Aula 02 - Método de diferenças finitas*

Daniel Coelho†

Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)
Depto. de Engenharia Mecânica (MECAN)
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PPG-EM)

21 de novembro de 2020

*FEN03-05100: Tópicos Especiais em Engenharia Mecânica I
†Aluno de mestrado (PPG-EM)

Índice

Introdução

Aproximações por diferenças finitas

- Na última aula, a derivada na equação diferencial ordinária (EDO) foi aproximada por diferenças finitas.

- A aproximação foi através de uma fórmula que vem do **truncamento** de uma série infinita, a **série de Taylor***:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (x - x_0)^k \, \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} \ ,$$

- onde $f(x)$ é uma função analítica e k-vezes diferenciável no ponto x_0, em torno do qual é definido este **polinômio de Taylor** de ordem k.

*No caso particular $x_0 = 0$, essa série se chama **série de Maclaurin**.

Aproximações por diferenças finitas

- Trivialmente, para a primeira derivada (utilizada na primeira aula):

$$f'(x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} + \mathcal{O}(x - x_0) \,,$$

- Portanto, vamos **generalizar** e **manipular** essas aproximações para representar derivadas de primeira ordem, segunda ordem, quarta ordem, etc.*

*A ordem da derivada e a ordem do truncamento são coisas distintas.

Erros de arredondamento e truncamento

- Erros de **arredondamento** são os erros introduzidos por computadores que simulam a aritmética real ou complexa por aritmética de ponto flutuante (operações básicas). Esses erros estão associados à **precisão da máquina** (*machine epsilon* $\sim 10^{-15}$);

- Erros de **truncamento** local, ou de **discretização**, são erros introduzidos por um algoritmo que substitui quantidades contínuas (**infinitas** ou infinitesimais) por outras discretas (**finitas**).

- Métodos numéricos lidam diretamente com os erros de truncamento, que em geral **dominam** sobre os erros de arredondamento.*

---

*O somatório desses erros é comumente chamado de **erro global**; cometido no cálculo de uma solução numérica.

Consistência, estabilidade e convergência

Conceitos fundamentais:

- **Consistência**: o problema discreto é uma aproximação do diferencial. Com isso, temos um erro de truncamento local, $\mathcal{O}(h^p)$, com ordem de consistência p.
- **Estabilidade**: os erros da solução diminuem durante o procedimento de solução. Isto é, a solução numérica
- **Convergência**: a medida que a malha é refinada, a solução do problema discreto aproxima-se da solução do problema diferencial.
- Para problemas lineares, vale o **teorema (equivalência) de Lax**: consistência + estabilidade = convergência.

Método das Diferenças Finitas (MDF)

Série de Taylor

- Uma função $f(x)$ pode ser descrita pelo seguinte polinômio de Taylor:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (x - x_0)^k \, \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} =$$
$$= f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x_0) + \frac{\Delta x^3}{3!} f'''(x_0) + \dots \, ,$$

onde $\Delta x = x - x_0$.

- Generalizando essa fórmula, em torno da variável x (ao invés de x_0):

$$x_0 \longrightarrow x \, , \quad x \longrightarrow x + \Delta x \, , \quad \Delta x \equiv x - x_0$$

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x) + \frac{\Delta x^3}{3!} f'''(x) + \dots$$

Fórmulas de diferenças finitas

- Agora nós podemos construir quaisquer fórmulas de diferenças finitas utilizando essas séries (adotando $h = \Delta x$):

$$f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots\,, \tag{1}$$

$$f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots\,, \tag{2}$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2h\,f'(x) + \frac{4h^2}{2!}f''(x) + \frac{8h^3}{3!}f'''(x) + \dots\,, \tag{3}$$

$$f(x-2h) = f(x) - 2h\,f'(x) + \frac{4h^2}{2!}f''(x) - \frac{8h^3}{3!}f'''(x) + \dots\,. \tag{4}$$

- Comumente nos referimos ao valor da função f no ponto do domínio computacional x_i, de modo que:

$$\begin{gathered} f(x_i) = f_i\,, \quad f(x_i+h) = f_{i+1}\,, \quad f(x_i-h) = f_{i-1}\,, \\ f'(x_i) = f'_i\,, \quad f(x_i+2h) = f_{i+2}\,, \quad f(x_i-2h) = f_{i-2}\,, \ \dots \end{gathered}$$

Derivada de primeira ordem

Diferença progressiva:

- Inclinação da reta que conecta os pontos (x_i, f_i) e (x_{i+1}, f_{i+1}):

$$f'(x_i) = f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + \mathcal{O}(h) \,, \tag{5}$$

Diferença regressiva:

- Inclinação da reta que conecta os pontos (x_{i-1}, f_{i-1}) e (x_i, f_i):

$$f'(x_i) = f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + \mathcal{O}(h) \,, \tag{6}$$

- Ambas são aproximações de primeira ordem, $\mathcal{O}(h)$, para a derivada de primeira ordem.

Derivada de primeira ordem

Diferença centrada (ou central):

- Obtida subtraindo a Eq.(1) da Eq.(2):

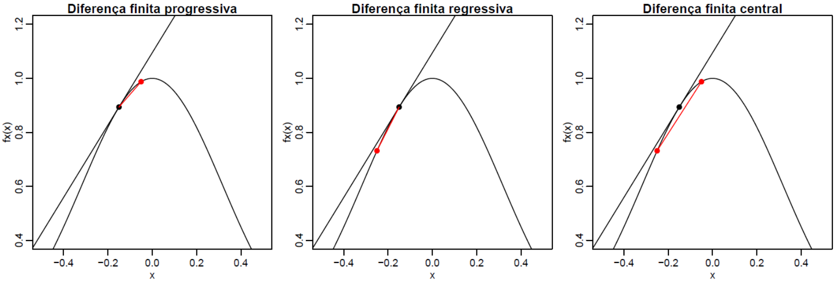
$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2h\, f_i' + \mathcal{O}(h^3)$$
$$\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = f_i' + \mathcal{O}(h^2)$$

- Inclinação da reta que conecta os pontos (x_{i-1}, f_{i-1}) e (x_{i+1}, f_{i+1}):

$$f'(x_i) = f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)\,, \qquad (7)$$

- Esta é uma **aproximação de segunda ordem**, $\mathcal{O}(h^2)$, para a **derivada de primeira ordem**.

Derivada de primeira ordem



- Qualitativamente, é possível observar que a inclinação utilizando a diferença centrada é **mais próxima** do valor da derivada da função f no ponto preto.
- Ou seja, a inclinação calculada numericamente utilizando diferença centrada oferece uma **melhor aproximação** quando comparada às demais (progressiva e regressiva).

Derivada de segunda ordem

Diferença centrada (ou central):

- Obtida somando as Eq.(1) e Eq.(2):

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2f_i + 2\frac{h^2}{2!}f_i'' + \mathcal{O}(h^4)$$
$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = f_i'' + \mathcal{O}(h^2)$$

- Fórmula de diferença centrada com três pontos para a derivada segunda:

$$f''(x_i) = f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)\ , \tag{8}$$

- Esta é uma **aproximação de segunda ordem**, $\mathcal{O}(h^2)$, para a **derivada de segunda ordem**.

Problema de Valor Inicial (PVI)

Problema de Valor Inicial (PVI)

- Um PVI é um problema de **evolução**, no qual a informação inicial (conhecida), é propagada para o interior do domínio pela equação diferencial.
- Para **exemplificar**, apresenta-se um PVI* simples para uma função $u \equiv u(t)$, na seguinte forma:

$$u' = \lambda u \,, \quad t \geqslant 0 \tag{9}$$

$$u(t_0) = u_0 \tag{10}$$

- A solução analítica (exata) dessa EDO é: $u(t) = u_0\, e^{\lambda(t-t_0)}$

*Nesse caso, o Problema de Cauchy

Método de Euler: Explícito

Euler explícito ("Forward")

- É o mesmo procedimento do Exercício 1 da primeira aula.
- Equivale ao método da diferença progressiva.

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda u^n$$

- Portanto: $u^{n+1} = (1 + \lambda \Delta t) u^n$

Método de Euler: Implícito

Euler implícito ("Backward")

- Equivale ao método da diferença regressiva.

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda u^{n+1}$$

- Portanto: $(1 - \lambda \Delta t)u^{n+1} = u^n \iff u^{n+1} = (1 - \lambda \Delta t)^{-1} u^n$
- Foi necessário inverter o "operador" do lado esquerdo da equação.

Método de Crank-Nicolson

- Também conhecido como a **regra dos trapézios***.
- **Generalizando** os métodos de Euler para $0 \leqslant \theta \leqslant 1$:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda \left[\theta u^{n+1} + (1 - \theta) u^n\right]$$

θ	**Método**
0	Euler explícito
1/2	Crank-Nicolson
1	Euler implícito

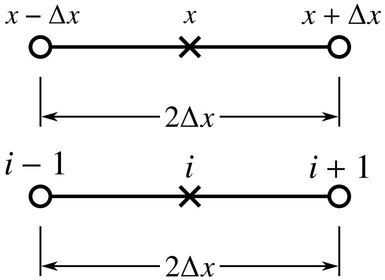
*Pode ser demonstrado a partir da definição de integração.

Analogia

Diferença centrada: espaço

$$\frac{du}{dx} = \lambda u$$

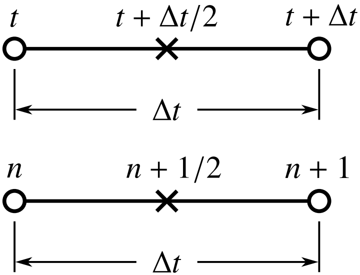
$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = \lambda u_i$$



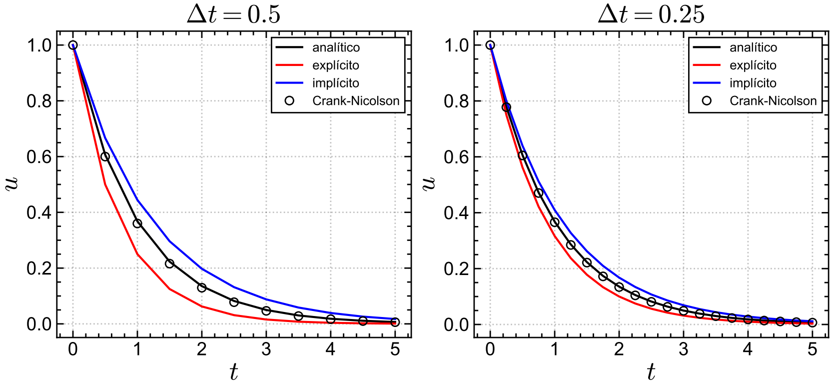
Crank-Nicolson: tempo

$$\frac{du}{dt} = \lambda u$$

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$$



Resultados



$\Delta t = 0.5$
$\Delta t = 0.25$
analítico
explícito
implícito
Crank-Nicolson
u
t
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
1
2
3
4
5

Análise Numérica do PVI

Consistência

Euler explícito:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda u^n + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$\left[u' - \frac{\Delta t}{2!} u'' \right]^n = \lambda u(t^n) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Euler implícito:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda u^{n+1} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$\left[u' - \frac{\Delta t}{2!} u'' \right]^{n+1} = \lambda u(t^{n+1}) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

- Ambos os métodos são consistentes de ordem 1, e
- conforme $\Delta t \longrightarrow 0$ a **equação de diferenças aproxima-se da equação diferencial** com um erro de truncamento local com ordem $\mathcal{O}(\Delta t)$.

Consistência

Crank-Nicolson:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

$$\left[u' - \frac{\Delta t}{2!} u'' \right]^{n+1/2} = \frac{\lambda}{2} \left[u(t^{n+1}) - u(t^n) \right] + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

- Esse método é consistente de ordem 1, e
- conforme $\Delta t \longrightarrow 0$ a **equação de diferenças aproxima-se da equação diferencial** com um erro de truncamento local com ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Estabilidade

- Adotamos a seguinte notação para solução exata para o problema discreto e numérica, respectivamente: $u^*(t^n)$ e u^n. Logo, o **erro global** é definido como:

$$e^n = u^*(t^n) - u^n$$

$$e^{n+1} = u^*(t^{n+1}) - u^{n+1}$$

Estabilidade

Euler explícito:

- Solução da eq. discreta: $u^*(t^{n+1}) = (1 + \lambda \Delta t) u^*(t^n)$
- Solução numérica: $u^{n+1} = (1 + \lambda \Delta t) u^n$
- Subtraindo ambas:

$$e^{n+1} = (1 + \lambda \Delta t) e^n$$

- Para que o erro global não aumente a cada passo, é necessário que

$$|1 + \lambda \Delta t| \leqslant 1$$

- Consequentemente, $-2 \leqslant \lambda \Delta t \leqslant 0$, e este é um método **condicionalmente estável**.

Estabilidade

Euler implícito:

- Solução da eq. discreta: $u^*(t^{n+1}) = (1 - \lambda\Delta t)^{-1} u^*(t^n)$
- Solução numérica: $u^{n+1} = (1 - \lambda\Delta t)^{-1} u^n$
- Subtraindo ambas:

$$e^{n+1} = (1 - \lambda\Delta t)^{-1} e^n$$

- Para que o erro global não aumente a cada passo, é necessário que

$$\left|\frac{1}{1 - \lambda\Delta t}\right| \leqslant 1$$

- Consequentemente, $\lambda\Delta t \leqslant 0$, e este é um método **incondicionalmente estável**.

Estabilidade

Crank-Nicolson:

- Solução da eq. discreta: $u^*(t^{n+1}) = (1+\lambda\Delta t)(1-\lambda\Delta t)^{-1}u^*(t^n)$
- Solução numérica: $u^{n+1} = (1+\lambda\Delta t)(1-\lambda\Delta t)^{-1}u^n$
- Subtraindo ambas:

$$e^{n+1} = \frac{(1+\lambda\Delta t)}{(1-\lambda\Delta t)}e^n$$

- Para que o erro global não aumente a cada passo, é necessário que

$$\left|\frac{1+\lambda\Delta t}{1-\lambda\Delta t}\right| \leqslant 1$$

- Consequentemente, $\lambda\Delta t \leqslant 0$, e este é um método **incondicionalmente estável**.

Convergência

Algumas "p-normas" para o cálculo do erro:

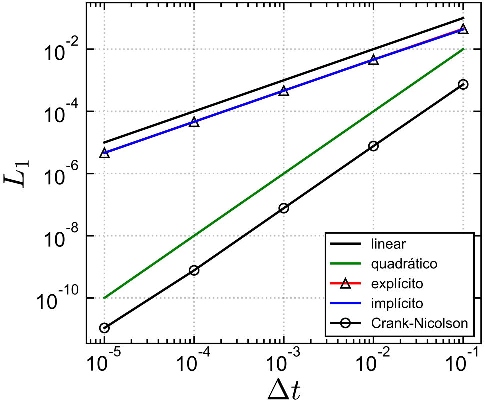
- Norma L_1:

$$L_1 = \frac{\sum_{i=0}^{N} |u_i - u_i^*|}{\sum_{i=0}^{N} |u_i^*|}$$

- Norma L_2:

$$L_2 = \left(\frac{\sum_{i=0}^{N} |u_i - u_i^*|^2}{\sum_{i=0}^{N} |u_i^*|^2} \right)^{1/2}$$

onde u é a solução numérica e u^* é a solução analítica.



Conclusões

Conclusões

- Existem várias formas de utilizar o MDF para discretização de uma EDO.
- Considerando o PVI estudado, observamos:

Método	**Consistência**	**Estabilidade**	**Convergência**
Euler explícito	Sim, $\mathcal{O}(\Delta t)$	condicional	$\propto \Delta t$
Euler implícito	Sim, $\mathcal{O}(\Delta t)$	incondicional	$\propto \Delta t$
Crank-Nicolson	Sim, $\mathcal{O}(\Delta t^2)$	incondicional	$\propto \Delta t^2$

- Existem ainda outros métodos de ordem mais alta para PVIs, como o **Runge-Kutta de quarta ordem (RK4)**, que apesar de ser explícito (condicionalmente estável), possui alta precisão.*

*O método RK4 impõe uma forte restrição sobre a escolha do tamanho do passo de tempo.

dúvidas, comentários, *feedbacks*,...

Contate-nos!

Daniel Coelho
danielcoelho.uerj@gmail.com
coelho.daniel@posgraduacao.uerj.br

Luís H. Carnevale
lh.carnevale@gmail.com

website
dancoelho.github.io

GESAR
Group for Environmental Studies in Reservoirs

www.gesar.uerj.br