Introdução

Dentro da modelagem físico-matemática o método das diferenças finitas (MDF) possui grande aceitação (CITAR) e larga aplicação (CITAR), seja pela simplicidade do método (CITAR) ou pelo baixo custo computacional (CITAR), mas possui desvantagens (CITAR) ao tratar malhas não regulares (CITAR), contornos móveis (CITAR) ou modelos matemáticos complexos (CITAR). Em especial a modelagem através do método das diferenças finitas pode apresentar artefatos numéricos de natureza não física que podem ter origem em soluções oscilatórias e propagação do erro no passo temporal.

Para evitar ou minimizar este tipo de artefatos é comum um estudo aprofundado da estabilidade, convergência e consistência da solução númerica modelada, isto se faz necessário pois os métodos tradicionais normalmente são direcionados para a discretização do sistema de equações resultante do modelo físico-matemático.

Os métodos miméticos em contrapartida constrõem um modelo matemático que modela a mecânica do contínuo de um dado sistema físico, isto é, propõe-se modelar as leis físicas constituintes do modelo como a lei de conservação de energia (CASTILLO; MIRANDA, 2013).

Motivação

mot

Objetivos

obj

Organização do trabalho

Este trabalho foi dividido em ...

Nunca:

- 1. usar verbos no futuro
- 2. Afirmar sem provar

Sempre:

 $28 \hspace{3cm} Introdução$

- 1. Referenciar tudo
- 2. figura e tabela precisa ser referenciada no texto e explicada

Parte I

Desenvolvimento

1 Rascunho

Neste capítulo, irei colocar tudo que foi utilizado para criação e preparação do trabalho e que ainda não esta em seu local correto.

Para realizar o trabalho precisamos construir algumas bases elas são:

1. Modelo matemático

- a) Conjunto de equações diferenciais ou integrais
- b) Condições iniciais
- c) Condições de contorno

2. Método de discretização

- a) Diferenças finitas
- b) Método mimético

3. Implementação computacional

- a) Implementação sequencial
- b) Implementação paralela

Com isto posto e trabalhado podemos realizar a análise e conclusão da presente dissertação.

(REESCREVER) diferenças entre a realidade e a simulacao pode mser encontrados por diversas razões como: 1. Desconhecimento da completa discrição do fenomeno; 2. Modelagem matemática é somente uma aproximação do problema físico; 3. Discretização é uma aproximação da modelagem matematica; e 4. Computação possui erros numericos seja por aproximação de numeros reais em pontos flutuantes de precisão finita. Ou seja, cada parte do método possui falhas inerentes que são propagadas, ainda assim, podemos estabelecer e analisar os problemas e estabelecer critérios para uma solucao ser aceitavel, outro ponto é que podemos aproximar a solução discretizada da solução analitica e usar métodos numéricos que propagam menos erros (este é o objeto de estudo deste trabalho) ou sejam mais rápidos.

1.1 A equação da onda

A equação da onda é objeto de estudo desde o século XVII quando foi primeiro analisada por matemáticos como Bernouli, Euler, Lagrange, d'Alambert (CITAR), co-

nhecimento este aprofundado no século XVIII por Fourier (CITAR) e no século XIX por Cauchy, Dirichelet e Riemann (CITAR).

Ainda muito visitada nos dias contemporâneos devido a sua ocorrência dentro dos fenômenos mecânicos, surge naturalmente em diversas áreas como eletromagnetismo, acústica, mecânica e dinâmica dos flúidos (CITAR).

É condensada em notação matemática da seguinte forma:

$$\nabla^2 U - \frac{1}{c(\mathbf{x})^2} U_{tt} = 0 \tag{1.1}$$

Onde U é uma função n-dimensional, U_{tt} é a segunda derivada parcial na varável t (normalmente representando o tempo), ∇^2 é o gradiente de segunda ordem também conhecido como $Laplaciano^1$, c é a velocidade do meio físico em um ponto dado, e o quadrado garante que ela será sempre positiva, a direção vem da própria função $U(\mathbf{x}, t)$.

É classificada como uma equação diferencial parcial hiperbólica de segunda ordem.

As EDP de segunda ordem são da forma:

$$aU_{xx} + 2bU_{xy} + cU_{yy} + dU_x + eU_y + f = 0 (1.2)$$

Onde a, b, c, d, e, f são constantes, classificamos então uma EDP como hiperbólica se e somente se dada matriz de coeficientes

$$X = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

a condição det(X) < 0 é satisfeita. No caso das equações hiperbólicas b = 0 e a ou c são negativos, desta forma o determinante é sempre negativo.

1.1.1 Intuição

Os estudos da equação da onde iniciaram com o objetivo de compreender o comportamento de uma corda vibrante em um instrumento musical (CITAR). Para construir uma intuição sobre o problema, vamos imaginar uma corda infinita tensionada (conforme a figura 1). Esta corda será então representada pela função $U(\mathbf{x},t)$, para o estudo do comportamento espacial podemos sem perda de generalidade fixar t, por exemplo t=0. Nesta representação iremos consideramos que não há transporte de massa, isto significa que cada ponto da corda desloca-se somente verticalmente.

Também pode ser visto como div (grad u) e seu cálculo é dado por $\nabla U = U_{x_1x_1} + U_{x_2x_2} + \ldots + U_{x_nx_n}$

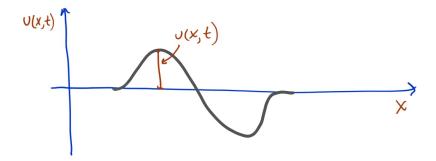


Figura 1 – Função $U(\mathbf{x},t)$ representando o deslocamento vertical que a onda aplica sobre uma corda infinita tensionada.

Observando mais detalhadamente o comportamento da corda, percebe-se que ao ser deslocada esta tende gerar uma força de reação para que cada ponto retorne ao seu estado de repouso. Podemos então representar de forma simplificada este força vertical aplicada a cada ponto como visto na figura 2.

A direção desta força vertical é dada pela concavidade da função U, foi demonstrado em (CITAR LIVRO DE ANALISE) que a concavidade é obtida ao aplicarmos a segunda derivada na função, neste caso U_{xx} .

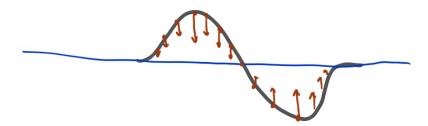


Figura 2 – Mostra os vetores força em alguns pontos da função U, com a direção representada pela concavidade e intensidade proporcional a segunda derivada U_{xx}

Esta força de retorno é maior nos pontos de maior deslocamento, atingido nos pontos de mínimo e máximo da função e é nula nos pontos onde a corda encontra-se na posição de repouso.

Para então entender o movimento de cada uma particula no tempo, consideremos que cada ponto da corda é uma partícula com massa pontual unitária e densidade uniforme. Pela segunda lei de Newton temos

A aceleração do movimento vertical é pela segunda derivada da função de deslocamento no tempo, isto é U_{tt} , substituindo temos:

$$F = m U_{tt}$$

Considerando que a força de deslocamento no tempo é proporcional a concavidade (será demonstrada a relação adiante) podemos concluir que:

$$U_{tt} = k U_{xx}$$

Para entender melhor esta constante de proporcionalidade faremos uma análise de dimensionalidade. Seja l uma medida de comprimento e t uma medida de tempo ambas unitárias temos:

$$U = l \tag{1.4}$$

$$U_{tt} = \frac{l}{t^2} \tag{1.5}$$

$$U_{xx} = \frac{l}{l^2} = \frac{1}{l} \tag{1.6}$$

Como:

$$k = \frac{U_{tt}}{U_{xx}} \tag{1.7}$$

$$k = \frac{\frac{l}{t^2}}{\frac{1}{l}} \tag{1.8}$$

$$k = \frac{l^2}{t^2} \tag{1.9}$$

Assim podemos considerar que $c^2=k$ que é representada pela razão comprimento por tempo, que é a grandeza física da velocidade.

1.1.2 Uma definição mais rigorosa

Ainda observando o fenômeno da corda vibratória, tomemos um intervalo infinitesimal em torno de um ponto x qualquer(figura 3). Para simplificar nosso modelo iremos fazer algumas considerações.

- 1. O movimento de cada ponto (partícula) é vertical;
- 2. A corda é perfeitamente flexível, isto é, não há resistência vertical;

- 3. A corda é perfeitamente elástica;
- 4. Consideraremos pequenas vibrações;
- 5. Não há transporte de massa.

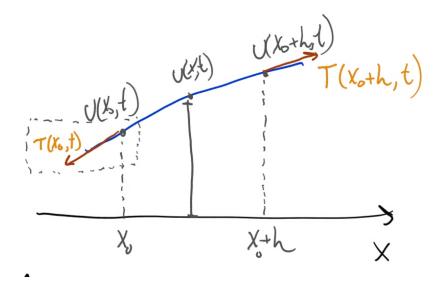


Figura 3 – Um intervalo infinitesimal da corda em torno do ponto \mathbf{x} , nos pontos x e x+h temos os vetores de tensão T, tangentes aos respectivos pontos.

Consideraremos a constante $\rho(x)$ como sendo a densidade da corda em um intervalo infinitesimal uniforme em torno do ponto x. A definição de massa então é dada por $m = \rho(x) \times L$. Sendo L o comprimento da corda no intervalo [x, x + h]. Como consideramos somente pequenas vibrações podemos aproximar o comprimento L, como o comprimento do intervalo, isto é

$$m = \rho\left(x\right) \times L \tag{1.10}$$

$$\approx \rho(x) \times (x + h - x) \tag{1.11}$$

$$= \rho\left(x\right) \times h \tag{1.12}$$

Para entender melhor as forças atuando sobre o ponto x no intervalo infinitesimal, podemos reescrever o vetor de tensão nas suas componentes espaciais $T = T_x + T_y$, onde $T_x = |T|\cos\theta$ e $T_y = |T|\sin\theta$, como mostrado na figura 4.

Como não ha transporte de massa e a particula se desloca verticalmente, conclui-se que a soma das componentes x dos vetores T(x,t) e T(x+h,t) deve ser igual a zero, de forma clara é necessário que em todo ponto x

$$T(x,t) + T(x+h,t) = 0 \ \forall t$$
 (1.13)

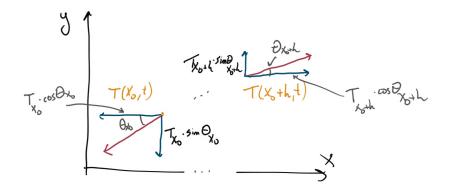


Figura 4 – Decomposição do vetor de tensão nas fronteiras do ponto x

seja verdadeiro.

Desta forma, as únicas forças atuantes sobre o ponto x são as componentes verticais dos vetores de tensão, assim

$$F(x,t) = |T(x+h,t)| \operatorname{sen} \theta - |T(x,t)| \operatorname{sen} \theta \tag{1.14}$$

Assim pela segunda lei de Newton e o que foi exposto temos

$$F = m a \tag{1.15}$$

$$|T(x+h,t)| \operatorname{sen} \theta - |T(x,t)| \operatorname{sen} \theta = \rho(x) h U_{tt}$$
 (1.16)

Dividindo por h

$$\frac{|T(x+h,t)| \operatorname{sen} \theta - |T(x,t)| \operatorname{sen} \theta}{h} = \rho(x) U_{tt}$$
(1.17)

Tomando o limite quando $h \to 0$

$$\lim_{h \to 0} \frac{|T(x+h,t)| \operatorname{sen} \theta - |T(x,t)| \operatorname{sen} \theta}{h} = \rho(x) U_{tt}$$
(1.18)

Pela definição de derivada:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[T(x,t) \operatorname{sen} \theta \right] = \rho(x) U_{tt}$$
(1.19)

A inclinação do vetor tensão é dada pela primeira derivada de U, isto é U_x . Podemos também escrever a inclinação como o vetor tangente ao ponto x. isto é $\tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta}$, como

consideramos somente pequenas oscilações $\cos\theta\approx 1$ então $\tan\theta\approx\sin\theta$, desta forma podemos escrever a equivalencia

$$sen \theta \approx U_x \tag{1.20}$$

Desta forma a equação 1.19 é reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[T(x, t) U_x \right] = \rho \left(x \right) U_{tt} \tag{1.21}$$

Considerando U uma função C^2 , uma corda prefeitamente elástica (T é constante) e $\rho(x)$ uniforme no intervalo infinitesimal. Podemos reescrever a equação 1.21 como:

$$TU_{xx} = \rho U_{tt} \tag{1.22}$$

$$U_{xx} = \frac{\rho}{T} U_{tt} \tag{1.23}$$

$$U_{xx} = c^2 U_{tt} (1.24)$$

Com $c=\sqrt{\frac{\rho}{T}}.~\rho$ a densidade sempre maior que 0 e T sempre positiva.

1.1.3 Uma solução para equação da onda

Iremos agora encontrar uma solução analítica para a equação da onda generalizada. Seja a equação

$$U_{tt} - c^2 U_{xx} = 0 (1.25)$$

Vamos supor uma função U(x,t) que é solução da equação da onda. Podemos então obter uma equação diferencial parcial de primeira ordem com da seguinte forma:

$$U_t + cU_x = 0 (1.26)$$

Esta EDP é tambem conhecida como equação do transporte pois aparece em problemas de transporte de massa. Não sabemos se U é solução da equação do transporte (1.26). Vamos supor que existe uma função W(x,t) que é resultado da equação do transporte em U. Ou seja:

$$U_t + cU_x = W(x, t) \tag{1.27}$$

Neste caso W é solução da equação do transporte oposta

$$W_t - cW_x = 0 (1.28)$$

pois

$$W_t - cW_x$$
 substitundo (1.27) (1.29)

$$= (U_t + cU_x)_t - c(U_t + c_U x)_x$$
 derivando (1.30)

$$= U_{tt} + cU_{xt} - cU_{tx} - c^2U_{xx} U \notin C^2 (1.31)$$

$$= U_{tt} + c^2 U_{xx} = 0 Por (1.25)$$

Então podemos afirmar que

$$U_{tt} - c^2 U_{xx} = 0 \iff \begin{cases} U_t + cU_x = W \\ W_t - cW_x = 0 \end{cases}$$

$$(1.33)$$

Analogamente temos

$$U_{tt} - c^2 U_{xx} = 0 \iff \begin{cases} U_t - cU_x = V \\ V_t + cV_x = 0 \end{cases}$$

$$\tag{1.34}$$

Assim pelas soluções da equação do transporte (CITAR OU PROVAR), temos:

$$U_t + cU_x = 0 \implies U(x, t) = p(x - ct) \tag{1.35}$$

e

$$U_t - cU_x = 0 \implies U(x, t) = q(x + ct) \tag{1.36}$$

com $p \in q$ sendo C^1 e pela linearidade temos

$$U(x,t) = p(x - ct) + q(x + ct)$$
(1.37)

sendo uma solução da equação da onda, conhecida como a forma de d'Alambert (CITAR). Para demonstrar a solução geral na forma de d'Alambert fazemos

$$U_t + cU_x = f(x - ct)$$
 solução da eq. do transporte (1.38)

$$U_t - cU_x = g(x + ct)$$
 solução da eq. do transporte reversa (1.39)

Assim somando (1.39) temos:

$$2U_t = f(x - ct) + g(x + ct) (1.40)$$

$$U_t = \frac{1}{2}f(x - ct) + \frac{1}{2}g(x + ct)$$
 (1.41)

e subtraindo (1.39) temos:

$$2cU_x = f(x - ct) - g(x + ct)$$
(1.42)

$$U_x = \frac{1}{2c}f(x - ct) - \frac{1}{2c}g(x + ct)$$
 (1.43)

Podemos então integrar cada uma das duas equações independentemente em t e x, sejam as antiderivadas F'=f e G'=g.

$$\int U_t dt = U(x,t) = \frac{1}{2c} F(x - ct) - \frac{1}{2c} G(x + ct) + h(x)$$
(1.44)

$$\int U_x dx = U(x,t) = \frac{1}{2c} F(x-ct) - \frac{1}{2c} G(x+ct) + h(t)$$
 (1.45)

Como U é solução nos dois casos $F(x) = G(t) \iff F(x) = G(t) = k$ com k constante, desta forma k não altera a forma da solução e podemos ignora-la para simplificar a forma final da solução. Desta forma temos a solução para equação da onda como:

$$U(x,t) = \frac{1}{2c}F(x-ct) - \frac{1}{2c}G(x+ct)$$
 (1.46)

sendo $\frac{1}{2c}$ uma constante, podemos então reescrever de forma mais geral:

$$U(x,t) = p(x - ct) + q(x + ct)$$
(1.47)

conforme queriamos demonstrar.

1.1.4 Forma de d'Alambert

Através da forma de d'Alambert para a equação da onda, iremos encontrar soluções que possuem uma condição inicial, seja então o problema de valor inicial dado por:

$$U_{tt} = c^2 U_{xx}$$
 equação da onda (1.48)

$$u(x,0) = f(x)$$
 posição inicial (1.49)

$$u_t(x,0) = g(x)$$
 velocidade inicial (1.50)

Por (1.47) temos

$$u(x,t) = p(x-ct) + q(x+ct)$$
 derivando em x (1.51)

$$u_t(x,t) = -cp'(x-ct) + cq'(x+ct)$$
(1.52)

e aplicando a condição inicial

$$u(x,0) = f(x) = p(x) + q(x)$$
(1.53)

$$u_t(x,0) = g(x) = -cp'(x) + cq'(x)$$
(1.54)

Nosso objetivo é encontrar as funções p(x,t) e q(x,t) de f(x) e g(x), para tal tomemos g(x) e seja a antiderivada G'(x) = g(x). Escolhemos G(x) na forma:

$$G(x) = -cp(x) + cq(x) \tag{1.55}$$

Reescrevendo p(x) e q(x) em função de f(x) e G(x) temos:

$$f(x) = p(x) + q(x) \tag{1.56}$$

$$G(x) = -cp(x) + cq(x) \tag{1.57}$$

$$\frac{1}{c}G(x) = -p(x) + q(x) \tag{1.58}$$

Somando (1.56) e (1.58)

(1.59)

$$f(x) + \frac{1}{c}G(x) = 2q(x) \tag{1.60}$$

$$\frac{1}{2}f(x) + \frac{1}{2c}G(x) = q(x) \tag{1.61}$$

Por outro lado, subtraindo (1.56) e (1.58)

(1.62)

$$f(x) - \frac{1}{c}G(x) = 2p(x)$$
 (1.63)

$$\frac{1}{2}f(x) - \frac{1}{2c}G(x) = p(x) \tag{1.64}$$

Reorganizando temos:

$$p(x) = \frac{1}{2}f(x) - \frac{1}{2c}G(x)$$

$$q(x) = \frac{1}{2}f(x) + \frac{1}{2c}G(x)$$
(1.65)

Aplicando (1.65) em (1.52)

$$U(x,t) = \frac{1}{2}f(x-ct) - \frac{1}{2c}G(x-ct) + \frac{1}{2}f(x+ct) + \frac{1}{2c}G(x+ct)$$

ou reorganizando

$$U(x,t) = \frac{1}{2} \left[f(x+ct) + f(x-ct) \right] + \frac{1}{2c} \left[G(x+ct) - G(x-ct) \right]$$
 (1.66)

Analizaremos G(x) com relação a g(x) em no intervalo $[x_0,x]$. Pela definição de anti-derivada temos:

$$G(x) = \int_{x_0}^x g(s)ds \tag{1.67}$$

Por (1.66) e o teorema fundamental do cálculo temos:

$$G(x+ct) - G(x-ct) = \int_{x_0}^{x+ct} g(s)ds - \int_{x_0}^{x-ct} g(s)ds$$
 (1.68)

$$= \int_{x_0}^{x+ct} g(s)ds + \int_{x-ct}^{x_0} g(s)ds$$
 (1.69)

$$= \int_{x-ct}^{x+ct} g(s)ds \tag{1.70}$$

Conseguimos encontrar uma relação de G(x) com g(x) assim, temos tudo necessário para descrever a solução da equação da onda com os valores iniciais descritas em (1.50).

$$U_{tt} = c^2 U_{xx} \tag{1.71}$$

$$U(x,0) = f(x) \tag{1.72}$$

$$U_t(x,0) = g(x) \tag{1.73}$$

cujo a solução é dada por

$$U(x,t) = \frac{1}{2} \left[f(x-ct) + f(x+ct) \right] + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(s)ds$$
 (1.74)

1.1.5 Separação de variáveis

Técnicas de separação de variáveis são uma ferramenta valiosa para a solução de EDPs lineares.

A ideia central consiste em decompor a função U(x,t) em duas outras funções V(x) e W(t) cada uma em uma única variável cujo a solução pode ser encontrada mais facilmente. Iniciamos então supondo que

$$U(x,t) = V(x)W(t) \tag{1.75}$$

exista e que esta solução seja uma combinação linear de soluções, na forma:

$$U(x,t) = \sum_{\lambda} U_{\lambda}(x,t) = \sum_{\lambda} V_{\lambda}(x) W_{\lambda}(t)$$
 (1.76)

Com λ sendo um parâmetro a ser encontrado para as famílias de soluções.

Seja então a equação da onda

$$u_{tt} = c^2 u_{xx} \tag{1.77}$$

Vamos supor que exista u(x,t) na forma

$$u(x,t) = v(x)w(t) \tag{1.78}$$

Assim

$$u_{tt} = v(x)w''(t) (1.79)$$

$$u_{xx} = v''(x)w(t) (1.80)$$

(1.81)

podemos então reescrever a equação da onda como:

$$v(x)w''(t) = c^2v''(x)w(t)$$
(1.82)

Separando os termos com as variáveis x e t, temos

$$\frac{w''(t)}{w(t)} = c^2 \frac{v''(x)}{v(x)} \tag{1.83}$$

Esta afirmação é verdadeira para todo x e t, se e somente cada um dos lados da igualdade forem constantes, escrevemos então como:

$$\frac{w''(t)}{w(t)} = c^2 \frac{v''(x)}{v(x)} = \lambda \tag{1.84}$$

Onde λ é a constante de separação que será utilizada para parametrização da equação da onda. Trabalhando isoladamente em cada variável temos

$$\frac{w''(t)}{w(t)} = \lambda \tag{1.85}$$

$$w''(t) = \lambda w(t) \tag{1.86}$$

 \mathbf{e}

$$\frac{v''(x)}{v(x)} = \lambda \tag{1.87}$$

$$v''(x) = \frac{\lambda}{c^2}v(x) \tag{1.88}$$

Agora iremos realizar a análise de sinal de λ , dividire-mos em três casos.

1.1.5.1 Análise de λ

Caso $\lambda = 0$:

$$v''(x) = \frac{\lambda}{c^2}v(x) = 0 {(1.89)}$$

$$w''(t) = \lambda w(t) = 0 (1.90)$$

Neste caso tanto v e w são da forma A+Bx e C+Dt, respectivamente. Desta forma as soluções podem ser escrita como:

$$u(x,t) = v(x)w(t) \tag{1.91}$$

$$= (A + Bx) * (C + Dt)$$
 (1.92)

$$= \alpha + \beta x + \gamma t + \zeta xt \tag{1.93}$$

e a base das soluções são geradas por:

$$u_{\lambda=0}(x,t) = \langle 1, x, t, xt \rangle \tag{1.94}$$

Caso $\lambda > 0$:

No caso positivo, vamos convenientemente escrever $\lambda=\omega^2$, desta forma esta garantido que λ seja sempre positivo.

$$v''(x) = \frac{\lambda}{c^2}v(x) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 v(x) \tag{1.95}$$

$$w''(t) = \lambda w(t) = \omega^2 w(t) \tag{1.96}$$

Esta EDO possui as soluções na forma:

$$w(t) = Ae^{\omega t} + Be^{-\omega t} \tag{1.97}$$

$$v(x) = Ae^{\frac{\omega}{c}x} + Be^{-\frac{\omega}{c}x} \tag{1.98}$$

(1.99)

Desta forma a base das soluções para o caso $\lambda > 0$ é:

$$u(x,t) = \langle e^{\omega\left(t+\frac{x}{c}\right)}, e^{\omega\left(t-\frac{x}{c}\right)}, e^{-\omega\left(t-\frac{x}{c}\right)}, e^{-\omega\left(t+\frac{x}{c}\right)} \rangle$$
 (1.100)

Caso $\lambda < 0$:

No caso negativo, vamos convenientemente escrever $\lambda = -(\omega^2) < 0$, desta forma esta garantido que ω^2 seja sempre positivo e λ sempre negativo.

$$v''(x) = \frac{\lambda}{c^2}v(x) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2v(x) \tag{1.101}$$

$$w''(t) = \lambda w(t) = -\left(\omega^2\right) w(t) \tag{1.102}$$

Esta EDO possui as soluções na forma:

$$w(t) = A \operatorname{sen} \omega t + B \cos \omega t \tag{1.103}$$

$$v(x) = A \sin \frac{\omega}{c} x + B \cos \frac{\omega}{c} x \tag{1.104}$$

(1.105)

Desta forma a base das soluções para o caso $\lambda < 0$ é:

$$u(x,t) = \langle \cos \omega t \cos \frac{\omega}{c} x, \cos \omega t \operatorname{sen} \frac{\omega}{c} x, \operatorname{sen} \omega t \cos \frac{\omega}{c} x, \operatorname{sen} \omega t \operatorname{sen} \frac{\omega}{c} x \rangle$$
 (1.106)

1.1.6 Equação da onda multivariável

 \mathbf{c}

1.1.7 Equação do transporte

<++>

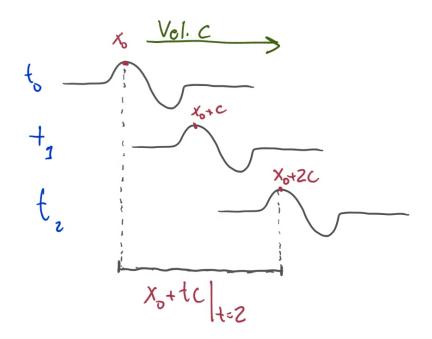


Figura 5 – Mostra a onda transportada com velocidade c em diferentes instantes de tempo.

1.2 Método das diferenças finitas

O método das diferenças finitas foi demonstrado por Courant, Friedrichs e Levy no artigo seminal Sobre equações diferenciais parciais da física matemática (Uber die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik), publicado na edição 100 dos Mathematische Annalen em 1928(LEWY; FRIEDRICHS; COURANT, 1928).². Importância deste artigo é tão grande que gerou todo um campo de estudo (CITAR) e com o advento dos computadores digitais, possibilitou a solução de problemas que até então não possuiam solução.

Neste artigo, ficam estabelecidas o domínio do problema sobre uma malha (mesh) retangular uniforme com contorno contínuo, dentro dos pontos desta malha foram definidas funções em relação aos pontos vizinhos que se aproximavam da representação analítica de derivadas. Colocadas estas definições, mostrou-se sua aplicabilidade em EDPs elípticas,

Muito é falado que Euler foi o primeiro a trabalhar com métodos numéricos em equações diferenciais parciais mas não pude encontrar nenhuma referência sobre o assunto

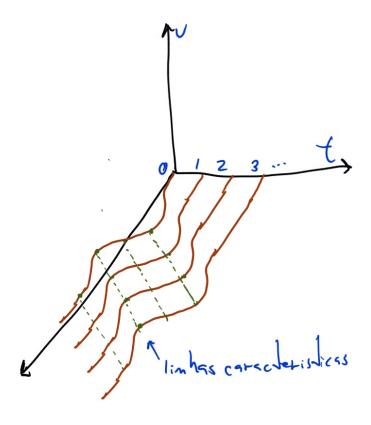


Figura 6 – Espaço de características para a equação da onda unidimensional em diferentes intervalos de tempo.

hiperbólicas aplicados a problemas de autovalores, estocásticos, equação da onda e função de *Green*. Neste trabalho estudamos em especial o problema hiperbólico aplicado a equação da onda.

1.2.1 Domínio do problema

Seja um domínio de pontos discretos, que chamaremos de malha7 retangular e uniforme (cartesiano), a cada ponto i, j da malha associamos um valor da função U, que será notado como $U_{i,j}$ onde i é o índice das abscissas e j o das ordenadas.

A malha possui dois tipos de pontos, chamamos de *pontos interiores* os pontos cujo a discretização do operador diferencial (será mostrado adiante) está completamente dentro da malha e chamamos de *pontos de borda* os pontos cujo algum elemento da discretização do operador diferencial esta fora do domínio de discretização, estes casos são tratados de forma especial como veremos em na discretização do operador (REFERENCIAR) e na implementação do método (REFERENCIAR) nos capítulos (REFERENCIAR).

Cada ponto da malha pode ser considerado como o ponto de origem de um sistema de coordenadas local.

Dividimos as linhas da malha em grupos ou famílias, um para cada dimensão

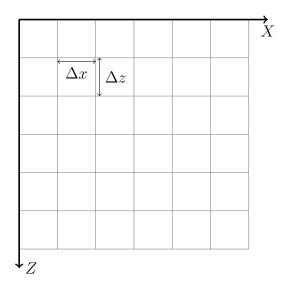


Figura 7 – Malha bidimensional com $N_i \times N_j$ pontos, onde o índice i representa o eixo das abscissas e j o das ordenadas

representada (na figura 7 temos duas dimenões) os membros de cada família nunca se cruzam e os membros de cada família cruzam-se com os membros da outra em somente um único ponto.

No sistema de coordenada local o ponto (que chamaremos de $n\acute{o}$ ou $n\acute{o}$ da malha) é referenciado como $U_{i,j}$, e seus elementos vizinhos espacialmente como $U_{i-1,j}$ e $U_{i+1,j}$ no eixo horizontal e $U_{i,j-1}$ e $U_{i,j+1}$ no eixo vertical. Podemos estender esta vizinhança conforme necessário, tomando pontos mais distantes utilizando notação similar.

O valor do nó é normalmente desconhecido e depende normalmente dos pontos vizinhos, para exemplificar podemos representar cada nó como

$$U_{i,j} = \frac{1}{4} \left[U_{i-1,j} + U_{i+1,j} + U_{i,j-1} + U_{i,j+1} \right]$$
 (1.107)

,

isto é, o valor de cada ponto é dado pela média dos pontos vizinhos. Esta descrição pode ser visto também de forma geométrica que chamamos de *esténcil* ou *molécula* (conforme figura 8).

Desta forma construimos uma equação algébrica para representar o campo que descreve a função U em cada um dos nós (i,j). Esta idéia será então extrapolada para comportar a discretização dos operadores diferenciais obtidos analíticamente.

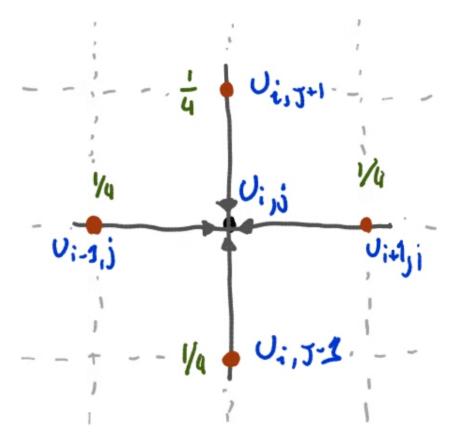


Figura 8 – Estencil bidimensional e seus pontos vizinhos

1.2.2 Operadores diferenciais discretos

Seja a definição de derivada dada por:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_i} \equiv \lim_{\Delta x \to 0} \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{\Delta x} \tag{1.108}$$

Geometricamente a derivada é representada pelo plano tangente que toca o ponto x_i . Uma visualização simples pode ser feita usando o espaço unidimensional (figura 9(a)). Pela figura é possível perceber que as diferenças regressivas, progressivas e centrais aproximam com erros variáveis a reta tangente. Fazendo com que Δx se aproxime cada vez mais de 0 fazemos com que cada uma das diferenças discretizadas convirjam para a diferença analítica, isto é, a reta tangente. Percebemos então que a descrição geométrica adequa-se perfeitamente a definição matemática rigorosa. A representação n-dimensional é equivalente visto que a derivada n-dimensional existe se e somente se ela existe em cada uma das suas componentes que são projeções do espaço sobre retas (CITAR ELON Rn).

Desta forma podemos aproximar as derivadas parciais da seguinte forma:

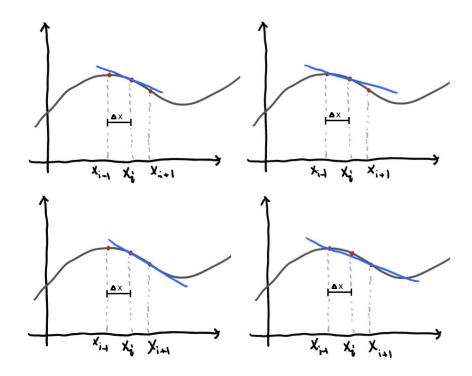


Figura 9 – (esq-direita/cima-baixo)Representação geométrica de: (a)Derivada no ponto x_i ; (b) Aproximação por diferença regressiva; (c) Aproximação por diferença progressiva; e (d) Aproximação por diferença central.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$$
 Diferença regressiva (1.109)

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \qquad \text{Diferença progressiva} \qquad (1.110)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \qquad \text{Diferença central} \qquad (1.111)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$$
 Diferença central (1.111)

Posto isto, uma pergunta que surge naturalmente é: "O quão boa é a aproximação definida nas equações algébricas (1.111)?", "É possível melhorar esta aproximação?", "Como encontrar aproximações para derivadas de ordem superior a 1?"

1.2.2.1 Séries de Taylor

Seja uma função U em um intervalo I de classe C^{∞} , se soubermos o valor da função em um ponto dado x_0 e quisermos encontrar outro valor da função em um ponto x qualquer dentro do intervalo I, podemos então utilizar de uma expansão em termos baseados nas derivadas de U para encontrar um U(x) qualquer. Esta expansão é conhecida como Série de Taylor, e é escrita da seguinte forma:

$$u(x) = u(x_0) + u'(x_0)\Delta x + \frac{u''(x_0)}{2!}\Delta x^2 + \dots + \frac{u^{(n-1)}(x_0)}{(n-1)!}\Delta x^{n-1} + r_n(\Delta x)$$
 (1.112)

(LIMA, 2012) mostra que basta que $r_n(\Delta x) \to 0$ para todo $n > n_0 \in \mathbb{N}$ para que a série de Taylor seja convergente para u(x). O termo r_n é chamado de resto ou erro de truncamento para o segundo usaremos o símbolo $\tau(\Delta x)$ para representar a ordem do erro de truncamento.

1.2.2.2 Aproximações diferenças discretas por séries de Taylor

Se substituirmos os valores x e x_0 da expansão de Taylor (mostrada em (1.112)) pelos pontos da malha discreta unidimensional (U_i, U_{i+1}, U_{i-1}) conforme (1.111) e mostrados no estencil da figura 8 temos:

$$u_{i+1} = u_i + u_i' \Delta x + \frac{u_i''}{2!} \Delta x^2 + \dots + \frac{u_i^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-1} + r_n(\Delta x)$$
(1.113)

$$u_{i+1} - u_i = u_i' \Delta x + \frac{u_i''}{2!} \Delta x^2 + \dots + \frac{u_i^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-1} + r_n(\Delta x)$$
(1.114)

dividindo por Δx

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} = u_i' + \frac{u_i''}{2!} \Delta x + \dots + \frac{u_i^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-2} + r_n(\Delta x)$$
(1.115)

isolando $u_{i}^{'}$

$$u_{i}' = \frac{u_{i+1} - u_{i}}{\Delta x} - \left(\frac{u_{i}''}{2!} \Delta x + \dots + \frac{u_{i}^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-2} + r_{n}(\Delta x)\right)$$
(1.116)

simplificando

$$u_{i}' = \frac{u_{i+1} - u_{i}}{\Delta x} - \tau \left(\Delta x\right) \tag{1.117}$$

Desta forma aproximamos a derivada contínua por uma expressão algébrica que chamamos de diferença finita progressiva, os termos englobados em $O(\Delta X)$ vão ficando cada vez menores visto que Δx é pequeno, consideramos também que U é Lipschitz contínua o que força que:

$$\frac{|u_{i+1} - u_i|}{\Delta x} \le k \ \forall i \in I \tag{1.118}$$

esta condição é automaticamente satisfeita pois consideramos somente funções U que são infinitamente diferenciáveis (C^{∞}) . Desta forma quando $\Delta x \to 0$ temos $\tau \to 0$, o que implica convergência.

Analogamente podemos fazer para diferença finita regressiva (nós u_{i-1} e u_i) e diferença finita central (nós u_{i-1} e u_{i+1}), conforme vamos mostrar.

$$u_{i-1} = u_i + u_i' \Delta x + \frac{u_i''}{2!} \Delta x^2 + \dots + \frac{u_i^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-1} + r_n(\Delta x)$$
 (1.119)

$$u_{i-1} - u_i = u_i' \Delta x + \frac{u_i''}{2!} \Delta x^2 + \dots + \frac{u_i^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-1} + r_n(\Delta x)$$
(1.120)

dividindo por Δx

$$\frac{u_{i-1} - u_i}{\Delta x} = u_i' + \frac{u_i''}{2!} \Delta x + \dots + \frac{u_i^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-2} + r_n(\Delta x)$$
(1.121)

isolando $u_{i}^{'}$

$$u_{i}' = \frac{u_{i} - u_{i-1}}{\Delta x} + \left(\frac{u_{i}''}{2!} \Delta x + \dots + \frac{u_{i}^{(n-1)}}{(n-1)!} \Delta x^{n-2} + r_{n}(\Delta x)\right)$$
(1.122)

simplificando

$$u_{i}' = \frac{u_{i} - u_{i-1}}{\Delta x} + \tau \left(\Delta x\right) \tag{1.123}$$

e para obtermos a diferença central da primeira derivada basta somarmos (1.117) e (1.123) obtendo:

$$2u_{i}' = \frac{u_{i+1} - u_{i}}{\Delta x} + \frac{u_{i} - u_{i-1}}{\Delta x} + \tau \left(\Delta x^{2}\right)$$
(1.124)

$$u_{i}' = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \tau \left(\Delta x^{2}\right) \tag{1.125}$$

(1.126)

O termo no erro de truncamento τ é normalmente chamado de ordem de acurácia, como Δx é menor que 1 (normalmente muito menor que 1), quanto maior a ordem de acurácia menor o erro que é exatamente o que esperamos.

As diferenças finitas progressivas e regressivas são chamadas de unilaterais, isto é, elas operam em valores somente de um único lado do estencil, por outro lado as diferenças centrais são homogêneas.

O melhor método de discretização a ser utilizado depende do fenomêno sendo modelado, se o problema possuir uma distribuição homogenea em todas as dimensões uma modelagem central é mais apropriada (este é o caso da discretização espacial da onda).

1.2.2.3 Malhas intercaladas

(REESCREVER) Se tomarmos uma malha de pontos intercalados sobre os pontos médios da malha regular e usarmos a diferença central obtemos uma aproximação de segunda ordem para as diferenças progressivas e regressiva. Por exemplo:

$$u'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \tau(\Delta x^2)$$
 (1.127)

$$u'_{i-\frac{1}{2}} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \tau(\Delta x^2)$$
 (1.128)

(1.129)

ou seja, um ganho de uma ordem para o dobro de pontos (uma malha regular e uma malha intercalada).

1.2.2.4 Segunda derivada discreta

Geometricamente a segunda derivada é dada pela curvatura da função, se a curvatura é para baixo (um intervalo com máximo local), então temos a segunda derivada negativa, por outro lado, quando a curvatura está para cima (um intervalo com mínimo local) temos a derivada positiva, assim a segunda derivada é 0 (zero) quando não há curvatura no intervalo, isto é, temos um intervalo que pode ser descrito como uma função linear Ax+b. Outra forma de ver é como a inclinação da linha tangente a curva da derivada da função (ou seja a derivada da derivada). Físicamente é normalmente representada como a aceleração de uma partícula.

Para encontrar a segunda derivada discreta consideremos as equações de diferença finita regressivas e progressivas de primeira ordem (1.117) (1.123) reescritas convenientemente abaixo até o terceiro termo

$$u_{i+1} = u_i + \frac{u_i^{(1)}}{1!} \Delta x^1 + \frac{u_i^{(2)}}{2!} \Delta x^2 + \frac{u_i^{(3)}}{3!} \Delta x^3 + \tau(\Delta x)$$
 (1.130)

$$u_{i-1} = u_i - \frac{u_i^{(1)}}{1!} \Delta x^1 + \frac{u_i^{(2)}}{2!} \Delta x^2 - \frac{u_i^{(3)}}{3!} \Delta x^3 + \tau(\Delta x)$$
 (1.131)

adicionando ambos

$$u_{i+1} + u_{i-1} = 2u_i + 2\frac{u_i^{(2)}}{2!}\Delta x^2 + \tau(\Delta x)$$

isolando a segunda derivada

$$\frac{u_i^{(2)}}{2!} \Delta x^2 = u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} + \tau(\Delta x)$$

dividindo por Δx^2

$$u_i^{(2)} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \frac{\tau(\Delta x)}{\Delta x^2}$$

$$u_i^{(2)} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \tau(\Delta x^2)$$
(1.132)

(1.133)

1.2.2.5 Aproximações de ordem superior para derivadas

(PESQUISAR ou ESCREVER) Algoritimos para obter os coeficientes das diferencas finitas para qualquer derivada ou ordem.(TREFETHEN, 1996)

1.2.2.6 Análise numérica: Consistência, Estabilidade, Convergência

a

1.2.2.6.1 Consistência

A consistência é um atributo do esquema numérico. A solução dada por um dado esquema numérico deve tender para a equação diferencial quando a malha espacial ou temporal tende a zero. (CITAR)

1.2.2.6.2 Estabilidade

A estabilidade é uma condição da solução numérica, ou seja, todos os erros devem estar limitados durante cada passo da iteração.

Para valores finitos da malha temporal ou espacial (Δt e $\Delta \mathbf{x}$), o erro deve ficar limitado quando o número de passos n tende ao infinito. (não pode explodir). (CITAR)

Consideramos erro no passo n no ponto i como $\epsilon_i^n = u_i^n - \bar{u_i^n}$ (onde \bar{u} é a solução exata da equação discretizada e u é a solução computada).

Escrevemos a condição de estabilidade como

$$\exists \Delta t : \lim_{n \to \infty} |\epsilon_i^n| < K \in \mathbb{R} \ \forall i \in I$$
 (1.134)

A condição de estabilidade é uma condição do esquema numérico somente, não esta relacionada de qualquer forma com a equação diferencial, também não garante que o erro seja "pequeno", somente que seja limitado para um dado passo de tempo t, isto é

$$t^n = n\Delta t \tag{1.135}$$

1.2.2.6.3 Convergência

é uma condição da solução numérica, onde a solução deve tender para a solução exata do modelo matemático quando os intervalos de tempo e espaço tendem a zero, isto significa que quanto mais refinada a malha mais proximo da solução analítica estamos. (CITAR)

Se o erro dado por $\tilde{\epsilon}_i^n=u_i^n-\tilde{u_i^n}$, a diferença entre a solução computada u_i^n e a solução exata da equação analítica \tilde{u}_n^i representando o modelo matemático. Matemáticamente representada como:

$$\lim_{\substack{\Delta t \to 0 \\ \Delta x \to 0}} |\tilde{\epsilon}_i^n| = 0 \tag{1.136}$$

1.2.2.6.4 Teorema da equivalência de Lax

Para um problema de valor inicial bem posto e um esquema de discretização consistente, estabilidade é a condição necessária e suficiente para convergencia. (CITAR) Podemos ver no diagrama 10 a relação de forma simplificada.

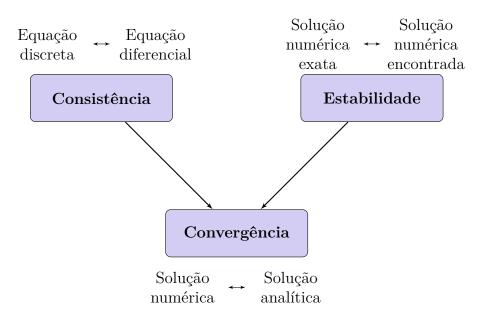


Figura 10 – Relações do teorema de Lax

1.3 Diferenças finitas na equação da onda

Estabelecidas as bases do modelo físico e numérico, vamos trabalhar no problema proposta a modelagem da equação da onda 2D, a extrapolação para um modelo 3D é feita simplesmente adicionando uma nova dimensão espacial, em uma primeira analise o modelo 3D não apresenta nenhuma complexidade de implementação sendo o maior problema o custo computacional elevado.

A primeira tarefa é estabeler uma discretização do domínio para tal, supomos uma região fechada, com contorno contínuo, com malha cartesiana e homogênea, isto é as retas das famílias se cruzam perpendicularmente e a distância entre cada nó em qualquer direção é o mesmo, isto é $\Delta x = \Delta z = h$, como podemos ver na figura 11

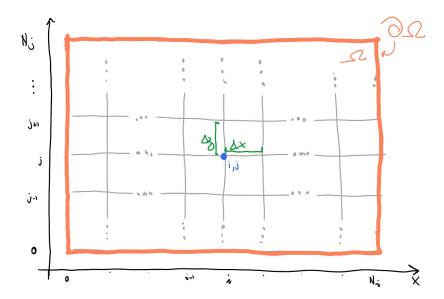


Figura 11 – Região Ω e seu contorno definido no modelo de diferenças finitas centrado no nó (i,j), com $N_i \times N_j$ pontos nas coordenadas x,z

Seja a equação da onda (1.25)

$$u_{tt}^2 + c^2 u_{xx}^2 = 0 (1.137)$$

em duas dimensões temos

$$u_{tt}^2 + c^2 \nabla^2 u = 0 (1.138)$$

$$u_{tt}^{2} + c^{2} \left(\frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} u}{\partial z^{2}} \right) = 0$$
 (1.139)

Aplicamos então a diferença finita central de segunda ordem para a segunda derivada (1.133), tanto no tempo como no espaço e ficamos com:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t^{2}} + c^{2} \left(\frac{U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n}}{2\Delta x^{2}} + \frac{U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n}}{2\Delta z^{2}} \right) = 0$$
(1.140)

isolando o passo futuro (n+1), temos:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t^{2}} = -c^{2} \left[\frac{U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n}}{2\Delta x^{2}} + \frac{U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n}}{2\Delta z^{2}} \right] \quad (1.141)$$

$$U_{i,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j}^{n-1} = -2c^{2} \Delta t^{2} \left[\frac{U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n}}{2\Delta x^{2}} + \frac{U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n}}{2\Delta z^{2}} \right] \quad (1.142)$$

Considerando uma malha regular $h = \Delta z = \Delta x$

$$U_{i,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j}^{n-1} = -2c^{2}\Delta t^{2} \left[\frac{U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n}}{2h^{2}} + \frac{U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n}}{2h^{2}} \right]$$

$$(1.143)$$

$$U_{i,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j}^{n-1} = -\frac{2c^{2}\Delta t^{2}}{2h^{2}} \left[U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n} + U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n} \right]$$

$$(1.144)$$

$$U_{i,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j}^{n-1} = -c^{2} \left(\frac{\Delta t}{h} \right)^{2} \left[U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n} + U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n} \right]$$

$$(1.145)$$

$$U_{i,j}^{n+1} = 2U_{i,j}^{n} - U_{i,j}^{n-1} - c^{2} \left(\frac{\Delta t}{h} \right)^{2} \left[U_{i-1,j}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i+1,j}^{n} + U_{i,j-1}^{n} - 2U_{i,j}^{n} + U_{i,j+1}^{n} \right]$$

$$(1.146)$$

A derivada espacial em x e z depende somente dos nós vizinhos no passo atual e esta representado pelo estencil mostrado na figura 12, por outro lado a derivada temporal depende de dois passos anteriores (13, isto é, para sabermos o valor no passo futuro (n+1) precisamos ter o valor no presente (n) e no passo anterior (n-1). Isso nos obriga a dar para o problema condições iniciais, iniciamos então nossa simulação no passo n=2, e definimos a priori o estado do campo quando n=1 e n=0 desta forma nosso modelo continua bem definido.

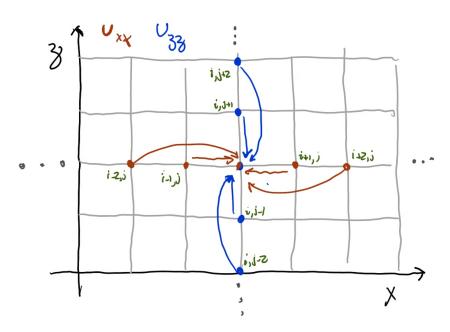


Figura 12 – Estencil para a diferença finita da segunda derivada de ordem 4 nas coordenadas x e z.

Um outro problema emerge da derivada espacial, quando computamos o valor do nó próximo das fronteiras do intervalo não é possível encontrar valores fora do domínio,

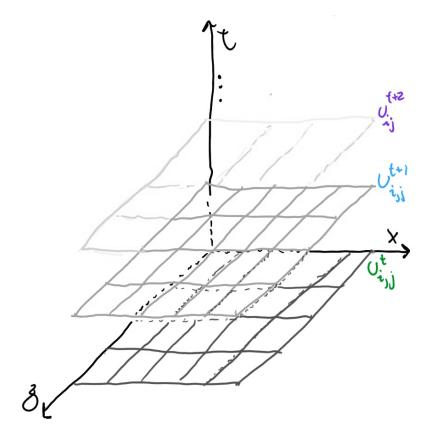


Figura 13 – Malha bidimensional com diferença finita temporal progressiva de segunda ordem.

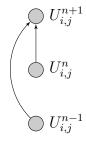


Figura 14 – Estencil da malha finita de segunda ordem, um nó representa todo plano para um dado instante t

por exemplo para computar o valor no ponto $U_{(1,1)}$ precisaremos no para a derivada em x dos valores de $U_{2,1}, U_{3,1}, U_{0,1}$ e de um quarto ponto que se oncontraria a esquerda de $U_{0,1}$, mas este valor não existe no nosso domínio. Dada esta limitação existem duas soluções possíveis.

A primeira seria computar os pontos perto da fronteira com uma discretização de ordem inferior, por exemplo ao invés da quarta ordem, usarmos a segunda ordem para os pontos de fronteira, enquanto esta solução é elegante, não elimina completamente o problema pois ao computarmos por exemplo o valor de $U_{0,0}$, ainda precisaremos de um valor a direita que não existe.

A segunda solução (que pode ser usado em conjunto com a primeira), é estabelecer um valor fixo para os nós de fronteira por exemplo $U_{0,z}=0 \ \forall z$, esta condição de contorno faz com que todos os valores de fronteira sejam sempre 0, que leva a um comportamento, que pode ser indesejado. Ao atribuir o valor 0 para a fronteira, faz com que criemos um ponto fixo malha que gera uma reflexão com a fase transladada em π radianos. Se quisermos que a equação da onda nao seja refletida nestes caso é necessário criar uma zonda de absorção que vai gradualmente mas rapidamente reduzindo a amplitude da criando uma ilusão de onda "saiu" da malha discretizada.

1.3.1 Condições iniciais

Na modelagem utilizada, teremos o sistema em repouso que será perturbado por um pulso em uma posição qualquer da malha, este pulso será variável no tempo.

Desta forma a condição inicial será dada por:

$$U(\mathbf{x},0) = 0 \tag{1.147}$$

$$U'(\mathbf{x},0) = 0 \tag{1.148}$$

1.3.2 O termo fonte

A equação da onda descreve o fenomedo da propagação da energia sobre um meio físico com uma velocidade c, normalmente esta onda é dada como o valor inicial para um determinado campo de pressão.

Ao invés disso intejaremos um pulso artificial em um ponto da malha qualquer, este pulso então será propagado conforme a simulação prossegue a este pulso chamaremos de *fonte*.

Escolheremos uma função chamada ondaleta Ricker (CITAR)(veja figura 15), que é obtida da segunda derivada da função gaussiana (CITAR)

$$f(t) = \left[1 - 2\pi \left(\pi f t\right)^{2}\right] e^{-\pi (\pi f t)^{2}}$$
(1.149)

Onde f é a frequência central da onda, e t é um passo do tempo. A função Ricker é simetrica com relação ao eixo vertical (função par), que gera um problema em t=0, pois f(0)=1 (veja 16), gerando uma descontinuidade, para mitigar este efeito é necessário que a onda seja deslocada no tempo e gradualmente atinja o seu valor de pico, este deslocamento é calculado a partir da equação

$$t_d = t - \frac{2\sqrt{\pi}}{f_{corte}} \tag{1.150}$$

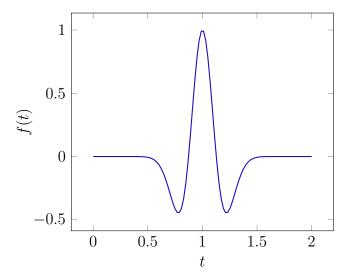


Figura 15 – Ondaleta ricker

e a frequencia de corte é obtida por

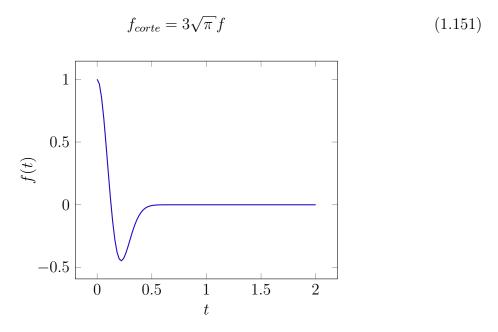


Figura 16 – Ondaleta ricker não deslocada

1.3.3 Condições de contorno

1.3.3.1 Dirichelet e Neumann

$$U(\partial\Omega, t) = 0 \tag{1.152}$$

$$U_x(\partial\Omega, t) = 0 \tag{1.153}$$

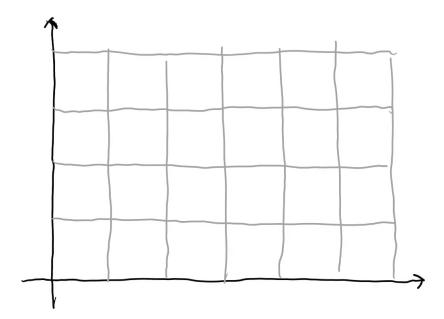


Figura 17 – Ondaleta Ricker 10hz propagada em meio isotropico com velocidade de $1500 \mathrm{m/s}$

1.3.3.2 Bordas não reflexivas

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n + c \frac{\Delta t}{\Delta h} \left(U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n \right)$$
 (1.154)

(REYNOLDS, 1978)

1.3.3.3 Camada de amortecimento

$$w(d) = e^{-(\beta(n-d))^2} (1.155)$$

(CERJAN et al., 1985)

Onde w(d) é o fator de atenuação, d é a distância do ponto atenuado até o contorno, β é o fator de amortecimento e n o número de pontos da malha que pertence a camada de amortecimento.

1.3.4 Análise numérica do modelo

Nesta sessão faremos a análise numérica da discretização escolhida: Segunda ordem no tempo e quarta ordem no espaço para diferencas centrais. (VIREUX, 1986) e (YEE, 1966).

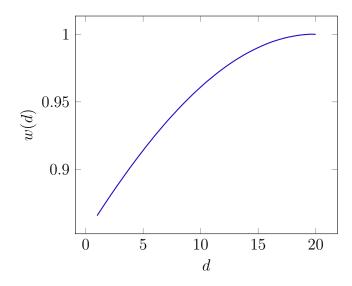


Figura 18 – Função de atenuação para um $\beta=0.02$ com 20 pontos de absorção

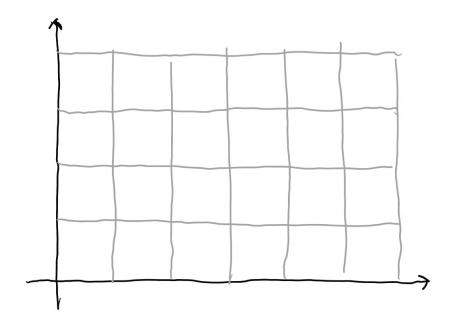


Figura 19 – Comparação entre diferentes tipos de condições de contorno. a) Dirichelet. b) vonNeumann, c) Bordas não reflexivas, d) Camada de amortecimento

$$U_{i,j}^{n+1} = 2U_{i,j}^{n} - U_{i,j}^{n-1} - c^{2} \left(\frac{\Delta t}{h}\right)^{2} \frac{1}{12}$$

$$\left[\left(U_{i-2,j}^{n} - 16U_{i-1,j}^{n} + 30U_{i,j}^{n} - 16U_{i+1,j}^{n} + U_{i+2,j}^{n}\right) + \left(U_{i,j-2}^{n} - 16U_{i,j-1}^{n} + 30U_{i,j}^{n} - 16U_{i,j+1}^{n} + U_{i,j+2}^{n}\right) \right]$$

$$- c^{2} \Delta t^{2} f^{n}(x, z)$$

$$(1.156)$$

$$h = \max\left(\Delta x, \Delta z\right) \tag{1.157}$$

$$h \le \frac{V_{min}}{k \cdot f_{corte}} \tag{1.158}$$

$$\Delta t = \frac{h}{\gamma \cdot V_{max}} \tag{1.159}$$

(CITAR) quem onde?

1.4 Implementação computacional

A implementação do modelo matemático e sua discretização em diferenças finitas foi feita utilizando a linguagem C padrão ANSI 2011 (ISO, 2011), com extensões matemáticas da biblioteca GNU/libc 2.27 (LOOSEMORE; STALLMAN; ORAM, 2018). A versão final do código fonte pode ser obtida em http://github.com/igormorgado/wave, mas esta contida nos anexos para fins documentais.

1.4.1 Sequencial

O algoritimo sequencial tem seu fluxo principal organizado da seguinte forma:

wave.c

```
velocity_model__read_from_file()
ricker_source__read_from_file()
simulation__create()
simulation__is_stable()
wavefield__laplacian_params()
for(t = 0; t < timesteps; t++) {
    simulation__inject_source()
    wavefield__laplacian()
    wavefield__perfect_match_layer()
    wavefield__swap()
    simulation__write_to_file()
}</pre>
```

Dentro do código e na descrição dos algorítimos serão usadas variáveis de forma continuada são elas

```
\mathbf{nx} Número de nós no eixo x;
```

 \mathbf{nz} Número de nós no eixo z;

steps Número de passos temporais a serem simulados;

ix Contador usaro para iteração sobre Nx;

```
iz Contador usaro para iteração sobre Nz;
it Contador usaro para iteração sobre steps;
\mathbf{dx} Tamanho do grid no eixo x;
dz Tamanho do grid no eixo z;
dt Tamanho do espaçamento temporal;
coef Coeficientes de diferenças finitas;
\mathbf{dxdx} Quadrado de dx;
\mathbf{dzdz} Quadrado de dz;
\mathbf{dtdt} Quadrado de dt;
coef dx2 Razao dos coeficientes sobre o quadrado de dx;
\mathbf{coef}_{\mathbf{dz2}} Razao dos coeficientes sobre o quadrado de dz;
vel Velocidade do meio físico no em um ponto da malha;
vel dt2 Razão da velocidade sobre o quadrado de dt;
order Ordem espacial da diferença finita (suporta 2, 4, 6 e 8);
border_size Tamanho da borda, relacionada com a ordem da diferença finita;
grid Campo de pressão para todos Nx \times Nz pontos no instante futuro
grid_o Campo de pressão para todos Nx \times Nz pontos no instante passado
sample Intervalo de tempo no qual o campo de pressão é armazenado em disco. Não é
     necessário armazenar cada etapa da simulação, somente uma quantidade reduzida
     de quadros (normalmente 1 a cada 8 milisegundos)
\mathbf{sx} Posição x da fonte de energia;
sz Posição z da fonte de energia;
frequency Frequencia (em Hz) da ondaleta Ricker;
```

O modelo de velocidades, representa a velocidade do meio fisico em cada ponto da malha discretizada, esta velocidade esta normalmente relacionada as caracteristicas físicas do material.

(ADICIONAR) tabela com velocidades de materiais

Na implementação foi utilizado valores de ponto flutuante de precisão dupla (double) com 128 bits, o arquivo de velocidade é então uma sequencia de $N_x \times N_z$ números flutuantes em formato binário. Qualquer programa que gere este formato pode ser usado como entrada, mas por praticidade disponibilizamos algumas funções para criar e ler arquivos de velocidades neste formato são as funções:

wavefield_create Cria um modelo de velocidades dados os valores N_x e N_z

wavefield_laplacian Executa o calculo do gradiente espacial da ordem definida em wavefield_laplacian_params para todo ponto da malha

wavefield_laplacian_params Precalcula os parametros para aplicação do laplaciano em cada nó.

wavefield_perfect_match_layer Aplica as condições de contorno esperadas em uma aquisição sísmica (1.154) (1.155)

wavefield_swap Faz a troca do modelo de onda propagado em memoria, representa a diferenca central no tempo

wavefield_read_from_file Carrega um modelo de velocidades de um

simulation_inject_source Injeta a fonte sismica em uma posição dada

Apesar de ser uma função simples, precalcular os parametros do Laplaciano tem grandes beneficios (APRESENTAR RESULTADO COMPARATIVO), visto que este parte do código é parte do loop principal e seus valores não se alteram. Aqui calculamos os quadrados do gradiente, os coeficientes da diferença finita e os coeficientes já operados com o gradiente, poupando grande custo computacional.

wavefield_laplacian_params()

```
coef = coeficientes_dif_finita(int ordem, int derivada);
dxdx = dx * dx;
dzdz = dz * dz;
for(i=0; i < len(coef); i++) {
    coef_dx2[i] = coef[i]/dxdx;
    coef_dz2[i] = coef[i]/dzdz;
}</pre>
```

Listing 1.3 – wavefield_laplacian():Algoritimo que propaga a onda baseada na discretização de diferenças finitas

```
for(iz = border_size; iz < nz - border_size; iz++) {
  for(ix = border_size; ix < nx - border_size; ix++) {
    vel_dt2 = (vel[x][z]*dt)^2;</pre>
```

```
/* Aplica o estencil */
lapx = coef_dx2[0] * grid_o[x][z];
lapz = coef_dz2[0] * grid_o[x][z];
for(ic=1; ic < len(coef); ic++) {
    lapx += coef_dx2[ic] * ( grid_o[ix-ic][iz] + grid_o[ix+ic][iz] );
    lapz += coef_dz2[ic] * ( grid_o[ix][iz-ic] + grid_o[ix][iz+ic] );
}
grid[ix][iz] = 2*grid_o[ix][iz] - grid[ix][iz] + vel_dt2 * (lapx + lapz);
}
</pre>
```

Listing 1.4 – wavefield_perfect_match_layer():Algoritimo que aplica as condições de borda definidas por Reynolds e Cerjan

```
/* Para o lado esquerdo */

/* Bordas transparentes de Reynolds */
for(iz = 0; iz < nz; iz++) {
    for(ix = 0; ix < border_size; ix++)
        grid_o[ix][iz] = grid[ix][iz] + vel[ix][iz] * dt_dx * grid[ix +1][iz] - grid[ix][iz]);

/* Camada de absorcao de Cerjan */
for(iz = 0; iz < nz; iz++)
    for(ix = 0; ix < nd; ix++)
        grid_o[ix][iz] = grid_o[ix][iz] * exp(-beta*(nd-ix)^2)</pre>
```

Listing 1.5 – simulation.c:simulation_inject_source():Algoritimo para injetar a fonte em uma posição dada

```
vel_dt2 = (vel[x][z]*dt)^2;
grid[sx][sz] += vel_dt2 * wavelet[it];
```

1.4.2 Paralela

Visto que o algoritimo sequencial é limitado pelo enderecamento da memoria do computador e a velocidade que o equipamento é capaz de realizar a computação, foi a natural a busca por um algoritimo paralelo. Utilizamos um modelo de divisão e conquista onde o domínio foi dividido em blocos ortogonais conforme podemos ver na figura ?? e 21

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus

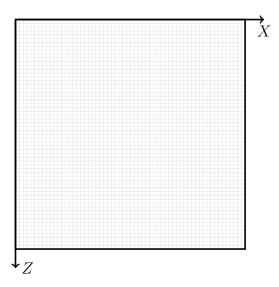


Figura 20 – Domínio 2D original

placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque

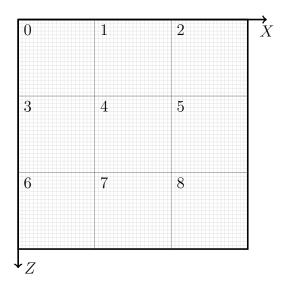


Figura 21 – Domínio decomposto em 9 áreas, numeradas de 0 a 8

pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Mostra a zona fantasma central (repensar neste algoritimo) 22

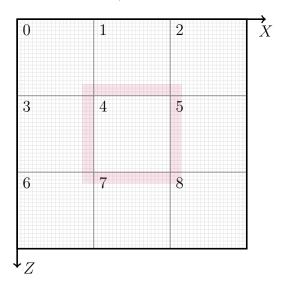


Figura 22 – Dominio decomposto, a área dentro do retângulo vermelho mostra do dominio id 4, com a área fantasma que transborda sobre as decomposições vizinhas

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec

ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Mostra cada uma das zonas fantasma por sub domínio 23.

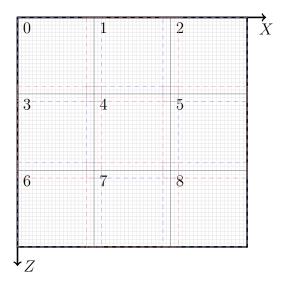


Figura 23 – Mostra cada domínio decomposto com suas bordas fantasma, as cores são usadas somente para ressaltar as fronteiras

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris.

Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Estencil na borda de um subdominio 24.

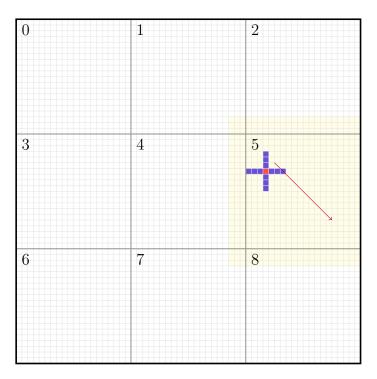


Figura 24 – Mostra o domínio decomposto para um grid dado, com o estencil de ordem 4 proximo a uma borda, no estencil o nó vermelho é o nó sendo computado, e os azuis representam a vizinhança necessária para este nó. A seta indica a direção da computação dos nós.

Os métodos de discretização algébrica miméticas ou compatíveis empregam construções discretas que mimetizam as identidades contínuas e os teoremas encontrados no cálculo vetorial. Destes são divididos em dois principais grupos são eles:

- Método compatível de Bochev (CITAR)
- Operadores diferenciais miméticos de Castillo-Grone (CITAR)

Vamos brevemente explicar as características de cada um dos métodos supracitados:

Modelo compatível de Bochev

- Baseado no modelo de topologia-algébrica;
- Versão combinatória do teorema de Stokes;
- Suporta operações de integração e diferenciação mutuamente consistentes;
- Mais geral e abstrado;
- Suas soluções para problemas de valores de contorno são restritas pelo espaço de *Sobolev*.

Operador mimetico Castillo-Grone

- Baseado na extensão do teorema da divergência de Gauss;
- Não precisa de conceitos como espaço dual ou produto exterior;
- Válido invariavelmente para modelos até três dimensões;
- Não é local, isto é permite o aumento de precisão até o contorno do domínio físico.
- Mimetiza (representa) o diferencial da mecânica do contínuo e também os operadores integrais de fluxo;

O foco deste trabalho será estudar as técnicas de discretização aplicados a problemas de mecânica do contínuo, mais especificamente a equação da onda em meios acústicos utilizando o operador mimético de *Castillo-Grone*.

1.5.1 Introdução aos métodos miméticos

Precisamos criar técnicas de distretização que satisfaçam o problema dado os passos sao:

- 1. Discretização dos operadores do cálculo vetorial usados para descrever o problema
- 2. Uso dos operadores discretizados para realizar a discretização do problema.

É muito provavel que se o problema colocado for estável a sua discretização mimética sera estável (CITAR e DEFINIR o que é estabilidade aqui).

O principal ponto que difere o método mimético dos tradicionais (como o MDF) é que estes discretizam o problema para somente então verificar sua estabilidade. Os métodos miméticos por outro lado buscam operadores que sejam intrinsecamente estaveis pois baseiam-se e são limitados pelas leis que regem o problema contínuo, este processo intrinssecamente contribui para a estabilidade do métodos.

Estes modelos contínuos são usados para descrever as distribuições que são dependentes no tempo e espaço no domínio contínuo sendo analisado.

Esta continuidade necessidade que necessita ser sustentada somente por partes (ou localmente integraveis) e a consequência é a manutenção local do princípio de conservação.

Os métodos miméticos podem ser usados em diversos tipos de malhas como:

- Retangulares
- Irregulares
- Desestruturadas
- Triangulares
- Poligonais

No nosso caso iremos trabalhar somente com malhas *retangulares* pois pretendemos compara-lo aos métodos de diferenças finitas sobre a malha ortogonal e cartesiana.

Desde sua criação ja foram derivados métodos miméticos espectrais e pseudo-espectrais (CITAR).

Muitas aplicações já foram dadas para os métodos miméticos como:

- Meios porosos;
- Dinâmica de flúidos; (EDPs parabólocas)

- Processamento de imagens;
- Relatividade Geral
- Eletromagnetismo (EDPs Elípticas)
- Propagação de ondas (EDPs Hiberbólicas)

É importante ressaltar que diferente dos métodos tradicionais de discretização que normalmente são utilizados para discretizar as equações do sistema diretamente, os métodos miméticos devem começar com a discretização do problema físico baseando-se na teoria do contínuo por trás do problema.

(CASTILLO; MIRANDA, 2013) explica que discretização da teoria do contínuo através dos metódos miméticos por:

Os métodos miméticos inicialmente constroem um análogo matemático discreto da descrição relevante da mecanica do contínuo (com a descrição normalmente tomando a forma de uma lei de conservação física ou constitutiva). [...] Esta forma limita a estrutura que os operadores discretos podem ter.

Uma vez construido estes operadores discretos que obedecem as leis físicas, estes operadores miméticos podem então ser utilizados em substituição em um sistema de equações diferenciais ou integrais.

Por esta ligação íntima entre o operador mimético e o modelo físico real, este modelo auxilia na redução do aparecimento de diversos artefatos numéricos de natureza não física que ocorrem normalmente quando se utiliza métodos tradicionais.

Métodos miméticos são um forte candidato para resolução de de problemas anisotrópicos ou em materiais extremamente não homogêneos.

Exemplos de artefatos não físicos:

- 1. Contaminação de soluções oscilatórias;
- 2. Espectros não fisicos em operadores Laplacianos (quando trabalhando com equações elípticas);
- 3. Instabilidades de propagação de erro no tempo

Apesar de lineares, métodos miméticos podem ser utilizados para resolver equações não lineares.

A solução numérica de uma equação funcional consiste de um conjunto finito de números dos quais a distribuição de um corpo de funções contínua por desconhecida por

partes (unknown piecewise continuos field function) em um domínio de interesse pode ser obtida por aproximação.

O ponto inicial é discretizar a distribuição de u, resultando em uma função malha \tilde{u} , cujo os valores estão sobre uma malha finita, estes valores arranjados constituiem um vetor cujo a i-ésima copmponente é $u_i^* = u(x_i)$. Os pontos da malha pertencem a um espaço vetorial Euclidiano E^d , onde d é o número de variáveis independentes dos argumentos de u.

Quando $d \geq 2$ o conjunto de pontos G da malha de pontos ou mais simplesmente malha, pode parecer com uma estrutura em E^d . Intimamente relacionado com a malha G, podemos então definir uma malha ou um conjunto d-dimensional de c'elulas.

Por exemplo quando d=3 as células podem ser poliedros convexos ou não convexos e os pontos da malha podem estar no centro da célula, centro da face, centro da borda ou nos vértices. Uma dada malha pode estar associada a mais de uma malha G, neste caso temos as malhas intercaladas.

O próximo passo é definir adequadamente a função da malha $u^h = (u_1^h, \dots, u_M^h)$ onde h é normalmente o $tamanho\ da\ malha$.

O método deve prover algum esquema resultando em um sistema de M equações algébricas para os u_i^h , $i=1,\ldots,M$ desconhecidos. Além de possuir um algorítimo para resolver este sistema.

A adequação do modelo se dá na convergência do esquema discreto no qual a u_i^h se aproxima de \tilde{u}_i , isto é $\lim_{h\to 0} (u^h - \tilde{u}) = 0$.

Na maior parte destes casos o melhor é também discretizar o domínio físico, permitindo o uso de diferentes perfis de suposições em cada subdomínio. (por exemplo uso de exponenciais ao invés dos polinômios de Taylor normalmente usados). Assim o método de discretização geral é completado com o uso de perfils parciais para avaliar os valores aproximados das integrais ou derivadas necessárias.

Um grande número de equações diferenciais são criados usando divergentes, rotacionais e gradientes como operadores diferenciais de primeira ordem.

1.5.2 Operadores diferenciais miméticos

Seja u uma função desconhecida, solução para uma equação diferencial, e as leis de conservação associadas. Iremos então desenvolver o método para obter o operador discreto div , grad e rot .

Seja a função vetorial v e a função escalar f. Iremos discretizar ambos operadores utilizando uma **grelha conveniente** para as função vetoriais e escalares simultanêamente.

Esta discretização cria as funções discretas análogas \tilde{v} e \tilde{f} . Que existem em espaços vetoriais de diferentes dimensões finitas.

Seja uma malha cartesiana obtida pela discretização do domínio utilizando os eixos coordenados x, y, z. Os elementos desta malha conhecidos como *células*, são um um poliedro convexo. Neste caso um paralepipedo retangular P, com um centro M_3 , seis faces F, 12 arestas e 8 vértices 3-D nomeados $A, A^*, B, B^*, C, C^*, D, D^*$, conforme visto na figura 25.

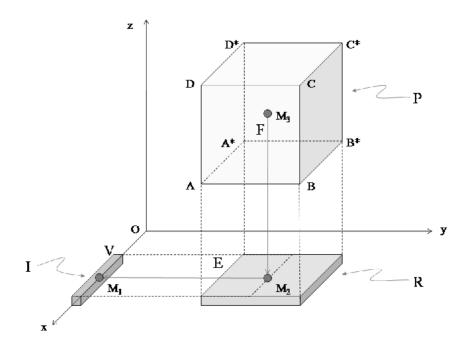


Figura 25 – elementos de uma célula discretizada

Podemos ver problemas bidimensionais se ignorarmos as mudanças de magnitude em uma das direções espaciais (por exemplo z), desta forma o resultado seria a célula 2D R que é uma projeção de P sobre o plano (x, y).

$$R = proj_{x,y}P (1.160)$$

$$E = proj_{x,y}(ADA^*D^*) (1.161)$$

$$M_2 = proj_{x,y}M_3 \tag{1.162}$$

$$I = proj_x R (1.163)$$

$$V = proj_x (proj_{x,y}(A^*B^*C^*D^*))$$
(1.164)

$$M_1 = proj_x M_1 \tag{1.165}$$

Notar na figura 25 que centros projetam em centros.

Seja $\operatorname{grad} f = v$, estamos interessados em $\operatorname{div} v$, isto é: $\operatorname{div} \operatorname{grad} f$. O operador discreto DIV é melhor definino nos centros da célula (DEMONSTRAR)(refazer os calculos

para esta afirmação). Baseando-se nos valores de v no centro das 6 faces retangulares F. Se ignorarmos a variação em z, então precisariamos de informação do centro das quatro arestas E. Se ignorarmos a variação em y, precisaremos encontrar v = grad f nos vértices V do intervalo projetado I = [0, 1]. No qual ha um fluxo de entrada em x = 0 e de saida em x = 1.

Agora precisamos saber os locais para o qual os valores da função escalar f, de forma que o operador discreto 1-D GRAD, seja correspondente ao operador contínuo grad sob a função \tilde{f} nos vertices do intervalo real I.

Para fins de notação utilizaremos as letras no lugar do nome dos operadores:

$$DIV = D (1.166)$$

$$GRAD = G (1.167)$$

$$CURL = C (1.168)$$

Sendo DIV, GRAD, CURL os operadores miméticos equivalentes aos contínuos div, grad, curl.

Seja então a função f aplicada nos pontos adicionais da malha original, esta será chamada de malha intercalada sobreposta a malha original.

A malha original é resultado de uma *malha*, feita de células cobrindo o domínio fisico e constituido por *nós*. A intersecção dos tres planos coordenados (no caso 3D). Estes nós podem ser *nos de contorno* ou *nos internos* (equivalentes a definição no **MDF**).

Assim uma malha 1D original sera formada dos nós na forma $x_i = ih, 0 \le i \le N$ e h = 1/N. O intervalo da i-ésima célula é dado por [ih, (i+1)h].

Os pontos da malha adicionados a malha original através do escalonamento podem ser vistos facilmente como os centros originais das células 1-D, digamos $x_{i+\frac{1}{2}}=(i+\frac{1}{2})h, 0 \le i \le N-1$. Como podemos ver na figura 26.

A discretização mais *simples* da divergência e dos gradiente discretos podem ser definidas na grade intercalada por:

$$(D\tilde{v})_{i+\frac{1}{2}} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h}, 0 \le i \le N - 1 \tag{1.169}$$

$$\left(G\tilde{f}\right)_{i} = \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{h}, 0 \le i \le N - 1 \tag{1.170}$$

Para analises no contorno (x_0, x_N) de $G\tilde{f}$ precisaremos também definir os valores de f_0 e f_N de forma que preservemos a acurácia global.

A forma mais simples de $G\tilde{f}$ no contorno é dada por:

$$\left(G\tilde{f}\right)_{0} = \frac{f_{\frac{1}{2}} - f_{0}}{\frac{h}{2}} \tag{1.171}$$

$$\left(G\tilde{f}\right)_{N} = \frac{f_{N} - f_{N-\frac{1}{2}}}{\frac{h}{2}}$$
 (1.172)

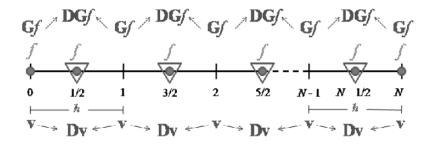


Figura 26 – Malha escalonada 1-D

Então $\tilde{f} \in \mathbb{R}^{N+2}$, $\tilde{v} \in \mathbb{R}^{N+1}$, $D\tilde{v} \in \mathbb{R}^N$ e $G\tilde{f} \in \mathbb{R}^{N+1}$.

Explicar isso melhor

Na minha compreensão: $\operatorname{grad} f(v_N) : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N \text{ e } \operatorname{div} v_N : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}.$

O relacionamento:

$$\tilde{v} \in \mathbb{R}^{N+1} = G\tilde{f} \in \mathbb{R}^{N+1} \tag{1.173}$$

É evidente (pela afirmação acima). O problema está em mostrar a redução da dimensão de \mathbb{R}^{N+2} para \mathbb{R}^{N+1} então \mathbb{R}^{N} .

Suponha uma discretização 1D que contém 5 pontos (0,1,2,3,4). Logo ${\cal N}=4.$

A função vetorial \tilde{v} é calculada nos pontos (0,1,2,3,4) da grelha regular, assim sendo o vetor que representa \tilde{v} na grelha 1D tem tamanho 4, por isso $\tilde{v} \in \mathbb{R}^{N+1} = \mathbb{R}^5$. O mesmo se aplica a $G\tilde{f}$.

 \tilde{f} é calculada na malha intercalada e também nas extremidades (condições de contorno), assim sendo N+2, por isso $\tilde{f} \in \mathbb{R}^{N+2}$

 $D\tilde{v}$ é calculada somente nos pontos da malha intercalada, assim $D\tilde{v} \in \mathbb{R}^N$. O mesmo se aplica para $DG\tilde{f}$.

 \tilde{v} e $G\tilde{f}$ são densidades do vetor de fluxo e **DEVEM** ser avaliadas nos mesmos pontos da grade que são **análogos** aos centros das *faces(F)*, *arestas(E)* e *vértices(V)*, para os modelos 3D, 2D e 1D respectivamente.

 $curl\,v\,\,{\rm e}\,\,v=grad\,f\,\,{\rm s\~ao}\,\,{\rm calculados}\,\,{\rm nos}\,\,^{**}{\rm centros}^{**}\,\,{\rm das}\,\,{\rm fronteiras}\,\,{\rm da}\,\,{\rm superf\'icie}\,\,{\rm e}\,\,$ $div\,v\,\,\acute{\rm e}\,\,{\rm calculado}\,\,{\rm no}\,\,^{**}{\rm centro}^{**}\,\,{\rm das}\,\,{\rm c\'elulas}.\,\,({\rm pag}\,\,47)$

As seguintes condições de controle são aplicadas:

$$\begin{cases} v \cdot \hat{n} \neq 0 & \forall F \in P \text{ (3D)} \\ v = Pi + Qj \implies v \cdot \hat{n} \neq 0 & \forall E \in R \text{ (2D)} \\ v = vi \implies v \cdot \hat{n} \neq 0 & \forall V \in I \text{ (1D)} \end{cases}$$

$$(1.174)$$

Podemos ver a idéia de colapsamento de dimensionalidade na figura 27.

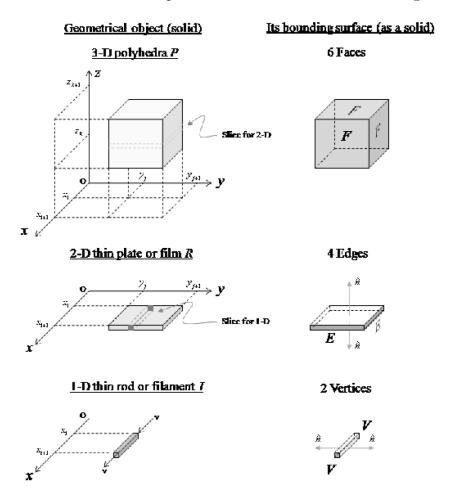


Figura 27 – Colapsamento de dimensionalidade

Assim as propriedades principais dos operadores miméticos de Castillo-Grone sobre malhas uniformes 1-D pode ser visto na tabela 1.

1.5.3 Teorema fundamental do cálculo discreto (malha nodal)

Para
$$\tilde{v} = (v_0, v_1, \dots, v_n)^T \in \mathbb{R}^{N+1}$$
 e $D\tilde{v} \in \mathbb{R}^N$:

$$\langle D\tilde{v}, h1_N \rangle = v_N - v_0 \tag{1.175}$$

Operador	Comentário
$D\tilde{v}_{const} = 0$	Preservação do fluxo
$G\tilde{f}_{const} = 0$	Gradiente de função constante
$CG\tilde{f} = 0$	Curl do gradiente é 0
$DC\tilde{v} = 0$	Div do curl é 0
$DG\tilde{f} = Lf$	Div do grad é o laplaciano

Tabela 1 – Propriedades dos operadores diferenciais de Castillo-Grone

(Integração pela regra do ponto médio composto.)

Para lembrar:

$$(D\tilde{v})_{i+\frac{1}{2}} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h}, 0 \le i \le N - 1 \tag{1.176}$$

1.5.4 Análise de matrizes

Este texto é baseado no estudo de (CASTILLO; GRONE, 2003) (A matrix analysis approach to Higher-Order Approximations for divergence and gradientes satisfying a global conservation law).

1.5.4.1 Introdução

O objetivo é construir operadores diferenciais discretos para as operacoes de **gradiente** e **divergente** que possuam alta ordem de aproximação nos contornos em grades unidimensionais intercaladas de forma que satisfaçam a lei de conservação global.

O problema central é encontrar aproximações de alta ordem do divergente e do gradiente que satisfaçam o análogo discreto do teorema do divergente dado por:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{v} f dV + \int_{\Omega} \vec{v} \operatorname{grad} f dV = \int_{\partial \Omega} f \vec{v} \cdot \vec{n} dS$$
 (1.177)

Sendo f uma função escalar e v uma função vetorial.

(TODO) Adicionar a forma discreta com operadores de castillo-grone

Tres propriedades estao relacionadas:

- 1. Teorema do divergente;
- 2. Conservação local (tomando f = 1, na região de uma unica celula)
- 3. Conservação global (f = 1 em toda região)

Chamamos de mimetica as discretizacoes que mantem propriedades analogas a estas.

Como exemplo, tomemos o intervalo na reta [0, 1] podemos rescrever o lado esquerdo da equação (1) como:

$$\int_{0}^{1} \frac{dv}{dx} f \, dx + \int_{0}^{1} v \frac{df}{dx} \, dx \tag{1.178}$$

Integrando por parte:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f \, dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} \, dx = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$
 (1.179)

(TODO) Demonstrar isso

Se assumirmos que $f\equiv 1$ na equacao acima (pela lei de conservacao) temos:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} 1 \, dx + \int_0^1 v \frac{d1}{dx} \, dx \tag{1.180}$$

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} \, dx + \int_0^1 v \cdot 0 \, dx \tag{1.181}$$

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} \, dx = v(1) - v(0) \tag{1.182}$$

Iremos então construir aproximações de alta ordem de $\frac{d}{dx}$ que satisfazem a lei de conservação global.

Usaremos para tal uma grade operadores-suporte uniforme como mostrado na figura 28.

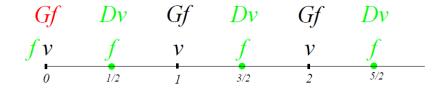


Figura 28 – Mostra a malha nos pontos [0,1,2] e com grade intercalada $\left[\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2}\right]$. Bem como onde se aplicam as funcoes e os operadores.

Escolhemos N>0 o numero de células e $h=\frac{1}{N}$ o espacamento entre pontos. Os *nos* da grade são definidos como:

$$x_i = ih, \ 0 \le i \le N \tag{1.183}$$

Cada célula então é composta dos intervalos:

$$[ih, (i+1)h]$$
 (1.184)

com centros

$$x_{i+\frac{1}{2}} = \left(i + \frac{1}{2}\right)h, 0 \le i \le N - 1 \tag{1.185}$$

Percebemos então pela figura \ref{figura} que o operador gradiente mimetico G ira atuar nos pontos da grade principal sobre os valores f e o operador divergente mimetico D sera calculado na grade intercalada utilizando os valores v.

1.5.5 Operadores discretos de segunda ordem

1.5.5.1 Divergente

Como o divergente é aplicado somente nos pontos interiores da grade. Defininos ele de forma simplificada como:

$$(Dv)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h}, \ 0 \le i \le N - 1 \tag{1.186}$$

1.5.5.2 Gradiente

Como o gradiente é tem que ser calculado nas extremidades definimos então sua forma para cada uma das regioes.

Contorno (boundary)

$$(Gf)_0 = \frac{f_{\frac{1}{2}} - f_0}{h/2} = \frac{2\left(f_{\frac{1}{2}} - f_0\right)}{h} \tag{1.187}$$

$$(Gf)_N = \frac{f_N - f_{N-\frac{1}{2}}}{h/2} = \frac{2\left(f_N - f_{N-\frac{1}{2}}\right)}{h},\tag{1.188}$$

Interno

$$(Gf)_i = \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{h} \ 1 \le i \le N - 1 \tag{1.189}$$

Assim temos os operadores com precisao de segunda ordem, exceto os operadores gradiente nas extremidades 0, N.

(TODO) Ler os artigos de *Summation by Parts* (referencias 2, 12, 13, 14)

1.5.6 Esquemas de discretização mimética

Usando o modelo da malha uniforme a função v tornase um vetor com N+1 elementos na forma

$$v = (v_0, v_1, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^{N+1} \tag{1.190}$$

E o operador divergente se torna uma matriz $N \times (N+1)$ de forma que a multiplicação matricial:

$$Dv = D_{N,(N+1)} \cdot v_{(N+1),1} \tag{1.191}$$

e' valida e retorna um vetor com N elementos. Assim

$$Dv \in \mathbb{R}^N \tag{1.192}$$

1.5.7 Conservação

Seja então um vetor particular e cujo todos os seus termos são constantes iguais na forma

$$e = (1, 1, \dots, 1), \ e \in \mathbb{R}^{N+1}$$
 (1.193)

Queremos então que a matriz D satisfaca a propriedade

$$De = 0, (1.194)$$

ou seja se v é uma função constante, neste caso em particular v=e, seu divergente é 0.

DUVIDA: Equivalente dizer que as somas das linhas de D são $0,0,\dots,0$.

De forma conveniente iremos podemos expressar as leis de conservação como um produto interno

$$\langle \nabla \cdot v, 1 \rangle = v(1) - v(0) \tag{1.195}$$

De forma discreta temos:

$$\langle Dv, e \rangle = v(N) - v(0) \tag{1.196}$$

Esta condicao pode ser expressa como uma matriz D cujo as colunas somam $-1, 0, 0, \dots, 0, 1$, equivalentemente em produto matricial temos:

$$e^T D = (-1, 0, \dots, 0, 1)$$
 (1.197)

É desejado que D seja uma matriz esparsa para que estes métodos tenham uso pratico.

Os valores de aproximação em qualquer no devem ser determinados pelos seus vizinhos mais proximos desta forma D se apresentara como uma matriz em bandas mais especificamente uma matriz de Toeplitz onde os termos diagonais (e os adjacentes) são diagonalmente constantes.

Estas são caracteristicas importante para os esquemas de discretizacao.

Se a largura da banda de D é b, o esquema mimetico ira permir que D seja descrito em dimensao N para N>3b-1.

1.5.8 Simetria

Seja uma função w definida como:

$$w(x) = v(1-x) \ 0 < x < 1 \tag{1.198}$$

Desta forma a divergência de w é simetrica a divergência de v. Isto e':

$$\nabla \cdot w = -\nabla \cdot v \tag{1.199}$$

(DEMONSTRAR) esta passagem acima.

Assim queremos encontrar uma matrix D' tal que:

$$D' = -D$$

Denotemos então a matriz de permutação:

$$P_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Seja então $D_{N,(N+1)}$, definimos a versao mimetica do simetrico do operador divergente -D como:

$$P_N D P_{N+1} = -D$$

Chamaremos esta matriz de **simetrica-centro-deslocada**.

1.5.8.1 Resumo das propriedades de D

- 1. A soma dos valores por linha de $D \notin 0$;
- 2. De = 0;
- 3. D é bandada (com b a largura da banda de D);
- 4. D tem estrutura tipo Toeplitz nas linhas interiores;
- 5. D é definida independente do numero de pontos da grade (N);
- 6. D é *simetrica-centro-deslocada*.

1.5.9 Encontrando o operador mimético

Encontrar o operador mimetico discreto do gradiente é equivalente a encontrar a versão mimética da divergência quando se utiliza o produto interno convencional (**entender melhor esta afirmação**).

A matriz D tem dimensão $N \times (N+1)$, e a matriz \hat{D} é a matriz D aumentada em duas linhas (a primeira e a ultima) de zeros, assim a matriz \hat{D} tem dimensão $(N+2)\times (N+1)$

Seja G uma matriz $(N+1) \times (N+2)$ a versão discreta do gradiente.

Se v é uma (N+1)-upla, f é uma (N)-upla $\left(f_{\frac{1}{2}},f_{\frac{3}{2}},\ldots\right)$, assim \hat{f} é igual a f adicionados dos pontos de contorno 0,N assim \hat{f} é uma (N+2)-upla.

Assim reescrevemos a equação continua

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f \, dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} \, dx = v(1)f(1) - v(0)f(0) \tag{1.200}$$

Da forma discreta como:

$$\langle \hat{D}v, f \rangle + \langle v, G\hat{f} \rangle = v_N f_N - v_0 f_0 \tag{1.201}$$

ou

$$\langle \hat{D}v, f \rangle + \langle G^t v, \hat{f} \rangle = \langle Bv, \hat{f} \rangle$$
 (1.202)

Com B de dimensões $(N+2) \times (N+1)$

$$B = \begin{bmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
 (1.203)

Sendo $\hat{D} + G^t = B$ assim G deve ter a forma:

$$G = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 0 \\ \vdots & -D^t & \vdots \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$
 (1.204)

Assim o operador discreto G é o adjunto negativo de D

1.5.10 Produto interno generalizado

Não é possível satisfazer todas as propriedades desejadas em conjunto com as condições de alta ordem (pag 132). Para evitar este problema propoe-se utilizar produtos internos com pesos (não euclidianos), estes produtos internos são descritos da forma:

$$\langle u, v \rangle = \langle Qu, v \rangle = v^t Q u$$
 (1.205)

Onde Q é uma matriz $N \times N$, positiva definida. Outra forma de escrever seria utilizando uma matriz E de ordem qualquer tal que:

$$E^t E = Q$$

desta forma

$$\langle u, v \rangle = \langle Eu, Ev \rangle = v^t E^t E u$$
 (1.206)

Chamamos este produto interno adicionado da matriz Q (ou E) de produto interno generalizado. Desta forma as equações:

Se tornam

$$\langle Dv, e \rangle_Q = v_N - v_0 \tag{1.207}$$

com

$$e^t QD = (-1, 0, \dots, 0, 1)$$
 (1.208)

Onde Q é diagonal, centro simétrica e independente da dimensão do espaço da malha (N)

1.5.11 Divergênte de alta ordem

Seja D uma matriz $N \times (N+1)$ (como já definido) representando a divergência discretizada. Dizemos que D é uma **aproximação de ordem K^{**} se D é exato para polinômios até a ordem k mas não k+1. Existe então uma matriz S chamada **matriz de estencíl natural**. Por exemplo para um caso de quarta ordem (k=4) a banda de S é igual a 4.

(VERIFICAR) em (CASTILLO, 1995), como gerar os coeficientes interpoladores para o polinomio de Lagrange.

Esta matriz pode ser descrita independente de N se $N \geq k+1$. É de quarta ordem no interior mas não nas bordas.

Para qualquer k existe uma matriz S ordem $N \times (N+1)$ canonica com banda b=k (por isso a restrição de $N \geq k+1$.

A matriz D (divergencia discreta) será então a versão modificada de S. Como S ja possui estencil de ordem K no interior, sera necessario somente modificar as primeiras e ultimas t linhas de S para obter D (com t = b).

Seja A uma matriz $t \times l$. Chamamos de D(A) a matriz obtida ao substituir as primeiras t linhas de S pela matriz

1.6 Sensitividade e acurácia

Estudos baseados em (CASTILLO, 1995) The sensitivity and accuracy of fourth order finite difference schemes on on uniform grids in one dimension.

O objetivo é construir aproximações que satisfazem os relacionamentos simétricos encontrados em operadores fundamentais: Divergente, Gradiente e Laplaciano.

Exemplo:

 $DIV^* = -GRAD$

LAP = DIV GRAD

(CASTILLO, 1995) afirma que

O uso de aproximações de alta ordem reduz o numero de pontos necessários na discretização e consequentemente reduz o custo computacional para atingir a acurácia desejada.

Os métodos utilizados são baseados no método de mapeamento. Neste método uma função definida em uma grade nao uniforme é primeiro mapeada para uma função definida em uma grade uniforme de referencia.

As derivadas são aproximadas na grade uniforme de referência e então aproximações são mapeadas de volta no espaço da malha não uniforme original.

A acurácia do método depende da suavidadde da grade e da função sendo diferenciada. Por isso, uma aproximação de quarta ordem em uma grade suave degenera para uma ordem inferior em grades grosseiras (rough).

Apesar desta perda, veremos que esta perda de precisão ocorre de forma elegante e que também as discretizações de quarta ordem são computacionalmente mais eficientes do que as discretizações de segunda ordem convencionais.

A construção e análise das aproximações dos esquemas alta ordem são feitas inicialmente utilizando interpolação de Lagrange (poderiamos usar SPLINES?) para construir aproximações de alta ordem em uma malha uniforme e so então usando o método de mapeamento para extender a aproximação para malhas não uniformes. A aproximação resultante e então mostrada como um exemplo do método do operador-suporte e consequentemente o esquema é mimético.

1.6.1 Discretização e erro de truncamento

Em altas dimensões o gradiente **grad** opera em uma função escalar para produzir uma função vetorial, enquanto divergente **div** opera em uma função vetorial para produzir uma uma função escalar.

Em uma dimensão a função vetorial $w = (w_x, 0, 0)$ tem um único componente e div é a derivada deste componente. O *grad* é a derivada convencional de uma função escalar.

Precisamos de aproximações que satisfaçam as propriedades de simetria, no contínuo temos as seguintes relações:

$$div^* = -grad (1.209)$$

$$\Delta = div \ grad \tag{1.210}$$

VER MAIS SOBRE A relação adjunta na primeira equação, implica no laplaciano ser um operador simétrico negativo.

Sem perda de generalidade, tomemos um domínio das funções a serem discretizadas no intervalo unitário [0, 1].

Dividimos este intervalo em células com pontos chamados *nós*.

Chamaremos de **funções nodais** as funções definidas sobre os nós, estas funções são análogas a funções vetoriais.

Por outro lado existem as **funções celulares** e são análogas as funções escalares e são definidas em **algum ponto** dentro das células.(a ideia de célula não foi definida ainda(

Considere o domínio [0,1] e a grade irregular com os nós $\{x_i, i=1,\ldots,M\}$, com $x_i < x_{i+1}$

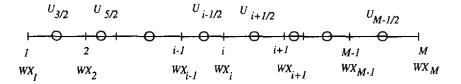


Figura 29 – Representação da malha regular e escalonada unidimensional

O tamanho da grade é medido como $\Delta x = \max_{1 \le i \le M-1} |x_{i+1} - x_i|$.

Em uma dimensão as funções vetoriais discretas tem uma componente $\vec{W} = (WX, 0, 0)$ com valores definidos nos nós: $WX = \{WX_1, WX_2, \dots, WX_M\}$.

Dentro de uma célula com pontos intervalares x_i e x_{i+1} , introduzimos o ponto $\hat{x}_{i+\frac{1}{2}}$, em uma malha regular o ponto \hat{x} é o ponto médio da célula $\hat{x}_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+\frac{1}{2}}$.

O ponto $\hat{x}_{i+\frac{1}{2}}$ é a localização onde as funções escalares discretas $U=(U_{\frac{3}{2}},\ldots,U_{M-\frac{1}{2}})$ são definidas.

Para manter a analogia (funcoes vetoriais nos nós e escalares nas celulas) A divergencia discreta **DIV** mapeia funções nodais (vetoriais) para funções

celulares (escalares) e o operador gradiente discreto **GRAD** mapeia funções celulares (escalares) em funções nodais (vetoriais) as aproximaçõs mais simples são dadas por:

$$\left(DIV\ \vec{W}\right)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\vec{W}_{i+1} - \vec{W}_i}{x_{i+1} - x_i} \tag{1.211}$$

$$(GRAD\ U)_{i} = \frac{U_{i+\frac{1}{2}} - U_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}}$$
(1.212)

Estas aproximações são de segunda ordem em grades uniformes, mas o gradiente é primeira ordem em grades não uniformes.

1.6.2 Erro de truncamento

Definimos o erro de truncamento como a diferença entre a projeção entre a derivada de uma função suave em um ponto da grade e a aproximação da diferença discreta usando os valores da função suave projetadas em um ponto da grade.

O operador de **projeção célular** p_h mapeia uma função escalar suave em funções discretas em valores nas células.

$$(p_h u)_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} \equiv u\left(\hat{x}_{i+\frac{1}{2}}\right) \tag{1.213}$$

O operador de **projeção nodal** P_h mapeia uma função vetorial suave aos seus valores nos nós

$$(P_h \vec{w})_i = \vec{w}_i \equiv \vec{w}(x_i) \tag{1.214}$$

Se \vec{w} é uma função vetorial suave então o erro de truncamento da divergencia discreta ψDIV é a função nodal

$$\psi \ DIV \ \vec{w} = p_h \left(\frac{d\vec{w}}{dx}\right) - DIV \left(P_h \vec{w}\right) \tag{1.215}$$

Se u é uma função escalar vetorial, o erro de truncamento do gradiente discreto $\psi GRAD$ é:

$$\psi \ GRAD \ u = GRAD \left(p_h u \right) - P_h \left(\frac{du}{dx} \right) \tag{1.216}$$