Método de Diferenças Finitas com Mínimos Quadrados Ponderados

Manoel da Rosa Paiva Filho Elisângela Pinto Francisquetti
Instituto de Matemática, PPGMAp, UFRGS
Av. Bento Gonçalves, 9500 - Prédio 43111 - Agronomia
91509-900 Porto Alegre - RS
E-mail: manoelpaivafilho@gmail.com, elisfrancis@gmail.com

Dagoberto Adriano Rizzotto Justo
E-mail: dago@mat.ufrgs.br

RESUMO

Nos últimos anos, uma classe de métodos numéricos conhecidos como métodos livres de malha [1] tem sido muito estudada no campo da dinâmica de fluido computacional, por conter métodos que não requerem a construção da malha tradicional para a formulação numérica. Uma de suas principais vantagens está na falta de conectividade entre os nós ou pontos da malha, já que exige apenas a geração de nós e não há relação entre eles, além de serem mais eficientes para representar fronteiras com geometrias complexas. Nosso objetivo é utilizar o método de diferenças finitas baseado em mínimos quadrados ponderados [1] em esquemas livres de malha para futuramente simular o movimento eletroforético [3], onde macromoléculas carregadas, como por exemplo fragmentos de DNA, são imersas numa solução eletrolítica que começam a se mover assim que um campo elétrico externo é ligado. Tal método será utilizado para definir o contorno das macromoléculas.

Usando expansão em série de Taylor, em duas variáveis, podemos determinar a derivada de uma função bidimensional $f(\vec{x})$ onde $\vec{x} = (x, y)$ e o valor da derivada da função no ponto $\vec{x_0}$ (denominado nó de referência) é encontrado usando os nós vizinhos (denominados nós suporte) desse nó $\vec{x}_i = \vec{x}_0 - \Delta\vec{x}_i$, $(i = 1, \ldots, n)$, onde $f(\vec{x}_i) = f_i$ é conhecida. Desta forma obtemos o sistema de equações:

$$\begin{aligned} f(\vec{x}_i) - f(\vec{x}_0) &= \Delta x_i \partial_x f|_{\vec{x}_0} + \Delta y_i \partial_y f|_{\vec{x}_0} + \frac{\Delta x_i^2}{2}\partial_x^2 f|_{\vec{x}_0} + \frac{\Delta y_i^2}{2}\partial_y^2 f|_{\vec{x}_0} \\ &+ (\Delta x_i)(\Delta y_i)\partial_x\partial_y f|_{\vec{x}_0} + \frac{\Delta x_i^3}{6}\partial_x^3 f|_{\vec{x}_0} + \frac{\Delta y_i^3}{6}\partial_y^3 f|_{\vec{x}_0} \\ &+ \frac{\Delta x_i^2 \Delta y_i}{2}\partial_x^2\partial_y f|_{\vec{x}_0} + \frac{\Delta x_i \Delta y_i^2}{2}\partial_x\partial_y^2 f|_{\vec{x}_0} + \mathcal{O}(|\Delta\vec{x}_i|^4) \end{aligned} \tag{1}$$

onde ∂_x e ∂_y denotam as derivadas parciais com relação às variáveis x e y respectivamente e $\Delta x_i = |x_0 - x_i|$ e $\Delta y_i = |y_0 - y_i|$ onde i=1,...,n.

Suponha que (1) é truncada nos termos de derivadas de terceira ordem, então existirão 9 derivadas desconhecidas. Aplicando a equação (1) nos n nós da vizinhança de x_0 obtemos o seguinte sistema linear, que relaciona as derivadas $\partial\mathbf{f}_{9\times1} = (\partial_x, \partial_y, \partial_x^2, \partial_x\partial_y, \ldots, \partial_y^3)^T f|_{\vec{x_0}}$ de f em x_0 para os valores funcionais de f em x_0 nos n nós suporte:

$$\Delta\mathbf{f}_{n\times1} = [S]_{n\times9}\partial\mathbf{f}_{9\times1} \tag{2}$$

onde $\Delta\mathbf{f}_{n\times1} = (f_1 - f_0, f_2 - f_0, \ldots, f_n - f_0)^T$, e

$$[S]_{n\times9} = \begin{bmatrix} \Delta x_1 & \Delta y_1 & \Delta x_1^2/2! & \Delta x_1\Delta y_1 & \cdots & \Delta y_1^3/3! \\ \Delta x_2 & \Delta y_2 & \Delta x_2^2/2! & \Delta x_2\Delta y_2 & \cdots & \Delta y_2^3/3! \\ \vdots & & & & & \vdots \\ \Delta x_n & \Delta y_n & \Delta x_n^2/2! & \Delta x_n\Delta y_n & \cdots & \Delta y_n^3/3! \end{bmatrix} \tag{3}$$

A matriz S contém todas as informações geométricas sobre a distribuição dos nós suporte e é composta dos coeficientes da equação (1). Estudando a estrutura da matriz S podemos encontrar o padrão de distribuição dos nós suporte que determinará se a matriz é singular ou mal condicionada [2]. O mal condicionamento pode surgir por inúmeras razões, como a proximidade entre alguns nós ou número grande de nós alinhados. A técnica dos mínimos quadrados é introduzida para superar esta dificuldade, pois permite uma aproximação otimizada das derivadas para um determinado conjunto de equações. Desta forma, o problema da matriz S de coeficientes singular é evitado por meio do uso de mais nós suporte (mais que os desconhecidos). Além disso, a aproximação por mínimos quadrados pode ser refinada pela incorporação de fatores peso $w_i (i = 1, \ldots, n)$ que são destinados a dar maior importância aos nós que estão mais próximos ao nó de referência.

Assim, a expressão para a aproximação das derivadas através da técnica dos mínimos quadrados ponderados é

$$\partial\mathbf{f}_{9\times1} = ([S^T]_{9\times n}[W_n][S]_{n\times9})^{-1}[S^T]_{9\times n}[W_n]\Delta\mathbf{f}_{n\times1} \tag{4}$$

onde $W_n = diag(w_1, w_2, \cdots, w_n)$ e $w_i = \left(\sqrt{4/\pi}\left(1 - |\Delta x_i/d_0|^2\right)\right)^4$.

Nesta etapa do trabalho, implementamos o método acima descrito. Entre os programas usuais para esse tipo de simulação como Fortran, C e Matlab escolhemos o Matlab onde fizemos testes com algumas funções como mostrado na tabela abaixo.

Ordem para Derivadas									
Função	∂_x	∂_y	∂_x^2	$\partial_x\partial_y$	∂_y^2	∂_x^3	$\partial_x^2\partial_y$	$\partial_x\partial_y^2$	∂_y^3
$\sin(x^2+y^2)$	3,8140	3,7959	2,0482	1,9092	1,9424	1,9257	1,9117	1,8069	1,8811
$\log(x+y)$	4,6164	4,4621	2,2762	2,1701	2,0862	2,5493	2,3644	2,2793	2,2269
$\exp(x+y)$	4,4261	4,3824	3,8513	3,7875	3,7767	3,1729	3,1281	3,1084	3,0846

O objetivo dos testes é verificar a diferença entre o valor obtido(aproximado) e o valor exato, ou seja, testar a ordem do erro do método implementado. Por conveniência, fixamos o número de nós em vinte e cinco sendo um nó de referência e vinte e quatro nós suporte e diminuímos a distância entre esses nodos. Desta forma, obtemos, através de testes para diferentes funções, que o método é de ordem pelo menos 2.

Palavras-chave: Livre de Malha, Diferenças Finitas, Mínimos Quadrados Ponderados.

Referências

[1] C.S. Chew, K.S. Yeo, C. Shu , A generalized finite-difference (GFD) ALE scheme for incompressible flows around moving solid bodies on hybrid meshfree Cartesian grids, Journal of Computational Physics, 218 (2006) 510.

[2] H. Ding, C. Shu, K.S. Yeo, D. Xu, Simulation of incompressible viscous flows past a circular cylinder by hybrid FD scheme and meshless least square-based finite difference method, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 193 (2004) 727.

[3] B. Luciano. "Movimento de Partículas Carregadas em Fluidos Ionizados: Fundamentos Matemáticos da Teoria de Eletroforese Capilar", Tese de Doutorado, PPGMAp-UFRGS, 2005.