

Capítulo 2.

APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS 1D EM MALHA UNIFORME

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 que se pretende conhecer 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

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

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)

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

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.

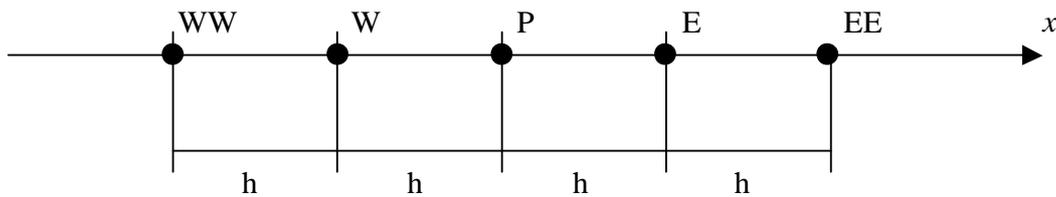


Figura 2.1 Malha 1D uniforme.

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. Da Fig. (2.1) temos:

- a) nós da malha: WW, W, P, E, EE.
- b) 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:	$P = N$
- c) número de nós da malha: N
- d) número de elementos da malha: $N - 1$

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

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

$$K_p = K_p \quad (2.5)$$

$$x_p = x_p \quad (2.6)$$

$$\Lambda_p = \Lambda_p \quad (2.7)$$

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

2.2 SÉRIE DE TAYLOR

No método das diferenças finitas, a aproximação dos termos envolvendo derivadas de Λ é feita usando a expansão em séries 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

$$h = x_P - x_W = x_E - x_P = \dots \quad (2.16)$$

Note 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 destes esquemas.

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

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

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

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

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

Portanto, a derivada de primeira ordem de Λ pode ser aproximada para o ponto P, através do esquema DDS, por

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

Note 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 (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, diferentes esquemas de interpolação podem ser obtidos envolvendo mais pontos da malha. Para isso basta que sejam combinadas as expressões da expansão em séries de Taylor de Λ para os outros pontos da malha, vizinhos ao ponto P. Este procedimento é limitado ao número de pontos da malha e às várias combinações possíveis fornecem diferentes esquemas de interpolação para Λ_P^i . 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

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

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

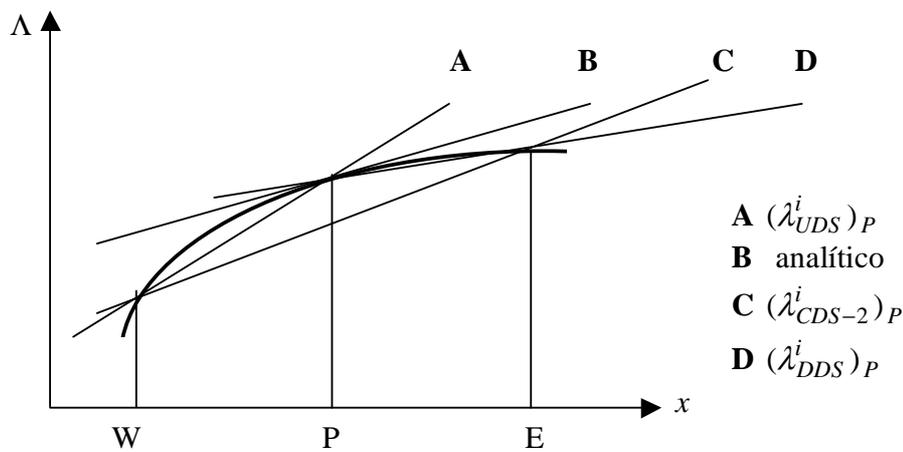


Figura 2.2 – Algumas aproximações numéricas para Λ_P^i .

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

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

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

2.4 APROXIMAÇÕES PARA A DERIVADA DE SEGUNDA ORDEM

Da mesma forma como para a derivada de primeira ordem de Λ , obtém-se as expressões para a derivada de segunda ordem de Λ a partir das Eqs. (2.13) 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

$$\Lambda_P^{ii} = (\lambda_{CDS-2}^{ii})_P + \varepsilon (\lambda_{CDS-2}^{ii})_P \quad (2.34)$$

onde

$$(\lambda_{CDS-2}^{ii})_P = \frac{(\Lambda_W + \Lambda_E - 2\Lambda_P)}{h^2} \quad (2.35)$$

$$\varepsilon (\lambda_{CDS-2}^{ii})_P = - \Lambda_P^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_P^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_P^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (2.36)$$

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

$$\Lambda_P^{ii} = (\lambda_{CDS-4}^{ii})_P + \varepsilon (\lambda_{CDS-4}^{ii})_P \quad (2.37)$$

onde

$$(\lambda_{CDS-4}^{ii})_P = \frac{(16\Lambda_W + 16\Lambda_E - \Lambda_{WW} - \Lambda_{EE} - 30\Lambda_P)}{12h^2} \quad (2.38)$$

$$\varepsilon (\lambda_{CDS-4}^{ii})_P = \Lambda_P^{vi} \frac{h^4}{90} + \Lambda_P^{viii} \frac{h^6}{1008} + \dots \quad (2.39)$$

2.5 APROXIMAÇÃO PARA A VARIÁVEL GLOBAL

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

$$\Lambda_m = \lambda_m + \varepsilon(\lambda_m) \quad (2.40)$$

onde

$$\lambda_m = \frac{h}{2L} \sum_{p=2}^N (\Lambda_w + \Lambda_p) \quad (2.41)$$

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{h^3}{L} \sum_{p=2}^N (\Lambda_w^{ii} \frac{1}{12} + \Lambda_w^{iv} \frac{h^2}{480} + \dots) \quad (2.42)$$

com

$$x_w = \frac{x_W + x_P}{2} \quad (2.43)$$

2.6 ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA

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

$$\varepsilon(\phi) = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots \quad (2.44)$$

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. (2.44) é denominada aqui de equação geral do erro de truncamento.

Por definição, as ordens verdadeiras (p_i) do erro de truncamento são os expoentes de h dos termos não-nulos da Eq. (2.44), ou seja, p_L , p_2 e p_3 . 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 subsequentes é constante.

Por definição, o menor expoente de h na Eq. (2.44) 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 temos

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

$c_1, c_2, c_3, \dots =$ 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 até aqui.

2.7 ERRO DE POLUIÇÃO

Todas as aproximações numéricas apresentadas anteriormente foram obtidas com a solução analítica exata Λ_P , definida pela série de Taylor para cada nó da malha. Mas no caso prático, as equações são discretizadas para todos os pontos da malha ocorrendo uma propagação do erro de truncamento no ponto P para todos os pontos a jusante e a montante, como por exemplo, nas equações discretizadas dos pontos P+1 e P-1. Então temos

$$\Lambda_P = \lambda_P + E(\lambda_P) \quad (2.45)$$

onde

$\Lambda_P =$ solução analítica exata

$\lambda_P =$ solução numérica

$E(\lambda_P) =$ erro numérico de λ_P

Substituindo a Eq. (2.45) na Eq. (2.17), por exemplo, temos

$$\Lambda_P^i = (\lambda_{DDS}^i)_P + e(\lambda_{DDS}^i)_P + \varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_P \quad (2.46)$$

onde

$$(\lambda_{DDS}^i)_P = \frac{(\lambda_E - \lambda_P)}{h} \quad \text{(aproximação numérica)} \quad (2.47)$$

$$e(\lambda_{DDS}^i)_P = \frac{[E(\lambda_E) - E(\lambda_P)]}{h} \quad \text{(erro de poluição)} \quad (2.48)$$

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_P = \text{Eq. (2.20)} \quad \text{(erro de truncamento)}$$

Para as aproximações numéricas apresentadas até aqui, $e(\phi)$ tem a mesma forma funcional de ϕ .

Tabela 2.1 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de truncamento.

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