

Geofísica Computacional Aplicada

Método das Diferenças Finitas

Carlos H. S. Barbosa¹
José Luis Drummond Alves

24 de Julho de 2023



¹clshenry@lamce.coppe.ufrj.br

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

» CONTATOS:

- José Luis Drummond Alves
- Contato: jalves@lamce.coppe.ufrj.br

- Carlos Henrique dos Santos Barbosa
- Contato: clshenry@lamce.coppe.ufrj.br

- Bruno Souza Silva
- Contato: brunosi@lamce.coppe.ufrj.br

» MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

- Motivação: Operadores Diferenciais e Equação da Onda Sísmica
- Método das Diferenças Finitas
- Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor
 - Diferenças finitas para a derivada de primeira ordem
 - Diferenças finitas para a derivada segunda ordem
- Expressão Geral das Diferenças Finitas para as Derivadas de Primeira e Segunda Ordens

MOTIVAÇÃO

Operadores Diferenciais

Motivação: Operadores Matemáticos

OPERADORES DIFERENCIAIS

Campo Escalar: $\phi(x, y, z)$,

Campo Vetorial: $\vec{v} = (v_x \hat{i} + v_y \hat{j} + v_z \hat{k})$.

» **Gradiente:**

$$\nabla \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \hat{k}.$$

» **Divergente:**

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}.$$

Motivação: Operadores Matemáticos

OPERADORES DIFERENCIAIS

Campo Escalar: $\phi(x, y, z)$,

Campo Vetorial: $\bar{v} = (v_x \hat{i} + v_y \hat{j} + v_z \hat{k})$.

» **Laplaciano:**

$$\nabla \cdot \nabla \phi = \nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}.$$

» **Rotacional:**

$$\nabla \times \bar{v} = \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \hat{i} + \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \hat{j} + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \hat{k}$$

Motivação: Operadores Matemáticos

OPERADORES DIFERENCIAIS

Campo Escalar: ϕ

Campo Vetorial: $\vec{v} = (v_x \hat{i} + v_y \hat{j} + v_z \hat{k})$

Aplicação dos operadores aos campos escalar e vetorial.

	Campo de Entrada	Resultado
Gradiente ∇	ϕ	$\nabla \phi$ (Campo Vetorial)
Divergente $\nabla \cdot$	\vec{v}	$\nabla \cdot \vec{v}$ (Campo Escalar)
Rotacional $\nabla \times$	\vec{v}	$\nabla \times \vec{v}$ (Campo Vetorial)
Laplaciano ∇^2	ϕ	$\nabla^2 \phi$ (Campo Escalar)

Motivação: Formulações Equação da Onda Sísmica

Formulação 1: Equação da Onda Acústica

$$\nabla^2 p(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v^2(\mathbf{r})} \frac{\partial^2 p(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 i_v(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2},$$

- $p(\mathbf{r}, t)$ é o campo de pressão na posição $\mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z)$ no domínio Ω e tempo $t \in [0, T]$. Condições iniciais e de contorno adequadas são necessárias.

Formulação 2: Equação da Onda Acústica Heterogênea

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla p(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{1}{\kappa(\mathbf{r})} \frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial i_v(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \end{aligned}$$

- $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ é o campo de velocidades, $\rho(\mathbf{r})$ e $\kappa(\mathbf{r})$ representam a densidade de massa e módulo de compressibilidade do meio, respectivamente. $\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)$ é a densidade de forças externas e i_v a fonte sísmica.

MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

Método das Diferenças Finitas

- "A essência dos métodos numéricos está na discretização do contínuo. É esta discretização que torna o finito o problema e portanto viabiliza sua solução através de computadores" (Cunha, 1993),
- O objetivo do método das diferenças finitas aqui é aproximar as soluções de equações diferenciais, em específico as equações que descrevem a propagação do campo de ondas,
- O método das diferenças finitas substitui as derivadas das equações diferenciais que descrevem um determinado problema físico por aproximações conhecidas como diferenças finitas,
 - Na prática substitui-se as derivadas pela razão incremental que converge para o valor da derivada quando o incremento tende a zero,
 - Para entender isso, vamos olhar para a [definição de derivada](#),

Randall J. LeVeque (2007)

Método das Diferenças Finitas: A Derivada

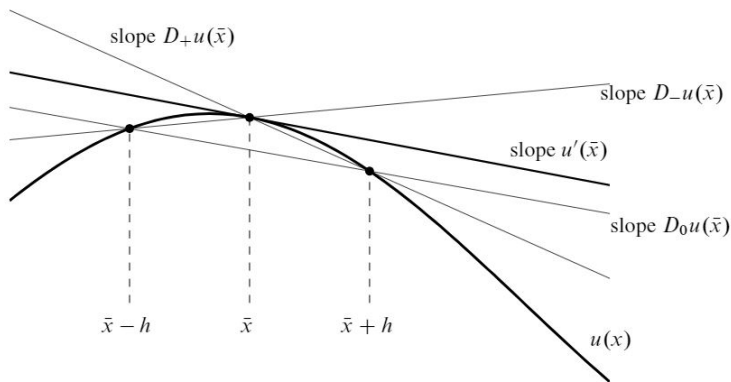
A derivada de uma função $u(x)$ no ponto x_0 é definida como:

$$u'(x_0) = \frac{d}{dx} u(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{u(x) - u(x_0)}{x - x_0}$$

Fazendo $h = x - x_0$, então:

$$u'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x_0 + h) - u(x_0)}{h}$$

Método das Diferenças Finitas

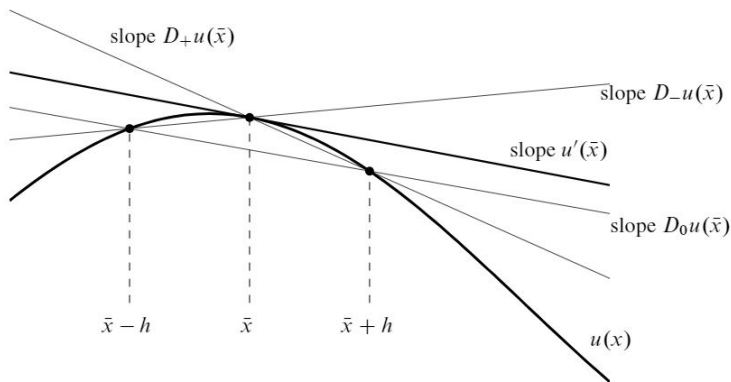


$$D_+u(\bar{x}) = \frac{u(\bar{x} + h) - u(\bar{x})}{h}$$

$$D_-u(\bar{x}) = \frac{u(\bar{x}) - u(\bar{x} - h)}{h}$$

Randall J. LeVeque (2007)

Método das Diferenças Finitas



$$D_0 u(\bar{x}) = \frac{u(\bar{x} + h) - u(\bar{x} - h)}{2h}$$

Método das Diferenças Finitas

- $D_+ u(\bar{x})$ é conhecido como diferença finita progressiva,
- $D_- u(\bar{x})$ é conhecido como diferença finita regressiva,
- $D_0 u(\bar{x})$ é conhecido como diferença finita centrada,

Pergunta: Há diferenças do ponto de vista numérico entre as formulações?

Método das Diferenças Finitas

» **Vamos tentar responder à pergunta anterior com um exemplo numérico**

Seja $u(x) = \sin(x)$ e $\bar{x} = 1$. Qual a derivada numérica de $u(\bar{x})$?
Saiba que $u'(1) = \cos(1) = 0,5403023$.

h	$D_+ u(\bar{x})$	$D_- u(\bar{x})$	$D_0 u(\bar{x})$
1.0e-01	-4.2939e-02	4.1138e-02	9.0005e-04
5.0e-02	-2.1257e-02	2.0807e-02	2.2510e-04
1.0e-02	-4.2163e-03	4.1983e-03	9.0050e-06
5.0e-03	-2.1059e-03	2.1014e-03	2.2513e-06
1.0e-03	-4.2083e-04	4.2065e-04	9.0050e-08

Método das Diferenças Finitas

Baseado nos resultados numéricos da tabela do slide anterior, o erro de cada derivada numérica pode ser escrito como:

- $D_+ u(\bar{x}) - u'(\bar{x}) \approx -0.42h,$
- $D_- u(\bar{x}) - u'(\bar{x}) \approx -0.42h,$
- $D_0 u(\bar{x}) - u'(\bar{x}) \approx 0.09h^2,$

Assim, o erro pode ser dado por:

Erro da aproximação por diferenças finitas

$$E(h) \approx Ch^p$$

Método das Diferenças Finitas

- Existem outras maneiras mais sofisticadas de se obter as aproximações das derivadas por diferenças finitas
- Mais que isso, é possível generalizar o método das diferenças finitas no sentido de ter aproximações mais acuradas e aproximações para derivadas de ordens mais altas

Ideias de alguma metodologia que pode ser aplicada?

Método das Diferenças Finitas: Fórmula de Taylor

Método de aproximação de uma função por um polinômio, com erro estimado.

Polinômio de Taylor: $f : I \rightarrow \mathcal{R}$ derivável em $\bar{x} \in I$ até ordem n . Assim, o polinômio de Taylor de ordem n de f em \bar{x} é dado por:

$$\mathcal{P}_n(\bar{x}) = f(\bar{x}) + f'(\bar{x})(x - \bar{x}) + \frac{f''(\bar{x})}{2!}(x - \bar{x})^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(\bar{x})}{n!}(x - \bar{x})^n.$$

- Se $n \rightarrow \infty$ este polinômio é a série de Taylor dada por:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\bar{x})}{n!} (x - \bar{x})^n.$$

Método das Diferenças Finitas: Fórmula de Taylor

» Exemplo:

Determinar $\mathcal{P}_6(0)$ da função $f(x) = e^x$.

$$\mathcal{P}_n(\bar{x}) = f(c) + f'(\bar{x})(x - \bar{x}) + \frac{f''(\bar{x})}{2!}(x - \bar{x})^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(\bar{x})}{n!}(x - \bar{x})^n,$$

$$\mathcal{P}_6(0) = f(0) + f'(0)(x) + \frac{f''(0)}{2!}(x)^2 + \frac{f'''(0)}{3!}(x)^3 + \cdots + \frac{f^{(6)}(0)}{6!}(x)^6,$$

Veja que $f = f' = f'' = f''' = f^{(4)} = f^{(5)} = f^{(6)} = e^x$, logo:

$$f(0) = e^0 = 1,$$

$$f'(0) = e^0 = 1,$$

.

.

.

$$f^{(6)}(0) = e^0 = 1.$$

Método das Diferenças Finitas: Fórmula de Taylor

» Exemplo:

Determinar $\mathcal{P}_6(0)$ da função $f(x) = e^x$.

Substituindo os valores da função e suas derivadas em 0, chegamos à:

$$\mathcal{P}_6(0) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!}.$$

Ou seja, nas proximidades de $x = 0$:

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!}.$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

Seja a série de Taylor:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\bar{x})}{n!} (x - \bar{x})^n.$$

Além disso, considere que $x = \bar{x} + h$. Com isso, a expansão em série de Taylor no ponto $\bar{x} + h$ é dada por:

$$f(\bar{x} + h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\bar{x})}{n!} (\bar{x} + h - \bar{x})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\bar{x})}{n!} h^n,$$

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

$$f(\bar{x} + h) = f(\bar{x}) + \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x}h + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} + \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^3}{3!} + \dots,$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Diferenças Finitas Progressivas: Derivada Primeira

Logo a derivada primeira pelo método das diferenças finitas progressivas é dada por:

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

onde:

$$\mathcal{O}(h) = -\frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h}{2!} - \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^2}{3!} + \dots,$$

é a ordem do erro da aproximação do método.

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Diferenças Finitas Regressivas: Derivada Primeira

Expansão da série de Taylor no ponto $\bar{x} - h$ é dada por:

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

Logo a derivada primeira pelo método das diferenças finitas regressivas é dada por:

$$\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} = \frac{f(\bar{x}) - f(\bar{x} - h)}{h} + \mathcal{O}(h),$$

com erro de ordem dada por:

$$\mathcal{O}(h) = \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h}{2!} - \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^2}{3!} + \dots,$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Diferenças Finitas Centradas: Derivada Primeira

Considere as expansões da série de Taylor nos pontos $\bar{x} + h$ e $\bar{x} - h$:

$$f(\bar{x} + h) = f(\bar{x}) + \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} h + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} + \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^3}{3!} + \dots,$$

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

Subtraindo-se as equações:

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

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Diferenças Finitas Centradas: Derivada Primeira

Logo a derivada primeira pelo método das diferenças finitas centradas é dada por:

$$\frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} = \frac{f(\bar{x} + h) - f(\bar{x} - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2),$$

com erro de ordem dada por:

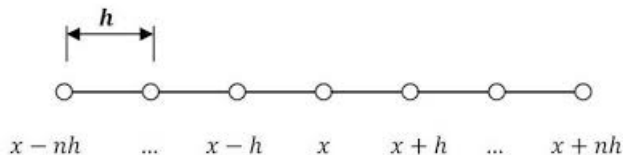
$$\mathcal{O}(h^2) = -\frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^2}{3!} - \frac{\partial^5 f(\bar{x})}{\partial x^5} \frac{h^4}{5!} \cdots,$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

- Temos a diferença finita progressiva $D_+ u(\bar{x})$,
- Temos a diferença finita regressiva $D_- u(\bar{x})$,
- Temos a diferença finita centrada $D_0 u(\bar{x})$,

Pergunta: Em que situações podemos utilizar cada uma delas?

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor



$$D_+ u(\bar{x})$$

$$D_0 u(\bar{x})$$

$$D_- u(\bar{x})$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

Formulação 1: Equação da Onda Acústica

$$\nabla^2 p(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v^2(\mathbf{r})} \frac{\partial^2 p(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0,$$

Formulação 2: Equação da Onda Acústica Heterogênea

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla p(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{1}{\kappa(\mathbf{r})} \frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial i_v(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \end{aligned}$$

Formulação 1 possui derivadas de segunda ordem.

Formulação 2 possui derivadas de primeira ordem.

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Diferenças Finitas Centradas: Derivada Segunda

Voltando as expansões da série de Taylor nos pontos $\bar{x} + h$ e $\bar{x} - h$:

$$f(\bar{x} + h) = f(\bar{x}) + \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} h + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} + \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^3}{3!} + \dots,$$

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

Somando as equações:

$$f(\bar{x} + h) + f(\bar{x} - h) = 2f(\bar{x}) + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{2h^2}{2!} + \frac{\partial^4 f(\bar{x})}{\partial x^4} \frac{2h^4}{4!} + \dots,$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Diferenças Finitas Centradas: Derivada Segunda

Logo a derivada de segunda ordem aproximada pelo método das diferenças finitas centradas é dada por:

$$\frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} = \frac{f(\bar{x} + h) - 2f(\bar{x}) + f(\bar{x} - h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2),$$

com erro de ordem dada por:

$$\mathcal{O}(h^2) = \frac{\partial^4 f(\bar{x})}{\partial x^4} \frac{2h^2}{4!} + \frac{\partial^6 f(\bar{x})}{\partial x^6} \frac{2h^4}{6!} + \dots,$$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Expandindo uma função $f(x)$ nos pontos $\bar{x} \pm h$, $\bar{x} \pm 2h$, ... chega-se à expressões que podem ser utilizadas na aproximação de derivadas:

$$f(\bar{x} + h) = f(\bar{x}) + \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} \frac{h}{1!} + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} + \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^3}{3!} + \dots$$

$$f(\bar{x} - h) = f(\bar{x}) - \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} \frac{h}{1!} + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{h^2}{2!} - \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{h^3}{3!} + \dots$$

$$f(\bar{x} + 2h) = f(\bar{x}) + \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} \frac{2h}{1!} + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{(2h)^2}{2!} + \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{(2h)^3}{3!} + \dots$$

$$f(\bar{x} - 2h) = f(\bar{x}) - \frac{\partial f(\bar{x})}{\partial x} \frac{2h}{1!} + \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x^2} \frac{(2h)^2}{2!} - \frac{\partial^3 f(\bar{x})}{\partial x^3} \frac{(2h)^3}{3!} + \dots$$

·
·
·

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

Exercício: Dada a expansão em série de Taylor da função $f(x)$ nos pontos $\bar{x} \pm h$, $\bar{x} \pm 2h$, obter a discretização de quarta ordem da derivada segunda e a ordem do erro.

Solução:

- » Desenvolvimento matemático até a solução.
- » Coeficientes das diferenças finitas.
- » Ordem do erro.

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Com a expansão pela série de Taylor é possível, então, deduzir expressão geral da discretização da **derivada de primeira ordem**:

$$\frac{\partial f}{\partial i} \approx \frac{1}{\Delta i} \left[\sum_{m=1}^{N/2} b_m (f_m - f_{-m}) \right],$$

- b_m são os coeficientes da discretização da derivada de primeira ordem,
- i diz respeito a variável de interesse,
- N é a ordem de discretização da derivada.
 - $N = 2$ » diferença finita de segunda ordem,
 - $N = 4$ » diferença finita de quarta ordem,
 - ...

Coeficientes das Diferenças Finitas

» Coeficientes da discretização da derivada de primeira ordem.

N	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5
2	$1/2$				
4	$2/3$	$-1/12$			
6	$3/4$	$-3/20$	$1/60$		
8	$4/5$	$-1/5$	$4/105$	$-1/280$	
10	$5/6$	$-5/21$	$5/84$	$-5/504$	$1/1260$

Método das Diferenças Finitas via Série de Taylor

» Com a expansão pela série de Taylor é possível, também, deduzir expressão geral da discretização da **derivada de segunda ordem**:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial i^2} \approx \frac{1}{\Delta i^2} \left[c_0 f_0 + \sum_{m=1}^{N/2} c_m (f_m + f_{-m}) \right],$$

- c_m são os coeficientes da discretização da derivada de segunda ordem,
- i diz respeito a variável de interesse,
- N é a ordem de discretização da derivada.
 - $N = 2$ » diferença finita de segunda ordem,
 - $N = 4$ » diferença finita de quarta ordem,
 - ...

Coeficientes das Diferenças Finitas

» Coeficientes da discretização da derivada de segunda ordem.

N	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
2	-2	1				
4	-5/2	4/3	-1/12			
6	-49/18	3/2	-3/20	1/90		
8	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560	
10	-5269/1800	5/3	-5/21	5/126	-5/1008	1/3150

Método das Diferenças Finitas

» O método das diferenças finitas avalia a derivada através de uma soma ponderada dos valores das funções na vizinhança de um determinado ponto.

- Série de Taylor,
- Interpolação polinomial de Lagrange,
- Truncamento da série convolutional do método Pseudo-espectral,
- Entre outros...

» Referências

- de Souza Silva, B. Avaliação de operadores convolucionais na solução da equação acústica da onda. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2014.
- Chu, C., & Stoffa, P. L. Determination of finite-difference weights using scaled binomial windows. Geophysics, 77(3), W17-W26, 2012.