Análise de erros em malhas arbitrárias de métodos discretos para problemas de contorno

Greice da Silva Lorenzzetti
Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
91509-900, Porto Alegre, RS
E-mail: greice.lorenzzetti@mat.ufrgs.br,

Janaína Pires Zingano, Paulo R. Zingano
Departamento de Matemática Pura e Aplicada
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
91509-900, Porto Alegre, RS
E-mail: jzingano@mat.ufrgs.br.

1. Introdução

Neste trabalho, discutimos novas técnicas de análise recentemente introduzidas [7], [8] para a estimativa de erros de métodos discretos (particularmente diferenças finitas) para problemas de contorno em *malhas gerais*, onde os métodos de análise clássicos (e.g., princípios de máximo, teoria de M-matrizes, Perron-Fröbenius, estimativas sobre autovalores, operadores de Green discretos, etc.) são deficientes [1], [3], [5], [6]. É conveniente revisar sucintamente tais procedimentos clássicos, tendo como problema-alvo a equação elíptica (linear)

$$-\operatorname{div}(A(\boldsymbol{x})\,\nabla u) \,+\, q(\boldsymbol{x})u(\boldsymbol{x}) \,=\, f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x}\in\Omega \tag{1}$$

onde $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, $n = 2$ ou 3, é uma região limitada, A é matriz real simétrica positiva definida, e $q \in C^0(\Omega)$ é não negativa,[1] com condições de Dirichlet, Neumann ou Robin (ou combinações destas) na fronteira $\partial\Omega$ da região. Discretizado, o problema é substituído (i.e., aproximado) por um problema discreto correspondente,

$$-\mathcal{D}(A^h\,\mathcal{G}v^h) \,+\, q^h v^h \,=\, f^h, \qquad v^h \in \mathcal{S}^h \tag{2}$$

onde A^h, q^h, f^h são projeções (aproximações) apropriadas das funções A, q, f sobre espaços de funções discretas correspondentes a pontos da malha ($\mathcal{S}^h$ sendo um destes espaços, de "funções escalares"), $\mathcal{D}$ ("divergente discreto") e $\mathcal{G}$ ("gradiente discreto") são operadores de diferenças correspondentes aos operadores divergente e gradiente em (1), e v^h é a aproximação obtida para a solução u (ou, mais precisamente, para uma certa projeção u^h de u sobre a malha). Matematicamente, (2) é nada mais que um sistema de equações lineares algébricas, trivialmente resolvível em comparação com o problema original. De interesse fundamental aqui são os erros cometidos, e^h ("erro de solução") e E^h ("erro de gradiente"), definidos por

$$e^h := v^h - u^h, \qquad E^h := \mathcal{G}v^h - (\nabla u)^h \tag{3}$$

que podem ser obtidos do seguinte modo: substituindo v^h por u^h em (2), resulta

$$-\mathcal{D}(A^h\,\mathcal{G}u^h) \,+\, q^h u^h \,=\, f^h \,+\, \tau^h \tag{4}$$

para certo resíduo τ^h ("erro de truncamento"), e subtraindo (4) de (2),

$$-\mathcal{D}(A^h\,\mathcal{G}e^h) \,+\, q^h e^h \,=\, -\,\tau^h \tag{5}$$

ou seja, $\mathbb{L}^h e^h = -\tau^h$, para um dado operador linear $\mathbb{L}^h$. Resolvendo (5), obtém-se

$$e^h \,=\, -\,\mathbb{G}^h \tau^h \tag{6}$$

onde $\mathbb{G}^h = (\,\mathbb{L}^h)^{-1}$ é operador de Green (discreto) correspondente ao esquema discreto utilizado. O procedimento clássico pode agora ser

[1] Mais geralmente, pode-se ter $q(\boldsymbol{x}) > -\lambda_1$ em Ω, sendo λ_1 o menor autovalor positivo do operador $-\operatorname{div}(A\,\nabla)$ em Ω, sob as condições de contorno (homogêneas) consideradas.

descrito do seguinte modo: de (6), obtém-se $|\, e^h |_h \,\leq\, \|\, \mathbb{G}^h \|_h \,|\, \tau^h |_h$ para certa norma $|\cdot|_h$ em $\mathcal{S}^h$, e a norma de operador $\|\cdot\|_h$ correspondente; assim, tendo-se $|\, \tau^h \,|_h \to 0$ ("consistência") ao $h \to 0$ (i.e., ao se refinar indefinidamente a malha), e existindo $\mathsf{E} > 0$ constante (independente de h, i.e., da malha) tal que $\|\, \mathbb{G}^h \,\|_h \,\leq\, \mathsf{E}$ para todo h ("estabilidade"),[2] resulta claramente $|\, e^h \,|_h \to 0$ ("convergência"), estabelecendo-se assim que, para o problema (1) acima, consistência e estabilidade de (2) garantem convergência. Além disso, o mesmo argumento mostra que, para um esquema estável,[3]

$$\tau^h \,=\, O(\, h^p \,) \quad \Longrightarrow \quad e^h \,=\, O(\, h^p \,) \qquad (7)$$

ou seja, e^h tem, no mínimo, a ordem de τ^h. Neste resultado residem ao mesmo tempo o poder e deficiência das técnicas clássicas de análise: em vários casos (especialmente quando se usam malhas uniformes ou suaves), e^h tem a mesma ordem de τ^h e a análise acima fornece um procedimento simples capaz de identificar corretamente comportamento do erro e^h. Em outros casos, porém, particularmente quando malhas não suaves são empregadas, tem-se e^h com ordem superior[4] a τ^h, fenômeno referido na literatura como *supraconvergência*[5] Mais ainda, problemas de contorno são diferentes de problemas evolutivos em que, para os primeiros, *consistência não é condição necessária para convergência*, ou sequer para estabilidade! Com efeito, *métodos de operadores de suporte*, ou *miméticos*, desenvolvidos recentemente por pesquisadores no LANL (Los Alamos National Laboratory, em Los Alamos, USA), são notoriamente *inconsistentes* (mesmo em malhas uniformes!), e ainda assim convergem, tendo mostrado excelente desempenho em problemas pouco regulares (i.e., coeficientes ou malhas de baixa regularidade) de tipo elíptico ou parabólico [2], [3]. Alternativas encontradas na literatura para análise mais fina de convergência nestes casos examinam em maior detalhe o operador de Green definido em (6) acima [5], estimando cuidadosamente seus elementos e derivadas discretas — um procedimento laborioso que facilmente se torna inviável, particularmente em esquemas com mais de uma ordem de supraconvergência. (Para métodos miméticos em malhas pouco regulares, por exemplo, pode mesmo ocorrer $\tau^h \to \infty$ ao $h \to 0$!)

Recentemente [7], [8], foram desenvolvidas novas técnicas de análise de convergência no caso de problemas (1) em *uma* variável (Sturm-Liouville), com resultados animadores: com esforço relativamente pequeno, é possível descrever muito detalhadamente o comportamento dos erros e^h, E^h para esquemas diversos em malhas *arbitrárias*.[6] A extensão destas técnicas para problemas multidimensionais, caso se mostre possível, representaria um dos mais importantes avanços na análise numérica de problemas de contorno.

2. Problemas de Sturm-Liouville

Para ilustrar as técnicas introduzidas em [7], [8], vamos considerar o caso particularmente simples dado por esquemas de três pontos para o problema (regular) de Sturm-Liouville num intervalo compacto $[\, a, b\,]$ dado por

$$-\,\frac{d}{dx}\left(K(x)\,\frac{du}{dx} \right) \,+\, q(x)\, u(x) \,=\, f(x), \quad \text{(8a)}$$

$$u(a) = \alpha, \qquad u(b) = \beta, \qquad \text{(8b)}$$

onde $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ são valores dados, assim como as funções (suaves) K, q, f, e onde supomos também $K > 0$ e $q \geq 0$ em $[\, a, b\,]$.[7] Podem-se considerar igualmente condições de contorno mais gerais (inclusive não separadas ou mesmo

[2] Mais precisamente, basta que se tenha $\|\, \mathbb{G}^h \|_h \leq \mathsf{E}$ para todo h suficientemente pequeno, ou seja, para toda malha suficientemente fina.

[3] Utilizando a teoria de M-matrizes e princípios de máximo, é mostrado em [7] que, em 1-D, *todo esquema consistente é necessariamente estável*, de modo que neste caso não seria preciso supor estabilidade na implicação indicada em (7), como feito aqui.

[4] Também em malhas *suaves* ou mesmo *uniformes* este efeito pode ocorrer [7], [8].

[5] Na literatura de elementos finitos, usa-se o termo *superconvergência* para denotar a ocorrência de erros de ordem superior em determinados nodos ou regiões da malha, em comparação com os demais pontos; *supraconvergência* e *superconvergência* são conceitos distintos, mas relacionados entre si [4].

[6] Estas técnicas dependem de se conseguir estimar suficientemente bem o erro E^h, o que requer menos conhecimento sobre o operador $\mathbb{G}^h$ se comparado com os métodos clássicos referidos acima para a análise de e^h.

[7] Mais geralmente, segue de [7] que é suficiente ter q satisfazendo $q(x) > -\left((\, b - a\,) \int_a^b \frac{1}{K(t)}\, dt \right)^{-1}$ em $[\, a, b\,]$.

não locais[8]), mas para manter a descrição simples vamos aqui adotar o problema de Dirichlet (8) acima. Exemplos de esquemas numéricos naturais incluem o método de diferenças finitas

$$-\frac{K_{i-1/2}}{L_{i-1/2}}\,v_{i-1} + \Big(\frac{K_{i-1/2}}{L_{i-1/2}} + \frac{K_{i+1/2}}{L_{i+1/2}} + q_i h_i\Big)v_i - \frac{K_{i+1/2}}{L_{i+1/2}}\,v_{i+1} = h_i f_i, \qquad 1 \le i \le N-1, \tag{9a}$$

com $v_0 = \alpha$, $v_N = \beta$, onde $a = x_0 < x_1 < ... < x_{N-1} < x_N = b$ são os nodos da malha, $L_{i-1/2} = x_i - x_{i-1}$ é o comprimento da célula i, com centro $x_{i-1/2} = (x_i - x_{i-1})/2$, $h_i = (x_{i+1} - x_{i-1})/2$, e q_i, $K_{i-1/2}$, etc., denotam os valores de q, K, etc., nos pontos x_i, $x_{i-1/2}$, etc. (Mostra-se conveniente aqui denotarmos $x_{-1/2} \equiv x_0$, $L_{-1/2} \equiv 0$, $x_{N+1/2} \equiv x_N$, $L_{N+1/2} \equiv 0$.)[9] Alternativamente, $K_{i-1/2}$ poderia denotar o valor médio de K na i-ésima célula, $K_{i-1/2} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} K(t)\,dt\,/\,L_{i-1/2}$, ou outro valor de malha que se deseje adotar, o mesmo valendo para as demais projeções q_i, f_i, etc. Em termos de (2), o esquema (9a) corresponde aos operadores

$$(\mathcal{D}\,w)_i = \frac{w_{i+1/2} - w_{i-1/2}}{h_i}, \quad 1 \le i \le N-1, \tag{9b}$$

$$(\mathcal{G}\,z)_{i-1/2} = \frac{z_i - z_{i-1}}{L_{i-1/2}}, \quad 1 \le i \le N. \tag{9c}$$

Outro esquema natural (associado a "discretizações C-N," cf. [3], [6]) é o método mimético

$$-\frac{K_{i-1}}{h_{i-1}}\,v_{i-3/2} + \Big(\frac{K_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{K_i}{h_i} + q_{i-1/2}L_{i-1/2}\Big)v_{i-1/2} - \frac{K_i}{h_i}\,v_{i+1/2} = L_{i-1/2}f_{i-1/2}, \qquad 1 \le i \le N, \tag{10a}$$

correspondente à escolha de operadores $\mathcal{D}$, $\mathcal{G}$ dada por

$$(\mathcal{D}\,w)_{i-1/2} = \frac{w_i - w_{i-1}}{L_{i-1/2}}, \quad 1 \le i \le N, \tag{10b}$$

$$(\mathcal{G}\,z)_i = \frac{z_{i+1/2} - z_{i-1/1}}{h_i}, \quad 0 \le i \le N, \tag{10c}$$

cuja análise de convergência é seriamente dificultada pelo fato de ser um esquema *inconsistente* com (8), particularmente em malhas não suaves, com erro de truncamento τ^h dado por

$$\begin{aligned}\tau_{i-1/2} = {} & K_{i-1/2}\,u''_{i-1/2}\Big(1 - \frac{h_i + h_{i-1}}{2\,L_{i-1/2}}\Big) + \\ & -\frac{1}{6}\,K_{i-1/2}\,u'''_{i-1/2}\,\frac{h_i^2 - h_{i-1}^2}{L_{i-1/2}} \\ & -\frac{1}{4}\,K'_{i-1/2}\,u''_{i-1/2}\,(h_i - h_{i-1}) \\ & + O(L_{i-3/2}^2) + O(L_{i-1/2}^2) + O(L_{i+1/2}^2)\end{aligned} \tag{10d}$$

para $1 \le i \le N$, onde $u'_{i-1/2} = u'(x_{i-1/2})$, etc.

3. Análise de erros

Nesta seção, vamos examinar os erros e^h, E^h no caso dos métodos (9), (10) acima, seguindo [7], [8]. Começando por (10), e assumindo momentaneamente $q = 0$, observamos que

$$K_i(\mathcal{G}e^h)_i = K_N(\mathcal{G}e^h)_N - \sum_{j=i+1}^{N} L_{j-1/2}\,\tau_{j-1/2} \tag{11}$$

para $0 \le i \le N$. Como

$$\begin{aligned}\sum_{j=i+1}^{N} K_{j-1/2}\,u''_{j-1/2}\Big(L_{j-1/2} - \frac{h_{j-1} + h_j}{2}\Big) = {} \\ = \frac{1}{4}\,K_N\,u''_N\,L_{N-1/2} + \frac{1}{4}\,K_i\,u''_i\,(L_{i+1/2} - L_{i-1/2}) \\ - \frac{1}{8}\big(K'_i u''_i + K_i u'''_i\big)\,L_{i-1/2}\,L_{i+1/2} + O(\hbar^2),\end{aligned} \tag{12a}$$

$$\begin{aligned}\sum_{j=i+1}^{N} K'_{j-1/2}\,u''_{j-1/2}\,L_{j-1/2}\,(h_j - h_{j-1}) = {} \\ = -\frac{1}{2}\,K'_i\,u''_i + L_{i-1/2}\,L_{i+1/2} + O(\hbar^2),\end{aligned} \tag{12b}$$

$$\begin{aligned}\sum_{j=i+1}^{N} K_{j-1/2}\,u'''_{j-1/2}\,(h_j^2 - h_{j-1}^2) = {} \\ = \frac{1}{4}\,K_{N-1/2}\,u'''_{N-1/2}\,L_{N-1/2}^2 - K_i\,u'''_i\,h_i^2 \\ + O(\hbar^2),\end{aligned} \tag{12c}$$

onde $\hbar$ é a medida de espaçamento de malha definida por

---

[8] É preciso supor apenas que as condições de contorno dadas garantam solução *única* para o problema (8), ou, equivalentemente, que a função de Green exista.

[9] A notação usada aqui é a mesma de [3], [6].

$$\hbar \;=\; \sqrt{\;\sum_{j=1}^{N} L_{j-1/2}^{3}\;}\;, \qquad (13)$$

resulta

$$\sum_{j==i+1}^{N} L_{j-1/2}\,\tau_{j-1/2} \;=\; \frac{1}{4}\,K_N\,u''_N\,L_{N-1/2} \;+$$
$$-\;\frac{1}{24}\,K_N\,u'''_N\,L_{N-1/2}^2 \;-\; \frac{1}{8}\,K_i\,u'''_i\,L_{i-1/2}\,L_{i+1/2}$$
$$+\;\frac{1}{4}\,K_i\,u''_i\,(\,L_{i+1/2}-L_{i-1/2})\;+\;\frac{1}{6}\,K_i\,u'''_i\,h_i^2$$
$$+\;O(\hbar^2). \qquad (14)$$

Resolvendo (5) para e_{N-1} somente, obtém-se

$$e_{N-1/2} \;=\; -\,\frac{1}{4}\,u''_N\,L_{N-1/2}\,h_N \;+$$
$$+\;\frac{1}{24}\,u'''_N\,L_{N-1/2}^2 h_N \;+\; h_N\,O(\hbar^2), \qquad (15)$$

de modo que, pela definição de $(\,\mathcal{G}e^h)_N$,

$$(\,\mathcal{G}e^h)_N \;=\; \frac{1}{4}\,u''_N\,L_{N-1/2} \;-\; \frac{1}{24}\,u'''_N\,L_{N-1/2}^2$$
$$+\;O(\hbar^2). \qquad (16)$$

Por (11), (14) e (16) acima, resulta imediatamente

$$(\,\mathcal{G}e^h)_i \;=\; -\,\frac{1}{4}\,u''_i\,(\,L_{i+1/2}-L_{i-1/2}\,)\;+$$
$$-\;\frac{1}{24}\,u'''_i\,(\,L_{i-1/2}^2 - L_{i-1/2}L_{i+1/2} + L_{i+1/2}^2\,)$$
$$+\;O(\hbar^2). \qquad (17)$$

Como, de (3), tem-se

$$E_i \;=\; (\,\mathcal{G}e^h)_i \;+\; \frac{u_{i+1/2}-u_{i-1/2}}{h_i} \;-\; u'_i, \qquad (18)$$

obtemos, para o erro de gradiente,

$$\boxed{\;E_i \;=\; O(\hbar^2), \qquad 0 \,\le\, i \,\le\, N.\;} \qquad (19a)$$

Este resultado pode ser usado para estimar o erro de aproximação e^h: com efeito, pelo método de quadratura por trapézios, obtemos

$$e_{i-1/2} \;=\; -\,\frac{1}{8}\,u''_{i-1/2}\,L_{i-1/2}^2 + \sum_{j=0}^{i-1} h_j\,E_j + O(\hbar^2)$$

e então, de (19a),

$$\boxed{\;e_{i-1/2} \;=\; -\,\frac{1}{8}\,u''_{i-1/2}\,L_{i-1/2}^2 \;+\; O(\hbar^2)\;} \qquad (19b)$$

para todo $1 \le i \le N$. Experimentalmente [7], observa-se que as estimativas (19), (20) para os erros e^h, E^h são *optimais*, retratando detalhadamente o comportamento exato observado em malhas arbitrárias, com qualquer grau de regularidade.

De modo análogo, obtém-se que, para o esquema dado em (9) acima,

$$\boxed{\;e_i \;=\; O(\hbar^2), \qquad 1 \,\le\, i \,\le\, N-1\;} \qquad (20a)$$

para o erro $e^h = v^h - u^h$, enquanto

$$\boxed{\;E_{i-1/2} \;=\; \frac{1}{2}\,w_{i-1/2}\,L_{i-1/2}^2 \;+\; O(\hbar^2)\;} \qquad (20b)$$

para o erro de gradiente, $1 \le i \le N$, onde $w_{i-1/2} = w(x_{i-1/2})$ com w dada por

$$w(x) \;=\; \frac{1}{2}\,K'(x)\,u''(x) \;+\; \frac{1}{3}\,K(x)\,u'''(x)$$
$$+\;\frac{1}{4}\,K''(x)\,u'(x). \qquad (20c)$$

Em particular, nota-se que, para o esquema (9), e^h é globalmente distribuído ao longo da malha,[10] ao passo que (10) exibe este comportamento para E^h, sendo assim mais conveniente no caso de computação de fluxos (i.e., $u'(x)$). Do mesmo modo, outros métodos discretos podem ser analisados, uma vez identificados os operadores $\mathcal{D}$, $\mathcal{G}$ em (2).

4. Aplicações à supraconvergência

Como os erros e^h, E^h são obtidos pontualmente em suficiente detalhe, pode-se usar os procedimentos acima para examinar efeitos de supraconvergência de métodos discretos em malhas não suaves. Em particular, resulta de (19), (20) que ambos os esquemas (9), (10) são supraconvergentes, uma propriedade comum a

[10] O mesmo comportamento pode ser mostrado para o método de elementos finitos com elementos lineares (i.e., triangulares) [7]

todos os métodos de segunda ordem habituais! Que exemplos de esquemas de segunda ordem (em malhas uniformes) *não* exibem supraconvergência?[11] Resulta da análise acima que tais exemplos podem ser facilmente construídos, sendo apenas necessário que se modifique convenientemente os métodos usuais: este seria o caso de (9) se tivesse sido posto na forma

$$-\frac{K_{i-1/2}}{L_{i-1/2}}\,v_{i-1} + \Big(\frac{K_{i-1/2}}{L_{i-1/2}} + \frac{K_{i+1/2}}{L_{i+1/2}} + q_i h_i\Big)v_i$$

$$-\frac{K_{i+1/2}}{L_{i+1/2}}\,v_{i+1} = h_i\tilde{f}_i, \qquad 1 \le i \le N-1, \tag{21}$$

onde $\tilde{f}_i = f_{i-1}$ se i for ímpar, e $\tilde{f}_i = f_{i+1}$ se i for par; uma definição não determinística seria tomar $\tilde{f}_i = f(\xi_i)$ com $\xi_i \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ sorteado aleatoriamente segundo distribuição uniforme. Analogamente, as fórmulas (10) podem ser similarmente modificadas de modo a produzir esquemas não supraconvergentes, que podem ser analisados pelos mesmos procedimentos já descritos. Mais ainda, estas técnicas podem ser utilizadas para examinar em detalhe efeitos de supraconvergência em métodos de ordem superior, em muitos casos observados apenas experimentalmente na literatura.

5. Outras aplicações

Além dos problemas considerados acima, é útil observar que as técnicas de análise desenvolvidas no contexto de problemas de contorno em malhas arbitrárias podem ser modificadas para examinar erros em procedimentos numéricos similares como *métodos de diferenciação compacta* ou *aproximação por splines* em malhas gerais — um problema de interesse visto que as estimativas conhecidas presentemente tendem a superestimar a magnitude dos erros em tais malhas. Ou podem ser estendidas de modo a fornecer resultados sobre os erros de aproximação no caso de problemas de Sturm-Liouville *singulares*,[12] além de outras possibilidades.

[11] Esta questão é sugerida em [4], onde exemplos de ordem superior são construídos.

[12] Neste caso, os erros e^h, E^h devem ser redefinidos levando em conta a função K, que se anula em a ou b.

Referências

[1] B. Heinrich, "Finite difference methods on irregular networks," Birkhäuser, Berlin, 1987.

[2] J. M. Hyman, M. Shashkov and S. L. Steinberg, The numerical solution of diffusion problems in strongly heterogeneous non-isotropic materials, *J. Comput. Phys.*, 132 (1997), 130 – 148.

[3] J. M. Hyman and S. L. Steinberg, The convergence of mimetic discretizations for rough grids, *Comput. Math. Appl.*, 47 (2004), 1565 – 1610.

[4] H. O. Kreiss, T. A. Manteuffel, B. Swartz, B. Wendroff and A. B. White, Jr., Supraconvergent schemes on irregular grids, *Math. Comp.*, 47 (1986), 537 – 554.

[5] A. A. Samarskii, "The Theory of Difference Schemes," Marcel Dekker, New York, 2001.

[6] M. Shashkov, "Conservative finite-difference methods on general grids," CRC Press, Boca Raton, 1996.

[7] S. L. Steinberg, J. P. Zingano and P. R. Zingano, Error analysis of discrete methods on general grids, submitted (*SIAM J. Numer. Anal.*).

[8] J. P. Zingano, Convergence of mimetic methods for Sturm-Liouville problems on general grids, *Ph.D. Thesis*, University of New Mexico, NM, 2003.