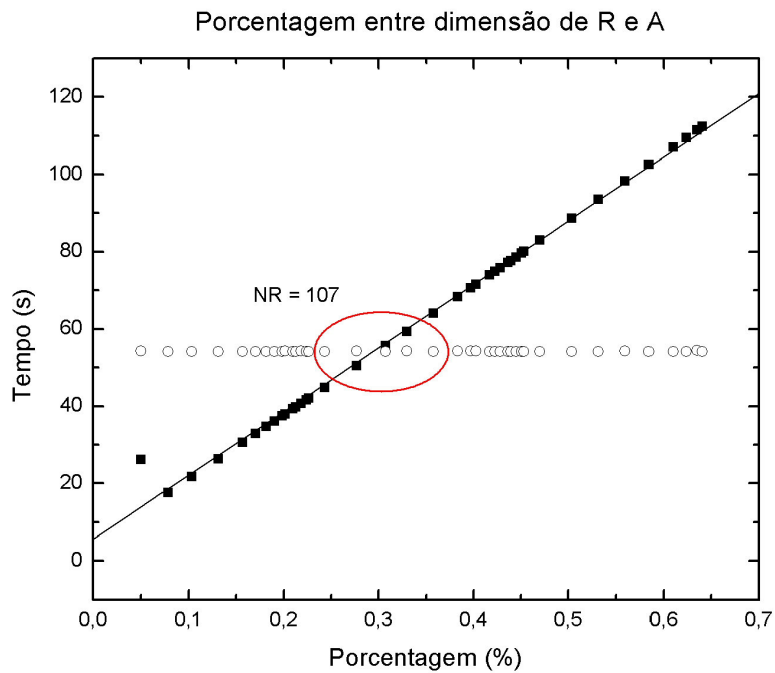


Figura 4.30 – Análise de desempenho em função da dimensão de R

	<i>Coefficientes</i>	<i>Erro</i>
<i>a</i>	5,63	0,78
<i>b</i>	164,76	2,04

Tabela 4.4 – Coeficientes da análise da dimensão de R

$$t = a + bN_R \quad (4.4)$$

Onde N_r é a dimensão da matriz R .

4.3.6 - Comparativo das soluções entre os métodos: Direto e SMR

Ainda para a grade óptica da Figura 4.13. Realizou-se a análise das soluções do recurso *SMR* variando-se o índice de refração da grade entre 1,2 e 3,35 para um comprimento de onda fixo em $1.5\mu m$. Pode-se verificar em Figura 4.31 e Figura 4.32 que os resultados são bem concordantes.

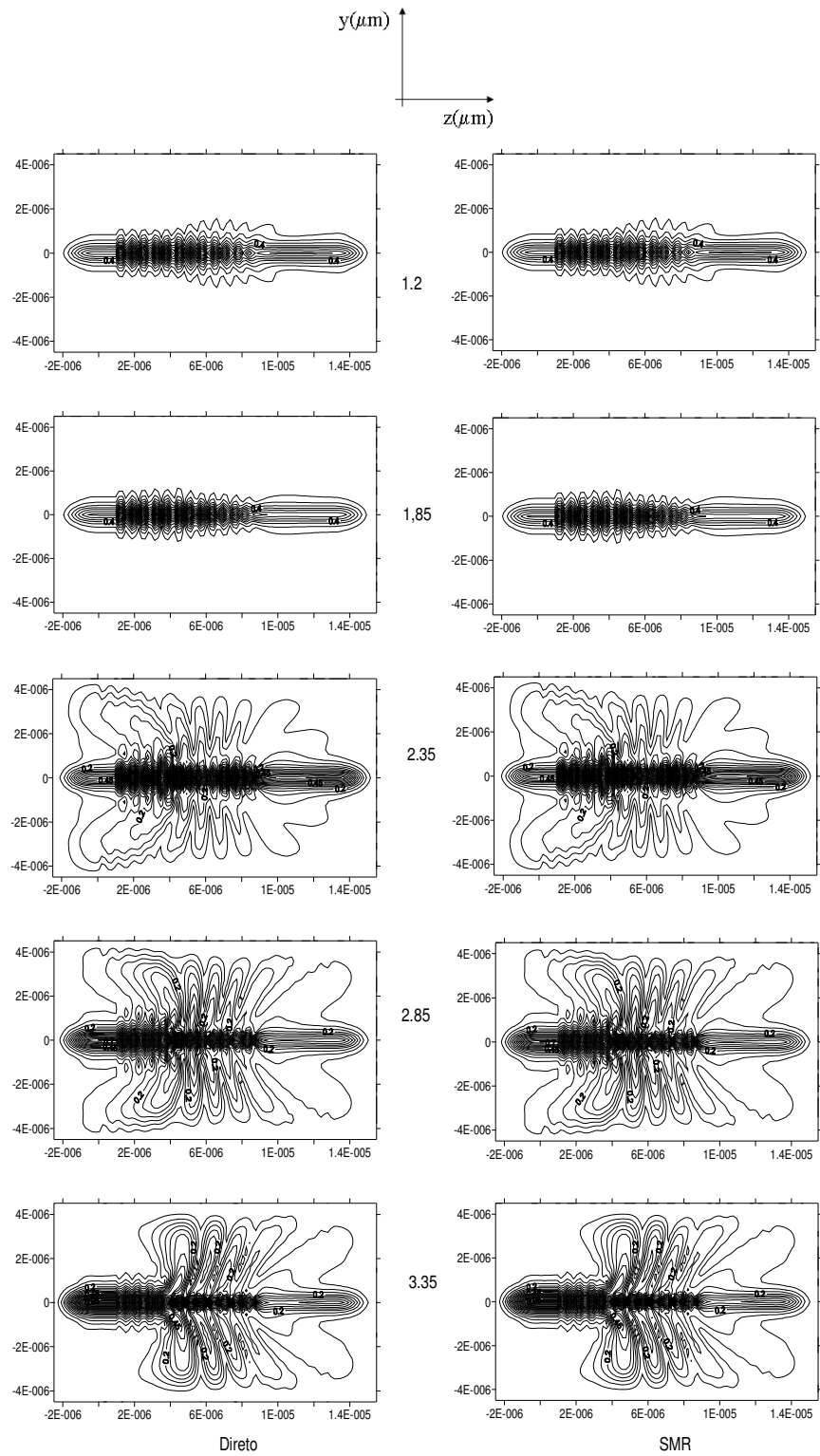


Figura 4.31 - Método direto x SMR com remontagem – curvas de níveis do modo TE, componente E_x .

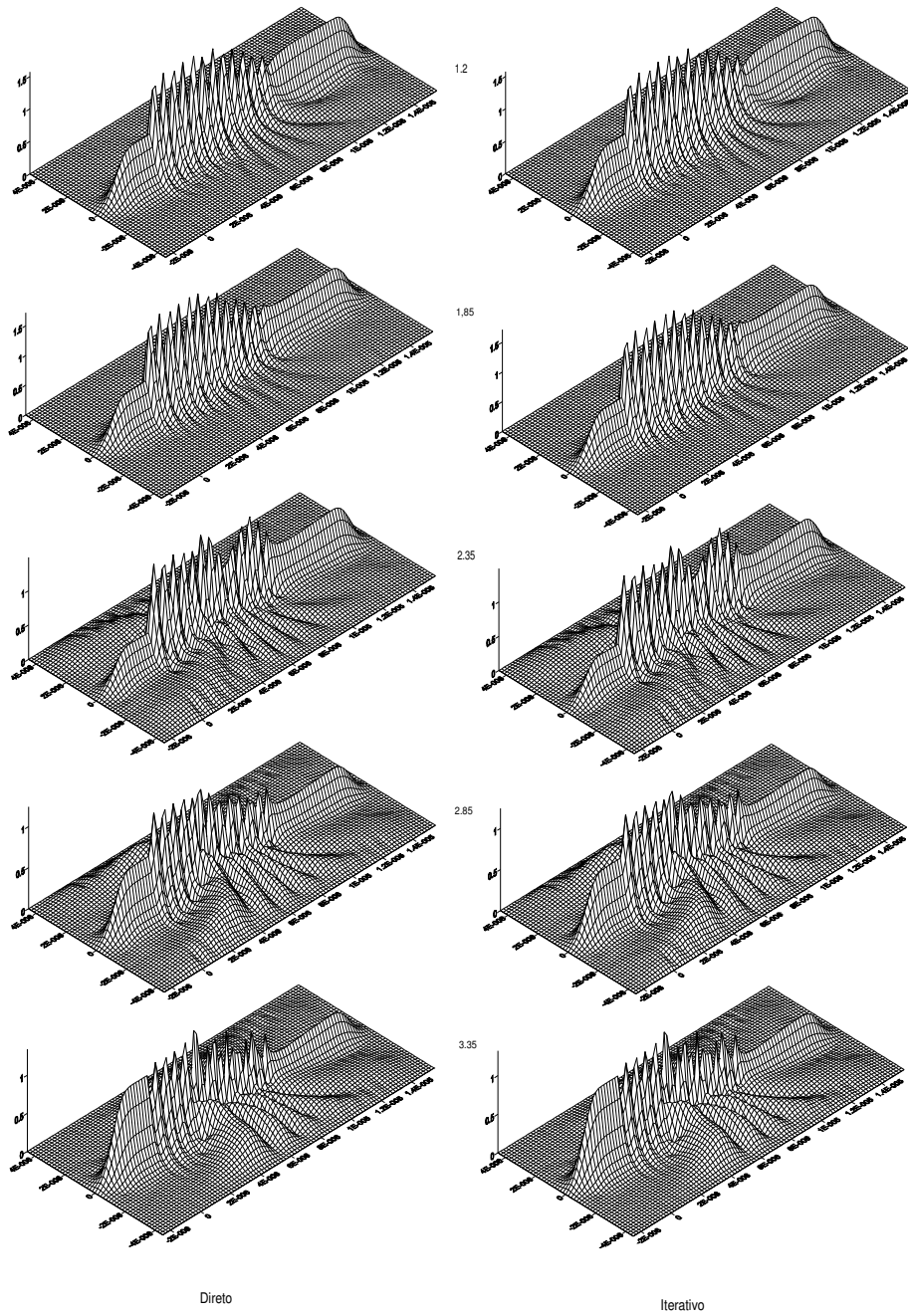
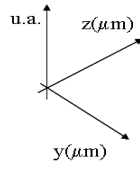


Figura 4.32 - Método direto x SMR com remontagem – Modo TE, componente E_x .

A fim de verificar se os resultados de *SMR* estão corretos, foi calculado o erro relativo entre ME28 e *SMR*, o qual é mostrado na Figura 4.33.

A Figura 4.33 mostra que o *SMR* implementado está numericamente correto, pois obteve praticamente o mesmo resultado que a ME28, algo que era esperado em se tratando de um método direto. Os erros apresentados na Figura 4.33 para cada índice permanecem em um mesmo nível, sem aumento à medida que se aumenta o índice de refração. Isto era esperado uma vez que a matriz *SMR* proporciona uma solução que é equivalente a do sistema original, transferindo as influências das alterações ao vetor lado direito do sistema de equações.

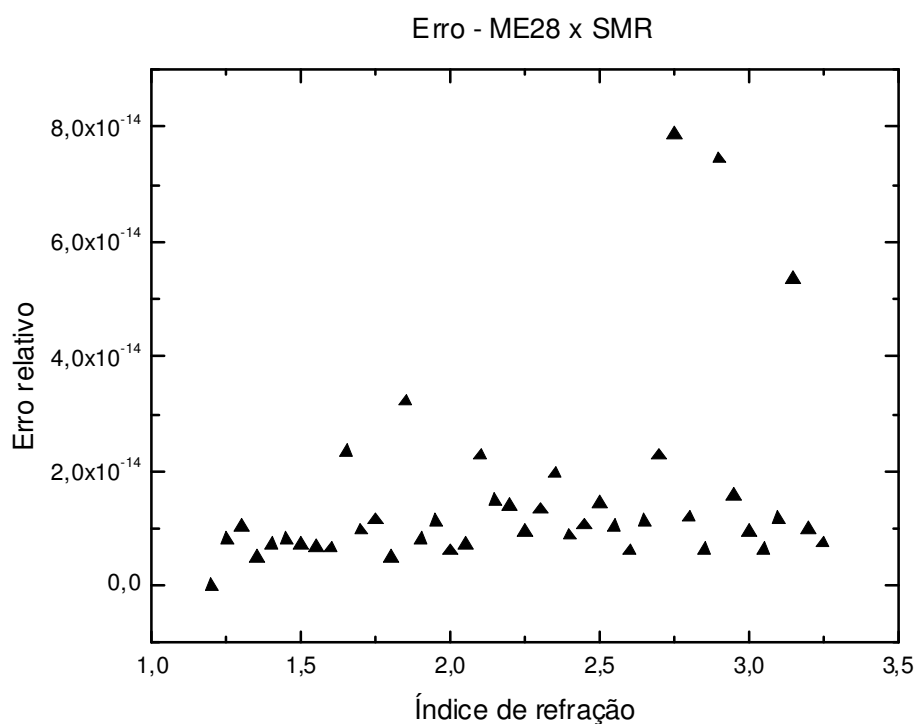


Figura 4.33 – Erro relativo ME28 x SMR

Na Figura 4.34, os tempos de simulações obtidos por *SMR* não tiveram variações significativas em função da modificação dos índices da grade, que ficaram em torno de 0.01 s, mostrando a robustez da utilização deste recurso de aproveitamento de soluções, merecendo ter estudos futuros.

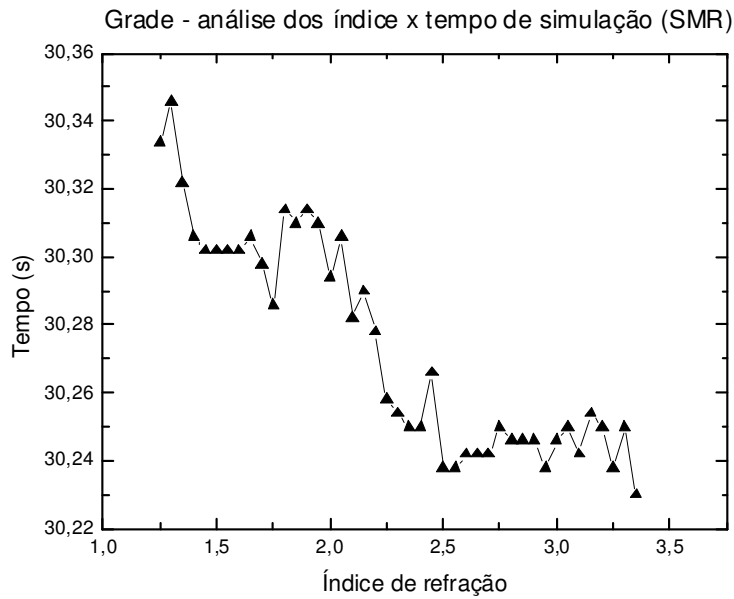


Figura 4.34 – Tempos de SMR com variação dos índices

4.3.7 - Análise de escalabilidade dos recursos propostos

A escalabilidade do método iterativo é medida pelo coeficiente angular da exponencial dada em (4.5). Esta representa o comportamento do método quando se altera a dimensão da matriz de coeficiente.

$$f(u) = v_1 \cdot u^{v_2}, \tag{4.5}$$

Em (4.5), f representa o tempo em segundos(s), u a dimensão da matriz A , v_1 e v_2 são coeficientes constantes que caracterizam o método. Ao utilizar o mesmo método iterativo, modificando o número de aplicações da ILUT, v_1 é alterado significativamente, o custo disso é um pequeno acréscimo do coeficiente v_2 .

As escalabilidades foram obtidas para os métodos: iterativo com os recursos propostos e o iterativo tradicional. Lembrando que o método com recursos propostos referem-se ao aproveitamento da ILUT com estratégia de corte fixo em um intervalo ótimo teórico e remontagem somente dos elementos modificados; o método tradicional sem recursos, é quando aplica-se a ILUT a cada alteração da matriz de coeficientes do sistema de equações lineares e realiza-se a montagem de toda a matriz a cada alteração matriz A .

O intervalo fixo ótimo teórico foi obtido com a solução da segunda derivada da equação obtida pelo método dos mínimos quadrados para cada dimensão da matriz analisada.

A grade óptica analisada é aquela mostrada na Figura 4.13, em 250 comprimentos de onda no intervalo entre 1.2 μm e 1.8 μm . O índice de refração do material da grade variando de 1.20 até 1.85 com intervalos de 0.05.

Na Figura 4.35, os resultados obtidos foram linearizados para obtenção dos coeficientes v_1 e v_2 , apresentados em (4.5).

Examinando os coeficientes lineares apresentados na Figura 4.35 nota-se que os recursos propostos não modificam significativamente o termo angular das retas, mas altera-se o termo linear. Aprofundando a análise, resolve-se o sistema de equações lineares referente às retas da Figura 4.35, mostrado em (4.6)

$$\begin{cases} y_1 = -1,54630 + 1,28707u \\ y_2 = -2,37516 + 1,37389u \end{cases} \quad (4.6)$$

Com o resultado do valor de u calcula-se a dimensão da matriz N^* , o qual é o ponto teórico onde para dimensões maiores que N^* os recursos propostos deixam de ser válidos. Este resultado é mostrado em (4.7).

$$\begin{aligned} \log(N^*) &= 9.54457 \\ N^* &= 3.504.087.825 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Escalabilidade - ILUT com recursos propostos

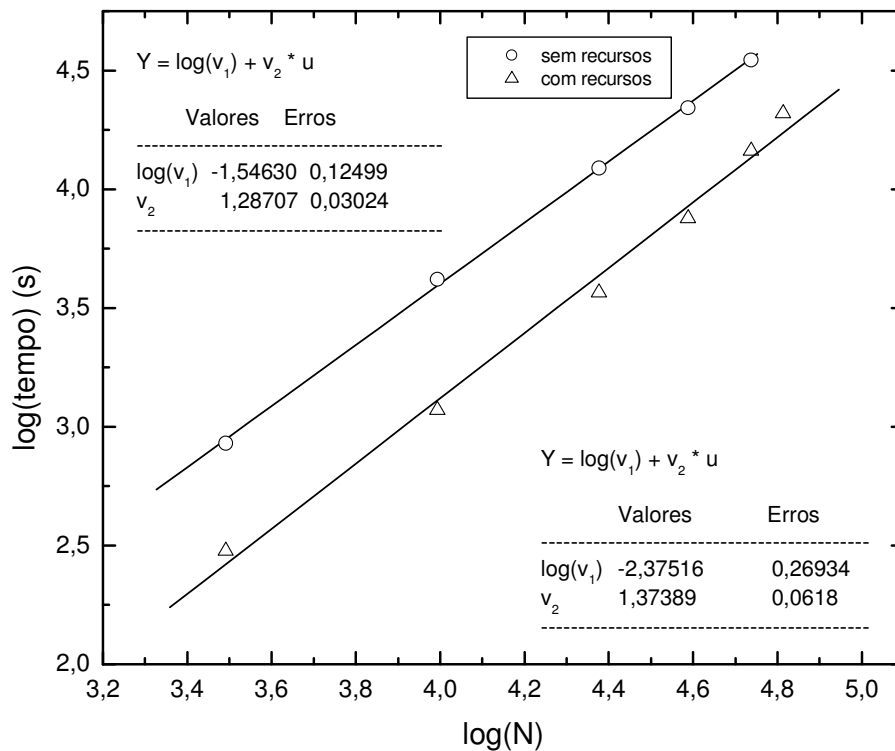


Figura 4.35 – Escalabilidade comparativa ILUT a todas as modificações e em intervalos de comprimento de onda ótimos.

Nota-se com esses resultados que o aproveitamento de soluções melhora significativamente o desempenho de solução de sistemas, sem diminuir significativamente a ordem do método iterativo Bicgstab com ILUT ($O(N^{1,28})$) atuando no multiplicador da exponencial.

O valor de N^* , obtido em (4.7) é um valor muito alto e impraticável com os recursos computacionais da atualidade, mostrando que as modificações propostas obtiveram bons resultados.

Capítulo 5

Conclusões

Os resultados, obtidos nos códigos iniciais: Poisson e domínio do tempo, permitiram que fossem validados os códigos implementados do MEF com os recursos de remontagem dos elementos alterados, bem como as propostas de aproveitamento do preconditionador ILUT.

Na aplicação do domínio da frequência, aumentou significativamente a necessidade dos recursos propostos devido ao número de alterações realizadas nas matrizes, que foram 250 comprimentos de ondas e 13 materiais totalizando 3250 alterações. O aproveitamento da decomposição incompleta em conjunto com a remontagem dos elementos alterados mostrou-se bem eficiente, o ganho computacional foi de aproximadamente três vezes em relação ao método em que fora aplicado a ILUT em todas as alterações e duas vezes e meia em relação ao método utilizando a sub-rotina ME28. É importante ressaltar que em todas as estratégias de corte, notou-se a existência de um corte ótimo e também a necessidade de uma escolha eficiente da frequência de aplicação da ILUT.

Com a realização da análise do alcance destes resultados mostrou-se que é possível levá-los para área de otimizações de dispositivos fotônicos, onde códigos com bom desempenho e eficientes são requisitados.

A estratégia de aplicação das decomposições ILUT, ao longo da análise da grade óptica, mostrou-se muito importante à obtenção de melhores resultados, os quais foram obtidos quando se estabeleceu que a decomposição devesse ser executada em intervalos fixos de comprimentos de onda. Desta forma é prudente sempre executar um refinamento da estratégia para se obter o máximo de desempenho computacional.

A análise da escalabilidade caracterizou os recursos implementados, mostrando que o melhor desempenho foi obtido com uma significativa diminuição no coeficiente linear das curvas de desempenho computacional linearizadas.

Para o aproveitamento de soluções com *Small Rank Adjustment*, é necessária cautela. Ficou clara a necessidade de estudos futuros devido aos custos computacionais das decomposições LU.

Trabalhos Futuros

Durante o processo de programação outros códigos foram desenvolvidos e testados, porém ainda não integrados e adaptados para aplicação em dispositivos fotônicos estes são: Algoritmos Genéticos e *Simulated Annealing*. Assim pretende-se completar os pacotes com esses otimizadores e outros já desenvolvidos por colegas do grupo.

Com a otimização implementada, pretende-se aplicar os códigos no desenvolvimento de dispositivos fotônicos. O pacote está completo com métodos de solução de sistemas de equações próprio, embora os preconditionadores ainda sejam de terceiros, portanto seria interessante um estudo e implementação de um preconditionador para o grupo.

Durante o processo de solução do sistema de equação linear o ordenamento da matriz utilizado não foi desenvolvido pelo grupo, assim também se pretende elaborar um estudo sobre ordenamento de matrizes esparsas.

A solução utilizando SMR merece ser revista, aprofundando estudos, uma vez que este recurso é promissor por ser mais robusto que o método iterativo.

Adicionalmente seria de grande utilidade o projeto dos códigos implementados em uma estrutura orientado objeto, uma vez que a manutenção e modificações são os pontos fortes deste tipo de linguagem. Com isso tornaria o programa com uma vida mais longa e com facilidades para manutenção e uso de outras pessoas com interesse nesta área.

Bibliografia

- [1] J. Yang, F. Shanhuai, M. David, “Demonstration of systematic photonic crystal device design and optimization by low-rank adjustments: an extremely compact mode separator”, *Optics Letters*, Vol. 30, no. 2, pp. 141-143, 2005.
- [2] R. A. Horn, C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1999.
- [3] D. Hermann, M. Schillinger, S. F. Mingaleev, Kurt Busch, “Wannier-function based scattering-matrix formalism for photonic crystal circuit”, *JOSA B*, Vol. 25, no. 2, pp. 202-209, 2008.
- [4] J. Jin, *The finite element method in electromagnetics*, Jonh Willey and Sons, 1993.
- [5] S. S. Rao, *The Finite Element Method in Engineering*, Fourth Edition, Elsevier Science & Technology Books, 2004.
- [6] R. Barret, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H.A. Vorst, *Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods*, SIAM, 1995.
- [7] K. Claudio, *Solução de sistemas lineares provenientes de modelagem de estruturas fotônicas*, Dissertação de Mestrado, 2003.
- [8] K. Claudio, V. F. Rodriguez-Esquerre, J. P. da Silva; M. F. G. Hernández, H. E. Hernández-Figueroa , “Iterative-solvers for numerical analysis of photonic devices”, *Micr. Opt. Letters*, Vol. 48, no. 6, pp. 1182-1186, 2006.
- [9] H. A. Vorst, “Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 13, no. 2, pp. 631-644, 1992.

- [10] Y. Saad, "Iterative methods for sparse linear systems", PWS, 1996.
- [11] T. F. Chan, H. A. Van der Vorst, "Approximate and Incomplete Factorizations, Parallel Numerical Algorithms", ICASE/LaRC Interdisciplinary Series in Science and Engineering, Vol.4, Kluwer Academic, Dordrecht, pp. 167-202, 1997.
- [12] W. H. Hayt Jr, J. A. Buck, *Eletromagnetismo*, LTC, 6^a ed., 2003.
- [13] M. Koshiba, Y. Tsuji, "Time-Domain Beam Propagation Method and Its Application to Photonic Crystal Circuits", *Journal of Lightwave Technology*, Vol. 18, no. 1, pp. 102 – 110, 2000.
- [14] Y. Tsuji, M. Koshiba, "Finite Element Method Using Port Truncation by Perfectly Matched Layer Boundary Conditions for Optical Waveguide Discontinuity Problems", *Journal of Lightwave Technology*, Vol. 20, no. 3, 465-468, 2002.
- [15] I. Duff, "ME28: A Sparse Unsymmetric Linear Equation Solver for Complex Equations", Vol. 7, no. 4, pp. 505-511, 1981.
- [16] A. C. Polycarpou, *Introduction to the Finite Element Method in Electromagnetics*, Morgan & Claypool Publishers, 2006.
- [17] R. W. Clough, *The finite element method in plane stress analysis*, Proceedings, Second ASCE Conference on Electronic Computation, Pittsburgh, PA, pp. 345-378, 1960.
- [18] I. S. Duff, A. M. Erisman, J. K. Reid, *Direct methods for sparse matrices*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [19] Programa computacional GID, <http://gid.cimne.upc.es/>, acessado em 12/03/2010.

- [20] R. P. Feynman, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. 2, Addison-Wesley Publishing Company, 2005.
- [21] C. A. Balanis, *Advanced Engineering Electromagnetic*, John Wiley & Sons, 1989.
- [22] Sadiku, Matthew N. O., *Elementos de Eletromagnetismo*, 3^a ed., Bookman Editora, 2004.
- [23] J. L. Volakis, A. Chatterjee L. C. Kempel, *Finite Element Method for Eletromagnetics*, IEEE Press, 1998.
- [24] J. P. Berenger, "A perfect Matched Layer for the absorption of electromagnetic waves", *J. Comput. Physics*, Vol. 114, no. 2, pp.185-200, 1994.
- [25] Y. Tsujian, M. Koshiba, "Finite element beam propagation method with perfectly matched layer boundary conditions for three-dimensional opticalwaveguides," *Int. J. Numer. Model.*, Vol. 13, no. 2-3, pp. 115-126, 2000.
- [26] U. Peke1, R. Mittra, "A finite element method frequency domain application of the perfectly matched layer (PML) concept," *Microwave Opt. Technol. Let.*, Vol. 9, no. 3, pp. 117-122., 1995.
- [27] Ida, Nathan, *Numerical Modeling*, 1995.
- [28] J. Crank, P. Nicholson, "A Practical Method for Numerical Evaluation of Solutions of Partial Differential Equations of the Heat-Conduction Type", *Proc. Camb. Phil. Soc.*, Vol. 43, 50-67, 1947.
- [29] P. L. Liu, U. Zhao, RS. Choa, "Slow-wave finite-difference beam propagation method," *IEEE Photon. Technol. Len.*, Vol. 7, no. 8, pp. 890-892, 1995.
- [30] G. H. An, J. Haran, P. Vilcot, D. Decoster, "An improved time-domain beam propagaton method for integrated optics components," *IEEE Photon. Technol. Lett.*, Vol. 9, no. 3, pp. 348-350, 1997.

- [31] M. Ruggiero, V. L. Lopes, *Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais*, Makron Books, 2^a ed., 1997.
- [32] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, 1990.
- [33] Y. Saad, H.A. Vorst, “Iterative solution of linear systems in the 20th century”, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 123, no. 1-2, pp. 1-33, 2000.
- [34] W. Kahan, “Gauss-Seidel methods of solving large systems of linear equations”, Phd thesis, University of Toronto, 1958.
- [35] R. Fletcher, “Conjugate gradients methods for indefinite systems”, G.A. Watson editor, *Proceedings of the Dundee Biennial Conference on Numerical Analysis 1974*, Springer Verlag, pp 73-89, 1975.
- [36] M. R. Hestenes, E. L. Stiefel, “Methods of conjugate gradients for solving linear systems”, *J. Res. Nat. Bur. Stand*, Sec. B, Vol. 49, pp. 409-436, 1952.
- [37] A. N. Krylov, “On the numerical solution of the equation by which in technical questions frequencies of small oscillations of material systems are determined”, *Izvestija AN SSSR (News of Academy of Sciences of the USSR)*, Vol. 7, no. 4, pp. 491-539, 1931.
- [38] P. Sonneveld, “CGS: a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems”, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol. 10, no. 1, pp. 36-52, 1989.
- [39] C. Lanczos, “An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators”, *J. Res. Nature Stand.*, Vol. 14, no. 4, pp. 255-282, 1950.
- [40] D. L. Lee, *Electromagnetic Principles of Integrated Optics*, John Wiley & Sons, 1986.

Publicações associadas à tese

1. K. Claudio, V.F. Rodriguez-Esquerre, J. P. da Silva, M. F. G. Hernández, H. E. Hernández-Figueroa , *Iterative-solvers for numerical analysis of photonic devices*, Micr. Opt. Letters, Vol. 48, no. 6, pp. 1182-1186, 2006.
2. K. Claudio, C. H. Silva-Santos, Marcos S. Gonçalves, H. E. Hernández-Figueroa , *A flexible implementation of finite element method and iterative method applied to analyze optical devices*, International Workshop on Simulation and Analysis of Complex Systems 2008.
3. C. H. Silva-Santos, K. Claudio, M. S. Gonçalves, J. R. Brianeze, H. E. Hernández-Figueroa , *Bio-inspired algorithms applied to microstrip antennas design - JCIS - Journal of Computational Interdisciplinary Sciences*, Vol. 1, no. 2, pp. 141-147, 2008.
4. C. H. Silva-Santos, K. Claudio, H. E. Hernández-Figueroa , M. S. Gonçalves, IMOC 2009 - SBMO/IEEE MTT-S International Microwave And Optoelectronics Conference *Design of Photonic Devices Using Bio-Inspired Algorithms*.
5. K. Claudio, C. H. Silva-Santos, H. E. Hernández-Figueroa , M. S. Gonçalves, IMOC 2009 - SBMO/IEEE MTT-S International Microwave And Optoelectronics Conference *Improvements in Linear System Solutions to Finite Element Method*.

Anexo I

Código desenvolvido – Montagem e Remontagem

O código a seguir permite a montagem da matriz global A , a montagem e remontagem dos elementos que tiveram suas características físicas alteradas através da variável de decisão $oper$. As variáveis aa e bb são a matriz local e a contribuição local ao vetor lado direito BB .

```
do i = 1, n_connect           ! nós dos elementos a serem montados
  ii = connect(i)
  if oper = 1 then
    B(ii) = B(ii) + bb(i)
  else
    B(ii) = B(ii) - bb(i)
  end if
do j = 1, n_connect
  jj = connect(j)
  start = crow(ii)
  endc = crow(ii + 1) - 1
  find = 0
  k = start
  while find = 0 and k <= endc
    if JVECT(k) = jj then
      if (oper.eq.1) then
        A(k) = A(k) + aa(i,j)      ! aa(i,j) matriz local
      else
        A(k) = A(k) - aa(i,j)
      end if
      IVECT(k) = ii
      JVECT(k) = jj
      find = 1
    end if
    k = k+1
  end while
  if (find=0) then
    k = start
    while find = 0 and k <= endc
      if JVECT(k) = -1 then
        if oper = 1 then
          A(k) = A(k) + aa(i,j)
        else
          A(k) = A(k) - aa(i,j)
        end if
        JVECT(k) = jj
        find = 1
      end if
      k = k+1
    end while
  end if
end do
end do
```

Para todo elemento da malha (completa ou alterada) após a montagem da matriz e vetor lado direito locais é chamada a função acima, que ao final será obtida a matriz A global, montada com as modificações, se este for o caso.