

Método de Interface Imersa de Alta Ordem para o Cálculo de Derivadas de Funções Descontínuas

Marilaine Colnago, Gabriela A. dos Reis, Italo V. M. Tasso,
Leandro F. de Souza,

Departamento de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP
13566-590, São Carlos, SP

E-mail: colnago@icmc.usp.br, lefraso@icmc.usp.br, gareis@icmc.usp.br, italo@tasso.com.br

Resumo: *Os métodos chamados de interface imersa tem tido grande estudo nos últimos tempos, por se tratar de métodos eficientes para a resolução de problemas de escoamentos multifásicos ou com descontinuidades nas interfaces. Nesses métodos, as equações a serem resolvidas são discretizadas numa grade cartesiana fixa. Como resultado, a fronteira do domínio nem sempre está em conformidade com a fronteira do domínio computacional. Isto dá origem às descontinuidades no interior do domínio computacional. Na presente investigação, usamos o método de interfaces imersas para resolver derivadas de funções descontínuas com salto em algum ponto do domínio. Foram realizadas análises dos resultados obtidos, usando um esquema de discretização de diferenças finitas compactas de quarta ordem.*

Palavras-chave: *Método de Interface Imersa, Diferenças Finitas Compactas, Derivadas com Descontinuidade*

1 Exposição do Problema

Antes da introdução dos métodos de interface imersa (MII), Peskin [5] introduziu os métodos de fronteira imersa para estudar o escoamento sanguíneo ao redor da válvula mitral. Esses métodos caracterizam-se por trabalhar com malhas de cálculo que contém o domínio do problema, sem respeitar a fronteira, fazendo com que a imposição das condições de contorno sejam incluídas na formulação numérica. Um avanço significativo nos métodos de fronteira imersa foi feito por LeVeque e Li [2], que introduziram a ideia do método de interface imersa, e por Wiegmann e Bube [7], que fizeram a simples, mas importante observação, de que as técnicas de diferenças finitas padrão falham quando aplicadas à funções não suaves porque as expansões de Taylor sobre os quais se baseiam são inválidas. Em [6], os autores descrevem a solução da equação de Poisson usando, assim como no presente trabalho, uma versão de quarta ordem do método de interface imersa que mostrou resultados satisfatórios. Atuais metodologias do MII utilizam processos iterativos quando a condição de salto não tem uma expressão analítica, e um sistema linear deve ser resolvido para cada iteração. Para superar isso, propuseram uma versão do método de interface imersa que lida com a condição de salto implicitamente, como parte da solução do sistema linear. A versão utilizada em [6] é adequada para a solução da equação de Navier-Stokes utilizando o método de projeção, uma vez que, resolver a equação de Poisson consome a maior parte do tempo de processamento.

A ideia chave dos métodos de fronteira imersa é que os esquemas de diferenças finitas na interface da fronteira imersa devem ser corrigidos, a fim de manter a precisão do esquema numérico utilizado. Este tópico será discutido a seguir, na seção 2, após uma breve introdução do esquema de diferenças finitas compactas e do problema a ser resolvido. Na seção 3, fizemos um teste encontrando as derivadas de uma função descontínua, utilizando o MII, e apresentamos os resultados obtidos. E na seção 4 são apresentadas as conclusões.

2 Formulação e Método

2.1 Diferenças Finitas Compactas

Para a discretização das equações, usamos um esquema de diferenças finitas compactas de quarta ordem, que para a primeira derivada, é dado pelas equações:

$$f'_0 + 3f'_1 = \frac{-17f_0 + 9f_1 + 9f_2 - f_3}{6h} + O(h^4) \quad (1)$$

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} = \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h} + O(h^4) \quad (2)$$

$$3f''_{N-1} + f''_N = \frac{17f_N - 9f_{N-1} - 9f_{N-2} + f_{N-3}}{6h} + O(h^4). \quad (3)$$

E para a segunda derivada:

$$f''_0 + 11f''_1 = \frac{39f_0 - 81f_1 + 45f_2 - 3f_3}{3h^2} + O(h^3) \quad (4)$$

$$f''_{i-1} + 10f''_i + f''_{i+1} = \frac{12(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})}{h^2} + O(h^4) \quad (5)$$

$$11f''_{N-1} + f''_N = \frac{39f_N - 81f_{N-1} + 45f_{N-2} - 3f_{N-3}}{3h^2} + O(h^3). \quad (6)$$

As equações acima formam o sistema tridiagonal de equações (7) para a primeira derivada e (8) para a segunda derivada, que podem ser resolvidos com qualquer técnica de álgebra linear numérica padrão, tal como, no caso do presente trabalho, o algoritmo de Thomas, para obter a aproximação numérica para as derivadas $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$ nos pontos da malha x_i .

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f'_0 \\ \vdots \\ f'_i \\ \vdots \\ f'_N \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \frac{1}{6}(-17f_0 + 9f_1 + 9f_2 - f_3) \\ \vdots \\ 3(f_{i+1} - f_{i-1}) \\ \vdots \\ \frac{1}{6}(17f_N - 9f_{N-1} - 9f_{N-2} + f_{N-3}) \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 11 & & & & \\ 1 & 10 & 1 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & 10 & 1 \\ & & & & & 11 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f''_0 \\ \vdots \\ f''_i \\ \vdots \\ f''_N \end{bmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{3}(39f_0 - 81f_1 + 45f_2 - 3f_3) \\ \vdots \\ 12(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) \\ \vdots \\ \frac{1}{3}(39f_N - 81f_{N-1} + 45f_{N-2} - 3f_{N-3}) \end{bmatrix} \quad (8)$$

2.2 Série de Taylor para funções com descontinuidades

A figura 1 mostra uma função $f(x)$ com descontinuidade no ponto $x = x_\alpha$. Assumimos que ela tem um salto de descontinuidade no valor da função ou em alguma de suas derivadas superiores no ponto x_α . Nesse caso, se $x_i < x_\alpha$, a série de Taylor para avaliar $f(x)$ no ponto x_{i+1} não pode ser feita, à menos que um termo de correção J_α seja acrescentado:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2!} + \dots + J_\alpha, \quad (9)$$

onde

$$J_\alpha = [f]_\alpha + [f']_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^+)^2 + \dots \quad (10)$$

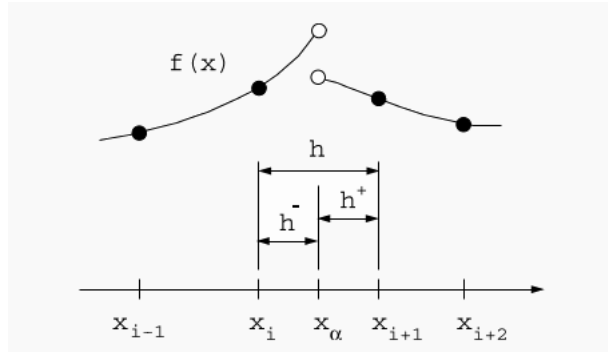


Figura 1: Uma função $f(x)$ com descontinuidade em $x = x_\alpha$. Fonte: [1].

$h = x_{i+1} - x_i$, $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$ e $[f]_\alpha$ representa o valor da função no salto, em $x = x_\alpha$, $[f']_\alpha$ o valor da primeira derivada da função no salto, e assim sucessivamente. No caso em que $x_\alpha < x_i$, não há necessidade de correção, e se, $x_i = x_\alpha$ temos que definir os termos $f(x_i)$, $f'(x_i)$, \dots , como limite esquerdo ou direito, para assim, usar ou não o termo de correção nas séries de Taylor (na seção 2.3 discutiremos mais detalhes sobre essa escolha).

2.3 Correção de salto no esquema de diferenças finitas

Para obtermos aproximações para as derivadas, um esquema de três pontos de diferenças finitas compactas de quarta ordem é usado. Para a primeira derivada, o esquema é dado por:

$$L_{i-1}^1 f_{i-1}^{(1)} + L_i^1 f_i^{(1)} + L_{i+1}^1 f_{i+1}^{(1)} = R_{i-1}^1 f_{i-1} + R_i^1 f_i + R_{i+1}^1 f_{i+1} + (L_I^1 J_{\alpha 1} - R_I^1 J_{\alpha 0}). \quad (11)$$

E para a segunda derivada:

$$L_{i-1}^2 f_{i-1}^{(2)} + L_i^2 f_i^{(2)} + L_{i+1}^2 f_{i+1}^{(2)} = R_{i-1}^2 f_{i-1} + R_i^2 f_i + R_{i+1}^2 f_{i+1} + (L_I^2 J_{\alpha 2} - R_I^2 J_{\alpha 0}), \quad (12)$$

onde o termo L_i se refere aos coeficientes que aparecem do lado esquerdo (*left*) do esquema de diferenças finitas e R_i os que aparecem do lado direito (*right*).

Se o salto ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, $I = i + 1$, tanto para a primeira quanto para a segunda derivada, e:

$$J_{\alpha 0} = [f^{(0)}]_\alpha + [f^{(1)}]_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f^{(2)}]_\alpha (h^+)^2 + \frac{1}{3!}[f^{(3)}]_\alpha (h^+)^3 + \frac{1}{4!}[f^{(4)}]_\alpha (h^+)^4 + \frac{1}{5!}[f^{(5)}]_\alpha (h^+)^5 \quad (13)$$

$$J_{\alpha 1} = [f^{(1)}]_\alpha + [f^{(2)}]_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f^{(3)}]_\alpha (h^+)^2 + \frac{1}{3!}[f^{(4)}]_\alpha (h^+)^3 + \frac{1}{4!}[f^{(5)}]_\alpha (h^+)^4, \quad (14)$$

$$J_{\alpha 2} = [f^{(2)}]_\alpha + [f^{(3)}]_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f^{(4)}]_\alpha (h^+)^2 + \frac{1}{3!}[f^{(5)}]_\alpha (h^+)^3, \quad (15)$$

onde $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$.

Se o salto ocorre em $x_{i-1} < x_\alpha < x_i$, então $I = i - 1$, e temos:

$$J_{\alpha 0} = -[f^{(0)}]_\alpha + [f^{(1)}]_\alpha h^- - \frac{1}{2!}[f^{(2)}]_\alpha (h^-)^2 + \frac{1}{3!}[f^{(3)}]_\alpha (h^-)^3 - \frac{1}{4!}[f^{(4)}]_\alpha (h^-)^4 + \frac{1}{5!}[f^{(5)}]_\alpha (h^-)^5 \quad (16)$$

$$J_{\alpha 1} = -[f^{(1)}]_\alpha + [f^{(2)}]_\alpha h^- - \frac{1}{2!}[f^{(3)}]_\alpha (h^-)^2 + \frac{1}{3!}[f^{(4)}]_\alpha (h^-)^3 - \frac{1}{4!}[f^{(5)}]_\alpha (h^-)^4, \quad (17)$$

$$J_{\alpha 2} = -[f^{(2)}]_\alpha + [f^{(3)}]_\alpha h^- - \frac{1}{2!}[f^{(4)}]_\alpha (h^-)^2 + \frac{1}{3!}[f^{(5)}]_\alpha (h^-)^3, \quad (18)$$

onde $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$.

No caso em que x_α coincide com um ponto da malha, temos que analisar as possibilidades. Por exemplo, se $x_\alpha = x_i$ e $f(x_i) = \lim_{x \rightarrow x_i}^+ f(x)$, então $I = i - 1$ e há necessidade da inclusão dos termos $(L_I^1 J_{\alpha 1} - R_I^1 J_{\alpha 0})$ e $(L_I^2 J_{\alpha 2} - R_I^2 J_{\alpha 0})$. Por outro lado, se $x_\alpha = x_{i-1}$ e $f(x_{i-1}) = \lim_{x \rightarrow x_{i-1}}^+ f(x)$, então não há necessidade de correção.

Finalmente, nossa discretização se fará da seguinte forma: nos pontos x_{i-1} , a equação, para a primeira derivada, é:

$$L_{i-2}^1 f_{i-2}^{(1)} + L_{i-1}^1 f_{i-1}^{(1)} + L_i^1 f_i^{(1)} = R_{i-2}^1 f_{i-2} + R_{i-1}^1 f_{i-1} + R_i^1 f_i. \quad (19)$$

Nesse caso não aparece o termo de correção pois o estêncil não intercepta a descontinuidade. Para os pontos de malha x_i , temos:

$$L_{i-1}^1 f_{i-1}^{(1)} + L_i^1 f_i^{(1)} + L_{i+1}^1 f_{i+1}^{(1)} = R_{i-1}^1 f_{i-1} + R_i^1 f_i + R_{i+1}^1 f_{i+1} + (L_I^1 J_{\alpha 1} - R_I^1 J_{\alpha 0}). \quad (20)$$

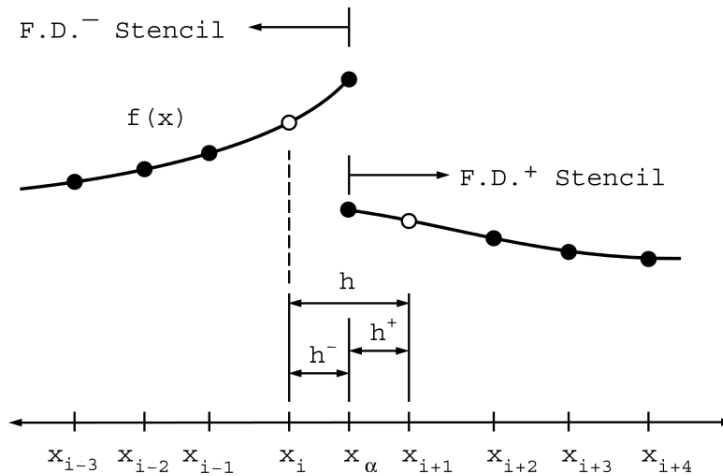


Figura 2: Esquema do estêncil de diferenças finitas usado para obter os saltos. Os pontos preenchidos de cor preta são pontos usados no esquema de diferenças finitas e os demais não. Fonte: [1].

Como vimos, os termos de correção presentes na equação (20), $J_{\alpha 1}$ e $J_{\alpha 0}$, envolvem termos adicionais $[f^{(n)}]_{\alpha}$, que podem ser obtidos da forma:

$$[f^{(n)}]_{\alpha} = f_{F.D.+}^{(n)} - f_{F.D.-}^{(n)}, \quad (21)$$

onde

$$f_{F.D.+}^{(n)} = c_{n_{\alpha}^+} f_{\alpha}^+ + c_{n_{i+2}} f_{i+2} + c_{n_{i+3}} f_{i+3} + c_{n_{i+4}} f_{i+4} \quad (22)$$

$$f_{F.D.-}^{(1)} = c_{n_{\alpha}^-} f_{\alpha}^- + c_{n_{i-1}} f_{i-1} + c_{n_{i-2}} f_{i-2} + c_{n_{i-3}} f_{i-3}. \quad (23)$$

Os coeficientes c_{n_i} são usados para determinar uma aproximação numérica da n -ésima derivada de f com uma combinação linear de f_i . Os subíndices $+$ e $-$ indicam os limites da direita e esquerda de x_{α} , respectivamente.

Por exemplo, no caso de $[f^{(1)}]_{\alpha}$, temos:

$$[f^{(1)}]_{\alpha} = f_{F.D.+}^{(1)} - f_{F.D.-}^{(1)}, \quad (24)$$

onde $f_{F.D.+}^{(1)} \equiv 0$, por estar dentro da interface imersa, e

$$f_{F.D.-}^{(1)} = c_{1_{\alpha}^-} f_{\alpha}^- + c_{1_{i-1}} f_{i-1} + c_{1_{i-2}} f_{i-2} + c_{1_{i-3}} f_{i-3} + c_{1_{i-4}} f_{i-4} + c_{1_{i-5}} f_{i-5} \quad (25)$$

E, finalmente, para o ponto x_{i+1} , a equação é, simplesmente:

$$f_{i+1}^{(1)} = 0. \quad (26)$$

Para o caso da segunda derivada, o esquema é análogo.

3 Resultados

A solução numérica aqui, é obtida num intervalo $[0, 1]$, e a interface imersa é um círculo de raio $r = 0.05$ centrado no ponto $x_c = 0.5$. Um esquema compacto de quarta ordem, como definido acima, foi usado para a discretização espacial, com correções também de quarta ordem na fronteira imersa, mantendo assim a ordem do esquema utilizado. Dentro da interface, a função $f(x)$ é igual a zero, e fora, definimos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} f(x) &= \cos(x), & \text{caso } x < x_c - r, \\ f(x) &= \sin(x), & \text{caso } x > x_c + r. \end{aligned} \tag{27}$$

A figura 3 mostra um gráfico das soluções analítica e numérica da primeira derivada de f e a figura 4 da segunda derivada. Pode-se observar que os resultados foram satisfatórios, já que a solução numérica muito se aproximou da solução analítica em ambos os casos. Isso pode ser verificado melhor nas tabelas a seguir.

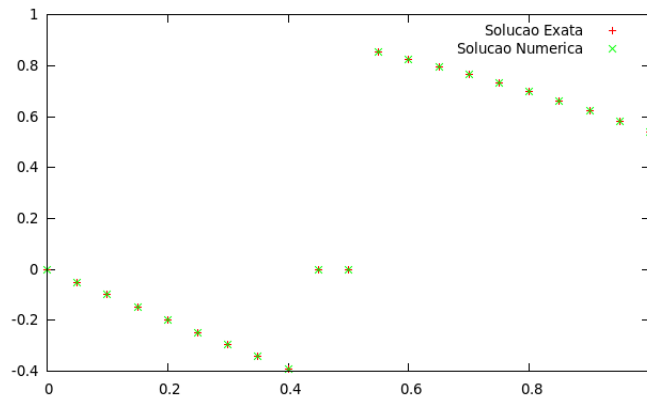


Figura 3: Gráfico da primeira derivada de f encontrada analiticamente e numericamente.

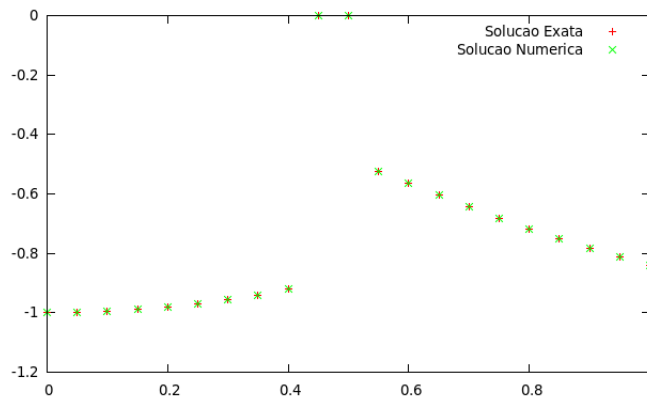


Figura 4: Gráfico da segunda derivada de f encontrada analiticamente e numericamente.

A tabela 1 apresenta os resultados do estudo da convergência da primeira derivada de f , comparando a solução numérica com a exata, já que as derivadas (tanto primeira quanto segunda) das funções seno e cosseno são conhecidas. Esses resultados nos mostram que o método foi de quarta ordem e a análise dos erros foi satisfatória, já que o valor resultante das normas utilizadas diminuem conforme aumentamos o valor de N . A tabela 2 contém os resultados da segunda derivada onde os resultados obtidos convergiram entre terceira e quarta ordens de precisão. Em ambos os casos foram feitos testes com valores distintos de N e para o cálculo da

ordem (ver [3]), o erro máximo absoluto é calculado nas normas L_1 , L_2 e L_∞ que são dadas por:

$$L_1 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N E_i \right), \tag{28}$$

$$L_2 = \sqrt{\frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N E_i^2 \right)}, \tag{29}$$

$$L_\infty = \max E_i, \tag{30}$$

onde $E_i = |f_{\text{numérica}} - f_{\text{exata}}|$.

N	Norma L_1	ordem	Norma L_2	ordem	Norma L_∞	ordem
20	5.749447e-08	-	1.304250e-07	-	5.513702e-07	-
40	2.033028e-09	4.821721	5.471831e-09	4.575052	3.278419e-08	4.071949
80	8.855033e-11	4.520989	2.399628e-10	4.511141	1.995444e-09	4.038219
160	4.516857e-12	4.293107	1.089794e-11	4.460684	1.229977e-10	4.020006
320	2.522935e-13	4.162144	5.200797e-13	4.389178	7.735146e-12	3.991059

Tabela 1: Ordem de convergência da primeira derivada

N	Norma L_1	ordem	Norma L_2	ordem	Norma L_∞	ordem
20	3.785258e-06	-	1.277930e-05	-	5.632436e-05	-
40	2.065716e-07	4.195678	1.065683e-06	3.583959	6.688130e-06	3.074084
80	1.198332e-08	4.107543	7.914397e-09	3.530919	8.134906e-07	3.039405
160	7.160512e-10	4.064821	1.089794e-11	4.460684	9.957979e-08	3.030201
320	5.645665e-11	3.664847	7.084649e-10	3.481711	1.258317e-08	2.984358

Tabela 2: Ordem de convergência da segunda derivada

4 Conclusão

Um método de interface imersa de alta ordem para encontrar derivadas de funções descontínuas numericamente, foi apresentado. Ao obtermos tais derivadas usando o método de interface imersa juntamente com derivadas compactas de quarta ordem, mostramos que a precisão do método numérico obtida foi de quarta ordem para a primeira derivada e entre terceira e quarta ordem no caso da segunda derivada. A solução numérica se aproxima bem da solução analítica, mostrando que o método foi satisfatório, e os resultados estão compatíveis com o esperado.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da CAPES e FAPESP, processos no 2012/04471-5 e 2013/21501-8.

Referências

- [1] S. K. Lele, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *Journal of Computational Physics*, 103 (1992) 16-42.

- [2] R. J. Leveque, Z. Li, The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources, *SIAM J. Numer. Anal.*, 31 (4) (1994) 1019-1044.
- [3] R. J. Leveque, "Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems", SIAM, Philadelphia, 2007.
- [4] M. N. Linnick, H. F. Fasel, A high-order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains, *Journal of Computational Physics*, 204 (2005) 157-192.
- [5] C. S. Peskin, Flow patterns around herats valves: a numerical method, *Journal of Computational Physics*, 10 (1972), 252-271.
- [6] G. A. dos Reis, I. V. M. Tasso, L. F. de Souza, J. A. Cuminato, Fast and precise solution for the Poisson equation in the presence of interfaces with discontinuities, *2nd International Congress of Mechanical Engineering*, (2013) 1464-1471.
- [7] A. Wiegmann, K. Bube, The explicit-jump immersed interface method: finite difference methods for pdes with piecewise smooth solutions, *SIAM J. Numer. Anal.* 37 (3) (2000) 827-862.