

# 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  $\vec{x}_i = \vec{x}_0 - \Delta\vec{x}_i$ , ( $i = 1, \dots, n$ ), onde  $f(\vec{x}_i) = f_i$  é conhecida. Desta forma obtemos o sistema de equações:

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

onde  $\partial_x$  e  $\partial_y$  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  $i=1, \dots, n$ .

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  $\partial \mathbf{f}_{9 \times 1} = (\partial_x, \partial_y, \partial_x^2, \partial_x \partial_y, \dots, \partial_y^3)^T f|_{\vec{x}_0}$  de  $f$  em  $x_0$  para os valores funcionais de  $f$  em  $x_0$  nos  $n$  nós suporte:

$$\Delta \mathbf{f}_{n \times 1} = [S]_{n \times 9} \partial \mathbf{f}_{9 \times 1} \quad (2)$$

onde  $\Delta \mathbf{f}_{n \times 1} = (f_1 - f_0, f_2 - f_0, \dots, f_n - f_0)^T$ , e

$$[S]_{n \times 9} = \begin{bmatrix} \Delta x_1 & \Delta y_1 & \Delta x_1^2/2! & \Delta x_1 \Delta y_1 & \cdots & \Delta y_1^3/3! \\ \Delta x_2 & \Delta y_2 & \Delta x_2^2/2! & \Delta x_2 \Delta y_2 & \cdots & \Delta y_2^3/3! \\ \vdots & & & & & \vdots \\ \Delta x_n & \Delta y_n & \Delta x_n^2/2! & \Delta x_n \Delta y_n & \cdots & \Delta y_n^3/3! \end{bmatrix} \quad (3)$$

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  $w_i (i = 1, \dots, n)$  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

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

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

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	$\partial_x$	$\partial_y$	$\partial_x^2$	$\partial_x \partial_y$	$\partial_y^2$	$\partial_x^3$	$\partial_x^2 \partial_y$	$\partial_x \partial_y^2$	$\partial_y^3$
$\sin(x^2 + y^2)$	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 diminuimos 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.