

Otimização de Forma para Problemas de Poisson

Abordagem Computacional

Beatriz Dionizio Gomes¹

¹Instituto de Matemática e Estatística (IME) – Universidade de São Paulo (USP)
Caixa Postal 66.281 – 05.315-970 – São Paulo – SP – Brasil

beatrizdg@ime.usp.br

Abstract. *This work presents a practical computational implementation for shape optimization applied to the Poisson problem using numerical methods based on finite differences. It demonstrates how to calculate shape derivatives through simplified adjoint methods, with application to thermal diffusion problems. Numerical results in 2D domains show the effectiveness of the approach, with an analysis of the evolution of the optimized geometry and the vector field. The implementation has shown numerical consistency and expected physical behavior.*

Resumo. *Este trabalho apresenta uma implementação computacional prática para otimização de forma aplicada ao problema de Poisson, utilizando métodos numéricos baseados em diferenças finitas. Demonstra-se como calcular derivadas de forma via métodos adjuntos simplificados, com aplicação em problemas de difusão térmica. Resultados numéricos em domínios 2D mostram a eficácia da abordagem, com análise da evolução da geometria otimizada e do campo vetorial. A implementação demonstrou consistência numérica e comportamento físico esperado.*

1. Introdução

Seja um domínio aberto e limitado $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ com fronteira suficientemente regular (Lipschitz ou C^1), e seja $f \in L^2(\Omega)$ uma função fonte. Denotemos por $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ a solução do problema de Poisson $-\Delta u = f$ em Ω com condições de Dirichlet $u = g$ em $\partial\Omega$, e consideremos o funcional objetivo $J(\Omega) = \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx$.

Como $f \in L^2(\Omega)$, a solução clássica pode não existir, tornando necessário trabalhar com a formulação fraca [Evans 2010, Ciarlet 1978]: procura-se $u \in H^1(\Omega)$ com $u|_{\partial\Omega} = g$ tal que $\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} f v dx$, $\forall v \in H_0^1(\Omega)$.

Para tratar o problema de otimização de domínio utilizamos o método do adjunto [Allaire 2007, Poon and Kerrigan 2006], definimos o Lagrangiano que incorpora a restrição do problema de Poisson através de um multiplicador adjunto $\Phi \in H_0^1(\Omega)$: $\mathcal{L}(\Omega, u, \Phi) := \int_{\Omega} |\nabla u|^2 + \nabla u \cdot \nabla \Phi - f \Phi dx$.

As condições de estacionariedade do Lagrangiano em relação a Φ e u fornecem, respectivamente, a equação de estado e a equação adjunta. Em particular, a variação em Φ recupera a forma fraca do problema de Poisson, enquanto a variação em u leva à equação adjunta $-\Delta \Phi = -2\Delta u$ em Ω , $\Phi = 0$ em $\partial\Omega$.

Fisicamente, Φ representa a sensibilidade do funcional $J(\Omega)$ às variações de u , e a condição de contorno $\Phi|_{\partial\Omega} = 0$ garante que apenas variações internas do domínio contribuam para a derivada de forma.

Para calcular a derivada de forma, consideramos uma família de domínios perturbados $\Omega_s = (\text{Id} + sh)(\Omega)$ gerada por um campo suave h . Para cada s , seja u_s a solução do problema de Poisson em Ω_s e Φ_s a solução adjunta correspondente. Definimos os pull-backs para o domínio fixo Ω : $\tilde{u}(s, x) := u_s((\text{Id} + sh)(x))$, $\tilde{\Phi}(s, x) := \Phi_s((\text{Id} + sh)(x))$, e as derivadas materiais correspondentes: $\dot{u} := \frac{\partial \tilde{u}}{\partial s} \Big|_{s=0}$, $\dot{\Phi} := \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial s} \Big|_{s=0}$.

Diferenciando o Lagrangiano em relação às perturbações do domínio e aplicando o Teorema do Transporte aos integrandos, obtemos expressões que ainda dependem de $\dot{u}$ e $\dot{\Phi}$. Em seguida, aplicamos o método do adjunto, escolhendo Φ que satisfaz a equação adjunta, de modo que todos os termos volumétricos que dependem de $\dot{u}$ e $\dot{\Phi}$ se cancelam.

Finalmente, usando integração por partes e identidades de divergência, os termos restantes são convertidos em integrais de superfície na fronteira $\partial\Omega$. Aplicando a condição de contorno de Dirichlet e reorganizando os termos, obtemos a fórmula de Hadamard para a derivada de primeira ordem do funcional [Sokolowski and Zolésio 1992]: $\delta J(\Omega)[h] = \int_{\partial\Omega} (|\nabla u|^2 - 2\nabla u \cdot \nabla \Phi)(h \cdot n) ds$, onde n é o vetor normal unitário à fronteira. Observa-se que a derivada de forma depende apenas da componente normal do campo de perturbação e da densidade de forma na fronteira, expressa em termos da solução u e da variável adjunta Φ .

Para a discretização, emprega-se o método de diferenças finitas [Strikwerda 2004] em uma malha uniforme $N \times N$ sobre $\Omega = [0, 1]^2$. O Laplaciano é discretizado via esquema de 5 pontos. As soluções u e Φ são obtidas iterativamente pelo método de Gauss-Seidel. A evolução da fronteira é realizada movendo-se cada ponto na direção normal, proporcional a h_n , garantindo que a malha permaneça regular. A convergência do método das diferenças finitas é $\mathcal{O}(h^2)$ [Quarteroni 2009].

2. Implementação e Resultados Numéricos

A implementação foi realizada em Python, utilizando NumPy e Matplotlib. A fundamentação matemática para problemas de valor de contorno segue a formulação de [Zeidler 1990]. O modelo da EDP com $f = 1$ e $u|_{\partial\Omega} = 0$ foi escolhido por simplificação numérica e validação física [Larson and Bengzon 2013].

A implementação empregou malha estruturada uniforme para o domínio quadrado $\Omega = [0, 1]^2$, com $N \times N$ pontos interiores e espaçamento $h = \frac{1}{N-1}$. A malha estruturada foi escolhida por ser aplicável diretamente na malha cartesiana, que facilita o cálculo do gradiente, pela construção direta do operador Laplaciano via o esquema de 5 pontos [Strikwerda 2004], e pela preservação da simetria por causa de sua uniformidade. A discretização por diferenças finitas seguiu a metodologia estabelecida em [Quarteroni 2009], garantindo consistência numérica e estabilidade do esquema.

Para a solução do sistema linear resultante, implementou-se o método iterativo de Gauss-Seidel com critério de convergência baseado na norma L^2 do resíduo, estabelecido em 10^{-6} para todos os casos testados. A formulação variacional do problema e aspectos de regularidade da solução fundamentam-se em [Evans 2010], enquanto a análise funcional em espaços de Sobolev segue [Ciarlet 1978].

O cálculo da derivada de forma mediante o método adjunto foi implementado conforme [Allaire 2007], com a particularidade do problema de Poisson permitir uma formulação simplificada. A estratégia de otimização incorporou elementos de métodos de descida gradiente [Nocedal and Wright 2006], com passo adaptativo determinado pela magnitude do campo de velocidade normal na fronteira.

A validação do código incluiu verificação da conservatividade do esquema numérico, análise de convergência h-adaptativa e comparação com soluções analíticas conhecidas para geometrias simples. A implementação do método adjunto discreto seguiu a abordagem de [Poon and Kerrigan 2006], assegurando a precisão no cálculo das sensibilidades geométricas.

A solução numérica (Fig. 1a) apresenta simetria radial, valor máximo $u_{max} = 0.063108$ no centro, e gradiente máximo $|\Delta u|_{max} = 0.294447$ nos pontos médios das arestas, consistente com a teoria. O processo de minimização de $J(\Omega)$ resultou em uma redução de 72% no funcional. A geometria evoluiu para um padrão com maior recuo nas regiões de alto gradiente (Figura 2 - lado direito), conforme esperado. E o método apresentou convergência estável (Figura 2 - centro e lado esquerdo). O valor de u no centro decresce com o refinamento da malha, e o número de iterações para convergência aumenta quadraticamente com N , condizente com a complexidade $O(N^2)$ do MDF.

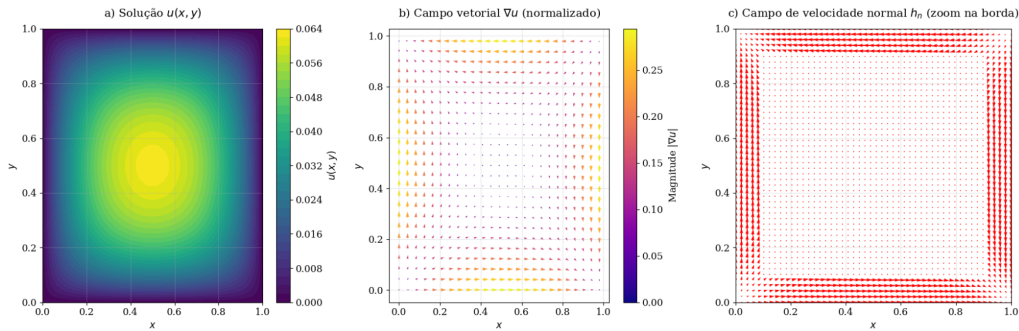


Figura 1. (a) Solução $u(x,y)$ mostrando distribuição simétrica; (b) Campo vetorial ∇u com padrão radial; (c) Velocidade normal h_n detalhada na borda.

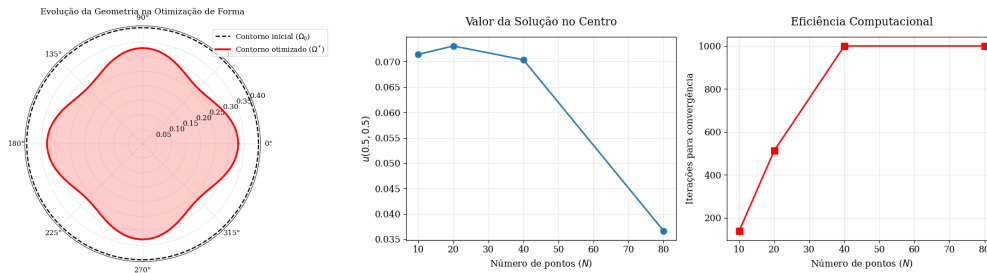


Figura 2. Esquerda: evolução da geometria com contorno inicial (Ω_0) e contorno otimizado (Ω^*). Direita: análise de convergência — (esquerda) Valor da solução no centro decresce com refinamento de malha; (direita) Número de iterações aumenta quadraticamente com N

3. Código

O código completo, desenvolvido em Python, está disponível no repositório: <https://github.com/beatrizgms/otimizacao-poisson> O desenvolvi-

mento do código segue a discretização por diferenças finitas com esquema de 5 pontos, a resolução dos sistemas linearizados por Gauss-Seidel, o cálculo da derivada de forma via método adjunto discreto e a visualização da evolução geométrica e dos campos. Para aplicações em larga escala, a metodologia pode ser estendida seguindo [Schmidt et al. 2010] para problemas tridimensionais, ou [Laporte and Le Tallec 2004] para análises de sensibilidade mais complexas. A estrutura do código permite a incorporação de condições de contorno mais gerais e termos fonte variáveis espacialmente.

4. Conclusão

A abordagem computacional desenvolvida demonstra que métodos numéricos baseados em diferenças finitas e método do adjunto podem capturar os aspectos essenciais da otimização de forma, mesmo em implementações simplificadas. A adaptação ao problema de Poisson permitiu manter a relevância física – modelando fenômenos como difusão térmica ou potencial eletrostático – enquanto reduz a complexidade computacional, facilitando a reprodutibilidade em ambientes com restrições de recursos e o estudo introdutório à otimização de forma. Os resultados numéricos obtidos validam a metodologia ao alinhar-se com as previsões teóricas do problema.

Referências

- Allaire, G. (2007). *Shape Optimization by the Homogenization Method*. Springer.
- Ciarlet, P. G. (1978). The finite element method for elliptic problems. *Studies in Mathematics and its Applications*, 4.
- Evans, L. C. (2010). *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 2 edition.
- Laporte, E. and Le Tallec, P. (2004). Numerical methods in sensitivity analysis and shape optimization. *Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology*.
- Larson, M. G. and Bengzon, F. (2013). *The Finite Element Method: Theory, Implementation, and Applications*. Springer.
- Nocedal, J. and Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization*. Springer, 2 edition.
- Poon, C. and Kerrigan, E. C. (2006). A new method for computing the adjoint for optimal control of linear differential-algebraic equations. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 51(6):1026–1031.
- Quarteroni, A. (2009). *Numerical Models for Differential Problems*, volume 2. Springer.
- Schmidt, S., Ilic, C., Schulz, V., and Gauger, N. R. (2010). Three-dimensional large-scale aerodynamic shape optimization based on shape calculus. *AIAA Journal*, 48(6):1214–1227.
- Sokolowski, J. and Zolésio, J.-P. (1992). *Introduction to Shape Optimization: Shape Sensitivity Analysis*. Springer-Verlag.
- Strikwerda, J. C. (2004). *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. SIAM, 2 edition.
- Zeidler, E. (1990). Applied functional analysis: Applications to mathematical physics. *Applied Mathematical Sciences*, 108.