Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 5, N. 1, 2017.

Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Geração de aproximações de diferenças finitas em malhas não-uniformes para as EDPs de Laplace e Helmholtz

Juliano D. B. Santos[1]
Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, Petrópolis, RJ
Abimael F. D. Loula[2]
Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, Petrópolis, RJ
Geraldo J. B. dos Santos[3]
Departamento de Tecnologia, UEFS, Feira de Santana, BA
Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC, Petrópolis, RJ

Resumo. Um método de diferenças finitas é aplicado aos problemas de Laplace e Helmholtz em malhas uniforme e não uniforme. Neste trabalho propomos para os problemas de Laplace e Helmholtz aproximações por diferenças finitas via bases polinomiais harmônicas e de Bessel, respectivamente, as quais são comparadas com as aproximações clássicas via polinômios canônicos. Os resultados são ilustrados pelas taxas de convergência obtidas.

Palavras-chave. Diferenças Finitas, Malhas não-estruturadas, Laplace, Helmholtz.

1 Geração de stencil de diferenças finitas para malhas não uniformes

Seja Ω um domínio aberto limitado em $\mathbb{R}^{n_{sd}}$, $n_{sd} = 1, 2$ ou 3, com um contorno Lipschitz-contínuo $\Gamma = \partial\Omega$. Um problema de valor de contorno qualquer, na sua forma forte, pode ser modelado de forma abstrata por:
Problema F: Encontrar as variável de campo $\mathbf{u}(\mathbf{x})$: $\Omega \longrightarrow \mathbb{R}^{n_{sd}}$, $\forall \mathbf{x} \in \Omega$, tal que

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}) \;=\; \mathbf{f} \qquad \text{em } \Omega, \tag{1}$$

com as condições de contorno dadas por:

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}) \;=\; \bar{\mathbf{g}} \qquad \text{sobre } \Gamma. \tag{2}$$

onde $\mathbf{f}$ é um termo fonte definido no domínio Ω e $\bar{\mathbf{g}}$ é a condição de contorno prescrita sobre todo o contorno Γ. Os operadores $\mathcal{L}$ e $\mathcal{B}$ representam um sistema de equações diferenciais parciais no domínio Ω e no contorno Γ, respectivamente.

[1]juliano@lncc.br
[2]aloc@lncc.br
[3]belmonte@uefs.br

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0339

A discretização das equações 1 e 2 em diferenças finitas pode ser descrita dentro de um *framework* de tal forma que seja independente do número de pontos usados no stencil e também independente da construção da malha, se uniforme ou não uniforme. A seguir iniciamos a construir tal estratégia.

Seja X um conjunto finito tal que $|X|$ denote seu número de elementos e $\mathcal{N} = \{\mathbf{x}_0, \ldots, \mathbf{x}_{|\mathcal{N}|-1}\} \subset \Omega \cup \Gamma$ um conjunto de pontos indexados, também chamados de nós, onde a solução possa ser avaliada e aproximada. Iremos denotar o conjunto de pontos de $\mathcal{N}$ no interior de Ω por $\mathcal{I}$, de modo que $\mathcal{I} := \mathcal{N} \cap \Omega$. O conjunto de pontos de $\mathcal{N}$ no contorno (ou fronteira) de Ω será denotado por $\mathcal{BP} := \mathcal{N} \cap \Gamma$. Além disso, para cada $i \in \{0, \ldots, |\mathcal{N}| - 1\}$, será associado o conjunto $\mathcal{A}_i \subset \{0, \ldots, |\mathcal{N}| - 1\}$, que contém os pontos adjacentes a x_i escolhidos segundo um determinado critério. Deste modo, se $j \in \mathcal{A}_i$, teremos que x_j será adjacente a x_i. Para as aplicaçações que serão feitas mais adiante será suficiente admitirmos que $i \in \mathcal{A}_i$, para todo $i \in \{0, \ldots, |\mathcal{N}| - 1\}$.

Sendo $\mathbf{x}$ um ponto dado em $\mathcal{N}$, associamos um índice $\mathrm{ind}(\mathbf{x})$, que, para qualquer $i \in \{0, \ldots, |\mathcal{N}| - 1\}$, é dado por $\mathrm{ind}(\mathbf{x}_i) := i$. Donde segue que $\mathrm{ind}(X)$ será o conjunto dos índices dos pontos de X em $\mathcal{N}$. Temos, em particular, que $\mathrm{ind}(\mathcal{N}) = \{0, \ldots, |\mathcal{N}| - 1\}$.

Considerando que a equação 1 é uma equação diferencial parcial de uma variável escalar $u(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$, sua aproximação clássica em diferenças finitas sobre um ponto $x_i \in \mathcal{I}$ deve atender à seguinte relação

$$\mathcal{L}u(\mathbf{x}_i) \cong \sum_{j \in \mathcal{A}_i} c_j u(\mathbf{x}_j), \tag{3}$$

com os coeficientes c_j, com $j \in \mathcal{A}_i$, calculados de forma que o valor do operador $\mathcal{L}$ sobre a variável u no ponto $\mathbf{x}_i$ seja dado como combinação linear dos valores da função u avaliados nos pontos $\mathbf{x}_j$ pertencentes a uma vizinhança $\mathcal{A}_i$ de $\mathbf{x}_i$. A aproximação do operador na sua forma forte pode ser substituída pela sua versão na forma fraca, versão assim chamada de diferenças finitas energéticas, tendo a vantagem de reduzir a ordem das derivadas aproximadas.

O cálculo de c_j, stencil de diferenças finitas em $\mathbf{x}_i$, pode ser realizado de diversas formas. Aqui utilizaremos a expressão direta, dada pela equação 3, substituindo a variável u por cada uma das m funções bases em $\mathbb{B}_i$ avaliadas no ponto $\mathbf{x}_i$. Usando uma base $\mathbb{B}_i$ com m funções φ_l,

$$\mathbb{B}_i := \{\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_m\}, \tag{4}$$

obtemos para cada φ_l, $l = 1, \ldots, m$, uma equação,

$$\sum_{j \in \mathcal{A}_i} c_j \varphi_l(\mathbf{x}_j) = \mathcal{L}\varphi_l(\mathbf{x}_i), \tag{5}$$

a qual é avaliada no ponto i, resultando em um sistema de m equações algébricas lineares

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0339

e $|\mathcal{A}_i|$ incógnitas c_j. Na forma matricial, sendo $m = |\mathcal{A}_i|$, tal sistema é dado por

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \kappa_{13} & \dots & \kappa_{1m} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & \kappa_{23} & \dots & \kappa_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{m1} & \kappa_{m2} & \kappa_{m3} & \dots & \kappa_{mm} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{K}} \underbrace{\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix}}_{C} = \underbrace{\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{bmatrix}}_{F} \tag{6}$$

sendo que $\boldsymbol{K}$ é a matriz de entradas $\kappa_{lj} = \varphi_l(\mathbf{x}_j)$, $j, l = 1...m$, C o vetor de incógnitas e F o vetor de termo fonte com componentes $f_l = \mathcal{L}\varphi_l(\mathbf{x}_i)$. Os $|\mathcal{A}_i|$ pontos $\mathbf{x}_j$ são escolhidos segundo algum critério de forma a garantir que a matriz $\boldsymbol{K}$ seja não singular e que se obtenha a melhor representação do operador pelo *stencil* de diferenças. Se $m > |\mathcal{A}_i|$ o sistema dado pela equação 6 ainda pode ser resolvido usando a técnica de mínimos quadrados, minimizando o erro ponderado $E = \sum_{l=1}^{m} \Big\{ W_l \Big\{ \sum_{j\in|\mathcal{A}_i|} c_j\varphi_l(\mathbf{x}_j) - \mathcal{L}\varphi_l(\mathbf{x}_i) \Big\} \Big\}^2$, sendo W_l uma função peso de suporte compacto associada ao ponto l (ver Liszka [1]).

2 Aplicação ao problema de Laplace

Seja um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ aberto e limitado de fronteira Γ suave por partes e Lipschitz contínuo, sendo $\Gamma = \partial\Omega$. Seja $u : \Omega \to \mathbb{R}$ uma função suficientemente regular. Nessas condições, o problema de Laplace com condições de contorno de Dirichlet é dada por

$$\begin{aligned} -\Delta u(\mathbf{x}) = 0,\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \quad &\text{em } \Omega \\ u = g \quad &\text{ao longo de } \partial\Omega \end{aligned} \tag{7}$$

onde Δ representa o operador laplaciano em coordenadas cartesianas,

$$\Delta u := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \tag{8}$$

e $g : \partial\Omega \to \mathbb{R}$ é uma função definida no contorno $\partial\Omega$.

Para o cálculo do stencil de diferenças finitas aplicado ao problema de Laplace, usando como conjunto de funções base os primeiros 9 polinômios canônicos,

$$\mathbb{B} := \{1, x, y, xy, x^2, y^2, x^2y, xy^2, x^2y^2\}, \tag{9}$$

obtemos um resultado idêntico ao esquema de diferenças finitas de 2^a ordem via série de Taylor. Caso a malha seja uniforme, o stencil associado terá cinco pontos, conforme LeVeque [2]. Como nem todos os polinômios presentes na base da expressão (9) satisfazem a equação de Laplace, segue que o termo de fonte para este caso não será nulo e o sistema (6) é resolvido invertendo-se a matriz $\boldsymbol{K}$.

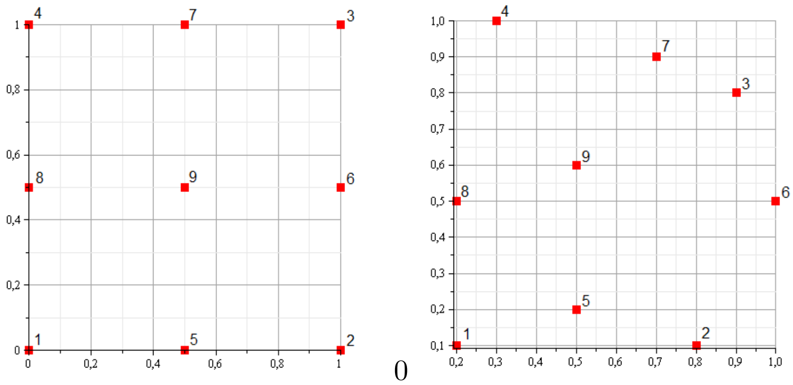
Propomos o emprego da base polinomial harmônica como alternativa na obtenção de aproximações para este problema de Laplace (7). Para este caso a base polinomial será

$$\mathbb{B} := \{1, x, y, xy, x^2 - y^2, x^3 - 3xy^2, 3x^2y - y^3, x^4 - 6x^2y^2 + y^4, 4x^3y - 4xy^3\} \tag{10}$$

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0339

formada por 9 polinômios que satisfazem a equação de Laplace identicamente.

Para esta base de funções, ter-se-á que o termo de fonte será identicamente nulo. Para que o sistema seja resolvível geramos uma equação identidade fixando o valor do coeficiente $c_9 = 4$ relacionado com o ponto central do stencil $\mathbf{x}_9$, gerando uma equação identidade e um termo de fonte. Donde segue que os demais oito coeficientes são calculados.



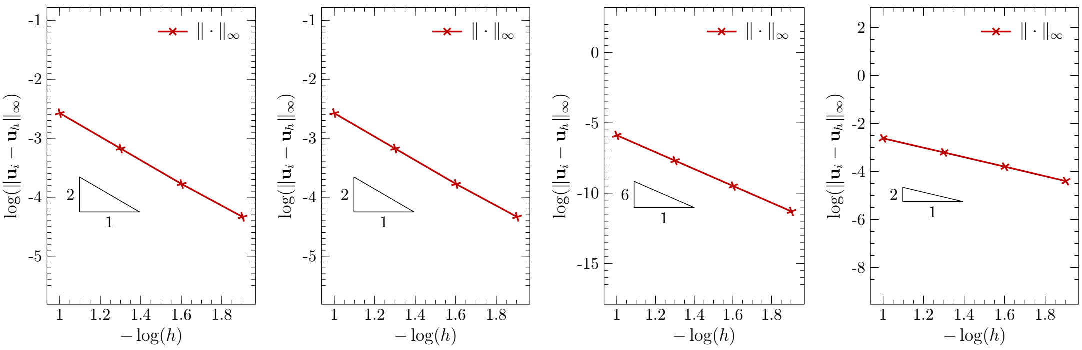
(a) retangular uniforme (b) não uniforme

Figura 1: Exemplos de pontos de stencil de nove nós em malhas do tipo retangular uniforme e não uniforme, respectivamente.

A Figura 1 contém exemplos de *stencil* sobre malhas uniforme e não uniformes.

Visando o caso mais geral, simulações foram feitas sobre malhas não uniformes, ou seja, quando os parâmetros de malha Δx e Δy são em geral distintos para cada ponto do stencil. Para a geração deste tipo de malha adotamos o expediente de se gerar uma malha estruturada de coordenadas $(a_i, b_i) \in \mathcal{I}$ de nós interiores i e, em seguida, através de uma função randômica, perturbar de forma independente as coordenadas $a_i' := a_i + 0.3 \cdot r_i \Delta x$, $b_i' := b_i + 0.3 \cdot s_i \Delta y$, onde r_i e s_i são números randômicos distribuídos uniformemente no intervalo $[-0.5, 0.5]$. A perturbação foi definida de modo a possuir um valor máximo percentual dos parâmetros de malha Δx e Δy. Em experimentos adotamos perturbações com valor percentual máximo de 30%.

A metodologia descrita nos parágrafos anteriores foi implementada para a geração da aproximação por diferenças finitas da equação de Laplace e, mais adiante, para o problema de Helmholtz. Em ambos os casos foram utilizadas as malhas $10 \times 10, 20 \times 20, 40 \times 40$ e 80×80 para o estudo da taxa de convergência. Para o caso em que foi utilizada a base canônica um método de segunda ordem é obtido para malhas uniforme e não uniforme de acordo com as taxas nos gráficos das Figuras (2a) e (2b), nessa ordem. Uma abordagem análoga foi feita via polinômios harmônicos. Ao invés de aproximarmos os operadores de derivada, como feito anteriormente, iremos aproximar a própria equação de Laplace, por meio de uma base de funções que a satisfazem identicamente, usando as funções harmônicas. Neste caso, um *stencil* de sexta ordem para malha ortogonal uniforme e de segunda ordem para malha não uniforme foram obtidos, conforme apresentado no estudo de convergência das Figuras (2c) e (2d), respectivamente.



(a) (b) (c) (d)

Figura 2: Estudo de convergência do problema de Laplace para as bases canônica e harmônica em malhas uniformes e irregulares. (a) Base canônica e malha uniforme; (b) Base canônica e malha não uniforme; (c) Base harmônica e malha uniforme; (d) Base harmônica e malha não uniforme

3 Aplicação ao problema de Helmholtz: Ondas não direcionais

A investigação analítica de ondas em meios não dispersivos é baseada na Equação de Helmholtz reduzida (ver Babuska e Ihlenburg [3]). Propomos uma abordagem para este problema em coordenadas polares com dependência apenas radial

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + k^2 u = 0, \text{ em } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \tag{11}$$

sendo o número de ondas k uma constante. Neste caso será adotada uma metodologia de resolução por diferenças finitas de modo que o conjunto de funções base adotado será formado pelas funções de Bessel de primeiro tipo e ordem zero. Seja $\mathbf{x}_j = (a_j, b_j)$ um ponto do stencil centrado em $\mathbf{x}_i = (a, b)$. Para cada nó $j \in \mathcal{A}_i$ deste, definimos

$$r_j = \sqrt{(a - a_j)^2 + (b - b_j)^2} \tag{12}$$

de modo que as funções de Bessel associadas serão

$$J_0(kr_j) = 1 - \frac{(kr_j)^2}{4} + \frac{(kr_j)^4}{64} - \frac{(kr_j)^6}{2304} + \dots \tag{13}$$

que são funções que satisfazem a equação de Helmholtz, cada uma centrada em um dos nove nós do stencil, com dependência apenas radial. Como todas as funções da base de Bessel satisfazem o problema identicamente precisamos, assim como feito no problema de Laplace, fixar um parâmetro de alguma maneira conveniente levando-se em conta a numeração dos nós do stencil conforme a Figura (1). Isto será feito impondo-se a restrição $\varphi_{|\mathcal{A}_i|} = \varphi_9 = 1$, que não satisfaz a EDP de Helmholtz. Com isso, o sistema 9×9 terá termo de fonte não nulo, donde a solução não trivial é factível.

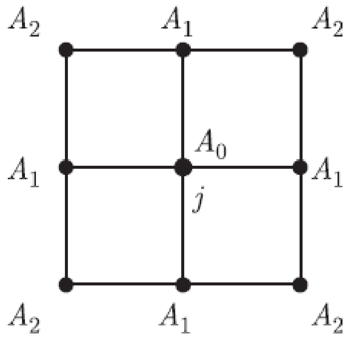


Figura 3: Stencil uniforme de nove nós.

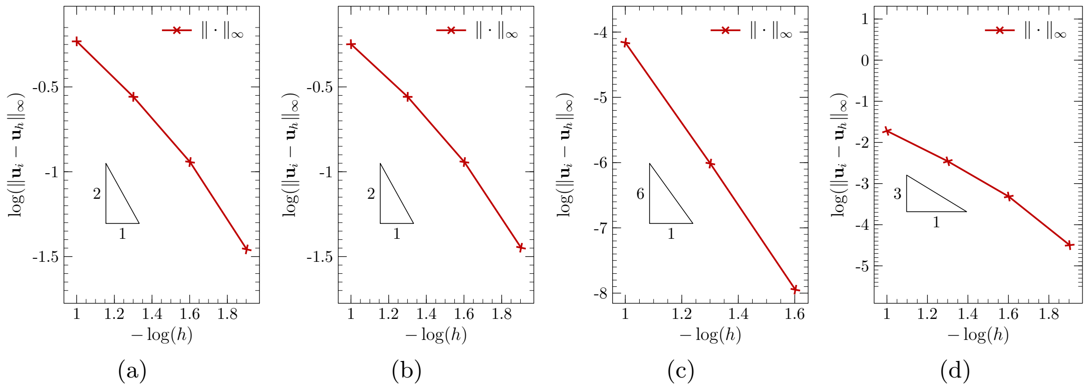


Figura 4: Estudo de convergência do problema de Helmholtz para as bases canônica e de Bessel em malhas uniformes e irregulares. (a) Base canônica e malha uniforme; (b) Base canônica e malha não uniforme; (c) Base de Bessel e malha uniforme; (d) Base Bessel e malha não uniforme

Este procedimento, empregado em malhas uniformes e fixando o coeficiente $c_m := c_9 = 4$, resulta no stencil da Figura (3) cuja simetria implica em

$$\begin{aligned} c_1 = c_2 = c_4 = c_3 = A_1 \\ c_5 = c_6 = c_7 = c_8 = A_2 \end{aligned} \tag{14}$$

sendo que

$$\begin{aligned} A_1 &= -\frac{4}{5} - \frac{29}{125}(kh)^2 - \frac{2549}{50000}(kh)^4 - \frac{473849}{45000000}(kh)^6 - \frac{10086892607}{4704000000000}(kh)^8 \ldots \\ A_2 &= -\frac{1}{5} - \frac{17}{250}(kh)^2 - \frac{801}{50000}(kh)^4 - \frac{76313}{22500000}(kh)^6 - \frac{1091144231}{1568000000000}(kh)^8 \ldots \end{aligned} \tag{15}$$

são os mesmos coeficientes do método Quasi Optimal Finite Difference method(QOFD) apresentado em [4]. Ou seja, nossa proposta é equivalente ao stencil de poluição mínima do método QOFD, um método superior à aproximações feitas com base canônica. De fato, os estudos de convergência apontam que um método de segunda ordem é obtido para aproximação usual seja a malha uniforme ou não, conforme os gráficos (4a) e (4b), por essa ordem. Já as aproximações via base de Bessel resultam em sexta ordem para malha uniforme e pelo menos terceira ordem para malha não uniforme conforme consta nos gráficos (4c) e (4d) de modo respectivo.

4 Conclusões

Apresentamos estratégias de aproximação por diferenças finitas para os problemas de Laplace e Helmholtz. Para o problema de Laplace foram empregadas uma base de funções harmônicas que se mostrou de sexta ordem em malhas cartesianas uniformes. Para malhas irregulares mostrou-se com desempenho análogo ao esquema clássico de diferenças de segunda ordem. O problema de Helmholtz foi aproximado tendo como base polinomial as funções de Bessel de primeiro tipo e ordem zero. Esta abordagem apresentou ganhos significativos relativos à taxas de convergência em malhas uniformes e irregulares. De fato, enquanto que o esquema clássico apresentou segunda ordem em ambas as malhas, como esperado, nossa abordagem apresentou sexta ordem e terceira ordem em malhas regulares e irregulares, de modo respectivo.

Agradecimentos

O primeiro autor agradece os demais autores pelos ensinamentos e, também, ao programa de recursos humanos PRH da ANP pelo financiamento do mestrado.

Referências

[1] T. Liszka and J. Orkisz. The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics. *Computers & Structures*, 11:83–95, 1980.

[2] R. J. LeVeque. *Finite Difference Methods for Differential Equations*. University of Washington, 2005.

[3] I. M. Babuska and F. Ihlenburg. Finite element solution of the helmholtz equation with high wave number part i: The h-version of the fem,. *Computers. & Mathematics with Aplications*, 30:9–37, 1995.

[4] D. T. Fernandes. Métodos de elementos finitos e diferenças finitas estabilizados para o problema de helmholtz. Tese de Doutorado, LNCC - Laboratório Nacional de Computção Científica, 2009.

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0339