

NOVOS ESQUEMAS DE DIFERENÇAS FINITAS PARA A EQUAÇÃO DE HELMHOLTZ

Gustavo Benitez Alvarez
Universidade Federal Fluminense
benitez.gustavo@gmail.com

Helder da Fonseca Nunes
Universidade Federal Fluminense
helderfn@id.uff.br

Resumo: A equação de Helmholtz descreve os harmônicos-temporais de ondas acústicas. É bem conhecido que métodos de diferenças finitas e elementos finitos apresentam o efeito de poluição do erro para número de onda médio e alto. Nesse trabalho são analisados dois novos esquemas consistentes de diferenças finitas centradas de segunda ordem de precisão em uma e duas dimensões. A análise de dispersão, o comportamento do erro e os resultados numéricos mostram o bom desempenho do Novo Esquema 2.

Palavras-chave: Equação de Helmholtz. Diferenças Finitas. Análise de dispersão. Poluição do erro.

Introdução

A equação de Helmholtz escalar com condições de contorno de Dirichlet é dada por:

$$\Delta u + k^2 u = f \text{ em } \Omega, \quad (1)$$

$$u = g \text{ em } \partial\Omega, \quad (2)$$

onde k é o número de onda, Ω é o interior do domínio limitado com contorno Lipschitz $\partial\Omega$, f é um termo fonte, e u é um campo escalar que descreve os harmônicos-temporais de ondas acústicas. Pela sua grande importância, tal equação é objeto de muitos estudos. Contudo, grande parte das aplicações práticas exigem que se tenha um valor de número de onda elevado e sabe-se que a qualidade da solução numérica depende significativamente desse parâmetro, sendo sua precisão deteriorada com o aumento do valor de k (LOULA et al., 2007).

Para que uma aceitável aproximação possa ser obtida, a resolução da malha utilizada deve ser ajustada de acordo com o número de onda. Esse ajuste é obtido através da regra do dedão (*rule of thumb*), que prescreve uma quantidade mínima de elementos por comprimento de onda. (IHLENBURG; BABUŠKA, 1995b). Contudo, é de conhecimento que, mesmo quando a regra do dedão é obedecida, a performance dos métodos de diferenças finitas e elementos finitos diminui drasticamente com o aumento do número de onda (SINGER; TURKEL, 1998; IHLENBURG; BABUŠKA, 1995a). Esse problema é conhecido por efeito de poluição do erro, e está relacionado à diferença entre o número de onda k da solução exata e o número de onda k^h da solução numérica. Para problemas unidimensionais, já existem métodos de elementos finitos que eliminam esse efeito, tal como o método GLS (Galerkin-Mínimos Quadrados) apresentado por Harari e Hughes (1991). Para problemas bidimensionais, sabe-se que é impossível eliminar totalmente esse efeito de poluição, como pode ser visto em Babuška e Sauter (1997).

Buscaram-se desenvolver, portanto, métodos que minimizassem essa poluição do erro, como o Método de Elementos Finitos Quase Estabilizado (QSFEM) descrito por Babuška, Ihlenburg et al. (1995). Alguns trabalhos tem sido desenvolvidos também com a utilização de diferenças finitas, de modo a obter uma melhor qualidade nas soluções. Podemos citar Sutmann (2007) que desenvolveu um novo esquema de sexta ordem, Singer e Turkel (1998) que desenvolveram esquemas de quarta ordem baseados nas generalizações das aproximações de Padé. Nabavi, Siddiqui e Dargahi (2007) desenvolveram um novo

esquema compacto de sexta ordem utilizando nove pontos. Wu (2017) desenvolveu um esquema de quarta ordem que minimiza o erro de dispersão, e Wu e Xu (2018) apresentam um esquema de sexta ordem.

No presente trabalho são apresentados dois novos esquemas de diferenças finitas centrados de segunda ordem de precisão para a equação de Helmholtz em uma e duas dimensões. Esses esquemas são consistentes, ou seja, conforme há o refinamento da malha a solução numérica tende para solução exata. Os novos esquemas foram obtidos realizando novas aproximações do termo k^2u da equação 1.

O trabalho apresenta a seguinte organização: inicialmente são apresentados os esquemas de diferenças finitas e a análise de dispersão para os casos 1D e 2D. Em sequência tem-se um breve estudo do erro seguido dos resultados numéricos e discussões. Por fim, tem-se as conclusões.

Esquemas de Diferenças Finitas em Uma e Duas Dimensões

Três esquemas de diferenças finitas são apresentados: Centrado Clássico (CC), Novo Esquema 1 (NE-1) e Novo Esquema 2 (NE-2). Todos são esquemas centrados de segunda ordem de precisão, onde a aproximação do termo k^2u na equação de Helmholtz pode ser entendida como uma média da solução em torno do ponto central. A análise realizada aqui apenas considera malhas uniformes, onde $h = \Delta x = \Delta y$ é o espaçamento da malha.

Em Uma Dimensão (1D)

Para todos os esquemas a derivada segunda foi aproximada com diferenças finitas centradas de segunda ordem de precisão:

$$\frac{d^2u}{dx^2} \approx \frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2}, \quad (3)$$

onde, $U_{i-1} = U(x_i - h)$, $U_i = U(x_i)$, $U_{i+1} = U(x_i + h)$.

Centrado Clássico (CC)

Neste esquema o segundo termo da equação de Helmholtz é aproximado como $k^2u(x) \approx k^2U_i$. Isto resulta na equação matricial

$$\frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2} + k^2U_i = f_i \text{ ou } \frac{1}{h^2}(AU_{i-1} + BU_i + AU_{i+1}) = f_i, \quad (4)$$

onde $A = 1$ e $B = -2 + (kh)^2$.

Novo Esquema 1 (NE-1)

Neste esquema utilizou-se a aproximação $k^2u(x) \approx k^2 \frac{U_{i-1} + U_{i+1}}{2}$, resultando na equação matricial

$$\frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2} + k^2 \left(\frac{U_{i-1} + U_{i+1}}{2} \right) = f_i \text{ ou } \frac{1}{h^2}(AU_{i-1} + BU_i + AU_{i+1}) = f_i, \quad (5)$$

onde $A = 1 + \frac{(kh)^2}{2}$ e $B = -2$.

Novo Esquema 2 (NE-2)

Este esquema consiste numa média dos esquemas CC e NE-1 resultando na equação do estêncil

$$\frac{U_{i-1} - 2U_i + U_{i+1}}{h^2} + k^2 \left(\frac{U_i + \frac{U_{i-1} + U_{i+1}}{2}}{2} \right) = f_i \text{ ou } \frac{1}{h^2}(AU_{i-1} + BU_i + AU_{i+1}) = f_i, \quad (6)$$

onde $A = 1 + \frac{(kh)^2}{4}$ e $B = -2 + \frac{(kh)^2}{2}$.

Em Duas Dimensões (2D)

Analogamente, para todos os esquemas as derivadas segundas foram aproximadas com diferenças finitas centradas de segunda ordem de precisão:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} \text{ e } \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{h^2}. \quad (7)$$

A equação do estêncil clássico de 5 pontos para cada esquema resulta numa equação matricial do tipo:

$$\frac{1}{h^2} (AU_{i-1,j} + AU_{i+1,j} + BU_{i,j} + AU_{i,j-1} + AU_{i,j+1}) = f_{i,j}. \quad (8)$$

Centrado Clássico (CC)

Temos a equação do estêncil:

$$\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} + \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{h^2} + k^2 U_{i,j} = f_{i,j}, \quad (9)$$

que pode ser escrita na forma da equação 8 com $A = 1$ e $B = -4 + (kh)^2$.

Novo Esquema 1 (NE-1)

$$\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} + \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{h^2} + k^2 \left[\left(\frac{U_{i-1,j} + U_{i+1,j}}{4} \right) + \left(\frac{U_{i,j-1} + U_{i,j+1}}{4} \right) \right] = f_{i,j}, \quad (10)$$

ou na forma da equação 8 com $A = 1 + \frac{(kh)^2}{4}$ e $B = -4$.

Novo Esquema 2 (NE-2)

$$\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} + \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{h^2} + k^2 \left[\frac{\left(\frac{2U_{i,j} + U_{i-1,j} + U_{i+1,j}}{4} \right) + \left(\frac{2U_{i,j} + U_{i,j-1} + U_{i,j+1}}{4} \right)}{2} \right] = f_{i,j}, \quad (11)$$

ou na forma da equação 8 com $A = 1 + \frac{(kh)^2}{8}$ e $B = -4 + \frac{(kh)^2}{2}$.

Análise de Dispersão

A diferença entre o número de onda da solução exata (k) e da solução numérica (k^h) pode ser estimada através da análise de dispersão. Esta diferença provoca a perda de fase da solução numérica e impacta o efeito de poluição do erro. A análise consiste em considerar a equação de Helmholtz homogênea ($f = 0$) e supor soluções numéricas na forma de ondas planas que, substituídas na equação do estêncil para cada esquema, permite obter uma expressão para k^h (número de onda discreto) em função de k (FERNANDES, 2009).

Caso Unidimensional

Neste caso, a solução numérica na forma $U_i = e^{ikhx_i}$ é substituída na equação do estêncil 4 obtendo:

$$k^h = \frac{1}{h} \arccos\left(-\frac{B}{A}\right). \quad (12)$$

Substituindo os valores de A e B de cada esquema em 12 e realizando a expansão em série de Taylor em torno de $kh = 0$, temos as expressões de $k^h - k$ para cada método:

$$\text{CC: } k^h - k = \frac{1}{24}(k^3h^2) + \frac{3}{640}(k^5h^4) + \mathcal{O}(k^6h^5), \quad (13)$$

$$\text{NE-1: } k^h - k = -\frac{5}{24}(k^3h^2) + \frac{43}{640}(k^5h^4) + \mathcal{O}(k^6h^5), \quad (14)$$

$$\text{NE-2: } k^h - k = -\frac{1}{12}(k^3h^2) + \frac{1}{80}(k^5h^4) + \mathcal{O}(k^6h^5). \quad (15)$$

Caso Bidimensional

Neste caso, a onda plana discreta na direção θ é $U_{i,j} = e^{ik^h(x_i \cos\theta + y_j \sin\theta)}$. Substituindo na equação homogênea 8 obtemos:

$$B + 2A(\cos(k^h h \cos\theta) + \cos(k^h h \sin\theta)) = 0. \quad (16)$$

Substituindo os valores de A e B para cada esquema e realizando a expansão em série de Taylor em torno de $kh = 0$, após algumas manipulações algébricas com o auxílio do *software* Mathematica¹ obtemos:

$$\text{CC: } k^h - k = \frac{3 + \cos 4\theta}{96}(k^3h^2) + \frac{235 + 162 \cos 4\theta + 35 \cos^2 4\theta}{92160}(k^5h^4) + \mathcal{O}(k^6h^5), \quad (17)$$

$$\text{NE-1: } k^h - k = \frac{-9 + \cos 4\theta}{96}(k^3h^2) + \frac{1315 - 198 \cos 4\theta + 35 \cos^2 4\theta}{92160}(k^5h^4) + \mathcal{O}(k^6h^5), \quad (18)$$

$$\text{NE-2: } k^h - k = \frac{-3 + \cos 4\theta}{96}(k^3h^2) + \frac{235 + 162 \cos 4\theta + 35 \cos^2 4\theta}{92160}(k^5h^4) + \mathcal{O}(k^6h^5). \quad (19)$$

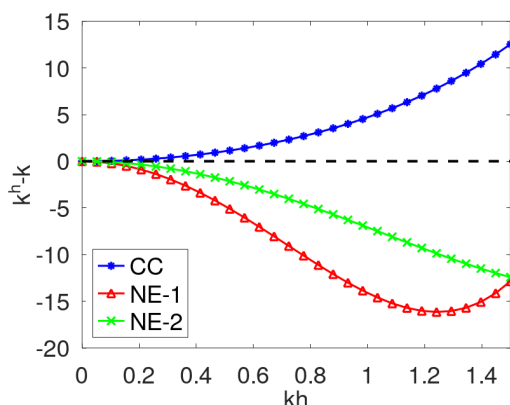


Figura 1: Dispersão 1D para $k = 100$.

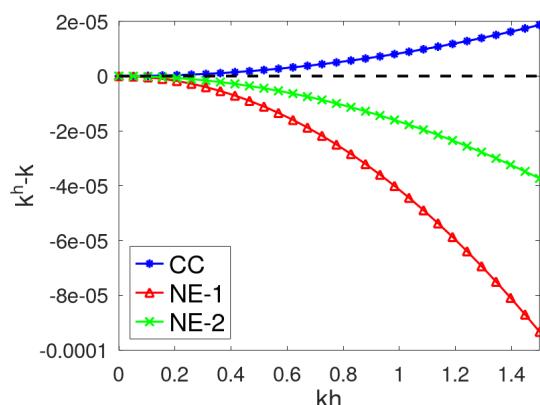


Figura 2: Dispersão 2D para $k = 100$ e $\theta = \pi/4$.

¹<https://www.wolfram.com/mathematica>

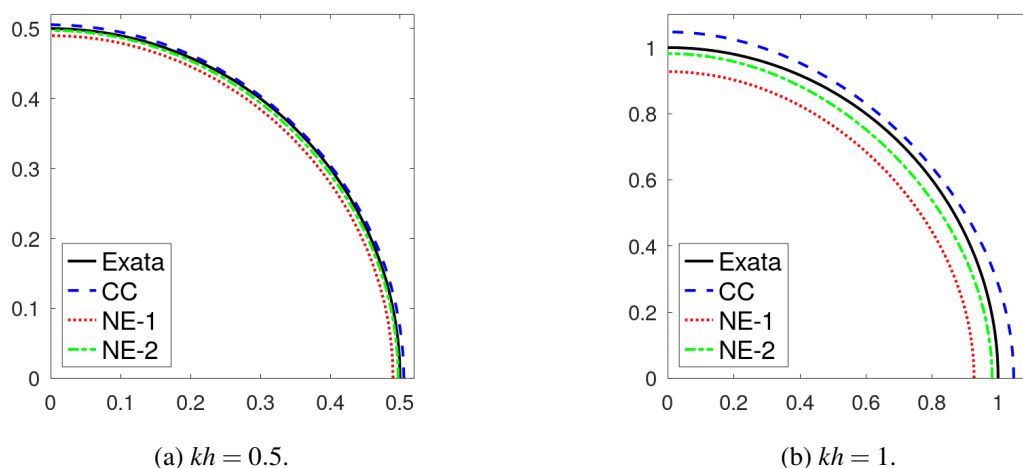


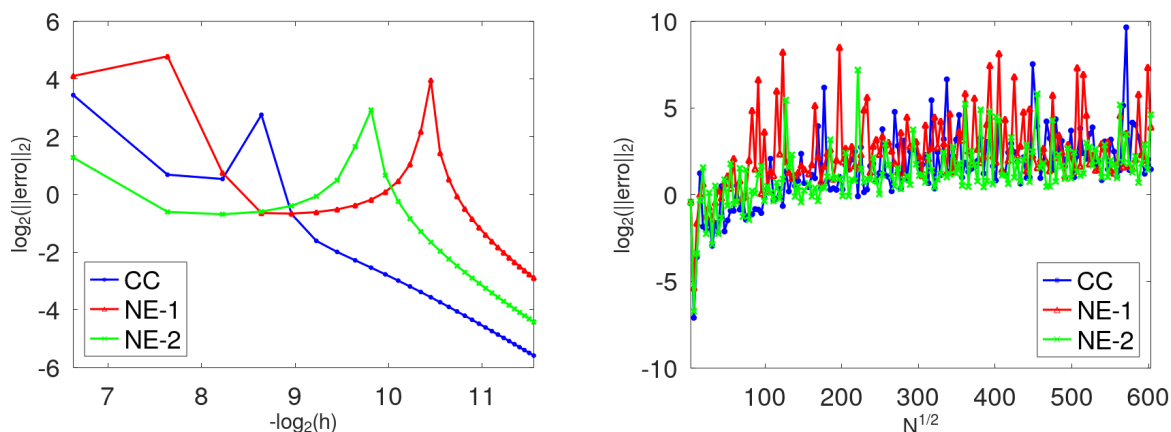
Figura 3: Relação de dispersão no caso 2D para $0 \leq \theta \leq \pi/2$.

As figuras 1 e 2 mostram que para ambos os casos, 1D e 2D, como esperado, o retardo de fase diminui para malhas mais refinadas. Os esquemas CC e NE-2 apresentam melhores resultados quando comparado ao NE-1, embora todos apresentem dispersão da mesma ordem.

Quando comparamos a relação da dispersão no caso 2D com a direção da onda plana θ nas figuras 3a e 3b, podemos observar que o NE-2 apresentou a menor dispersão em $\theta = 0$ e $\theta = \pi/2$, e a maior dispersão em $\theta = \pi/4$. O método CC apresentou um comportamento contrário ao NE-2, exibindo maior dispersão em $\theta = 0$ e $\theta = \pi/2$, e a menor dispersão em $\theta = \pi/4$. Por outro lado, a dispersão do NE-1 não mostra grandes variações com o ângulo, porém apresenta maior distância da dispersão exata.

Comportamento do Erro

Podemos mostrar o efeito de poluição do erro aumentando o refinamento da malha para um dado número de onda fixo. É esperado que, se não houvesse o efeito de poluição, o erro diminuiria conforme o refinamento da malha. O erro absoluto apresentado aqui $e_{i,j} = U_{i,j} - u_{i,j}$ foi calculado utilizando a equação A.18 para $q = 2$, que encontra-se em LeVeque (2007, p. 252).



(a) $k = 80$ e malha variando de 100×100 a 3000×3000 .

(b) $kh = 0.5$ com k variando de 1 a 300.

Figura 4: Erro no caso 2D variando-se o tamanho da malha (4a) e mantendo-se kh constante (4b).

Na figura 4a é possível observar que aumentando-se a quantidade de elementos da malha o erro

aumenta em certos pontos (picos) e só após isso temos uma convergência assintótica para a ordem de convergência de cada método. Manter kh constante, como já mencionado, também não é o suficiente para controlar o efeito da poluição do erro, como pode ser visto na figura 4b.

Resultados Numéricos

Códigos computacionais 1D e 2D foram desenvolvidos usando o *software* GNU Octave². São apresentados resultados numéricos da equação homogênea e não-homogênea para um domínio quadrado unitário e malha uniforme composta por 200×200 elementos. As figuras 5a e 5b apresentam as soluções dos três métodos e o interpolante para a equação homogênea com $k = 100$, $kh = 0.5$ e superposição de três ondas planas nas direções $\theta = 0, \pi/4$ e $\pi/8$. Neste caso a solução exata $u(x,y) = \sum_{i=1}^n (\cos(k(x \cos \theta_i + y \sin \theta_i)))$ é a superposição de $n = 3$ ondas planas. Na figuras 6a e 6b considera-se a fonte $f(x,y) = 4 + k^2(x^2 + y^2)$ cuja solução exata é $u(x,y) = x^2 + y^2 + \sin(k(x \cos \theta + y \sin \theta))$. Em ambos casos, homogêneo e não-homogêneo, percebe-se que o método NE-2 exibe resultados mais próximos do interpolante, apresentando menor retardo de fase e diferença de amplitude que os métodos CC e NE-1.

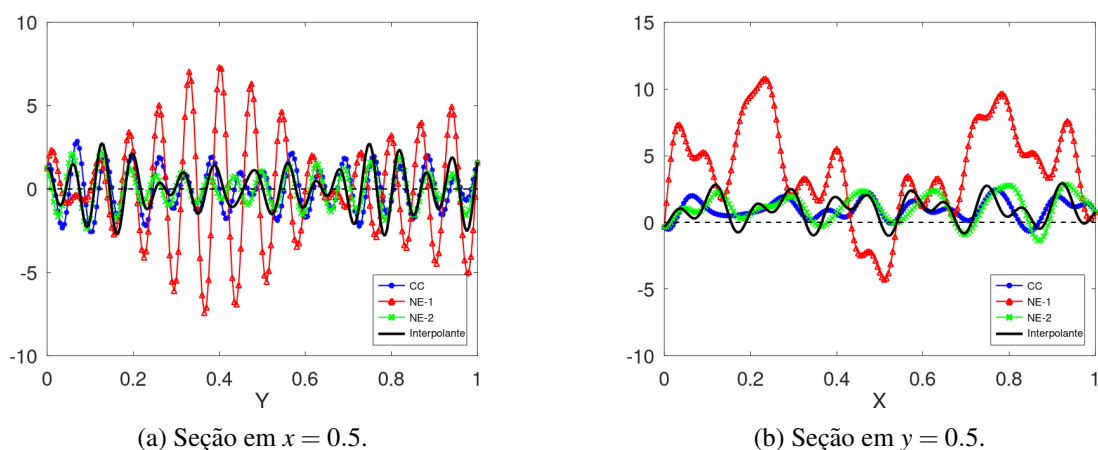


Figura 5: Soluções numéricas no caso 2D homogêneo com $k = 100$, $kh = 0.5$ e $\theta = 0, \pi/4$ e $\pi/8$.

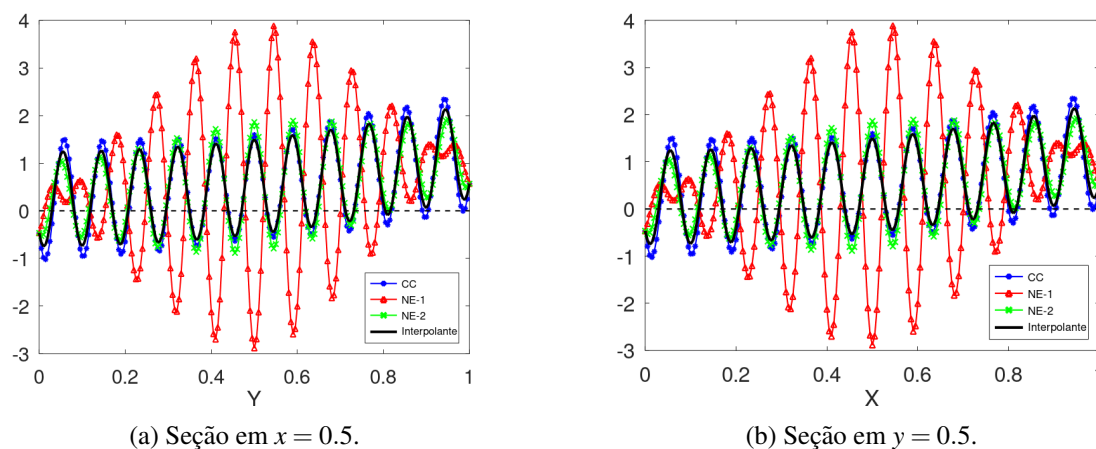


Figura 6: Soluções numéricas no caso 2D não-homogêneo com $k = 100$, $kh = 0.5$ e $\theta = \pi/4$.

²<https://www.octave.org>

Conclusões

Dois novos esquemas de diferenças finitas para a equação de Helmholtz foram apresentados. Estes foram obtidos modificando apenas a aproximação para o segundo termo k^2u , e são de segunda ordem de precisão. As análises de dispersão para os casos 1D e 2D mostraram o bom desempenho do método NE-2. Os gráficos dos erros confirmaram a presença do efeito de poluição do erro para os três métodos, conforme esperado. Por fim, os resultados numéricos corroboram o que foi visto nas análises de dispersão, com o novo método NE-2 apresentando resultados mais próximos aos do interpolante.

Referências

- BABUŠKA, I.; IHLENBURG, F. et al. A Generalized Finite Element Method for solving the Helmholtz equation in two dimensions with minimal pollution. en. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, v. 128, p. 325–359, 1995.
- BABUŠKA, I. M.; SAUTER, S. A. Is the Pollution Effect of the FEM Avoidable for the Helmholtz Equation Considering High Wave Numbers? en. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 34, n. 6, p. 2392–2423, dez. 1997.
- FERNANDES, D. T. **Métodos de Diferenças Finitas e Elementos Finitos para o Problema de Helmholtz**. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, RJ, 2009.
- IHLENBURG, F.; BABUŠKA, I. Dispersion analysis and error estimation of Galerkin finite element methods for the Helmholtz equation. en. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 38, n. 22, p. 3745–3774, nov. 1995.
- IHLENBURG, F.; BABUŠKA, I. Finite element solution of the Helmholtz equation with high wave number Part I: The h-version of the FEM. en. **Computers & Mathematics with Applications**, v. 30, n. 9, p. 9–37, nov. 1995.
- LEVEQUE, R. J. **Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems**. Seattle, Washington: Society for Industrial e Applied Mathematics, jan. 2007.
- LOULA, A. F. D. et al. A discontinuous finite element method at element level for Helmholtz equation. en. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 196, n. 4-6, p. 867–878, jan. 2007.
- NABAVI, M.; SIDDIQUI, M. K.; DARGAHI, J. A new 9-point sixth-order accurate compact finite-difference method for the Helmholtz equation. en. **Journal of Sound and Vibration**, v. 307, n. 3-5, p. 972–982, nov. 2007.
- SINGER, I.; TURKEL, E. High-order finite difference methods for the Helmholtz equation. en. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 163, n. 1-4, p. 343–358, set. 1998.
- SUTMANN, G. Compact finite difference schemes of sixth order for the Helmholtz equation. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 203, n. 1, p. 15–31, jun. 2007.
- WU, T. A dispersion minimizing compact finite difference scheme for the 2D Helmholtz equation. en. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 311, p. 497–512, fev. 2017.
- WU, T.; XU, R. An optimal compact sixth-order finite difference scheme for the Helmholtz equation. en. **Computers & Mathematics with Applications**, v. 75, n. 7, p. 2520–2537, abr. 2018.