

Universidade Federal de Uberlândia

Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal

Curso de Matemática

**Teste de verificação de código para o
cálculo de derivada com singularidades
salto**

por

Welton Costa Lavércio [†]

Bacharelado em Matemática - Ituiutaba - MG

Orientador: Prof. Dr. Homero Ghioti da Silva

Teste de verificação de código para o cálculo de derivada com singularidades salto

Este exemplar corresponde à redação final da Monografia devidamente corrigida e defendida por **Welton Costa Lavércio** e aprovada pela comissão julgadora.

Ituiutaba, 18 de junho de 2021.

Prof. Dr Homero Ghioti da Silva

Banca examinadora:

Prof. Dr Homero Ghioti da Silva.

Prof. Dr. José Laércio Doricio.

Prof. Dr. Josuel Kruppa Rogenski.

Monografia apresentada ao Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal, UFU como requisito parcial para obtenção do título de **Bacharelado em Matemática**.

Ao meu Orientador

Homero

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a toda minha família por sempre apoiar-me no caminho que decidi trilhar, em especial minha mãe e irmã.

Ao meu orientador Prof. Dr. Doutor Homero Ghioti da Silva, agradeço pela paciência e todo conhecimento compartilhado, seus conselhos ajudaram-me em diversos momentos da graduação e ocasionaram-me persistência diante das dificuldades.

Ao Programa de Educação Tutorial (PET), por proporcionar-me maior estabilidade durante minha graduação e propiciou conhecer pessoas incríveis.

Ao Prof. Dr. Marcelo Gonçalves Oliveira Vieira, tutor no PET, por instruir-me de maneira a aproveitar as oportunidades e evoluir academicamente.

A todos professores com quais tive aula, por contribuir de forma direta com a minha formação acadêmica.

Aos professores Dr. José Laércio Doricio e Dr. Josuel Kruppa Rogenski, por aceitar participar da banca de defesa desse TCC.

A todas as amigas que construí durante a graduação, em especial Pedro Rangel, meu companheiro de casa durante muito tempo, e a Roberta Agnes Mendes Melo, minha principal companheira de estudos durante a graduação e atual companheira para a vida.

Todas as amigas envolvidas possibilitaram sentir-me em casa, mesmo à mais de 600 km da minha cidade natal. As brincadeiras, madrugadas viradas em festas ou estudando, almoços de domingo e aprendizados marcaram-me e serão guardados na memória.

A todos os funcionários da Universidade Federal de Uberlândia que fizeram parte de minha jornada tanto de forma direta quanto indireta.

RESUMO

Quando tratamos da utilização de computadores na resolução de modelos matemáticos é importante se ter certeza que os cálculos foram realizados corretamente, isso para garantir se não houve erros no processo de elaboração do código computacional. O objetivo do presente trabalho foi realizar um teste de verificação de código para o cálculo da primeira derivada de uma função real com singularidade do tipo salto. Para realizar o cálculo de uma derivada com singularidade do tipo salto utilizou-se o método da interface imersa, que é uma alternativa para resolver, numericamente, problemas de valor inicial e/ou contorno em domínios com geometrias imersas complexas. A escolha desses métodos foi devido a familiaridade adquirida durante a disciplina Mecânica dos Fluidos Computacional e o interesse em ampliar os conhecimentos nessa área. Para desenvolver tais métodos estudou-se os conceitos de erros numéricos, diferenças finitas explícitas e compactas, correção para série de Taylor em funções com singularidades e verificação de código com o método das soluções manufaturadas. A metodologia adotada foi quantitativa de caráter bibliográfico e as principais referências para a realização desses estudo foram [1], [2], [3], [6], [7], [9], [10], [11], [14], [15],[16] e [17]. Desenvolve-se esquemas de diferenças finitas explícitas de 2^a ordem de precisão e de diferenças finitas compactas de 6^a ordem de precisão corrigidos para realizar o cálculo de derivada em uma função real com uma singularidade do tipo salto e um teste de verificação com o (MSM) utilizando 10 níveis de malhas no refinamento, para alcançar a faixa assintótica de ajuste de ordem de precisão. Os resultados dos testes foram satisfatórios tanto para o esquema de diferenças finitas explícitas corrigido de 2^a ordem de precisão quanto para o de diferenças finitas compactas corrigido de 6^a ordem

de precisão, já que a precisão formal é mantida em todo domínio inclusive na vizinhança da singularidade.

Palavras-chave: Método das Soluções Manufaturadas; Verificação de código; Método da interface Imersa; Alta ordem de precisão; Diferenças finitas compactas.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	vii
Introdução	1
Estrutura dos Tópicos Apresentados	3
1 Conceitos preliminares	4
1.1 Erros	4
1.1.1 Erros na fase de modelagem	5
1.1.2 Erros na fase de resolução	6
1.1.3 Erros de programação	9
1.2 Malhas computacionais	10
1.2.1 Cálculo de erro na malha computacional.	11
1.3 Teste de Verificação usando o Método das Soluções Manufaturadas	12
1.3.1 Testes de Verificação	12
1.3.2 Método das Soluções Manufaturadas	13
2 As diferenças finitas explícitas e compactas	15
2.1 Fórmula de Taylor	15
2.2 Diferenças Finitas Explícitas	17
2.2.1 Diferenças Finitas explícitas clássicas	17
2.2.2 Esquemas clássicos	20

2.2.3	Diferenças Finitas Explícitas de até 4ª ordem de aproximação . . .	20
2.2.4	Esquemas de até 4ª ordem de aproximação	23
2.3	Aplicando as Diferenças Finitas Explícitas	24
2.4	Diferenças Finitas Compactas	27
2.4.1	Diferenças Finitas Compactas de até 4ª ordem de aproximação . . .	27
2.4.2	Esquemas de até 4ª ordem de aproximação	30
2.4.3	Diferenças Finita Compactas de até 10ª ordem de aproximação . . .	31
2.4.4	Esquemas de até 10ª ordem de aproximação	34
2.5	Aplicação das Diferenças Finitas Compactas	36
3	Cálculo de derivada em funções com singularidade salto	40
3.1	Série de Taylor e funções com singularidade tipo salto	40
3.1.1	Correção aplicada em esquemas de Diferenças Finitas	42
3.1.2	Obtendo as $[f^k]_\alpha$ para o termo corretor	44
3.2	Corrigindo alguns esquemas convencionais	46
3.2.1	Correção para as diferenças finitas explícitas	46
3.2.2	Correção para as diferenças finitas compactas	47
4	Resultados dos Testes de verificação de código para cálculo de singularidade salto	50
4.1	Teste de verificação usando diferenças finitas explícitas corrigidas de 2ª ordem de aproximação.	51
4.2	Teste de verificação usando diferenças finitas compacta corrigidas de 6ª ordem de aproximação.	54
	Considerações	58
	Bibliografia	60

LISTA DE FIGURAS

1	Geometria complexa Ω com a fronteira $\partial\Omega$ imersa em uma malha computacional	1
1.1	Esquema de erros.	5
1.2	Representação do número 25 na calculadora	8
1.3	Representação com as explicações	8
1.4	Representação do número decimal 0.1 na calculadora.	8
3.1	Uma função f com uma singularidade no ponto x_α	41
3.2	Esquema de estêncil usada para obter os saltos. O símbolo $\bullet$ indica pontos no esquema, enquanto o símbolo $\circ$ indica pontos não usados no esquema. . .	45
4.1	Derivada da função $\text{sen}(x)$ com uma singularidade tipo salto em $x = 5.5$. .	51
4.2	Comparação entre a solução numérica e manufaturada usando 49 pontos na malha.	53
4.3	Teste de convergência de malhas usando diferenças finitas corrigidas de 2^a ordem de precisão.	53
4.4	Derivada da função $\text{sen}(x)$ com uma singularidade tipo salto em $x = 4.2$. .	54
4.5	Comparação entre a solução numérica e manufaturada utilizando 49 pontos na malha.	56
4.6	Teste de convergência de malhas usando diferenças finitas corrigidas de 6^a ordem de precisão.	56

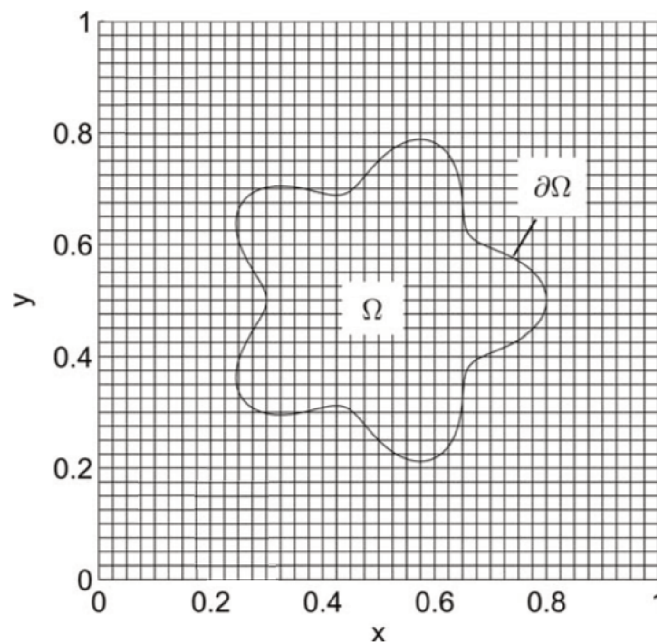
LISTA DE TABELAS

2.1	Dados calculados	25
2.2	Comparação entre soluções	27
2.3	Algumas esquemas gerados	31
2.4	Dados calculados	37
2.5	Comparação entre os métodos	39
4.1	Malhas usadas para o TCM	52
4.2	Malhas usadas para o TCM	55

INTRODUÇÃO

Métodos de fronteira imersas (MFI) e os métodos de interface imersas (MII) foram introduzidos como alternativa para resolver numericamente problemas de valor inicial ou de contorno em domínios com geometrias complexas. A figura 1 representa um exemplo desse tipo de geometria abordada nesses métodos.

Figura 1: Geometria complexa Ω com a fronteira $\partial\Omega$ imersa em uma malha computacional



Fonte: Figura adaptada pelo pesquisador de Linnick e Fasel, 2005 pág. 158.

Os primeiros trabalhos em MFI remontam à década de 70 com aos trabalhos de Peskin (1972,1977), com o problema de escoamento de fluidos simulando a dinâmica do sangue em válvulas mitrais do coração. O modelo matemático assume um campo de força onde a geometria da superfície imersa é determinada como parte da solução global. Esses trabalhos foram um grande salto para o conhecimento e o desenvolvimento dos estudos de fronteira imersa. Desde então vários pesquisadores da área vem procurando formas de melhorar os resultados alcançados com esse método. Segundo Linnick e Fasel (2005), um avanço significativo para o método da fronteira imersa foi feito por LeVeque e Li (1994) quando introduziram a ideia do método da interface imersa, porém foram Wiegmann e Bude (2000), que propuseram o método da interface imersa. Esses pesquisadores fizeram a observação importante de que as técnicas padrões de diferenças finitas falham quando aplicadas em funções não suaves, já que expansões da série de Taylor nas quais elas são baseadas são inválidas. A ideia principal do MII é que os esquemas de diferenças finitas nos cálculos próximos à interface imersa devem ser corrigidos, a fim de manter a precisão formal do esquema numérico. O artigo de Linnick e Fasel traz uma abordagem para esse problema utilizando diferenças finitas compactas de quarta ordem aproximação. Naquele trabalho foram realizados simulações de problemas clássicos de instabilidade hidrodinâmica em camada limite e testes de verificação usando o método das soluções manufaturadas.

O objetivo deste trabalho foi estudar o método da interface imersa e elaborar um algoritmo, em linguagem Fortran, para calcular a derivada em uma função real com singularidade do tipo salto utilizando alta ordem de precisão, e depois realizar um teste de verificação de código por meio do método das soluções manufaturadas (MSM) para certificar que a ordem de aproximação formal dos métodos empregados tenham se mantido.

Esse trabalho foi desenvolvido, pela necessidade de se realizar uma iniciação científica dentro do Programa de Educação Tutorial (PET) e o interesse pela área de Mecânica dos Fluidos, gerado durante a disciplina optativa ofertada pelo Prof. Dr. Homero. Nesse contexto surgiu a oportunidade de realizar um projeto sobre o método da interface imersa, área essa que tem atraído cada vez mais pesquisadores. Além disso, a importância de se realizar esse projeto se torna notável devido ao fato que vários conteúdos abordados são assuntos não vistos no curso de Bacharelado em Matemática da UFU-Campus Pontal. O fato de se tratar de um assunto recente, faz com que se abra possibilidades para a realização de projetos futuros os quais resultariam em uma contribuição significativa para

essa área de estudo.

Os resultados apresentados mostraram a eficácia do teste de verificação com MSM para um código de alta ordem de precisão, quando aplicado em um ambiente controlado e no contexto das funções reais com uma singularidade do tipo salto.

O trabalho foi estruturado como segue:

- No capítulo 1, apresenta-se uma revisão de **Erros numéricos** e **Malhas computacionais**. Esses conceitos são relevantes quando se trabalha com métodos numéricos. Além disso foram apresentados os conceitos de **Verificação de código** e o de **Método das Soluções Manufaturadas**, a verificação de código é um conceito importante, pois com ela é capaz de certificar que o método proposto mantém a ordem de precisão formal descrita na literatura, já o método das soluções manufaturadas foi a estratégia utilizada para realizar o teste no algoritmo construído pelo pesquisador e orientador. O conteúdo que foi desenvolvido nesse capítulo teve como base as referências [1], [2], [10], [11], [14], [15] e [16].
- No capítulo 2, apresenta-se uma revisão da **Fórmula de Taylor**, **Diferenças Finitas Explícitas** e **Diferenças Finitas Compactas**. A fórmula de Taylor é um conceito fundamental para se trabalhar com alguns métodos numéricos, enquanto as diferenças finitas explícitas e compactas são métodos convencionais para cálculo aproximado das derivadas de uma função. O conteúdo que foi desenvolvido nesse capítulo teve como base as referências [1], [3], [8], [6], [11] e [15].
- No capítulo 3, apresenta-se a **Série de Taylor em funções com singularidades tipo salto** e a **Correção de alguns esquemas convencionais de 2ª e 6ª ordem**, com a série Taylor para singularidades foi possível realizar a correção em alguns esquemas de diferenças finitas obtidos no capítulo 2 e aplicá-los para calcular a derivada de funções com singularidade do tipo salto. O conteúdo que foi desenvolvido nesse capítulo teve como base as referências [5], [9] e [17].
- No capítulo 4, apresenta-se os **Resultados** obtidos com os testes de verificação com o método das soluções manufaturadas. O conteúdo desenvolvido nesse capítulo foi todo elaborado pelo pesquisador.

CAPÍTULO 1

CONCEITOS PRELIMINARES

Soluções numéricas devem ser obtidas havendo atenção à quantificação dos erros devido o uso dos computadores para resolução dos modelos matemáticos. A proposta desse capítulo é apresentar uma classificação dos **erros** e suas diferentes fontes bem como uma revisão da discretização do domínio computacional. A escolha da **malha computacional** também foi apresentada juntamente com o **Método das Soluções Manufaturas**, uma das formas de se realizar verificação de códigos. As referências utilizadas serão indicadas em cada item desse capítulo.

1.1 Erros

O estudo dessa seção foi baseado principalmente nas referências [1] e [15].

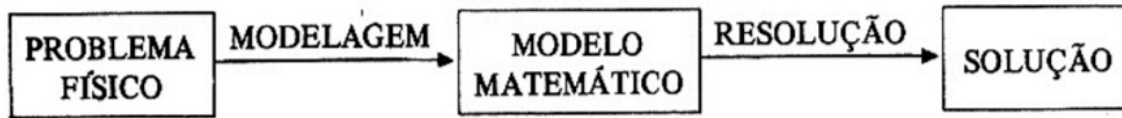
A obtenção de uma solução numérica para um problema físico por meio de aplicação de métodos numéricos nem sempre fornece valores que se encaixam dentro de limites razoáveis. Esta afirmação é verdadeira mesmo quando se aplica um método adequado e os cálculos são efetuados de uma maneira correta.

Esta diferença entre a solução numérica e a solução real do problema físico é chamada de **erro** e é inerente ao processo.

Para facilitar a apresentação das fontes de erros, no processo de solução de um problema físico, por meio de aplicação de métodos numéricos, é apresentada a figura 1.1.

Duas fases podem ser identificadas na figura 1.1 são elas a:

Figura 1.1: Esquema de erros.



Fonte: Barroso, 2006, pág.1.

1. MODELAGEM - é a fase de obtenção de um modelo matemático que descreve o comportamento do sistema físico em questão.
2. RESOLUÇÃO - é a fase de obtenção da solução do modelo matemático através da aplicação de métodos numéricos.

1.1.1 Erros na fase de modelagem

Ao se tentar representar um fenômeno do mundo físico por meio de um modelo matemático, raramente se tem uma descrição correta deste fenômeno. Normalmente, são necessárias várias simplificações do mundo físico para que se tenha um modelo matemático com o qual se possa trabalhar.

Exemplo 1.1.

Para o estudo do movimento de um corpo sujeito a uma aceleração constante, tem-se a seguinte equação:

$$d = d_0 + v_0 t + \frac{1}{2} a t^2 \quad (1.1)$$

onde:

d - distância percorrida

d₀ - distância inicial

v₀ - velocidade inicial

t - tempo

a - aceleração

Suponha que um engenheiro queira determinar a altura de um edifício e que para isso disponha apenas de uma bolinha de metal, um cronômetro e a fórmula acima, ele sobe então ao topo do edifício e mede o tempo que a bolinha gasta para tocar o solo, obtendo o

valor de 3 segundos.

Substituindo essa informação na equação (1.1) e considerando $a = 9.8 \text{ m/s}$ obtém-se:

$$d = 0 + 0 \cdot 3 + \frac{1}{2} \cdot 9.8 \cdot 3^2$$
$$d = 44.1\text{m}$$

É bem provável que a resposta obtida no exemplo 1.1 não seja precisa, pois no modelo matemático não foram consideradas outras forças como, por exemplo, a resistência do ar, a velocidade do vento etc. Além destas, existe um outro fator que tem muita influência: a precisão da leitura do cronômetro, pois para uma pequena variação no tempo medido existe uma grande variação na altura do edifício. Se o tempo medido fosse 3.5 segundos ao invés de 3 segundos, a altura do edifício seria de 60 metros. Em outras palavras, para uma variação de 16.7% no valor lido no cronômetro, a altura calculada apresenta uma variação de 36%.

De certa forma pode-se dizer que na fase de modelagem ocorre dois tipos de erros, são eles o **erro de modelagem** e o **erro na entrada de dados**. O erro de modelagem basicamente é a não consideração de algumas informações na montagem do seu modelo matemático, ou seja, é o erro originário devido a escolha do sistema de equações que o descreve. Enquanto o erro na entrada de dados é o erro que se dá devido a precisão dos dados obtidos, ou seja, é originário da não precisão das ferramentas na coleta de dados.

Com o exemplo 1.1 pode-se notar a grande influência que o modelo matemático e a precisão dos dados obtidos exercem sobre a confiabilidade da resposta obtida.

1.1.2 Erros na fase de resolução

Para a resolução de modelos matemáticos, muitas vezes torna-se necessário a utilização de instrumentos de cálculo que necessitam, para seu funcionamento, que sejam feitas certas aproximações. Tais aproximações podem gerar erros que serão apresentados a seguir.

Erros de Arredondamento

O erro de arredondamento é resultante do uso do computador na obtenção da solução do modelo matemático devido à limitação em ser armazenar grandes quantidades de dígitos dos números.

Para exemplificar, um número é geralmente representado na calculadora ou no computador no sistema binário, enquanto que o homem lida com a base decimal. A conversão de base para comunicação entre o computador e o homem resulta em erro de arredondamento como segue:

Um número x é representado na base β por:

$$x = \pm \left[\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \frac{d_3}{\beta^3} + \cdots + \frac{d_t}{\beta^t} \right] \cdot \beta^{exp}$$

onde:

d_i - são números inteiros contidos no intervalo

$$0 \leq d_i \leq \beta - 1; i = 1, 2, \dots, t.$$

exp - representa o expoente de β e assume valores entre

$$I \leq exp \leq S$$

I, S - limite inferior e limite superior, respectivamente, para a variação do expoente.

$\left[\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \frac{d_3}{\beta^3} + \cdots + \frac{d_t}{\beta^t} \right]$ - é chamada de mantissa e é a parte do número que representa seus dígitos significativos e t é o número de dígitos significativos do sistema de representação, comumente chamado de precisão da máquina.

Exemplo 1.2.

Em uma calculadora cujo sistema de representação utilizado tenha $\beta = 2, t = 10, I = -15$ e $S = 15$. O número 25 na base decimal é assim representado:

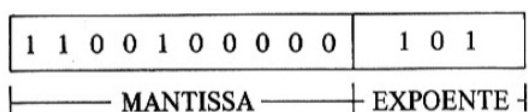
$$25_{10} = 11001_2 = 0.11001 \cdot 2^5 = 0.11001 \cdot 2^{101}$$

$$\left(\frac{1}{2^1} + \frac{1}{2^2} + \frac{0}{2^3} + \frac{0}{2^4} + \frac{1}{2^5} + \frac{0}{2^6} + \frac{0}{2^7} + \frac{0}{2^8} + \frac{0}{2^9} + \frac{0}{2^{10}} \right) \cdot 2^{101}$$

ou, de uma forma mais compacta como na figura 1.2.

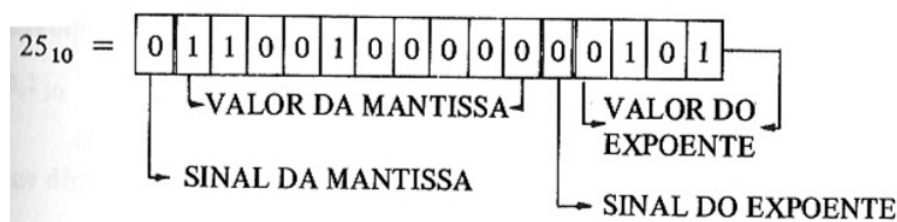
Cada dígito é chamado de **bit**, portanto, nesta máquina são utilizados 10 bits para a mantissa, 4 bits para o expoente e mais um bit para o sinal da mantissa e um bit para o sinal do expoente, resultando, no total, 16 bits, que são assim representados na figura 1.3.

Figura 1.2: Representação do número 25 na calculadora



Fonte: Barroso, 2006, pág.8.

Figura 1.3: Representação com as explicações



Fonte: Barroso, 2006, pág.9.

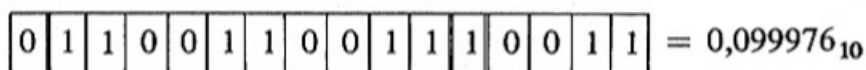
No caso do exemplo 1.2 não houve um problema para essa máquina representar o número 25_{10} , porém será discutido um exemplo no qual essa máquina não será capaz de representar com exatidão.

Exemplo 1.3. *Suponha que você necessite realizar um cálculo usando o valor decimal 0.1 na calculadora do exemplo 1.2.*

$$0.1_{10} = 0.000110011001100\dots$$

O valor decimal 0.1 tem uma representação binária com um número infinito de dígitos. Logo, ao se representar o 0.1_{10} na máquina descrita no exemplo 1.2 comete-se um erro, veja a figura 1.4.

Figura 1.4: Representação do número decimal 0.1 na calculadora.



Fonte: Barroso, 2006, pág.11.

O erro que ocorreu no exemplo 1.4 é conhecido como o **erro de arredondamento**.

Pode-se amenizar esse erro em um algoritmo em linguagem de programação aumentando o número de casas representativas. Na linguagem de programação Fortran tem-se

os comandos de dupla precisão e quádrupla precisão, a dupla precisão duplica o número de casas na representação apresentada na figura 1.3 e a quádrupla precisão quádruplica essa mesma representação. Assim é plausível assumir que os computadores com sistemas operacionais de 32 e 64 bits são mais relevantes do que os de 16 bits, quando se trabalha com dupla ou quádrupla precisão.

Erros de Truncamento

Os erros de truncamento são erros provenientes da utilização de processos que deveriam ser infinitos ou grandes para a determinação de um valor e que, por razões práticas, são truncados¹.

Estes processos infinitos são muito utilizados na avaliação de funções matemáticas, tais como, exponenciais, logarítmicas, trigonométricas e várias outras.

Exemplo 1.4.

Uma máquina poderia calcular a função $\cos(x)$ utilizando a série de potências (1.2)

$$\cos(x) = \sum_{i=0}^n (-1)^i \frac{x^{2i}}{(2i)!}. \quad (1.2)$$

Para que a expressão (1.2) seja realmente verdadeira o valor de n teria que ir para o infinito, porém isso não seria possível em um algoritmo.

A solução adotada nesse caso é de interromper a somatoria quando uma determinada precisão é atingida, essa precisão, na maioria dos casos, é estabelecida antecipadamente.

Os termos da série (1.2) que foram desprezados na representação finita citada acima é denominado erro de truncamento..

Na etapa de resolução ainda há outros tipos de erros, o erro de convergência ou erro devido os métodos iterativos e o erro de programação.

1.1.3 Erros de programação

Erros de programação, não podem sempre ser encontrado. No entanto suas consequências são imprevisíveis e por isso os programas computacionais precisam ser cuidadosamente analisado. A obtenção de confiabilidade de que erros de programação não

¹Truncar nesse contexto significa tirar uma parte.

afetam o procedimento numérico é o principal objetivo quando se aplica teste de verificação de código tal como apresentado na seção 1.3. O erro de programação é basicamente o erro que pode se cometer no momento da elaboração de um algoritmo, esse erro é, geralmente, associado ao erro humano, ou seja, enganos que ocorre nesse processo.

Os erros de programação podem ser detectados com estudos de convergência de malha para problemas com solução exata entre outras estratégias, porém são erros difíceis de se quantificar, o que gera complexidades no seu tratamento.

1.2 Malhas computacionais

O estudo dessa seção foi baseado principalmente nas referências [1], [11] e [15].

Uma malha computacional é uma representação ou a discretização² do domínio das funções a serem calculadas pelo procedimento numérico. Uma malha computacional é constituída por linhas e pontos, os pontos são considerados onde essas linhas se interceptam e servem de orientação para o cálculo de propriedades físicas baseado em um modelo matemático.

Exemplo 1.5. *Suponha que alguém queira discretizar o intervalo $[a, b]$, onde $a < b$, em n pontos, ou seja montar uma malha computacional para trabalhar com métodos numéricos sobre esse intervalo.*

Tome pontos x_i , com $i = 0, \dots, n - 1$, de tal forma que

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{i-1} < x_i < \dots < x_{n-1} = b.$$

O conjunto $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ é uma malha computacional que representa o intervalo $[a, b]$.

Uma malha equidistante é uma malha computacional cuja a distância entre os pontos de sua malha seja a mesma, isso em cada linha.

Exemplo 1.6. *A malha $P = \{0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\}$ é uma malha equidistante com 6 pontos que representa o intervalo $[0, 1]$.*

Um refinamento de malha é o processo de subdividir uma malha computacional, ou seja aumentar o número de pontos na sua representação a fim de torna-lá mais precisa.

²É o processo de representar elementos contínuos por elementos discretos.

Exemplo 1.7. *Um refinamento para a malha $P = \{0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\}$ pode ser feito adicionando o ponto médio entre cada par de pontos adjacentes dessa malha, ou seja um conjunto $Q = \{0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1\}$ onde $P \subset Q$. Perceba que o refinamento de uma malha gera uma nova malha computacional a qual representa de uma forma melhor o mesmo objeto, que nesse caso se trata do intervalo $[0, 1]$.*

Esse processo de subdividir a malha é utilizado no Teste de Convergência de Malhas (TCM). O TCM é o processo de subdividir as malhas gerando novas cada vez mais refinadas. Esse teste tem como objetivo analisar se o comportamento do erro acompanha a ordem de precisão do método numérico a medida que a malha é refinada. O número de malhas do TCM é escolhido com o propósito de se atingir uma faixa assintótica de erros preestabelecida. Faixa assintótica é a faixa de erros no qual a ordem de precisão não muda com o refinamento.

1.2.1 Cálculo de erro na malha computacional.

Em uma malha computacional há maneiras distintas de se calcular o erro numérico, as principais são: erro médio e erro máximo.

O erro médio é baseado na norma da soma ou na norma euclidiana e fornece a média de erro obtida em toda malha computacional, enquanto o erro máximo é baseado na norma do máximo e fornece o ponto da malha computacional onde o erro é maior.

Para se calcular o erro médio e máximo primeiro é necessário calcular o erro em cada ponto da malha, esse é calculado como a diferença, em módulo, entre a solução numérica e a solução analítica, pode-se pensar também em erro relativo, veja na expressão (1.3).

$$E(x_i) = |f_{num}(x_i) - f_{ana}(x_i)|, \text{ onde } x_i \text{ é o } i\text{-ésimo ponto da malha.} \quad (1.3)$$

Agora o cálculo do erro médio é feito a partir do valor da norma, euclidiana ou da soma, entre todos os pontos e depois o resultado é dividido pelo número de pontos na malha, na expressão (1.4) um exemplo de como calcular o erro médio pela normal da soma em uma malha com n pontos.

$$L_1(E_{num}) = \left(\sum_{i=1}^n (E_{num}(i)) \right) / n. \quad (1.4)$$

Por fim, o erro máximo é calculado a partir da norma do máximo entre todos os pontos da malha, ou seja, obtém-se o maior erro dentre todos os pontos da malha, a

expressão (1.5) mostra um exemplo de como é calculado esse erro.

$$L_{\infty}(E_{num}) = \max(E_{num}(i)); i = 1, \dots, n. \quad (1.5)$$

Quando se deseja analisar o erro assumido por um método em uma malha computacional é de extrema importância se calcular tanto o erro médio quanto o erro máximo. O cálculo desses dois erros juntamente com um TCM ajudam a entender como o método se comportou quando aplicado em um domínio e pode-se analisar se houve dominância de erro em algum ponto da malha.

1.3 Teste de Verificação usando o Método das Soluções Manufaturadas

O objetivo dessa seção é apresentar o conceito de **Verificação de Código** usando o **Método das Soluções Manufaturadas**. Esse teste se resume em analisar a ordem de convergência da solução numérica em um teste de refinamento de malha (TCM) para se ter confiabilidade de que erros de programação não afetam a solução numérica. Para desenvolver essa capítulo foram utilizadas as referências [2], [10], [11], [14] e [16].

1.3.1 Testes de Verificação

Verificação é um conceito importante na área de programação. De acordo com Silva (2008), testes de verificação são estratégias aplicadas para garantir que um código realize simulações numéricas com boa representação de um determinado problema abordado.

Verificação tem como objetivo avaliar se o código responde corretamente a ordem de precisão dos modelos implementados, além disso, estudar como foram realizados os cálculos e quantificar o erro da solução numérica. Esse conceito é diferente do conceito de validação que tem como objetivo certificar se as equações apresentadas no modelo são adequadas para modelar o problema no qual elas foram aplicadas, para isso se utiliza de comparações entre soluções numéricas e experimentais. O objetivo desse trabalho foi trabalhar com teste de verificação enquanto testes de validação não foram discutidos aqui. Detalhes sobre validação podem ser encontrados em Steinberg e Roache (1984).

Testes de verificação podem ser compostos de dois tipos: o estudo da verificação da solução numérica e a verificação de código. O foco da verificação de solução é quantificar

a incerteza numérica das soluções. Maiores detalhes da verificação de solução podem ser encontrados em Steinberg e Rouche (1984). Agora a verificação de código avalia a implementação das equações, condições de contorno e esquemas de discretização. O objetivo neste caso é certificar a ausência ou a não influência de erros de programação nas soluções numéricas. Esse deve ser o primeiro teste realizado, ou seja, antes de realizar a verificação das soluções (SILVA, 2008).

1.3.2 Método das Soluções Manufaturadas

Para se realizar um teste de verificação de código pode se adotar duas estratégias diferentes. A maneira mais comum de se realizar esse teste é pela comparação entre as soluções numéricas com soluções exatas de problemas com complexidade reduzida ou comparar com soluções de outros códigos computacionais. Apesar de serem maneiras interessantes de se verificar um código, essas estratégias falham em alguns aspectos. No caso das comparações com soluções existe uma simplificação do modelo matemático, tal como usar geometrias simplificadas, fornecer outras condições de contorno, etc. Essas simplificações geram soluções que nem sempre testam todas as rotinas do código numérico, pois em geral os problemas iniciais são bem mais complexos. Já na comparação com outros códigos permitem apenas comparar a precisão dos esquemas numéricos de forma qualitativa.

Uma abordagem interessante para se realizar verificação de código é simular um problema que tenha uma solução analítica e seja parecido com o problema que esteja sendo trabalhado, isto é, utilizar as mesmas condições de contorno, a mesma geometria até as mesmas equações. Essa solução analítica citada pode ser produzida utilizando o Método das Soluções Manufaturadas (MSM).

O funcionamento desse método se dá introduzindo termos fontes nas equações governantes criando um problema, embora não realístico, mas com uma solução analítica para realizar comparações com a solução numérica e um teste de convergência de malhas para obtenção da ordem de precisão dos cálculos. No final, se os testes forem satisfatórios, o código estará verificado e o termo fonte nas equações estudadas podem ser retirados, voltando assim para as equações originais.

O método das soluções manufaturadas foi desenvolvido por Steinberg e Roache (1984) e Roache (1998). Alguns estudos interessantes de Silva (2008), Doricio (2009) e Silva,

Souza e Medeiros (2010), foram realizados utilizando o (MSM), mostrando a eficiência desse método e de que maneira ele vem se estabelecendo como uma importante abordagem para verificação de código.

CAPÍTULO 2

AS DIFERENÇAS FINITAS EXPLÍCITAS E COMPACTAS

O método de diferenças finitas é um método que realiza o cálculo aproximado das derivadas de uma função f em uma malha computacional, podendo melhorar a aproximação desses cálculos tanto refinando as malhas computacionais quanto utilizando métodos de ordem superior de precisão. O objetivo desse capítulo é apresentar o método de Diferenças Finitas e construir alguns esquemas convencionais, esses esquemas serão utilizados posteriormente no capítulo 3 para obter um método de calcular a derivada de uma função com singularidades do tipo salto.

Esse trabalho apresenta as **Diferenças finitas explícitas** e as **Diferenças finitas compactas**, porém antes é importante apresentar a **Fórmula de Taylor**, que é o objeto primordial para se obter os métodos de diferenças finitas. As referências utilizadas serão indicadas em cada item desse capítulo.

2.1 Fórmula de Taylor

O objetivo dessa seção é exibir a Fórmula de Taylor. Esse é um conceito fundamental para o desenvolvimento de diversos métodos numéricos e, em especial, para o desenvolvimento das diferenças finitas. Para desenvolver essa seção foi utilizado o capítulo 9 da

referência [8].

Notação 2.1. A k -ésima derivada (ou derivada de ordem k) de uma função no ponto a será indicada com a notação $f^k(a)$. Para $k = 1, 2$ e 3 escreve-se $f'(a)$, $f''(a)$ e $f'''(a)$ respectivamente.

Por definição, $f''(a) = (f')'(a)$ e assim sucessivamente: $f^k(a) = (f^{k-1})'(a)$.

Para que $f^n(a)$ tenha sentido, é necessário que $f^{n-1}(x)$ esteja definida num conjunto do qual a seja ponto de acumulação e seja derivável no ponto $x = a$.

Quando existe $f^k(x)$ para todo $x \in I$, diz que a $f; \rightarrow R$ é k vezes derivável no intervalo I .

Se $f; \rightarrow R$ é uma função de classe C^k , e escrevendo na seguinte notação $f \in C^k$, significa que a f é k vezes derivável e, além disso, a função $f^k : I \rightarrow R$ é contínua. Quando $f \in C^k$ para todo $k \in \mathbb{N}$, diz que f é de classe C^∞ e escreve-se $f \in C^\infty$.

Seja $f : I \rightarrow R$ uma função definida no intervalo I e k vezes derivável no ponto $a \in I$. O polinômio de Taylor de ordem k da função f no ponto a é o polinômio $p(h) = a_0 + a_1 h + \dots + a_k h^k$ (de grau $\leq k$) cujas derivadas de ordem $\leq k$ no ponto $h = 0$ coincidem com as derivadas de mesma ordem de f no ponto a , isto é, $p^i(0) = f^{(i)}(a)$, $i = 0, 1, \dots, k$. Assim o polinômio de Taylor de ordem n da função f no ponto a é

$$p(h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}h^k.$$

Se $p(h)$ é o polinômio de Taylor de ordem k da função $f : I \rightarrow R$ no ponto $a \in I$ então a função $r(h) = f(a+h) - p(h)$, definida no intervalo $J = \{h \in R; a+h \in I\}$ é k vezes derivável no ponto $0 \in J$, com $r(0) = r'(0) = \dots = r^{(k)}(0) = 0$.

Teorema 2.2. (Fórmula de Taylor infinitesimal.)

Seja $f : I \rightarrow R$ k vezes derivável no ponto $a \in I$. A função $r : J \rightarrow R$, definida no intervalo $J = \{h \in R; a+h \in I\}$ pela igualdade

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}h^k + r(h),$$

cumpra $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{r(h)}{h^k} = 0$. Reciprocamente, se $p(h)$ é um polinômio de grau $\leq k$ tal que $r(h) = f(a+h) - p(h)$ cumpra $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{r(h)}{h^k} = 0$ então $p(h)$ é o polinômio de Taylor de ordem k de f no ponto a , isto é,

$$p(h) = \sum_{i=0}^k \frac{f^{(i)}(a)}{i!} h^i.$$

Teorema 2.3. (*Fórmula de Taylor, com resto de Lagrange.*)

Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ k vezes derivável no intervalo aberto (a, b) , com f^{k-1} contínua em $[a, b]$. Existe $c \in (a, b)$ tal que

$$f(b) = f(a) + f'(a)(b-a) + \dots + \frac{f^{(k-1)}(a)}{(k-1)!}(b-a)^{k-1} + \frac{f^{(k)}(c)}{(k)!}(b-a)^k.$$

2.2 Diferenças Finitas Explícitas

O objetivo dessa seção é apresentar e mostrar como são construídos os métodos de diferenças finitas. Para desenvolvê-la foram utilizadas as referências [1], [3] e [15].

O método de **Diferenças Finitas Explícitas** é um método que aproxima a k -ésima derivada de uma função f através da combinação linear entre valores que a função assume em um determinado estêncil ¹, utilizando a série de Taylor para encontrar esquemas que nos fornece essa aproximação. Primeiro será apresentado os métodos clássicos para o cálculo da primeira derivada e posteriormente um método de até 4ª ordem de precisão.

2.2.1 Diferenças Finitas explícitas clássicas

Os métodos de diferenças finitas explícitas clássicos, para o cálculo da primeira derivada da f , são as: **Diferenças Finitas Progressivas**; **Diferenças Finitas Retroativas**; **Diferenças Finitas Centradas**.

Diferenças Finitas Progressivo

A ideia para a construção desse método é encontrar uma aproximação para a primeira derivada da função aplicada em x , ou seja $f'(x)$, utilizando a função aplicada em x e em um ponto a direita de x .

Seja f uma função de classe C^∞ em um intervalo I , então pode-se escrever a série de Taylor em torno do ponto a dessa função da seguinte forma:

$$f(x) = \frac{f(a)}{0!}(x-a)^0 + \frac{f'(a)}{1!}(x-a)^1 + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k + \dots \quad (2.1)$$

onde $a \in \text{int}(I)$

¹São os pontos da discretização selecionados para aplicação do método.

Tomando $h = x - a \Leftrightarrow x = a + h$ na expressão (2.1) tem-se:

$$\begin{aligned} f(a+h) &= \frac{f(a)}{0!}h^0 + \frac{f(a)'}{1!}h^1 + \frac{f(a)''}{2!}h^2 + \frac{f(a)'''}{3!}h^3 + \dots \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^k + \dots \Leftrightarrow \\ f(a+h) &= f(a) + f(a)'h + \frac{f(a)''}{2!}h^2 + \frac{f(a)'''}{3!}h^3 + \dots \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^k + \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

Fazendo $O(h^2) = \frac{f(a)''}{2!}h^2 + \frac{f(a)'''}{3!}h^3 + \dots \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^k + \dots$ na expressão (2.2), obtem-se:

$$f(a+h) = f(a) + f(a)'h + O(h^2) \quad (2.3)$$

Agora isolando $f'(a)$ em (2.3), então

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + O(h), \text{ onde } O(h) = \frac{f(a)''}{2!}h + \frac{f(a)'''}{3!}h^2 + \dots \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^{k-1} + \dots$$

Agora truncando o termo $O(h)$ para obter uma expressão para o cálculo aproximado da primeira derivada da f aplicada em a , onde a ordem de precisão será definida pelo termo dominante de $O(h)$, nesse caso $\frac{f(a)''}{2!}(h)$ o que nos dá um método de 1ª ordem para cálculo da 1ª derivada. Assim tem-se:

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \quad (2.4)$$

que é chamado de método de **Diferenças Finitas Progressivo**, pois para realizar esse cálculo precisa da informação da função aplicada no ponto a e no ponto a direita de a ou seja os valores $f(a)$ e $f(a+h)$.

Diferenças Finitas Retroativas

A ideia para a construção desse método é encontrar uma aproximação para a primeira derivada da função aplicada em x , ou seja $f'(x)$, utilizando a função aplicada em x e em um ponto a esquerda de x .

Considerando a equação (2.1) novamente, mas dessa será tomado $h = a - x \Leftrightarrow x = a - h$, assim tem-se

$$\begin{aligned} f(a-h) &= \frac{f(a)}{0!}(-h)^0 + \frac{f(a)'}{1!}(-h)^1 + \frac{f(a)''}{2!}(-h)^2 + \frac{f(a)'''}{3!}(-h)^3 + \dots \frac{f(a)^{(k)}}{k!}(-h)^k + \dots \Leftrightarrow \\ f(a-h) &= f(a) - f(a)'h + \frac{f(a)''}{2!}h^2 - \frac{f(a)'''}{3!}h^3 + \dots (-1)^k \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^k + \dots \end{aligned} \quad (2.5)$$

Fazendo $O(h^2) = \frac{f(a)''}{2!}h^2 - \frac{f(a)'''}{3!}h^3 + \dots (-1)^k \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^k + \dots$ em (2.5), obtem-se:

$$f(a-h) = f(a) - f(a)'h + O(h^2) \quad (2.6)$$

Agora isolando $f'(a)$ em (2.6), então

$$f'(a) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + O(h), \text{ onde } O(h) = \frac{f(a)''}{2!}h - \frac{f(a)'''}{3!}h^2 + \dots (-1)^k \frac{f(a)^{(k)}}{k!}h^{k-1} + \dots$$

Agora truncando o termo $O(h)$ para obter uma expressão para o cálculo aproximado da primeira derivada da f aplicada em a , onde a ordem de precisão será definida pelo termo dominante de $O(h)$, nesse caso $\frac{f(a)''}{2!}(h)$ o que nos dá um método de 1ª ordem para cálculo da primeira derivada. Assim tem-se:

$$f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

que é chamado de método de **Diferenças Finitas Retroativo**, pois para realizar esse cálculo precisa da informação da função aplicada no ponto a e no ponto a esquerda de a ou seja os valores $f(a)$ e $f(a-h)$.

Diferenças Finitas Centradas

A ideia para a construção desse método é encontrar uma aproximação para a primeira derivada da função aplicada em x , ou seja $f'(x)$, utilizando a função aplicada no ponto a direita e na esquerda de x .

Subtraindo as expressões (2.2) e (2.5), obtém-se

$$f(a+h) - f(a-h) = 2f(a)'h + 2\frac{f(a)''}{3!}h^3 + 2\frac{f(a)'''}{5!}h^5 \dots + 2\frac{f(a)^{(2k+1)}}{(2k+1)!}h^{2k+1} + \dots \quad (2.7)$$

Fazendo $O(h^3) = 2\frac{f(a)'''}{3!}h^3 + 2\frac{f(a)'''}{5!}h^5 \dots + 2\frac{f(a)^{(2k+1)}}{(2k+1)!}h^{2k+1} + \dots$ em (2.7), tem-se

$$f(a+h) - f(a-h) = 2f(a)'h + O(h^3) \quad (2.8)$$

Agora isolando $f'(a)$ em (2.8), então

$$\begin{aligned} f(a)' &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - O(h^2), \text{ onde} \\ O(h^2) &= \frac{f(a)'''}{3!}h^2 + \frac{f(a)'''}{5!}h^5 \dots + \frac{f(a)^{(2k+1)}}{(2k+1)!}h^{2k-1} + \dots \end{aligned} \quad (2.9)$$

Agora truncando o termo $O(h^2)$ para obter uma expressão para o cálculo aproximado da primeira derivada da f aplicada em a , onde a ordem de precisão será definida pelo

termo dominante de $O(h^2)$, nesse caso $\frac{f(a)'''}{3!}(h^2)$ o que nos dá um método de 2ª ordem de aproximação para cálculo da primeira derivada. Assim tem-se:

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

que é chamado de método de **Diferenças Finitas Centradas**, pois para realizar esse cálculo precisa da informação da função aplicada no ponto da direita de a e do ponto a esquerda de a ou seja os valores $f(a+h)$ e $f(a-h)$.

2.2.2 Esquemas clássicos

Assim tem-se as expressões clássicas para o cálculo aproximado da primeira derivada da f em uma malha equidistante, são elas as: Diferenças Finitas Progressivo (2.10); Diferenças Finitas Retroativas (2.11); Diferenças Finitas Centradas (2.12) e sua ordem de precisão.

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}, \text{ 1ª Ordem.} \quad (2.10)$$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}, \text{ 1ª Ordem.} \quad (2.11)$$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}, \text{ 2ª Ordem.} \quad (2.12)$$

2.2.3 Diferenças Finitas Explícitas de até 4ª ordem de aproximação

O desenvolvimento apresentado a seguir pode ser aplicada para um número finito de pontos, quanto mais pontos no seu esquema de diferenças finitas maior a ordem de precisão se consegue alcançar.²

Desenvolvimento

Assumindo um domínio discretizado, ou malha computacional, com $n + 1$ pontos, $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$, nesse caso será trabalhado com uma malha equidistante onde o

²O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

espaçamento é denominado por $h = \frac{x_n - x_0}{n}$, ou seja $x_i - x_{i-1} = h$ e $x_{1-i} - x_i = -h$.

Olhando para a expressão (2.13)

$$a_{i-2}f(x_{i-2}) + a_{i-1}f(x_{i-1}) + a_i f(x_i) + a_{i+1}f(x_{i+1}) + a_{i+2}f(x_{i+2}) \quad (2.13)$$

pode-se encontrar coeficientes $a_{i-2}, a_{i-1}, a_i, a_{i+1}$ e a_{i+2} para que a expressão (2.13) se torne uma aproximação para a n -ésima derivada de f .

A partir desse momento usa-se a seguinte notação para facilitar.

Notação 2.4. $f^{(k)}(x_j) = f_j^{(k)}$, $\forall k \in \mathbf{N}$ e $j \in \mathbf{Z}$.

Assim a expressão (2.13) fica da seguinte forma

$$a_{i-2}f_{i-2} + a_{i-1}f_{i-1} + a_i f_i + a_{i+1}f_{i+1} + a_{i+2}f_{i+2} \quad (2.14)$$

Agora, assumindo $f \in C^\infty$, expandindo a série de Taylor em torno do ponto x_i para $f_{i-2}, f_{i-1}, f_{i+1}$ e f_{i+2} , escrevendo essa expansão até a quinta derivada e o restante ficara representado por uma função $O(h^6)$.

$$\begin{aligned} a_i f_i &= a_i f_i \\ a_{i+1} f_{i+1} &= a_{i+1} \left[f_i + f'_i h + \frac{f''_i}{2!} h^2 + \frac{f'''_i}{3!} h^3 + \frac{f^4_i}{4!} h^4 + \frac{f^5_i}{5!} h^5 \right] + O_{i+1}(h^6) \\ a_{i-1} f_{i-1} &= a_{i-1} \left[f_i - f'_i h + \frac{f''_i}{2!} h^2 - \frac{f'''_i}{3!} h^3 + \frac{f^4_i}{4!} h^4 - \frac{f^5_i}{5!} h^5 \right] + O_{i-1}(h^6) \\ a_{i+2} f_{i+2} &= a_{i+2} \left[f_i + 2f'_i h + 2^2 \frac{f''_i}{2!} h^2 + 2^3 \frac{f'''_i}{3!} h^3 + 2^4 \frac{f^4_i}{4!} h^4 + 2^5 \frac{f^5_i}{5!} h^5 \right] + O_{i+2}(h^6) \\ a_{i-2} f_{i-2} &= a_{i-2} \left[f_i - 2f'_i h + 2^2 \frac{f''_i}{2!} h^2 - 2^3 \frac{f'''_i}{3!} h^3 + 2^4 \frac{f^4_i}{4!} h^4 - 2^5 \frac{f^5_i}{5!} h^5 \right] + O_{i-2}(h^6) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Observação 2.5. Os índices $i + l$ nas funções O são apenas para diferencia-las

Agora substituindo (2.15) em (2.14) e colocando em evidencia os termos $f_i, f'_i h, \frac{f''_i}{2!} h^2, \frac{f'''_i}{3!} h^3, \frac{f^4_i}{4!} h^4$ e $\frac{f^5_i}{5!} h^5$ obtém-se

$$\begin{aligned} a_{i-2}f_{i-2} + a_{i-1}f_{i-1} + a_i f_i + a_{i+1}f_{i+1} + a_{i+2}f_{i+2} &= f_i[a_{i-2} + a_{i-1} + a_i + a_{i+1} + a_{i+2}] + \\ &+ f'_i h[-2a_{i-2} - a_{i-1} + a_{i+1} + 2a_{i+2}] + \frac{f''_i}{2!} h^2[2^2 a_{i-2} + a_{i-1} + a_{i+1} + 2^2 a_{i+2}] + \\ &+ \frac{f'''_i}{3!} h^3[-2^3 a_{i-2} - a_{i-1} + a_{i+1} + 2^3 a_{i+2}] + \frac{f^4_i}{4!} h^4[2^4 a_{i-2} + a_{i-1} + a_{i+1} + 2^4 a_{i+2}] + \\ &+ O(h^5) \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde

$$O(h^5) = \frac{f_i^5}{5!} h^5 [-2^5 a_{i-2} - a_{i-1} + a_{i+1} + 2^5 a_{i+2}] + O_1(h^6) + O_2(h^6) + O_{-1}(h^6) + O_{-2}(h^6)$$

Agora dividindo a expressão (2.16) por h e desprezando o termo $O(h^4)$ alcança-se uma aproximação para cálculo da primeira derivada da f igualando os coeficientes que acompanham a $\frac{f_i}{h}, f'_i, \frac{f_i''}{2!}h, \frac{f_i'''}{3!}h^2$ e $\frac{f_i^4}{4!}h^3$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} a_{i-2} + a_{i-1} + a_i + a_{i+1} + a_{i+2} &= 0 \\ -2a_{i-2} - a_{i-1} + a_{i+1} + 2a_{i+2} &= 1 \\ 2^2 a_{i-2} + a_{i-1} + a_{i+1} + 2^2 a_{i+2} &= 0 \\ -2^3 a_{i-2} - a_{i-1} + a_{i+1} + 2^3 a_{i+2} &= 0 \\ 2^4 a_{i-2} + a_{i-1} + a_{i+1} + 2^4 a_{i+2} &= 0 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Escrevendo a expressão 2.17 em forma matricial

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 2^2 & 1 & 0 & 1 & 2^2 \\ -2^3 & -1 & 0 & 1 & 2^3 \\ 2^4 & 1 & 0 & 1 & 2^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i-2} \\ a_{i-1} \\ a_i \\ a_{i+1} \\ a_{i+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo esse sistema³ encontra-se $a_{i-2} = \frac{1}{12h}, a_{i-1} = \frac{-2}{3h}, a_i = 0, a_{i+1} = \frac{2}{3h}$ e $a_{i+2} = \frac{-1}{12h}$, logo uma aproximação para a primeira derivada da f é

$$f'_i \approx \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12h}$$

ou, voltando para $x_{i-2}, x_{i-1}, x_{i+1}$ e x_{i+2} ,

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{12h} \quad (2.18)$$

onde o erro de truncamento é

$$ET = \frac{f_i^5}{5!} h^4 [-2^5 a_{i-2} - a_{i-1} + a_{i+1} + 2^5 a_{i+2}] + O_1(h^5) + O_2(h^5) + O_{-1}(h^5) + O_{-2}(h^5)$$

ou seja, é uma $O(h^4)$ com o termo dominante h^4 , então essa é uma expressão de 4ª ordem de precisão.

³Para esse calculo foi utilizado uma calculadora disponível em: <https://matrixcalc.org/pt/slu.html>.

2.2.4 Esquemas de até 4ª ordem de aproximação

A partir das ideias apresentadas nesse sessão pode-se encontrar diversos esquemas de diferenças finitas para o cálculo da primeira derivada, a seguir será apresentado alguns⁴;

$$\begin{aligned} f'_i &= \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2h} + O_{+3}(h^2) \\ f'_i &= \frac{f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i}{2h} + O_{-3}(h^2) \\ f'_i &= \frac{-2f_{i-1} - 3f_i + 6f_{i+1} - f_{i+2}}{6h} + O_{+4}(h^3) \\ f'_i &= \frac{f_{i-2} - 6f_{i-1} + 3f_i + 2f_{i+1}}{6h} + O_{-4}(h^3) \end{aligned}$$

Esses são alguns esquemas que podem ser gerados com as ideias apresentadas. A seguir será exibido um esquema completo de 4ª ordem de precisão para o cálculo da primeira derivada da f .

$$f'_i = \frac{-25f_i + 48f_{i+1} - 36f_{i+2} + 16f_{i+3} - 3f_{i+4}}{12h} + O_{+4}(h^4) \quad (2.19)$$

$$f'_i = \frac{-3f_{i-1} - 10f_i + 18f_{i+1} - 6f_{i+2} + f_{i+3}}{12h} + O_{+3}(h^4) \quad (2.20)$$

$$f'_i = \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12h} + O_c(h^4) \quad (2.21)$$

$$f'_i = \frac{-f_{i-3} + 6f_{i-2} - 18f_{i-1} + 10f_i + 3f_{i+1}}{12h} + O_{-3}(h^4) \quad (2.22)$$

$$f'_i = \frac{3f_{i-4} - 16f_{i-3} + 36f_{i-2} - 48f_{i-1} + 25f_i}{12h} + O_{-4}(h^4) \quad (2.23)$$

A expressão (2.19) pode ser utilizada para o cálculo do primeiro ponto da discretização, a expressão (2.20) para o segundo ponto, a expressão (2.22) para o penúltimo ponto e a expressão (2.23) para o último. Nos demais pontos do domínio discretizado utiliza-se a expressão (2.21) para o cálculo. Dependendo do número de pontos na discretização pode-se utilizar essas expressões para calcular outros pontos.

Na próxima seção será apresentado uma aplicação do método de diferenças finitas explícitas clássicos e o de 4ª ordem de precisão.

⁴O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

2.3 Aplicando as Diferenças Finitas Explícitas

Nessa seção será apresentada uma aplicação do método de diferenças finitas explícitas, clássico e o de 4ª ordem de precisão. Posteriormente será montada uma tabela para que se possa comparar a diferença dos resultados gerados por esses métodos.⁵

Exemplo 2.6. *Calcular numericamente a primeira derivada da função $f(x) = e^x$ no intervalo $[0, 1]$ com uma malha de 6 pontos.*

Para resolver esse exemplo apresenta-se um algoritmo em descrição narrativa que ajudará na aplicação do método.

1. Calcule o espaçamento da discretização, ou seja calcular $h = \left| \frac{b-a}{n-1} \right|$ onde n é o número de pontos que se deseja na malha, a é o ponto inicial do intervalo e b é o ponto final;
2. Calcule todos os pontos da discretização, $x_i = a + hi$ para $i = 0, \dots, n-2$ e $x_{n-1} = b$;
3. Calcular os valores da $f(x)$ para todos os pontos da discretização;
4. Escrever em uma tabela as informações i , x_i e $f(x_i)$ nessa ordem;
5. Aplicar o esquema de diferenças finitas desejado para calcular os valores da $f'(x_i)$;
6. Escrever em uma tabela a solução analítica e numérica para cada $f'(x_i)$.

Solução 2.7. *Seguindo a sequência de passos listada acima:*

Calculando o espaçamento h ;

$$h = \left| \frac{1-0}{6-1} \right| = \frac{1}{5} = 0.2$$

Calculando os pontos da discretização x_i ;

$$x_0 = 0 + 0.2 \times 0 = 0, \quad x_1 = 0 + 0.2 \times 1 = 0.2, \quad x_2 = 0 + 0.2 \times 2 = 0.4, \quad x_3 = 0 + 0.2 \times 3 = 0.6, \\ x_4 = 0 + 0.2 \times 4 = 0.8 \text{ e } x_5 = 1$$

⁵O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

Calculando os valores da $f(x_i)$, como será aplicado um método de até 4ª ordem é necessário trabalhar com 8 casas após a vírgula, para que o erro de aproximação não interfira no erro de truncamento adotado no método⁶;

$f(x_0) = 1$, $f(x_1) \approx 1.22140276$, $f(x_2) \approx 1.49182470$, $f(x_3) \approx 1.82211880$, $f(x_4) \approx 2.22554093$ e $f(x_5) \approx 2.71828183$

Escrevendo a tabela 2.1 com os valores de i , x_i e $f(x_i)$;

Tabela 2.1: Dados calculados

i	x_i	$f(x_i)$
0	0	1
1	0.2	1.22140276
2	0.4	1.49182470
3	0.6	1.82211880
4	0.8	2.22554093
5	1	2.71828183

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

Primeiramente será calculada a primeira derivada da f com as diferenças finitas explícitas clássicas e depois o de 4ª ordem de precisão;

⁶Quando se dejesa analisar o erro de truncamento é indicado que o erro de arredondamento seja no mínimo 1000 vezes menor que a do erro de truncamento.

Utilizando o esquema clássico, ou seja, as expressões, (2.10), (2.11) e (2.12):

$$\begin{aligned}
 f'(0) &\approx \frac{f(0.2) - f(0)}{0.2} \approx \frac{1.22140276 - 1}{0.2} \approx 1.1070138 \\
 f'(0.2) &\approx \frac{f(0.4) - f(0.2)}{0.2} \approx \frac{1.4918247 - 1.22140276}{0.2} \approx 1.3521097 \\
 f'(0.4) &\approx \frac{f(0.6) - f(0.4)}{0.2} \approx \frac{1.8221188 - 1.4918247}{0.2} \approx 1.6514705 \\
 f'(0.6) &\approx \frac{f(0.8) - f(0.6)}{0.2} \approx \frac{2.22554093 - 1.8221188}{0.2} \approx 2.01711065 \\
 f'(0.8) &\approx \frac{f(1) - f(0.8)}{0.2} \approx \frac{2.71828183 - 2.22554093}{0.2} \approx 2.4637045 \\
 f'(1) &\approx \frac{f(1) - f(0.8)}{0.2} \approx \frac{2.71828183 - 2.22554093}{0.2} \approx 2.4637045
 \end{aligned}$$

Utilizando um esquema de 4ª ordem, ou seja, as expressões (2.19), (2.20), (2.21), (2.22) e (2.23):

$$\begin{aligned}
 f'(0) &\approx \frac{-25f(0) + 48f(0.2) - 36f(0.4) + 16f(0.6) - 3f(0.8)}{12 \times 0.2} \approx 0.99955054 \\
 f'(0.2) &\approx \frac{-3f(0) - 10f(0.2) + 18f(0.4) - 6f(0.6) + f(0.8)}{12 \times 0.2} \approx 1.2215188 \\
 f'(0.4) &\approx \frac{f(0) - 8f(0.2) + 8f(0.6) - f(0.8)}{12 \times 0.2} \approx 1.49174475 \\
 f'(0.6) &\approx \frac{f(0.2) - 8f(0.4) + 8f(0.8) - f(1)}{12 \times 0.2} \approx 1.82202117 \\
 f'(0.8) &\approx \frac{-f(0.2) + 6f(0.4) - 18f(0.6) + 10f(0.8) + 3f(1)}{12 \times 0.2} \approx 2.22569241 \\
 f'(1) &\approx \frac{3f(0.2) - 16f(0.4) + 36f(0.6) - 48f(0.8) + 25f(1)}{12 \times 0.2} \approx 2.7176546
 \end{aligned}$$

Escrevendo a tabela 2.2 com a solução analítica, numérica da clássica e numérica de 4ª ordem;

Perceba que através da tabela 2.2 pode-se notar que o uso das diferenças finitas clássicas obteve uma aproximação inferior a que o de 4ª ordem de precisão, isso utilizando uma mesma discretização. Apesar de que no desenvolvimento do método de diferenças finitas explícitas ter assumido que a f é de classe C^∞ essa condição não precisa ser necessariamente satisfeita. Na verdade é preciso que, no mínimo, a f seja de classe C^k , onde k é a ordem de precisão desejada para o esquema.

Tabela 2.2: Comparação entre soluções

$f'(x_i)$	Solu. analítica	Solu. numérica clássicas	Solu. numérica de 4ª ordem
$f'(0)$	1	1.1070138	0.99955054
$f'(0.2)$	1.22140276	1.3521097	1.2215188
$f'(0.4)$	1.49182470	1.6514705	1.49174475
$f'(0.6)$	1.82211880	2.01711065	1.82202117
$f'(0.8)$	2.22554093	2.4637045	2.22569241
$f'(1)$	2.71828183	2.4637045	2.7176546

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

2.4 Diferenças Finitas Compactas

O objetivo dessa seção é apresentar como é realizada a construção do método de diferenças finitas compactas. Primeiro será apresentado o desenvolvimento para um esquema de até 4ª ordem de precisão, utilizando 3 pontos na esquerda e 3 na direita do esquema. Posteriormente será apresentado um esquema de até 10ª ordem de precisão, utilizando até 5 pontos na esquerda do esquema. Para desenvolver essa seção foram utilizadas as referências [6] e [11].

O método de **Diferenças Finitas Compactas** é um método que aproxima a k – ésima derivada de uma função f através da combinação linear entre valores, que função e suas derivadas, assumem em um determinado estêncil, utilizando a série de Taylor para encontrar essas aproximações. A vantagem das diferenças finitas compactas em relação a explícitas é que se consegue uma ordem de precisão melhor com um número menor de pontos conhecidos, a desvantagem é que com nesse método não é possível calcular a derivada em apenas um ponto isolado.

2.4.1 Diferenças Finitas Compactas de até 4ª ordem de aproximação

Desenvolvimento do método

Para o desenvolvimento do método deduziu-se uma expressão para o cálculo da primeira derivada de uma função f com até 4ª ordem de precisão.

Suponha uma fórmula Hermitiana de três pontos envolvendo uma função f e sua primeira derivada, onde f é de classe C^∞ em uma malha computacional equidistante, assim a fórmula é dada por,

$$H_i = \sum_{m=-1}^{m=1} a_m f(x_{i+m}) + b_m f'(x_{i+m}) = 0$$

ou

$$a_1 f(x_{i+1}) + a_0 f(x_i) + a_{-1} f(x_{i-1}) + b_1 f'(x_{i+1}) + b_0 f'(x_i) + b_{-1} f'(x_{i-1}) = 0 \quad (2.24)$$

Colocando a expressão (2.24) na notação (2.2.3) tem-se

$$a_1 f_{i+1} + a_0 f_i + a_{-1} f_{i-1} + b_1 f'_{i+1} + b_0 f'_i + b_{-1} f'_{i-1} = 0 \quad (2.25)$$

A ideia para construir os esquemas é encontrar uma relação entre os coeficientes que acompanham as $(f'_{i-1}, f'_i, f'_{i+1})$ e os que acompanham as (f_{i-1}, f_i, f_{i+1}) .

Agora utilizando as expansões da série de Taylor de f e f' na equação (2.25), onde $h = x_{i+1} - x_i$ é o espaçamento da malha, obtém-se

$$\begin{aligned} & a_1 \left[f_i + h f'_i + \frac{1}{2} h^2 f''_i + \frac{1}{6} h^3 f'''_i + \frac{1}{24} h^4 f^{(4)}_i + \frac{1}{120} h^5 f^{(5)}_i + \frac{1}{720} h^6 f^{(6)}_i + O_1(h^7) \right] + a_0 f_i + \\ & + a_{-1} \left[f_i - h f'_i + \frac{1}{2} h^2 f''_i - \frac{1}{6} h^3 f'''_i + \frac{1}{24} h^4 f^{(4)}_i - \frac{1}{120} h^5 f^{(5)}_i + \frac{1}{720} h^6 f^{(6)}_i + O_2(h^7) \right] + \\ & + b_1 \left[f'_i + h f''_i + \frac{1}{2} h^2 f'''_i + \frac{1}{6} h^3 f^{(4)}_i + \frac{1}{24} h^4 f^{(5)}_i + \frac{1}{120} h^5 f^{(6)}_i + O_3(h^6) \right] + b_0 f'_i + \\ & + b_{-1} \left[f'_i - h f''_i + \frac{1}{2} h^2 f'''_i - \frac{1}{6} h^3 f^{(4)}_i + \frac{1}{24} h^4 f^{(5)}_i - \frac{1}{120} h^5 f^{(6)}_i + O_4(h^6) \right] = 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Colocando as $f_i, f'_i, f''_i, f'''_i, f^{(4)}_i, f^{(5)}_i$ e $f^{(6)}_i$ de (2.26) em evidência tem-se

$$\begin{aligned} & [a_1 + a_0 + a_{-1}] f_i + [(a_1 + a_{-1})h + b_1 + b_0 + b_{-1}] f'_i + \left[\frac{1}{2} (a_1 + a_{-1}) h^2 + (b_1 - b_{-1}) h \right] f''_i \\ & + \left[\frac{1}{6} (a_1 - a_{-1}) h^3 + \frac{1}{2} (b_1 + b_{-1}) h^2 \right] f'''_i + \left[\frac{1}{24} (a_1 + a_{-1}) h^4 + \frac{1}{6} (b_1 - b_{-1}) h^3 \right] f^{(4)}_i + \\ & + \left[\frac{1}{120} (a_1 - a_{-1}) h^5 + \frac{1}{24} (b_1 + b_{-1}) h^4 \right] f^{(5)}_i + \left[\frac{1}{720} (a_1 + a_{-1}) h^6 + \frac{1}{120} (b_1 - b_{-1}) h^5 \right] f^{(6)}_i + \\ & + a_1 O_1(h^7) + a_{-1} O_2(h^7) + b_1 O_3(h^6) + b_{-1} O_4(h^6) = 0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Se a relação (2.27) for exata, então os coeficientes que acompanha as $f_i, f'_i, f''_i, f'''_i, f_i^4, f_i^5$ e f_i^6 devem ser todos iguais a zero, com $O_T(h^6) = a_1 O_1(h^7) + a_{-1} O_2(h^7) + b_1 O_3(h^6) + b_{-1} O_4(h^6) = 0$, porém será definido apenas alguns desses coeficientes igual a zero, baseado na ordem de precisão que se deseja.

$$\begin{aligned} a_1 + a_0 + a_{-1} &= 0 & (\text{Coeficiente do } f_i) \\ (a_1 + a_{-1})h + b_1 + b_0 + b_{-1} &= 0 & (\text{Coeficiente do } f'_i) \\ \frac{1}{2}(a_1 + a_{-1})h^2 + (b_1 - b_{-1})h &= 0 & (\text{Coeficiente do } f''_i) \\ \frac{1}{6}(a_1 - a_{-1})h^3 + \frac{1}{2}(b_1 + b_{-1})h^2 &= 0 & (\text{Coeficiente do } f'''_i) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Observação 2.8. Não é possível igualar mais termos a zero, pois o sistema terá uma solução indejada.

Para obter um esquema de até 4ª ordem de aproximação, suponha que a relação descrita na expressão (2.28) aconteça e truncando o restante dos termos de (2.27), então tem-se

$$\begin{aligned} a_1 + a_0 + a_{-1} &= 0 \\ (a_1 + a_{-1})h + b_1 + b_0 + b_{-1} &= 0 \\ \frac{1}{2}(a_1 + a_{-1})h^2 + (b_1 - b_{-1})h &= 0 \\ \frac{1}{6}(a_1 - a_{-1})h^3 + \frac{1}{2}(b_1 + b_{-1})h^2 &= 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

e resolvendo (2.29)⁷, com os coeficientes a_1, a_0, a_{-1} e b_0 em termos de b_1 e b_{-1} , obtém-se:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2h}(-5b_1 - b_{-1}) \\ a_0 &= \frac{2}{h}(b_1 - b_{-1}) \\ a_{-1} &= \frac{1}{2h}(b_1 + b_{-1}) \\ b_0 &= 2(b_1 + b_{-1}) \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde o erro de truncamento se dá pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} ET &= \left[\frac{1}{24}(a_1 + a_{-1})h^4 + \frac{1}{6}(b_1 - b_{-1})h^3 \right] f_i^4 + \left[\frac{1}{120}(a_1 - a_{-1})h^5 + \frac{1}{24}(b_1 + b_{-1})h^4 \right] f_i^5 + \\ &+ \left[\frac{1}{720}(a_1 + a_{-1})h^6 + \frac{1}{120}(b_1 - b_{-1})h^5 \right] f_i^6 + O_T(h^6) \end{aligned}$$

⁷Para esse cálculo foi utilizado uma calculadora disponível em: <https://matrixcalc.org/pt/slu.html>.

Utilizando a informação de (2.29) tem-se

$$\frac{1}{6}(a_1 - a_{-1})h^3 + \frac{1}{2}(b_1 + b_{-1})h^2 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{1}{2}(a_1 + a_{-1})h^2 + (b_1 - b_{-1})h = 0$$

então

$$ET = \frac{1}{12}h^3(b_1 - b_{-1})f_i^4 + \frac{1}{60}h^4(b_1 + b_{-1})f_i^5 + \frac{1}{180}h^5(b_1 - b_{-1})f_i^6 + O_T(h^6)$$

Agora dividindo (2.25) por b_1 , obtém-se

$$\frac{a_1}{b_1}f_{i+1} + \frac{a_0}{b_1}f_i + \frac{a_{-1}}{b_1}f_{i-1} + \frac{b_1}{b_1}f'_{i+1} + \frac{b_0}{b_1}f'_i + \frac{b_{-1}}{b_1}f'_{i-1} = 0 \quad (2.31)$$

então redefinindo o sistema (2.30) da seguinte maneira

$$\frac{a_1}{b_1} = \frac{1}{2h}(-5 - \alpha), \quad \frac{a_0}{b_1} = \frac{2}{h}(1 - \alpha), \quad \frac{a_{-1}}{b_1} = \frac{1}{2h}(1 + 5\alpha), \quad \frac{b_0}{b_1} = 2(1 + \alpha) \quad (2.32)$$

onde $\alpha = \frac{b_{-1}}{b_1}$

Substituindo o sistema (2.32) em (2.31) e desprezando o ET, obtém-se⁸

$$\begin{aligned} \alpha f'_{i-1} + 2(1 + \alpha)f'_i + f'_{i+1} + \frac{(1 + 5\alpha)}{2h}f_{i-1} + \frac{2(1 - \alpha)}{h}f_i - \frac{(5 + \alpha)}{2h}f_{i+1} &\simeq 0 \Leftrightarrow \\ \alpha f'_{i-1} + 2(1 + \alpha)f'_i + f'_{i+1} &\simeq -\frac{(1 + 5\alpha)}{2h}f_{i-1} - \frac{2(1 - \alpha)}{h}f_i + \frac{(5 + \alpha)}{2h}f_{i+1} \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde

$$ET = \frac{h^3}{12}(1 - \alpha)f_i^4 + \frac{h^4}{60}(1 + \alpha)f_i^5 + \frac{h^5}{180}(1 - \alpha)f_i^6 + O_T(h^6) \quad (2.34)$$

Agora basta atribuir valores para α e será possível construir esquemas de até 4ª ordem. A seguir serão apresentados alguns desses esquemas.

2.4.2 Esquemas de até 4ª ordem de aproximação

Atribuindo valores para α nas expressões (2.33) e (2.34) consegue-se esquemas de até 4ª ordem para cálculo da primeira derivada. Na tabela 2.5 pode ser visto alguns esquemas gerados com essa representação.⁹

Um esquema completo com 3 pontos na esquerda, em uma malha equidistante de

⁸O desenvolvimento até encontrar essa expressão foram realizadas pelo pesquisador.

⁹O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

Tabela 2.3: Algumas esquemas gerados

α	Esquerda do esquema	Direita do esquema	Termo de maior grau do ET	Ordem de precisão
0	$2f'_i + f'_{i+1}$	$\frac{-f_{i-1} - 4f_i + 5f_{i+1}}{2h}$	$\frac{h^3}{12} f_i^4$	3^a
-1	$-f'_{i-1} + f'_{i+i}$	$\frac{2f_{i-1} - 4f_i + 2f_{i+1}}{h}$	$\frac{h^3}{6} f_i^4$	3^a
1	$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1}$	$\frac{3(-f_{i-1} + f_{i+1})}{h}$	$\frac{h^4}{30} f_i^5$	4^a

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

$n + 1$ pontos, para aplicar o método de diferenças finitas compactas, pode ser visto na expressão (2.35).

$$\begin{aligned}
 f'_0 + 2f'_1 &= \frac{-5f_0 + 4f_1 + f_2}{2h} + O_+(h^3) \\
 f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} &= \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h} + O_c(h^4) \\
 2f'_{n-1} + f'_n &= \frac{-f_{n-2} - 4f_{n-1} + 5f_n}{2h} + O_-(h^3)
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Um esquema completo de 4^a ordem, com uma malha equidistante de $n + 1$ pontos, para aplicar o método de diferenças finitas compactas, pode ser visto na expressão (2.36).

$$\begin{aligned}
 f'_0 + 3f'_1 &= \frac{-17f_0 + 9f_1 + 9f_2 - f_3}{6h} + O_+(h^4) \\
 f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} &= \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h} + O_c(h^4) \\
 3f'_{n-1} + f'_n &= \frac{f_{n-3} - 9f_{n-2} - 9f_{n-1} + 17f_n}{6h} + O_-(h^4)
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Com as ideias abordadas aqui é possível montar esquemas de diferenças finitas compactas de alta ordem de precisão. A seguir será desenvolvido o método de diferenças finitas compactas para encontrar um esquema de até 10^a ordem de precisão.

2.4.3 Diferenças Finita Compactas de até 10^a ordem de aproximação

Aqui foram desenvolvidos esquemas de diferenças finitas compactas com cinco pontos na esquerda, para isso estabeleceu-se relações entre os coeficientes que acompanham as

$(f'_{i-2}, f'_{i-1}, f'_{i+1}, \dots, f'_{i+2})$ e os que acompanham as $(f_{i-3}, f_{i-2}, f_{i-1}, f_{i+1}, f_{i+2}, f_{i+3})$ para gerar esquemas de até 10^a ordem de precisão.

Desenvolvimento

Agora uma fórmula geral de cinco pontos para aproximação da primeira derivada de uma função f , onde f é de classe C^∞ em uma malha equidistante, pode ser escrita como (2.37).

$$\begin{aligned} \beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = \\ a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6h} \end{aligned} \quad (2.37)$$

A ideia será a mesma abordada no método de até 4^a ordem de precisão.

Expandindo a série de Taylor da f e f' da expressão (2.37) em torno do ponto x_i , obtém-se

$$\begin{aligned} \beta \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2h)^n}{n!} f_i^{n+1} + \alpha \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{h^n}{n!} f_i^{n+1} + f'_i + \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} f_i^{n+1} + \beta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2h)^n}{n!} f_i^{n+1} = \\ = \frac{a}{2h} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} f_i^k - \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{h^k}{k!} f_i^k \right) + \frac{b}{4h} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2h)^k}{k!} f_i^k - \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2h)^k}{k!} f_i^k \right) + \\ + \frac{c}{6h} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(3h)^k}{k!} f_i^k - \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(3h)^k}{k!} f_i^k \right) \end{aligned} \quad (2.38)$$

Agora calculando as somatórias da expressão (2.38) até $k = 10$ para lado esquerdo da igualdade e $k = 11$ para o lado direito da igualdade, e colocando em evidência os termos $\frac{h^k}{k!} f_i^{k+1}$ em evidência do lado esquerdo e o termo $\frac{h^k}{k!} f_i^{k+1}$ do lado direito, os termos restantes das somatórias serão denotados por $o(h^{11})$. Assim chegando na seguinte relação entre os coeficientes β, α e a, b, c .

$$\begin{aligned}
0 &= f_i \left(\frac{(a-a)}{2h} + \frac{(b-b)}{4h} + \frac{(c-c)}{6h} \right) \\
f'_i(\beta + \alpha + 1 + \alpha + \beta) &= h f'_i \left(\frac{(a+a)}{2h} + \frac{(2b+2b)}{4h} + \frac{(3c+3c)}{6h} \right) \\
h f''_i(-2\beta - \alpha + \alpha + 2\beta) &= \frac{h^2}{2!} f''_i \left(\frac{(a-a)}{2h} + \frac{(2^2b-2^2b)}{4h} + \frac{(3^2c-3^2c)}{6h} \right) \\
\frac{h^2}{2!} f'''_i(2^2\beta + \alpha + \alpha + 2^2\beta) &= \frac{h^3}{3!} f'''_i \left(\frac{(a+a)}{2h} + \frac{(2^3b+2^3b)}{4h} + \frac{(3^3c+3^3c)}{6h} \right) \\
\frac{h^3}{3!} f^4_i(-2^3\beta - \alpha + \alpha + 2^3\beta) &= \frac{h^4}{4!} f^4_i \left(\frac{(a-a)}{2h} + \frac{(2^4b-2^4b)}{4h} + \frac{(3^4c-3^4c)}{6h} \right) \\
\frac{h^4}{4!} f^5_i(2^4\beta + \alpha + \alpha + 2^4\beta) &= \frac{h^5}{5!} f^5_i \left(\frac{(a+a)}{2h} + \frac{(2^5b+2^5b)}{4h} + \frac{(3^5c+3^5c)}{6h} \right) \\
\frac{h^5}{5!} f^6_i(-2^5\beta - \alpha + \alpha + 2^5\beta) &= \frac{h^6}{6!} f^6_i \left(\frac{(a-a)}{2h} + \frac{(2^6b-2^6b)}{4h} + \frac{(3^6c-3^6c)}{6h} \right) \\
\frac{h^6}{6!} f^7_i(2^6\beta + \alpha + \alpha + 2^6\beta) &= \frac{h^7}{7!} f^7_i \left(\frac{(a+a)}{2h} + \frac{(2^7b+2^7b)}{4h} + \frac{(3^7c+3^7c)}{6h} \right) \\
\frac{h^7}{7!} f^8_i(-2^7\beta - \alpha + \alpha + 2^7\beta) &= \frac{h^8}{8!} f^8_i \left(\frac{(a-a)}{2h} + \frac{(2^8b-2^8b)}{4h} + \frac{(3^8c-3^8c)}{6h} \right) \\
\frac{h^8}{8!} f^9_i(2^8\beta + \alpha + \alpha + 2^8\beta) &= \frac{h^9}{9!} f^9_i \left(\frac{(a+a)}{2h} + \frac{(2^9b+2^9b)}{4h} + \frac{(3^9c+3^9c)}{6h} \right) \\
\frac{h^9}{9!} f^{10}_i(-2^9\beta - \alpha + \alpha + 2^9\beta) &= \frac{h^{10}}{10!} f^{10}_i \left(\frac{(a-a)}{2h} + \frac{(2^{10}b-2^{10}b)}{4h} + \frac{(3^{10}c-3^{10}c)}{6h} \right) \\
\frac{h^{10}}{10!} f^{11}_i(2^{10}\beta + \alpha + \alpha + 2^{10}\beta) &= \frac{h^{11}}{11!} f^{11}_i \left(\frac{(a+a)}{2h} + \frac{(2^{11}b+2^{11}b)}{4h} + \frac{(3^{11}c+3^{11}c)}{6h} \right)
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Reorganizando a expressão (2.39) tem-se

$$\begin{aligned}
f'_i(1 + 2\alpha + 2\beta) &= f'_i(a + b + c) \\
\frac{h^2}{2!} f'''_i(2\alpha + 2(2^2\beta)) &= \frac{h^2}{3!} f'''_i(a + 2^2b + 3^2c) \\
\frac{h^4}{4!} f^5_i(2\alpha + 2(2^4\beta)) &= \frac{h^4}{5!} f^5_i(a + 2^4b + 3^4c) \\
\frac{h^6}{6!} f^7_i(2\alpha + 2(2^6\beta)) &= \frac{h^6}{7!} f^7_i(a + 2^6b + 3^6c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{h^8}{8!}f_i^9(2\alpha + 2(2^8\beta)) &= \frac{h^8}{9!}f_i^9(a + 2^8b + 3^8c) \\ \frac{h^{10}}{10!}f_i^{11}(2\alpha + 2(2^{10}\beta)) &= \frac{h^{10}}{11!}f_i^{11}(a + 2^{10}b + 3^{10}c)\end{aligned}$$

e em sequência

$$\begin{aligned}(f_i')(1 + 2\alpha + 2\beta) &= (f_i')(a + b + c) \\ (h^2 f_i''')2\frac{3!}{2!}(\alpha + 2^2\beta) &= (h^2 f_i''')(a + 2^2b + 3^2c) \\ (h^4 f_i^5)2\frac{5!}{4!}(\alpha + 2^4\beta) &= (h^4 f_i^5)(a + 2^4b + 3^4c) \\ (h^6 f_i^7)2\frac{7!}{6!}(\alpha + 2^6\beta) &= (h^6 f_i^7)(a + 2^6b + 3^6c) \\ (h^8 f_i^9)2\frac{9!}{8!}(\alpha + 2^8\beta) &= (h^8 f_i^9)(a + 2^8b + 3^8c) \\ (h^{10} f_i^{11})2\frac{11!}{10!}(\alpha + 2^{10}\beta) &= (h^{10} f_i^{11})(a + 2^{10}b + 3^{10}c)\end{aligned}$$

Por fim, as relações entre os coeficientes a, b, c e α, β^{10} são estabelecidas da seguinte maneira

$$a + b + c = 1 + 2\alpha + 2\beta \quad 2^a \text{ Ordem} \quad (2.40)$$

$$a + 2^2b + 3^2c = 6(\alpha + 2^2\beta) \quad 4^a \text{ Ordem} \quad (2.41)$$

$$a + 2^4b + 3^4c = 10(\alpha + 2^4\beta) \quad 6^a \text{ Ordem} \quad (2.42)$$

$$a + 2^6b + 3^6c = 14(\alpha + 2^6\beta) \quad 8^a \text{ Ordem} \quad (2.43)$$

$$a + 2^8b + 3^8c = 18(\alpha + 2^8\beta) \quad 10^a \text{ Ordem} \quad (2.44)$$

onde

$$ET = (h^{10} f_i^{11})(a + 2^{10}b + 3^{10}c - 22(\alpha + 2^{10}\beta)) + O(h^{11}) \quad (2.45)$$

2.4.4 Esquemas de até 10^a ordem de aproximação

Agora a partir das relações estabelecidas através da expressão (2.37) serão mostrados alguns esquemas gerados com essas relações.¹¹

¹⁰O desenvolvimento dessas relações foram realizadas pelo pesquisador.

¹¹O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

Para construir um esquema de até 2^a ordem use relação (2.40) que fornece a expressão:

12

$$a = 1 + 2\alpha + 2\beta - b - c \quad (2.46)$$

Para construir um esquema de até 4^a ordem use as relações (2.40) e (2.41) que fornece a expressão:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{3}(4 + 5c + 2\alpha - 16\beta) & b &= \frac{1}{3}(-1 - 8c + 4\alpha + 22\beta) \\ \text{ou} \\ a &= \frac{1}{2}(3 + b + 6c - 18\beta) & \alpha &= \frac{1}{4}(1 + 3b + 8c - 22\beta) \end{aligned} \quad (2.47)$$

Para construir um esquema de até 6^a ordem use as relações (2.40), (2.41) e (2.42) que fornece a expressão:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{9}(14 - 5c - 24\beta) & b &= \frac{1}{9}(1 - 64c + 114\beta) & \alpha &= \frac{1}{3}(1 - 10c + 12\beta) \\ \text{ou} \\ a &= \frac{1}{6}(9 + \alpha - 20\beta) & b &= \frac{1}{15}(-9 + 32\alpha + 62\beta) & c &= \frac{1}{10}(1 - 3\alpha + 12\beta) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Para construir um esquema de até 8^a ordem use as relações (2.40), (2.41), (2.42) e (2.43) que fornece a expressão:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{48}(75 - 140\beta) & b &= \frac{1}{15}(3 + 142\beta) & c &= -\frac{1}{80}(1 + 36\beta) & \alpha &= \frac{1}{8}(3 + 20\beta) \\ \text{ou} \\ a &= \frac{1}{6}(12 - 7\alpha) & b &= \frac{1}{150}(-183 + 568\alpha) & c &= \frac{1}{50}(-4 + 9\alpha) & \beta &= \frac{1}{20}(-3 + 8\alpha) \end{aligned} \quad (2.49)$$

Para construir um esquema de até 10^a ordem use as relações (2.40), (2.41), (2.42), (2.43) e (2.44) que fornece os valores:

$$a = \frac{17}{12} \quad b = \frac{101}{150} \quad c = \frac{1}{100} \quad \alpha = \frac{1}{2} \quad \beta = \frac{1}{20} \quad (2.50)$$

Agora basta escolher a ordem que deseja e atribuir valores para os coeficientes independentes, a seguir serão mostrados alguns exemplos de esquemas.

¹²Todos os calculos foram realizados utilizando uma calculadora disponível em: <https://matrixcalc.org/pt/slu.html>.

Exemplo 2.9. Atribuindo os valores $b = 0$, $c = 0$, $\alpha = 1$ e $\beta = 0$ em (2.46) encontra-se um esquema de 2ª ordem de aproximação:

$$f'_{i-1} + f'_i + f'_{i+1} \approx \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{2h}$$

Exemplo 2.10. Atribuindo os valores $\beta = 0$, $b = 0$ e $c = 0$ em (2.47) encontra-se um esquema de 4ª ordem de aproximação:

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} \approx \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h}$$

Exemplo 2.11. Atribuindo os valores $\beta = 0$ e $c = 0$ em (2.48) encontra-se um esquema de 6ª ordem de aproximação:

$$f'_{i-1} + 3f'_i + f'_{i+1} \approx \frac{f_{i+2} + 28f_{i+1} - 28f_{i-1} - f_{i-2}}{12h}$$

Exemplo 2.12. Atribuindo o valor $\alpha = 0$ em (2.49) encontra-se um esquema de 8ª ordem de aproximação:

$$-3f'_{i-2} + 20f'_i - 3f'_{i+2} \approx \frac{2f_{i-3} + 61f_{i-2} - 200f_{i-1} + 200f_{i+1} - 61f_{i+2} - 2f_{i+3}}{10h}$$

Exemplo 2.13. O caso para conseguir um esquema de 10ª ordem não é necessário atribuir valores, pois a expressão (2.50) já fornece os valores a serem substituídos:

$$\frac{f'_{i-2} + 10f'_{i-1} + 20f'_i + 10f'_{i+1} + f'_{i+2} \approx 1700(f_{i+1} - f_{i-1}) + 404(f_{i+2} - f_{i-2}) + 3(f_{i+3} - f_{i-3})}{120h}$$

Na próxima seção será apresentado uma aplicação do método de diferenças finitas compactas de 4ª ordem de aproximação.

2.5 Aplicação das Diferenças Finitas Compactas

Essa seção apresenta uma aplicação do método de diferenças finitas compactas de 4ª ordem de aproximação.¹³

Foi aplicado o método de diferenças finitas compactas no exemplo 2.6, o qual foi exibido a aplicação das diferenças finitas explícitas. Para esse aplicação foi utilizado a mesma sequência de passos listadas exemplo 2.6 e utilizado o esquema (2.36). No final será feita uma comparação entre os resultados gerados pelo método de diferenças finitas explícitas e o de compactas.

¹³O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

Exemplo 2.14. Calcular numericamente a primeira derivada da função $f(x) = e^x$ no intervalo $[0, 1]$ com uma malha de 6 pontos.

Solução 2.15. Seguindo a sequência de passos listada na aplicação das diferenças finitas explícitas:

Calculando o espaçamento h ;

$$h = \left| \frac{1 - 0}{6 - 1} \right| = \frac{1}{5} = 0.2$$

Calculando os pontos da discretização x_i ;
 $x_0 = 0 + 0.2 \times 0 = 0$, $x_1 = 0 + 0.2 \times 1 = 0.2$, $x_2 = 0 + 0.2 \times 2 = 0.4$, $x_3 = 0 + 0.2 \times 3 = 0.6$,
 $x_4 = 0 + 0.2 \times 4 = 0.8$ e $x_5 = 1$

Calculando os valores da $f(x_i)$, será trabalhado com 8 casas a pós a vírgula;
 $f(x_0) = 1$, $f(x_1) \approx 1.22140276$, $f(x_2) \approx 1.49182470$, $f(x_3) \approx 1.82211880$, $f(x_4) \approx 2.22554093$ e $f(x_5) \approx 2.71828183$

Escrevendo a tabela 2.4 com os valores de i , x_i e $f(x_i)$;

Tabela 2.4: Dados calculados

i	x_i	$f(x_i)$
0	0	1
1	0.2	1.22140276
2	0.4	1.49182470
3	0.6	1.82211880
4	0.8	2.22554093
5	1	2.71828183

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

Utilizando o esquema de 4ª ordem de aproximação (2.36):

$$\begin{aligned}
 f'(0) + 3f'(0.2) &\approx \frac{-17f(0) + 9f(0.2) + 9f(0.4) - f(0.6)}{6 \times 0.2} \approx 4.66410695 \\
 f'(0) + 4f'(0.2) + f'(0.4) &\approx \frac{3(f(0.4) + f(0))}{0.2} \approx 7.3773705 \\
 f'(0.2) + 4f'(0.4) + f'(0.6) &\approx \frac{3(f(0.6) + f(0.2))}{0.2} \approx 9.0107406 \\
 f'(0.4) + 4f'(0.6) + f'(0.8) &\approx \frac{3(f(0.8) + f(0.4))}{0.2} \approx 11.0057435 \\
 f'(0.6) + 4f'(0.8) + f'(1) &\approx \frac{3(f(1) + f(0.6))}{0.2} \approx 13.4424455 \\
 3f'(0.8) + f'(1) &\approx \frac{f(0.4) - 9f(0.6) - 9f(0.8) + 17f(1)}{6 \times 0.2} \approx 9.39473183
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

Colocando os coeficientes da expressão (2.51) em uma matriz:

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f'(0) \\ f'(0.2) \\ f'(0.4) \\ f'(0.6) \\ f'(0.8) \\ f'(1) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 4.66410695 \\ 7.3773705 \\ 9.0107406 \\ 11.0057435 \\ 13.4424455 \\ 9.39473183 \end{bmatrix}$$

Agora resolvendo ¹⁴ essa matriz obtém-se:

$$\begin{aligned}
 f'(0) &\approx 0.99971679 & f'(0.2) &\approx 1.22146338 & f'(0.4) &\approx 1.49180016 \\
 f'(0.6) &\approx 1.82207655 & f'(0.8) &\approx 2.22563711 & f'(1) &\approx 2.71782048
 \end{aligned}$$

Escrevendo a tabela com a solução analítica, solução numérica com método de 1ª ordem explícitas, com método de 4ª ordem explícitas e com método de 4ª ordem compactas.

Note que os resultados gerados com o método de diferenças finitas compactas de 4ª ordem foi aproximadamente igual os resultados gerados com o método de diferenças finitas explícitas de 4ª ordem, sendo exatamente iguais nas 3 primeiras casas após a vírgula.

¹⁴Para o cálculo foi utilizado uma calculadora disponível em: <https://matrixcalc.org/pt/slu.html>.

Tabela 2.5: Comparação entre os métodos

$f'(x_i)$	Solução analítica	Solu. numé. explí. de 1ª ordem	Solu. numé. explí. de 4ª ordem	Solu. numé. comp. de 4ª ordem
$f'(0)$	1	1.1070138	0.99955054	0.99971679
$f'(0.2)$	1.22140276	1.3521097	1.2215188	1.22146338
$f'(0.4)$	1.49182470	1.6514705	1.49174475	1.49180016
$f'(0.6)$	1.82211880	2.01711065	1.82202117	1.82207655
$f'(0.8)$	2.22554093	2.4637045	2.22569241	2.22563711
$f'(1)$	2.71828183	2.4637045	2.7176546	2.71782048

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

Perceba que a matriz gerada, na aplicação do método de diferenças finitas compactas, é uma matriz tridiagonal. Esse padrão se repete para outras ordem de precisão, porém no método 5 pontos gera uma matriz pentadiagonal, no método com 7 pontos uma matriz heptadiagonal e assim por diante.

Apesar de no desenvolvimento do método de diferenças finitas compactas ter sido assumido que a f é de classe C^∞ essa condição não precisa ser necessariamente satisfeita. Na verdade é preciso que, no mínimo, a f seja de classe C^k , onde k é a ordem de precisão desejada.

Nesse capítulo foram apresentados os métodos de diferenças finitas explícitas e compactas convencionais e mostrado como eles são obtidos, além disso foi exibido uma aplicação desses métodos, na qual foi possível perceber que realmente são métodos interessantes para se trabalhar com aproximações de derivadas. A questão é, e se não for possível escrever a série de Taylor de uma função f em todo seu domínio? Deve-se abandonar esses métodos caso isso aconteça? Essas questões são abordadas no próximo capítulo.

CAPÍTULO 3

CÁLCULO DE DERIVADA EM FUNÇÕES COM SINGULARIDADE SALTO

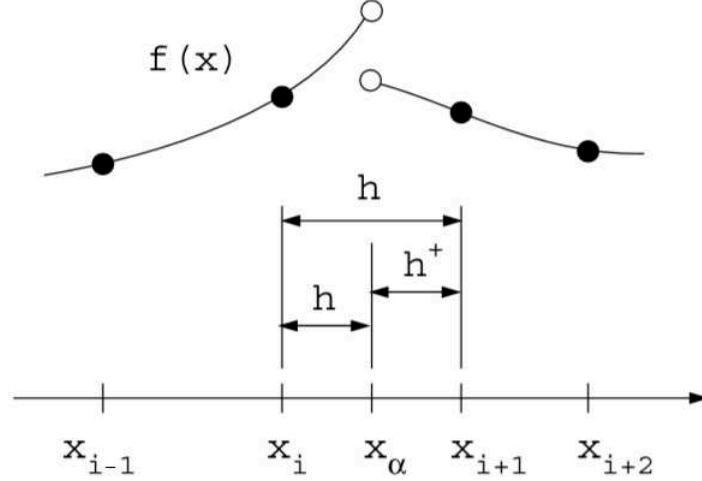
Funções com singularidade salto necessitam de especial tratamento dos cálculos da derivada nos pontos na vizinhança da singularidade. O objetivo desse capítulo é apresentar o método de correção para a série de Taylor e aplicá-lo em alguns esquemas de diferenças finitas. Para desenvolver esse capítulo foram utilizadas as referências [5], [9] e [17].

3.1 Série de Taylor e funções com singularidade tipo salto

Essa seção é uma tradução livre adaptada da referência [9]. Aqui será apresentado o método de correção para a série de Taylor e a aplicação dessa correção em um esquema de diferenças finitas de até 4ª ordem de precisão.

A figura 3.1 mostra uma função $f(x)$ com uma descontinuidade no ponto $x = x_\alpha$, onde $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$.

Essa função será o objeto de estudo para esse método. A ideia chave aqui é adicionar uma correção no momento de escrever a série de Taylor para $f(x_{i+1})$ em torno do ponto

Figura 3.1: Uma função f com uma singularidade no ponto x_α .

Fonte: Figura adaptada pelo pesquisador de Linnick e Fasel, 2005 pág. 163.

x_i , ou seja, colocar um termo corretor quando a expansão da série de Taylor envolve dois pontos adjacentes da discretização que possuem uma singularidade salto entre eles.

Suponha que a f seja analítica em todo domínio $D = \{x; x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}\}$, exceto no ponto x_α , onde há uma singularidade do tipo salto no valor da função, as derivadas dessa função podem ou não apresentar uma descontinuidade no mesmo ponto x_α .

Se $x_i < x_\alpha$ a série de Taylor centrada em x_i não pode prosseguir através de x_α , para avaliar a função em torno de um ponto $x_{i+1} > x_\alpha$. Para prosseguir corretamente é necessário que um termo de correção J_α seja adicionado como segue:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2!} + \cdots + J_\alpha, \quad (3.1)$$

onde

$$J_\alpha = [f]_\alpha + [f']_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^+)^2 + \cdots, \quad h = x_{i+1} - x_i \text{ e } h^+ = x_{i+1} - x_\alpha.$$

O termo $[f^k]_\alpha$ representa o salto no valor f^k em $x = x_\alpha$, isto é

$$[f^k]_\alpha = \lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} f^k(x) - \lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} f^k(x) \quad (3.2)$$

de modo que $[f]_\alpha$ representa o salto no valor da função em $x = x_\alpha$, $[f']_\alpha$ o salto no valor da primeira derivada da função e assim por diante.

O caso $x_i = x_\alpha$ exige que se decida se os termos $[f]_i, [f']_i, [f^2]_i \dots$, devem ser definidos como limites esquerdo ou direito, determinando, por sua vez, se será ou não necessário uma correção para a série de Taylor.

Por final, o caso $x_\alpha < x_i$, nenhuma correção é necessária para prever $f(x_{i+1})$.

A equação (3.1) é denominada a série de Taylor corrigida. A prova da validade da expansão é dada por Wiegmann e Bude em [17].

A série de Taylor corrigida presente na equação (3.1) será utilizada a seguir para corrigir um esquema de diferenças finitas que foi obtido no capítulo 2.

3.1.1 Correção aplicada em esquemas de Diferenças Finitas

Usando o termo de correção J_α , discutido na seção anterior, é possível modificar qualquer tipo de esquema convencional de diferenças finitas para obter sua contraparte corrigida pelo salto. O esquema corrigido manterá a ordem de precisão do esquema original, quando o estêncil envolver uma singularidade do tipo salto.

Considere, como exemplo, um esquema de diferenças finitas compactas de até 4ª ordem de precisão para a primeira derivada f' .

$$L_{i-1}f'_{i-1} + L_i f'_i + L_{i+1}f'_{i+1} = R_{i-1}f_i + R_i f_i + R_{i+1}f_{i+1} \quad (3.3)$$

O termo L_i refere-se aos coeficientes de diferenças finitas que aparecem ao lado esquerdo do esquema de diferenças finitas compactas (contendo derivadas da função f), e R_i o coeficiente no lado direito do esquema de diferenças finitas (contendo valores da função f em si mesma).

A equação (3.3) é a equação (2.25), desenvolvida no capítulo 2 com uma malha equidistante. A discretização com pontos não equidistantes são permitidos nessa discussão, no entanto, todas as referências à precisão formal são declaradas para o caso da malha equidistante.

Se a função f é analítica em todo o domínio $x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}$, então o esquema dado em (3.3) será exato até o erro de truncamento embutido na aproximação pela utilização

desse esquema. No entanto, considere a função descrita na figura (3.1). Se o esquema dado na (3.3) for aplicado a este caso, um grande erro ocorrerá.

Para evitar a situação desse erro, o esquema (3.3) deve ser modificado, desta forma o termo $(L_{lpc}J_{\alpha 1} - R_{lpc}J_{\alpha 0})$ deve ser adicionado

$$L_{i-1}f'_{i-1} + L'_i + L_{i+1}f'_{i+1} = R_{i-1}f_{i-1} + R_i f_i + R_{i+1}f_{i+1} + (L_{lpc}J_{\alpha 1} - R_{lpc}J_{\alpha 0}) \quad (3.4)$$

onde $J_{\alpha 0}$ e $J_{\alpha 1}$ são truncados tomando apenas termos suficientes para manter $O(h^4)$, ou seja, $L_{lpc}J_{\alpha 1} = R_{lpc}J_{\alpha 0} + O(h^4)$.

Observação 3.1. *O índice lpc indica o lado para correção.*

Se e o salto ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, $lpc = i + 1$, e portanto para a primeira derivada, é:

$$\begin{aligned} J_{\alpha 0} &= [f]_\alpha + [f']_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^+)^2 + \frac{1}{2!}[f''']_\alpha (h^+)^3 + \frac{1}{4!}[f^4]_\alpha (h^+)^4, \\ J_{\alpha 1} &= [f']_\alpha + [f'']_\alpha h^+ + \frac{1}{2!}[f''']_\alpha (h^+)^2 + \frac{1}{3!}[f^4]_\alpha (h^+)^3, \\ \text{onde } h^+ &= x_{i+1} - x_\alpha. \end{aligned}$$

Se e o salto ocorre em $x_{i-1} < x_\alpha < x_i$, $lpc = i - 1$, para a primeira derivada, é:

$$\begin{aligned} J_{\alpha 0} &= -[f]_\alpha + [f']_\alpha h^- - \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^-)^2 + \frac{1}{2!}[f''']_\alpha (h^-)^3 - \frac{1}{4!}[f^4]_\alpha (h^-)^4, \\ J_{\alpha 1} &= -[f']_\alpha + [f'']_\alpha h^- - \frac{1}{2!}[f''']_\alpha (h^-)^2 + \frac{1}{3!}[f^4]_\alpha (h^-)^3, \\ \text{onde } h^- &= x_\alpha - x_{i-1}. \end{aligned}$$

O último caso a ser analisado é se x_α é uma ponto da malha computacional, tem que verificar duas possibilidades:

- se $x_\alpha = x_i$ e $f(x_i) = \lim_{x \rightarrow x_i^+} f(x)$, então $lpc = i - 1$, há necessidade da inclusão do termo $(L_{i-1}J_{\alpha 1} - R_{i-1}J_{\alpha 0})$
- se $x_\alpha = x_{i-1}$ e $f(x_{i-1}) = \lim_{x \rightarrow x_{i-1}^+} f(x)$, então não há necessidade de correção.

No caso de $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$ em uma malha equidistante de tamanho h , visando um esquema de 4ª ordem aproximação, a equação (3.4) torna-se

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} = \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h} + \left(J_{\alpha 1} - \frac{3}{h} J_{\alpha 0} \right) \quad (3.5)$$

onde

$$L_{i-1} = 1, \quad L_i = 4, \quad L_{i+1} = 1, \quad R_{i-1} = -\frac{3}{h}, \quad R_i = 0 \text{ e } R_{i+1} = \frac{3}{h}$$

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

$$J_{\alpha 1} = [f']_\alpha + [f'']_\alpha h^+ + \frac{1}{2!} [f''']_\alpha (h^+)^2 + \frac{1}{3!} [f^{(4)}]_\alpha (h^+)^3, \text{ com } h^+ = x_{i+1} - x_\alpha.$$

Agora, os termos de salto serão cancelados, deixando apenas um termo remanescente de $O(h^4)$. A questão que permanece é de como obter os saltos na função e derivados em x_α que são necessários para o esquema corrigido, isto será discutido na próxima subseção.

3.1.2 Obtendo as $[f^k]_\alpha$ para o termo corretor

Diferente do caso envolvendo termos de forçamento singular, citado na subseção anterior, os saltos na função $[f]_\alpha$ e suas derivadas $[f^k]_\alpha$, não podem ser encontrados independentemente da solução real do problema. Dito isso, é necessário usar outra solução para obter os saltos. Numericamente, isso pode ser obtido através do uso de diferenças finitas explícitas unilaterais, ou seja, que usa todos os termos em uma mesma direção. No capítulo 2 apresentou-se um exemplo de diferenças finitas unilaterais de até 4ª ordem de precisão (2.19).

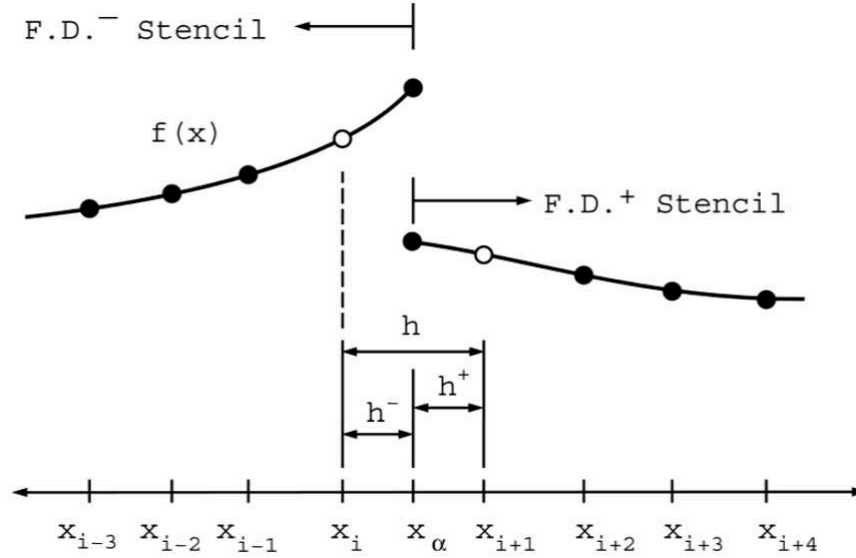
A precisão e a configuração dos esquemas de diferenças finitas unilaterais devem ser escolhidos com algum cuidado, como será mostrado a seguir.

Primeiro será apresentada a questão da precisão, e posteriormente, uma discussão sobre a configuração, ou seja, quais pontos devem ser ignorados e não devem ser usados nos estênceis unilaterais.

Com referência a figura 3.2, a primeira derivada de uma função f no ponto x_i é calculado com o esquema (3.5)

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} = \frac{3(f_{i+1} - f_{i-1})}{h} + \left(J_{\alpha 1} - \frac{3}{h} J_{\alpha 0} \right) \quad (3.6)$$

Figura 3.2: Esquema de estêncil usada para obter os saltos. O símbolo $\bullet$ indica pontos no esquema, enquanto o símbolo $\circ$ indica pontos não usados no esquema.



Fonte: Figura adaptada pelo pesquisador de Linnick e Fasel, 2005 pág. 165.

e os termo de correção de salto truncado são

$$\begin{aligned}
 J_{\alpha 0} &= [f]_{\alpha} + [f']_{\alpha} h^{+} + \frac{1}{2!} [f'']_{\alpha} (h^{+})^2 + \frac{1}{2!} [f''']_{\alpha} (h^{+})^3 + \frac{1}{4!} [f^{(4)}]_{\alpha} (h^{+})^4, \\
 J_{\alpha 1} &= [f']_{\alpha} + [f'']_{\alpha} h^{+} + \frac{1}{2!} [f''']_{\alpha} (h^{+})^2 + \frac{1}{3!} [f^{(4)}]_{\alpha} (h^{+})^3, \\
 \text{onde } h^{+} &= x_{i+1} - x_{\alpha}.
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

As expressões (3.6) e (3.7) juntas formam uma expressão $O(h^4)$ para f'_i na presença de uma singularidade tipo salto no ponto $x = x_{\alpha}$. Iniciando com $[f]_{\alpha}$ e terminando com $[f^{(4)}]_{\alpha}$, os termos de salto devem ser escolhidos para as $O(h^4)$, $O(h^3)$, $O(h^2)$ e $O(h)$, respectivamente, para garantir a precisão de $O(h^4)$ na equação (3.6).

Para manter a 4ª ordem de precisão, cada um dos esquemas de diferenças finitas unilaterais usados para calcular os saltos na equação (3.7) deve conter, no mínimo, 5 pontos. Referindo novamente a (3.2), a configuração desses pontos que os saltos são calculados como segue:

$$[f^{(k)}]_{\alpha} = f_F^{(k)} \cdot D \cdot^{+} - f_F^{(k)} \cdot D \cdot^{-}, \tag{3.8}$$

onde

$$\begin{aligned} f_F^{(k)}.D.^+ &= c_{k_{\alpha+}} f_{\alpha}^+ + c_{k_{i+2}} f_{i+2} + c_{k_{i+3}} f_{i+3} + c_{k_{i+4}} f_{i+4} + c_{k_{i+5}} f_{i+5} \\ f_F^{(k)}.D.^- &= c_{k_{\alpha-}} f_{\alpha}^- + c_{k_{i-2}} f_{i-2} + c_{k_{i-3}} f_{i-3} + c_{k_{i-4}} f_{i-4} + c_{k_{i-5}} f_{i-5} \end{aligned}$$

Os coeficientes c_{k_l} são usados para determinar a aproximação numérica para a k -ésima derivada da f por uma combinação linear das f_i , tal como foram desenvolvidas no capítulo 2.

Os subíndices $+$ e $-$ na f_{α} indicam, respectivamente, o limite a direita e a esquerda de x_{α} . Note que os pontos x_i e x_{i+1} não foram usados intencionalmente, por conta da estabilidade numérica. Admitindo limites imersos de forma arbitrária, ou ainda, mover limites imersos, é claro que deve-se permitir que as singularidades se movam arbitrariamente perto, ou mesmo fiquem no topo, de pontos da malha. A configuração dos esquemas de diferenças finitas descritos nesta seção permitem apenas isso.

A seguir será apresentado outros esquemas corrigidos com esse método.

3.2 Corrigindo alguns esquemas convencionais

Nesse seção dois esquemas corrigidos com as ideias discutidas anteriormente, um esquema de diferenças finitas explícitas de 2ª ordem de aproximação e um esquema de diferenças finitas compactas de 6ª ordem de aproximação.¹

3.2.1 Correção para as diferenças finitas explícitas

Aqui será exibido como foram realizados os cálculos para a primeira derivada de uma função com uma singularidade tipo salto utilizando as diferenças finitas explícitas de 2ª ordem de precisão.

Assumindo $f(x)$ analítica em todo seu domínio $D = \{x \mid x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}\}$, exceto no ponto x_{α} onde se encontra a descontinuidade no valor da função ou de suas derivadas têm-se: se $x_i < x_{\alpha}$, a série de Taylor não pode assumir valor de f em x_{α} para prever corretamente $f(x_{i+1})$, desta forma, um termo corretor J_{α} deve ser adicionado, obtendo

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2} + \cdots + J_{\alpha}.$$

¹O conteúdo desse item foi elaborado pelo pesquisador.

Assim uma forma genérica para cálculo da primeira derivada, com a correção, utilizando diferenças finitas explícitas de até 2ª ordem se escreve

$$f'(x_i) = R_{i+1}f(x_{i+1}) + R_i f(x_i) + R_{i-1}f(x_{i-1}) - R_{i+1}J_\alpha.$$

onde

$$J_\alpha = [f]_\alpha + [f']_\alpha h^+ + \frac{1}{2}[f'']_\alpha (h^+)^2 + \dots, \quad h = x_{i+1} - x_i \text{ e } h^+ = x_{i+1} - x_\alpha.$$

Os termos: $[f]_\alpha$ (representando o salto no valor de f em $x = x_\alpha$) onde, $[f']_\alpha, [f'']_\alpha, \dots$, são calculados via polinômio de Taylor usando os pontos laterais da discretização da função f , escolhidos conforme a necessidade, ou seja

$$[f^{(k)}]_\alpha = \lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} f^{(k)}(x) - \lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} f^{(k)}(x).$$

Com isso utilizando a seguinte expressão para o cálculo:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} - \frac{1}{2h}J_\alpha \quad (3.9)$$

com

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

Os termos $[f^{(k)}]_\alpha$ foram calculados satisfazendo a seguinte lógica, 2ª ordem de precisão para $[f']_\alpha$ e 1ª ordem de precisão para $[f'']_\alpha$. Para calcular as $[f^{(k)}]_\alpha$ foi utilizado diferenças finitas explícitas unilaterais, geradas apartir da expressão (3.10)

$$\begin{aligned} [f^{(k)}]_\alpha &= f_F^{(k)} \cdot D.^+ - f_F^{(k)} \cdot D.^-, \\ f_F^{(k)} \cdot D.^+ &= c_{k_{\alpha^+}} f_\alpha^+ + c_{k_{i+2}} f_{i+2} + c_{k_{i+3}} f_{i+3} \\ f_F^{(k)} \cdot D.^- &= c_{k_{\alpha^-}} f_\alpha^- + c_{k_{i-2}} f_{i-2} + c_{k_{i-3}} f_{i-3} \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde $f_F^{(k)} \cdot D.^+$ representa o $\lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} f^{(k)}(x)$ e $f_F^{(k)} \cdot D.^-$ representa o $\lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} f^{(k)}(x)$.

A maneira de encontrar valores para os coeficientes c_{k_n} é tal como foi apresentada no capítulo 2. Os pontos onde não foram necessários correções, diferenças finitas explícitas de 1ª e 2ª ordens de precisão foram utilizadas.

3.2.2 Correção para as diferenças finitas compactas

Aqui será exibido como foram realizados os cálculos para a primeira derivada de uma função com uma singularidade tipo salto utilizando as diferenças finitas explícitas de 6ª

ordem de precisão.

Assumindo $f(x)$ analítica em todo seu domínio $D = \{x \mid x_{i-2} \leq x \leq x_{i+2}\}$, exceto no ponto x_α onde se encontra a descontinuidade no valor da função ou de suas derivadas têm-se: se $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, a série de Taylor não pode assumir valor de f em x_α para prever corretamente $f(x_{i+1})$ e $f(x_{i+2})$ em torno do ponto x_i , desta forma, um termo corretor $J_{n\alpha m}$ deve ser adicionado, obtendo

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2!} + \cdots + J_\alpha.$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + f'(x_i)2h + f''(x_i)\frac{(2h)^2}{2!} + \cdots + J_{2\alpha}.$$

Assim uma forma genérica para cálculo da primeira derivada, com a correção, utilizando diferenças finitas compactas de até 6ª ordem se escreve

$$\begin{aligned} L_{i-1}f'_{i-1} + L_i f'_i + L_{i+1}f'_{i+1} &= R_{i-2}f_{i-2} + R_{i-1}f_{i-1} + R_i f_{i-1} + \\ &+ R_{i+1}f_{i+1} + R_{i+2}f_{i+2} + (L_{i+1}J_{\alpha_1} - R_{i+1}J_{\alpha_0} + R_{i+2}J_{2\alpha_0}), \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} L_{i+1}J_{\alpha_1} &= R_{i+1}J_{\alpha_0} + R_{i+2}J_{2\alpha_0} + O(h^6), \\ J_{n\alpha_k} &= [f^k]_\alpha + [f^{k+1}]_\alpha h^{+n} + \frac{1}{2}[f^{k+2}]_\alpha (h^{+n})^2 + \cdots, \\ h &= x_{i+1} - x_i \text{ e } h^{+n} = x_{i+n} - x_\alpha. \end{aligned}$$

Os termos: $[f]_\alpha$ (representando o salto no valor de f em $x = x_\alpha$) onde, $[f']_\alpha, [f'']_\alpha, \dots$, são calculados via polinômio de Taylor usando os pontos laterais da discretização da função f , escolhidos conforme a necessidade, ou seja

$$[f^{(k)}]_\alpha = \lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} f^{(k)}(x) - \lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} f^{(k)}(x).$$

Com isso utilizando a seguinte expressão para o cálculo:

$$f'_{i-1} + 3f'_i + f'_{i+1} = \frac{1}{12h}(-f_{i-2} - 28f_{i-1} + 28f_{i+1} + f_{i+2}) + \left(J_{\alpha_1} - \frac{(28J_{\alpha_0} + J_{2\alpha_0})}{12h} \right) \quad (3.11)$$

com

$$\begin{aligned} J_{\alpha_0} &= [f]_\alpha + [f']_\alpha h^{+1} + \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^{+1})^2 + \frac{1}{3!}[f''']_\alpha (h^{+1})^3 + \frac{1}{4!}[f^{(4)}]_\alpha (h^{+1})^4 + \frac{1}{5!}[f^{(5)}]_\alpha (h^{+1})^5 + \frac{1}{6!}[f^{(6)}]_\alpha (h^{+1})^6, \\ J_{2\alpha_0} &= [f]_\alpha + [f']_\alpha h^{+2} + \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^{+2})^2 + \frac{1}{3!}[f''']_\alpha (h^{+2})^3 + \frac{1}{4!}[f^{(4)}]_\alpha (h^{+2})^4 + \frac{1}{5!}[f^{(5)}]_\alpha (h^{+2})^5 + \frac{1}{6!}[f^{(6)}]_\alpha (h^{+2})^6 \end{aligned}$$

e

$$J_{\alpha_1} = [f']_\alpha h^{+1} + \frac{1}{2!}[f'']_\alpha (h^{+1})^2 + \frac{1}{3!}[f''']_\alpha (h^{+1})^3 + \frac{1}{4!}[f^{(4)}]_\alpha (h^{+1})^4 + \frac{1}{5!}[f^{(5)}]_\alpha (h^{+1})^5 + \frac{1}{6!}[f^{(6)}]_\alpha (h^{+1})^6$$

onde

$$h = x_{i+1} - x_i, \quad h^{+1} = x_{i+1} - x_\alpha \quad \text{e} \quad h^{+2} = x_{i+2} - x_\alpha$$

Os termos $[f^n]_\alpha$ foram calculados satisfazendo a seguinte lógica, 6ª ordem de precisão para $[f']_\alpha$, 5ª ordem de precisão para $[f'']_\alpha$, 4ª ordem de precisão para $[f''']_\alpha$, 3ª ordem de precisão para $[f^4]_\alpha$, 2ª ordem de precisão para $[f^5]_\alpha$ e 1ª ordem de precisão para $[f^6]_\alpha$. Para calcular as $[f^n]_\alpha$ foi utilizado diferenças finitas explícitas, geradas a partir da expressão (3.12)

$$\begin{aligned} [f^{(k)}]_\alpha &= f_F^{(k)} \cdot D.^+ - f_F^{(k)} \cdot D.^-, \\ f_F^{(k)} \cdot D.^+ &= c_{k_\alpha+} f_\alpha^+ + c_{k_{i+2}} f_{i+2} + c_{k_{i+3}} f_{i+3} + c_{k_{i+4}} f_{i+4} + c_{k_{i+5}} f_{i+5} + c_{k_{i+6}} f_{i+6} + c_{k_{i+7}} f_{i+7} \\ f_F^{(k)} \cdot D.^- &= c_{k_{\alpha-}} f_\alpha^- + c_{k_{i-2}} f_{i-2} + c_{k_{i-3}} f_{i-3} + c_{k_{i-4}} f_{i-4} + c_{k_{i-5}} f_{i-5} + c_{k_{i-6}} f_{i-6} + c_{k_{i-7}} f_{i-7} \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde $f_F^{(k)} \cdot D.^+$ representa o $\lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} f^{(k)}(x)$ e $f_F^{(k)} \cdot D.^-$ representa o $\lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} f^{(k)}(x)$.

A maneira de encontrar valores para os coeficientes c_{k_n} é tal como foi apresentada no capítulo 2. Os pontos onde não foram necessários correções, diferenças finitas compactas de 5ª e 6ª ordens de precisão foram utilizadas.

No próximo capítulo serão apresentados os resultados dos testes utilizando o Método das Soluções Manufaturadas nos esquemas corrigidos (3.11) e (3.9) para garantir a precisão formal pré-estabelicida.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS DOS TESTES DE VERIFICAÇÃO DE CÓDIGO PARA CÁLCULO DE SINGULARIDADE SALTO

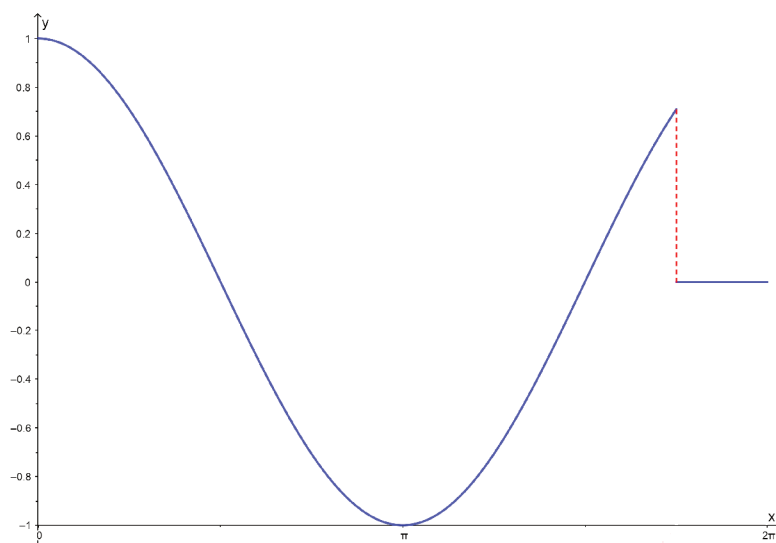
Testes do cálculo da derivada de uma função com apenas uma singularidade salto usando o método das soluções manufaturadas são apresentados nesse capítulo. Os resultados foram apresentados separadamente conforme a escolha do método, diferenças finitas explícitas e diferenças finitas compactas de alta ordem de precisão. O teste se dá comparando os resultados numéricos com a solução manufaturada escolhida em um teste de refinamento de malhas, permitindo analisar se a ordem de precisão obtida coincide com a ordem de precisão teórica dos métodos numéricos empregados. É importante ressaltar que para se obter uma melhor análise, na convergência de malhas, é necessário se calcular o erro médio e o erro máximo, pois apenas o cálculo do erro médio pode não ser uma ferramenta eficiente para se estudar a ordem de precisão global de esquemas numéricos que possuem erro numérico dominado por alguma região da malha. O programa computacional foi desenvolvido em linguagem de programação Fortran e os gráficos foram

gerados em MATLAB¹ e Geogebra².

4.1 Teste de verificação usando diferenças finitas explícitas corrigidas de 2^a ordem de aproximação.

Para o teste foi escolhida a solução manufaturada no intervalo $[0, 2\pi]$, sendo o cálculo da derivada da função $\text{sen}(x)$ no domínio $[0, x_\alpha]$ e a função nula para $(x_\alpha, 2\pi]$. Aqui foi escolhida a singularidade no ponto $x_\alpha = 5.5$. Foi escolhida a função seno por ser de classe C^∞ e isso facilita na realização dos testes. O ponto $x = 5.5$ foi escolhido arbitrariamente no interior do domínio. O gráfico dessa função pode ser visto na figura 4.1.

Figura 4.1: Derivada da função $\text{sen}(x)$ com uma singularidade tipo salto em $x = 5.5$.



Fonte: Elaborada pelo pesquisador no Geogebra.

O teste de convergência de malhas (TCM) foi realizado com 10 níveis de refinamento com os seguintes números de pontos na discretização: 7; 13; 25; 49; 97; 193; 385; 769; 1537 e 3073. Essa escolha de malhas permitiu analisar o erro numérico dentro da faixa assintótica de convergência dos erros. Para que o erro numérico fosse dominado pelo

¹MATLAB é um software apropriado para desenvolvimento de aplicativos de natureza técnica.

²GeoGebra é um software de matemática dinâmica para todos os níveis de ensino.

erro de discretização, adotou-se aqui um erro de arredondamento de máquina pelo menos 1000 vezes menor. Isso foi feito utilizando dupla precisão nos cálculos. Os testes usando métodos de alta ordem requereram quádrupla precisão nos cálculos. O espaçamento entre pontos foi equidistante definido como $h = \frac{2\pi}{n-1}$, onde n representa o número de pontos na malha. Perceba que da primeira para a segunda malha o número de ponto foi dobrado e subtraído 1, e assim por diante até o último ponto, esse é o processo de subdividir a malha ou diminuir o espaçamento pela metade e foi a estratégia adotada aqui.

Tabela 4.1: Malhas usadas para o TCM

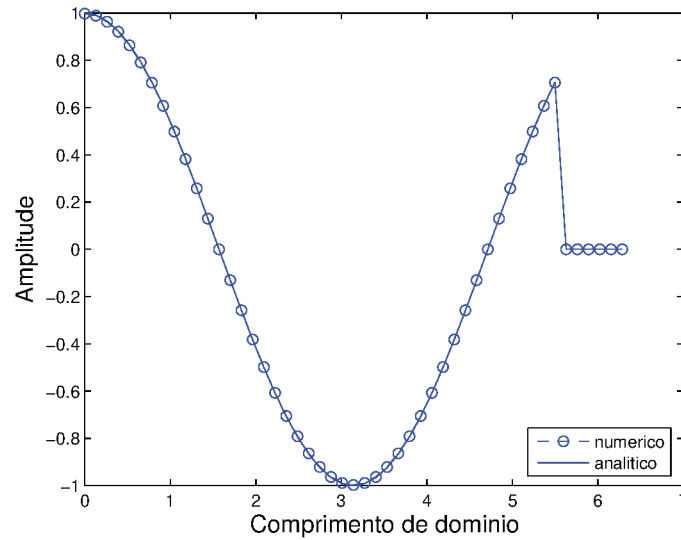
malhas	número de pontos (n)	espaçamento h com dupla precisão
1	7	1.0471975511965976
2	13	0.52359877559829882
3	25	0.26179938779914941
4	49	0.13089969389957470
5	97	$6.54498469497873520 \times 10^{-2}$
6	193	$3.27249234748936760 \times 10^{-2}$
7	385	$1.63624617374468380 \times 10^{-2}$
8	769	$8.18123086872341899 \times 10^{-3}$
9	1537	$4.09061543436170950 \times 10^{-3}$
10	3073	$2.04530771718085475 \times 10^{-3}$

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

A Figura 4.2 apresenta a solução manufaturada e numérica usando a malha computacional com 49 pontos. Em termos comparativos a visualização é satisfatória, inclusive na vizinhança da singularidade.

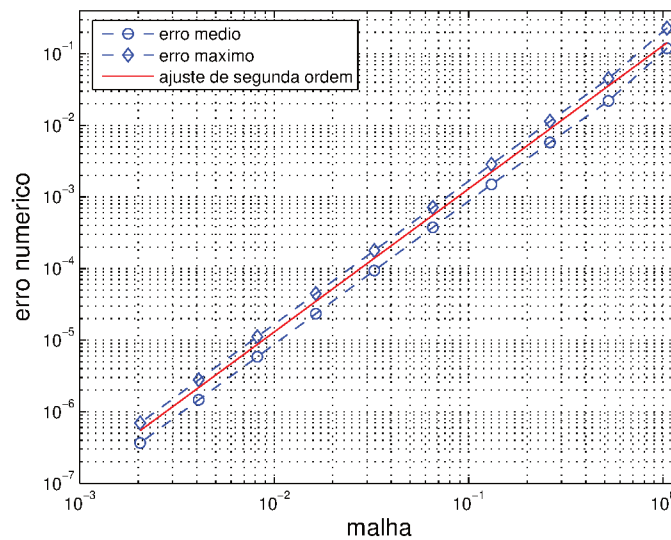
A Figura 4.3 apresenta teste de refinamento de malhas. A linha vermelha tem inclinação de 2^a ordem de precisão e serviu de referência para comparações com os resultados numéricos, representados pelos símbolos. No presente teste foi utilizada a escala logarítmica no gráfico, pois se trata de valores pequenos para serem observados em uma escala convencional. Note a convergência de 2^a ordem de precisão para ambos os cálculos de erros médio e máximo. O cálculo do erro médio e máximo foi utilizado para garantir que não há dominância do erro numérico em uma região da malha, como em ambos os

Figura 4.2: Comparação entre a solução numérica e manufaturada usando 49 pontos na malha.



Fonte: Lavércio, 2020.

Figura 4.3: Teste de convergência de malhas usando diferenças finitas corrigidas de 2ª ordem de precisão.



Fonte: Lavércio, 2020.

casos foi garantido uma convergência de 2ª ordem de precisão foi garantido a inexistência da dominância do erro numérico em todo domínio, mesmo na vizinhança da singularidade.

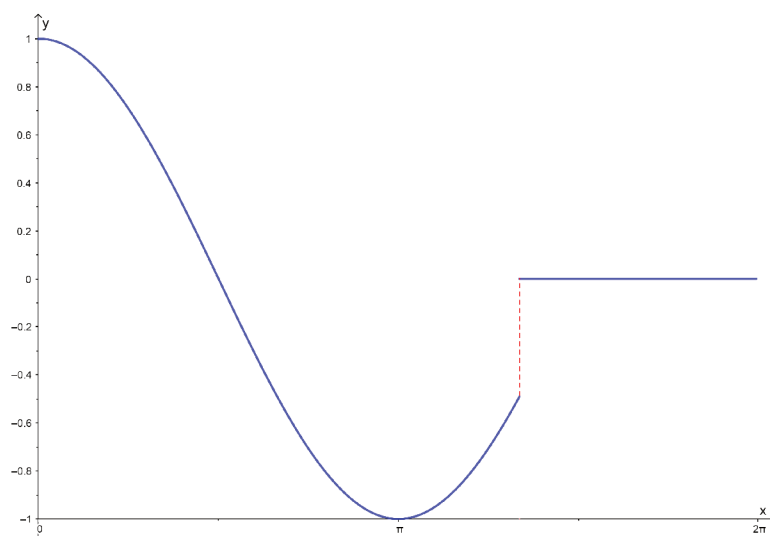
Geralmente a causa de erros dominantes vêm do uso de diferentes ordens de precisão em posições distintas do domínio. Foi possível perceber que o método realmente garantiu a precisão formal do esquema corrigido, mesmo nos pontos próximos à singularidade.

Por fim, pode se notar que os esquemas apresentados de diferenças finitas explícitas de 2ª ordem de precisão com correção dos pontos na vizinhança da singularidade conforme mostrado na sessão 3.2.1, garantem a ordem formal implementada para todo o domínio.

4.2 Teste de verificação usando diferenças finitas compacta corrigidas de 6ª ordem de aproximação.

Para esse teste foi escolhida a solução manufaturada no intervalo $[0, 2\pi]$, sendo o cálculo da derivada da função $\text{sen}(x)$ no domínio $[0, x_\alpha]$ e a função nula para o domínio $(x_\alpha, 2\pi]$. Aqui foi escolhida a singularidade no ponto $x_\alpha = 4.2$. Foi escolhida a função seno por ser de classe C^∞ e isso facilita na realização dos testes. O ponto $x = 4.2$ foi escolhido arbitrariamente no interior do domínio. O gráfico dessa função pode ser visto na figura 4.4.

Figura 4.4: Derivada da função $\text{sen}(x)$ com uma singularidade tipo salto em $x = 4.2$.



Fonte: Elaborada pelo pesquisador no Geogebra.

O teste de convergência de malhas (TCM) foi realizado com 10 níveis de refinamento com os seguintes números de pontos na discretização: 7; 13; 25; 49; 97; 193; 385; 769; 1537 e 3073. Essa escolha de malhas permitiu analisar o erro numérico dentro da faixa assintótica de convergência dos erros. Para que o erro numérico fosse dominado pelo erro de discretização, adotou-se aqui um erro de arredondamento de máquina pelo menos 1000 vezes menor. Isso foi feito utilizando quádrupla precisão nos cálculos. O espaçamento entre pontos foi equidistante definido como $h = \frac{2\pi}{n-1}$, onde n representa o número de pontos na malha. Perceba que da primeira para a segunda malha o número de ponto foi dobrado e subtraído 1, e assim por diante até o último ponto, esse é o processo de subdividir a malha ou diminuir o espaçamento pela metade e foi a estratégia adotada aqui.

Tabela 4.2: Malhas usadas para o TCM

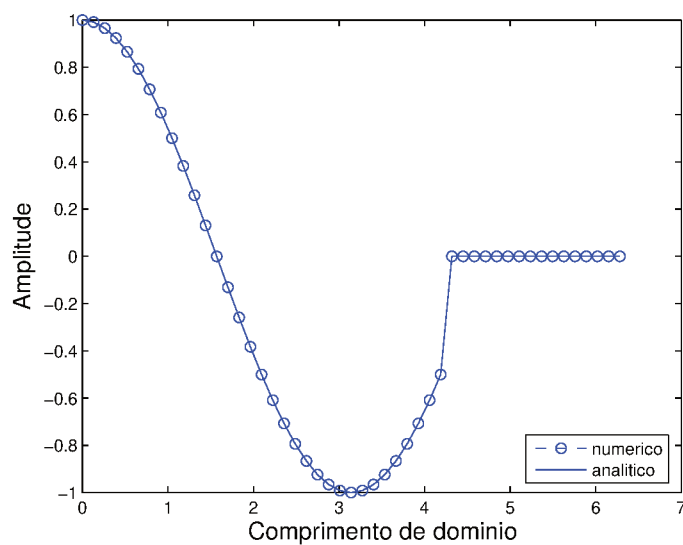
malhas	número de pontos (n)	espaçamento h com quádrupla precisão
1	7	1.04719755119659774...66
2	13	0.52359877559829887...32
3	25	0.26179938779914943...16
4	49	0.13089969389957471...58
5	97	6.54498469497873591...90 $\times 10^{-2}$
6	193	3.27249234748936795...95 $\times 10^{-2}$
7	385	1.63624617374468397...47 $\times 10^{-2}$
8	769	8.18123086872341989...37 $\times 10^{-3}$
9	1537	4.09061543436170994...18 $\times 10^{-3}$
10	3073	2.04530771718085497...09 $\times 10^{-3}$

Fonte: Elaborada pelo pesquisador.

A Figura 4.5 apresenta a solução manufaturada e numérica usando a malha computacional com 49 pontos. Em termos comparativos a visualização é satisfatória, inclusive na vizinhança da singularidade.

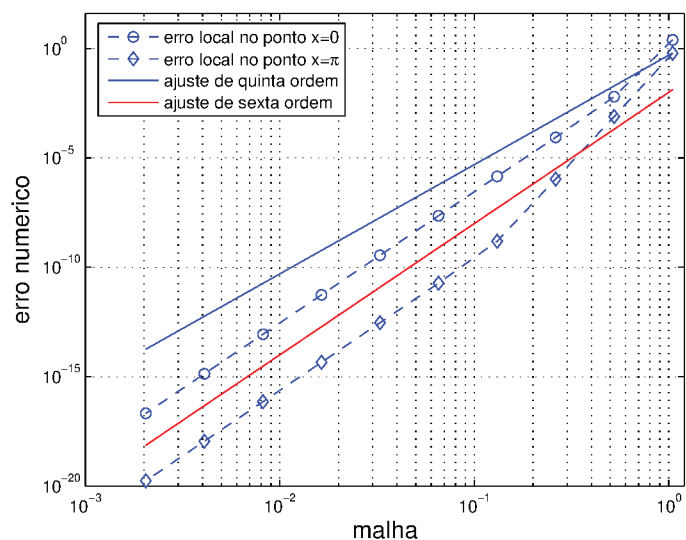
A Figura 4.6 apresenta teste de refinamento de malhas. As linhas vermelha e azul tem, respectivamente, inclinação de 6^a e 5^a ordem de precisão e serviram de referências para comparações com os resultados numéricos, representados pelos símbolos. No pre-

Figura 4.5: Comparação entre a solução numérica e manufaturada utilizando 49 pontos na malha.



Fonte: Elaborada pelo pesquisador no MATLAB.

Figura 4.6: Teste de convergência de malhas usando diferenças finitas corrigidas de 6ª ordem de precisão.



Fonte: Elaborado pelo pesquisador no MATLAB.

sente teste foi utilizada a escala logarítmica no gráfico, pois se trata de valores pequenos para serem observados em uma escala convencional. Note a convergência de 6ª ordem de

precisão para ambos os cálculos de erros nos pontos $x = 0$ e $x = \pi$, porém nos primeiros níveis de malhas apenas o erro no ponto $x = 0$ teve o ajuste de 6ª ordem de aproximação.

Por fim, pode se notar que os esquemas apresentados de diferenças finitas compactas de 6ª ordem de precisão com correção dos pontos da vizinhança da singularidade conforme mostrado na sessão 3.2.2, garantem a ordem formal implementada para todo o domínio.

Em ambos testes foi possível garantir apenas a inexistência de erros de programação para o lado esquerdo da correção, pois a escolha a função nula no lado direito do domínio da solução manufatura interfere nos resultados. Para conseguir verificar o código completamente pode-se utilizar a solução manufaturada sendo a derivada da função seno no domínio de $[0, x_\alpha)$ a função nula no domínio $[x_\alpha, x_\beta]$ e a derivada da função cosseno no domínio $(x_\beta, 2\pi]$.

CONSIDERAÇÕES

O método da fronteira imersa (MFI) e o método da interface imersa (MII) foram introduzidos ao longo do tempo como ferramentas de modelagem computacional de problemas de valor inicial e de contorno na simulação computacional de superfícies imersas em escoamentos. Os primeiros trabalhos em MFI remontam à década de 70 onde Peskin trabalhava o problema de escoamento de fluidos simulando a dinâmica do sangue em válvulas mitrais do coração em que a geometria da superfície imersa é determinada como parte da solução global (PESKIN, 1972 e 1977). Com métodos matemáticos pouco sofisticados quando comparados com os de hoje, esses trabalhos foram um grande salto para a ciência, pois permitiram aprimorar a técnica. Desde então, com o avanço da tecnologia vieram muitos outros métodos e também outras aplicações pertinentes da natureza. Mais recentemente a aplicação de métodos para cálculos com superfícies imersas na área de transição laminar turbulento de escoamentos, escoamentos em aerofólios e estudos de camada limite foram realizados (Linnick e Fasel 2005, Hosseinverdi e Fasel 2018). Para esses estudos os métodos de alta ordem de precisão foram utilizados porque o problema de simulações numéricas em transição e turbulência necessita captar pequenas escalas de magnitude e com excelente precisão. Segundo Linnick e Fasel (2005), os métodos da fronteira imersa (MFI) não apresentam boa performance, uma vez que são métodos de baixa ordem e são dispersivos e apresentam perda de precisão na fronteira. Nesse contexto o método da interface imersa (MII), que usa as correções das diferenças finitas compactas para cálculos na vizinhança da superfície imersa modelada como singularidades salto. Esse método é uma interessante proposta e incentivou a realização desse trabalho.

A proposta desse trabalho foi aplicar um teste de verificação de código usando o método das soluções manufaturadas (MMS) em uma função diferenciável em uma variável e que apresenta uma singularidade salto em seu domínio. Dessa forma a modelagem é bastante simplificada e somente cálculos diretos de derivada usando diferenças finitas compactas de mais alta ordem foram testadas. Teste de verificação com MMS envolve inserir um termo fonte nas equações modelo do problema em estudo, modificando-o de forma a passar a ter solução analítica. Esse é um problema matemático sem significado físico, mas robusto para análise de erros de programação. Todas as rotinas do código podem ser testadas em um mesmo nível de exigência. Testes de refinamento de malhas são aplicados e a ordem de precisão dos cálculos comparados com a ordem formal dos métodos empregados. Silva (2008), descreve com detalhes esse método quando aplicado em um código para simulação da evolução de ondas Tolmien Schillitching em escoamento de Poiseuille. Os trabalhos de Hosseinverdi e Fasel (2018) e Linnick e Fasel (2005) apresentam testes de verificação de código utilizando o método de soluções manufaturadas (MSM), imitando problemas bi e tri dimensionais na área da transição, simulando de fato o método da interface imersa. Os autores verificaram que a ordem de precisão dos cálculos da fronteira se preserva. Problemas físicos descritos pela teoria também foram testados.

No presente trabalho os testes foram realizados separadamente em dois momentos: primeiro testou-se as diferenças finitas explícitas de 2ª ordem de precisão; em seguida testou-se as diferenças finitas compactas de 6ª ordem de precisão para cálculo de derivada da função $sen(x)$ com uma singularidade do tipo salto. Os resultados mostraram que a ordem de precisão almejada na aplicação do método se manteve para ambos os testes.

Este projeto gerou um material científico didático para consultas em português do Brasil (pt-BR), tendo em vista que até o momento da defesa desse TCC não há muito material nessa língua sobre alguns assuntos abordados nesse trabalho. Além disso o projeto proporcionou ao pesquisador uma oportunidade de estudar conteúdos não vistos na graduação, ampliando as possibilidades de escolha de áreas para a Pós-Graduação.

Para projetos futuros pode-se, por exemplo, realizar cálculos de mais de uma derivada do tipo salto em funções unidimensionais, realizar testes para o método apresentado em problemas bidimensionais e tridimensionais, aplicar o método da interface imersa em problemas físicos, tal como a equação do calor, o problema de cavidade ou a equação de Burgers.

BIBLIOGRAFIA

- [1] BARROSO, L., et al. **Cálculo Numérico com Aplicações**. 2.ed. São Paulo: Prentice-Hall Brasil, 2006.
- [2] DORICIO, J. L. **Estudo da Aplicabilidade do Método de Fronteira Imersa no Cálculo das Derivadas Aerodinâmicas não estacionárias para Análise de Flutter com as Equações de Euler para Fluxo Compressível**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo, 2009.
- [3] FRANCO, N. B. **Cálculo Numérico**. São Paulo: Pearson Education, 2006.
- [4] HOSSEINVERDI, S.; FASEL H. F. An efficient, high-order method for solving Poisson equation for immersed boundaries: Combination of compact difference and multiscale multigrid methods. **Journal of Computational Physics**, v. 374, p. 912-940, 2018.
- [5] LAVÉRCIO, W. C.; SILVA, H. G. Verificação de código para cálculo de derivada de funções com singularidades tipo salto. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics** v. 7, n. 1, 2020. Disponível em: <https://proceedings.sbmac.emnuvens.com.br/sbmac/article/view/3018>. Acesso em: 01/04/2021.
- [6] LELE, S. K. Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution. **Journal of Computational Physics**, v. 103, p. 16-42, 1992.

- [7] LEVEQUE, S. K.; LI, Z. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 31, p. 1019-1044, 1994.
- [8] LIMA, E. L. **Análise Real Volume I: Funções de uma variável**. 8.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2006.
- [9] LINNICK, N. M.; FASEL H. F. A high-order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains. **Journal of Computational Physics**, v. 204, p. 157-192, 2005.
- [10] SILVA, H. G. **Regime Não-Linear de Trens de Ondas Modulados na Direção Transversal em um Escoamento de Poiseuille Plano**. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Escola de Engenharia de São Carlos. Universidade de São Paulo, 2008.
- [11] SILVA, H. G.; SOUZA, L. F. ; MEDEIROS, M. A. F. Verification of a mixed high-order accurate DNS code for laminar turbulent transition by the method of manufactured solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**., v. 64, p. 336-354, 2010.
- [12] PESKIN, C. S. Flow patterns around heart valves: a numerical method. **Journal of Computational Physics**, v. 10, p. 252–271, 1972.
- [13] PESKIN, C. S. Numerical analysis of blood flow in the heart. **Journal of Computational Physics**, v. 25, p. 220–252, 1977.
- [14] ROACHE, P. J. Verification of codes and calculations. **AIAA Journal**, v. 36, p. 696-702, 1998.
- [15] RUGGIERO, M. A.; LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais**. 2. ed. São Paulo: Makron Books, 1996.
- [16] STEINBERG, S; ROACHE, P. J. Symbolic manipulation and computational fluid dynamics. **AIAA Journal**, v. 22, p. 1390-1394, 1984.
- [17] WIEGMANN, A.; BUDE, K. The explicit-jump immersed interface method: finite difference methods for pdes with piecewise smooth solutions. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 37, p. 827-862, 2000.