
Solução Numérica de Equações Diferenciais e Derivadas Parciais por Diferenças Finitas

Kémelli Campanharo Estacio

Renato Aparecido Pimentel da Silva

Claudio de Lima Menezes

Ana Cristina Pivem

*Aguinaldo Aparecido Pereira**

Evelise Roman Corbalan Góis

Fernanda Paula Barbosa

Viviane Cecília de Oliveira

Valdemir Garcia Ferreira

ICMC/USP–Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

Departamento de Computação e Estatística

Caixa Postal 668, 13560-970, São Carlos, SP, Brasil

{kemelli, rsilva, cmenezes, anapivem, ercgois, ferpaula,

vivianececilia, pvgf}@icad.icmc.usp.br, *agnld@hotmail.com

Prefácio

Este documento apresenta notas sobre solução numérica de equações diferenciais a derivadas parciais utilizando o método de diferenças finitas.

Sumário

1	Contextualização	1
2	Equações Modelos e a Técnica de Diferenças Finitas	3
2.1	Condições Auxiliares	4
2.2	Problema Bem Posto	4
2.3	Classificação	5
2.4	Equações Modelo	5
2.5	A malha computacional	5
2.6	Método de Diferenças Finitas	6
2.6.1	Notação para Funções de Várias Variáveis	8
3	Equações Parabólicas	10
3.1	Processo de Adimensionalização	10
3.2	Método explícito	11
3.2.1	Exemplo	11
3.3	Método de Crank-Nicolson	14
3.3.1	Exemplo	15
3.4	Condições de Contorno do tipo Neumann	17
3.4.1	Exemplo	17
3.5	Erro de Truncamento Local e Consistência	19
3.5.1	Erro de Truncamento Local	19
3.5.2	Consistência	22
3.6	Convergência e Estabilidade	24
3.6.1	Convergência	24
3.6.2	Estabilidade	25
3.6.3	Critérios de Estabilidade	31
3.7	Exercícios	36

4	Equações Hiperbólicas	40
4.1	Equações de primeira ordem quase-lineares e características	44
4.1.1	Exemplo	45
4.1.2	Método de Lax-Wendroff	46
4.2	A Condição CFL para Equações de Primeira Ordem	47
4.3	Equações Hiperbólicas Quase-Lineares de Segunda Ordem	48
4.3.1	Métodos Explícitos e a Condição CFL	50
4.3.2	Métodos Implícitos	52
4.4	Esquemas <i>Upwind</i>	54
4.5	Exercícios	55
5	Sistemas Elípticos	57
5.1	Motivação	57
5.2	Exemplos	58
5.2.1	Problema de Dirichlet	58
5.2.2	Problema de Neumann no Retângulo	60
5.3	Exercícios	61
6	Aplicação: Equação de Navier–Stokes	63
6.1	Introdução	63
6.2	Técnicas Básicas	64
6.2.1	Equações Governantes	64
6.2.2	Adimensionalização	64
6.2.3	Diferenças finitas	65
6.2.4	Iteração de Pressão	69
6.2.5	Condições de Contorno	71
6.2.6	Condições de Estabilidade	72
6.3	Simulações	73
6.3.1	Resultados	75
A	Resolução dos Exercícios	81
A.1	Equações Parabólicas	81
A.2	Equações Hiperbólicas	88
A.3	Equações Elípticas	90

Contextualização

A formulação matemática da maioria dos problemas envolvendo taxas de variação de duas ou mais variáveis independentes, geralmente representando tempo, comprimento e ângulo, conduz a uma Equação Diferencial Parcial (EDP) ou a um conjunto de tais equações [9]. Fundamentalmente três abordagens podem ser utilizadas independentemente, ou conjuntamente, para a solução de problemas modelos por essas equações, a saber: a experimental, a analítica e a computacional [2, 4].

Na abordagem experimental, um modelo físico deve ser construído de forma a desenvolver estudos do problema sob análise por meio da medição direta dos parâmetros determinantes o problema, cuidando-se de efetuar adequada análise dimensional, direcionada a preservar a homogeneidade dimensional das equações que expressem leis ou processos físicos. A abordagem experimental tem a capacidade de produzir as mais realistas respostas para problemas de escoamento de fluidos, contudo tem custo elevado e diariamente crescente.

Na abordagem analítica, simplificações teóricas são adotadas objetivando-se tornar os problemas complexos tratáveis, e se possível construir uma solução fechada para o problema. A precisão da solução analítica pode ser grandemente elevada e é dependente da precisão e da eficácia das simplificações efetuadas no modelo matemático. Ela é uma abordagem útil em projeto, projeções, simulações e *design* preliminar, referenciando-se razoáveis soluções em um espaço de tempo relativamente curto.

Na abordagem computacional, um número limitado de simplificações no modelo matemático é adotado, proporcionando a elaboração de um modelo computacional consistente a ser resolvido com técnicas de modelagem e simulação numérica. Neste modelo computacional, aplica-se então, um método de discretização do contínuo, para se obter aproximações numéricas das EDPs via computador. No caso particular destas notas, as derivadas

nas EDPs são aproximadas por diferenças finitas em cada ponto de uma malha de discretização do contínuo, gerando um sistema de equações para as variáveis discretas.

A simulação computacional apresenta, em relação à abordagem experimental, a liberdade de limitações de ordem dimensional, de ordem física e espacial e outras específicas da modelagem física, para análise do problema em foco. A ausência de limitações relativamente aos procedimentos experimentais e analíticos indica ser a abordagem computacional a de maior potencial evolutivo. A análise computacional necessita de precisão na prevenção de erros numéricos relacionados à análise do problema, à modelagem e ao desenvolvimento e implantação do algoritmo de solução, cuidando-se de incorporar técnicas de estabilidade e de convergência do processo de solução. Tais técnicas garantem a precisão na obtenção da solução.

Equações Modelos e a Técnica de Diferenças Finitas

Muitos problemas em física e em engenharia requerendo solução numérica envolvem casos específicos da EDP

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0, \quad (2.1)$$

em que a, b, c, d, e, f e g podem ser funções das variáveis independentes x e y e da variável dependente ϕ , a qual é definida dentro de alguma região R do plano xy .

Notação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \phi_x, \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \phi_{xx}, \dots$$

Exemplo: Equações de Navier–Stokes

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \vec{f}, \quad (2.2)$$

em que $\vec{v} = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t))$ é o vetor velocidade, $p = p(x, y, z, t)$ é a pressão, μ é a viscosidade e \vec{f} são forças externas. Essas equações modelam o escoamento de fluidos.

Note que esse sistema contém três equações e quatro incógnitas (u, v, w e p). Para fechar esse sistema acopla-se a equação da conservação de massa:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.3)$$

Encontrar soluções analíticas para EDPs pode ser uma tarefa muito difícil, ou até

mesmo inviável, como no caso das equações exemplificadas acima. O método de diferenças finitas fornece soluções aproximadas, efetuando diretamente a substituição das derivadas da função/variável dependente, por diferenças finitas, obtidas pela expansão em série de Taylor e truncamento a nível da ordem de erro desejada.

2.1 Condições Auxiliares

Em geral, as EDPs que modelam sistemas físicos (como, por exemplo, escoamento de fluidos) têm usualmente muitas soluções. Para selecionar uma função que representa a solução para o problema físico, deve-se impor certas condições auxiliares que caracterizam o sistema em questão. Estas condições auxiliares são divididas em duas categorias:

1. Condições de contorno (fronteira):

São condições que devem ser impostas em todos os pontos do contorno (na fronteira) da região na qual a EDP está definida.

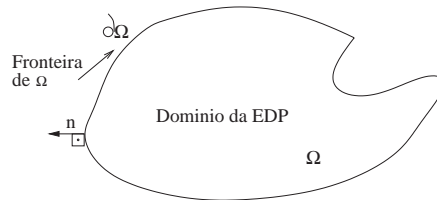


Figura 2.1: Ilustração do domínio de definição de uma EDP e de sua fronteira.

Por exemplo, sendo U a solução do problema e g uma função conhecida,

(a) condição de Dirichlet: $U = g$;

(b) condição de Neumann: $\frac{\partial U}{\partial n} = g$;

(c) condição de Robin: $\alpha U + \beta \frac{\partial U}{\partial n} = g$;

em que α e β são constantes e n é o vetor normal à superfície apontando para fora.

2. Condição inicial

São condições que devem ser satisfeitas em todo o domínio da EDP e no instante em que o sistema físico se inicia.

2.2 Problema Bem Posto

As condições iniciais e de contorno, juntamente com as funções coeficientes e os termos não homogêneos em uma EDP correspondem aos dados do problema modelado pela EDP.

A solução depende continuamente dos dados do problema se mudanças pequenas nesses dados acarretam, correspondentemente, variações pequenas na solução.

No sentido de Hadamard, um problema é bem posto se:

1. a solução da EDP existe;
2. a solução é única;
3. a solução depende continuamente dos dados.

Se uma das condições 1), 2) ou 3) não está satisfeita, o problema é dito mal-posto.

2.3 Classificação

Segue da equação geral (2.1) que $\Delta = b^2 - 4ac$. Desta forma,

- se $\Delta < 0$ então a equação é dita elíptica;
- se $\Delta = 0$ então a equação é dita parabólica;
- se $\Delta > 0$ então a equação é dita hiperbólica;

2.4 Equações Modelo

Nestas notas os métodos numéricos apresentados serão aplicados a equações modelos de cada uma das três sub-áreas de EDPs. São elas:

- parabólica:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad \text{que é a equação do calor em 1D}$$

- hiperbólica:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial u}{\partial x} \quad \text{que é a equação da onda}$$

- elíptica:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = k, \quad k \text{ constante, que é a equação de Laplace/Poisson}$$

2.5 A malha computacional

Considere U , uma função de duas variáveis independentes x e t , isto é, $U = U(x, t)$. Subdividindo-se o plano xt em conjuntos de retângulos iguais de lados $\delta x = h$, $\delta t = k$, por linhas igualmente espaçadas paralelas ao eixo t , definidas por $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, 2, \dots$ e igualmente espaçadas e paralelas ao eixo x , definidas por $t_j = t_0 + jk$, $j = 0, 1, 2, \dots$. Uma malha no plano xt é o conjunto dos pontos $(x_i, t_j) = (x_0 + ih, t_0 + jk)$, onde i e j são inteiros e (x_0, t_0) é um ponto de referência, como ilustra a Figura 2.2, sem perda de generalidade considera-se $(x_0, t_0) = (0, 0)$.

Os pontos (x_i, t_j) são chamados de pontos de malha e os números positivos h e k são, respectivamente, os espaçamentos da malha nas direções x e t . Se h e k são constantes, a

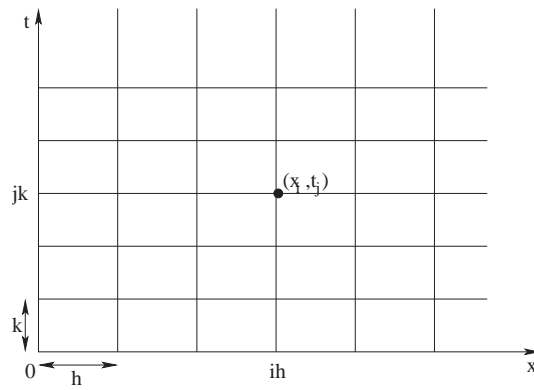


Figura 2.2: Exemplo de malha. O ponto (x_i, t_j) localiza-se nas posições ih e jk da malha considerando $(x_0, y_0) = (0, 0)$

malha é dita uniforme. Deseja-se obter a solução numérica do problema físico, $u(x_i, t_j)$, isto é, encontrar a solução numérica nos pontos (x_i, t_j) da malha.

2.6 Método de Diferenças Finitas

Para se obter uma solução de (2.1), pela técnica de diferenças finitas, a região Ω é coberta por uma malha com h e k sendo os espaçamentos nas direções x e y respectivamente, como ilustrado na Figura 2.3, e aproximamos as derivadas presentes na EDP em um ponto genérico da malha (x_i, t_j) por uma aproximação de derivadas.

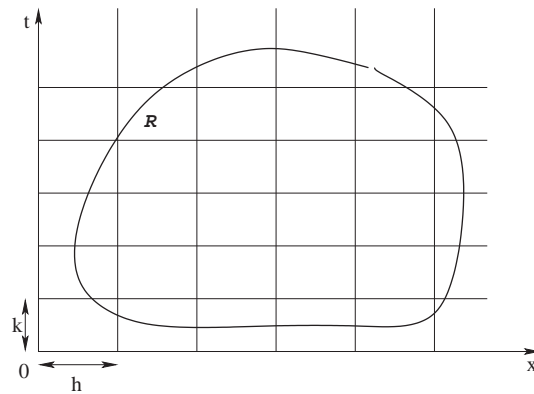


Figura 2.3: Ilustração de uma região coberta por uma malha.

Considere uma função $U = U(x)$ contínua e de derivadas contínuas, então é possível expandir U em série de Taylor da seguinte maneira

$$U(x + h) = U(x) + hU'(x) + \frac{1}{2}h^2U''(x) + \frac{1}{3!}h^3U'''(x) + \dots \quad (2.4)$$

e

$$U(x - h) = U(x) - hU'(x) + \frac{1}{2}h^2U''(x) - \frac{1}{3!}h^3U'''(x) + \dots \quad (2.5)$$

Desprezando-se o termo $\frac{1}{2}h^2U''(x) + \frac{1}{3!}h^3U'''(x) + \dots$ na equação (2.4), obtém-se:

$$U(x+h) \approx U(x) + hU'(x) \quad (2.6)$$

ou

$$U'(x) \approx \frac{U(x+h) - U(x)}{h} \quad (2.7)$$

que é a aproximação progressiva (ou para frente) para a primeira derivada.

O erro de truncamento, ET, nesta aproximação é dado por

$$ET = \frac{h}{2}U''(x) + \frac{h^2}{3!}U'''(x) + \dots \quad (2.8)$$

Admitindo-se $U''(x), U'''(x), \dots$ limitadas e $h \rightarrow 0$, então $ET \rightarrow 0$.

Definição 1 Uma função $f = f(h)$ é de ordem de magnitude de uma função $g = g(h)$, quando $h \rightarrow 0$, se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(h)}{g(h)} = \text{constante}$$

Notação: $f(h) = O(g(h))$

A aproximação progressiva para a primeira derivada é de primeira ordem, isto é, $O(h)$. Usualmente, estamos muito mais interessados na ordem do ET do que em sua expressão propriamente dita.

Analogamente, desprezando-se os termos de $O(h^2)$ na equação (2.5), obtém-se:

$$U(x-h) \approx U(x) - hU'(x) \quad (2.9)$$

ou

$$U'(x) \approx \frac{U(x) - U(x-h)}{h} \quad (2.10)$$

que é chamada aproximação regressiva (ou para trás) para a primeira derivada, cuja ordem é $O(h)$.

Por outro lado, somando-se as expressões (2.4) e (2.5), tem-se:

$$U(x+h) + U(x-h) = 2U(x) + h^2U''(x) + \frac{h^4}{12}U^{(iv)}(x) + \dots \quad (2.11)$$

Desprezando-se os termos $\frac{h^4}{12}U^{(iv)}(x) + \dots$, obtém-se:

$$U(x+h) + U(x-h) \approx 2U(x) + h^2U''(x) \quad (2.12)$$

ou

$$U''(x) \approx \frac{U(x+h) - 2U(x) + U(x-h)}{h^2} \quad (2.13)$$

em que $ET = \frac{h^2}{12}U^{(iv)}(x) + \dots = O(h^2)$. Essa expressão é chamada de aproximação por diferenças centrais para a segunda derivada.

Finalmente, subtraindo-se (2.4) de (2.5), tem-se:

$$U(x+h) - U(x-h) = 2U(x) + h^2U''(x) + \frac{h^3}{3}U'''(x) + \dots \quad (2.14)$$

Desprezando-se os termos de ordem maior ou igual a 3, obtém-se:

$$U'(x) \approx \frac{U(x+h) - U(x-h)}{2h} \quad (2.15)$$

que é chamada diferença central para a primeira derivada. Nesse caso, tem-se que $ET = \frac{h^2}{12}U^{(iv)}(x) + \dots = O(h^2)$. Se as derivadas de U forem limitadas então $ET \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$.

2.6.1 Notação para Funções de Várias Variáveis

Considere agora U uma função de duas variáveis independentes x e t , ou seja, $U = U(x, t)$. Subdividindo o plano xt em conjuntos de retângulos iguais de lados $\delta x = h$, $\delta t = k$, por linhas igualmente espaçadas paralelas a $0y$, definidas por $x_i = x_0 + ih, i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e igualmente espaçadas e paralelas a $0x$, definidas por $t_j = t_0 + jk, j = 0, 1, 2, \dots$, como ilustra a Figura 2.4.

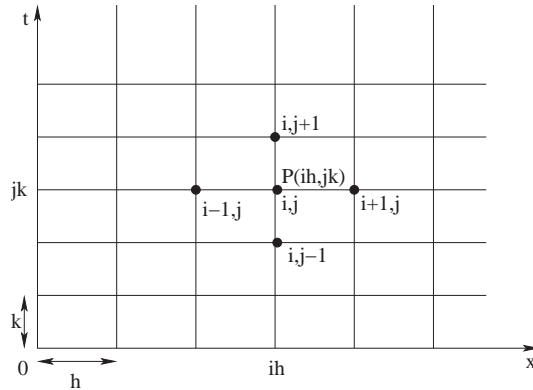


Figura 2.4: Exemplo de malha. O ponto $P(ih, jk)$ localiza-se nas posições ih e jk da malha considerando $(x_0, y_0) = (0, 0)$

Considerando-se $(x_0, y_0) = (0, 0)$ e denotando-se o valor de U no ponto da malha $P(ih, jk)$ por

$$U_P = U(ih, jk) = U_{i,j} \quad (2.16)$$

então pela equação (2.7), tem-se:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_P = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{i,j} \simeq \frac{U((i+1)h, jk) - 2U(ih, jk) + U((i-1)h, jk)}{h^2} \quad (2.17)$$

ou seja,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \simeq \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2} \quad (2.18)$$

com um erro local induzido de ordem de h^2 .

Analogamente,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \simeq \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{k^2} \quad (2.19)$$

com um erro local induzido de ordem de k^2 .

Usando-se esta notação, a aproximação de diferenças progressivas para $\frac{\partial U}{\partial t}$ em P é dada por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} \simeq \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} \quad (2.20)$$

com um erro induzido de $O(k)$.

O leitor interessado em maiores detalhes da discretização de derivadas em diferenças finitas pode consultar Anderson et al., 1997 [2].

Equações Parabólicas

Considere a equação parabólica modelo 1D, dada pela equação do calor:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = k \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

onde k é uma constante. Essa equação fornece a distribuição da temperatura $U = f(x)$ ao longo de uma barra de comprimento L e de espessura δ , com $\delta \ll L$.

As condições auxiliares para a solução desta equação são: em $t = 0$, U é conhecida ao longo da barra, e as temperaturas nos extremos da barra pode, ser derivadas.

3.1 Processo de Adimensionalização

Pode -se resolver uma variedade de problemas por meio de uma EDP. Isto pode ser feito expressando a EDP em termos de variáveis adimensionais.

No caso da equação de calor (3.1), tem-se que U é a temperatura, t é o tempo e x é o comprimento. Para essas variáveis, considera-se a seguinte transformação linear:

- $x^* = \frac{x}{L} \Rightarrow x = Lx^*$
- $U^* = \frac{U}{U_0} \Rightarrow U = U_0U^*$
- $t^* = \frac{kt}{L^2} \Rightarrow t = L^2k^{-1}t^*$

onde as quantidades marcadas com o asterisco (*) são adimensionais, e U_0 é a temperatura de referência.

Substituindo-se essas transformações na equação (3.1), obtém-se:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial U}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \\
 \frac{\partial(U_0 U^*)}{\partial(L^2 k^{-1} t^*)} &= k \frac{\partial}{\partial(Lx^*)} \left(\frac{\partial(U_0 U^*)}{\partial(Lx^*)} \right) \\
 \frac{U_0}{L^2 k^{-1}} \frac{\partial U^*}{\partial t^*} &= k \frac{U_0}{L^2} \frac{\partial^2 U^*}{\partial x^{*2}} \\
 \frac{\partial U^*}{\partial t^*} &= \frac{\partial^2 U^*}{\partial x^{*2}}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

que está na forma adimensional.

Fazendo-se um abuso de notação, a equação acima pode ser escrita como:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \tag{3.3}$$

3.2 Método explícito

Deseja-se avaliar as derivadas presentes na equação (3.3) usando diferenças finitas e um esquema explícito. Para tanto, substitui-se as expressões (2.18) e (2.20) em (3.3), resultando em:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \tag{3.4}$$

ou

$$u_{i,j+1} = r u_{i+1,j} + (1 - 2r) u_{i,j} + r u_{i-1,j} \tag{3.5}$$

onde u é a solução exata da equação de diferenças, e $r = \frac{k}{h^2}$ é a relação entre a malha nas direções x e t .

3.2.1 Exemplo

Como um exemplo numérico, deseja-se resolver a equação (3.2) usando o método descrito pela equação (3.5) e considerando as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned}
 (a) \quad U &= 2x, \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \quad t = 0 \\
 (b) \quad U &= 2(1 - x), \quad \frac{1}{2} \leq x \leq 1, \quad t = 0
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

e as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned}
 (c) \quad U &= 0, \quad x = 0, \quad t > 0 \\
 (d) \quad U &= 0, \quad x = 1, \quad t > 0
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

A solução analítica da equação (3.2) satisfazendo essas condições é dada por:

$$U = \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left(\sin \frac{1}{2} n \pi x \right) \exp(-n^2 \pi^2 t) \quad (3.8)$$

Pretende-se, portanto, resolver numericamente a equação (3.2) e comparar os resultados obtidos com os resultados fornecidos pela equação 3.8. Para tanto, utiliza-se três valores distintos para r , a saber: $r = 0.01$, $r = 0.5$ e $r = 0.51$.

Caso 1: $r = 0.1$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{1000}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{10}$.

A Figura 3.1 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

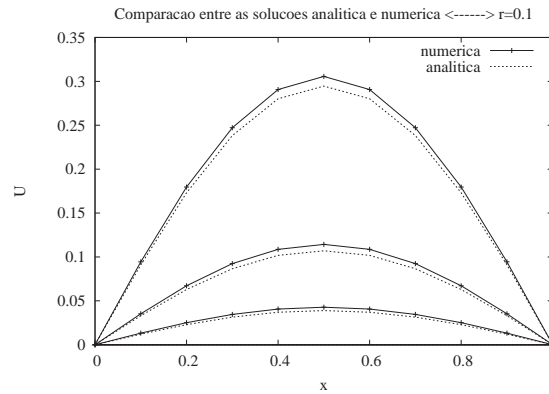


Figura 3.1: Comparação entre as soluções analítica e numérica, nos tempos $t = 0.01$, $t = 0.02$ e $t = 0.03$. Neste caso, tem-se $r = 0.1$.

Uma comparação da solução obtida pelo método das diferenças finitas com a solução analítica dada pela equação (3.8), em $x = 0.3$, é ilustrada na Tabela 3.1. A porcentagem do erro é calculada como:

$$\frac{|U_{numérica} - U_{analítica}|}{U_{analítica}} \times 100$$

t	Solução obtida por Diferenças Finitas	Solução Analítica	Percentual do Erro
0.005	0.5971	0.5966	0.08
0.01	0.5822	0.5799	0.4
0.02	0.5373	0.5334	0.7
0.10	0.2472	0.2444	1.1

Tabela 3.1: Comparação entre as soluções numérica e analítica obtida em uma malha de 10 passos na direção x e 1000 passos na direção t , com $r = 0.1$.

Caso 2: $r = 0.5$

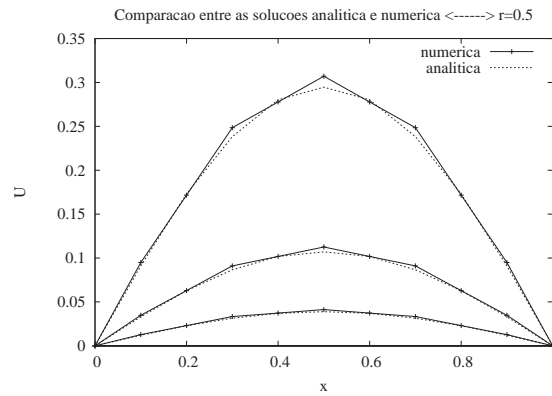


Figura 3.2: Comparação entre as soluções analítica e numérica, nos tempos $t = 0.01$, $t = 0.02$ e $t = 0.03$. Neste caso, tem-se $r = 0.5$.

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{200}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{5}{10}$.

A Figura 3.2 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

Uma comparação da solução obtida pelo método das diferenças finitas com a solução analítica dada pela equação (3.8), em $x = 0.3$, é ilustrada na Tabela 3.2.

t	Solução obtida por Diferenças Finitas	Solução Analítica	Percentual do Erro
0.005	0.6000	0.5966	0.57
0.01	0.6000	0.5799	3.5
0.02	0.5500	0.5334	3.1
0.10	0.2484	0.2444	1.6

Tabela 3.2: Comparação entre as soluções numérica e analítica obtida em uma malha de 10 passos na direção x e 1000 passos na direção t , com $r = 0.5$.

Pode-se observar que esta solução obtida por diferenças finitas não é tão boa quanto à obtida no exemplo anterior.

Caso 3: $r = 0.512821$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{200}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{5}{10}$.

A Figura 3.3 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

Pode-se observar o caráter oscilatório da solução numérica obtida pelo método das diferenças finitas, considerando-se $r = 0.5128$. Uma comparação da solução numérica com a solução analítica, em $x = 0.3$ é ilustrada na Tabela 3.3. Em outras simulações, considerando-se valores maiores de r , nota-se que a amplitude das oscilações torna-se cada vez maior.

Pode-se observar que a solução numérica encontrada neste caso não é uma boa aproximação para a solução analítica.

Estes três casos claramente indicam que o valor de r é importante e será mostrado que este método explícito é válido somente para $0 \leq r \leq \frac{1}{2}$.

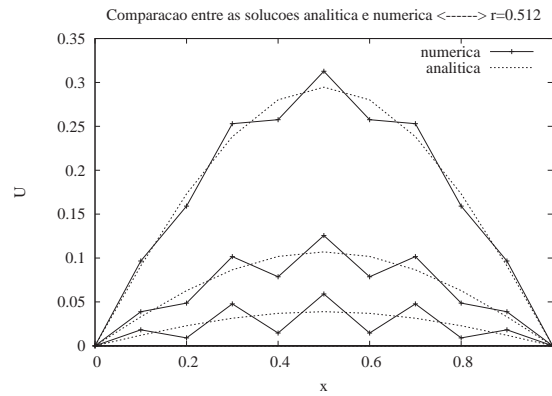


Figura 3.3: Comparação entre as soluções analítica e numérica, nos tempos $t = 0.01$, $t = 0.02$ e $t = 0.03$. Neste caso, tem-se $r = 0.512$.

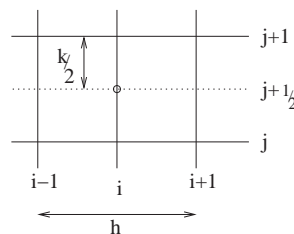
t	Solução obtida por Diferenças Finitas	Solução Analítica	Percentual do Erro
0.005	0.6000	0.5966	0.62
0.01	0.6000	0.5799	3.66
0.02	0.5500	0.5334	3.64
0.10	0.2484	0.2444	6.16

Tabela 3.3: Comparação entre as soluções numérica e analítica obtida em uma malha de 10 passos na direção x e 1000 passos na direção t , com $r = 0.52821$.

3.3 Método de Crank-Nicolson

Embora o método explícito seja computacionalmente simples, ele apresenta uma séria desvantagem. O passo no tempo $\delta t = k$ deve ser necessariamente muito pequeno para ser convergente, uma vez que o processo é válido somente para $0 \leq k/h^2 \leq \frac{1}{2}$, isto é $k \leq \frac{1}{2}h^2$.

Crank e Nicolson (1947) propuseram um método que reduz o volume total de cálculo e é válido (consistente e estável) para todo valor finito de r . Eles consideraram a EDP sendo satisfeita no ponto $(ih, (j + \frac{1}{2})k)$, e substituíram a derivada $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ pela média de suas aproximações de diferenças finitas nos níveis de tempo j e $j + 1$.



Em outras palavras, eles aproximaram a equação:

$$\frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{i, j+\frac{1}{2}} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{i, j+\frac{1}{2}} \tag{3.9}$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{i,j+1} \right) \quad (3.10)$$

por

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{1}{2h^2} (u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}). \quad (3.11)$$

Chamando $r = \frac{k}{h^2}$,

$$-ru_{i-1,j+1} + 2(1+r)u_{i,j+1} - ru_{i+1,j+1} = ru_{i-1,j} - 2(1-r)u_{i,j} + ru_{i+1,j} \quad (3.12)$$

Em geral, o lado esquerdo da equação (3.12) contém três incógnitas e o direito, três valores conhecidos de u . Se há N pontos internos na malha ao longo de cada coluna no tempo, então, para $j = 0$ e $i = 1, \dots, N$ a equação (3.12) fornece N equações simultâneas para as N incógnitas ao longo da primeira linha no tempo em termos dos valores iniciais e de fronteira. Analogamente, $j = 1$ expressa N incógnitas de u ao longo da segunda linha calculados em termos dos valores da primeira linha, etc. Essa é uma característica de métodos implícitos.

Vantagens do método:

1. $O(h^2, k^2)$;
2. Resolver $Ax = b$ para cada j ;
3. Válido (consistente e estável) para “todo” r .

Desvantagens do método:

1. Resolver $Ax = b$ se A for mal condicionada;
2. Comportamento oscilatório nas vizinhanças de descontinuidades.

3.3.1 Exemplo

Usar o método de Crank-Nicolson para resolver a equação (3.2) e considerando as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned} (a) \quad U &= 2x, \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \quad t = 0 \\ (b) \quad U &= 2(1-x), \quad \frac{1}{2} \leq x \leq 1, \quad t = 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

e as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned} (c) \quad U &= 0, \quad x = 0, \quad t > 0 \\ (d) \quad U &= 0, \quad x = 1, \quad t > 0 \end{aligned} \quad (3.14)$$

Tomando $h = 0.1$ e $k = 0.01$ teremos $r = 1$. Então a equação (3.12) é escrita como:

$$-u_{i-1,j+1} + 4u_{i,j+1} - u_{i+1,j+1} = u_{i-1,j} + u_{i+1,j} \quad (3.15)$$

Caso 1: $r = 0.5$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{200}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{2}$.

A Figura 3.4 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

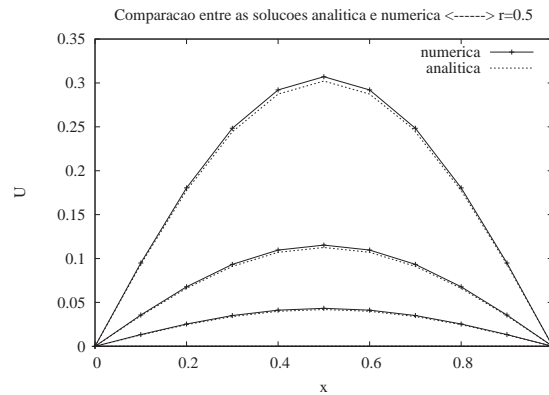


Figura 3.4: Comparação entre as soluções analítica e numérica, obtida pelo método de Crank-Nicolson, nos tempos $t = 0.01$, $t = 0.02$ e $t = 0.03$. Neste caso, tem-se $r = 0.5$.

Caso 2: $r = 1$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{100}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{5}{10}$.

A Figura 3.5 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

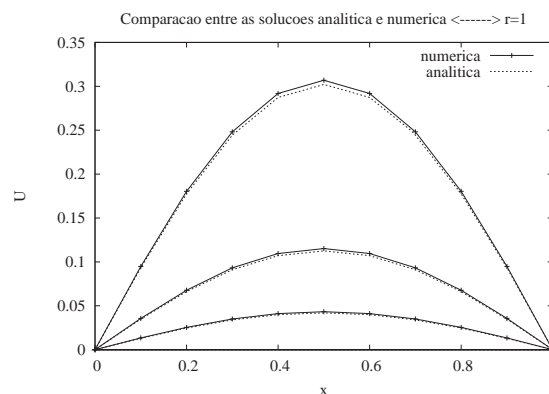


Figura 3.5: Comparação entre as soluções analítica e numérica, obtida pelo método de Crank-Nicolson, nos tempos $t = 0.01$, $t = 0.02$ e $t = 0.03$. Neste caso, tem-se $r = 0.5$.

Caso 3: $r = 10$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{200}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{5}{10}$.

A Figura 3.6 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

Apesar de o método de Crank-Nicolson ser válido para todo r , pode-se observar que a solução numérica obtida pelo método das diferenças finitas, considerando-se $r = 10$ apresenta um caráter oscilatório bastante ampliado nas vizinhanças da descontinuidade. Em outras simulações, considerando-se valores ainda maiores de r , nota-se que a amplitude das oscilações torna-se cada vez maior.

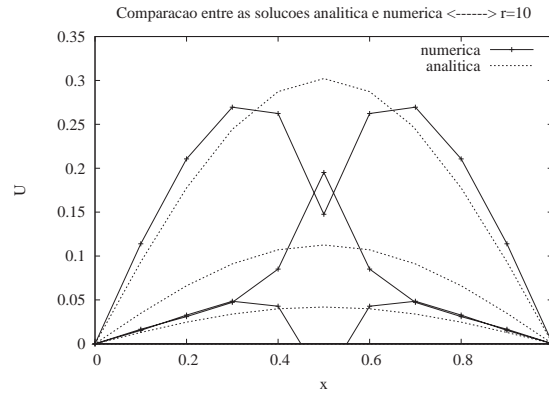


Figura 3.6: Comparação entre as soluções analítica e numérica, obtida pelo método de Crank-Nicolson nos tempos $t = 0.01$, $t = 0.02$ e $t = 0.03$. Neste caso, tem-se $r = 10$.

3.4 Condições de Contorno do tipo Neumann

Condições de contorno expressas em termos de derivadas parciais ocorrem com frequência, e são denominadas condições de contorno do tipo Neumann.

Considere, por exemplo, uma haste delgada que é termicamente isolada ao longo de seu comprimento e que irradia calor da extremidade $x = 0$. A temperatura nesse extremo no tempo t é agora desconhecida e sua determinação requer uma equação adicional. Essa equação é tomada como a condição de contorno quando um esquema de diferença progressiva é usado para avaliar $\frac{\partial U}{\partial x}$.

3.4.1 Exemplo

Resolva a equação

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \tag{3.16}$$

satisfazendo a seguinte condição inicial:

$$U = 1, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t = 0 \tag{3.17}$$

e as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned} (c) \quad & \frac{\partial U}{\partial x} = U, \quad x = 0, \quad t > 0 \\ (d) \quad & \frac{\partial U}{\partial x} = -U, \quad x = 1, \quad t > 0 \end{aligned} \tag{3.18}$$

usando um método explícito e empregando diferenças centrais para as condições de contorno.

Solução Deseja-se avaliar

$$\left. \frac{\partial U}{\partial t} \right|_{i,j} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_{i,j}$$

usando diferenças progressivas no tempo e centrais no espaço. Assim,

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

ou

$$u_{i,j+1} = ru_{i+1,j} + (1 - 2r)u_{i,j} + ru_{i-1,j}$$

onde $r = k/h^2$.

Em $x = 0$, tem-se $i = 0$, então

$$u_{0,j+1} = ru_{1,j} + (1 - 2r)u_{0,j} + ru_{-1,j} \quad (3.19)$$

Discretizando-se $U_x = U$ em $x = 0$ por diferenças centrais,

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{0,j} = u_{0,j} \Rightarrow u_{0,j} = \frac{u_{1,j} - u_{-1,j}}{2h} \quad (3.20)$$

Combinando-se (3.19) e (3.20), obtém-se

$$u_{0,j+1} = u_{0,j} + 2r(u_{1,j} - (1 + h)u_{0,j}) \quad (3.21)$$

Analogamente, para a fronteira $x = 1$, obtém-se:

$$u_{n,j+1} = u_{n,j} + r(u_{n-1,j} - 2u_{n,j} + u_{n+1,j}) \quad (3.22)$$

Discretizando-se $U_x = U$ em $x = 1$ por diferenças centrais, tem-se

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{n,j} = u_{n,j} \Rightarrow u_{n,j} = -\frac{u_{n+1,j} - u_{n-1,j}}{2h} \quad (3.23)$$

Combinando-se as equações (3.22) e (3.23), para eliminar o valor fictício $u_{n+1,j}$, obtém-se

$$u_{n,j+1} = u_{n,j} + 2r(u_{n-1,j} - (1 + h)u_{n,j}) \quad (3.24)$$

Em resumo,

$$\begin{cases} u_{0,j+1} = u_{0,j} + 2r(u_{1,j} - (1 + h)u_{0,j}), & i = 0 \\ u_{i,j+1} = ru_{i+1,j} + (1 - 2r)u_{i,j} + ru_{i-1,j}, & 1 \leq i \leq n - 1 \\ u_{n,j+1} = u_{n,j} + 2r(u_{n-1,j} - (1 + h)u_{n,j}), & i = n \end{cases} \quad (3.25)$$

Neste caso, o método é válido para $r \leq \frac{1}{2 + h^2}$.

A seguir são apresentadas duas soluções da equação (3.16) sujeita às condições inicial (3.17) e de contorno (3.18), obtidas usando o método descrito pela equação (3.25).

Caso 1: $r = 0.25$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{400}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{4}$.

A Figura 3.7 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

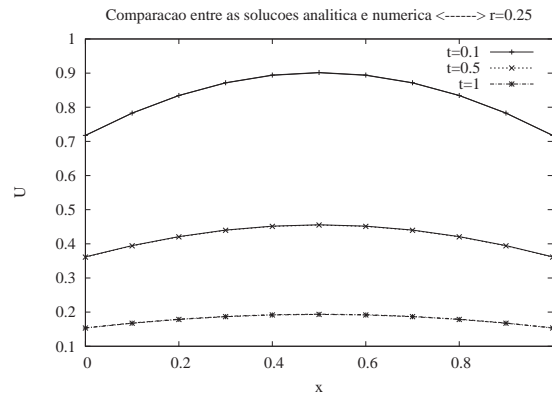


Figura 3.7: Comparação entre as soluções analítica e numérica, obtida pelo método explícito, nos tempos $t = 0.1$, $t = 0.5$ e $t = 1$. Neste caso, tem-se $r = 0.25$.

Observa-se a concordância entre as soluções analítica e numérica, e isso ocorre porque a condição $r \leq \frac{1}{2 + h^2}$ está satisfeita.

Caso 2: $r = 0.5$

Tomando-se $h = \frac{1}{10}$ e $k = \frac{1}{200}$, tem-se que $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{2}$.

A Figura 3.8 ilustra uma comparação qualitativa entre as soluções obtidas:

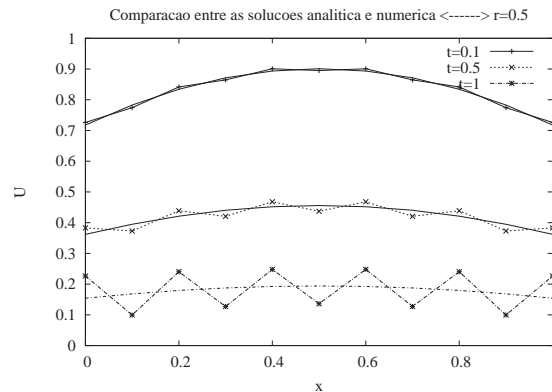


Figura 3.8: Comparação entre as soluções analítica e numérica, obtida pelo método explícito, nos tempos $t = 0.1$, $t = 0.5$ e $t = 1$. Neste caso, tem-se $r = 0.5$.

As oscilações presentes na solução numérica podem ser explicadas devido ao fato de $r = 0.5$ não satisfazer a condição de estabilidade $r \leq \frac{1}{2 + h^2}$.

3.5 Erro de Truncamento Local e Consistência

3.5.1 Erro de Truncamento Local

Considere u a solução da equação de diferenças finitas e U a solução da EDP. Seja $F_{i,j}(u) = 0$ uma função que aproxima a EDP no ponto (i, j) da malha. Por exemplo, para o método

explícito,

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

$$F_{i,j}(u) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} = 0 \quad (3.26)$$

Substituindo em (3.26) u por U , o valor de $F_{i,j}(U)$ é chamado de Erro de Truncamento Local, $ET_{i,j}$, no ponto (i, j) .

3.5.1.1 Exemplo:

Vamos calcular o ET no ponto (i, j) para o método de Crank-Nicolson.

Resolução

$$F_{i,j}(U) = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j} + U_{i+1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i-1,j+1}}{2h^2}$$

onde $U_{i,j} = U(ih, jk)$.

Lembrando que:

$$U(x+h) = U(x) + hU'(x) + \frac{h^2}{2!}U''(x) + \dots$$

$$U(x+h, y+k) = U(x, y) + hU_x(x, y) + kU_y(x, y) + \frac{1}{2!} \left(h^2U_{xx}(x, y) + 2hkU_{xy}(x, y) + k^2U_{yy}(x, y) \right) + \dots + \frac{1}{n!} \left[h^n \frac{\partial U}{\partial x^n}(x, y) + \binom{n}{1} h^{n-1} k \frac{\partial U}{\partial x^{n-1}y}(x, y) + \dots + k^n \frac{\partial U}{\partial y^n}(x, y) \right] + \dots$$

Tem-se:

$$ET_{i,j} = \frac{1}{k} \left(U + kU_t + \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} + \dots - U \right)_{i,j} - \frac{1}{2h^2} \left\{ \left(U + hU_x + \frac{h^2}{2!}U_{xx} + \frac{h^3}{3!}U_{xxx} + \dots \right) - 2U + \left(U - hU_x + \frac{h^2}{2!}U_{xx} - \frac{h^3}{3!}U_{xxx} + \dots \right) + \left(U + hU_x + kU_t + \frac{1}{2!} \left(h^2U_{xx} + 2hkU_{xt} + k^2U_{tt} \right) + \dots \right) + -2 \left(U + kU_t + \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} + \dots \right) + \left(U - hU_x + kU_t + \frac{1}{2!} \left(h^2U_{xx} - 2hkU_{xt} + k^2U_{tt} \right) + \dots \right) \right\}_{i,j} \quad (3.27)$$

donde

$$ET_{i,j} = -\frac{h^2}{12}U_{xxxx} - \frac{k^2}{4}U_{xtt} = O(h^2, k^2) \quad (3.28)$$

3.5.1.2 Exemplo

Calcule o erro de truncamento local do método explícito

$$F_{i,j}(u) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

usado para aproximar a equação

$$\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0 \quad (3.29)$$

no ponto (i, j) .

Solução Tem-se que:

$$T_{i,j} = F_{i,j}(U) = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}$$

Por expansão em Série de Taylor:

$$\begin{aligned} T_{i,j} = & \frac{1}{k} \left(U + kU_t + \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} + \dots - U \right) \Big|_{i,j} \\ & - \frac{1}{2h^2} \left\{ \left(U + hU_x + \frac{h^2}{2!}U_{xx} + \frac{h^3}{3!}U_{xxx} + \dots \right) \Big|_{i,j} \right. \\ & \left. - 2U_{i,j} + \left(U - hU_x + \frac{h^2}{2!}U_{xx} - \frac{h^3}{3!}U_{xxx} + \dots \right) \Big|_{i,j} \right\} \end{aligned} \quad (3.30)$$

donde

$$\begin{aligned} T_{i,j} = & U_t + \frac{k}{2}U_{tt} + \frac{k^2}{6}U_{ttt} - U_{xx} - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} + O(h^4, k^3) \\ = & \frac{k}{2}U_{tt} + \frac{k^2}{6}U_{ttt} - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} + O(h^4, k^3) \\ = & O(k, h^2) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Note que este método apresenta baixa ordem na discretização temporal. Além disso, a parte principal de $T_{i,j}$ na equação (3.29) é

$$\frac{k}{2}U_{tt} - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} \quad (3.32)$$

assim, é possível aumentar ordem de $T_{i,j}$. De fato:

$$U_{tt} = \frac{\partial U_t}{\partial t} \stackrel{3.29}{=} \frac{\partial U_{xx}}{\partial t} \stackrel{3.29}{=} \frac{\partial^2 U_{xx}}{\partial x^2} = U_{xxxx} \quad (3.33)$$

Então a parte principal é a parte principal de $T_{i,j}$ na equação (3.29) é

$$\left(\frac{k}{2} - \frac{h^2}{12}\right) U_{xxxx} \quad (3.34)$$

Portanto

$$T_{i,j} = \left(\frac{k}{2} - \frac{h^2}{12}\right) U_{xxxx} + O(h^4, k^2) \quad (3.35)$$

Desta forma, tem-se que se $\frac{k}{2} - \frac{h^2}{12} = 0$, isto é, $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{6}$ então, $T_{i,j} = O(h^4, k^2)$. A vantagem dessa condição é o aumento da ordem do método, entretanto, fazer $r = \frac{k}{h^2} = \frac{1}{6}$ impõe restrições severas sobre a malha, e para h pequenos, r torna-se muito pequeno e aumenta-se demasiadamente a quantidade de cálculos para se avançar ao longo do tempo.

3.5.2 Consistência

Seja $F_{i,j}(u) = 0$ a equação que aproxima a solução exata da EDP por diferenças finitas no ponto (i, j) da malha. O erro de truncamento local $T_{i,j}$ no ponto (i, j) da malha é definido por:

$$T_{i,j}(U) = F_{i,j}(u) \quad (3.36)$$

Definição 2 Uma equação de diferenças finitas é consistente com uma EDP se:

$$T_{i,j}(U) \rightarrow 0 \quad \text{quando } h \rightarrow 0 \quad \text{e } k \rightarrow 0$$

Desta forma, analisando-se o Exemplo 3.5.1.2, e admitindo-se que as derivadas presentes na equação (3.29) existem e são limitadas, então:

$$\lim_{h,k \rightarrow 0} T_{i,j} = 0 \quad (3.37)$$

Nesta situação, o método explícito é consistente com a EDP

$$\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0$$

3.5.2.1 Exemplo

A equação

$$\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0 \quad (3.38)$$

é aproximada no ponto (i, j) pelo esquema de diferenças finitas:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2k} - \frac{u_{i+1,j} - 2[\theta u_{i,j+1} + (1-\theta)u_{i,j-1}] + u_{i-1,j}}{h^2} = 0 \quad (3.39)$$

onde θ é um parâmetro entre 0 e 1. Estude a consistência desse esquema.

Resolução:

Tem-se que:

$$T_{i,j} = F_{i,j}(U) = \frac{U_{i+1,j} - 2[\theta U_{i,j+1} + (1-\theta)U_{i,j-1}] + U_{i-1,j}}{h^2} - U_{i,j-1}2k = 0$$

Por expansão em Série de Taylor:

$$\begin{aligned} T_{i,j} &= \frac{1}{2k} \left(U + kU_t + \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} + O(k^4) - U + kU_t - \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} - O(k^4) \right)_{i,j} \\ &\quad - \frac{1}{h^2} \left\{ U + hU_x + \frac{h^2}{2!}U_{xx} + \frac{h^3}{3!}U_{xxx} + O(h^4) - 2\theta \left(U + kU_t + \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} + O(k^4) \right) + \right. \\ &\quad \left. - 2(1-\theta) \left(U + kU_t + \frac{k^2}{2!}U_{tt} + \frac{k^3}{3!}U_{ttt} + O(k^4) \right) + U - hU_x \frac{h^2}{2!}U_{xx} - \frac{h^3}{3!}U_{xxx} + O(h^4) \right\}_{i,j} \\ &= \frac{1}{2k} \left(2kU_t + \frac{k^3}{3}U_{ttt} + \frac{2k^5}{5!}U_{ttttt} + O(k^7) \right)_{i,j} - \frac{1}{h^2} \left\{ h^2U_{xx} + \frac{2h^4}{4!}U_{xxxx} + O(h^6) \right. \\ &\quad \left. - (4\theta - 2)kU_t - k^2U_{tt} - (4\theta - 2)\frac{k^3}{6}U_{ttt} - \frac{2}{4!}k^4U_{tttt} + O(k^5) \right\} \\ &= U_t - U_{xx} + \frac{1}{h^2}(4\theta - 2)kU_t + \frac{k^2}{h^2}U_{tt} + \frac{1}{6} \left(k^2 - (4\theta - 2)\frac{k^3}{h^2} \right) U_{ttt} + \\ &\quad - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} + \frac{k^4}{12h^2}U_{tttt} + \frac{k^4}{5!}U_{ttttt} + O \left(\frac{k^3}{h^2}, k^4, h^4 \right) \\ &= U_t - U_{xx} + \frac{k^2}{6}U_{ttt} - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} + \frac{2k}{h^2}(2\theta - 1)U_t + \frac{k^2}{h^2}U_{tt} + O \left(\frac{k^3}{h^2}, k^4, h^4 \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

Há dois casos a analisar, quando $k = rk$ e quando $k = rh^2$.

Caso 1: $k = rh$

Nesse caso,

$$T_{i,j} = U_t - U_{xx} + \frac{r^2h^2}{6}U_{ttt} - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} + \frac{2r}{h}(2\theta - 1)U_t + r^2U_{tt} + O(rh, r^4h^4, h^4) \quad (3.41)$$

Quando $h \rightarrow 0$ e $k \rightarrow 0$, tem-se:

$$T_{i,j} = U_t - U_{xx} + \frac{2r}{h}(2\theta - 1)U_t + r^2U_{tt} \quad (3.42)$$

Se $\theta \neq \frac{1}{2}$, o terceiro termo tende ao infinito, e se $\theta = \frac{1}{2}$, então

$$T_{i,j} = \frac{r^2 h^2}{6} U_{ttt} + r^2 U_{tt} \quad (3.43)$$

e, portanto,

$$T_{i,j} \rightarrow r^2 U_{tt} \quad (3.44)$$

Portanto, o esquema numérico (3.38) é sempre inconsistente com a EDP (3.39), quando $k = rh^2$.

Caso 2: $k = rh^2$

Nesse caso,

$$T_{i,j} = U_t - U_{xx} + \frac{r^2 h^4}{6} U_{ttt} - \frac{h^2}{12} U_{xxxx} + 2r(2\theta - 1)U_t + r^2 h^2 U_{tt} + O(r^3 h^4, r^4 h^4, h^4) \quad (3.45)$$

Quando $h \rightarrow 0$ e $k \rightarrow 0$, tem-se:

$$T_{i,j} = U_t - U_{xx} + 2r(2\theta - 1)U_t \quad (3.46)$$

Se $\theta = \frac{1}{2}$, então

$$T_{i,j} \rightarrow 0 \quad (3.47)$$

e o esquema (3.39) é consistente com a equação (3.38). Caso contrário,

$$T_{i,j} = U_t - U_{xx} + 2r(2\theta - 1)U_t \quad (3.48)$$

e o esquema (3.39) não é consistente com a equação (3.38), mas sim com a equação:

$$U_t - U_{xx} + 2r(2\theta - 1)U_t = 0$$

Nesse caso, o esquema numérico (3.38) não é consistente com a EDP (3.39).

3.6 Convergência e Estabilidade

Quais condições devem ser satisfeitas para que a solução da equação de diferenças finitas seja uma boa aproximação para a solução da EDP parabólica ou hiperbólica?

3.6.1 Convergência

Em geral, a equação de diferenças (ou a equação discretizada) é dita ser convergente se o erro de discretização tende a zero quando as malhas $h \rightarrow 0$ e $k \rightarrow 0$.

Na verdade, o mínimo que se deseja, após ter sido gasto um tempo escrevendo um programa de computador para resolver uma EDP, é que sejamos capazes de obter alguma solução, o que só será possível se tivermos um esquema estável, isto é, capaz de impedir o crescimento de erros provenientes de arredondamento, truncamento e outros enganos.

O problema de convergência é difícil de ser resolvido pois a expressão final do erro de discretização é usualmente conhecida em função de derivadas incógnitas, para as quais nenhum limitante pode ser estimado. Felizmente, no caso linear, o teorema de equivalência de Lax é capaz de nos auxiliar nesse ponto.

Teorema 1 (da Equivalência de Lax) *Para um problema linear de valor inicial e de contorno bem posto e um esquema de diferenças finitas que satisfaz a condição de consistência, uma condição necessária e suficiente para a convergência é a estabilidade numérica.*

Podemos exprimir o teorema de Lax no famoso *slogan* :

$$\text{convergência} = \text{consistência} + \text{estabilidade}$$

3.6.2 Estabilidade

3.6.2.1 Motivação

Seja o esquema de diferenças finitas:

$$y_{n+1} = ax_n + b_n \tag{3.49}$$

onde a é uma constante e x_0 é dado.

Seja $y_0 = x_0 + \varepsilon$ com ε uma perturbação no dado inicial x_0 . Assim,

$$\begin{aligned} y_1 &= ay_0 + b_0 = a(x_0 + \varepsilon) + b_0 = ax_0 + b_0 + a\varepsilon = x_1 + a\varepsilon \\ y_2 &= ay_1 + b_1 = a(x_1 + a\varepsilon) + b_1 = ax_1 + b_1 + a^2\varepsilon = x_2 + a^2\varepsilon \\ &\vdots \\ y_{n+1} &= x_{n+1} + a^{n+1}\varepsilon \end{aligned} \tag{3.50}$$

Assim,

$$|y_{n+1} - x_{n+1}| = |a^{n+1}\varepsilon| \leq |a^{n+1}| |\varepsilon| \tag{3.51}$$

donde

$$|E_{n+1}| \leq |a^{n+1}| |\varepsilon| \tag{3.52}$$

Assim, se $|a^{n+1}| \leq 1$ então $|E_{n+1}| \rightarrow 0$ e caso contrário, o erro cresce infinitamente.

Estabilidade no contexto acima se refere ao crescimento ou decaimento dos erros decorrentes das várias operações aritméticas associadas com a solução das equações algébricas.

Em tese, estas relações algébricas admitem uma solução; entretanto, esquemas instáveis podem impedir sua obtenção por não convergirem.

Deve ficar claro que o teorema de equivalência de Lax é extremamente importante, pois ele nos indica que a solução a ser encontrada será a correta, desde que algumas condições sejam satisfeitas (consistência e estabilidade).

3.6.2.2 Norma de Matrizes

Dado um vetor $x \in \mathbb{R}^n$, $x^t = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ define-se a norma de x a função:

$$\begin{aligned} \|\cdot\| : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R}^+ \\ x &\rightarrow \|x\| \end{aligned} \tag{3.53}$$

São válidas as seguintes propriedades:

- $\|x\| \geq 0$ e $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$;
- $\|cx\| = |c| \|x\|$;
- $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

Dentre as normas mais conhecidas, tem-se:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$;
- $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\}$;
- $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$;

O conjunto das matrizes de ordem n com as operações de soma e produto por um escalar forma um espaço vetorial E de dimensão $n \times n$. Para uma matriz A de ordem n , são válidas as seguintes propriedades:

- $\|A\| \geq 0$ e $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$;
- $\|cA\| = |c| \|A\|$;
- $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$;
- $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$

Dentre as normas mais conhecidas, tem-se:

- $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \left\{ \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right\}$;

- $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right\}$;
- $\|A\|_E = \left(\sum_{i=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$;
- $\|A\|_2 = \max_{1 \leq i \leq n} \{|\lambda_i|\}$, λ_i : autovalores de A .

Notação: $\|A\|_2 = \rho(A)$, raio espectral.

3.6.2.3 Um condição necessária e suficiente para a estabilidade

Seja a equação de diferenças

$$b_{i-1}u_{i-1,j+1} + b_i u_{i,j+1} + b_{i+1}u_{i+1,j+1} = c_{i-1}u_{i-1,j} + c_i u_{i,j} + c_{i+1}u_{i+1,j}$$

para resolver uma EDP no retângulo da Figura 3.9:

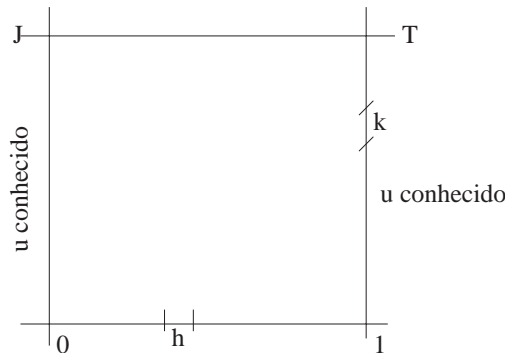


Figura 3.9: Tem-se $x_i = ih$, $y_j = jk$, $Nh = 1$ e $Jk = T$.

Assim,

$$\begin{aligned} i = 1 &= b_0 u_{0,j+1} + b_1 u_{1,j+1} + b_2 u_{2,j+1} = c_0 u_{0,j} + c_1 u_{1,j} + c_2 u_{2,j} \\ i = 2 &= b_1 u_{1,j+1} + b_2 u_{2,j+1} + b_3 u_{3,j+1} = c_1 u_{1,j} + c_2 u_{2,j} + c_3 u_{3,j} \\ &\vdots \end{aligned} \tag{3.54}$$

Sejam os vetores U_{j+1} , U_j e d definidos por:

$$u_{j+1} \begin{pmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ u_{3,j+1} \\ \vdots \\ u_{N-2,j+1} \\ u_{N-1,j+1} \end{pmatrix} = u_j \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ u_{3,j+1} \\ \vdots \\ u_{N-2,j} \\ u_{N-1,j} \end{pmatrix} = d = \begin{pmatrix} c_0 u_{0,j} - b_0 u_{0,j+1} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ c_{N,N} - b_N u_{N,j+1} \end{pmatrix} \tag{3.55}$$

e as matrizes B e C , dadas por:

$$\begin{bmatrix} b_1 & b_2 & & & & \\ b_1 & b_2 & b_3 & & & \\ & b_2 & b_3 & b_4 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & b_{N-3} & b_{N-2} & b_{N-1} & \\ & & & b_{N-2} & b_{N-1} & \end{bmatrix} C = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & & & & \\ c_1 & c_2 & c_3 & & & \\ & c_2 & c_3 & c_4 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & c_{N-3} & c_{N-2} & c_{N-1} \\ & & & & c_{N-2} & c_{N-1} \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

Então

$$\begin{aligned} BU_{j+1} &= CU_j + d_j \stackrel{\exists B^{-1}}{\Leftrightarrow} \\ U_{j+1} &= \underbrace{B^{-1}C}_{A} U_j + \underbrace{B^{-1}d_j}_{f_j} \\ &= AU_j + F_j \quad j = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.57)$$

Aplicando-se recursivamente a equação (3.57), obtém-se

$$U_j = A^j U_0 + A^{j-1} f_0 + A^{j-2} f_1 + \dots + f_{j-1} \quad (3.58)$$

Seja U_0^* uma perturbação de U_0 , então

$$U_j^* = A^j U_0^* + A^{j-1} f_0 + A^{j-2} f_1 + \dots + f_{j-1} \quad (3.59)$$

Lembrando que $e_j = U_j^* - U_j$, então, fazendo (3.59) - (3.58), obtém-se:

$$e_j = U_j^* - U_j = A^j (U_0^* - U_0) = A^j e_0 \quad (3.60)$$

então,

$$\|e_j\| \leq \|A^j\| \|e_0\| \leq \|A\|^j \|e_0\| \quad (3.61)$$

Segue que a condição de estabilidade de Lax-Richtmyer é satisfeita se

$$\|A\| < 1$$

Esta é uma condição necessária e suficiente para a estabilidade das equações de diferenças quando a solução da EDP não aumenta quando t aumenta.

3.6.2.3.1 Método Explícito

Considere o clássico esquema explícito,

$$u_{i,j+1} = ru_{i-1,j} + (1 - 2r)u_{i,j} + ru_{i+1,j}$$

para o qual a matriz A , de dimensão $(N - 1) \times (N - 1)$ é:

$$\begin{bmatrix} (1 - 2r) & r & & & & & \\ & r & (1 - 2r) & r & & & \\ & & r & (1 - 2r) & r & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & r & (1 - 2r) & r & \\ & & & & r & (1 - 2r) & \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

onde $r = \frac{k}{h^2} > 0$, e assume-se que os valores de contorno são conhecidos.

Norma 1:

Tem-se que $\|A\|_1 = |r| + |1 - 2r| + |r| = 2r + |1 - 2r|$. Impondo $\|A\| < 1$,

$$2r + |1 - 2r| < 1 \Rightarrow r \leq \frac{1}{2}$$

e, portanto, o método explícito é estável para $r \leq \frac{1}{2}$.

Quando a expressão da equação de diferenças,

$$u_j = U_j - e_j$$

é substituída no esquema de diferenças finitas, conclui-se que o erro e_j também satisfaz tal equação. Na literatura aparece também a seguinte definição para estabilidade: “Estabilidade consiste em encontrar condições sob as quais o erro e_j permanece limitado quando $j \rightarrow \infty$ ”.

Tem-se que para a matriz de amplificação A , o método será estável se $\|A\| < 1$. Desta forma, sendo $\rho(A)$ o raio espectral, λ_i os autovalores e x_i os autovalores associados de A , tem se:

$$Ax_i = \lambda_i x_i$$

Assim,

$$|\lambda_i| \|x_i\| = \|Ax_i\| \leq \|A\| \|x_i\| \quad i = 1, \dots, n$$

$$|\lambda_i| \leq \|A\|$$

Em particular, $\max_i \{|\lambda_i|, \lambda_i = \text{autovalor}\} \leq \|A\|$ e como $\rho(A) = \max_i \{|\lambda_i|, \lambda_i = \text{autovalor}\}$, então $\rho(A) \leq \|A\|$.

Propriedade: Se a matriz A de ordem n é da forma:

$$A = \begin{bmatrix} a & b & & & \\ c & a & b & & \\ & c & a & b & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & c & a & b \\ & & & & c & a \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

então os autovalores de A são dados por $\lambda_s = a + 2\sqrt{bc} \cos\left(\frac{s\pi}{n+1}\right)$.

Assim, os autovalores da matriz em (3.61) são da forma:

$$\lambda_s = (1 - 2r) + 2\sqrt{rr} \cos\left(\frac{s\pi}{n}\right) = 1 - 2r \left(1 - \cos\left(\frac{s\pi}{n}\right)\right)$$

Lembrando que $\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) = \frac{1 - \cos(\beta)}{2}$, então $\lambda_s = 1 - 4r \sin^2\left(\frac{s\pi}{2n}\right)$, $1, \dots, n-1$

Norma 2:

Tem-se que $\|A\|_2 = \rho(A) = |\lambda_s|$. Impondo $\|A\| < 1$, tem-se:

$$\left|1 - 4r \sin^2\left(\frac{s\pi}{2n}\right)\right| \Rightarrow r \leq \frac{1}{\sin^2\left(\frac{s\pi}{2n}\right)}$$

Quando $r \rightarrow 0$ ou, equivalentemente, $n \rightarrow \infty$, e em particular, para $s = n-1$, tem-se

$$r \leq \frac{1}{\sin^2\left(\frac{(n-1)\pi}{2n}\right)}$$

Como,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sin^2\left(\frac{(n-1)\pi}{2n}\right) = \sin^2\pi \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(n-1)}{2n} = \sin^2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$$

então,

$$r \leq \frac{1}{2}$$

Portanto, conclui-se que o método explícito é estável para $r \leq \frac{1}{2}$, ou seja, este método é condicionalmente estável.

3.6.2.3.2 Método de Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson é consistente e além disso tem-se que:

$$\|A\|_2 = \rho(A) = \max \left| \frac{1 - 2r \sin^2\left(\frac{s\pi}{2n}\right)}{1 + 2r \sin^2\left(\frac{s\pi}{2n}\right)} \right| < 1$$

ou seja, o método é incondicionalmente estável. Logo pelo Teorema da Equivalência de Lax, o método é convergente.

3.6.3 Critérios de Estabilidade

3.6.3.1 Critério da Matriz

Consideremos o método explícito $u_{j+1} = Au_j + b_j$ com condições de contorno conhecidas, onde

$$A = \begin{bmatrix} (1-2r) & r & & & & \\ r & (1-2r) & r & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & r & (1-2r) & r \\ & & & & r & (1-2r) \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

Conforme mostrado pela equação (3.61), se o vetor de valores iniciais u_0 for perturbado para u_0^* , e se nenhuma perturbação adicional ou erros forem introduzidos nos cálculos subsequentes, o vetor de perturbação:

$$e = u^* - u$$

será propagado nos tempos seguintes de acordo com a equação:

$$e_j = A^j e_0$$

Para malhas de comprimentos h e k fixos, as equações de diferenças serão estáveis se e_j permanece limitado conforme j cresce indefinidamente. Isto pode ser investigado expressando o vetor das perturbações iniciais em termos de autovetores de A , que permanecem fixos conforme j cresce.

Se A é não defectiva, isto é, tem $n - 1$ autovetores linearmente independentes, então podemos expressar e_0 como uma combinação linear deles, a saber

$$e_0 = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i v_i \quad \alpha_i \text{ constantes}$$

A perturbação no nível $k = 1$, resultante da perturbação inicial é:

$$e_1 = Ae_0 = A \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i v_i \right) = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i Av_i = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \lambda_i v_i$$

Analogamente,

$$e_j = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \lambda_i^j v_i$$

Portanto, as perturbações não crescerão exponencialmente com j se

$$\rho(A) = \max_i \{|\lambda_i|, \lambda_i = \text{autovalor}\} \leq 1 \quad i = 1, \dots, n - 1$$

3.6.3.2 Critério de Estabilidade para Condições de Contorno tipo Newmann

Considere a equação

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (3.65)$$

e as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial x} &= h_1(U - v_1), \quad x = 0, \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial U}{\partial x} &= -h_2(U - v_2), \quad x = 1, \quad t \geq 0 \end{aligned} \quad (3.66)$$

onde h_1, h_2, v_1 e v_2 são constantes, $h_1, h_2 \geq 0$.

Aproximando $\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=0}$ por diferenças para frente, $\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=1}$ por diferenças para trás e $U_t = U_{xx}$ pelo método explícito em $0 < x < 1$, a matriz de amplificação é

$$A = \begin{bmatrix} 1 - 2r(1 + h_1\delta x) & r & & & & & & \\ & r & (1 - 2r) & r & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & r & (1 - 2r) & r & & \\ & & & & r & 1 - 2r(1 + h_2\delta x) & & \end{bmatrix} \quad (3.67)$$

Impondo $\|A\|_\infty < 1$, tem-se para a primeira linha que:

$$|1 - 2r(1 + h_1\delta x)| + |2r| \leq 1 \Rightarrow r \leq \frac{1}{2 + h_1\delta x}$$

Para as linhas intermediárias, $r \leq \frac{1}{2}$ e para a última linha, $r \leq \frac{1}{2 + h_2\delta x}$. Logo,

$$r = \min \left\{ \frac{1}{2 + h_2\delta x}, \frac{1}{2 + h_1\delta x}, \frac{1}{2 + h_2\delta x} \right\}$$

3.6.3.3 Critério de Von Neumann ou Método de Fourier

O critério de matriz visto anteriormente é de pouco uso na prática. O critério de Von Neumann é simples e bastante utilizado na determinação da estabilidade de um esquema numérico. Ele é baseado no princípio da superposição, isto é, o erro global é a soma de erros mais simples, também conhecidos por harmônicos.

Nesse método, é de interesse a estabilidade de uma equação de diferenças no tempo $0 \leq t \leq T = Jk$, com T finito, quando $\delta x = h \rightarrow 0$ e $\delta y = k \rightarrow 0$, isto é, quando $J \rightarrow \infty$.

O método de Fourier, também conhecido como método de Von Neumann, expressa os valores iniciais nos pontos da malha ao longo de $t = 0$ em termos de uma série finita de Fourier, e então considera o crescimento do erro global de uma função que se reduz para essa série em $t = 0$, por um método de separação de variáveis idêntico aos comumente usados para resolver equações diferenciais parciais.

A série de Fourier pode ser expressa em termos de senos e cossenos, e também em termos de exponencial complexa, o que facilita os cálculos, ou seja, $\sum a_n \cos(n\pi x/l)$ ou $\sum b_n \sin(n\pi x/l)$ são substituídos equivalentemente por $\sum A_n e^{in\pi x/l}$, onde $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária e l é o intervalo em x no qual a função é definida. Claramente, a notação usual $u_{i,j}$ deve ser substituída por $u_{p,q} = u(ph, qk)$. Em termos dessa notação,

$$\sum A_n e^{in\pi x/l} = \sum A_n e^{in\pi ph/Nh} = \sum A_n e^{i\beta_n ph}$$

onde $\beta_n = n\pi/Nh$ e $Nl = h$.

Os valores iniciais nos pontos da malha ao longo de $t = 0$ são definidos como

$$u_{p,0} = u(ph, 0) = \sum_n^N A_n e^{i\beta_n ph}, \quad p = 0, 1, \dots, N \quad (3.68)$$

Esta equação constitui em um sistema de $N + 1$ equações lineares a $N + 1$ incógnitas A_0, A_1, \dots, A_N ($Ax = b$) cuja matriz dos coeficientes é do tipo Vandermond e, portanto, não singular. Isto mostra que os valores iniciais pode de fato ser expressos na forma da equação (3.68). Desta forma, é possível investigar a propagação de um único valor inicial (ou um único harmônico) do tipo $e^{i\beta_n ph}$.

Para investigar a propagação deste termos, quando t cresce, faz-se:

$$u_{p,q} = e^{i\beta x} e^{\alpha t} = e^{i\beta ph} e^{\alpha qk} = e^{i\beta ph} (e^{\alpha k})^q$$

Chamando $\xi = e^{\alpha k}$ o fator de amplificação,

$$u_{p,q} = e^{i\beta ph} \xi^q, \quad i = \sqrt{-1}$$

Pela definição de Lax e Richtmyer, a equação de diferença é estável se $|u_{p,q}|$ permanece limitado $\forall q \leq J$ quando $h, k \rightarrow 0$. Desta forma, a condição para a estabilidade é $|\xi| \leq 1$.

3.6.3.3.1 Exemplo: Investigue a estabilidade do esquema:

$$\frac{1}{k}(u_{p,q+1} - u_{p,q}) = \frac{1}{h^2}(u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1})$$

para resolver a equação $U_t = U_{xx}$.

Resolução:

Tem-se que $u_{p,q} = e^{i\beta ph} \xi^q$, então

$$\begin{aligned} \frac{1}{k}(e^{i\beta ph} \xi^{q+1} - e^{i\beta ph} \xi^q) &= \frac{1}{h^2}(e^{i\beta(p-1)h} \xi^{q+1} - 2e^{i\beta ph} \xi^{q+1} + e^{i\beta(p+1)h} \xi^{q+1}) \\ \frac{e^{i\beta ph} \xi^q}{k}(\xi - 1) &= \frac{e^{i\beta ph} \xi^q}{h^2}(e^{-i\beta h} \xi - 2\xi + e^{i\beta h} \xi) \\ \xi - 1 &= r\xi(e^{-i\beta h} - 2 + e^{i\beta h}) \\ \xi - 1 &= r\xi(2 \cos(\beta h) - 2) \\ \xi - 1 &= 2r\xi(2 \operatorname{sen}^2(\frac{\beta h}{2})) \\ \xi &= \frac{1}{1 + 4r \operatorname{sen}^2(\frac{\beta h}{2})} \leq 1 \end{aligned} \tag{3.69}$$

e, portanto, o método é incondicionalmente estável.

3.6.3.3.2 Exemplo: Investigue a estabilidade do esquema

$$\frac{1}{k}(u_{p,q+1} - u_{p,q}) = \frac{a}{h^2}(u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q}) + bu_{p,q}$$

para resolver a equação $U_t = aU_{xx} + bU$.

Resolução:

Temos que

$$\frac{1}{k}(\xi - 1) = \frac{a}{h^2}(e^{-i\beta h} - 2 + e^{i\beta h}) + b$$

Assim,

$$\begin{aligned} \xi &= ar(e^{i\beta h} + e^{-i\beta h} - 2) + kb + 1 \\ &= ar(2 \cos(\beta h) - 2) + kb + 1 \\ &= 1 - 4ar \operatorname{sen}^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + kb. \end{aligned}$$

Impondo $|\xi| \leq 1$, obtemos

$$|\xi| = \left|1 - 4ar \operatorname{sen}^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + kb\right| \leq \left|1 - 4ar \operatorname{sen}^2\left(\frac{\beta h}{2}\right)\right| + kb.$$

Se $|1 - 4ar \operatorname{sen}^2(\frac{\beta h}{2})| < 1$, temos

$$-1 \leq 1 - 4ar \operatorname{sen}^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) \leq 1.$$

Conclusão: O método é estável se $r < 1/2a$ e se, além disso, ele for consistente com $U_t = aU_{xx} + bU$ então será convergente pelo teorema de Lax.

3.6.3.3 Exemplo: A equação $aU_x + bU_t + c$ é aproximada pelo esquema de Crank-Nicolson:

$$(b + ap)u_{i+1,j+1} + (b - ap)u_{i,j-1} - (b - ap)u_{i+1,j} - (b + ap)u_{i,j} - 2kc = 0, \quad p = \frac{k}{h}.$$

Analisar sua estabilidade. **Resolução:** Temos que

$$(b + ap)e^{i\beta h}\xi + (b - ap)\xi - (b - ap)e^{i\beta h} - (b + ap) - 2kc = 0.$$

Daí,

$$[(b + ap)e^{i\beta h} + (b - ap)]\xi = (b - ap)e^{i\beta h} + (b + ap) + 2kc,$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{(b - ap)e^{i\beta h} + (b + ap) + 2kc}{(b + ap)e^{i\beta h} + (b - ap)} \\ &= \frac{b(e^{i\beta h} + 1) - ap(e^{i\beta h} - 1) + 2kc}{b(e^{i\beta h} + 1) + ap(e^{i\beta h} - 1)} + 2kc \end{aligned}$$

Logo,

$$|\xi| \leq \left| \frac{b(e^{i\beta h} + 1) - ap(e^{i\beta h} - 1) + 2kc}{b(e^{i\beta h} + 1) + ap(e^{i\beta h} - 1)} \right| + \mathcal{O}(k),$$

onde $\mathcal{O}(k) = \frac{2kc}{b(e^{i\beta h} + 1) + ap(e^{i\beta h} - 1)}$.

Devemos verificar

$$\left| \frac{b(e^{i\beta h} + 1) - ap(e^{i\beta h} - 1) + 2kc}{b(e^{i\beta h} + 1) + ap(e^{i\beta h} - 1)} \right|.$$

Sabemos que

$$\begin{aligned} e^{i\beta h} + 1 &= 1 + \cos(\beta h) + i \operatorname{sen}(\beta h) = 2 \cos^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + i \operatorname{sen}(\beta h) \\ &= 2 \cos^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + 2i \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) \\ &= 2 \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) \right] = 2 \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) e^{i\frac{\beta h}{2}}. \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
e^{i\beta h} - 1 &= \cos(\beta h) + i \operatorname{sen}(\beta h) - 1 = -(1 - \cos(\beta h)) + i \operatorname{sen}(\beta h) \\
&= -2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + i \operatorname{sen}(\beta h) \\
&= 2 \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) \left[-\operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) + i \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) \right] \\
&= 2 \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) \left\{ -\operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) + i \left[e^{\frac{i\beta h}{2}} - i \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) \right] \right\} \\
&= 2 \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) i e^{\frac{i\beta h}{2}}.
\end{aligned}$$

Então, $\forall a, p, b$, temos

$$\left| \frac{2b \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) e^{\frac{i\beta h}{2}} - 2ap \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) i e^{\frac{i\beta h}{2}}}{2b \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) e^{\frac{i\beta h}{2}} + 2ap \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) i e^{\frac{i\beta h}{2}}} \right| = \left| \frac{2b \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) - 2ap \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) i}{2b \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) + 2ap \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) i} \right| = \frac{\varepsilon_1}{\bar{\varepsilon}_1} \leq 1.$$

Logo, observa-se que o método é incondicionalmente estável.

3.7 Exercícios

1. Implementar o método explícito da Seção 3.2.1 para resolver a equação do calor $U_t = U_{xx}$ sujeita às seguintes condições iniciais e de contorno

$$U = 2x, \quad 0 \leq x \leq 0.5, \quad t = 0$$

$$U = 2(1 - x), \quad 0.5 \leq x \leq 1, \quad t = 0$$

$$U = 0, \quad x = 0, \quad t > 0$$

$$U = 0, \quad x = 1, \quad t > 0$$

usando:

- (a) $r = 0.01$;
- (b) $r = 0.1$;
- (c) $r = 0.5$;
- (d) $r = 1$;

e comparar com a solução analítica dada pela equação (3.8).

2. Implementar o método de Crank-Nicolson da Seção 3.3.1, aplicando-o à equação do calor $U_t = U_{xx}$ sujeita às seguintes condições iniciais e de contorno

$$U = 2x, \quad 0 \leq x \leq 0.5, \quad t = 0$$

$$U = 2(1 - x), \quad 0.5 \leq x \leq 1, \quad t = 0$$

$$U = 0, \quad x = 0, \quad t > 0$$

$$U = 0, \quad x = 1, \quad t > 0$$

usando:

(a) $r = 0.1$;

(b) $r = 0.5$;

(c) $r = 1$;

(d) $r = 10$;

e compare com a solução analítica dada pela equação (3.8).

3. Resolva a equação $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ satisfazendo as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$U = 1, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = U, \quad x = 0, \quad t > 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = -U, \quad x = 1, \quad t > 0$$

usando um método explícito e empregando diferenças centrais para as condições de contorno. Considere:

(a) $r = 0.25$;

(b) $r = 0.5$;

4. A equação $U_t - U_{xx} = 0$ é aproximada no ponto (ih, jk) pela equação de diferença:

$$\theta \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2k} \right) + (1 - \theta) \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{k} \right) - \frac{1}{h^2} \delta_x^2 u_{i,j} = 0$$

onde $\delta_x^2 = u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}$. Mostre que o erro de truncamento local neste ponto é dado por $T_{i,j} = -\frac{1}{2}k(1 - \theta)U_{tt} - \frac{1}{12}h^2U_{xxxx} + O(k, h^2)$ e encontre o valor de θ que reduz esse erro para $O(k^2, h^4)$.

5. Mostre que o erro de truncamento local no ponto (ih, jk) da aproximação de Crank-Nicolson para $U_t = U_{xx}$ é $O(h^2, k^2)$.

6. A equação $\alpha U_t + U_x - f(x, t) = 0$, α constante, é aproximada no ponto (ih, jk) no plano xt pelo esquema de diferenças finitas:

$$\frac{\alpha}{k} \left[u_{i,j+1} - \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j}}{2} \right] + \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} \right) - f_{i,j} = 0$$

Investigue a consistência desse esquema para:

- (a) $k = rh$;
- (b) $k = rh^2$;

com $r > 0$ constante.

7. A equação $U_t = aU_{xx} - \beta U$, $0 < x < 1$, $t > 0$, onde α e β são constantes reais positivas, é aproximada no ponto (ih, jk) pelo esquema de diferenças explícito

$$\frac{1}{k} \Delta_t u_{i,j} = \frac{a}{h^2} \delta_x^2 u_{i,j} - \beta u_{i,j}$$

Dado que U tem valores iniciais contínuos ao longo do intervalo $0 \leq x \leq 1$, $quadt = 0$, valores de contorno conhecidos em $x = 0$ e $x = 1$ e que $Nh = 1$, encontre um limitante para $r = \frac{k}{h^2}$ de estabilidade.

8. A equação $U_t = aU_{xx}$, $0 < x < 1$, $t > 0$, onde $a > 0$, é aproximada no ponto (ih, jk) pelo esquema de diferenças regressivas completamente implícito (backward Euler):

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = ra(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1})$$

onde $r = \frac{k}{h^2}$ e $Nh = 1$. Assumindo que os valores iniciais e de contorno são conhecidos, prove que:

- (a) o esquema é incondicionalmente estável;
- (b) o erro de truncamento local é $O(k, h^2)$.

9. A equação $U_t = U_{xx}$, $0 < x < 1$, $t > 0$, é aproximada no ponto (ih, jk) pelo esquema

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = r[\theta(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}) + (1 - \theta)(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j})]$$

onde $r = \frac{k}{h^2}$, $0 \leq \theta \leq 1$ e $Nh = 1$. Assumindo que os valores iniciais e de contorno são conhecidos, prove que:

- (a) o esquema é incondicionalmente estável no sentido de Lax-Ritchmyer para $0.5 \leq \theta \leq 1$ e estável para $0 \leq \theta \leq 0.5$ quando $r \leq \frac{1}{2(1 - 2\theta)}$;
- (b) o método de Von Neumann fornece o mesmo resultado.

10. Use o método de série de Fourier para provar que:

- (a) A aproximação progressiva explícita

$$u_{p,q+1} - u_{p,q} = r(u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q})$$

para a equação $U_t = U_{xx}$ é estável para $r \leq \frac{1}{2}$;

(b) A aproximação central explícita (Método de Richardson)

$$u_{p,q+1} - u_{p,q-1} = 2r(u_{p-1,q} - 2u_{pq} + u_{p+1,q})$$

para a equação $U_t = U_{xx}$ é instável para $r \geq 0$;

(c) A aproximação implícita

$$u_{p,q+1} - 2u_{pq} + u_{p,q+1} = \frac{1}{2}r^2[(u_{p-1,q} - 2u_{pq} + u_{p+1,q}) + (u_{p-1,q-1} - 2u_{p,q-1} + u_{p+1,q-1})]$$

para a equação hiperbólica $U_{tt} = U_{xx}$ é estável para $r \geq 0$, $r = \frac{k}{h}$.

11. A equação $U_t = U_{xx} + \frac{1}{x}U_x$, $0 < x < 1$, $t > 0$ é aproximada no ponto (ph, qk) pela equação de diferenças

$$\frac{1}{k}\Delta_t u_{p,q} = \frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_{p,q} + \frac{1}{2xh}(\Delta_x u_{p,q} \nabla_x u_{p,q})$$

use o método de Von Neumann para mostrar que as equações de diferenças são estáveis para $x > 0$ quando

$$\frac{k}{h^2} \leq \frac{2}{4 + p^{-1}}$$

Em $x = 0$, avalie esta equação dado que $U_x = 0$ em $x = 0$, $t > 0$ e U é constante em $x = 1$.

Equações Hiperbólicas

A equação hiperbólica principal (nosso modelo) é a equação unidimensional da onda:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad \text{ou} \quad U_{tt} = U_{xx}$$

onde $U = U(x, t)$.

Para se ter um problema bem definido, devemos prescrever condições iniciais. Por exemplo: $U(x, 0) = f$ e $U_t(x, 0) = g$.

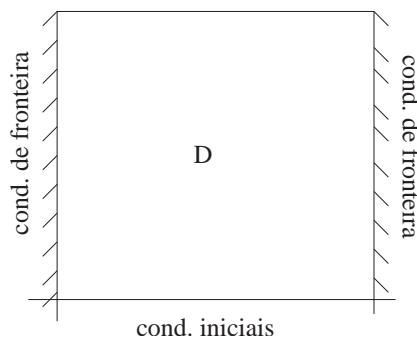


Figura 4.1:

Note que, agora são necessárias duas condições iniciais, ao passo que no modelo das equações parabólicas (equação do calor) uma condição era suficiente.

Podemos fatorar o operador

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) U = \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) U = 0$$

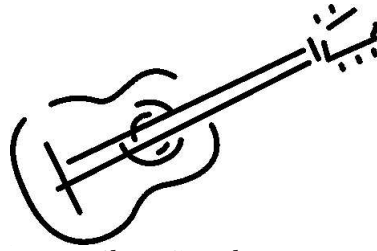


Figura 4.2: $U_{tt} = U_{xx}$ descreve as vibrações de uma corda sendo que neste caso, $U = U(x, t)$ é o deslocamento a partir do repouso.

Isto nos leva a considerar um modelo ainda mais simples, isto é,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial x} \quad \text{ou} \quad U_t = U_x.$$

Esta equação é o modelo mais simples de sistemas hiperbólicos.

A EDP $U_t = U_x$ com a seguinte condição inicial $U(x, 0) = f(x)$ tem como solução $U(x, t) = f(x, t)$. De fato, $U_x = \frac{\partial f}{\partial x} = f'$ e $U_t = \frac{\partial f}{\partial t} = f'$.

Suponhamos por exemplo que $f(17) = 3$.

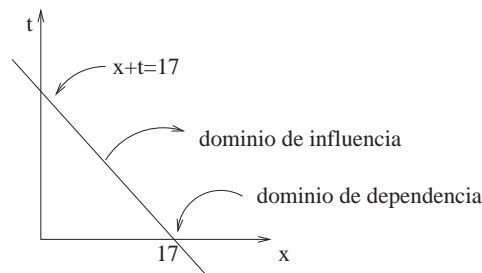


Figura 4.3:

Olhando para todos os pontos do plano (x, t) para os quais $u(x, t) = 3$. Desde que, $u(x, t) = f(x, t)$, temos $x + t = 17$ que é chamada equação característica. Note que, a solução em todos os pontos (x, t) para os quais $x + t = 17$ depende somente do valor inicial $x = 17$. E, o ponto $x = 17$ é chamado domínio de dependência.

Da mesma forma, podemos notar que o valor do dado inicial f em $x = 17$ influencia a solução em todos os pontos ao longo da característica, o qual é chamado de domínio de influência.

Vamos agora relacionar a equação da onda $U_{tt} = U_{xx}$ com sistema hiperbólicos.

Sejam $U_{tt} = U_{xx}$, $U_t = U_1$ e $U_x = U_2$, então

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix}_t = \begin{pmatrix} U_{1t} \\ U_{2t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{tt} \\ U_{xt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{xx} \\ U_{tx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_x \\ U_t \end{pmatrix}_x = \begin{pmatrix} U_2 \\ U_1 \end{pmatrix}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix}_x.$$

Portanto,

$$\vec{U} = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix}$$

A equação da onda pode ser escrita na forma

$$\vec{U}_t = A\vec{U}_x \quad \text{onde} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Se os auto-valores de A são reais e A pode ser transformada na forma diagonal (diagonalizada), isto é, existe uma matriz diagonal Λ tal que $A = T\Lambda T^{-1}$. Então diz-se que $\vec{U}_t = A\vec{U}_x$ é um sistema hiperbólico.

A solução do problema

$$\begin{aligned} U_{tt} &= U_{xx} \\ U(x, 0) &= f(x) && \text{“shape”} \\ U_t(x, 0) &= g(x) && \text{“velocity”} \end{aligned}$$

pode ser escrita como:

$$U(x, t) = F(x, t) + G(x - t)$$

onde F e G são funções diferenciáveis arbitrárias. De fato,

$$\begin{aligned} U_t &= F' - G' & U_x &= F' + G' \\ U_{tt} &= F'' + G'' & U_{xx} &= F'' + G'' \end{aligned}$$

Para obter F e G usamos os dados iniciais, isto é

$$U(x, 0) = F(x) + G(x) = f(x) \tag{4.1}$$

$$U_t(x, 0) = F'(x) - G'(x) = g(x). \tag{4.2}$$

Da equação (4.2), obtemos que

$$F(x) - G(x) = \int_0^x g(t) dt + c. \tag{4.3}$$

Fazendo (4.1)+(4.3), chegamos que

$$2F(x) = f(x) + \int_0^x g(t) dt + c. \tag{4.4}$$

Agora, fazendo (4.1)-(4.3), obtemos

$$2G(x) = f(x) - \int_0^x g(t) dt - c. \tag{4.5}$$

De (4.4),

$$2F(x+t) = f(x+t) + \int_0^{x+t} g(\xi) d\xi + c$$

e, de (4.5),

$$2G(x-t) = f(x-t) - \int_0^{x-t} g(\xi) d\xi - c.$$

Somando-as, temos que

$$2(F(x+t) + G(x-t)) = f(x+t) - f(x-t) + \int_{x-t}^{x+t} g(\xi) d\xi$$

ou seja,

$$F(x+t) + G(x-t) = \frac{f(x+t) - f(x-t)}{2} + \frac{1}{2} \int_{x-t}^{x+t} g(\xi) d\xi.$$

Portanto,

$$U(x,t) = \frac{f(x+t) - f(x-t)}{2} + \frac{1}{2} \int_{x-t}^{x+t} g(\xi) d\xi$$

conhecida como **Fórmula de D'Alembert**.

A partir da fórmula de D'Alembert, voltamos ao conceito de domínio de dependência e característica.

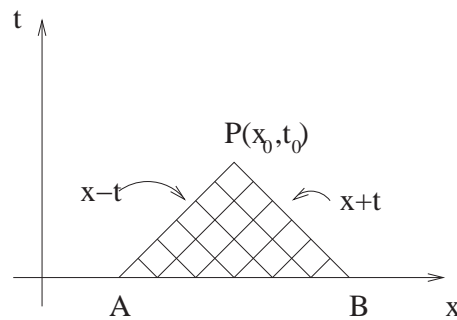


Figura 4.4:

O valor da solução no ponto (x_0, t_0) depende dos dados iniciais no eixo Ox entre A e B . As linhas $x \pm t = \text{constante}$ são as características da equação da onda e o triângulo PAB é o domínio de dependência.

Nota: Na discretização por diferenças finitas de equações hiperbólicas, devemos ter cuidado. Por exemplo, discretizando a derivada temporal por diferenças para frente e a derivada espacial por diferenças centrais no ponto (i, j) da malha, obtemos:

$$u_t \Big|_{(i,j)} = u_x \Big|_{(i,j)} \iff \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h}$$

Logo,

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + r(u_{i+1,j} - u_{i-1,j}), \quad r = \frac{k}{2h}.$$

Aplicando o critério de estabilidade de von Neumann:

$$\begin{aligned}\xi &= 1 + r(e^{i\beta h} - e^{-i\beta h}) \\ &= 1 + i2r \operatorname{sen}(\beta h).\end{aligned}$$

Assim, $|\xi|^2 = 1^2 + 4r^2 \operatorname{sen}^2(\beta h) > 1$. Portanto, o método é instável.

4.1 Equações de primeira ordem quase-lineares e características

De forma mais geral, considere o modelo

$$a \frac{\partial U}{\partial x} + b \frac{\partial U}{\partial y} = c, \quad (4.6)$$

onde $a = a(x, y, t, U)$, $b = b(x, y, t, U)$ e $c = c(x, y, t, U)$ são quase lineares.

Se denotarmos

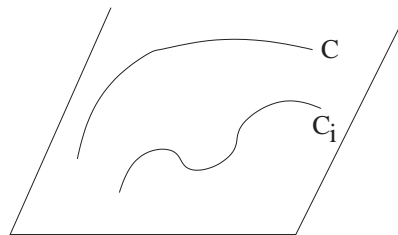
$$p = \frac{\partial U}{\partial x}, \quad q = \frac{\partial U}{\partial y},$$

então a equação (4.6) se torna

$$ap + bq = c. \quad (4.7)$$

A análise a seguir mostra que em cada ponto do domínio de solução da equação (4.7) existe um direção ao longo da qual a integração de (4.7) reduz-se à integração de uma Equação Diferencial Ordinária.

Suponhamos que conhecemos a solução U de (4.7) em cada ponto de uma curva C no plano xy , onde C não coincide com a condição inicial.



Uma questão interessante que se coloca é a seguinte: É possível determinar os valores de p e q sobre C dados os valores de U sobre C tais que eles satisfaçam (4.7)?

Vejamos, consideremos a curva

$$C : C(x(t), y(t)) \quad t \in (a, b)$$

Temos que $U = U(x(t), y(t))$. Assim,

$$\frac{dU}{dt} = \frac{\partial U}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{dy}{dt} = p \frac{dx}{dt} + q \frac{dy}{dt}$$

ou,

$$dU = p dx + q dy \quad (4.8)$$

As equações (4.7) e (4.8) constituem um sistema de duas equações a duas incógnitas p e q :

$$\begin{cases} p dx + q dy = dU \\ pq + qb = c \end{cases}$$

Então,

$$p = \frac{c - qb}{a}$$

e

$$q(a dy - b dx) + c dx - a dU = 0. \quad (4.9)$$

A equação (4.9) não depende explicitamente de p e para que não dependa também de q devemos ter

$$a dy - b dx = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{dy}{dx} = \frac{b}{a} \quad (\text{equação característica}) \quad (4.10)$$

esta equação diferencial ordinária para a curva C é chamada **curva característica**.

Também das equações (4.9) e (4.10) temos que

$$c dx - a dU = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{dU}{dx} = \frac{c}{a}$$

que define a solução U sobre a curva característica C .

Essas equações são fáceis de lembrar porque elas podem ser escritas como:

$$\frac{dx}{a} = \frac{dy}{b} = \frac{dU}{c}$$

4.1.1 Exemplo

Considere a equação:

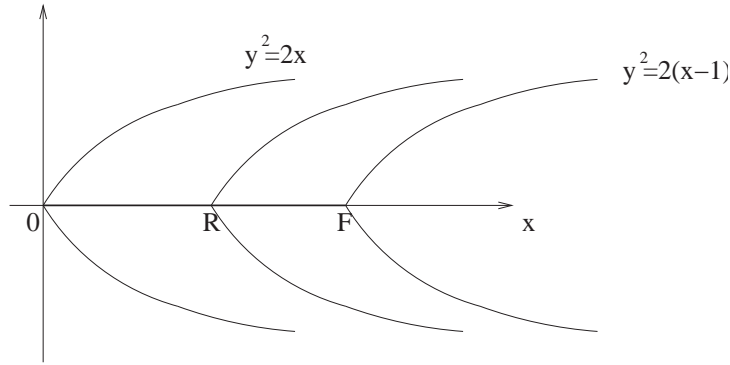
$$y \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} = 2 \quad (4.11)$$

onde a solução analítica $U = U(x, y)$ é conhecida no segmento

$$\Gamma = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; 0 \leq x \leq 1, y = 0\}$$

A equação diferencial da família das curvas características é dada por

$$\frac{dx}{y} = \frac{dy}{1} \Rightarrow y dy = dx \Rightarrow x = A + \frac{1}{2}y^2 \quad (4.12)$$



onde A é a constante de integração. Para a característica passando em $R = (x_r, 0)$, $A = x_R$. Então a equação desta característica particular é $y^2 = 2(x - x_R)$.

A solução ao longo das características é:

$$\frac{dy}{1} = \frac{dU}{2} \Rightarrow U = B + 2y \quad (4.13)$$

onde B é a constante de integração. Ao longo de $y^2 = 2(x - x_R)$, $U = 2y + U_R$, pois $U = U_R$ em $R = (x_r, 0)$ e então $B = U_R$.

Como os valores iniciais de U são conhecidos somente no segmento de reta OF , onde $0 \leq x_R \leq 1$, conforme ilustra a Figura 4.1.1, segue que a solução é definida somente na região limitada pelas características $y^2 = 2x$ e $y^2 = 2(x - 1)$, e inclusive. Nesta região, a solução é claramente única e fora da região a solução é indefinida.

4.1.2 Método de Lax-Wendroff

Na teoria de escoamentos de fluidos, as equações da continuidade, da quantidade de movimento e da energia podem ser combinadas em uma equação de conservação da forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0 \quad (4.14)$$

onde \mathbf{U} e \mathbf{F} são vetores com três componentes. O método de Lax-Wendroff, como ilustrado a seguir para uma equação de uma variável dependente, pode ser usado para aproximar (4.14) por uma equação de diferenças explícita de segunda ordem de precisão.

Considere a equação

$$\frac{\partial U}{\partial t} + a \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad (4.15)$$

onde a é uma constante positiva. Por expansão em série de Taylor,

$$U_{i,j+1} = U(x_i, t_j + k) = U_{i,j} + k \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_{i,j} + \frac{1}{2} k^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \right)_{i,j} + \dots$$

onde $x_i = ih$ e $t_j = jk$ com $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e $j = 0, 1, 2, \dots$.

A equação diferencial pode agora ser utilizada para eliminar as derivadas de t . Note

que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \equiv -a \frac{\partial}{\partial x}$$

então

$$U_{i,j+1} = U_{i,j} - ka \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{1}{2} k^2 a^2 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_{i,j} + \dots$$

Finalmente, substituindo as derivadas de x por diferenças centrais:

$$U_x|_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{2h} \quad e \quad U_{xx}|_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}$$

então, tem-se o seguinte esquema de diferenças explícito:

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} - \frac{ka}{2h}(u_{i+1,j} - u_{i-1,j}) + \frac{k^2 a^2}{2h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \quad (4.16)$$

ou

$$u_{i,j+1} = \frac{ap}{2}(1 + ap)u_{i-1,j} + (1 - a^2 p^2)u_{i,j} - \frac{ap}{2}(1 - ap)u_{i+1,j} \quad (4.17)$$

onde $p = k/h$.

A substituição de $u_{p,q} = e^{i\beta p h} \xi^q$ na equação (4.17) conduz a

$$\xi = (1 - 2a^2 p^2 \sin^2(\frac{1}{2}\beta h)) - 2i a p, \quad \sin(\frac{1}{2}\beta h) \cos(\frac{1}{2}\beta h)$$

Portanto $|\xi|^2 = (1 - 4a^2 p^2 (1 - a^2 p^2) \sin^4(\beta h))$. Para que os erros não cresçam exponencialmente com j , $|\xi|^2 \leq 1$, isto é $0 \leq 4a^2 p^2 (1 - a^2 p^2) \leq 1$, fornecendo $0 < ap \leq 1$.

Além disso, pode ser mostrado que o erro de truncamento local é

$$T_{i,j} = \frac{k^2}{6} U_{ttt} + \frac{ah^2}{6} U_{xxx} + \dots$$

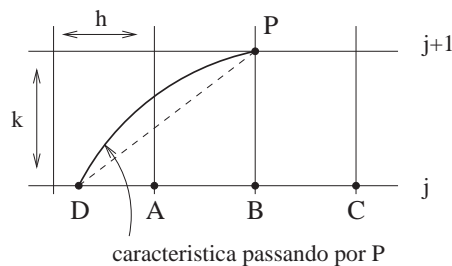
Portanto, o método é convergente pelo teorema de Lax.

4.2 A Condição CFL para Equações de Primeira Ordem

Assuma que uma equação diferencial hiperbólica de primeira ordem seja aproximada pela equação de diferenças da forma:

$$u_{i,j+1} = au_{i-1,j} + bu_{i,j} + cu_{i+1,j}$$

Então, conforme ilustra a Figura 4.2, u_p depende de valores de u nos pontos A , B e C da malha. Assuma agora que a curva característica passando por P da equação hiperbólica cruza a reta AC em D e considere AC como um segmento inicial. Se os valores iniciais ao longo de AC são alterados, então o valor da solução em P da equação de diferenças finitas mudará, mas essas alterações não afetarão o valor da solução em P da



equação diferencial, que depende do valor inicial em D . Neste caso, u_p pode não convergir para U_p conforme $h, k \rightarrow 0$. Para a convergência, D deve estar entre A e C .

Considere, por exemplo, a aproximação de Lax-Wendroff (4.17). A inclinação dt/dx da característica de equação diferencial correspondente é dada por:

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{a}$$

Para a convergência da equação de diferenças, a inclinação de PD deve ser maior ou igual à inclinação de PA , ou seja,

$$\frac{1}{a} \geq \frac{k}{h}$$

fornecendo

$$ap \leq 1$$

o que coincide com a condição de estabilidade

$$0 < ap \leq 1$$

visto que $a, p > 0$.

Em conclusão, para que $u_p \xrightarrow{h, k \rightarrow 0} U_p$, a condição CFL $ap \leq 1$ deve ser satisfeita. Além disso, a condição CFL diz que o domínio numérico deve conter o domínio de dependência analítico.

4.3 Equações Hiperbólicas Quase-Lineares de Segunda Ordem

Considere a equação diferencial parcial de segunda ordem:

$$a \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + e = 0 \quad (4.18)$$

onde a, b, c e e podem ser funções de x, y, U, U_x e U_y , mas não dependem de U_{xx}, U_{xy} e U_{yy} . Tal equação é dita quase-linear.

Será mostrado que em cada ponto do domínio de solução existem duas direções ao longo das quais a integração da equação diferencial parcial é transformada na integração

de uma equação que envolve apenas derivadas totais. Em outras palavras, nessas direções a equação a ser integrada não é complicada pela presença de derivadas parciais em outras direções.

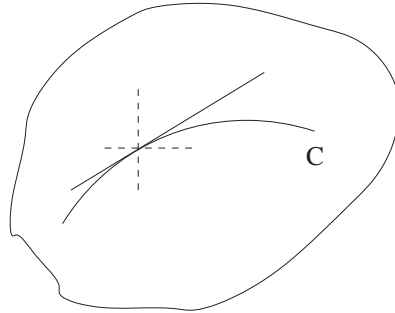


Figura 4.5: Curva C no plano xy são conhecidos os valores da solução U .

Denotando as derivadas parciais por

$$\frac{\partial U}{\partial x} = p, \quad \frac{\partial U}{\partial y} = q, \quad \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = r, \quad \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} = s \quad e \quad \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = t$$

e seja C a curva no plano xy são conhecidos os valores da solução U da equação (4.18), juntamente com os valores de p e q relacionados a U pela equação:

$$dU = \frac{\partial U}{\partial x} dx + \frac{\partial U}{\partial y} dy = p dx + q dy$$

onde dy/dx é a inclinação da reta tangente a C . (A curva C não é a curva inicial na qual os valores de U , p e q são especificados). Uma interessante questão que se coloca é: É possível encontrar valores para r , s e t sobre C que satisfazem a equação diferencial:

$$ar + bs + ct + e = 0 \tag{4.19}$$

Como r , s e t sobre C devem satisfazer as equações:

$$dp = \frac{\partial p}{\partial x} dx + \frac{\partial p}{\partial y} dy = r dx + s dy \tag{4.20}$$

e

$$dq = \frac{\partial q}{\partial x} dx + \frac{\partial q}{\partial y} dy = s dx + t dy \tag{4.21}$$

pode-se observar que as equações (4.19), (4.20) e (4.21) são três equações para as variáveis r , s e t . Isolando r e s nas equações (4.20) e (4.21), respectivamente, e substituindo na equação (4.19), tem-se:

$$\frac{a}{dx}(dp - s dy) + bs + \frac{c}{dy}(dq - s dx) + e = 0$$

Multiplicando-se essa equação por dy/dx , obtém-se:

$$s \left[a \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - b \left(\frac{dy}{dx} \right) + c \right] - \left[a \frac{dp}{dx} \frac{dy}{dx} + c \frac{dq}{dx} + e \frac{dy}{dx} \right] = 0 \quad (4.22)$$

onde dy/dx é a inclinação da reta tangente à C .

Por hipótese a equação (4.19) é quase-linear, então a , b , c e e são independentes de r , s e t . Portanto, a equação (4.22) é independente de r e t . Essa equação pode ainda ser independente de s se C for escolhida de modo que a reta tangente à C em cada ponto seja raiz da equação:

$$a \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - b \left(\frac{dy}{dx} \right) + c = 0 \quad (4.23)$$

Tomando $\Delta = b^2 - 4ac$ na equação (4.23), tem-se que:

- Se $\Delta > 0$, o sistema é hiperbólico;
- Se $\Delta = 0$, o sistema é parabólico;
- Se $\Delta < 0$, o sistema é elíptico.

Além disso, pelas equações (4.23) e (4.22) segue que ao longo das direções tangenciais a C a partir dos pontos de C :

$$a \frac{dp}{dx} \frac{dy}{dx} + c \frac{dq}{dx} + e \frac{dy}{dx} = 0 \quad (4.24)$$

Portanto, foi mostrado que em cada ponto do domínio de solução há duas direções, dadas pelas raízes de (4.23), ao longo das quais há relações entre as derivadas totais dp e dq , dadas pela equação (4.24), que são independentes das derivadas parciais em outras direções. As direções dadas pelas raízes da equação (4.23) são chamadas de direções características.

4.3.1 Métodos Explícitos e a Condição CFL

Considere a equação da onda:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial t^2}, \quad t > 0 \quad (4.25)$$

onde, inicialmente $U(x, 0) = f(x)$ e $\frac{\partial U}{\partial t}(x, 0) = g(x)$.

Pela equação (4.23), as inclinações dt/dx das curvas características são dadas por

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = 1$$

pois, neste caso $a = 1$, $b = 0$ e $c = -1$.

Então as características passando por $P(x_p, t_p)$, como ilustrado na Figura 4.6 são retas $t - t_p = \pm(x - x_p)$, visto que $\frac{dx}{dt} = \pm 1$, que encontram o eixo- x nos pontos $D(x_p - t_p, 0)$ e $E(x_p + t_p, 0)$.

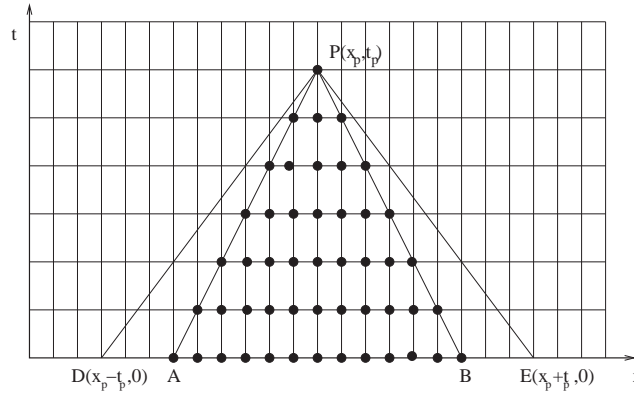


Figura 4.6: Características passando por $P(x_p, t_p)$.

A solução da equação (4.25) satisfazendo as condições iniciais dadas é:

$$U(x, t) = \frac{1}{2} \left[f(x+t) - f(x-t) + \int_{x-t}^{x+t} g(\xi) d\xi \right]$$

e, portanto, a solução em $P(x_p, t_p)$ é

$$U(x_p, t_p) = \frac{1}{2} \left[f(x_p + t_p) - f(x_p - t_p) + \int_{x_p - t_p}^{x_p + t_p} g(\xi) d\xi \right]$$

que mostra que a solução é dependente dos valores de $f(x)$ em D e E , e dos valores de $g(x)$ em cada ponto do intervalo fechado DE , isto é, depende dos dados iniciais ao longo do *intervalo de dependência* DE . O triângulo PDE é chamado *domínio de dependência* do ponto P . Uma aproximação central de diferenças finitas para a equação (4.25) nos pontos $(x_i, t_j) = (ih, jk)$ em uma malha retangular cobrindo o domínio de solução é:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}$$

isto é

$$u_{i,j+1} = r^2 u_{i-1,j} + 2(1 - r^2) u_{i,j} + r^2 u_{i+1,j} - u_{i,j-1} \quad (4.26)$$

onde $r = k/h$. Esta é uma aproximação explícita.

No caso $j = 0$, tem-se:

$$u_{i,1} = r^2 u_{i-1,0} + 2(1 - r^2) u_{i,0} + r^2 u_{i+1,0} - u_{i,-1}$$

$$u_{i,1} = r^2 f_{i-1} + 2(1 - r^2) f_i + r^2 f_{i+1} - u_{i,-1}$$

e uma aproximação de diferenças centrais para $\left. \frac{\partial U}{\partial t} \right|_{i,0} = g_{i,0}$, fornece:

$$u_{i,-1} = u_{i,1} - 2kg_{i,0}$$

Então

$$u_{i,1} = r^2 f_{i-1} + 2(1 - r^2)f_i + r^2 f_{i+1} - (u_{i,1} - 2kg_{i,0})$$

ou seja,

$$u_{i,1} = \frac{1}{2} [r^2 f_{i-1} + 2(1 - r^2)f_i + r^2 f_{i+1} + 2kg_{i,0}] \quad (4.27)$$

As equações (4.26) e (4.27) mostram que u_p no ponto P da malha depende dos valores $u_{i,j}$ nos pontos da malha marcados, como ilustra na Figura 4.6. Este conjunto de pontos da malha é chamado de domínio de dependência numérico do ponto P , e as retas PA e PB são freqüentemente chamadas de características numéricas.

Assuma agora que as condições iniciais ao longo de DA e BE foram mudadas. Essas mudanças afetarão a solução analítica da equação diferencial em P , mas não modificará a solução numérica dada pelas equações (4.26) e (4.27). Neste caso, u_p pode não convergir para U_p com $h, k \rightarrow 0$ e r permanecendo constante. Ao contrário, quando as características numéricas PA e PB estão fora do domínio de dependência PDE , tem-se que o efeito dos dados iniciais ao longo de DA e BE sobre a solução em P da equação de diferenças finitas tende a zero conforme $h, k \rightarrow 0$, com r permanecendo constante e P fixo [9].

A condição CFL para a convergência diz que o domínio numérico de dependência da equação de diferenças deve incluir o domínio de dependência da equação diferencial. Usando essa condição, é claro que a equação de diferenças (4.26) é convergente para $0 < r \leq 1$.

4.3.2 Métodos Implícitos

Métodos implícitos não podem ser utilizados sem suposições simplificadoras para resolver problemas puramente de valores iniciais porque eles fornecem um infinito número de equações simultâneas. Eles podem, entretanto, ser utilizados efetivamente para problemas de valor de contorno quando, por exemplo, condições iniciais sobre $0 \leq x \leq 1$ e condições de fronteira sobre $x = 0$ e $x = 1$ são dadas. A convergência é garantida via teorema de Lax.

Um esquema satisfatório aproximando a equação da onda (4.25) no ponto (ih, jk) é

$$\frac{1}{k^2} \delta_t^2 u_{i,j} = \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{4} \delta_x^2 u_{i,j+1} + \frac{1}{2} \delta_x^2 u_{i,j} + \frac{1}{4} \delta_x^2 u_{i,j-1} \right) \quad (4.28)$$

onde $\delta_t^2 u_{i,j} = u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}$, etc. Este esquema fornece um sistema tridiagonal de equações e pode ser mostrado que é incondicionalmente estável para todo $r = \frac{k}{h} > 0$.

O Erro de truncamento local é:

$$T_{i,j} = h^2 \left[-\frac{1}{12}(4r^2 + 1) \frac{\partial^4 U}{\partial x^4} - \frac{1}{720} h^2 (13r^4 + 15r^2 + 1) \frac{\partial^6 U}{\partial x^6} + \dots \right]_{i,j}$$

que tende a zero para r finito com $h \rightarrow 0$. Portanto, o esquema é convergente.

Um esquema mais geral expande $U_{i,j+1}$ e $U_{i,j-1}$ em série de Taylor sobre o ponto (i, j) e obtém:

$$U_{i,j+1} + U_{i,j-1} = 2U_{i,j} + k^2 \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \Big|_{i,j} + \frac{k^4}{12} \frac{\partial^4 U}{\partial t^4} \Big|_{i,j} + \dots$$

Se U é solução de

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

então

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

e, portanto,

$$\frac{\partial^4 U}{\partial t^4} \Big|_{i,j} = \frac{\partial^4 U}{\partial x^4} \Big|_{i,j}, \quad \frac{\partial^6 U}{\partial t^6} \Big|_{i,j} = \frac{\partial^6 U}{\partial x^6} \Big|_{i,j}, \quad etc.$$

Assim,

$$U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1} = k^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{k^4}{12} \frac{\partial^4 U}{\partial x^4} \Big|_{i,j} + \dots \quad (4.29)$$

Como

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 + \frac{1}{90} \delta_x^6 + \dots \right) U$$

segue, das diferenças de ordem quatro, que

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 \right) U$$

e

$$\frac{\partial^4 U}{\partial x^4} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right) = \frac{1}{h^4} \delta_x^4 U$$

Substituindo essas expressões em (4.29), tem-se que para essa ordem de precisão,

$$U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1} = r^2 \left[1 + \frac{1}{12}(r^2 - 1) \delta_x^2 \right] \delta_x^2 U_{i,j} \quad (4.30)$$

onde $r = k/h$. Operando ambos os lados dessa equação por $[1 + \frac{1}{12}(r^2 - 1) \delta_x^2]^{-\frac{1}{2}}$ e expandindo cada operador até termos em δ_x^4 por expansão binomial, obtém-se a seguinte

aproximação implícita para a equação da onda:

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1} &= \frac{1}{24}(r^2 - 1)(\delta_x^2 u_{i,j+1} + \delta_x^2 u_{i,j-1}) + \frac{1}{12}(11r^2 + 1)\delta_x^2 u_{i,j} + \\ &+ \frac{1}{192}(r^2 - 1)(9r^2 - 1)\delta_x^4 u_{i,j} - \frac{1}{384}(r^2 - 1)^2(\delta_x^4 u_{i,j+1} + \delta_x^4 u_{i,j-1}) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Analogamente, se ambos os lados da equação (4.30) for operados por $[1 + \frac{1}{12}(r^2 - 1)\delta_x^2]^{-1}$, a equação de diferenças correspondente é

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1} &= \frac{1}{12}(r^2 - 1)(\delta_x^2 u_{i,j+1} + \delta_x^2 u_{i,j-1}) + \frac{1}{5}(5r^2 + 1)\delta_x^2 u_{i,j} + \\ &+ \frac{1}{144}(r^2 - 1)^2 [2\delta_x^4 u_{i,j} - (\delta_x^4 u_{i,j+1} + \delta_x^4 u_{i,j-1})] \end{aligned} \quad (4.32)$$

Essas equações de diferenças de alta ordem seriam complicadas de implementar na prática por causa das dificuldades associadas com as condições de fronteira.

4.4 Esquemas Upwind

A equação de onda é relacionada à equação de advecção, que em uma dimensão tem a forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4.33)$$

Esta equação modela o transporte passivo por advecção de algum campo escalar $u(x, t)$ carregado longitudinalmente por um escoamento de velocidade constante v .

O esquema de Crank-Nicholson representa um método numérico eficiente e preciso para resolver uma equação de advecção. Este é certamente o caso, se o problema estiver restrito a ondas suaves. Infelizmente, o esquema de Crank-Nicholson faz um trabalho muito pobre em transportar ondas por advecção que apresentam descontinuidades. Isto é ilustrado na Figura 4.7, que mostra um cálculo em que o esquema de Crank-Nicholson é usado para transportar uma onda de pulso quadrado.

Pode-se notar que as oscilações são geradas nas bordas, o que mostra que esquemas centrados para resolver a equação de advecção sofrem de um problema similar.

A única maneira conhecida para suprimir oscilações nas bordas de uma onda com quinas é adotar um esquema de diferenciação *upwind*. Em tal esquema, as diferenças espaciais são aproximadas no sentido *upwind*: isto é, o sentido de que o fluxo advectado surge, vem. Assim, a versão *upwind* do esquema explícito simples 4.33 é escrita como:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = -v \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} \quad (4.34)$$

ou

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} - C(u_{i,j} - u_{i-1,j}) \quad (4.35)$$

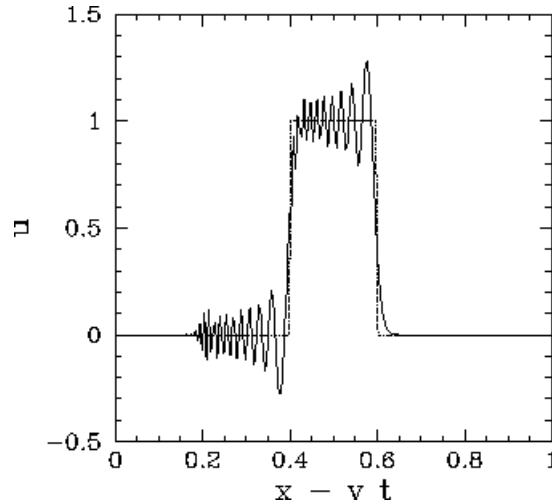


Figura 4.7: Advecção de um pulso 1D quadrado. Os cálculos numéricos foram realizados utilizando-se $v = 1$, $\delta t = 2.49 \times 10^{-3}$, e $N = 200$. A curva pontilhada mostra a condição inicial em $t = 0.0$, enquanto que a curva contínua mostra a solução numérica em $t = 0.1$.

Note que este esquema é somente de primeira ordem no espaço. Uma análise da estabilidade de von Neumann do esquema acima resulta:

$$A = 1 - C[1 - \cos(k\delta x) - i C \text{sen}(k\delta x)] \quad (4.36)$$

Note que

$$\|A\|^2 = 1 - 2C(1 - C)[1 - \cos(k\delta x)] \quad (4.37)$$

Segue que $\|A\| < 1$ contanto que $C < 1$. Assim, o esquema diferenças *upwind* é estável contanto que a condição de CFL seja satisfeita. A Figura 4.7 mostra um cálculo em que o esquema acima é usado ao transportar um pulso quadrado. Não há agora nenhuma oscilação gerada nas bordas da onda. Por outro lado, a forma da onda mostra a evidência de dispersão. Certamente, o esquema de diferenças *upwind* sofre do mesmo tipo de problema da dispersão que o esquema de Lax.

Infelizmente, não há nenhum esquema de diferenças que é não-dispersivo e capaz de tratar bem situações como as “quinas” das ondas. Na verdade, códigos sofisticados que resolvem a equação de advecção (ou a equação da onda) empregam geralmente um esquema *upwind* nas regiões perto das quinas, ou choques, e um esquema não-dispersivo mais preciso nas outras partes.

4.5 Exercícios

1. A função U satisfaz a equação $U_t + U_x = 0$, $0 < x < \infty$, $t > 0$ com condições de fronteira e iniciais dadas por:

$$U(0, t) = 2t, \quad t > 0$$

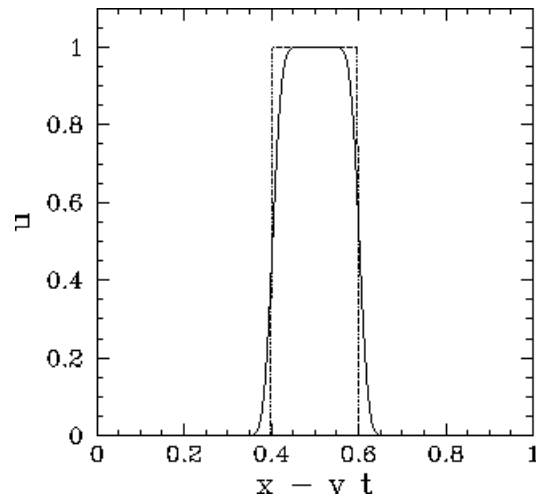


Figura 4.8: Advecção de um pulso 1D quadrado. Os cálculos numéricos foram realizados utilizando-se $v = 1$, $\delta t = 2.49 \times 10^{-3}$, e $N = 200$. A curva pontilhada mostra a condição inicial em $t = 0.0$, enquanto que a curva contínua mostra a solução numérica em $t = 0.1$

$$U(x, 0) = x(x - 2), \quad 0 \leq x \leq 2$$

$$U(x, 0) = 2(x - 2), \quad x \geq 2$$

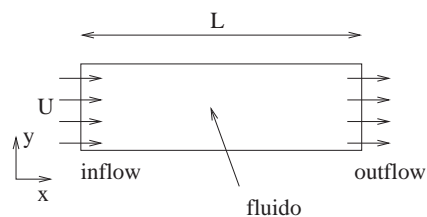
Calcule:

- (a) uma solução analítica;
 - (b) uma solução numérica usando o esquema explícito de Lax–Wendroff.
2. (a) Use o método de Von Neumann para mostrar que o método de Lax–Wendroff é estável para $0 < ap \leq 1$.
- (b) Mostre que a parte principal do erro de truncamento local é $T_{i,j} = \frac{k^2}{6}U_{ttt} + \frac{ah^2}{6}U_{xxx} \Big|_{i,j}$.
- (c) Prove que a solução de $U_t = aU_x$, com a constante, é a solução da aproximação de Lax–Wendroff quando $\frac{k}{h} = \frac{1}{a}$.

Sistemas Elípticos

5.1 Motivação

Consideremos o escoamento hidrodinâmico desenvolvido (estacionário) de um fluido



O escoamento em regime “laminar” e permanente (não transiente) de um fluido é regido pelas equações de Navier–Stokes:

$$\begin{aligned}
 u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \\
 u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \nu^2 \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \\
 \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Após um certo comprimento L , que depende da natureza do escoamento, verifica-se que o perfil de velocidades não se altera mais. Então

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad e \quad \frac{\partial p}{\partial x} = \text{constante}$$

Pela equação da conservação de massa,

$$\frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow v = 0$$

Então, as equações tornam-se

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{1}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} = c$$

que é a equação de Poisson unidimensional. Neste caso, o maior problema é a fronteira.

Equações diferenciais do tipo elíptico aparecem com muita frequência em problemas de equilíbrio, isto é, problemas em que a solução da EDP é requerida em um domínio fechado sujeito a certas condições de contorno.

Na terminologia matemática, esses problemas são conhecidos como problemas de valor de contorno. Na literatura inglesa, esses problemas são chamados de “jury problems”. Esse nome é devido ao fato de que a solução da EDP em todo o domínio depende das condições de contorno pré-estabelecidas. Usualmente, a solução de um problema de equilíbrio maximiza ou minimiza uma integral representando a energia de sistema. As equações mais comuns são:

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(xy) \quad \text{equação de Poisson}$$

$$\nabla^2 u = 0 \quad \text{equação de Laplace}$$

O domínio de integração de uma equação elíptica em 2D é sempre uma área limitada pela fronteira $\partial\Omega$. As condições de contorno usualmente especificam os valores da função ou os valores de sua derivada normal ao longo do contorno $\partial\Omega$, ou uma mistura de ambos. Têm-se então os três problemas famosos:

- i. Problema de Dirichlet (u é conhecida em $\partial\Omega$);
- ii. Problema de Neumann ($\frac{\partial u}{\partial \vec{n}}$ é conhecida em $\partial\Omega$);
- iii. Problema de Robin ($\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \vec{n}}$ é conhecida em $\partial\Omega$);

Teorema 2 *Se o problema i) tem solução, então ela é única.*

5.2 Exemplos

5.2.1 Problema de Dirichlet

Considere a equação de Laplace

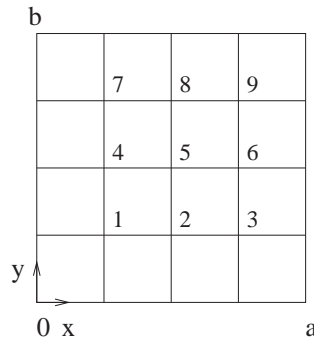
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \tag{5.2}$$

definida em um domínio $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}, 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b\}$ e com $u = g$ no contorno.

Considerando $\delta x = h = \frac{a}{N_x}$ e $\delta y = k = \frac{b}{N_y}$, com $N_x = N_y = 4$, podemos aproximar as derivadas da equação por diferenças centrais, e obter:

$$\frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + \frac{1}{k^2}(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) = 0 \quad (5.3)$$

com $i, j = 1, 2, 3$.



Para o ponto 1, conforme o ilustrado na Figura 5.2.1, tem-se que $i, j = 1$, então:

$$\frac{1}{h^2}(u_{2,1} - 2u_{1,1} + u_{0,1}) + \frac{1}{h^2}(u_{1,2} - 2u_{1,1} + u_{1,0}) = 0$$

$$\frac{1}{h^2}(u_{2,1} - 2u_{1,1}) + \frac{1}{h^2}(u_{1,2} - 2u_{1,1}) = -\frac{1}{h^2}g_{0,1} - \frac{1}{k^2}g_{1,0}$$

Sem perda de generalidade, suponha que $a = b = 1$, então $h = k$, assim

$$-4u_{1,1} + u_{1,2} + u_{2,1} = -(g_{0,1} + g_{1,0})$$

Para o ponto 2, ou seja $i = 2$ e $j = 1$, tem-se:

$$\frac{1}{h^2}(u_{3,1} - 2u_{2,1} + u_{1,1}) + \frac{1}{h^2}(u_{2,2} - 2u_{2,1} + u_{2,0}) = 0$$

$$u_{3,1}) - 4u_{2,1} + u_{2,2} + u_{1,1} = g_{2,0}$$

e assim por diante para os pontos 3, 4, ..., 9, conforme ilustrado na Figura 5.2.1.

No caso de $N_x = 4$ e $N_y = 3$, a forma matricial resultante dessas equações é dada por:

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{0,1} + g_{1,0} \\ g_{2,0} \\ g_{3,0} \\ g_{4,0} \\ g_{5,0} \\ g_{3,3} + g_{4,2} \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

5.2.2 Problema de Neumann no Retângulo

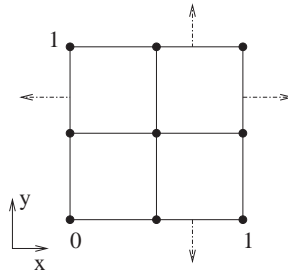
Considere a equação de Laplace

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (5.5)$$

definida em um domínio $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}, 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$ e com $\frac{\partial u}{\partial n} = g(x, y)$ no contorno.

Pode-se mostrar que o problema de Neumann (5.5) tem solução $\int_L g(x, y) dL = 0$, onde L é o perímetro. A solução será única, a menos de uma constante. A unicidade de U requer que U seja especificada em algum ponto do domínio.

Como exemplo, sejam $h = k = \frac{1}{2}$. A Figura (5.2.2) ilustra os pontos do domínio onde deseja-se encontrar a solução.



No contorno $x = 0$, tem-se:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{0,j} = g(0, j) \Rightarrow \frac{1}{2h}(U_{-1,j} - U_{1,j}) = g_{0,j} \Rightarrow U_{-1,j} = 2hg_{0,j} + U_{1,j}$$

No contorno $x = 1$, tem-se:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{2,j} = g(1, j) \Rightarrow \frac{1}{2h}(U_{3,j} - U_{1,j}) = g_{2,j} \Rightarrow U_{3,j} = 2hg_{2,j} + U_{1,j}$$

No contorno $y = 0$, tem-se:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,0} = g(i, 0) \Rightarrow \frac{1}{2k}(U_{i,-1} - U_{i,1}) = g_{i,0} \Rightarrow U_{i,-1} = 2kg_{i,0} + U_{i,1}$$

No contorno $y = 1$, tem-se:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i,2} = g(i, 2) \Rightarrow \frac{1}{2k}(U_{i,3} - U_{i,1}) = g_{i,2} \Rightarrow U_{i,3} = 2kg_{i,2} + U_{i,1}$$

Para o ponto interior, tomando-se $i = 0$ e $j = 0$, obtém-se:

$$\frac{1}{h^2}(U_{1,0} - 2U_{0,0} + U_{-1,0}) + \frac{1}{k^2}(U_{0,1} - 2U_{0,0} + U_{0,-1})$$

$$-4U_{0,0} + 2U_{1,0} + 2U_{0,1} = -4hg_{0,0}$$

Observa-se que para o problema (5.5) que apresenta apenas um ponto interior, há nove equações que devem ser resolvidas.

O sistema resultante é dado por:

$$\begin{bmatrix} 4 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -2 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 4 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \end{bmatrix} = 2h \begin{bmatrix} 2g_1 \\ g_2 \\ 2g_3 \\ g_4 \\ 0 \\ g_6 \\ g_7 \\ g_8 \\ 2g_9 \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Multiplicando a primeira, a segunda, ..., a nona linha por $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$, 1 , $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$ e $\frac{1}{4}$ respectivamente, obtemos uma matriz simétrica:

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 2 & -\frac{1}{2} & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 2 & -1 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -\frac{1}{2} & 2 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9 \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

Pode-se notar que $\sum_{i=1}^9 v_i = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^9 \alpha_i v_i = 0 \Rightarrow$ os vetores v_i são l.d. Logo $\det(A) = 0$, ou seja, a matriz é singular.

Em conseqüência, o problema numérico pode não ter soluções ou tem infinitas soluções. Para obter uma única solução, é necessário especificar o valor de U em algum ponto do domínio.

5.3 Exercícios

1. A função U satisfaz a equação $U_{xx} + U_{yy} - 32U = 0$ em cada ponto dentro do quadrado $x \pm 1$ e $y \pm 1$ e está sujeita às condições de fronteira:

$$U = 0 \text{ em } y = 1, \quad -1 \leq x \leq 1$$

$$\begin{aligned}
 U &= 1 \text{ em } y = -1, \quad -1 \leq x \leq 1 \\
 U_x &= -\frac{1}{2}U \text{ em } x = 1, \quad -1 \leq y \leq 1 \\
 U_x &= \frac{1}{2}U \text{ em } x = -1, \quad -1 \leq y \leq 1
 \end{aligned}$$

Tome $h = k = \frac{1}{4}$ e mostre que é possível escrever as equações resultantes na forma de um sistema linear $Au = b$ onde u é um vetor coluna do tipo 35×1 e b é um vetor 35×1 cujo vetor transposto é $b^t = (0, 0, \dots, 0, -1, -1, -1, -1, -1)^t$ e A é uma matriz que pode ser escrita na forma particionada

$$\begin{bmatrix}
 B & I & & & & & \\
 I & B & I & & & & \\
 & I & B & I & & & \\
 & & I & B & I & & \\
 & & & I & B & I & \\
 & & & & I & B & I \\
 & & & & & I & B
 \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

onde

$$B = \begin{bmatrix}
 -6 & 2 & & & & \\
 1 & -6 & 1 & & & \\
 & 1 & -6 & 1 & & \\
 & & 1 & -6 & 1 & \\
 & & & 2 & -\frac{25}{4} &
 \end{bmatrix} \quad e \quad I = \begin{bmatrix}
 1 & & & & & \\
 & 1 & & & & \\
 & & 1 & & & \\
 & & & 1 & & \\
 & & & & 1 & \\
 & & & & & 1
 \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

Aplicação: Equação de Navier–Stokes

Nesse capítulo é calculada a solução numérica das equações de Navier-Stokes e da continuidade, em escoamentos isotérmicos confinados e incompressíveis, utilizando-se o método MAC. Dois problemas clássicos são implementados, o problema da cavidade (*lid-driven cavity-flow*) e o escoamento sobre um degrau (*backward-facing step*), ambos em regime transiente.

6.1 Introdução

O método *Marker-and-Cell*, ou simplesmente MAC, foi desenvolvido por Harlow e Welch em 1965 [6], para a simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo fluidos newtonianos em superfícies livres, onde partículas marcadoras (*markers*) definem a posição da superfície livre do fluido. Entretanto, a ausência de superfícies livres não restringe a sua utilização, de modo que tal método é uma das formulações explícitas mais aplicadas para a solução numérica das equações de Navier-Stokes e da continuidade.

O método é caracterizado pela utilização de uma malha deslocada (*staggered grid*) e originalmente, a solução de uma equação de Poisson foi empregada para o avanço temporal da pressão no domínio do problema. Para os problemas estudados nesse trabalho, entretanto, opta-se por uma abordagem alternativa, a *iteração da pressão*, desenvolvida por Chorin [3], e utilizada por Hirt e Cook [7] na solução numérica de escoamentos tri-dimensionais.

Embora as técnicas aqui utilizadas datam da década de 1970, o método MAC passou por diversos avanços, dentre os quais a generalização do método para fluidos newtonianos generalizados, o método GENSMAC [10].

6.2 Técnicas Básicas

6.2.1 Equações Governantes

Escoamentos incompressíveis bi-dimensionais envolvendo fluidos newtonianos em regime isotérmico são governados pelas equações de Navier-Stokes

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial vu}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)\end{aligned}\quad (6.1)$$

e a equação da continuidade

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (6.2)$$

onde p é a pressão à densidade constante, no S. I. medida em m^2/s^2 , u e v são respectivamente as velocidades do escoamento em, no S. I. em m/s nas direções x e y do domínio físico do problema, notando que (6.1) e (6.2) estão representadas em um sistema de coordenadas cartesianas. ν é a viscosidade cinemática do fluido newtoniano em estudo, no S. I. medida em m^2/s . Nesse caso, são ignoradas as forças de campo, como, por exemplo, a atração gravitacional.

6.2.2 Adimensionalização

As equações são adimensionalizadas por meio das relações lineares

$$x = x^*L \quad y = y^*L \quad u = u^*U_0 \quad v = v^*U_0 \quad p = p^*U_0^2 \quad t = t^*\frac{L}{U_0}, \quad (6.3)$$

que transformam (6.1) em

$$\begin{aligned}\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \frac{\partial (u^*)^2}{\partial x^*} + \frac{\partial u^*v^*}{\partial y^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u^*}{\partial (x^*)^2} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial (y^*)^2} \right) \\ \frac{\partial v^*}{\partial t^*} + \frac{\partial v^*u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial (v^*)^2}{\partial y^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v^*}{\partial (x^*)^2} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial (y^*)^2} \right).\end{aligned}\quad (6.4)$$

A equação da continuidade (6.2) se mantém da mesma forma, a menos das variáveis, que passam a ser adimensionais:

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0. \quad (6.5)$$

As grandezas L e U_0 são, respectivamente, o comprimento e a velocidade característicos do problema (escalares). $Re = \frac{U_0L}{\nu}$ é o número de Reynolds e x^* , y^* , u^* , v^* , p^* e t^* são variáveis adimensionalizadas. A partir desse ponto, serão omitidos os asteriscos, para simplificação da notação.

6.2.3 Diferenças finitas

No método MAC, o domínio computacional é dividido em um conjunto finito de células retangulares, cada uma com dimensões δx e δy , formando uma malha uniforme. Cada célula é indexada por sua posição (i, j) em relação a uma célula de referência, geralmente adjacente à origem do sistema de coordenadas do problema. No presente trabalho, essa célula é tal que a origem corresponde ao seu canto superior direito, de modo que as coordenadas do centro (i, j) de cada célula é dado por $(i, j) = ((i-1/2)\delta x, (j-1/2)\delta y)$. As células correspondentes ao interior do domínio computacional são numeradas de 1 a N_i na direção x e de 1 a N_j na direção y , sendo que as disposições das células nos dois problemas estudados são mostradas nas figuras 6.1 e 6.2. As componentes horizontal e vertical da velocidade do escoamento são calculadas, respectivamente, nas faces horizontal e vertical de cada célula, e a pressão em seu centro, caracterizando a malha deslocada, como descrito na figura 6.3. A opção pela malha deslocada em relação à malha co-localizada deve-se ao desacoplamento das equações e a conseqüente geração de campos oscilatórios para a pressão presente na segunda, além do fato de que o esquema originado desta é fisicamente incoerente, conforme descrito por Fortuna [5].

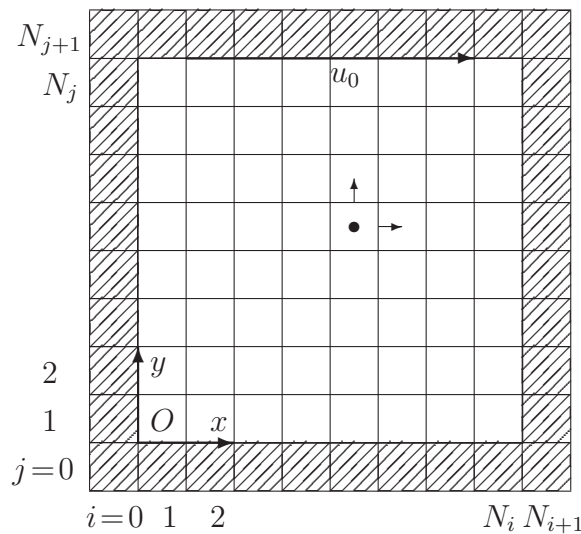


Figura 6.1: Domínio computacional do problema da cavidade. Adaptado de Fortuna [5]

A solução é calculada por meio do avanço das variáveis do escoamento em pequenos intervalos de tempo de duração δt , sendo tais intervalos suficientemente pequenos para respeitar as condições de estabilidade a serem vistas na seção 6.2.6. O avanço é feito em duas etapas:

- Inicialmente, atualizam-se as componentes da velocidade em todas as células (i, j) do domínio, exceto aquelas especificadas por condições de fronteira. No MAC, esse cálculo é explícito, sendo tal avanço baseado na solução obtida no tempo anterior.

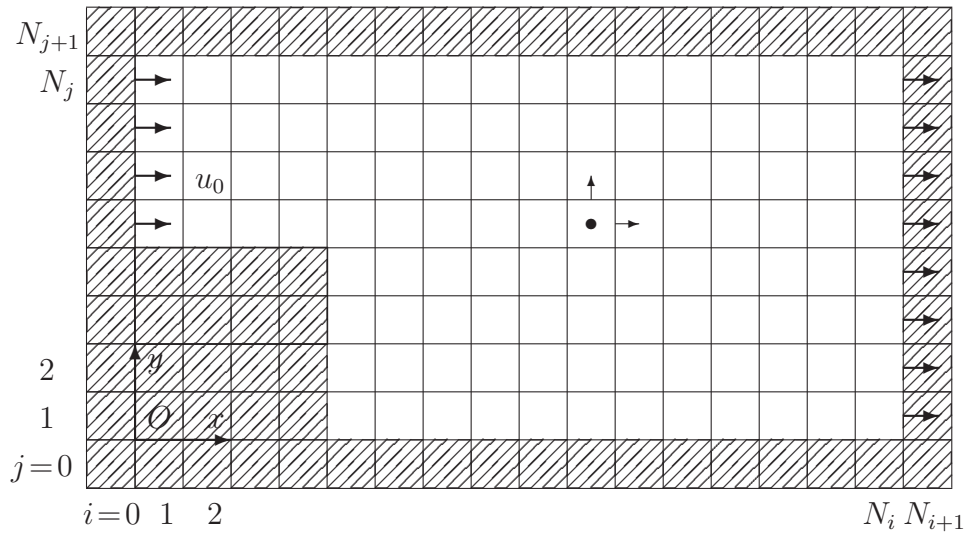


Figura 6.2: Domínio computacional do problema do degrau. Adaptado de Fortuna [5]

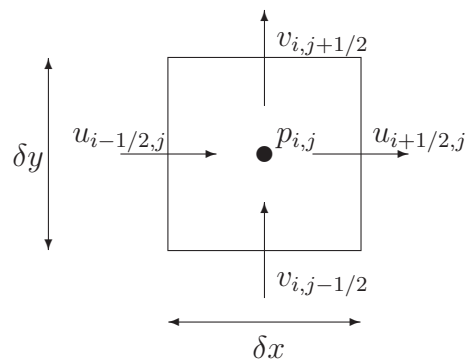


Figura 6.3: Célula (i, j) do método Marker-and-Cell

- As velocidades obtidas na primeira etapa não-necessariamente satisfazem à equação da continuidade (6.2). Nessa etapa, portanto, as velocidades são ajustadas de modo a garantir a conservação de massa. Tal correção é feita por meio da atualização da pressão em cada célula (i, j) .

Originalmente, Harlow e Welch [6] obtiveram a pressão da segunda etapa por meio da solução de uma equação de Poisson. Uma alternativa é realizar iterações nos campos de velocidades e de pressão simultaneamente, até que a conservação de massa se estabeleça. Essa técnica, desenvolvida por Chorin [3] e descrita por Hirt e Cook [7], é denominada *iteração da pressão*.

As duas etapas descritas acima são executadas como segue:

Inicialmente, as componentes u e v da velocidade em cada célula (i, j) são estimadas

na primeira etapa pelas seguintes equações de diferença finita:

$$\begin{aligned} u_{i+1/2,j}^{n+1,(0)} &= u_{i+1/2,j}^n + \delta t \left(-\text{CONV}_{i+1/2,j}^n + \frac{1}{Re} \text{VISC}_{i+1/2,j}^n - \frac{p_{i+1,j}^n - p_{i,j}^n}{\delta x} \right) \\ v_{i,j+1/2}^{n+1,(0)} &= v_{i,j+1/2}^n + \delta t \left(-\text{CONV}_{i,j+1/2}^n + \frac{1}{Re} \text{VISC}_{i,j+1/2}^n - \frac{p_{i,j+1}^n - p_{i,j}^n}{\delta y} \right), \end{aligned} \quad (6.6)$$

onde os termos convectivos são dados por

$$\begin{aligned} \text{CONV}_{i+1/2,j}^n &= \frac{(uu)_{i+1,j}^n - (uu)_{i,j}^n}{\delta x} + \frac{(uv)_{i+1/2,j+1/2}^n - (uv)_{i+1/2,j-1/2}^n}{\delta y} \\ \text{CONV}_{i,j+1/2}^n &= \frac{(vu)_{i+1/2,j+1/2}^n - (vu)_{i-1/2,j+1/2}^n}{\delta x} + \frac{(vv)_{i,j+1}^n - (vv)_{i,j}^n}{\delta y} \end{aligned}$$

e os viscosos por

$$\begin{aligned} \text{VISC}_{i+1/2,j}^n &= \frac{u_{i+3/2,j}^n - 2u_{i+1/2,j}^n + u_{i-1/2,j}^n}{\delta x^2} + \frac{u_{i+1/2,j+1}^n - 2u_{i+1/2,j}^n + u_{i-1/2,j-1}^n}{\delta y^2} \\ \text{VISC}_{i,j+1/2}^n &= \frac{v_{i+1,j+1/2}^n - 2v_{i,j+1/2}^n + v_{i-1,j+1/2}^n}{\delta x^2} + \frac{v_{i,j+3/2}^n - 2v_{i,j+1/2}^n + v_{i,j-1/2}^n}{\delta y^2}. \end{aligned}$$

6.2.3.1 Termos Convectivos

Os termos convectivos envolvem componentes de velocidade em pontos onde estas não estão definidas na discretização. O cálculo de tais termos é feito por meio da expressão

$$\frac{(uu)_{i+1,j}^n - (uu)_{i,j}^n}{\delta x} = \frac{u_{i+1,j}^n \bar{u}_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n \bar{u}_{i,j}^n}{\delta x}, \quad (6.7)$$

considerando-se o primeiro termo convectivo da equação de momento na direção x , e assim por diante para os demais termos. Os valores de $\bar{u}_{i+1,j}^n$ e $\bar{u}_{i,j}^n$ são aproximadas pela média aritmética de valores de u em pontos vizinhos, em que estes estão definidos na discretização, e os valores de $u_{i+1,j}^n$ e $u_{i,j}^n$ são obtidos por meio do uso de esquemas de convecção.

Esse tratamento distinto tem base física. Seja o termo $(uu)_{i,j}^n$. Tal termo representa o transporte da propriedade u pela velocidade de convecção u no centro da célula (i, j) . Em outras palavras, de acordo com tal produto, a propriedade u está sendo transportada com velocidade u . Tal fato torna-se evidente quando se considera a equação de momento na direção x sob a forma não-conservativa, dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \underbrace{u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y}}_{\text{CONV}} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right).$$

Pela expressão acima, observa-se por meio dos termos convectivos o transporte da propriedade u ao longo das direções x e y com velocidade u e v , respectivamente.

A separação do produto $(uu)_{i,j}^n$ na forma $u_{i,j}^n \bar{u}_{i,j}^n$ é também uma maneira de linearizar as equações de diferença finita, pois o produto $u_{i,j}^n \bar{u}_{i,j}^n$ é linear com relação a $u_{i,j}^n$.

Hirt e Cook consideram $u_{i,j}^n = \bar{u}_{i,j}^n$, ou seja, fazem uso exclusivo da média aritmética das velocidades dos pontos vizinhos, porém esclarecendo que as equações resultantes são estáveis desde que viscosidade suficiente seja aplicada, ou seja, os resultados numéricos obtidos são plausíveis apenas a valores baixos do número de Reynolds. Um trabalho recente de Kaibara et al. [8] confirma o fato constatado pelos dois pesquisadores, destacando que esquemas numéricos clássicos de diferenças finitas para aproximar derivadas espaciais em geral levam a resultados desastrosos em processos dominados por convecção. Com base em tais fatos, nesse trabalho utiliza-se o recente esquema CUBISTA [1] para a aproximação dos termos convectivos.

Considerando-se o termo $(uu)_{i,j}^n$, procede-se como segue:

Seja o termo $\bar{u}_{i,j}^n$, dado pela expressão

$$\bar{u}_{i,j}^n = \frac{u_{i+1/2,j}^n + u_{i-1/2,j}^n}{2}. \quad (6.8)$$

- Se $\bar{u}_{i,j}^n > 0$, define-se

$$u_D = u_{i+1/2,j}^n \quad u_U = u_{i-1/2,j}^n \quad u_R = u_{i-3/2,j}^n$$

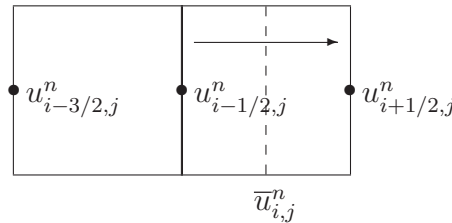
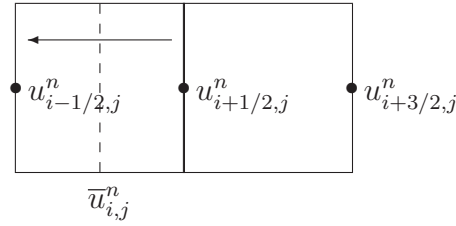


Figura 6.4: Esquema CUBISTA quando $\bar{u}_{i,j}^n > 0$.

- Se $\bar{u}_{i,j}^n < 0$, define-se

$$u_D = u_{i-1/2,j}^n \quad u_U = u_{i+1/2,j}^n \quad u_R = u_{i+3/2,j}^n.$$

D , U e R indicam, respectivamente, o ponto imediatamente para onde segue o escoamento (*downstream*); o ponto imediatamente na direção de onde vem o escoamento (*upstream*); e o ponto imediatamente depois, nessa mesma direção (*remote upstream*).

Figura 6.5: Esquema CUBISTA quando $\bar{u}_{i,j}^n < 0$.

Seja $\hat{u} = \frac{u_U - u_R}{u_D - u_R}$. Então

$$u_{i,j}^n = \begin{cases} \frac{1}{4}(7u_U - 3u_R), & \text{se } 0 < \hat{u} < \frac{3}{8} \\ \frac{1}{8}(3u_D + 6u_U - u_R), & \text{se } \frac{3}{8} \leq \hat{u} \leq \frac{3}{4} \\ \frac{1}{4}(3u_D + u_U), & \text{se } \frac{3}{4} < \hat{u} < 1 \\ u_U, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

O cálculo de $u_{i+1,j}^n$ é feito de maneira análoga, e assim por diante para as demais componentes dos termos convectivos.

6.2.4 Iteração de Pressão

Estimadas as componentes $u_{i+1/2,j}^{n+1,(0)}$ e $v_{i,j+1/2}^{n+1,(0)}$ para todas as células, passa-se para a segunda etapa, onde se ajusta tais componentes por meio da iteração da pressão, como segue:

Para um passo k da iteração, a partir de $k = 0$, calcula-se a dilatação $D_{i,j}^{n+1,(k)}$ em cada célula (i, j) , definida como

$$D_{i,j}^{n+1,(k)} = \frac{u_{i+1/2,j}^{n+1,(k)} - u_{i-1/2,j}^{n+1,(k)}}{\delta x} + \frac{v_{i,j+1/2}^{n+1,(k)} - v_{i,j-1/2}^{n+1,(k)}}{\delta y}.$$

A dilatação é proporcional ao fluxo de massa em cada célula, de modo que se a dilatação for nula em todas as células, a equação da continuidade (6.2) - cujo segundo termo da equação acima representa sua discretização em diferenças finitas - está satisfeita em todo o domínio e o escoamento é incompressível. Para tal verificação, considera-se a dilatação máxima obtida no domínio. Caso

$$\max_{i,j} \left| D_{i,j}^{n+1,(k)} \right| \geq \epsilon,$$

em que ϵ é uma precisão definida, o escoamento não deve ser considerado incompressível e ajustes são necessários. Em geral, $\epsilon = \sigma_1/N$, onde N é o número de células do domínio computacional. Nesse trabalho, toma-se $\sigma_1 = 10^{-7}$.

Os ajustes são feitos da seguinte maneira:

Em primeiro lugar, ajusta-se a pressão em cada célula, por meio da expressão

$$p_{i,j}^{n+1,(k+1)} = p_{i,j}^{n+1,(k)} + \delta p_{i,j}^{(k)},$$

onde

$$\delta p_{i,j}^{(k)} = \frac{-\beta_0 D_{i,j}^{n+1,(k)}}{2\delta t \left(\frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta y^2} \right)}$$

e $p_{i,j}^{n+1,(0)} = p_{i,j}^n$. β_0 é um fator de relaxação, $0 < \beta_0 < 2$. É usado nesse trabalho $\beta_0 = 1$.

As componentes da velocidade - exceto aquelas especificadas em pontos de fronteira - são então ajustadas por meio das expressões

$$\begin{aligned} u_{i+1/2,j}^{n+1,(k+1/2)} &= u_{i+1/2,j}^{n+1,(k)} + \frac{\delta t}{\delta x} \delta p_{i,j}^{(k)} \\ u_{i-1/2,j}^{n+1,(k+1)} &= u_{i-1/2,j}^{n+1,(k+1/2)} - \frac{\delta t}{\delta x} \delta p_{i,j}^{(k)} \\ v_{i,j+1/2}^{n+1,(k+1/2)} &= v_{i,j+1/2}^{n+1,(k)} + \frac{\delta t}{\delta y} \delta p_{i,j}^{(k)} \\ v_{i,j-1/2}^{n+1,(k+1)} &= v_{i,j-1/2}^{n+1,(k+1/2)} - \frac{\delta t}{\delta y} \delta p_{i,j}^{(k)}. \end{aligned}$$

Nesse processo de percorrimento das células, as componentes da velocidade são atualizadas duas vezes - exceto obviamente as especificadas por condições de fronteira, e aquelas nos extremos do domínio computacional. Portanto a primeira correção leva uma componente ao nível $(k + 1/2)$ presente nas equações acima, sendo a definitiva a que leva ao passo $(k + 1)$. Para tal, supõe-se que o processo é feito incrementando-se sucessivamente i e j , isto é, percorrendo-se as células da esquerda para a direita e de baixo para cima - procedimento adotado neste projeto - ou vice-versa.

Após a atualização da pressão e das velocidades em cada célula, incrementa-se k , repetindo-se o processo, até que

$$\max_{i,j} \left| D_{i,j}^{n+1,(k)} \right| < \epsilon,$$

para um certo valor de k . Supondo que tal condição esteja satisfeita para uma iteração $(k) \equiv (K)$, a segunda etapa está concluída, e então

$$u_{i+1/2,j}^{n+1} = u_{i+1/2,j}^{n+1,(K)} \quad v_{i,j+1/2}^{n+1} = v_{i,j+1/2}^{n+1,(K)} \quad p_{i,j}^{n+1} = p_{i,j}^{n+1,(K)}.$$

Quando o processo de iteração de pressão está concluído, todas as variáveis do sistema foram avançadas no tempo, e então passa-se ao próximo passo na escala temporal, incrementando-se n .

O processo deve ser repetido até que se atinja o estado estacionário. Tal condição

pode ser verificada por meio do cálculo do resíduo RES^{n+1} . Caso

$$\text{RES}^{n+1} = \sum_i \sum_j \left(\left| u_{i+1/2,j}^{n+1} - u_{i+1/2,j}^n \right| + \left| v_{i,j+1/2}^{n+1} - v_{i,j+1/2}^n \right| \right) \leq \xi,$$

onde ξ é uma precisão definida, a simulação está concluída. Em geral $\xi = \sigma_2/N$, onde N é o número de células do domínio computacional. Neste trabalho, adota-se $\sigma_2 = 10^{-5}$.

6.2.5 Condições de Contorno

Admitindo-se que células computacionais são adjacentes às fronteiras do domínio computacional, como nos dois problemas abordados neste trabalho - ver figuras 6.1 e 6.2 - as condições de contorno são tratadas como segue:

- Paredes rígidas não-escorregadias: Em tais paredes, a velocidade tangencial deve ser nula, pela condição de não-escorregamento. Ou seja, na parede, $v_t = 0$. No método MAC, as componentes da velocidade tangenciais às paredes não estão definidas em pontos adjacentes a estas, de modo que se considera

$$v_t|_{\text{Ext}} = -v_t|_{\text{Int}}, \quad (6.9)$$

onde Int e Ext designam pontos nas células adjacentes à fronteira dentro e fora do domínio, respectivamente, onde v_t é definida. Desta forma, durante o cálculo dos termos convectivos, tem-se uma expressão análoga a equação (6.8), dada por

$$\bar{v}_t|_{\text{parede}} = \frac{v_t|_{\text{Int}} + v_t|_{\text{Ext}}}{2} = 0, \quad (6.10)$$

e a condição se satisfaz, pois não há convecção nesse ponto.

A parede é considerada impermeável, e portanto a velocidade normal adjacente a esta é nula, e tem-se $v_n|_{\text{parede}} = 0$.

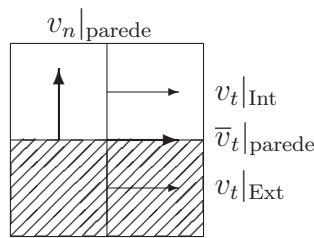


Figura 6.6: Velocidades normal e tangencial em paredes rígidas.

- Paredes rígidas escorregadias ou móveis: no caso de paredes rígidas que se deslocam com uma certa velocidade v_0 ou em paredes escorregadias em que o fluido em contato se desloca com tal velocidade, tem-se $v_t = v_0$, de modo que se aplica a condição

$$v_t|_{\text{Ext}} = 2v_0 - v_t|_{\text{Int}}.$$

Dessa forma,

$$\bar{v}_t|_{\text{parede}} = \frac{v_t|_{\text{Int}} + v_t|_{\text{Ext}}}{2} = v_0.$$

A velocidade normal é nula como no caso anterior.

- Regiões de entrada de fluido: em geral, as velocidades normal e tangencial às interfaces de entrada são conhecidas, dadas por

$$v_n|_{\text{entrada}} = f_t \qquad \bar{v}_t|_{\text{entrada}} = g_t,$$

onde f_t e g_t são perfis conhecidos de velocidades, em geral funções da direção tangencial à região de entrada, podendo ser constantes, como admite-se no caso da região de entrada do problema do degrau neste trabalho. Em geral, admite-se que o fluido entra na direção normal à parede, considerando-se $g_t \equiv 0$ e adotando-se a equação (6.10) para a velocidade tangencial.

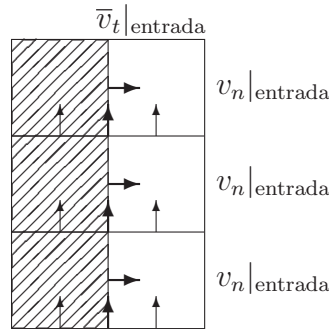


Figura 6.7: Velocidades normal e tangencial em regiões de entrada de fluido.

- Regiões de saída de fluido: existem diversas formas de tratar a solução numérica em tais regiões. Em geral nestas regiões assume-se que não há variação das componentes da velocidade na direção normal à saída, isto é,

$$\frac{\partial v_t}{\partial \hat{n}} \Big|_{\text{saída}} = 0 \qquad \frac{\partial v_n}{\partial \hat{n}} \Big|_{\text{saída}} = 0.$$

Desta forma, aplica-se às condições

$$v_t|_{\text{Int}} = v_t|_{\text{IInt}} \qquad v_n|_{\text{saída}} = v_n|_{\text{Int}},$$

onde tais velocidades são representadas como na figura 6.8.

6.2.6 Condições de Estabilidade

A natureza explícita do método MAC o sujeita a certas restrições com relação ao valor de δt :

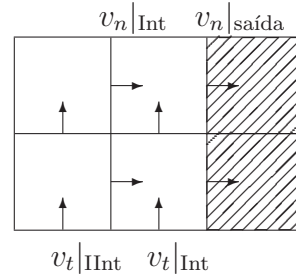


Figura 6.8: Velocidades normal e tangencial em regiões de saída de fluido.

- O escoamento não deve cruzar mais de uma célula em qualquer direção a cada etapa de tempo, o que resulta na restrição

$$\delta t_1 < \min \left(\frac{\delta x}{|u|_{\max}}, \frac{\delta y}{|v|_{\max}} \right). \quad (6.11)$$

Tal restrição se deve ao fato de que as aproximações convectivas assumem variações apenas entre células adjacentes. Tal restrição é conhecida como condição CFL, devido a trabalho de Courant, Friedrichs e Lewy.

- O termo difusivo presente nas equações de momento exige que

$$\delta t_2 < \frac{Re}{2} \left(\frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta y^2} \right)^{-1}. \quad (6.12)$$

- Hirt e Cook também destacam por meio de análise linear que

$$\delta t_3 < \frac{2}{Re \max(|u|_{\max}^2, |v|_{\max}^2)}. \quad (6.13)$$

Portanto, δt satisfaz as restrições (6.11), (6.12) e (6.13) se

$$\delta t \leq \min(\delta t_1, \delta t_2, \delta t_3).$$

Neste trabalho, atualiza-se δt a cada passo de tempo por meio da expressão

$$\delta t = \tau \min(\delta t_1, \delta t_2, \delta t_3), \quad (6.14)$$

com $0 < \tau < 1$, e $\delta t_1, \delta t_2, \delta t_3$ dados através das restrições (6.11)-(6.13) convertidas em igualdades. As simulações são executadas com $\tau = 0.5$.

6.3 Simulações

Os dois problemas são dados como segue:

- Cavidade

Nesse problema, um fluido inicialmente em repouso com viscosidade cinemática ν está contido numa cavidade quadrada de lado L , preenchendo-a por completo. Instantaneamente, a tampa superior desta passa a se deslocar com velocidade U_0 , conforme figura 6.9. As paredes são todas rígidas e impermeáveis, sendo as paredes laterais e inferior não-escorregadias, e a superior móvel não-escorregadia, sendo tratada como escorregadia onde o fluido se desloca com velocidade U_0 . O número de Reynolds característico de tal problema é dado por $Re = \frac{U_0 L}{\nu}$.

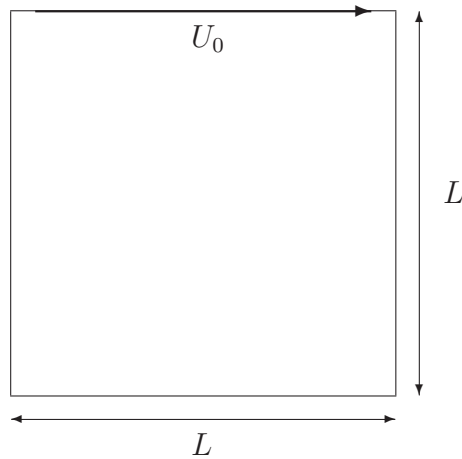


Figura 6.9: Problema da cavidade.

- Degrau

Inicialmente, o fluido de viscosidade cinemática ν em repouso preenche uma região de comprimento L constituída de um degrau de comprimento ℓ , mostrada na figura 6.10. Instantaneamente a entrada deste é liberada, e o fluido passa a entrar com velocidade U_0 em uma região de entrada de seção transversal h . A incompressibilidade força a mesma quantidade de fluido que entra por essa região deixá-la por uma região de saída de seção transversal H . O escoamento do fluido no interior desta região é afetado pelo degrau, de maneira que ao deixar a região acima do degrau, o fluido tende a ocupar toda a área de seção H além deste, criando uma zona de recirculação nas proximidades de sua parede lateral. Admite-se neste projeto que a razão $\alpha = \ell/L$ é dada por $\alpha = 1/4$, e que $h/H = 1/2$, de modo que o degrau ocupe metade da altura da região, e um quarto de seu comprimento. O número de Reynolds característico é dado por $Re = \frac{U_0 h}{\nu}$.

A implementação de ambos os problemas é feita em linguagem C utilizando-se o compilador gcc. No problema da cavidade utiliza-se uma malha composta de 25×25 células computacionais, totalizando 625 células ao todo. No problema do degrau a malha é composta de 80×40 células, a um total de 3200 células.

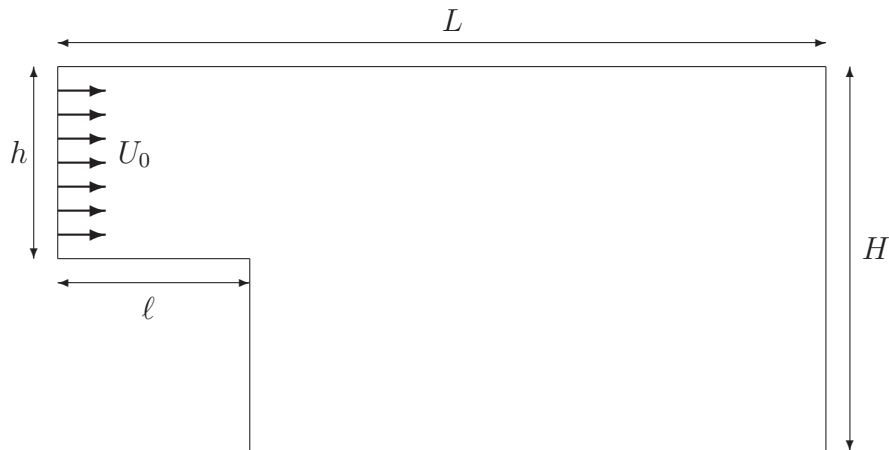


Figura 6.10: Problema do degrau.

6.3.1 Resultados

No caso do problema da cavidade, são realizadas simulações para número de Reynolds 1, 10 e 100. O estado estacionário é atingido após, respectivamente, 17501, 18219 e 4493 iterações, sendo que o decaimento dos resíduos em função do número de iterações para $Re = 1$ e $Re = 10$ apresenta o mesmo comportamento, conforme figura 6.11.

Já no caso do problema do degrau, as simulações foram executadas para os mesmos valores do número de Reynolds, e ao contrário do ocorrido anteriormente, pequenas variações ocorrem no número de iterações com a variação do número de Reynolds. Entretanto, há maior sensibilidade quanto ao comportamento do resíduo, e valores de Reynolds acima de 100 podem causar instabilidade numérica. Uma maneira de contornar tal situação é refinar a malha utilizada, o que força um número maior de passos no processo de iteração de pressão. Outra maneira é reduzir o fator τ na equação (6.14) para valores menores que o utilizado. O estado estacionário é atingido após 5400, 5898 e 3447 passos de tempo, para $Re = 1$, 10 e 100, respectivamente. Novamente, o decaimento do resíduo apresenta comportamento semelhante para Reynolds 1 e 10 (figura 6.12).

As figuras 6.13 a 6.20 ilustram os resultados obtidos pelas simulações.

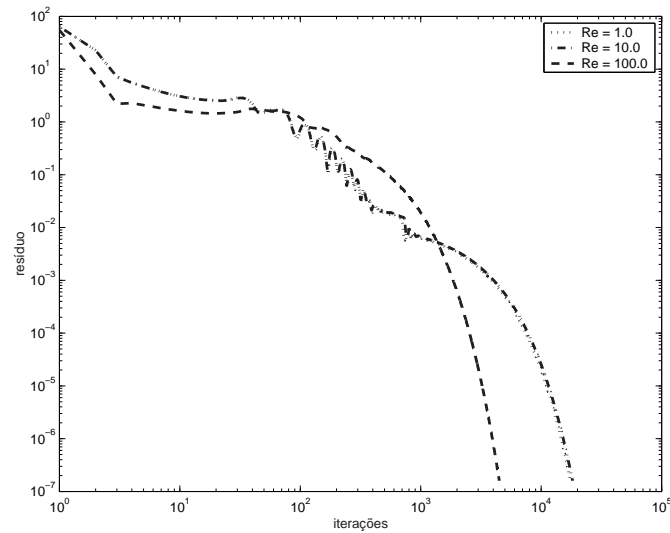


Figura 6.11: Evolução do resíduo no problema da cavidade.

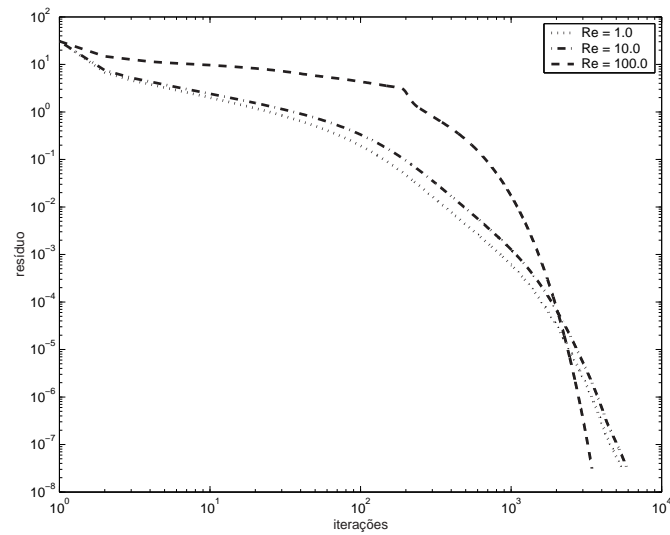


Figura 6.12: Evolução do resíduo no problema do degrau.

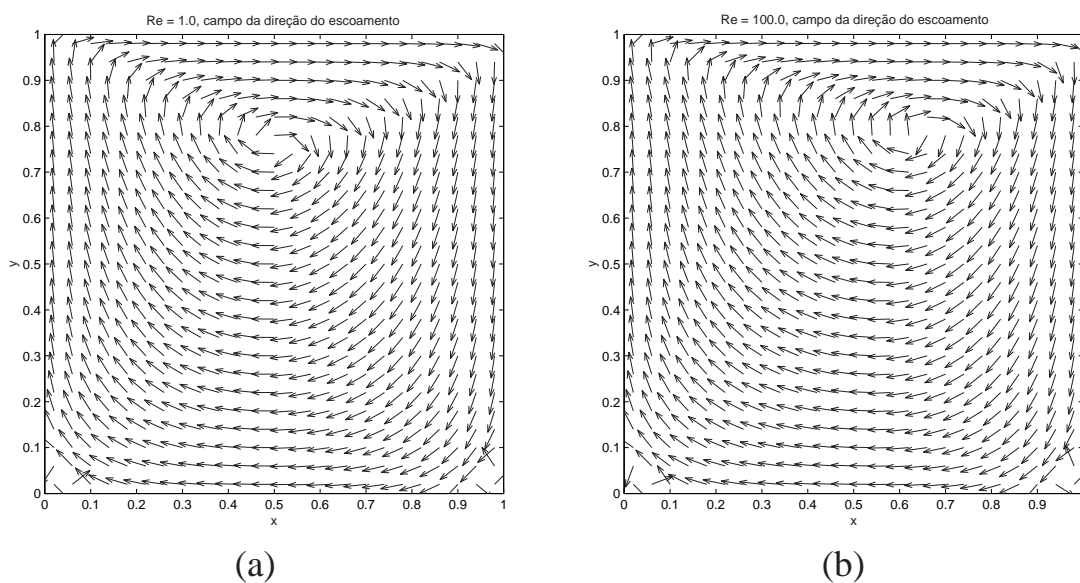


Figura 6.13: Campos de direção do escoamento no problema da cavidade.
(a) $Re = 1.0$. (b) $Re = 100.0$

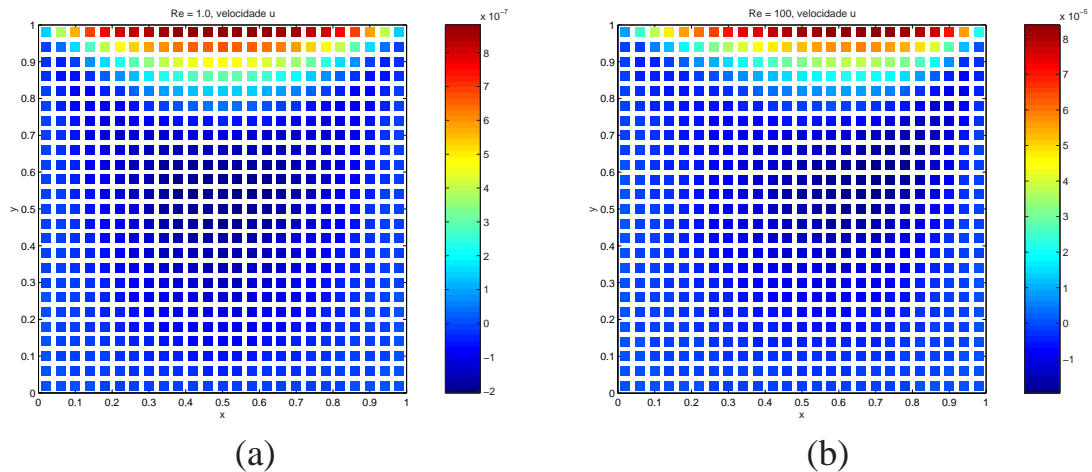


Figura 6.14: Componente u da velocidade no problema da cavidade. (a) $Re = 1.0$. (b) $Re = 100.0$

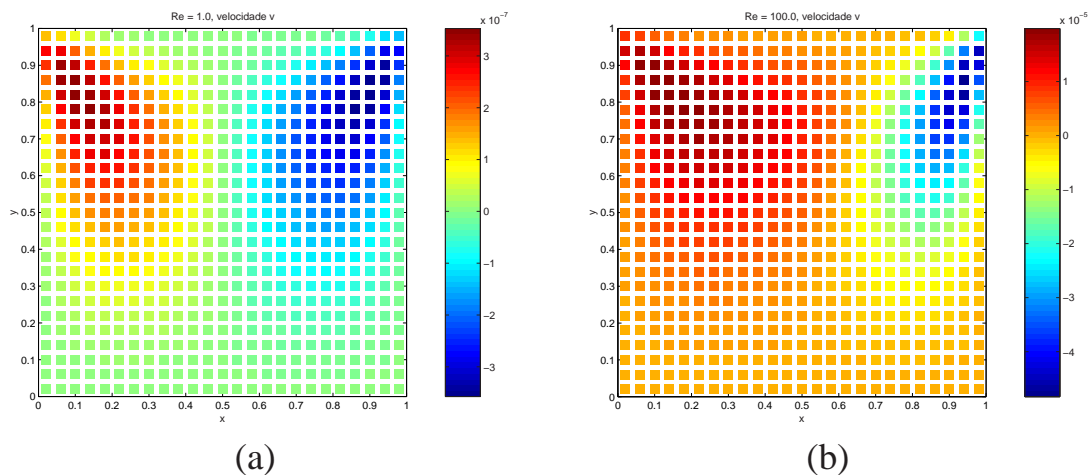


Figura 6.15: Componente v da velocidade no problema da cavidade. (a) $Re = 1.0$. (b) $Re = 100.0$

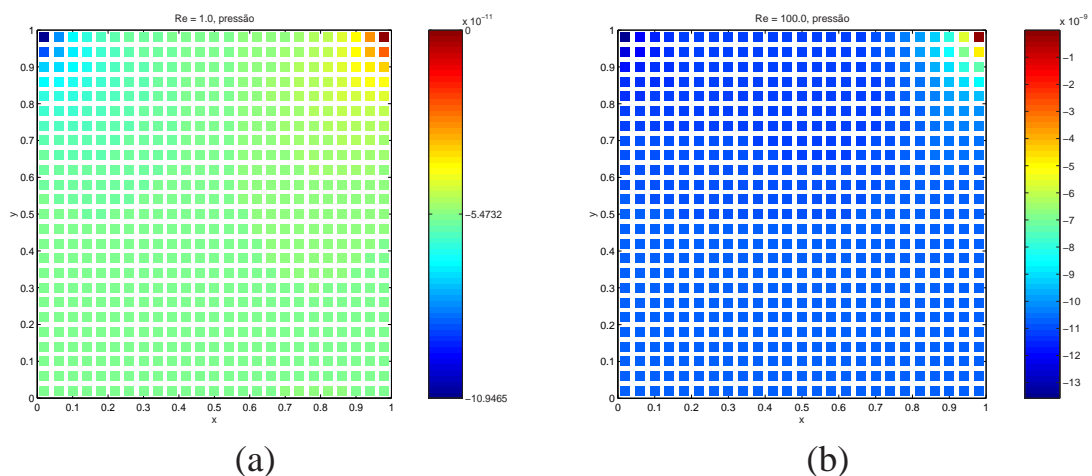


Figura 6.16: Taxa de pressão a densidade constante p na cavidade. Os valores referem-se à pressão relativa em relação à pressão inicial. (a) $Re = 1.0$. (b) $Re = 100.0$

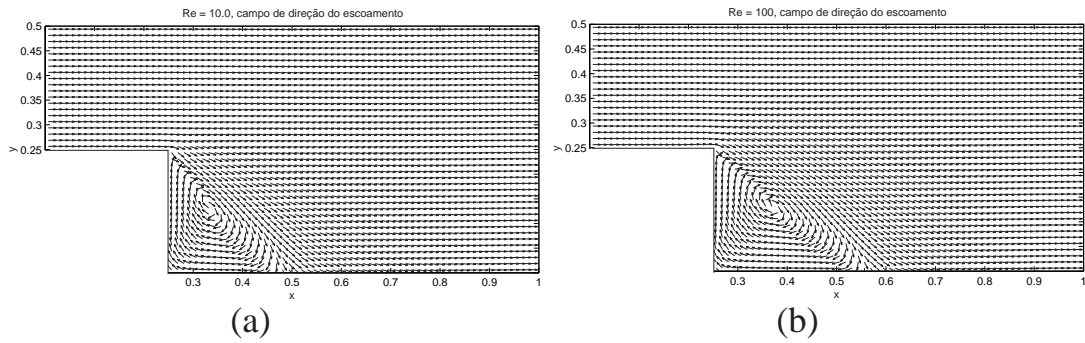


Figura 6.17: Campos de direção do escoamento no problema do degrau.
 (a) $Re = 10.0$. (b) $Re = 100.0$

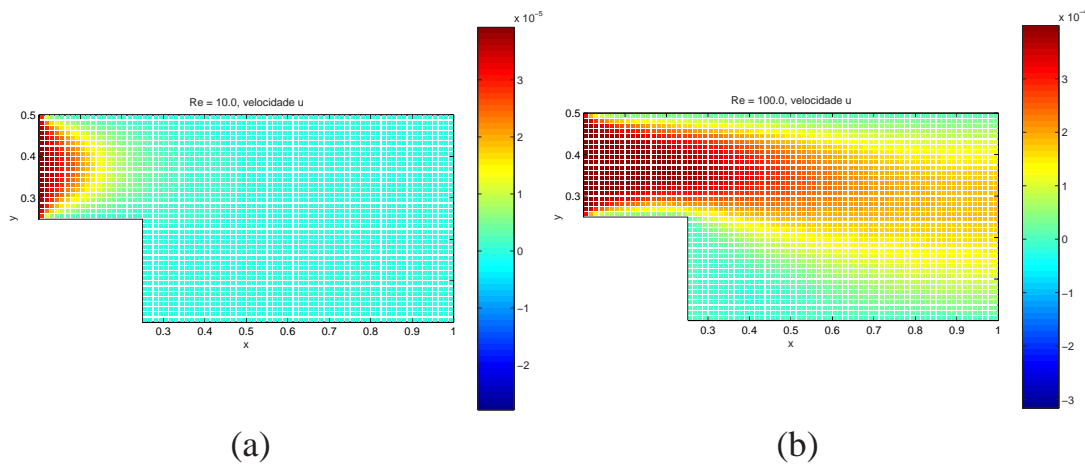


Figura 6.18: Componente u da velocidade no problema do degrau.
 (a) $Re = 10.0$. (b) $Re = 100.0$

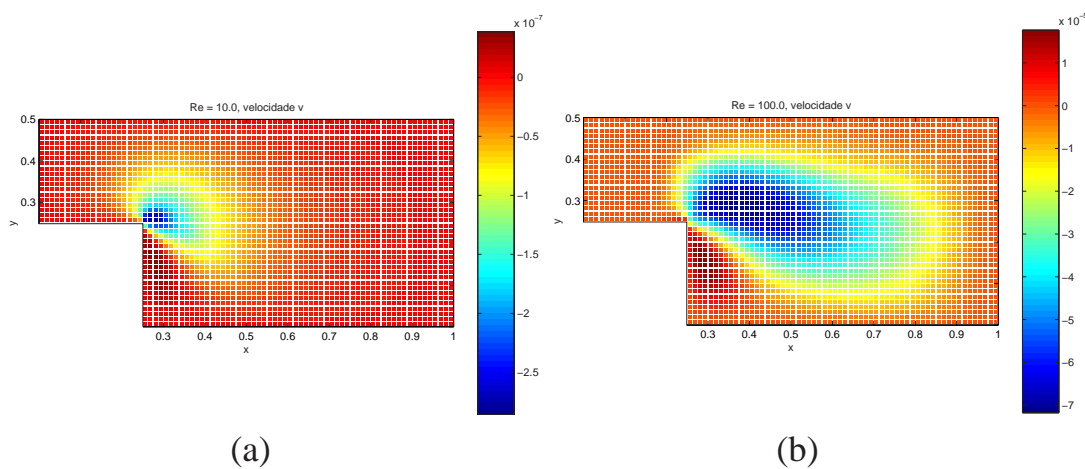


Figura 6.19: Componente v da velocidade no problema do degrau.
 (a) $Re = 10.0$. (b) $Re = 100.0$

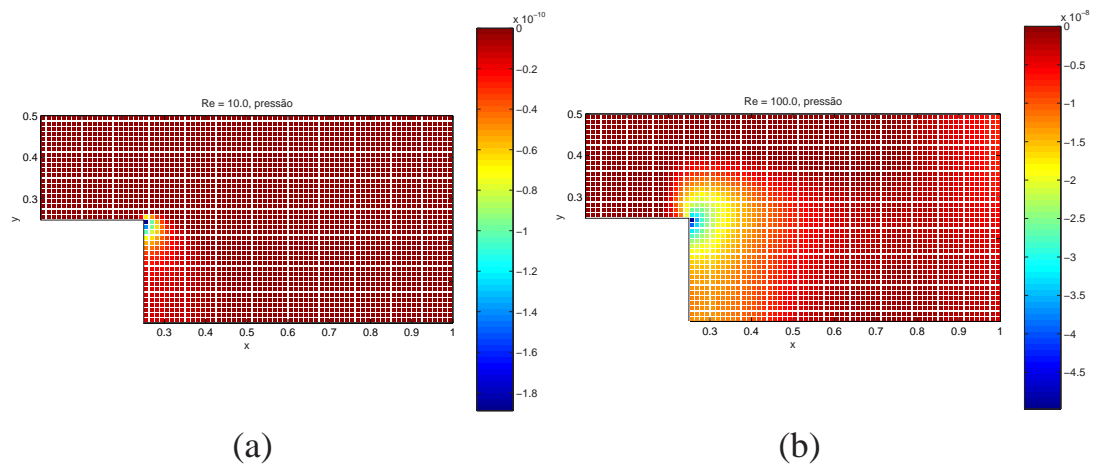


Figura 6.20: Taxa de pressão a densidade constante p no problema do degrau. Os valores referem-se à pressão relativa em relação à pressão inicial.
(a) $Re = 10.0$. (b) $Re = 100.0$

Referências Bibliográficas

- [1] M. A. Alves, P. J. Oliveira, and F. T. Pinho. “a convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection”. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41: 47–75, 2003.
- [2] D. A. Anderson, J. C. Tannehill, and R. H. Pletcher. *Computacional Fluid Mechanics and Heat Transfer*. McGraw-Hill, 1997.
- [3] A. J. Chorin. *AEC Research and Development Report*. NYO-1480-61, 1966.
- [4] F. P. Costa. *Solução Numérica de Equações Diferenciais*. Universidade Estadual de Santa Cruz, 2002.
- [5] A. O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. EDUSP, 2000.
- [6] F. H. Harlow and J. E. Welch. “Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface”. *Physics of Fluids*, 8: 2182–2189, 1965.
- [7] C. W. Hirt and J. L. Cook. “Calculating Three-Dimensional Flows around Structures and over Rough Terrain”. *Journal of Computational Physics*, 10: 324–340, 1972.
- [8] M. K. Kaibara, V. G. Ferreira, and H. A. Navarro. “upwinding finite-difference schemes for convection dominated problems part i: Theoretical results”. *Notas do ICMC, Série Computação*, 80, 2004.
- [9] G. D. Smith. *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Oxford University Press, Oxford, 3 edition, 1985.
- [10] M. F. Tomé. *GENSMAC: A Multiple Free Surface Fluid Flow Solver*. Ph.d. thesis, University of Strathclyde, Dept. of Mathematics, Glasgow, U. K., 1993.

Resolução dos Exercícios

A.1 Equações Parabólicas

4. A equação $U_t - U_{xx} = 0$ é aproximada no ponto (ih, jk) pela equação de diferença:

$$\theta \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2k} \right) + (1 - \theta) \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{k} \right) - \frac{1}{h^2} \delta_x^2 u_{i,j} = 0$$

onde $\delta_x^2 = u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}$. Mostre que o erro de truncamento local neste ponto é dado por $T_{i,j} = -\frac{1}{2}k(1 - \theta)U_{tt} - \frac{1}{12}h^2U_{xxxx} + O(k, h^2)$ e encontre o valor de θ que reduz esse erro para $O(k^2, h^4)$.

Resolução:

$$T_{i,j} = \theta \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j-1}}{2k} + (1 - \theta) \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{k} - \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2}$$

Expanda cada termo por série de Taylor sobre o ponto (ih, jk) para obter

$$T_{i,j} = -\frac{1}{2}k(1 - \theta) \frac{\partial^2 U_{i,j}}{\partial t^2} - \frac{1}{12}h^2 \frac{\partial^4 U_{i,j}}{\partial x^4} + O(k^2, h^4)$$

Onde

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

e, portanto,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^4 U}{\partial x^4}$$

Logo

$$T_{i,j} = \left(-\frac{1}{2}k(1 - \theta) - \frac{1}{12}h^2 \right) \frac{\partial^4 U_{i,j}}{\partial x^4} + O(k^2, h^4)$$

Assim,

$$\frac{1}{2}k(1 - \theta) = -\frac{1}{12}h^2$$

isto é,

$$\theta = 1 + \frac{h^2}{6k}$$

fornece o resultado procurado.

5. Mostre que o erro de truncamento local no ponto (ih, jk) da aproximação de Crank-Nicolson para $U_t = U_{xx}$ é $O(h^2, k^2)$.

Resolução:

$$T_{i,j} = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - \frac{1}{2h^2}(\delta_x^2 U_{i,j+1} - \delta_x^2 U_{i,j})$$

Expanda cada termo por série de Taylor sobre o ponto (ih, jk) para obter

$$T_{i,j} = \left[\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]_{i,j} + \frac{1}{2}k \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right]_{i,j} - \frac{1}{12}h^2 \left(\frac{\partial^4 U}{\partial x^4} \right)_{i,j} + O(k^2, h^4, kh^2)$$

Onde $\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0$, o que mostra o resultado.

6. A equação $\alpha U_t + U_x - f(x, t) = 0$, α constante, é aproximada no ponto (ih, jk) no plano xt pelo esquema de diferenças finitas:

$$\frac{\alpha}{k} \left[u_{i,j+1} - \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j}}{2} \right] + \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} \right) - f_{i,j} = 0$$

Investigue a consistência desse esquema para:

1. $k = rh$;
2. $k = rh^2$;

com $r > 0$ constante.

Resolução:

$$T_{i,j} = F_{i,j}(U) = \left[U_{i,j+1} - \frac{U_{i+1,j} + U_{i-1,j}}{2} \right] + \left(\frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h} \right) - f_{i,j}$$

Expanda cada termo por série de Taylor sobre o ponto (ih, jk) para obter

$$T_{i,j} = \frac{\alpha k}{2} U_{tt} + \frac{\alpha k^2}{6} U_{ttt} - \frac{\alpha h^2}{2k} U_{xx} + \frac{h^2}{6} U_{xxx} + O(k^3, h^4)$$

- Se $k = rh$ então

$$T_{i,j} = \frac{\alpha rh}{2} U_{tt} + \frac{\alpha r^2 h^2}{6} U_{ttt} - \frac{\alpha h^2}{2rh} U_{xx} + \frac{h^2}{6} U_{xxx} + O(k^3, h^4)$$

Se $h \rightarrow 0$ então $T_{i,j} \rightarrow 0$ e o esquema é consistente.

- Se $k = rh^2$ então

$$T_{i,j} = \frac{\alpha rh^2}{2} U_{tt} + \frac{\alpha r^2 h^4}{6} U_{ttt} - \frac{\alpha h^2}{2rh^2} U_{xx} + \frac{h^2}{6} U_{xxx} + O(k^3, h^4)$$

Se $h \rightarrow 0$ então $T_{i,j} \rightarrow \frac{\alpha}{2r}$, isto é, o esquema é consistente com a equação $\alpha U_t + U_x - \frac{\alpha}{2r} U_{xx} - f = 0$ e não com a equação $\alpha U_t + U_x - f = 0$.

7. A equação $U_t = aU_{xx} - \beta U$, $0 < x < 1$, $t > 0$, onde α e β são constantes reais positivas, é aproximada no ponto (ih, jk) pelo esquema de diferenças explícito

$$\frac{1}{k} \Delta_t u_{i,j} = \frac{a}{h^2} \delta_x^2 u_{i,j} - \beta u_{i,j}$$

Dado que U tem valores iniciais contínuos ao longo do intervalo $0 \leq x \leq 1$, $quadt = 0$, valores de contorno conhecidos em $x = 0$ e $x = 1$ e que $Nh = 1$, encontre um limitante para $r = \frac{k}{h^2}$ de estabilidade.

Resolução:

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = r\alpha(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) - k\beta u_{i,j}$$

$$u_{i,j+1} = r\alpha u_{i-1,j} + (1 - 2r\alpha - k\beta)u_{i,j} + r\alpha u_{i+1,j}$$

Temos então que $u_{j+1} = Au_j + b_j$ onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 - 2r\alpha - k\beta & r\alpha & & & & \\ r\alpha & 1 - 2r\alpha - k\beta & r\alpha & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & r\alpha & 1 - 2r\alpha - k\beta & r\alpha \\ & & & & r\alpha & 1 - 2r\alpha - k\beta \end{bmatrix}$$

e b_j é um vetor coluna de valores conhecidos.

As equações serão estáveis se $\|A\| \leq 1$. Como A é real e simétrica,

$$\|A\|_2 = \rho(A) = \max |1 - k\beta - 4r\alpha \sin^2(\frac{s\pi}{2N})|, \quad s = 1, \dots, N - 1.$$

O maior valor de r é dado por

$$-1 \leq 1 - rh^2\beta - 4r\alpha \operatorname{sen}^2\left(\frac{(N-1)\pi}{2N}\right)$$

que implica que $r \leq \frac{2}{4\alpha + \beta h^2}$.

8. A equação $U_t = aU_{xx}$, $0 < x < 1$, $t > 0$, onde $a > 0$, é aproximada no ponto (ih, jk) pelo esquema de diferenças regressivas completamente implícito (backward Euler):

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = ra(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1})$$

onde $r = \frac{k}{h^2}$ e $Nh = 1$. Assumindo que os valores iniciais e de contorno são conhecidos, prove que:

1. o esquema é incondicionalmente estável;
2. o erro de truncamento local é $O(k, h^2)$.

Resolução:

- a) Mostre que $u_{j+1} = (I - raT_{N-1})^{-1}u_j + b_j$ onde

$$T_{N-1} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

A matriz $A = (I - raT_{N-1})^{-1}$ é real e simétrica e então,

$$\|A\|_2 = \rho(A) = \frac{1}{1 + 4ra \operatorname{sen}^2\left(\frac{s\pi}{2N}\right)} < 1$$

para todo $r > 0$.

- b)

$$T_{i,j} = k \left(\frac{1}{2}U_{tt} - aU_{xxt} \right)_{i,j} - \frac{1}{12}ah^2(U_{xxx})_{i,j} + k^2 \left(\frac{1}{6}U_{ttt} - \frac{1}{2}aU_{xxtt} \right)_{i,j} + \dots$$

9. A equação $U_t = U_{xx}$, $0 < x < 1$, $t > 0$, é aproximada no ponto (ih, jk) pelo

esquema

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = r[\theta(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}) + (1 - \theta)(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j})]$$

onde $r = \frac{k}{h^2}$, $0 \leq \theta \leq 1$ e $Nh = 1$. Assumindo que os valores iniciais e de contorno são conhecidos, prove que:

1. o esquema é incondicionalmente estável no sentido de Lax-Ritchmyer para $0.5 \leq \theta \leq 1$ e estável para $0 \leq \theta \leq 0.5$ quando $r \leq \frac{1}{2(1 - 2\theta)}$;
2. o método de Von Neumann fornece o mesmo resultado.

Resolução:

- a) A matriz A das equações é $(I - r\theta T_{N-1})^{-1}[I + r(1 - \theta)T_{N-1}]$. Como $(I - r\theta T_{N-1})$ e $[I + r(1 - \theta)T_{N-1}]$ são ambas simétricas e comutam, a matriz A é simétrica. Portanto a sua norma-2 é igual ao raio espectral. As equações serão estáveis quando

$$-1 \leq \frac{1 - 4r(1 - \theta) \operatorname{sen}^2(\frac{s\pi}{2N})}{1 - 4r\theta \operatorname{sen}^2(\frac{s\pi}{2N})} \leq 1$$

A desigualdade da direita é automaticamente satisfeita para $r > 0$, $0 \leq \theta \leq 1$. A desigualdade da esquerda fornece $2r(1 - 2\theta) \leq 1$, que é o resultado.

- b) Substituindo $u_{p,q}$ por $e^{i\beta h} \xi^q$ segue que

$$\xi = \frac{1 - 4r(1 - \theta) \operatorname{sen}(\frac{\beta h}{2})}{1 + 4r\theta \operatorname{sen}(\frac{\beta h}{2})}$$

Como $u_{p,q}$ não cresce exponencialmente com q , a condição para estabilidade é $|\xi| \leq 1$, que é exatamente o mesmo resultado do item a).

10. Use o método de série de Fourier para provar que:

1. A aproximação progressiva explícita

$$u_{p,q+1} - u_{p,q} = r(u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q})$$

para a equação $U_t = U_{xx}$ é estável para $r \leq \frac{1}{2}$;

2. A aproximação central explícita (Método de Richardson)

$$u_{p,q+1} - u_{p,q-1} = 2r(u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q})$$

para a equação $U_t = U_{xx}$ é instável para $r \geq 0$;

3. A aproximação implícita

$$u_{p,q+1} - 2u_{pq} + u_{p,q-1} = \frac{1}{2}r^2[(u_{p-1,q} - 2u_{pq} + u_{p+1,q}) + (u_{p-1,q-1} - 2u_{p,q-1} + u_{p+1,q-1})]$$

para a equação hiperbólica $U_{tt} = U_{xx}$ é estável para $r \geq 0$, $r = \frac{k}{h}$.

Resolução:

a) Tem-se que $\xi = 1 - 2r(1 - \cos(\beta h)) = 1 - 4r^2 \sin^2(\frac{\beta h}{2})$. Impondo $|\xi| \leq 1$ segue que $r \leq \frac{1}{2}$

b) Tem-se que $\xi^2 + 8r\xi \sin^2(\frac{\beta h}{2}) - 1 = 0$, então $\xi_1 = -\frac{1}{\xi_2}$ e $\xi_1 + \xi_2 = -8r \sin^2(\frac{\beta h}{2})$. Para que se tenha estabilidade $|\xi_1| \leq 1$ e $|\xi_2| \leq 1$. Quando $|\xi_1| < 1$, tem-se $|\xi_2| > 1$ gerando instabilidade. Quando $\xi_1 = 1$, $\xi_2 = -1$ então $\xi_1 + \xi_2 = 0$, fornecendo $r = 0$.

c) Tem-se que $\xi^2 - 2A\xi + 1 = 0$, onde $A = \frac{1}{1 + 2r^2 \sin^2(\frac{\beta h}{2})} < 1$. Portanto $\xi = A + -i(1 - A^2)^{\frac{1}{2}}$, fornecendo $|\xi| \leq 1$ para todos os valores reais de r .

11. A equação $U_t = U_{xx} + \frac{1}{x}U_x$, $0 < x < 1$, $t > 0$ é aproximada no ponto (ph, qk) pela equação de diferenças

$$\frac{1}{k}\Delta_t u_{p,q} = \frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_{p,q} + \frac{1}{2xh}(\Delta_x u_{p,q} \nabla_x u_{p,q})$$

use o método de Von Neumann para mostrar que as equações de diferenças são estáveis para $x > 0$ quando

$$\frac{k}{h^2} \leq \frac{2}{4 + p^{-1}}$$

Em $x = 0$, avalie esta equação dado que $U_x = 0$ em $x = 0$, $t > 0$ e U é constante em $x = 1$.

Resolução:

Substituindo $u_{p,q}$ por $e^{i\beta ph} \xi^q$ segue que

$$\xi = 1 - 4r \sin^2(\frac{\beta h}{2}) + i\frac{r}{p} \sin(\beta h), \quad r = \frac{k}{h^2}, \quad p \geq 1$$

Como ξ é imaginário faz-se

$$\xi^2 = 1 + 16r^2 \sin^4(\frac{\beta h}{2}) - 4r \sin^2(\beta h) \left(2 - \frac{r}{p^2} \cos^2(\frac{\beta h}{2})\right)$$

Desta forma, $|\xi| \leq 1$ se $4r \operatorname{sen}^2(\beta h) \left(2 - \frac{r}{p^2} \cos^2\left(\frac{\beta h}{2}\right)\right) \geq 16r^2 \operatorname{sen}^4\left(\frac{\beta h}{2}\right)$, fornecendo

$$r \leq \frac{2}{4 + \frac{1}{p^2}}$$

Vamos agora avaliar $U_t = U_{xx} + \frac{U_x}{x}$ em $x = 0$.

Tem-se que, em $x = 0$,

$$\frac{U_x}{x} = \frac{U_{xx}}{1}$$

donde

$$U_t = 2U_{xx}$$

que pode ser aproximada pela equação

$$\frac{u_{0,q+1} - u_{0,q}}{k} = 2 \frac{u_{-1,q} - 2u_{0,q} + u_{1,q}}{h^2}$$

Como $U_x = 0$ em $x = 0$, podemos aproximar essa derivada por diferenças centrais e obter $u_{-1,q} = u_{1,q}$. Assim,

$$u_{0,q+1} = (1 - 4r)u_{0,q} + 4ru_{1,q}$$

Na forma matricial, tem-se

$$u_{q+1} = Au_q + c_q,$$

onde c_q é um vetor coluna de constantes e

$$A = \begin{bmatrix} 1 - 4r & 4r & & & & & \\ (1 - \frac{1}{2})r & (1 - 2r) & (1 + \frac{1}{2})r & & & & \\ & (1 - \frac{1}{4})r & (1 - 2r) & (1 + \frac{1}{4})r & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & (1 - \frac{1}{2p})r & (1 - 2r) & (1 + \frac{1}{2p})r & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & (1 - \frac{1}{2(N-1)})r & (1 - 2r) \end{bmatrix}$$

Quando $r \leq \frac{1}{4}$ a soma dos módulos dos termos ao longo de cada linha é menor ou igual a um, ou seja $\|A\|_\infty \leq 1$

A.2 Equações Hiperbólicas

1. A função U satisfaz a equação $U_t + U_x = 0$, $0 < x < \infty$, $t > 0$ com condições de fronteira e iniciais dadas por:

$$U(0, t) = 2t, \quad t > 0$$

$$U(x, 0) = x(x - 2), \quad 0 \leq x \leq 2$$

$$U(x, 0) = 2(x - 2), \quad x \geq 2$$

Calcule:

1. uma solução analítica;
2. uma solução numérica usando o esquema explícito de Lax–Wendroff.

Resolução:

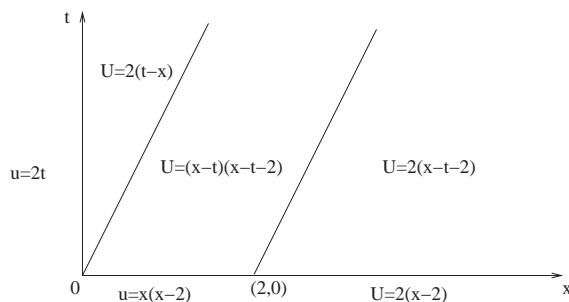
- a) Para uma equação do tipo $aU_t + bU_x = c$ tem-se $\frac{dt}{a} = \frac{dx}{b}$.

Como, neste caso, $a = b = 1$, então $\frac{dt}{1} = \frac{dx}{1}$

$$dx = dt \Rightarrow t = x + \text{const}$$

A solução ao longo da característica, para $aU_t + bU_x = c$ é $\frac{dU}{c} = \frac{dx}{b}$. Nesse caso, $c = 0$, logo $dU = 0$, e portanto, U é constante ao longo da reta $t = x + \text{const}$.

Portanto a equação característica de $R(x_R, 0)$ é $t = x = x_R$, e se $U(x, 0) = \varphi(x)$ então a solução ao longo desta característica é $U(x, t) = \varphi(x_R) = \varphi(x - t)$.
 Similarmente, se $U(0, t) = \psi(t)$, então a solução ao longo da característica $t - t_S = x$ de $S(0, t_S)$ é $U(x, t) = \psi(t - x)$. Portanto as condições do problema fornecem a solução mostrada na figura:



- b) O esquema explícito de Lax–Wendroff, para a equação $U_t + U_x = 0$ é dado por

$$u_{i,j+1} = \frac{ap}{2}(1 + ap)u_{i-1,j} + (1 - a^2p^2)u_{i,j} - \frac{ap}{2}(1 - ap)u_{i+1,j}$$

onde $p = k/h$ e $a = 1$. Tomando $h = \frac{1}{4}$ e $k = \frac{1}{8}$, tem-se $p = \frac{1}{2}$. Assim

$$u_{i,j+1} = \frac{3}{8}u_{i-1,j} + \frac{3}{4}u_{i,j} - \frac{1}{8}u_{i+1,j}$$

2. 1. Use o método de Von Neumann para mostrar que o método de Lax–Wendroff é estável para $0 < ap \leq 1$.

2. Mostre que a parte principal do erro de truncamento local é $T_{i,j} = \frac{k^2}{6}U_{ttt} + \frac{ah^2}{6}U_{xxx} \Big|_{i,j}$.

3. Prove que a solução de $U_t = aU_x$, com a constante, é a solução da aproximação de Lax–Wendroff quando $\frac{k}{h} = \frac{1}{a}$.

Resolução:

1. Substituindo $u_{p,q}$ por $e^{i\beta ph\xi^q}$ segue que

$$\xi = -2api \operatorname{sen}\left(\frac{\beta h}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta h}{2}\right) - 2a^2p^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + 1$$

Como ξ é imaginário, deseja-se que $|\xi|^2 \leq 1$.

$$|\xi|^2 = 1 - 4a^2p^2(1 - a^2p^2) \operatorname{sen}^4\left(\frac{\beta h}{2}\right)$$

Para que $|\xi|^2 \leq 1$, segue que $4a^2p^2(1 - a^2p^2) \operatorname{sen}^4\left(\frac{\beta h}{2}\right) \geq 0$; ou seja, $0, ap \leq 1$.

2. Tem-se que

$$T_{i,j}(U) = U_{i,j+1} - \frac{ap}{2}(1 + ap)U_{i-1,j} - (1 - a^2p^2)U_{i,j} + \frac{ap}{2}(1 - ap)U_{i+1,j}$$

Expandindo-se $U_{i-1,j}$ e $U_{i+1,j}$ em série de Taylor e fazendo-se as simplificações, obtém-se:

$$T_{i,j} = U_t + aU_x + \frac{k}{2}(U_{tt} - a^2U_{xx}) + \frac{a^2h^2}{6}U_{xxx} + \frac{k^2}{6}U_{ttt} + \dots$$

Como $U_t + aU_x = 0$ e $U_{tt} - a^2U_{xx}$, segue que

$$T_{i,j} = \frac{a^2h^2}{6}U_{xxx} + \frac{k^2}{6}U_{ttt} + \dots$$

3. Quando $\frac{k}{h} = \frac{1}{a}$, tem-se que

$$T_{i,j}(U) = U_{i,j+1} - U_{i-1,j}$$

Como

$$U_t = -U_x, \quad U_{tt} = U_{xx}, \quad U_{ttt} = -U_{xxx}, \quad \dots$$

segue que, expandindo $U_{i,j+1}$ e $U_{i-1,j}$ em séries de Taylor,

$$T_{i,j} = 0$$

A.3 Equações Elípticas

1. A função U satisfaz a equação $U_{xx} + U_{yy} - 32U = 0$ em cada ponto dentro do quadrado $x \pm 1$ e $y \pm 1$ e está sujeita às condições de fronteira:

$$U = 0 \text{ em } y = 1, \quad -1 \leq x \leq 1$$

$$U = 1 \text{ em } y = -1, \quad -1 \leq x \leq 1$$

$$U_x = -\frac{1}{2}U \text{ em } x = 1, \quad -1 \leq y \leq 1$$

$$U_x = \frac{1}{2}U \text{ em } x = -1, \quad -1 \leq y \leq 1$$

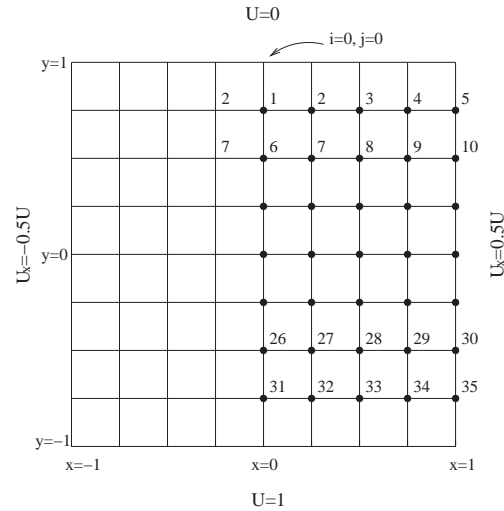
Tome $h = k = \frac{1}{4}$ e mostre que é possível escrever as equações resultantes na forma de um sistema linear $Au = b$ onde u é um vetor coluna do tipo 35×1 e b é um vetor 35×1 cujo vetor transposto é $b^t = (0, 0, \dots, 0, -1, -1, -1, -1, -1)^t$ e A é uma matriz que pode ser escrita na forma particionada

$$\begin{bmatrix} B & I & & & & \\ I & B & I & & & \\ & I & B & I & & \\ & & I & B & I & \\ & & & I & B & I \\ & & & & I & B & I \\ & & & & & I & B \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

onde

$$B = \begin{bmatrix} -6 & 2 & & & & \\ 1 & -6 & 1 & & & \\ & 1 & -6 & 1 & & \\ & & 1 & -6 & 1 & \\ & & & 2 & -\frac{25}{4} & \end{bmatrix} \quad e \quad I = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Resolução



Note que U é simétrico com relação a $x = 0$, então $U_x = 0$ em $x = 0$. Vamos aproximar U_{xx} e U_{tt} por diferenças centrais, lembrando que $k = h = \frac{1}{4}$:

$$u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1} - 6u_{i,j} = 0$$

Esta equação pode ser convenientemente representada pelos números:

$$\begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & -6 & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix} u = 0$$

Para o Ponto 1, $u_2 + 0 + u_2 + u_6 - 6u_1 = 0$

Para o Ponto 2, $u_3 + 0 + u_1 + u_7 - 6u_2 = 0$

Para o Ponto 3, $u_4 + 0 + u_2 + u_8 - 6u_3 = 0$

Para o Ponto 4, $u_5 + 0 + u_3 + u_9 - 6u_4 = 0$

Para o Ponto 5, $u_{-4} + 0 + u_4 + u_{10} - 6u_5 = 0$ e $\frac{u_{-4} - u_4}{2h} = \frac{u_5}{2}$, então $2u_4 - \frac{25}{4}u_5 + u_{10} = 0$

Para o Ponto 6, $u_7 + u_1 + u_7 + u_{11} - 6u_6 = 0$

Para o Ponto 7, $u_8 + u_2 + u_6 + u_{12} - 6u_7 = 0$

Para o Ponto 8, $u_9 + u_3 + u_7 + u_{13} - 6u_8 = 0$

Para o Ponto 9, $u_{10} + u_4 + u_8 + u_{14} - 6u_9 = 0$

Para o Ponto 10, $u_{-9} + u_5 + u_9 + u_{15} - 6u_{10} = 0$ e $\frac{u_9 - u_{-9}}{2h} = \frac{u_{10}}{2}$, então $2u_9 + u_5 - \frac{25}{4}u_{10} + u_{15} = 0$

E assim por diante.

Na forma matricial, tem-se:

$$A = \begin{bmatrix} -6 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & -6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -\frac{25}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -6 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ & & & & & & & & & & & & & \dots & \dots \\ & & & & & & & & & & & & & & \dots & \dots \\ & & & & & & & & & & & & & & \dots & \dots \\ & & & & & & & & & & & & & & \dots & \dots \end{bmatrix}_{35 \times 35}$$

que pode ser escrita na forma particionada

$$A = \begin{bmatrix} B & I & & & & & \\ I & B & I & & & & \\ & I & B & I & & & \\ & & I & B & I & & \\ & & & I & B & I & \\ & & & & I & B & I \\ & & & & & I & B \\ & & & & & & I & B \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

onde

$$B = \begin{bmatrix} -6 & 2 \\ 1 & -6 & 1 \\ & 1 & -6 & 1 \\ & & 1 & -6 & 1 \\ & & & 2 & -\frac{25}{4} \end{bmatrix} \quad e \quad I = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$