

Método Completo de Diferenças Finitas Centradas para a Equação de Helmholtz

Gustavo B. Alvarez¹, Helder da F. Nunes²

PPG-MCCT/UFF, Volta Redonda, RJ

Welton A. de Menezes³

UFF, Volta Redonda, RJ

Resumo. Uma nova abordagem em diferenças finitas (MCDFC) é desenvolvida, a qual é formada por três passos. O primeiro passo consiste em fixar a dimensão do subespaço local de aproximação com a escolha do estêncil. No segundo passo é necessário construir uma base de vetores geradores para este subespaço. O terceiro passo consiste em determinar os coeficientes da combinação linear. Assim, o MCDFC é capaz de gerar qualquer esquema de diferenças finitas que pertence a esse subespaço. A base de vetores geradores é formada pelo esquema centrado clássico e novos esquemas centrados. Os coeficientes da combinação linear são escolhidos de forma a minimizar a relação de dispersão em qualquer dimensão. No caso 1D consegue-se eliminar totalmente a dispersão de onda, ou seja, o efeito de poluição do erro é eliminado. No caso 2D com estêncis de 5 e 9 pontos são obtidas relações de dispersão equivalentes às relações dos métodos GLS e QSFEM, respectivamente. O MCDFC é consistente e apresenta a maior estabilidade possível. Resultados numéricos confirmam o bom desempenho do método.

Palavras-chave. Equação de Helmholtz, Diferenças Finitas, Poluição do erro, Dispersão, Estabilização.

1 Introdução

A Equação de Helmholtz possui grande quantidade de aplicações nos ramos da física e engenharias. Ela descreve os harmônicos temporais de ondas acústicas, elásticas e eletromagnéticas. Em sua forma escalar bidimensional e com condições de contorno de Dirichlet é escrita como

$$\Delta u + k^2 u = f \text{ em } \Omega, \quad (1)$$

$$u = g \text{ em } \partial\Omega, \quad (2)$$

onde k é o número de onda, Ω é o interior do domínio limitado com contorno Lipschitz $\partial\Omega$, f é um termo fonte e u é o campo escalar que descreve os harmônicos temporais das ondas.

Sua resolução numérica tem sido um desafio, tanto para os Métodos de Diferenças Finitas (MDF), quanto para os Métodos de Elementos Finitos (MEF), devido a natureza oscilatória da solução. Sabe-se que, à medida que o número de onda k aumenta, a solução numérica perde precisão e estabilidade mesmo quando é obedecida a regra heurística do dedão (*rule of thumb*). Essa regra $kh = \frac{2\pi}{n}$, relaciona k e o espaçamento entre nós da malha h necessário para aproximar o comprimento de onda, onde uma escolha intuitiva para a quantidade de nós por comprimento de

¹benitez.gustavo@gmail.com

²helderfn@id.uff.br

³wamenezes@id.uff.br

onda seria $7 \leq n \leq 10$ [1, 10, 11, 14, 16]. Contudo, mesmo que a regra seja obedecida, para médios e altos valores de k , os quais configuram grande parte das aplicações práticas, não há garantia que se obtenha estabilidade e precisão da solução numérica. Esse comportamento é conhecido como poluição do erro [4, 5, 12] e está relacionado com a diferença do número de onda exato k e o número de onda numérico k^h [7].

Em uma dimensão (1D), já existem MEF que eliminam totalmente este problema, tal como o método GLS (*Galerkin Least-Squares*) [9]. Porém, é de conhecimento que em duas dimensões (2D) não é possível eliminar totalmente a poluição do erro, apenas minimizá-la [5]. O primeiro MEF que minimizou a poluição foi o QSFEM (*Quasi Stabilized Finite Element Method*) [4]. Posteriormente outros MEF foram desenvolvidos com o mesmo intuito [1, 6, 13, 15].

No âmbito dos MDF alguns avanços no sentido de minimizar a poluição do erro têm sido feitos. Pode-se mencionar um esquema de sexta ordem desenvolvido em [17]. Outro esquema de quarta ordem que minimiza o erro de dispersão foi desenvolvido em [18]. Em [16] esquemas de quarta ordem baseados nas generalizações de Padé foram apresentados. Em [8] foi desenvolvido o QOFD (*Quasi Optimal Finite Difference Method*) para malhas não-estruturadas e não-uniformes. Recentemente, em [2, 3, 14] foram desenvolvidos os fundamentos de uma nova abordagem no *framework* do MDF.

Aqui é apresentada sucintamente esta nova abordagem do MDF, a qual sempre gera soluções numéricas com a menor relação de dispersão $k - k^h$ possível. A nova abordagem, chamada de Método Completo de Diferenças Finitas Centradas (MCDFC), é consistente e apresenta a maior estabilidade e o menor efeito de poluição possíveis. O trabalho continua com a Seção 2 apresentando o MCDFC em 1D e 2D para diferentes estêncis uniformes. Na Seção 3 são apresentados os resultados numéricos para o caso homogêneo e não-homogêneo. Considerações finais são relatadas na Seção 4.

2 Método Completo de Diferenças Finitas Centradas

Seja uma malha com N^h graus de liberdade. Assim, o espaço de aproximação global S^G possui dimensão $\dim(S^G) = N^h$ [14]. Este espaço contém todos os vetores de dimensão N^h , inclusive o interpolante u^h definido como a solução exata da equação de Helmholtz nos nós da malha. Seja $\mathbf{T}U^h = F$ o sistema linear de equações algébricas de um esquema de diferenças finitas qualquer. Considere a equação correspondente a um nó interior arbitrário I (numeração global) deste sistema. O tipo de estêncil escolhido e as aproximações de diferenças finitas utilizadas determinam esta equação. A nível de estêncil, as incógnitas U^h dessa equação pertencem ao subespaço $S^L \subseteq S^G$ com dimensão $\dim(S^L) = L$, e a equação do nó I pode ser escrita como o produto interno $\langle G, U^h \rangle = f_I$, onde G denota o vetor gerador da equação do estêncil. Este subespaço contém todos os vetores com dimensão L , e sua representação completa é o foco da nova abordagem. Um conjunto de L vetores linearmente independentes forma uma base para S^L , e qualquer vetor desse subespaço pode ser representado como uma combinação linear dos vetores dessa base.

Em termos de diferenças finitas, se os vetores da base do subespaço S^L forem escolhidos como sendo os vetores geradores G_l da equação do estêncil de diferentes esquemas, então o MCDFC permite representar a equação de qualquer esquema no nó I como uma combinação linear dos vetores geradores G_l linearmente independentes.

$$E_{MCDFC} := \left\langle \sum_{l=1}^L \alpha_l G_l, U^h \right\rangle = \left(\sum_{l=1}^L \alpha_l \right) f_I, \tag{3}$$

onde α_l são os coeficientes da combinação linear que podem ser vistos como parâmetros livres a

serem determinados considerando-se algum critério. No caso da equação de Helmholtz, o critério utilizado será a minimização da dispersão [4, 9, 12].

2.1 MCDFC 1D e estêncil com 3 pontos

Nesse caso, $\dim(S^L) = 3$. A equação do MCDFC para o nó central i (numeração local) pode ser escrita como

$$\left\langle \sum_{l=1}^3 \alpha_l G_l, U^h \right\rangle := AU_{i-1} + BU_i + CU_{i+1} = \left(\sum_{l=1}^3 \alpha_l \right) f_i, \quad (4)$$

onde $A = \sum_{l=1}^3 \alpha_l g_{l,1}$, $B = \sum_{l=1}^3 \alpha_l g_{l,2}$ e $C = \sum_{l=1}^3 \alpha_l g_{l,3}$. Os vetores geradores $G_l = [g_{l,1}, g_{l,2}, g_{l,3}]$ correspondem aos esquemas CC-1D, NE-1-1D e NE-6-1D desenvolvidos em [14]. O esquema CC-1D é o bem conhecido Centrado Clássico de segunda ordem de precisão. Os novos esquemas NE-1-1D e NE-6-1D foram obtidos realizando apenas novas aproximações do termo $k^2 u$ da equação (1), já que a derivada segunda foi aproximada igual que no esquema CC-1D. Os α_l são determinados tomando-se $k = k^h$ na relação de dispersão [14], onde $\alpha_1 = 1$ e $\alpha_3 = 0$, pois o vetor G_3 não é necessário para malhas uniformes. Mais detalhes podem ser vistos em [14, p. 49]. Assim,

$$\alpha_2 = \frac{2 - 2 \cos(kh) - k^2 h^2}{\cos(kh)[2 + k^2 h^2] - 2}, \quad (5)$$

e o MCDFC é determinado com $A = C = -\frac{h^2 k^4}{-4 + 2[2 + (kh)^2] \cos(kh)}$ e $B = \frac{h^2 k^4 \cos(kh)}{-2 + [2 + (kh)^2] \cos(kh)} = -\frac{1}{2} \cos(kh) A$, eliminando o efeito de poluição $k^h - k = 0$, como pode ser visto na Figura 1a.

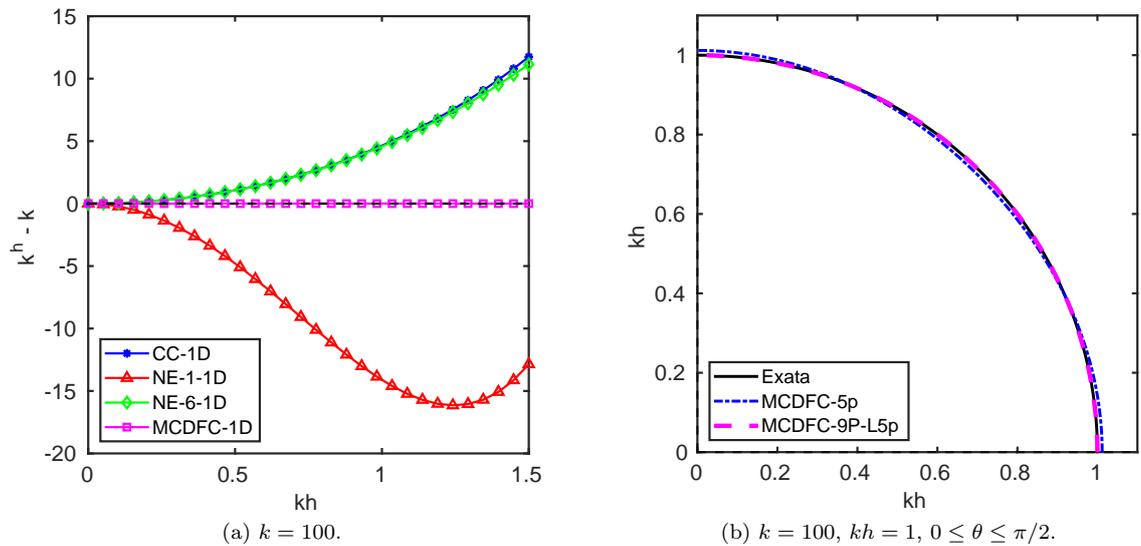


Figura 1: Dispersão de onda para os casos 1D (a) e 2D (b). Fonte: Elaborada pelos autores.

2.2 MCDFC 2D e estêncil com 5 pontos

Nesse caso, $\dim(S^L) = 5$. A equação do MCDFC-5p para o nó central i, j é

$$\left\langle \sum_{l=1}^5 \alpha_l G_l, U^h \right\rangle := A_1 U_{i-1,j} + A_2 U_{i,j-1} + BU_{i,j} + C_1 U_{i+1,j} + C_2 U_{i,j+1} = \left(\sum_{l=1}^5 \alpha_l \right) f_{i,j}, \quad (6)$$

onde os coeficientes A_1, A_2, B, C_1 e C_2 são definidos de forma análoga ao caso 1D. Os vetores geradores G_1, \dots, G_5 correspondem aos esquemas CC-2D, NE-1-2D, NE-6-2D, NE-7-2D e NE-1-2D em [14]. Os parâmetros α_l podem ser determinados de acordo com a minimização da dispersão. Considerando malhas uniformes e apenas o caso mais simétrico [14], $\alpha_1 = 1$ e $\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = 0$. Assim, o α_2 que minimiza a dispersão na direção de onda $\theta_1 = \pi/8$ é

$$\alpha_2 = -\frac{2(-4 + k^2h^2 + 2c_1 + 2s_1)}{-8 + 4c_1 + k^2h^2c_1 + 4s_1 + k^2h^2s_1}, \quad (7)$$

onde $c_1 = \cos(kh \cos \theta_1)$ e $s_1 = \cos(kh \sin \theta_1)$. Substituindo-se a equação (7) nos coeficientes da equação (6) do estêncil, o MCDFC-5p apresenta dispersão mínima, equivalente ao GLS [9], como pode ser visto na Figura 1b. Porém, deve ser destacado que o estêncil do método GLS possui 9 pontos e o estêncil do MCDFC-5p apenas 5 pontos.

2.3 MCDFC 2D e estêncil com 9 pontos

Nesse caso, $\dim(S^L) = 9$. A equação do MCDFC para o nó central i, j é

$$\left\langle \sum_{l=1}^9 \alpha_l G_l, U^h \right\rangle := A_1 U_{i-1,j} + A_2 U_{i,j-1} + A_3 U_{i-1,j-1} + A_4 U_{i+1,j-1} + B U_{i,j} \\ + C_1 U_{i+1,j} + C_2 U_{i,j+1} + C_3 U_{i-1,j+1} + C_4 U_{i+1,j+1} = \left(\sum_{l=1}^9 \alpha_l \right) f_{i,j}. \quad (8)$$

Com os coeficientes do estêncil sendo definidos de forma análoga aos casos 1D e 2D anteriores. Os vetores geradores utilizados podem ser vistos com detalhes em [14, p. 46–47], bem como as expressões para os coeficientes do estêncil [14, p. 58]. Neste estêncil o operador Laplaciano pode ser aproximado de duas formas diferentes utilizando: fórmulas centradas de segunda ordem (MCDFC-9p-L5p) e fórmulas centradas de quarta ordem (MCDFC-9p-L9p) [14]. Assim, duas bases diferentes para o subespaço local de aproximação S^L podem ser construídas, gerando duas versões diferentes do MCDFC. Porém, estas duas versões são equivalentes, apresentando a mesma relação de dispersão mínima equivalente ao QSFEM [4].

Considerando malhas uniformes e apenas o caso mais simétrico da versão MCDFC-9p-L5p [14], $\alpha_1 = 1$ e $\alpha_3 = \alpha_5 = \alpha_6 = \alpha_7 = \alpha_8 = \alpha_9 = 0$. Assim, os α_2 e α_4 que minimizam a dispersão nas direções de onda $\theta_1 = \pi/16$ e $\theta_2 = 3\pi/16$ são

$$\alpha_2 = \frac{8(-c_1 + c_2 - s_1 + s_2 + 2c_1s_1 - 2c_2s_2 - c_1c_2s_1 + c_1c_2s_2 - c_1s_1s_2 + c_2s_1s_2)}{\chi_1 + \chi_2 + \chi_3} \\ + \frac{4k^2h^2(c_1s_1 - c_2s_2 - c_1c_2s_1 + c_1c_2s_2 - c_1s_1s_2 + c_2s_1s_2) + 2k^4h^4(-c_1s_1 + c_2s_2)}{\chi_1 + \chi_2 + \chi_3}, \quad (9)$$

$$\alpha_4 = \frac{k^4h^4(c_1 - c_2 + s_1 - s_2)}{\chi_1 + \chi_2 + \chi_3}, \quad (10)$$

$$\chi_1 = 8(c_1 - c_2 + s_1 - s_2 - 2c_1s_1 + 2c_2s_2 + c_1c_2s_1 - c_1c_2s_2 + c_1s_1s_2 - c_2s_1s_2), \quad (11)$$

$$\chi_2 = 2k^2h^2(c_1 - c_2 + s_1 - s_2 - 4c_1s_1 + 4c_2s_2 + 3c_1c_2s_1 - 3c_1c_2s_2 + 3c_1s_1s_2 - 3c_2s_1s_2), \quad (12)$$

$$\chi_3 = k^4h^4(c_1c_2s_1 - c_1c_2s_2 + c_1s_1s_2c_2s_1s_2), \quad (13)$$

onde $c_m = \cos(kh \cos \theta_m)$ e $s_m = \cos(kh \sin \theta_m)$. Com esses parâmetros é obtido o MCDFC-9p-L5p com dispersão mínima, equivalente ao QSFEM [4], como pode ser visto na Figura 1b. É importante mencionar que todos os MCDFC em 1D e 2D são consistentes, já que o Erro de Truncamento Local (ETL) calculado em função dos parâmetros α_l é de ordem de aproximação h^2 [14, p. 65–69].

3 Resultados Numéricos

Foi visto que para o caso 1D, o MCDFC elimina por completo o efeito da poluição, porém seus resultados numéricos não são mostrados por falta de espaço. Analogamente, no caso 2D, os resultados numéricos do MCDFC-5p também não são apresentados visto que são equivalentes aos do método GLS. Assim, são apresentados apenas os resultados numéricos das duas versões do MCDFC para o caso 2D e estêncil com 9 pontos. Dois problemas com condições de contorno de Dirichlet são resolvidos: caso homogêneo e com termo fonte.

Para o problema homogêneo, a solução exata é a superposição de cinco ondas planas $u(x, y) = \sum_{i=1}^5 \cos[k(x \cos \theta_i + y \sin \theta_i)]$ nas direções $\theta_1 = 0, \theta_2 = \pi/8, \theta_3 = \pi/4, \theta_4 = 3\pi/8$ e $\theta_5 = \pi/2$. Estas direções não coincidem com os ângulos para os quais o MCDFC-9p-L5p minimiza a relação de dispersão. A Figura 2a apresenta as soluções numéricas das versões MCDFC-9p-L5p e MCDFC-9p-L9p juntamente com o interpolante na seção $y = 0.5$. Para facilitar a comparação entre as soluções, na Figura 2b é mostrado um *zoom* no intervalo $0.4 \leq x \leq 0.5$. Pode ser observado a boa estabilidade e precisão de ambas versões do MCDFC-9p. Também é possível notar que as soluções de ambas versões são semelhantes, as quais se diferenciam apenas no erro de *round-off*.

Para o problema não-homogêneo, utilizou-se o termo fonte $f(x, y) = 4 + k^2[(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2]$. A solução exata é $u(x, y) = u_H(x, y) + u_P(x, y) = (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2 + \sin[k(x \cos \theta + y \sin \theta)]$, a qual é o resultado da soma da solução da equação homogênea $u_H(x, y) = \sin[k(x \cos \theta + y \sin \theta)]$ correspondente a uma onda plana na direção $\theta = \pi/4$ e uma solução particular $u_P(x, y) = (x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2$ consequência do termo fonte. A Figura 3a apresenta as soluções numéricas das versões MCDFC-9p-L5p e MCDFC-9p-L9p juntamente com o interpolante na seção $y = 0.5$. Novamente, na Figura 3b é mostrado um *zoom* no intervalo $0.4 \leq x \leq 0.5$. Ambas versões do MCDFC-9p se mostram estáveis e precisas com soluções que se diferenciam apenas no erro de *round-off*.

O bom desempenho das duas versões do MCDFC-9p para ambos problemas mostram que, independentemente da base escolhida para representar o subespaço local de aproximação S^L , a nova abordagem é capaz de gerar qualquer esquema de diferenças finitas pertencente a este subespaço. Este foi o motivo que levou a inserir a palavra Completo no nome da nova abordagem.

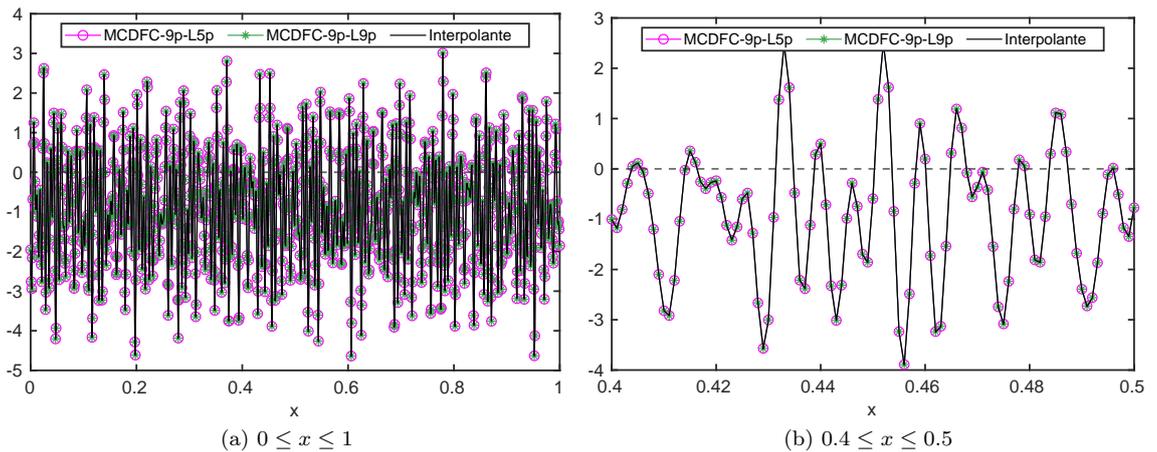


Figura 2: Soluções numéricas das versões MCDFC-9p-L5p e MCDFC-9p-L9p para o problema homogêneo com $k = 1000, kh = 1$ e sobreposição de 5 ondas planas nas direções $\theta_i = 0, \pi/8, \pi/4, 3\pi/8$ e $\pi/2$. Fonte: Elaborada pelos autores.

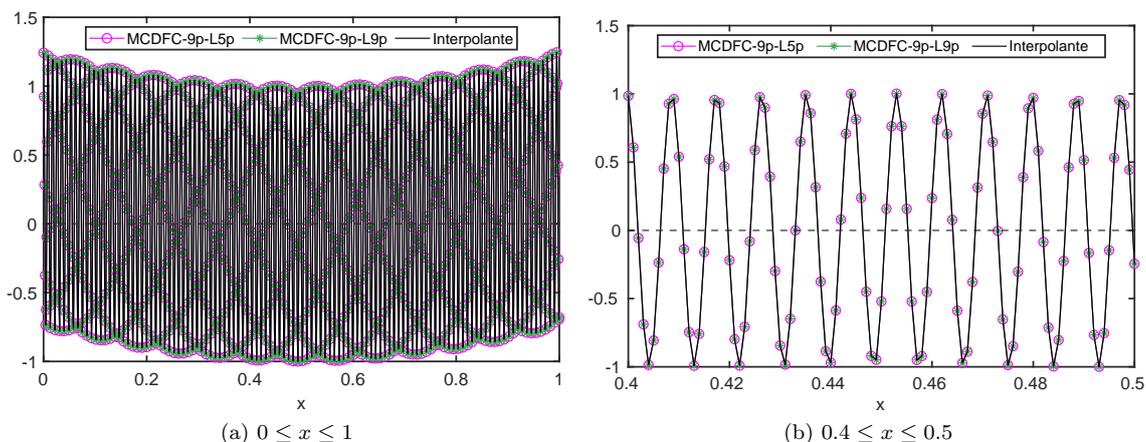


Figura 3: Soluções numéricas das versões MCDFC-9p-L5p e MCDFC-9p-L9p para o problema não-homogêneo com $k = 1000$, $kh = 1$ e $\theta = \pi/4$. Fonte: Elaborada pelos autores.

4 Considerações Finais

Uma nova abordagem para o MDF foi desenvolvida, a qual é capaz de gerar qualquer esquema de diferenças finitas pertencente ao subespaço local de aproximação S^L . Como caso particular, esta abordagem sempre é capaz de gerar o esquema de diferenças finitas que minimiza a relação de dispersão em qualquer dimensão. No caso 1D e estêncil com 3 pontos, o MCDFC elimina totalmente a poluição do erro, anulando a dispersão de onda. No caso 2D e estêncil com 5 pontos, o MCDFC-5p é capaz de obter dispersão equivalente à do método GLS, porém com o estêncil de dimensão menor. Neste caso, a matriz do sistema linear é penta-diagonal enquanto que a do método GLS possui nove diagonais diferentes de zero. No caso 2D e estêncil com 9 pontos, as duas versões do MCDFC-9p produzem a mesma relação de dispersão equivalente à do método QSFEM. Os resultados numéricos apresentados neste caso mostraram o excelente desempenho do método, o qual obteve soluções numéricas próximas do interpolante.

Referências

- [1] G. B. Alvarez, A. F. D. Loula, E. G. D. Do Carmo e F. A. Rochinha. “A discontinuous finite element formulation for Helmholtz equation”. Em: **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.** 195.33-36 (2006), pp. 4018–4035. DOI: 10.1016/j.cma.2005.07.013.
- [2] G. B. Alvarez e H. F. Nunes. “Novos esquemas de diferenças finitas para a equação de Helmholtz”. Em: **Anais do Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional (ERMAT-RJ)**. 2023, pp. 1–7. DOI: 10.29327/1343139.
- [3] G. B. Alvarez e H. F. Nunes. “Novos esquemas de diferenças finitas para a equação de Helmholtz”. Em: **REMAT: Revista Eletrônica da Matemática** (2024). Aceito.
- [4] I. Babuška, F. Ihlenburg, E. T. Paik e S. A. Sauter. “A Generalized Finite Element Method for solving the Helmholtz equation in two dimensions with minimal pollution”. Em: **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.** 128 (1995), pp. 325–359. DOI: 10.1016/0045-7825(95)00890-X.

- [5] I. M. Babuška e S. A. Sauter. “Is the Pollution Effect of the FEM Avoidable for the Helmholtz Equation Considering High Wave Numbers?” Em: **SIAM Journal on Numerical Analysis** 34.6 (1997), pp. 2392–2423. DOI: 10.1137/S0036142994269186.
- [6] E. G. D. Do Carmo, G. B. Alvarez, A. F. D. Loula e F. A. Rochinha. “A nearly optimal Galerkin projected residual finite element method for Helmholtz problem”. Em: **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.** 197.13-16 (2008), pp. 1362–1375. DOI: 10.1016/j.cma.2007.11.001.
- [7] D. T. Fernandes. “Métodos de Diferenças Finitas e Elementos Finitos para o Problema de Helmholtz”. Tese de doutorado. Laboratório Nacional de Computação Científica, 2009. URL: https://bdtd.ibict.br/vufind/Record/LNCC_7dfbadd75e60f72c58f1d5bdba866f9b.
- [8] D. T. Fernandes e A. F. D. Loula. “Quasi Optimal Finite Difference Method for Helmholtz Problem on Unstructured Grids”. Em: **International Journal for Numerical Methods in Engineering** 82.10 (2010), pp. 1244–1281. DOI: 10.1002/nme.2795.
- [9] I. Harari e T. J. R. Hughes. “Galerkin/least-squares finite element methods for the reduced wave equation with non-reflecting boundary conditions in unbounded domains”. Em: **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.** 98.3 (1992), pp. 411–454. DOI: 10.1016/0045-7825(92)90006-6.
- [10] F. Ihlenburg. **Finite element analysis of acoustic scattering**. Applied mathematical sciences. New York: Springer, 1998. ISBN: 0387983198.
- [11] F. Ihlenburg e I. Babuška. “Dispersion analysis and error estimation of Galerkin finite element methods for the Helmholtz equation”. en. Em: **International Journal for Numerical Methods in Engineering** 38.22 (1995), pp. 3745–3774. DOI: 10.1002/nme.1620382203.
- [12] F. Ihlenburg e I. Babuška. “Finite element solution of the Helmholtz equation with high wave number Part I: The h-version of the FEM”. Em: **Computers & Mathematics with Applications** 30.9 (1995), pp. 9–37. DOI: 10.1016/0898-1221(95)00144-N.
- [13] A. F. D. Loula, Gustavo B. Alvarez, E. G. D. Do Carmo e F. A. Rochinha. “A discontinuous finite element method at element level for Helmholtz equation”. Em: **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.** 196.4-6 (2007), pp. 867–878. DOI: 10.1016/j.cma.2006.07.008.
- [14] H. F. Nunes. “Método Completo de Diferenças Finitas Centradas para a Equação de Helmholtz”. Dissertação de mestrado. Universidade Federal Fluminense, 2024. URL: <http://mcct.uff.br/documentos-teses/#diss>.
- [15] F. A. Rochinha, G. B. Alvarez, E. G. D. do Carmo e A. F. D. Loula. “A locally discontinuous enriched finite element formulation for acoustics”. Em: **Commun. Numer. Meth. Engng.** 23 (2007), pp. 623–637. DOI: 10.1002/cnm.946.
- [16] I. Singer e E. Turkel. “High-order finite difference methods for the Helmholtz equation”. Em: **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering** 163.1-4 (1998), pp. 343–358. DOI: 10.1016/S0045-7825(98)00023-1.
- [17] G. Sutmann. “Compact finite difference schemes of sixth order for the Helmholtz equation”. Em: **Journal of Computational and Applied Mathematics** 203.1 (2007), pp. 15–31. DOI: 10.1016/j.cam.2006.03.008.
- [18] T. Wu. “A dispersion minimizing compact finite difference scheme for the 2D Helmholtz equation”. Em: **Journal of Computational and Applied Mathematics** 311 (2017), pp. 497–512. DOI: 10.1016/j.cam.2016.08.018.