

Capítulo 2

Método de Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas é uma das várias técnicas para a diferenciação de uma função discreta, *i.e.*, um conjunto discreto de valores da variável dependente em pontos conhecidos da variável independente. O cálculo do declive não é mais do que o cálculo discreto de dy/dx num dado ponto x_0 . O seu valor $dy/dx = (y_1 - y_0)/(x_1 - x_0)$ corresponde a uma fórmula de diferenças finitas para o cálculo da primeira derivada. Neste capítulo serão apresentadas algumas técnicas para gerar fórmulas de diferenças finitas.

2.1 Expansão em série de Taylor

Seja $\phi(x)$ uma função definida no intervalo $a \leq x \leq b$, e suponha que o intervalo $[a, b]$ contém o conjunto $x_0 = a, x_1, \dots, x_i, \dots, x_{N+1} = b$. A representação discreta de $\phi(x)$ é $[\phi_i] = [\phi(a), \phi(x_1), \dots, \phi(x_i), \dots, \phi(b)]$ onde o valor de $\phi(x_i)$ se representa por ϕ_i . O valor de $x_{i+1} - x_i$, representa o espaçamento da malha e para uma malha uniforme $x_i = a + i\Delta x$ com $i = 0, \dots, N + 1$ e $\Delta x = (b - a)/(N + 1)$. A figura 2.1 representa uma malha computacional para um problema uni-dimensional e a figura 2.2 uma malha estruturada cartesiana ortogonal para um problema bidimensional. Qualquer ponto (x_i, y_i) fica representado na malha por (i, j) e os vizinhos relativamente a esse ponto vêm representados por $(i \pm 1, j \pm 1)$.

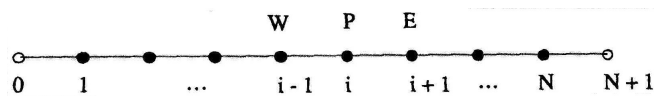


Figura 2.1: Malha Computacional Uni-dimensional

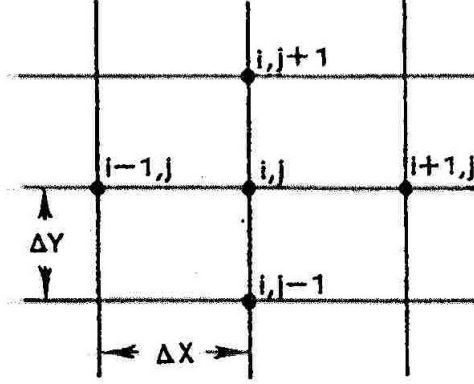


Figura 2.2: Malha computacional bidimensional

Fórmulas de diferenças finitas podem ser obtidas através do desenvolvimento em série de Taylor (ver por exemplo Collatz (1966), Ames (1977), Roache (1976), e Lagidus e Piner (1982)).

Por exemplo, aproximar $\partial\phi/\partial x$ no ponto (x_i, y_i) por uma diferença discreta para um valor finito de Δx , expande-se em série de Taylor:

$$\phi(x_i + \Delta x, y_i) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\Delta x)^m}{m!} \frac{\partial^m \phi(x_i, y_i)}{\partial x^m} \quad (2.1)$$

que para as equações à direita e à esquerda do ponto (x_i, y_i) :

$$\phi(x_i + \Delta x, y_i) = \phi(x_i, y_i) + \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i \Delta x + \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i \frac{\Delta x^2}{2!} + \left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right|_i \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (2.2)$$

$$\phi(x_i - \Delta x, y_i) = \phi(x_i, y_i) - \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i \Delta x + \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i \frac{\Delta x^2}{2!} - \left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right|_i \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (2.3)$$

Se pretendemos obter no ponto (i, j) a primeira derivada através de diferenças a jusante ou, progressivas temos, por (2.2):

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{(\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j})}{\Delta x} + \mathcal{O} \left(\Delta x, \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \quad (2.4)$$

ou, através de diferenças a montante ou regressivas ou ainda apelidadas de **”UPWIND”**, por (2.3):

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{(\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j})}{\Delta x} + \mathcal{O} \left(\Delta x, \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \quad (2.5)$$

Para obter uma fórmula de diferenças centrais subtrai-se (2.3) de (2.2) e a série é truncada:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{(\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j})}{2\Delta x_i} + \mathcal{O}\left(\Delta x^2, \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right) \quad (2.6)$$

Logo há um erro induzido pela truncatura da série. Se mais termos da série de Taylor fossem considerados seria necessário aproximar $\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}, \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5}, \dots$, etc... que levava a considerar mais pontos e mais séries de Taylor.

Note-se que diferenças a jusante ou montante são aproximações de 1^a ordem dado que, por (2.4) e (2.5) vem que $o(\Delta x^n, \frac{\partial^m \phi}{\partial x^m})$ para $n = 1$ significa que é proporcional a Δx e para $m = 2$ (que a aproximação é exacta para $\phi = a + bx$ ou seja a aproximação é de 1^a ordem ou linear). Da análise do erro de truncatura para diferenças centrais, $n = 2$ e $m = 3$ (é exacto para $\phi = a + bx + cx^2$ que é uma parábola, ou seja, de 2^a ordem). Assim, pode-se designar a ordem ou no operador Δx^n , por ordem n , ou na derivada $\partial^m \phi / \partial x^m$, por ordem $(m - 1)$.

Igualmente obtém-se a aproximação da 2^a derivada, $\partial^2 \phi / \partial x^2$:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j})}{\Delta x^2} + \mathcal{O}\left(\Delta x^2, \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\right) \quad (2.7)$$

que é de 2^a ordem de precisão no operador Δx e de 3^a ordem na derivada (entendido no grau máximo do polinómio em que a aproximação é exacta). Para ilustrar o uso da expansão em série de Taylor para aproximar expressões com derivadas parciais cruzadas consideramos $\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$. As expansões em série de Taylor para as duas variáveis x e y ,

$$\begin{aligned} \phi(x + \Delta x, y + \Delta y) = & \phi(x, y) + \Delta x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \\ & + 2 \frac{\Delta x \Delta y}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + \mathcal{O}[(\Delta x)^3, (\Delta y)^3] \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i+1,j+1} = & \phi_{i,j} + \Delta x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \Delta x \Delta y \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \frac{(\Delta y)^2}{2} \\ & + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \mathcal{O}[(\Delta x)^3, (\Delta y)^3] \end{aligned} \quad (2.9)$$

Expressões análogas podem ser obtidas para $\phi_{i-1,j-1}; \phi_{i+1,j-1}; \phi_{i-1,j+1}$ originando:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} = \frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i-1,j-1}}{4(\Delta x)(\Delta y)} + \mathcal{O}[(\Delta x)^2, (\Delta y)^2] \quad (2.10)$$

de um modo semelhante pode-se recorrer a:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y)^2 \right] \\ &= \frac{1}{2\Delta y} \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j+1} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i,j-1} \right] + \mathcal{O}(\Delta y)^2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Usando diferenças centrais para $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ conduz a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} &= \frac{1}{2\Delta y} \left[\frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i-1,j+1}}{2\Delta x} - \frac{\phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j-1}}{2\Delta x} \right] \\ &\quad + \mathcal{O}[(\Delta y)^2, (\Delta x)^2] \end{aligned} \quad (2.13)$$

O mesmo procedimento é válido para derivadas temporais, ou seja:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = (\phi^{n+1} - \phi^n)/\Delta t + \mathcal{O} \left(\Delta t, \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right) \quad (2.14)$$

em que os índices n e $n+1$ designam dois níveis temporais. o nível $(n+1)$ representa o futuro e o nível n , o presente, ϕ^n é conhecido.

Para encontrar fórmulas de diferenças finitas que envolvam o valor da função em pontos desejados e ao mesmo tempo maximizem a ordem de aproximação, e.g. Moin(2000) (diminuição do erro de truncatura), escreve-se a fórmula desejada na forma:

$$\phi_i + \sum_{k=0}^n a_k f_{i+k} = \mathcal{O}(\text{mínimo possível com pontos envolventes}) \quad (2.15)$$

O procedimento para determinar os coeficientes a_k , para um dado número de pontos $(n+1)$ da malha é o seguinte: fazem-se combinações lineares da série de Taylor de modo que a função nos pontos considerados, seja expressa em função dos valores e suas derivadas, no ponto em que se pretende calcular a derivada através da fórmula de diferenças. Por exemplo se pretender calcular ϕ'_i usando os pontos $i, i+1, i+2$ obtendo-se a tabela 2.1

Para o exemplo de considerar os três pontos a equação (2.15) é escrita com a ajuda da tabela 2.1 da seguinte forma:

	ϕ_i	ϕ'_i	ϕ''_i	ϕ'''_i
ϕ'_i	0	1	0	0
$a_0\phi'_i$	a_0	0	0	0
$a_1\phi'_{i+1}$	a_1	$a_1\Delta x$	$a_1\frac{\Delta x}{2}$	$a_1\frac{\Delta x^3}{6}$
$a_2\phi'_{i+2}$	a_2	$2a_2\Delta x$	$a_2\frac{(2\Delta x)^2}{2}$	$a_2\frac{(2\Delta x)^3}{6}$

Tabela 2.1: Combinação linear da série de Taylor

$$\begin{aligned}
\phi'_i + \sum_{k=0}^2 a_k \phi_{i+k} &= (a_0 + a_1 + a_2)\phi_1 \\
&+ (1 + a_1\Delta x + 2a_2\Delta x)\phi'_1 \\
&+ \left(a_1\frac{\Delta x^2}{2} + a_2\frac{(2\Delta x)^2}{2} \right) \phi''_i \\
&+ \left(a_1\frac{\Delta x^3}{6} + a_2\frac{(2\Delta x)^3}{6} \right) \phi'''_i + \dots
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Para obter a maior ordem de precisão é obviamente necessário diminuir o erro de truncatura o que se consegue eliminando os termos da equação (2.16) que contêm ϕ_i , ϕ'_i e ϕ''_i assim:

$$\begin{aligned}
a_0 + a_1 + a_2 &= 0 \\
a_1\Delta x + 2a_2\Delta x &= -1 \\
a_1\Delta x^2/2 + 2a_2\Delta x^2 &= 0
\end{aligned}$$

e obtêm-se deste sistema de equações os coeficientes:

$$a_0 = \frac{3}{2\Delta x}; \quad a_1 = -\frac{2}{\Delta x}; \quad a_2 = \frac{1}{2\Delta x}$$

Substituindo estes valores em (2.16):

$$\phi'_i = \frac{-3\phi_i + 4\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{2.17}$$

e o erro de truncatura é obtido substituindo a_1 e a_2 no último termo da equação (2.16). Com os pontos especificados não é possível encontrar uma fórmula de diferenças que seja superior à segunda ordem de precisão.

Um segundo procedimento para aproximar uma derivada, consiste em representar a função por um polinómio de ordem desejada. Os coeficientes do polinómio são calculados no referencial local centrado no ponto em que se deseja obter a derivada discreta. Por exemplo, considere-se o polinómio de segunda ordem

$$\phi(x) = Ax^2 + Bx + C \tag{2.18}$$

Seleccionando a origem em x_i . Assim $x_i = 0$, $x_{i+1} = \Delta x$ e $x_{i+2} = 2\Delta x$ e os valores da função nesses pontos são

$$\phi(x_i) = \phi_i; \phi(x_{i+1}) = \phi_{i+1} \text{ e } \phi(x_{i+2}) = \phi_{i+2}$$

assim

$$\begin{aligned} \phi_i &= Ax_i^2 + Bx_i + C = C \\ \phi_{i+1} &= Ax_{i+1}^2 + Bx_{i+1} + C = A(\Delta x)^2 + B(\Delta x) + C \\ \phi_{i+2} &= Ax_{i+2}^2 + Bx_{i+2} + C = A(2\Delta x)^2 + B(2\Delta x) + C \end{aligned}$$

e os coeficientes são dados por:

$$\begin{aligned} C &= \phi_i \\ B &= \frac{-\phi_{i+2} + 4\phi_{i+1} - 3\phi_i}{2\Delta x} \\ A &= \frac{\phi_{i+2} - 2\phi_{i+1} + \phi_i}{2\Delta x} \end{aligned}$$

A primeira derivada de ϕ vem

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 2Ax + B$$

para $x_i = 0$, $\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = B$ então

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-\phi_{i+2} + 4\phi_{i+1} - 3\phi_i}{2\Delta x} \quad (2.19)$$

que é igual à aproximação de diferenças finitas obtida por aproximação progressiva de série de Taylor. A segunda derivada vem $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 2A$,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi_{i+2} - 2\phi_{i+1} + \phi_i}{\Delta x} \quad (2.20)$$

Se o espaçamento entre os pontos i , $i+1$ e $i+2$, não é igual, um procedimento idêntico é seguido mas agora é preciso ter em conta o espaçamento não uniforme da malha. Como será analisado em 2.5.

2.2 Construção Geral de Fórmulas de Diferenças Finitas

A ordem da aproximação aumenta com o número de pontos. O procedimento geral para gerar fórmulas de diferenças finitas de qualquer ordem de precisão pode ser encontrada em Hirsch (1986). Definindo operadores que, por exemplo, para diferenças finitas a jusante:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j-1} - \phi_{i,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) = \frac{\delta^+ \phi_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (2.21)$$

Assim o operador para diferenças a jusante

$$\delta^+ \phi_i = \phi_{i+1} - \phi_i \quad (2.22)$$

A tabela 2.2 mostra alguns dos operadores mais usados

Operador	Símbolo	Expressão	Relações
deslocamento	E	$E\phi_i = \phi_{i+1}$	
montante	δ^-	$\delta^- \phi_i = \phi_{i-1}$	$\delta^+ = E - 1$
central	δ	$\delta \phi_i = \phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}$	$\delta^- = 1 - E^{-1}$
médio	μ	$\mu \phi_i = \frac{1}{2}(\phi_{i+1/2} + \phi_{i-1/2})$	$\mu = \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2})$
diferencial	Δ	$\Delta \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x}$	

Tabela 2.2: Operadores e suas relações

As relações entre os operadores também estão listadas na tabela 2.2

$$E^n = \phi_{i+n} \quad (2.23)$$

$$\delta = E^{1/2} - E^{-1/2} \quad (2.24)$$

$$\mu = \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2}) \quad (2.25)$$

$$\delta^+ \delta^+ \delta^+ \dots \delta^+ = (E - 1)^n \quad (2.26)$$

Considerando a série de Taylor:

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) + \Delta x \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi(x)}{\partial x^3}$$

escrita com os operadores

$$E\phi(x) = \left(1 + \Delta x D + \frac{(\Delta x D)^2}{2!} + \frac{(\Delta x D)^3}{3!} + \dots \right) \phi(x) \quad (2.27)$$

ou ainda atendendo ao desenvolvimento da exponencial

$$E\phi(x) = e^{\Delta x D} \phi(x) \text{ com } E = e^{\Delta x D} \quad (2.28)$$

e tomando logaritmos

$$\Delta x D = \ln E \quad (2.29)$$

Escolhendo diferenças progressivas é necessário substituir $E = 1 + \delta^+$,

$$\delta x D = \ln E = \ln(1 + \delta^+) = \delta^+ - \frac{(\delta^+)^2}{2} + \frac{(\delta^+)^3}{3} - \frac{(\delta^+)^4}{4} + \dots \quad (2.30)$$

Considerando diferenças regressivas para substituir $E = 1 - \delta$ na equação (2.20) obtem-se:

$$\Delta x D = \delta^- + \frac{(\delta^-)^2}{2} + \frac{(\delta^-)^3}{3} + \frac{(\delta^-)^4}{4} + \dots \quad (2.31)$$

e para diferenças centrais virá:

$$\begin{aligned} \delta \phi_i &= \phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2} = (E^{1/2} - E^{-1/2}) \phi_i \\ \delta &= e^{\Delta x/2} - e^{-\Delta x/2} = 2 \sinh \frac{\Delta x}{2} \end{aligned}$$

$$\Delta x D = \delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{7\delta^7}{7168} + \dots \quad (2.32)$$

Desprezando os termos na equação (2.21) os termos da série de potências de $(\delta^+)^2$ e superiores obtem-se $\Delta x D = \delta^+$, ou seja:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i,j} = D \phi_i = \frac{\phi_{i+1,j-1} - \phi_{i,j}}{\Delta x} + \mathcal{O} \left(\Delta x, \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \quad (2.33)$$

se $\Delta x D = \delta^+ - \frac{(\delta^+)^2}{2}$ então:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{-3\phi_i + 4\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{2\Delta x} + \mathcal{O} \left(\Delta x^2, \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) \quad (2.34)$$

Para obter fórmulas de diferenças regressivas de realiza-se um procedimento semelhante a partir da equação (2.29).

Para obter fórmulas de diferenças centrais para a primeira derivada, a partir da equação (2.32).

$$\Delta x D = \delta = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta x}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \quad (2.36)$$

se forem introduzidos mais termos da equação:

$$\Delta x D = \delta - \delta \frac{\delta^3}{24} \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{12\Delta x} + \mathcal{O} \left(\Delta x^4, \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} \right) \quad (2.38)$$

Derivadas de ordem elevada usando diferenças progressivas são obtidas a partir de:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^n \phi}{\partial x^n} &= D^n \phi_i = \frac{1}{\Delta x^n} [ln(1 + \delta^+)]^n \phi_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^n} \left[\delta^{+n} - \frac{n}{2} \delta^{+(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24} \delta^{+(n+2)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{n(n+2)(n+3)}{48} \delta^{+(n+3)} + \dots \right] \phi_i\end{aligned}\quad (2.39)$$

Diferenças regressivas

$$\begin{aligned}\frac{\partial^n \phi}{\partial x^n} &= -\frac{1}{\Delta x^n} [ln(1 - \delta^-)]^n \phi_i = \frac{1}{\Delta x^n} \left(\delta^- + \frac{\delta^{-2}}{2} + \frac{\delta^{-3}}{3} + \dots \right)^n \phi_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^n} \left[\delta^{-n} + \frac{n}{2} \delta^{-(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24} \delta^{-(n+2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{n(n+2)(n+3)}{48} \delta^{-(n+3)} + \dots \right] \phi_i\end{aligned}\quad (2.40)$$

Ou centrais

$$\begin{aligned}D^n \phi_i &= \left(\frac{2}{\Delta x} \sinh^{-1} \frac{\delta}{2} \right)^n \phi_i = \frac{1}{\Delta x^n} \left[\delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} + \dots \right]^n \phi_i \\ &= \frac{\delta^n}{\Delta x^n} \left[1 - \frac{n}{24} \delta^2 + \frac{n}{64} \left(\frac{22+5n}{90} \right) \delta^4 - \frac{n}{45} \left(\frac{5}{7} + \frac{n-1}{5} + \frac{(n-1)(n-2)}{35} \right) \delta^6 + \dots \right] \phi_i\end{aligned}\quad (2.41)$$

A tabela 2.3 lista os coeficientes da fórmula de diferenças finitas até à 4ª derivada e 6ª ou 8ª ordem de precisão para uma função discreta no ponto i .

	$i-4$	$i-3$	$i-2$	$i-1$	i	$i+1$	$i+2$	$i+3$	$i+4$
<i>1derivada</i>									
2				$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$			
4			$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{12}$		
6		$-\frac{1}{60}$	$\frac{1}{20}$	$-\frac{1}{4}$	0	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{20}$	$\frac{1}{60}$	
8	$\frac{1}{290}$	$-\frac{1}{105}$	$\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{5}$	0	$\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{1}{105}$	$-\frac{1}{280}$
<i>2derivada</i>									
2				1	-2	1			
4			$-\frac{1}{12}$	$-\frac{4}{3}$	$-\frac{5}{2}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{12}$		
6		$\frac{1}{90}$	$-\frac{1}{20}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{49}{18}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{20}$	$\frac{1}{90}$	
8	$-\frac{1}{560}$	$\frac{1}{315}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$	$-\frac{205}{72}$	$\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{1}{315}$	$-\frac{1}{560}$
<i>3derivada</i>									
2			$-\frac{1}{2}$	1	0	-1	$\frac{1}{2}$		
4		$\frac{1}{3}$	-1	$\frac{13}{8}$	0	$-\frac{13}{8}$	1	$-\frac{1}{3}$	
6	$-\frac{7}{240}$	$\frac{1}{10}$	$-\frac{169}{120}$	$\frac{61}{30}$	0	$-\frac{61}{30}$	$\frac{169}{120}$	$-\frac{1}{10}$	$\frac{7}{240}$
<i>4derivada</i>									
2			1	-4	6	4	1		
4		$-\frac{1}{6}$	2	$-\frac{13}{2}$	$\frac{28}{3}$	$-\frac{13}{2}$	2	$-\frac{1}{6}$	
6	$\frac{7}{240}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{169}{60}$	$-\frac{122}{15}$	$\frac{91}{8}$	$-\frac{122}{15}$	$\frac{169}{60}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{7}{240}$

Tabela 2.3: Coeficientes de fórmulas de diferenças finitas centrais em malha uniforme

Exemplo 2-1

Obter fórmulas de diferenças finitas regressivas, progressivas ou centrais para a segunda derivada mantendo só o primeiro termo da expansão ou mantendo os dois primeiros termos.

$$\begin{aligned}
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^{+2} - \delta^{+3} + \frac{11}{12} \delta^{+4} - \frac{5}{6} \delta^{+5} + \dots \right) \phi_i \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^{-2} - \delta^{-3} + \frac{11}{12} \delta^{-4} - \frac{5}{6} \delta^{-5} + \dots \right) \phi_i \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \dots \right) \phi_i \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1\mu}{\Delta x^2} \left(\delta^2 - \frac{5\delta^4}{2x} + \frac{259}{5760} \delta^6 + o(\Delta x^8) \right) \phi_i
 \end{aligned}$$

Mantendo o primeiro termo da série, vem:

$$\begin{aligned}
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} (\phi_{i+2} - 2\phi_{i+1} + \phi_i) - \Delta x \phi_{xxx} \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} (\phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) + \Delta x \phi_{xxx} \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} (\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) - \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right) \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{2\Delta x^2} (\phi_{i+3/2} - \phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2} + \phi_{i-3/2}) \\
 &\quad - \frac{5}{2x} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right)
 \end{aligned}$$

Mantendo dois termos da série, vem para diferenças progressivas, regressivas e centrais respectivamente:

$$\begin{aligned}
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} (2\phi_i - 5\phi_{i+1} + 4\phi_{i+2} - \phi_{i+3}) + \frac{11}{12} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right) \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} (2\phi_i - 5\phi_{i-1} + 4\phi_{i-2} - \phi_{i-3}) + \frac{11}{12} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right) \\
 (\phi_{xx})_i &= \frac{1}{12\Delta x^2} (-\phi_{i+2} + 16\phi_{i+1} - 30\phi_i + 16\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) \\
 &\quad + \frac{\Delta x^4}{90} \left(\frac{\partial^6 \phi}{\partial x^6} \right)
 \end{aligned}$$

Estas fórmulas são importantes para a incorporação de condições fronteira.

2.3 Ordem de Precisão das Fórmulas de Diferenças Finitas

O erro de truncatura da série de Taylor é expresso pela ordem de grandeza do primeiro termo desprezado da série. A ordem da aproximação é usualmente estabelecida pela potência, n , do intervalo discreto, Δx^n . Por exemplo $\Theta(\Delta x^2, \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4})$ significa que a fórmula de diferenças finitas é de segunda ordem, Δx^2 . Contudo é importante ter em conta a ordem da derivada porque no erro de truncatura a 4ª derivada significa que se a solução exacta fosse dada por um polinómio do 3º grau o erro de truncatura seria nulo. Contudo a solução analítica é desconhecida e assim não é quantificável o erro de $\partial^4 \phi / \partial x^4$. Da análise do erro de truncatura pode-se concluir o seguinte:

1. Se há várias variáveis independentes, cada uma terá um erro de truncatura por exemplo $\Theta(\Delta x^2; \Delta t)$, ou seja, de segunda ordem em x e de primeira ordem em t .
2. A ordem do esquema numérico (fórmula de diferenças finitas), depende de propriedades locais da função. Por exemplo próximo de gradientes elevados de ϕ pode originar uma ordem de precisão menor do que a ordem teórica calculada pela expansão em série de Taylor. Diferentes erros contribuem para a solução final podendo a ordem da precisão da solução medida numa dada norma, ser diferente da ordem de erro local num dado ponto.
3. É desejável usar fórmulas de diferenças finitas de ordem elevada. Contudo, como veremos, o erro da fórmula de diferenças não significa que se conheça o erro da solução. As equações são não lineares e não se conhece, em geral, como é que um erro local vai evoluir durante o processo iterativo até à obtenção da solução final. A ordem de precisão estabelece como é que o erro vai variar com o refinamento da malha. Assim por exemplo para uma precisão de segunda ordem, significa que o erro R obtido com a malha Δx será de $R/4$ com a malha $\Theta(\Delta x/2)^2$. E será de $R/16$ com a malha $(\Delta x/4)^2$. De modo idêntico uma ordem de precisão de primeira ordem conduziria ao erro R com uma malha de espaçamento Δx e conduziria ao erro de $R/2$ com uma malha de espaçamento $\Delta x/2$. Para uma malha de $\Delta x/n$ implicaria um erro R/n .
4. O erro da truncatura é cumulativo, ou seja, para problemas por exemplo não estacionários leva a que durante a evolução temporal os erros vão aumentando devido a erros em cada nível temporal.
5. O erro de truncatura em aplicações práticas de engenharia é quase sempre muito maior ao erro de truncatura da máquina, devido a um número de bits finito.

Exemplo 2-2

Para ilustrar os efeitos dos erros vamos considerar a função

$$f(x) = \frac{\sin x}{x^3}$$

num domínio discreto com incremento espacial h . Pretendemos obter o erro da fórmula de diferenças finitas para o cálculo da 1ª derivada $\partial t/\partial x$ com:

1. Diferenças regressivas de 1ª ordem
2. Diferenças centrais de 2ª ordem
3. Diferenças centrais de 4ª ordem

Considere incrementos espaciais $h = 10, 1, 0.1, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 2 \times 10^{-5}$. A figura 2.3 mostra os resultados obtidos.

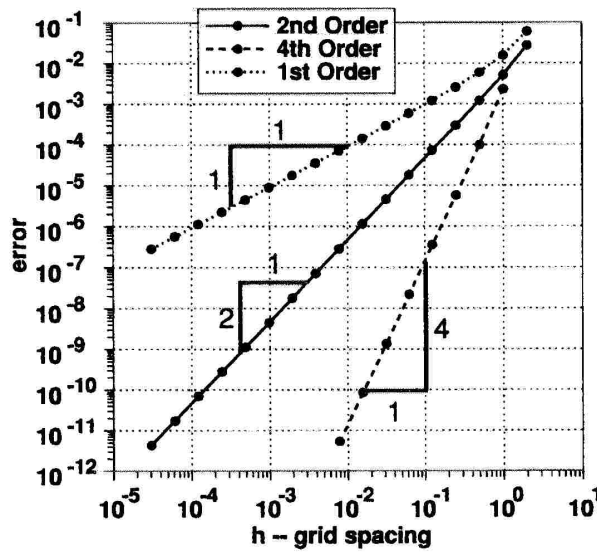


Figura 2.3: Ordem de precisão do exemplo 2.1

O decaimento do erro com a diminuição de h está de acordo com a ordem do erro de truncatura da fórmula de diferenças finitas. A ordem de precisão dá uma indicação da precisão das fórmulas de diferenças finitas e diz como é que o refinamento da malha melhora a precisão.

2.4 Malhas não uniformes

Quando a variável dependente é uma função não linear no domínio computacional poderá ser um desperdício usar malhas muito finas para discretizar todo o domínio. Será mais conveniente usar uma malha não uniforme para refinar nas regiões onde se espera que a solução contenha gradientes mais elevados. Se os pontos da malha não estão uniformemente espaçados vem por exemplo para o cálculo de $\partial\phi/\partial x$, em pontos $x_{i+1} - x_i = A\Delta x$ e $x_i - x_{i-1} = (1 + \alpha)\Delta x$

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) + \Delta x \frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3\phi}{\partial x^3} + \mathcal{O}((\Delta x)^4) \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \phi[x + (1 + \alpha)\Delta x] = \phi(x) + (1 + \alpha)\Delta x \frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{(1 + \alpha)^2(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \\ \frac{(1 + \alpha)^3(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3\phi}{\partial x^3} + \mathcal{O}((\Delta x)^4) \end{aligned} \quad (2.43)$$

Multiplicando a equação (2.42) por $-(1 + \alpha)$ e adicionando à equação (2.43) vem

$$\phi_i'' = 2 \left[\frac{\phi_{i-1}}{\Delta x(1 + \alpha)(\Delta x(1 + \alpha) + \Delta x)} - \frac{\phi_i}{\Delta x(1 + \alpha) + \Delta x} + \frac{\phi_{i+1}}{\Delta x(\Delta x(1 + \alpha) + \Delta x)} \right] \quad (2.44)$$

Uma outra técnica de ter em conta a não uniformidade da malha consiste em transformar o domínio discreto.

Para $\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$ a fórmula de diferenças finitas é dada transformando $0 \leq x \leq 1$ em $0 \leq \xi \leq \frac{\pi}{2}$. Outra transformação utilizada é, por exemplo, $\xi = \cos^{-1}x$. Para um espaçamento uniforme em ξ

$$\xi_j = \frac{\pi}{2N} j \quad j = 0, 1, 2, \dots, N \quad (2.45)$$

corresponde a uma malha não uniforme em x em que próximo de $x = 1$ a malha será muito fina e próximo de $x = 0$, a malha será muito espaçada, ver figura 2.4

De um modo geral a transformação

$$\xi = g(x) \quad (2.46)$$

leva a que as derivadas no novo sistema de coordenadas sejam dadas por:

$$\frac{df}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{df}{d\xi} = g' \frac{df}{d\xi} \quad (2.47)$$

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left[g' \frac{df}{d\xi} \right] = g'' \frac{df}{d\xi} + (g')^2 \frac{d^2f}{d\xi^2} \quad (2.48)$$

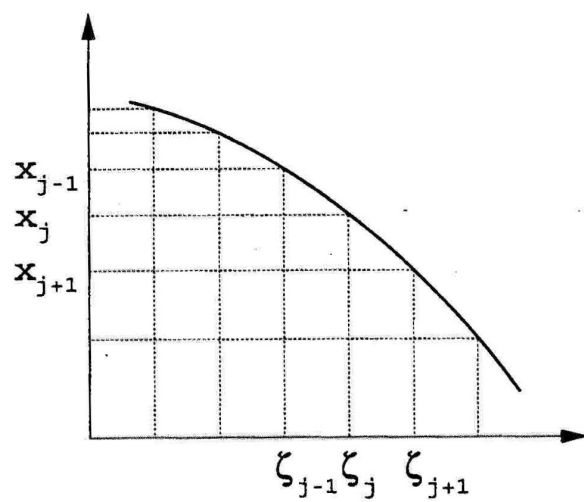


Figura 2.4: Transformação de coordenadas

assim diferenças finitas para malhas uniformes são usadas para $\frac{\partial f}{\partial \xi}$ e $\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2}$.

2.5 Condições Fronteiras de Dirichlet ou de von Neumann

As condições fronteiras podem classificar-se como pertencendo a 3 classes: Dirichlet, von Neumann e Mistas. Diz-se que uma condição fronteira é do tipo de Dirichlet quando a variável dependente é dada explicitamente, mesmo que esteja a variar por exemplo com o tempo. $\varphi(x, t)$ para $\varphi(0, t) = C_0(t)$ em que C_0 é uma função conhecida de t . Quando a derivada normal à fronteira é conhecida, a condição fronteira é do tipo de von Neumann. Por exemplo para a condução de calor estacionária com h , coeficiente de convecção, e K , condutividade.

A equação do calor unidimensional:

$$\frac{d\phi_1}{dt} = k \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.49)$$

na equação de diferenças finitas:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + r (\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n), \quad r = \frac{\Delta t K}{\Delta x^2} \quad (2.50)$$

para uma condição fronteira de convecção ou de Von Neumann:

$$-\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{h}{K}(\phi - \phi_{ref}) \quad (2.51)$$

com diferenças a jusante,

$$\frac{\phi_1 - \phi_0}{\Delta x} = \frac{h}{K}(\phi_0 - \phi_{ref}) \quad (2.52)$$

Se fosse com diferenças centrais há a necessidade de introduzir um ponto virtual $i = -1$.

$$\frac{\phi_1 - \phi_{-1}}{\Delta x} = \frac{h}{K}(\phi_0 - \phi_{ref}) \quad (2.53)$$

ϕ_{-1} pode ser eliminado através da aplicação da equação de diferenças finitas para o ponto $i = 0$, ou seja:

$$\phi_{-1} = -\frac{h\Delta x}{K}(\phi_0 - \phi_{ref}) + \phi_1 \quad (2.54)$$

$$\phi_0^{n+1} = \phi_0^n + r \left(\phi_1^n - \frac{h\Delta x}{K}(\phi_0^n - \phi_{ref}) - 2\phi_0^n + \phi_1^n \right) \quad (2.55)$$

O mesmo procedimento pode ser aplicado à fronteira para $i = N$. Por exemplo:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_N = C_B(t) \quad (2.56)$$

onde n é medido na direcção perpendicular à fronteira. Temos como exemplo

as condições fronteira de convecção num problema de transmissão de calor. A condição fronteira do tipo misto pode ser expressa por:

$$a_F(t)\phi_F + b_F(t) \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_F = c_F(t) \quad (2.57)$$

onde as funções a_F , b_F , c_F podem depender da posição F na fronteira e a_F e b_F têm o mesmo sinal. Por exemplo, se a condição fronteira é de:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_{0,t} = C_0(t) \quad (2.58)$$

vem que $a_0(t) = 0$ e $b_0(t) = -1$ para um problema mais concreto como seja de convecção nas fronteiras:

$$k \frac{\partial \phi}{\partial x} = h(\phi - \phi_{ref}) \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{h}{k}(\phi - \phi_{ref}) \quad (2.60)$$

2.6 Estrutura da Matriz de Coeficientes

A equação de Laplace e de Poisson são exemplos típicos de equações elípticas que em coordenadas cartesianas na forma bidimensional são expressas respectivamente por:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = f(x, y) \quad (2.62)$$

Aproximando por diferenças centrais as segundas derivadas, vem que:

$$\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} = 0 \quad (2.63)$$

A molécula computacional de cinco pontos está representada na figura 2.5.

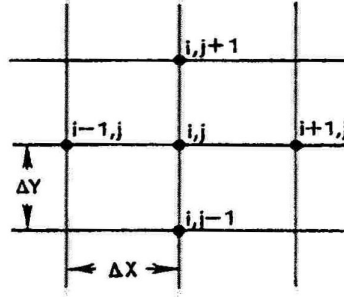


Figura 2.5: Molécula computacional envolvendo cinco pontos

A equação de Laplace também poderia ser discretizada por diferenças finitas de ordem mais elevada como por exemplo por diferenças centrais de 4ª. ordem

$$\begin{aligned} & \frac{-\phi_{i-2,j} + 16\phi_{i-1,j} - 30\phi_{i,j} + 16\phi_{i+1,j} - \phi_{i+2,j}}{12(\Delta x)^2} + \\ & + \frac{-\phi_{i,j-2} + 16\phi_{i,j-1} - 30\phi_{i,j} + 16\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j+2}}{12(\Delta y)^2} = 0 \end{aligned} \quad (2.64)$$

em que a molécula computacional está representada na figura 2.6

A discretização de segundas derivadas só raramente é que é feita com fórmulas de diferenças de 4ª. ordem. Rearranjando os termos, vem que, para segunda ordem de precisão:

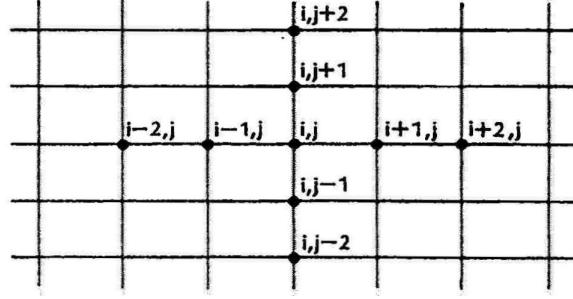


Figura 2.6: Molécula computacional envolvendo nove pontos

$$\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j} + \left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right)^2 (\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}) = 0 \quad (2.65)$$

Definindo a razão do espaçamento da malha por β , tal que, $\beta = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ a equação 2.66 aparece como:

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \beta^2 \phi_{i,j+1} + \beta^2 \phi_{i,j-1} - 2(1 + \beta^2) \phi_{i,j} = 0 \quad (2.66)$$

Equações elípticas requerem sempre a solução de sistemas de equações. É assim fundamental perceber a estrutura da matriz de coeficientes. Consideramos uma malha de 6x6 como ilustrado na figura 2.7. As condições fronteira são:

$$\begin{aligned} x=0 \phi &= u_2, & y=0 \phi &= u_1 \\ x=L \phi &= u_4, & y=H \phi &= u_3 \end{aligned} \quad (2.67)$$

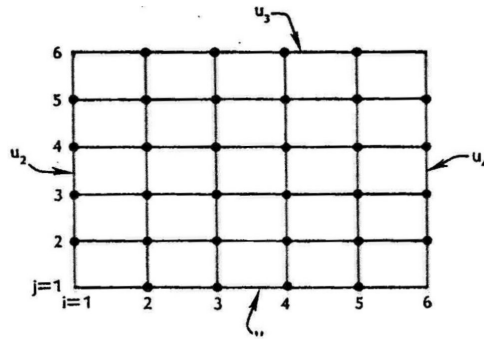


Figura 2.7: Malha computacional

Aplicando a equação 2.66 a todos os pontos interiores do domínio computacional,

vem que:

$$\begin{aligned}
\phi_{3,2} + \phi_{1,2} + \beta^2 \phi_{2,3} + \beta^2 \phi_{2,1} - 2(1 + \beta^2) \phi_{2,2} &= 0 \\
\phi_{4,2} + \phi_{2,2} + \beta^2 \phi_{3,3} + \beta^2 \phi_{3,1} - 2(1 + \beta^2) \phi_{3,2} &= 0 \\
\phi_{5,2} + \phi_{3,2} + \beta^2 \phi_{4,3} + \beta^2 \phi_{4,1} - 2(1 + \beta^2) \phi_{4,2} &= 0 \\
\phi_{6,2} + \phi_{4,2} + \beta^2 \phi_{5,3} + \beta^2 \phi_{5,1} - 2(1 + \beta^2) \phi_{5,2} &= 0 \\
\phi_{5,3} + \phi_{1,3} + \beta^2 \phi_{2,4} + \beta^2 \phi_{2,2} - 2(1 + \beta^2) \phi_{2,3} &= 0 \\
\phi_{4,3} + \phi_{2,3} + \beta^2 \phi_{3,4} + \beta^2 \phi_{3,2} - 2(1 + \beta^2) \phi_{3,3} &= 0 \\
\phi_{5,3} + \phi_{3,3} + \beta^2 \phi_{4,4} + \beta^2 \phi_{4,2} - 2(1 + \beta^2) \phi_{4,3} &= 0 \\
\phi_{6,3} + \phi_{4,3} + \beta^2 \phi_{5,4} + \beta^2 \phi_{5,2} - 2(1 + \beta^2) \phi_{5,3} &= 0 \\
\phi_{3,4} + \phi_{1,4} + \beta^2 \phi_{2,5} + \beta^2 \phi_{2,3} - 2(1 + \beta^2) \phi_{2,4} &= 0 \\
\phi_{4,4} + \phi_{2,4} + \beta^2 \phi_{3,5} + \beta^2 \phi_{3,3} - 2(1 + \beta^2) \phi_{3,4} &= 0 \\
\phi_{5,4} + \phi_{3,4} + \beta^2 \phi_{4,5} + \beta^2 \phi_{4,3} - 2(1 + \beta^2) \phi_{4,4} &= 0 \\
\phi_{6,4} + \phi_{4,4} + \beta^2 \phi_{5,5} + \beta^2 \phi_{5,3} - 2(1 + \beta^2) \phi_{5,4} &= 0 \\
\phi_{3,5} + \phi_{1,5} + \beta^2 \phi_{2,6} + \beta^2 \phi_{2,4} - 2(1 + \beta^2) \phi_{2,5} &= 0 \\
\phi_{4,5} + \phi_{2,5} + \beta^2 \phi_{3,6} + \beta^2 \phi_{3,4} - 2(1 + \beta^2) \phi_{3,5} &= 0 \\
\phi_{5,5} + \phi_{3,5} + \beta^2 \phi_{4,6} + \beta^2 \phi_{4,4} - 2(1 + \beta^2) \phi_{4,5} &= 0 \\
\phi_{6,5} + \phi_{4,5} + \beta^2 \phi_{5,6} + \beta^2 \phi_{5,4} - 2(1 + \beta^2) \phi_{5,5} &= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix}
\alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & \alpha & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\beta^2 & 0 & 0 & 0 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 & \beta^2 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 1 & \alpha
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\phi_{2,2} \\
\phi_{3,2} \\
\phi_{4,2} \\
\phi_{5,2} \\
\phi_{2,3} \\
\phi_{3,3} \\
\phi_{4,3} \\
\phi_{5,3} \\
\phi_{2,4} \\
\phi_{3,4} \\
\phi_{4,4} \\
\phi_{5,4} \\
\phi_{2,5} \\
\phi_{3,5} \\
\phi_{4,5} \\
\phi_{5,5}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
-u_{1,2} - \beta^2 u_{2,1} \\
-\beta^2 u_{3,1} \\
-\beta^2 u_{4,1} \\
-u_{6,3} - \beta^2 u_{3,1} \\
-u_{1,3} \\
0 \\
0 \\
-u_{6,3} \\
-u_{1,4} \\
0 \\
0 \\
-u_{4,4} \\
-u_{1,5} - \beta^2 u_{3,6} \\
-\beta^2 u_{3,6} \\
-\beta^2 u_{4,6} \\
-u_{6,5} - \beta^2 u_{5,6}
\end{bmatrix}$$

onde

$$\alpha = -2(1 + \beta^2) \quad (2.68)$$

A estrutura da matriz de coeficientes é pentadiagonal e é uma matriz definida positiva. Não existe na literatura uma notação única para o método de diferenças finitas. Ou se usa uma notação indicial para localizar as variáveis no domínio computacional, como a apresentada até aqui, ou como vários autores usam uma notação de pontos cardeais, com Sul, Norte, Este e Oeste em torno do ponto P . Em vários livros de texto a notação para designar os pontos da malha em volta de (i, j) é substituída por pontos cardeais, N, S, E, W em torno do ponto P como mostra a figura 2.7. Vamos seguidamente discretizar a equação de convecção difusão para um problema unidimensional.

Exemplo 2-3

Obter a equação de diferenças finitas e a matriz de coeficientes da equação de convecção difusão:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho U \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (2.69)$$

Para o problema unidimensional com é discretização por diferenças centrais

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho U \phi) \right]_i = \frac{(\rho U \phi)_{i+1} - (\rho U \phi)_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$

O termo difusivo também é discretizado por diferenças centrais

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right]_i &= \frac{\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ &= 2 \frac{\Gamma_{\phi, i+\frac{1}{2}} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i} - \Gamma_{\phi, i-\frac{1}{2}} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \end{aligned}$$

O coeficiente difusivo só é conhecido nos pontos e é necessário o seu valor entre os nós:

$$\Gamma_{\phi, i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i+1})$$

$$\Gamma_{\phi, i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i-1})$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right]_i &= (\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i+1}) \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} - \\ &\quad - (\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i-1}) \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} \end{aligned}$$

Re-arranjando os termos, ficamos com a equação de diferenças finitas para cada ponto

$$a_p^i \phi_i = a_E^i \phi_{i+1} + a_W^i \phi_{i-1}$$

onde:

$$\begin{aligned} a_E^i &= -\frac{(\rho U)_{i+1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \frac{\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i+1}}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ a_W^i &= -\frac{(\rho U)_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \frac{\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i-1}}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ a_P^i &= -\frac{\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i+1}}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} + \frac{\Gamma_{\phi, i} + \Gamma_{\phi, i-1}}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} \end{aligned}$$

Pela equação de continuidade temos

$$(\rho U)_{i+1} = (\rho U)_{i-1}$$

que reservando o coeficiente da diagonal principal:

$$a_P^i = a_E^i + a_W^i$$

Na forma matricial o sistema de equações resultante da aplicação da equação de diferenças finitas a todos os pontos

$$\begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ i, j \\ \vdots \\ N-1 \\ N \end{matrix} \begin{bmatrix} a_E^1 & -a_W^1 & & & & \\ -a_W^2 & a_P^2 & -a_E^2 & & & \\ & \vdots & -a_W^i & a_P^i & -a_E^i & \\ & & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & 0 & & & -a_W^N & a_P^N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_{i-1} \\ \phi_i \\ \phi_{i+1} \\ \vdots \\ \phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_W^1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ a_E^N \phi_{N+1} \end{bmatrix}$$

onde o valor de ϕ_0 e ϕ_{N+1} é conhecido através das condições fronteira. Para obter a solução é necessário inverter a matriz triadiagonal.

Para um problema bidimensional de convecção/difusão:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho U \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho V \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = q_\phi$$

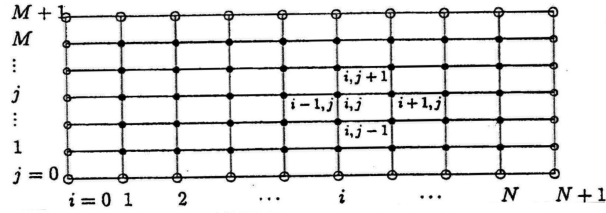


Figura 2.8: Malha do Problema Bidimensional

Usando diferenças centrais para discretizar as primeiras e segundas derivadas obtém-se a equação de diferenças finitas que se pode escrever na forma:

$$a_P^{i,j} \phi_{i,j} = a_E^{i,j} \phi_{i+1,j} + a_W^{i,j} \phi_{i-1,j} + a_N^{i,j} \phi_{i,j+1} + a_S^{i,j} \phi_{i,j-1} + Q_{i,j}$$

em que os coeficientes vêm dados por:

$$\begin{aligned} a_E^i &= -\frac{(\rho U)_{i+1,j}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \frac{\Gamma_{\phi,i,j} + \Gamma_{\phi,i+1,j}}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ a_W^i &= -\frac{(\rho U)_{i-1,j}}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \frac{\Gamma_{\phi,i,j} + \Gamma_{\phi,i-1,j}}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ a_N^i &= -\frac{(\rho V)_{i,j+1}}{y_{i+1} - y_{i-1}} + \frac{\Gamma_{\phi,i,j} + \Gamma_{\phi,i,j+1}}{(y_{i+1} - y_i)(y_{i+1} - y_{i-1})} \\ a_S^i &= -\frac{(\rho V)_{i,j-1}}{y_{i+1} - y_{i-1}} + \frac{\Gamma_{\phi,i,j} + \Gamma_{\phi,i,j-1}}{(y_{i+1} - y_{i-1})(y_{i+1} - y_{i-1})} \end{aligned}$$

2.7 Aproximação de Padé

O número de pontos e sua localização, que cada fórmula de diferenças finitas envolve para o cálculo de uma derivada, é conhecido como a molécula computacional. Pode-se perguntar qual será a fórmula de cálculo da derivada no ponto j , com um menor erro de truncatura envolvendo um dado número, prescrito, de pontos e também das derivadas f' em outros pontos. As aproximações Padé seguem este raciocínio, fazendo envolver, por exemplo, f'_j, f'_{j+1} e f'_{j-1} e os valores de função f, f_{j+1} e f_{j-1} , ou seja dado

$$f'_j + a_3 f'_{j+1} + a_4 f'_{j-1} = a_0 f_j + a_1 f_{j-1} + a_2 f_{j+1} \quad (2.70)$$

em que se pretende encontrar os coeficientes $a_i, i = 0, 1, \dots, 4$ de modo a maximizar a ordem de aproximação. A tabela 2.7 mostra os coeficientes da expansão em série de Taylor, ou seja, cada linha apresenta os coeficientes das derivadas envolvidas, por exemplo:

	f'	f''	f'''	f^{iv}	f^v
f'_j	0	1	0	0	0
$a_0 f'_j$	a_0	0	0	0	0
$a_1 f'_{j+1}$	a_1	$a_1 h$	$a_1 \frac{h^2}{2}$	$a_1 \frac{h^3}{6}$	$a_1 \frac{h^4}{24}$
$a_2 f'_{j-1}$	a_2	$-a_2 h$	$a_2 \frac{h^2}{2}$	$-a_2 \frac{h^3}{6}$	$-a_2 \frac{h^4}{24}$
$a_3 f'_{j+1}$	0	a_3	$a_3 h$	$a_3 \frac{h^2}{2}$	$a_3 \frac{h^3}{6}$
$a_4 f'_{j-1}$	0	a_4	$-a_4 h$	$-a_4 \frac{h^2}{2}$	$-a_4 \frac{h^3}{6}$

Tabela 2.4: Coeficientes da série de Taylor

$$a_1 f_{j+1} = +a_1 f_j + a_1 h f'_j + a_1 \frac{h^2}{2} f''_j + a_1 \frac{h^3}{6} f'''_j + \dots \quad (2.71)$$

de modo a determinar a ordem de precisão mais elevada dever-se anular o maior número de termos de ordem pequena

$$\begin{aligned}
 a_0 + a_1 + a_2 &= 0 \\
 a_1 h - a_2 h + a_3 + a_4 &= -1 \\
 a_1 \frac{h^2}{2} + a_2 \frac{h^2}{2} + a_3 h - a_4 h &= 0 \\
 a_1 \frac{h}{3} - a_2 \frac{h}{3} + a_3 + a_4 &= 0 \\
 a_1 \frac{h}{4} + a_2 \frac{h}{4} + a_3 - a_4 &= 0
 \end{aligned} \quad (2.72)$$

a solução do sistema (2.72) conduz a

$$a_0 = 0; \quad a_1 = -\frac{3}{4h}; \quad a_2 = \frac{3}{4h}; \quad a_3 = a_4 = \frac{1}{4} \quad (2.73)$$

Substituindo na coluna e rearranjando conduz à fórmula de Padé

$$f'_{j+1} + f'_{j-1} + 4f'_j = \frac{3}{h}(f_{j+1} - f_{j-1}) + \frac{h^4}{30}f_j^0 \quad (2.74)$$

onde $j = 1, 2, 3, \dots, n-1$. A equação (2.74) conduz a um sistema de equações lineares para o cálculo de f'_j . Há $(n-1)$ equações para $(n+1)$ incógnitas. Alteração especial deve ser dada próximo das fronteiras. Usualmente baixa-se a ordem e usam-se diferenças progressivas ou regressivas para f'_o e f'_n . Por exemplo:

$$\begin{aligned} f'_0 + 2f'_1 &= \frac{1}{h} \left(-\frac{5}{2}f_0 + 2f_1 + \frac{1}{2}f_2 \right) \\ f'_n + 2f'_{n-1} &= \frac{1}{h} \left(\frac{5}{2}f_n - 2f_{n-1} - \frac{1}{2}f_{n-2} \right) \end{aligned} \quad (2.75)$$

Na forma matricial (2.74) e (2.75) aparecem como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f'_0 \\ f'_1 \\ f'_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ f'_{n-1} \\ f'_n \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -\frac{5}{2}f_0 + 2f_1 + \frac{1}{2}f_2 \\ 3(f_2 - f_0) \\ 3(f_3 - f_1) \\ \vdots \\ \vdots \\ 3(f_n - f_{n-2}) \\ \frac{5}{2}f_n - 2f_{n-1} - \frac{1}{2}f_{n-2} \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

A inversão da matriz triadiagonal é simples e rápida e permite o cálculo da derivada em cada ponto. Este procedimento leva a uma ordem de precisão de 4ª ordem em que a aproximação aumenta o domínio de número de onda (frequências) que se podem resolver, ver figura 2.9. Aproximações de Padé são globais porque fazem envolver todos os pontos na molécula computacional ao longo da direcção que se pretende a derivada. É possível estender a aproximação Padé a qualquer outra derivada e por exemplo para a 2ª derivada vem:

$$\frac{1}{12}f''_{i-1} + \frac{10}{12}f''_i + \frac{1}{12}f''_{i+1} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \quad (2.77)$$

Lele (1992) apresentou aproximações de Padé para a 1ª e 2ª derivadas até à 10ª ordem de aproximação. Considerando a expressão (2.78):

$$\begin{aligned} \beta(\phi_x)_{i-2,j} + \alpha(\phi_x)_{i-1,j} + (\phi_x)_{i,j} + \alpha(\phi_x)_{i+1,j} + \beta(\phi_x)_{i+2,j} = \\ c \frac{\phi_{i+3,j} - \phi_{i-3,j}}{6h} + b \frac{\phi_{i+2,j} - \phi_{i-2,j}}{4h} + a \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2h} \end{aligned} \quad (2.78)$$

As tabelas 2.5 e 2.6 listam os coeficientes para as aproximações à 1ª e 2ª derivadas.

Nº Diagonais da Matriz	α	β	a	b	c	Ord.	Erro de Truncatura
3	$\frac{1}{4}$	0	$\frac{3}{2}(\alpha+2)$	0	0	4^a	$\frac{4}{5!}(3\alpha-1)h^4\phi^5$
3	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{3}{2}(\alpha+2)$	$\frac{1}{4}(4\alpha-1)$	0	6^a	$\frac{4}{7!}h^6\phi^7$
5	$\frac{4}{9}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{2}{9}(8-3\alpha)$	$\frac{1}{18}(57\alpha-17)$	0	8^a	$-\frac{16}{9!}h^8\phi^9$
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{6}(12-7\alpha)$	$\frac{1}{150}(586\alpha-183)$	$\frac{1}{50}(9\alpha-4)$	10^a	$\frac{144}{11!}h^{10}\phi^{11}$

Tabela 2.5: Coefientes da aproximação de Padé para a 1^a derivada.

Nº de Diagonais Matriz	α	β	a	b	c	Ord.	Erro de Truncatura
3	$\frac{1}{10}$	0	$\frac{4}{3}(1-\alpha)$	$\frac{1}{3}(10k-1)$	0	4^a	$h^4\phi^6$
3	$\frac{2}{11}$	0	$\frac{12}{11}$	$\frac{3}{11}$	0	6^a	$h^6\phi^8$
5	$\frac{344}{1179}$	$\frac{38\alpha-9}{214}$	$\frac{696-1191\alpha}{428}$	$\frac{2454\alpha-294}{535}$	0	8^a	$h^8\phi^{10}$
5	$\frac{344}{899}$	$\frac{43}{1798}$	$\frac{1065}{1798}$	$\frac{1038}{1798}$	$\frac{79}{1798}$	10^a	$h^{10}\phi^{12}$

Tabela 2.6: Coefientes da aproximação de Padé para a 2^a derivada.

É de esperar que se a solução for dada for uma função seno com uma frequência elevada, obrigue a uma malha muito fina, ou seja, deve haver muito mais de que dois pontos por comprimento de onda caso contrário, a aproximação de derivadas induzirá um erro que não é admissível.

O método de número de onda aproximado permite verificar quais as frequências que a fórmula de diferenças finitas consegue resolver. É de esperar que sendo "φ" uma função sinusoidal, para baixas frequências, ou seja grandes comprimentos de onda, as fórmulas de diferenças finitas de baixa ordem têm suficiente resolução para o cálculo das derivadas. De modo oposto, para frequências altas, só as fórmulas de alta ordem devem ser aplicadas e mesmo assim com fortes limitações de precisão. Para ilustrar o procedimento, considere uma função de uma harmonia de período L .

$$f(x) = e^{ikx} \quad (2.79)$$

onde K é o número de onda (ou frequência) que toma os seguintes valores

$$K = \frac{2\pi}{L}n, n = 0, 1, 2, \dots, N/2 \quad (2.80)$$

em que N é o número de pontos em x . $x_i = \frac{L}{N}j$, $j = 0, 1, 2, \dots, N - 1$. A derivada exacta de (2.79) é

$$\frac{df}{dx} = ikf \quad (2.81)$$

Uma fórmula de diferenças finitas de 2ª ordem central para a primeira derivada:

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h} \quad (2.82)$$

em que $h = L/N$ é o incremento espacial do domínio de comprimento, L , com o número de pontos total N .

Substituindo (2.79) em (2.81) vem:

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_j = \frac{e^{i2\pi n(j+1)/N} - e^{i2\pi n(j-1)/N}}{2h} = \frac{e^{i2\pi n/N} - e^{-i2\pi n/N}}{2h} f_j \quad (2.83)$$

ou seja

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_j = i \frac{\sin(2\pi n/N)}{h} f_j = ik' f_j \quad (2.84)$$

$$k' = \frac{\sin(2\pi n/N)}{h} \quad (2.85)$$

A equação (2.84) mostra que a aproximação à derivada conserva a mesma forma excepto que k vem modificado por k' (Número de onda modificado). De um modo análogo é possível obter valores de k' para o presente caso da 1ª derivada. A figura 2.9 mostra a evolução do número de onda exacto, (linha

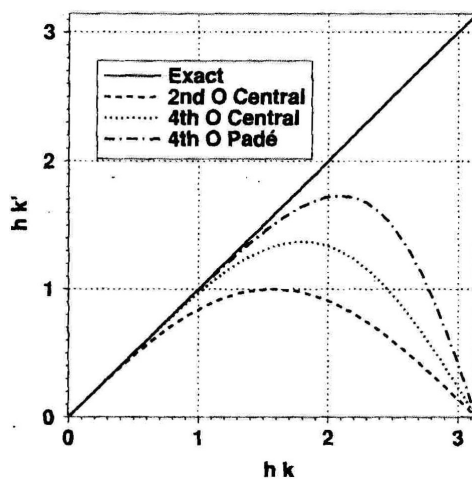


Figura 2.9: Número de onda modificada

recta) com os valores de uma fórmula de diferenças finitas central de 2ª ordem ou 4ª ordem de precisão e também com uma aproximação Padé.

Para valores elevados de k a função varia rapidamente no domínio e as fórmulas de diferenças finitas fornecem uma precisão bastante fraca para a 1ª derivada. Da equação 2.80 e de acordo com $h = L/N$ vem que

$$k = \frac{2\pi}{h} \frac{n}{N} n = 0, 1, 2, \dots, N/2$$

deste modo aumentando o número de pontos N para, por exemplo, $2N$ permite aumentar a gama de frequência resolvíveis pelo esquema numérico.

2.8 Resumo do Capítulo

O aluno deve saber:

- Gerar fórmulas de diferenças finitas usando Série de Taylor ou aproximação polinomial ou fórmulas genéricas.
- Gerar fórmulas de diferenças finitas para a derivada de ordem m , por diferenças progressivas ou regressivas ou centrais de ordem n
- Gerar fórmulas de diferenças finitas de derivadas cruzadas
- Gerar fórmulas de diferenças finitas em malhas não uniformes
- Saber o que significa a ordem de precisão e suas consequências
- Gerar os erros de truncatura de quaisquer fórmulas de diferenças
- Saber obter aproximações a derivadas de 1ª ordem ou 2ª ordem por operadores compactos centrais
- Saber obter uma equação de diferenças finitas e incorporar as condições fronteira
- Saber obter a matriz de coeficientes para a equação de diferenças finitas com a incorporação de condições fronteira

2.9 Referências

- [1] Ames, W. F. (1977). Numerical Methods for Partial Differential Equation, 2nd ed., New York, Academic Press
- [2] Collatz, L. (1966). The Numerical Treatment of Differential Equations, 3rd ed., Berlin, Springer Verlag
- [3] Lapidus, L and Pinder G. (1982). Numerical Solution of Partial Differential Equation in Science and Engineering, Wiley
- [4] Moin P.(2001). Fundamentals of Engineering Numerical Analysis, Cambridge Univiversity Press
- [5] Roache, P. J. (1976). Computational Fluid Dynamics, Hermosa Pub., Albuquerque, New Mexico
- [6] Lele, S. K., J. Comput. Physics, 103, vol 16, 1992
- [7] Hirsch, C. “Numerical Computation of Internal and External Flows Vol. 1”, Wiley, 1986

2.10 Problemas

P1. Aplique a série de Taylor à expressão geral da forma:

$$(\phi_x)_i = a\phi_{i+2} + b\phi_{i+1} + c\phi_i + d\phi_{i-1} + e\phi_{i-2}$$

- (a) Obtenha a aproximação de precisão de 4^a. ordem para a primeira derivada no ponto i .
- (b) Repita o mesmo procedimento para a 2^a. derivada $(u_{xx})_i$ com o mesmo número de pontos. Calcule o erro de truncatura em ambos os casos.

P2. Obtenha os coeficientes a , b e c das fórmulas de diferenças centrais para:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i &= \frac{(-\phi_{i+2} + a\phi_{i+1} - c\phi_{i-1} + \phi_{i-2})}{c} + \left(\frac{\Delta x^4}{30} \frac{\partial^5\phi}{\partial x^5}\right) \\ \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i &= \frac{(-\phi_{i+2} + a\phi_{i+1} - b\phi_i + c\phi_{i-1} - \phi_{i-2})}{d\Delta x^2} + \frac{1}{90}\Delta x^2 \left(\frac{\partial^6\phi}{\partial x^6}\right) \\ \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i &= \frac{(-\phi_{i+2} - a\phi_{i+1} + b\phi_{i-1} - \phi_{i-2})}{c\Delta x^2} + \frac{1}{4}\Delta x^2 \left(\frac{\partial^5\phi}{\partial x^5}\right) \\ \left(\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right)_i &= \frac{(\phi_{i+2} - a\phi_{i+1} + b\phi_i - c\phi_{i-1} + \phi_{i-2})}{\Delta x^4} - \frac{\Delta x^2}{6} \left(\frac{\partial^6\phi}{\partial x^6}\right) \end{aligned}$$

P3. Obtenha os coeficientes a , b e c das fórmulas de diferenças finitas:

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_i &= \frac{\phi_{i+2,j} - a\phi_{i+1,j} + b\phi_{i,j} - c\phi_{i-1,j} + \phi_{i-2,j}}{\Delta x^4} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_i &= \frac{-\phi_{i+3,j} + a\phi_{i+2,j} - b\phi_{i+1,j} + c\phi_{i,j}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned}$$

P4. Prove que as seguintes igualdades são verdadeiras através da diferenciação numérica por diferenças finitas:

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_i &= \frac{\phi_{i+2,j} - 2\phi_{i+1,j} + 2\phi_{i-1,j} - \phi_{i-2,j}}{2\Delta x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_i &= \frac{2\phi_{i,j} - 5\phi_{i-1,j} + 4\phi_{i-2,j} - \phi_{i-3,j}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_i &= \frac{-\phi_{i+2,j} + 8\phi_{i+1,j} - 8\phi_{i-1,j} + \phi_{i-2,j}}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_i &= \frac{-\phi_{i+2,j} + 16\phi_{i+1,j} - 30\phi_{i,j} + 16\phi_{i-1,j} - \phi_{i-2,j}}{12\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \end{aligned}$$

- P5. Prove que as seguintes expressões correspondem a aproximações de diferenças para derivadas parciais mistas:

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} &= \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i+1,j-1}}{\Delta y} - \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta y} \right) + \mathcal{O}(\Delta x \Delta y) \\ \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} &= \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\Delta y} - \frac{\phi_{i-1,j+1} - \phi_{i-1,j}}{\Delta y} \right) + \mathcal{O}(\Delta x \Delta y) \\ \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} &= \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j-1}}{2\Delta y} - \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} \right) + \mathcal{O}[\Delta x, (\Delta y)^2] \\ \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right|_{i,j} &= \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} - \frac{\phi_{i-1,j+1} - \phi_{i-1,j-1}}{2\Delta y} \right) + \mathcal{O}[\Delta x, (\Delta y)^2]\end{aligned}$$

- P6. Obtenha um gráfico semelhante ao da figura 2.9 mas correspondente à segunda derivada de $f = \exp(ikx)$ em que a segunda derivada é $-k^2 f$. A aplicação de uma fórmula de diferenças finitas para a segunda derivada confuz a $-k'^2 f$, em que k'^2 se denomina pelo número de onda modificado para a segunda derivada. Plote os valores de $k'^2 h^2$ em função de kh no intervalo $0 \leq kh \leq \pi$ e os valores de $k^2 h^2$ também em função de kh . Considere os operadores de finitas:

- (a) Diferenças centrais: $f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$.
- (b) Fórmula de Padé para a segunda derivada.
- (c) Diferenças centrais de 4ª ordem de precisão.

- P7. Considere as equações $\text{div}(\text{grad}(\phi)) = 0$ e $\nabla^2 \phi = 0$ na forma unidimensional. O domínio discreto é formado por uma malha não uniforme $\Delta x_{i+1} = r\Delta x_i$. Pretende-se obter fórmulas de diferenças finitas centrais e de 2ª ordem (quando em malha uniforme), para as derivadas. Apresente as fórmulas para malha não uniforme e analise os erros de truncatura obtidos para ambas as formas da mesma equação matemática, (Exame 2005, 1ª chamada)

- P8. Obtenha a equação de diferenças finitas compacta de 4ª ou de 6ª ordem para a solução de $a \frac{\partial \phi}{\partial x} = b\phi + c$ no domínio $\Omega \in [0, 1]$ em que a , b e c são constantes. Supondo condições fronteira $\phi = \phi_1, \phi = \phi_2$ respectivamente para os pontos $x = 0$ e $x = 1$, com o domínio com 7 pontos, apresente as modificações para implementar as condições fronteira e a sua justificação. (Exame 2005, 1ª chamada)

- P9. Considere $\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial U}{\partial x}$ e o seu desenvolvimento $\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial \mu}{\partial x} \frac{\partial U}{\partial x}$ em que $\mu = \mu(x)$.

- (a) Justifique se ambas as expressões, aproximadas por fórmulas de diferenças finitas centrais de 2ª ordem para as derivadas, têm o mesmo erro de truncatura numa malha uniforme ou não uniforme, $\Delta x_{i+1} = r\Delta x_i$. (Exame 2005, 2ª chamada)

- (b) Se aproximar

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = -\frac{1}{2\Delta x} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_{i-1} \right] + \frac{2}{\Delta x^2} (U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}),$$

qual seria a ordem de precisão, numa malha uniforme, da aproximação se usar diferenças finitas centrais de 2^a ordem para a primeira derivada? Verifique para $U = \sin x$.

- (c) Considere a equação $\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} + b \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$ em $x \in [0, 1]$ e $y \in [0, 1]$ com condições periódicas em $x = 0$ e $x = 1$, e $y = 0$ e $y = 1$ em que a e b são constantes. Considere um esquema temporal explícito e obtenha as equações de diferenças finitas compactas de 4^a ordem num domínio com 4x3 pontos.
- (d) Apresente a dedução da fórmula compacta de 4^a ordem central para a segunda derivada numa malha uniforme.
- P10. Considerando a função $f(x) = \frac{\sin x}{x^3}$ num domínio discreto com incremento espacial h , pretende-se:
- (a) Derivar as fórmulas das diferenças finitas de 2^a e 4^a ordem.
- (b) Estimar a ordem de grandeza do erro, de cada derivada, em relação à solução analítica.
- (c) Obter o valor da segunda derivada em diferenças finitas compactas.
- P11. Pretende-se calcular numericamente a rotação do escoamento atmosférico desde o vento geostrófico a 3000m até à superfície da Terra. Este fenómeno é governado pelas equações de Ekman para a camada limite planetária (PBL - Planetary Boundary Layer):

$$\begin{aligned} K \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f v &= 0 \\ K \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + f (U_g - u) &= 0 \end{aligned}$$

Para tal:

- (a) Discretizar as equações com um esquema de diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão.
- (b) Discretizar a equação acoplada (4^a derivada) com um esquema de diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão.
- (c) Comparar os resultados obtidos com a solução exacta das equações.

Para cada alínea, apresentar os resultados de perfil de u , de v e do ângulo α (ângulo entre a direcção do vento na camada limite e a direcção do vento geostrófico) para os seguintes valores de viscosidades:

$$K = 0.001; 1.00; 10 [m^2/s]$$

- P12. Consideremos um escoamento inviscido bidimensional de um fluido inviscido que entra numa câmara, como representado na figura P2.12. Pretende-se calcular a função linha de corrente no interior da câmara. Para um escoamento incompressível a equação da continuidade vem expressa por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

A função linha de corrente pode ser definida de tal modo que:

$$\begin{cases} u &= \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ v &= -\frac{\partial \psi}{\partial x} \end{cases}$$

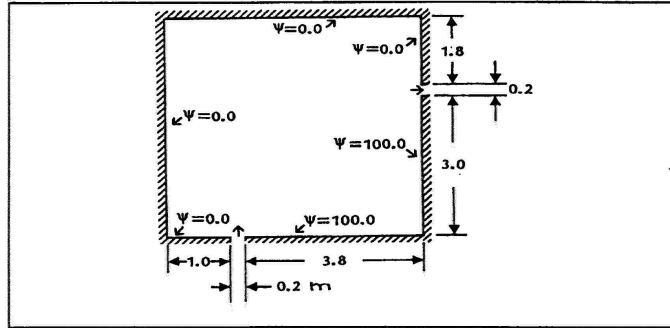


Figura P2.12: Desenho da configuração geométrica e condições fronteira do problema 12

Substituindo pela função linha de corrente:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0$$

Assim a solução desta equação, que é uma equação elíptica, permite calcular a função linha de corrente no interior da câmara, com as condições fronteira dadas na figura P2.12. Para a solução do problema, divida o domínio num número de pontos discretos através de uma malha computacional, em que, o espaçamento Δx e Δy é igual a $0.2m$. A condição inicial

é de $\psi = 0$ no interior do domínio. Considere que a solução numérica convergiu quando o máximo erro no interior do domínio é menor do que $\Delta\psi = 0.01$, entre duas iterações consecutivas. Represente perfis de ψ ao longo de y , para $x = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0$ e 5.0 . Represente valores da isofunção de corrente.

- P13. Considere o escoamento potencial na figura P2.13. O potencial de velocidades à entrada é dado por:

$$\phi = Ax$$

onde A é uma constante igual a 1.

Usando o método de diferenças finitas, calcule os valores da função linha de corrente.

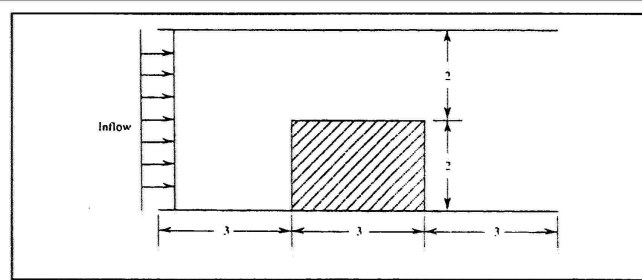


Figura P2.13: Figura do problema 13