

Capítulo 2.

APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS 1D EM MALHAS UNIFORMES

O princípio fundamental do método das diferenças finitas (MDF) é aproximar através de expressões algébricas cada termo do modelo matemático em cada nó da malha. Neste capítulo o MDF é aplicado inicialmente a um modelo matemático unidimensional (1D) usando uma discretização uniforme, isto é, uma malha de nós igualmente espaçados. Além da obtenção das equações discretizadas, são obtidas as expressões para os erros de truncamento admitidos em cada uma das expressões algébricas utilizadas neste modelo numérico.

O modelo matemático representa o fenômeno físico para o qual se deseja a solução. Este modelo é formado pelas equações governantes do problema, podendo ser uma única equação ou, em um problema mais complexo, um sistema de equações diferenciais. Inicialmente considere o seguinte modelo matemático unidimensional hipotético

$$\frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} + \Lambda^2 + x^3 + K \quad (2.1)$$

onde Λ é a variável dependente, x é a variável independente e K é uma constante. O objetivo, portanto, é resolver a equação Eq. (2.1) com o método numérico das diferenças finitas. As variáveis de interesse podem ser:

- primária: Λ (variável dependente, local)

- secundárias: $\Lambda_m = \frac{1}{L} \int_0^L \Lambda dx$ (global) (2.2)

$$\left(\frac{d\Lambda}{dx} \right)_{\text{contorno}} \quad (\text{local}) \quad (2.3)$$

onde L representa o comprimento do domínio de cálculo.

2.1 DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO E APROXIMAÇÕES DIRETAS

Discretizar o domínio de cálculo consiste em definir, ao longo deste domínio, em quais pontos se deseja conhecer a variável dependente Λ . Para isso é necessário construir sobre o domínio uma malha, que conterá um conjunto de nós posicionados onde se deseja determinar Λ . A Fig. (2.1) apresenta a discretização de um domínio unidimensional através da construção de uma malha igualmente espaçada, ou seja, uma malha uniforme.

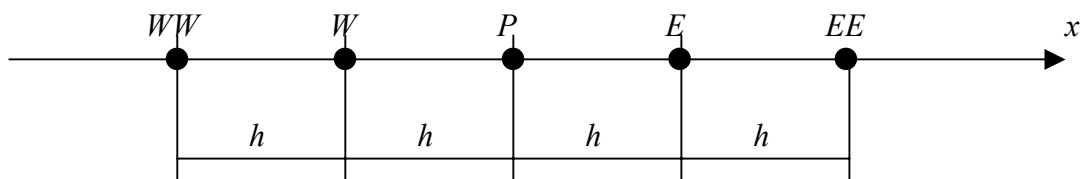


Figura 2.1 Malha 1D uniforme.

Para cada nó genérico P da malha, existirá uma equação discretizada do modelo matemático relacionando o valor de Λ armazenado em P com os valores de Λ armazenados nos nós vizinhos. Na Fig. (2.1) tem-se:

- 1) nós ou pontos da malha: WW, W, P, E, EE .
- 2) nó genérico para as aproximações: P
 - para o contorno esquerdo: $P = 1$
 - para os nós internos da malha: $P = 2, 3, \dots, N-1$
 - para o contorno direito: $P = N$
- 3) número de nós da malha: N
- 4) número de elementos da malha: $N - 1$

$$5) \text{ tamanho dos elementos da malha: } h = \frac{L}{N-1} \quad (2.4)$$

Os termos da equação do modelo matemático que não possuem derivadas são aproximados diretamente para o ponto P e assumem a forma

$$K = K_P \quad (2.5)$$

$$x = x_P \quad (2.6)$$

$$\Lambda = \Lambda_P \quad (2.7)$$

As Eqs. (2.5) a (2.7) são introduzidas na Eq. (2.1). Para completar a discretização do modelo matemático, são necessárias expressões algébricas para as derivadas de primeira e segunda ordens de Λ , avaliadas no ponto P . Como fazer isso é visto nas próximas seções deste capítulo.

2.2 SÉRIE DE TAYLOR

No método das diferenças finitas, a aproximação dos termos envolvendo derivadas de Λ é feita usando expansões da série de Taylor, dada por (Kreyszig, 1999)

$$\Lambda_x = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n (x - x_0)^n] \quad (2.8)$$

onde

$$a_n = \frac{1}{n!} \Lambda_{x_0}^{(n)} \quad (2.9)$$

$$\Lambda^{(n)} = \frac{d^n \Lambda}{dx^n} \quad (2.10)$$

A Eq. (2.8) pode ser reescrita na forma

$$\Lambda_x = \Lambda_P + \Lambda_P^i \frac{(x - x_P)}{1!} + \Lambda_P^{ii} \frac{(x - x_P)^2}{2!} + \Lambda_P^{iii} \frac{(x - x_P)^3}{3!} + \dots \quad (2.11)$$

O valor de Λ_x é exato se forem considerados os infinitos termos da série de Taylor. A Eq. (2.11) aplicada aos nós WW , W , E e EE , a partir do ponto P da Fig. (2.1), resulta em

$$\Lambda_E = \Lambda_P + \Lambda_P^i h + \Lambda_P^{ii} \frac{h^2}{2} + \Lambda_P^{iii} \frac{h^3}{6} + \dots \quad (2.12)$$

$$\Lambda_W = \Lambda_P - \Lambda_P^i h + \Lambda_P^{ii} \frac{h^2}{2} - \Lambda_P^{iii} \frac{h^3}{6} + \dots \quad (2.13)$$

$$\Lambda_{EE} = \Lambda_P + \Lambda_P^i 2h + \Lambda_P^{ii} 2h^2 + \Lambda_P^{iii} \frac{4h^3}{3} + \dots \quad (2.14)$$

$$\Lambda_{WW} = \Lambda_P - \Lambda_P^i 2h + \Lambda_P^{ii} 2h^2 - \Lambda_P^{iii} \frac{4h^3}{3} + \dots \quad (2.15)$$

onde

$$h = x_P - x_W = x_E - x_P = \dots = \text{constante} \quad (2.16)$$

Deve-se notar que as Eqs. (2.12) a (2.15) são expressões que relacionam o valor de Λ armazenado nos pontos WW , W , E e EE , com o valor de Λ armazenado no ponto P e suas derivadas.

2.3 APROXIMAÇÕES PARA A DERIVADA DE PRIMEIRA ORDEM

Uma expressão para a aproximação da derivada de primeira ordem pode ser obtida a partir de qualquer uma das Eqs. (2.12) a (2.15). A escolha de qual equação utilizar na aproximação define um tipo de esquema. A seguir são apresentados alguns esquemas mais comuns.

2.3.1 Com um Ponto a Jusante (DDS)

Isolando-se a derivada de primeira ordem, Λ_P^i , da Eq. (2.12), tem-se

$$\Lambda_P^i = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{h} - \underbrace{\Lambda_P^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{6} - \dots}_{\text{desprezado (erro de truncamento)}} \quad (2.17)$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{exato}}$

$\underbrace{\hspace{2.5cm}}_{\text{considerado}}$

$\underbrace{\hspace{3.5cm}}_{\text{desprezado (erro de truncamento)}}$

ou

$$\Lambda_P^i = \underbrace{(\lambda_{DDS}^i)_P}_{\text{aproximação numérica}} + \underbrace{\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_P}_{\text{erro de truncamento}} \quad (2.18)$$

onde

$$(\lambda_{DDS}^i)_P = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{h} \quad (2.19)$$

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_P = -\Lambda_P^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_P^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (2.20)$$

No esquema DDS, a derivada de primeira ordem de Λ é aproximada para o ponto P através de

$$\Lambda_P^i \approx (\lambda_{DDS}^i)_P \quad (2.21)$$

Deve-se notar que se pode utilizar outra expansão em série de Taylor, por exemplo a Eq. (2.13), ou até uma combinação entre as Eqs. (2.13) a (2.15) para a determinação da expressão que fornece a derivada de primeira ordem de Λ , o que é feito nas próximas seções.

2.3.2 Com um Ponto a Montante (UDS)

Isolando-se a derivada de primeira ordem, Λ_P^i , da Eq. (2.13), tem-se

$$\Lambda_P^i = (\lambda_{UDS}^i)_P + \varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_P \quad (2.22)$$

onde

$$(\lambda_{UDS}^i)_P = \frac{(\Lambda_P - \Lambda_W)}{h} \quad (2.23)$$

$$\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_P = \Lambda_P^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_P^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (2.24)$$

2.3.3 Com Diferença Central de 2 Pontos (CDS-2)

Subtraindo a Eq. (2.13) da Eq. (2.12), tem-se

$$\Lambda_P^i = (\lambda_{CDS-2}^i)_P + \varepsilon(\lambda_{CDS-2}^i)_P \quad (2.25)$$

onde

$$(\lambda_{CDS-2}^i)_P = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_W)}{2h} \quad (2.26)$$

$$\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^i)_P = - \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_P^v \frac{h^4}{120} - \Lambda_P^{vii} \frac{h^6}{5040} - \dots \quad (2.27)$$

A Fig. (2.2) apresenta graficamente as aproximações numéricas da derivada de primeira ordem de Λ , dadas pelos esquemas DDS, UDS e CDS-2. Como já foi observado, aproximações diferentes podem ser obtidas envolvendo mais pontos da malha. Para isso basta que sejam combinadas as expressões da expansão em série de Taylor de Λ para os outros pontos da malha, vizinhos ao ponto P . Este procedimento é limitado ao número de pontos da malha. Quanto mais pontos forem envolvidos, maior será a complexibilidade da aproximação numérica e menor será o erro de truncamento. Observe ainda que, para as aproximações apresentadas até aqui, o erro de truncamento tende a zero quando o tamanho dos elementos da malha também tende a zero.

2.3.4 Com Dois Pontos a Jusante (DDS-2)

Multiplicando por quatro a Eq. (2.12) e subtraindo a Eq. (2.14), tem-se

$$\Lambda_P^i = (\lambda_{DDS-2}^i)_P + \varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_P \quad (2.28)$$

onde

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_P = \frac{(4\Lambda_E - 3\Lambda_P - \Lambda_{EE})}{2h} \quad (2.29)$$

$$\varepsilon (\lambda_{DDS-2}^i)_P = \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{3} + \Lambda_P^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_P^v \frac{7h^4}{60} + \dots \quad (2.30)$$

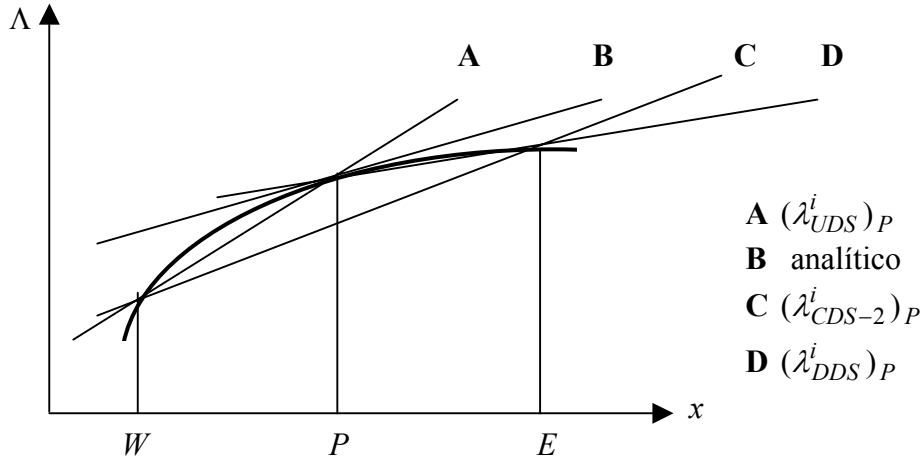


Figura 2.2 Algumas aproximações numéricas para Λ_P^i .

2.3.5 Com Dois Pontos a Montante (UDS-2)

Subtraindo da Eq. (2.15) a Eq. (2.13) multiplicada por quatro, tem-se

$$\Lambda_P^i = (\lambda_{UDS-2}^i)_P + \varepsilon (\lambda_{UDS-2}^i)_P \quad (2.31)$$

onde

$$(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \frac{(3\Lambda_P + \Lambda_{WW} - 4\Lambda_W)}{2h} \quad (2.32)$$

$$\varepsilon (\lambda_{UDS-2}^i)_P = \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{3} - \Lambda_P^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_P^v \frac{7h^4}{60} - \dots \quad (2.33)$$

2.3.6 Com Diferença Central de 4 Pontos (CDS-4)

Com [8 x a Eq. (2.12)] - [8 x a Eq. (2.13)] + [Eq. (2.15)] - [Eq. (2.14)], tem-se

$$\Lambda_P^i = (\lambda_{CDS-4}^i)_P + \varepsilon (\lambda_{CDS-4}^i)_P \quad (2.34)$$

onde

$$(\lambda_{CDS-4}^i)_P = \frac{(8\Lambda_E - 8\Lambda_W + \Lambda_{WW} - \Lambda_{EE})}{12h} \quad (2.35)$$

$$\varepsilon (\lambda_{CDS-4}^i)_P = \Lambda_P^v \frac{h^4}{30} + \Lambda_P^{vii} \frac{h^6}{252} + \Lambda_P^{ix} \frac{h^8}{4320} + \dots \quad (2.36)$$

2.4 APROXIMAÇÕES PARA A DERIVADA DE SEGUNDA ORDEM

Da mesma forma como para a derivada de primeira ordem de Λ , podem ser obtidas expressões para a derivada de segunda ordem de Λ a partir das Eqs. (2.12) a (2.15). Cada opção adotada determina um esquema numérico diferente. A seguir são apresentados dois destes esquemas.

2.4.1 Com Diferença Central de 3 Pontos (CDS-2)

Somando-se as Eqs. (2.12) e (2.13), tem-se

$$\Lambda_P^{ii} = (\lambda_{CDS-2}^{ii})_P + \varepsilon (\lambda_{CDS-2}^{ii})_P \quad (2.37)$$

onde

$$(\lambda_{CDS-2}^{ii})_P = \frac{(\Lambda_W + \Lambda_E - 2\Lambda_P)}{h^2} \quad (2.38)$$

$$\varepsilon (\lambda_{CDS-2}^{ii})_P = - \Lambda_P^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_P^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_P^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (2.39)$$

2.4.2 Com Diferença Central de 5 Pontos (CDS-4)

Somando-se as Eqs. (2.12) e (2.13) multiplicadas por dezesseis, e subtraindo desta soma as Eqs. (2.14) e (2.15), tem-se

$$\Lambda_P^{ii} = (\lambda_{CDS-4}^{ii})_P + \varepsilon (\lambda_{CDS-4}^{ii})_P \quad (2.40)$$

onde

$$(\lambda_{CDS-4}^{ii})_P = \frac{(16\Lambda_W + 16\Lambda_E - \Lambda_{WW} - \Lambda_{EE} - 30\Lambda_P)}{12h^2} \quad (2.41)$$

$$\varepsilon (\lambda_{CDS-4}^{ii})_P = \Lambda_P^{vi} \frac{h^4}{90} + \Lambda_P^{viii} \frac{h^6}{1008} + \Lambda_P^x \frac{h^8}{21600} + \dots \quad (2.42)$$

2.5 APROXIMAÇÃO PARA A VARIÁVEL GLOBAL

Através da regra do trapézio (Kreyszig, 1999), obtém-se

$$\Lambda_m = \lambda_m + \varepsilon (\lambda_m) \quad (2.43)$$

onde

$$\lambda_m = \frac{h}{2L} \sum_{P=2}^N (\Lambda_W + \Lambda_P) \quad (2.44)$$

$$\varepsilon (\lambda_m) = - \sum_{P=2}^N \left(\Lambda_w^{ii} \frac{h^3}{12} + \Lambda_w^{iv} \frac{h^5}{480} + \Lambda_w^{vi} \frac{h^7}{53760} + \dots \right) \quad (2.45)$$

com

$$x_w = \frac{x_W + x_P}{2} \quad (2.46)$$

2.6 ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA

O erro de truncamento (ε) de qualquer aproximação numérica (ϕ) pode ser representado genericamente por

$$\varepsilon(\phi) = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots \quad (2.47)$$

onde os coeficientes c_i podem ser positivos ou negativos e podem ser função da variável dependente Λ e de suas derivadas, isto é, podem variar com a coordenada x , mas independem do tamanho h dos elementos da malha. A Eq. (2.47) é denominada aqui de equação geral do erro de truncamento.

Por definição, as ordens verdadeiras (p_V) do erro de truncamento são os expoentes de h dos termos não-nulos da Eq. (2.47), ou seja, p_L, p_2, p_3 etc. As ordens verdadeiras seguem a relação $p_L < p_2 < p_3 < \dots$. São números inteiros positivos que geralmente constituem uma série aritmética, isto é, a diferença entre ordens subseqüentes é constante.

Por definição, o menor expoente de h na Eq. (2.47) é chamado de ordem assintótica (p_L). É um número inteiro positivo que satisfaz a condição $p_L \geq 1$. Quando o tamanho h dos elementos da malha tende a zero, o primeiro termo do erro de truncamento é o principal componente, dominando o valor total do erro. Neste caso, em gráficos logarítmicos de ε versus h , a inclinação da curva em relação ao eixo das abscissas tende ao valor da ordem assintótica. Quanto maior for esta inclinação, maior é a taxa de redução de ε com a diminuição de h . Em resumo, na equação geral do erro de truncamento tem-se

$$\phi = \frac{d\Lambda}{dx}, \frac{d^2\Lambda}{dx^2}, \Lambda_m, \dots$$

$c_1, c_2, c_3, \dots =$ coeficientes que independem de h

$p_V = p_L, p_2, p_3, \dots =$ ordens verdadeiras de ε (números inteiros e positivos)

$p_L =$ ordem assintótica de ε (≥ 1)

A Tabela (2.1) apresenta os valores das ordens verdadeiras e assintótica para as aproximações numéricas apresentadas neste capítulo.

Tabela 2.1 Ordens verdadeiras e assintótica do erro de truncamento.

Φ	ϕ	p_V	p_L
$\frac{d\Lambda}{dx}$	λ_{DDS}^i	1, 2, 3, ...	1
	λ_{UDS}^i	1, 2, 3, ...	1
	λ_{CDS-2}^i	2, 4, 6, ...	2
	λ_{DDS-2}^i	2, 3, 4, ...	2
	λ_{UDS-2}^i	2, 3, 4, ...	2
	λ_{CDS-4}^i	4, 6, 8, ...	4
$\frac{d^2\Lambda}{dx^2}$	λ_{CDS-2}^{ii}	2, 4, 6, ...	2
	λ_{CDS-4}^{ii}	4, 6, 8, ...	4
Λ_m	λ_m	2, 4, 6, ...	2

2.7 EXERCÍCIOS

Exercício 2.1

A partir das Eqs. (2.12) a (2.15), deduza os resultados mostrados nas:

- 1) Eqs. (2.25) a (2.27) [Λ_p^i CDS-2]
- 2) Eqs. (2.34) a (2.36) [Λ_p^i CDS-4]
- 3) Eqs. (2.40) a (2.42) [Λ_p^{ii} CDS-4]

Obtenha pelo menos três termos em cada equação do truncamento.

Exercício 2.2

- 1) Aplique a Eq. (2.24) de $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$ à função dada por $\Lambda = x^4$, em torno do ponto $x_P = 8$, e apresente os coeficientes c_i da Eq. (2.47), as ordens verdadeiras e assintótica.
- 2) Faça o mesmo para a Eq. (2.27) de $\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^i)$
- 3) E para a Eq. (2.30) de $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$

Exercício 2.3

- 1) Novamente, para a função dada por $\Lambda = x^4$, em torno do ponto $x_p = 8$, monte uma tabela com os valores de λ_{UDS}^i , da Eq. (2.23), de $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$, da Eq. (2.24), e a soma deles, para $h = 4, 2, 1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{256}$.
- 2) Faça o mesmo para λ_{CDS-2}^i , da Eq. (2.26), e $\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^i)$ da Eq. (2.27).
- 3) E para λ_{DDS-2}^i , da Eq. (2.29), e $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$ da Eq. (2.30).

Perceba que a soma da aproximação numérica com o seu erro de truncamento, em cada h , tem que ser igual à solução analítica exata de Λ_p^i , que neste caso é 2048.

Exercício 2.4

Faça um único gráfico do erro de truncamento *versus* h , em escala log-log, com os valores de $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$, $\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^i)$ e $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$ obtidos no exercício 2.3.