

Editado por

Eliana X.L. de Andrade

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

Rubens Sampaio

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro -

Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Geraldo N. Silva

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.7)**, as figuras em eps e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página
<http://www.sbmac.org.br/notas.php>

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS

Amélia Novais
Departamento de Matemática Aplicada
Universidade Estadual de Campinas
Campinas - SP
amelia@ime.unicamp.br

Maria Cristina de Castro Cunha
Departamento de de Matemática Aplicada
Universidade Estadual de Campinas
Universidade Desconhecida
Campinas - SP
cunha@ime.unicamp.br



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil
2012

Coordenação Editorial: Geraldo Nunes Silva

Coordenação Editorial da Série: Geraldo Nunes Silva

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2012 by Amélia Novais e Maria Cristina de Castro Cunha. Direitos reservados, 2012 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

**Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP
Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner**

Novais, Amélia.

Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais

- São Carlos, SP: SBMAC, 2012, 66 p., 20.5 cm

- (Notas em Matemática Aplicada; v. 4)

e-ISBN 978-85-86883-73-6

1. Matemática Aplicada. 2. Métodos Numéricos.

3. Equações Diferenciais Parciais. 4. Computação Científica.

I. Novais, Amélia. II. Cunha, Maria Cristina de Castro.

III. Título. IV. Série.

CDD - 51

Esta é uma republicação em formato de e-book do livro original do mesmo título publicado em 2003 nesta mesma série pela SBMAC.

Agradecimentos

Às pessoas que no desenvolvimento deste trabalho contribuíram de diferentes formas para sua realização. Em particular, agradecemos a Jörg Schleicher por ter lido e dado sugestões para melhorar o texto.

Ao CNPq e a FAPESP pelo apoio financeiro.

PREFÁCIO DA SÉRIE

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC, desde a realização do primeiro CNMAC - Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, publica monografias de cursos que são ministrados durante o Evento. A atual diretoria decidiu fazer a indexação bibliográfica dessas monografias através do ISBN para efeito de catalogação para preservação das mesmas para a memória dos CNMAC.

A coleção recebeu o título de “Notas em Matemática Aplicada” e consistirá das monografias dos cursos ministrados nos CNMAC. O livro correspondente a cada minicurso deve ser preparado em até 100 páginas para servir como texto introdutório, de modo que é aconselhável que contenha uma boa revisão bibliográfica e exercícios de verificação de aprendizagem. A clareza do texto é um dos fatores mais importantes.

A coleção incluirá, gradativamente, os textos dos Encontros Regionais de Matemática Aplicada e Computacional, os ERMAC e de outros eventos patrocinados pela SBMAC.

Além disso, é objetivo desta coleção publicar volumes com coletâneas de *pre-prints* de trabalhos apresentados em reuniões científicas patrocinadas pela SBMAC.

Esta primeira coleção, composta das monografias dos minicursos do XXVI CNMAC, foi especialmente preparada em comemoração aos 25 anos da SBMAC.

E. X. L. de Andrade
R. Sampaio
G. N. Silva

Conteúdo

1	Modelos básicos em EDP	1
1.1	Introdução	1
1.2	Modelos usando equações diferenciais	3
1.3	Processos difusivos: equações parabólicas	4
1.4	Movimento longitudinal: equações hiperbólicas	8
1.5	Fluxo não linear: as leis de conservação	13
1.6	Teoria do potencial: equações elípticas	15
1.7	Resumo	18
2	Convergência, consistência, estabilidade	20
2.1	Introdução	20
2.2	Malhas e discretização	21
2.3	Convergência	25
2.4	Consistência	28
2.5	Estabilidade	29
2.6	Teorema de Lax	31
2.7	Análise de esquemas de diferenças finitas	33
2.7.1	Análise de von Neumann	34
2.8	Dispersão e dissipação	38
2.9	Dispersão e dissipação	38
2.10	Problemas bidimensionais	40
3	Equações hiperbólicas	44
3.1	Introdução	44
3.2	Métodos <i>upwind</i>	45
3.3	Método Lax-Wendroff	46
3.4	Método Lax-Friedrichs	47
3.5	Equação da onda unidimensional	49
4	Leis de conservação	54
4.1	Introdução	54
4.2	Solução fraca	55
4.3	Condição de salto, Rankine-Hugoniot	55

4.4	Não unicidade de solução: Condição de entropia	56
4.5	Problema de Riemann centrado na origem	57
4.6	O método de Godunov	58
4.7	Os métodos de alta resolução: TVD	60

Capítulo 1

Modelos básicos em EDP

1.1 Introdução: olhar a floresta através dos detalhes das árvores

A matemática participa do permanente diálogo do Homem com a Natureza. Já nas suas origens, a matemática primitiva necessitou de demandas práticas para se desenvolver; hoje as mais diversas áreas da ciência e tecnologia utilizam simuladores computacionais para otimizar processos, realizar testes não destrutivos, enfim inúmeros aplicativos. Desta forma, é natural que os **Modelos Matemáticos** tenham papel importante na História das Ciências. Através de modelos procuramos agrupar fatos da física, biologia, química e outras áreas, para a identificação do problema matemático adequado. Mais ainda, estes problemas matemáticos devem ser encaminhados a compartimentos de uma estrutura de análise e resolução de equações matemáticas que já foram construídas, ou estão sendo construídas. Eis porque a matemática é chamada de linguagem da ciência.

A mecânica newtoniana é considerada por muitos a maior das teorias científicas desenvolvidas pelo Homem por ser uma investigação matemática para uma ampla gama de fenômenos do mundo físico. No universo newtoniano os planetas percorrem rotas preestabelecidas por equações matemáticas simples. Existe um mundo real onde as maçãs caem para baixo; por outro lado existe um mundo revelado por Newton (1642-1727) no qual os objetos materiais se atraem uns aos outros em proporção à sua quantidade de massa. Hoje sabemos que ao traçar a conexão entre forças qualitativas e propriedades quantitativas houve um desvio do rumo da Humanidade. Newton criou a linguagem do cálculo diferencial, apoiado pela geometria analítica de Descartes (1596-1650), que possibilitou a associação entre o fato físico, a atração dos corpos, e equações matemáticas, as leis de Newton.

Num parêntese, é interessante observar que embora a operação de diferenciação tenha surgido de problemas sobre tangentes a curvas e de questões de máximo e mínimo, o cálculo foi mais explorado, a partir do século XVIII, em aplicações à mecânica, à astronomia, hidráulica, construção de navios, questões de artilharia,

conservação de energia, enfim nos mais variados campos ligados ao desenvolvimento industrial e do conhecimento humano.

Vários matemáticos ficaram célebres por estudar conseqüências das leis de Newton utilizando símbolos matemáticos que representassem movimentos, princípios de conservação enfim equações que envolvam taxas de variação de suas variáveis. Estes matemáticos não só caracterizavam os problemas matemáticos associados aos fatos que queriam analisar, criando modelos matemáticos, como desenvolviam os meios de resolver estes problemas, isto é, desenvolviam métodos matemáticos. Embora seja impossível apresentar nestas notas um levantamento histórico justo, não podemos deixar de citar os que deram os passos iniciais na exploração do cálculo através das equações diferenciais. A família Bernoulli, com seus doze matemáticos que viveram no período de 1623 a 1863, Euler (1707-1783), Lagrange (1736-1813) e Laplace (1749-1827) têm seus trabalhos usados até os nossos dias.

Podemos resumir a forma como a matemática aplicada é usada na crescente compreensão da Natureza nas três etapas:

- **Formulação** do problema científico que queremos estudar numa linguagem matemática.
- **Solução** do problema matemático criado.
- **Interpretação** desta solução e verificação de sua validade.

É comum a tendência de valorizar excessivamente a segunda etapa em detrimento das outras duas. Isto torna o matemático um especialista em manipulação de técnicas. É claro que o conhecimento dos métodos matemáticos e habilidade em manipulá-los é necessário. Entretanto, só vamos alcançar o objetivo maior (a compreensão da Natureza) se também soubermos formular problemas e extrair conclusões e implicações verificáveis pela experiência. Talvez esta seja a diferença mais marcante entre atitudes dos matemáticos puros e aplicados. Entretanto as duas áreas têm objetivos muito próximos num processo de realimentação mútua, como mostram teorias matemáticas criadas pela necessidade de mostrar fatos rigorosamente dentro da abstração, generalização e formulação axiomática que caracteriza a matemática.

Estas notas têm como objetivo apresentar alguns aspectos da modelagem usando equações diferenciais. Inicialmente obtemos algumas equações diferenciais básicas a partir de princípios físicos estabelecendo **modelos matemáticos** para os processos físicos. Na etapa de solução destes modelos vamos explorar **métodos numéricos** que permitam encontrar aproximações para as soluções analíticas. Apresentamos a discretização e questões matemáticas associadas a esta forma de resolver os problemas: as questões de consistência, estabilidade e convergência. Finalmente, destinamos um capítulo às equações cujas soluções apresentam variações bruscas ou descontinuidades, casos cada vez mais freqüentes nos dias de desenvolvimento tecnológico galopante.

1.2 Modelos usando equações diferenciais

Os **modelos matemáticos**, modelos nestas notas, são representações na linguagem matemática das características relevantes de uma situação que queremos estudar. Assim, modelos são equações, escritas usando símbolos matemáticos, que resume de forma simplificada parte de fatos reais. Estas equações são criadas com algum objetivo e na sua formulação definimos as incógnitas que nos interessam que, em geral, dependem de outras variáveis, as variáveis independentes.

Nestas notas estaremos interessados em modelos cujas incógnitas são funções que aparecem sob a operação de diferenciação (as chamadas **equações diferenciais**). Assim, as equações diferenciais descrevem processos nos quais as taxas de variação das funções incógnitas dependem de seus valores passados, ou do presente, ou no contorno do domínio destas funções.

Vamos ilustrar isto com dois exemplos.

1. É natural supor que a taxa de variação da população de uma espécie seja proporcional à população atual desta espécie. Para representar matematicamente esta frase vamos denotar por $P(t)$ a população desta espécie num instante genérico t . A taxa de variação da população será dada por

$$\frac{dP}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta P}{\Delta t}. \quad (1.1)$$

Assim, a equação diferencial

$$\frac{dP(t)}{dt} = r(t) P(t) \quad (1.2)$$

representa na linguagem matemática a afirmação *a taxa de variação da população é proporcional à população*. Observe $r(t)$ que caracteriza a proporcionalidade também varia com o tempo refletindo restrições, como, por exemplo, questões alimentares, mortalidade maior em superpopulações, etc. Teríamos assim um modelo preliminar para o crescimento populacional.

2. Na mecânica newtoniana as forças estão relacionadas a aceleração, que é a derivada da velocidade com relação ao tempo, ou ainda, a derivada de segunda ordem do espaço percorrido:

$$\vec{F} = \frac{d(m\vec{v})}{dt} = \frac{d}{dt} \left(m \frac{d\vec{X}}{dt} \right), \quad (1.3)$$

sendo \vec{F} um vetor que representa a resultante das forças aplicadas, m a massa, \vec{v} o vetor velocidade e \vec{X} o vetor posição. Vemos assim que a lei de Newton é uma fonte de equações diferenciais usadas nos modelos da mecânica dos sólidos, dos fluidos, etc.

Em modelos mais gerais a função incógnita pode depender de duas, ou mais variáveis. Por exemplo, no estudo do movimento de um meio contínuo o que se pretende é conhecer a posição de cada ponto, como uma função do tempo t . É usual associar um ponto genérico $\vec{x} = (x, y, z)$ à sua posição num tempo inicial t_0 , \vec{A} , isto é, $\vec{x} = \vec{x}(\vec{A}, t)$, $\vec{x}(\vec{A}, t_0) = \vec{A}$.

Neste caso a velocidade é calculada pela derivada parcial

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{\partial \vec{x}}{\partial t}(\vec{A}, t), \quad (1.4)$$

e, portanto, as equações diferenciais contêm derivadas parciais.

Chamam-se **Equações Diferenciais Parciais**, EDP, os modelos que envolvem derivadas de funções incógnitas que dependem de duas, ou mais variáveis.

Na modelagem matemática o melhor dos casos seria encontrar soluções exatas para as equações diferenciais, a **solução analítica** para o modelo que estamos estudando. Entretanto, os métodos disponíveis para este fim ainda têm limitações fortes frente os modelos atuais. Algumas vezes para encontrar soluções analíticas temos de simplificar tanto o modelo que o objetivo da modelagem fica comprometido.

A dificuldade de resolução das equações diferenciais por meios analíticos favoreceu ao desenvolvimento dos **métodos numéricos** como forma de encontrar soluções aproximadas. Embora muitos dos métodos numéricos eficientes já fossem conhecidos antes do século XX, eles eram comprometidos pela necessidade de execução de cálculos manuais ou em equipamentos muito primitivos. Nos últimos cinquenta anos o desenvolvimento de computadores cada vez mais poderosos e versáteis ampliou a gama de problemas que podem ser investigados por meio de métodos numéricos. Vemos hoje um crescente desenvolvimento de simuladores numéricos, eficientes e robustos, nos mais diversos campos da computação científica.

É comum o uso da palavra **simulador** para designar programas computacionais que tenham como base as equações diferenciais que modelam um processo em análise. Assim, os simuladores resolvem modelos matemáticos que têm como base equações diferenciais por meio de métodos numéricos.

1.3 Processos difusivos: equações parabólicas

Nesta seção vamos usar o **Princípio da Conservação de Energia**, na forma de calor, para obter uma equação diferencial que representa matematicamente este princípio. Esta é a **Equação do Calor**, protótipo das equações parabólicas que são amplamente usadas no estudo de processos difusivos.

Consideremos uma barra de comprimento L com as seguintes características:

- O material que compõe a barra é homogêneo;
- As seções retas da barra são iguais, com área S , e a distribuição de temperatura é uniforme nas seções retas;
- A barra está lateralmente isolada.

Com estas hipóteses podemos identificar o corpo físico, uma barra de comprimento L , a um cilindro de seção S com eixo posicionado longitudinalmente na direção do eixo dos x . Ou seja, identificamos o corpo físico a uma região do espaço tridimensional delimitada pela superfície lateral do cilindro e por seções retas perpendiculares ao eixo- x , localizadas em $x = 0$ e $x = L$.

O **Princípio da Conservação do Calor** nos diz que:

A quantidade de calor acumulada numa região V , por unidade de tempo, é igual à resultante do fluxo de calor, que passa pela fronteira de V , somada à quantidade de calor gerada no interior de V , por unidade de tempo.

Os símbolos matemáticos podem ser usados para rescrever cada uma das três parcelas que estão presentes no balanço acima – termo de acumulação, termo do fluxo e o termo de geração. Esta é a forma de obter uma equação matemática que represente um princípio físico.

Vamos detalhar cada uma das parcelas separadamente considerando uma porção arbitrária da barra, V , delimitada por seções retas localizadas em $x = m$ e $x = n$.

A quantidade de calor acumulada em V pode ser calculada usando o conceito de capacidade calorífica do material que compõe a barra. O calor específico do material, aqui denotado por $c(x, t)$, é, por definição, a quantidade de calor, ΔQ , necessário para elevar de Δu a temperatura de uma unidade de massa. Assim, num elemento de volume $\Delta V = S\Delta x$ o calor acumulado será $\Delta Q = c\rho u S\Delta x$, na qual ρ é a densidade do material e u é a temperatura, medida num referencial fixo. Nesta notação, a taxa de variação, no tempo, da quantidade de calor na região $m \leq x \leq n$, pode ser escrita como:

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d}{dt} \int_m^n c\rho S u(x, t) dx = \int_m^n \frac{\partial}{\partial t} (c\rho S u) dx. \quad (1.5)$$

Passemos ao cálculo do fluxo de calor que atravessa a fronteira de V . Como estamos supondo que a barra tem a superfície lateral isolada, o fluxo de calor se dá nas seções retas localizadas em $x = m$ e $x = n$. A Lei de Fourier nos diz que a taxa de variação do fluxo de calor por unidade de área e unidade de tempo (na direção de crescimento de x) é proporcional à derivada da temperatura neste ponto,

$$J = -k \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (1.6)$$

Esta é uma **Equação Constitutiva** que informa como se difunde o calor no material que compõe a barra, através da condutividade térmica, k . O sinal negativo é colocado de modo que, sendo k positivo, o fluxo ocorra na direção da diminuição da temperatura. Nesta notação como calor que *entra* no cilindro é $-kS \frac{\partial u}{\partial x}(m, t)$ e calor que *sai* do cilindro é $-kS \frac{\partial u}{\partial x}(n, t)$, a resultante do fluxo de calor é o calor que entra menos o calor que sai, isto é,

$$kS \frac{\partial u}{\partial x}(n, t) - kS \frac{\partial u}{\partial x}(m, t). \quad (1.7)$$

Por conveniência rescrevemos (1.7) na forma:

$$kS \frac{\partial u}{\partial x}(n, t) - kS \frac{\partial u}{\partial x}(m, t) = \int_m^n \frac{\partial}{\partial x} \left(kS \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right) dx. \quad (1.8)$$

O terceiro termo do balanço de energia representa a energia gerada no interior da porção da barra, representada por V , será escrito em termos de uma função $f(x, t)$,

a quantidade de calor gerada, por unidade de volume e unidade de tempo. Nesta notação, a quantidade de calor gerada em V , por unidade de tempo, é:

$$\int_m^n Sf(x, t)dx. \quad (1.9)$$

Finalmente, usando (1.5), (1.8) e (1.9) no princípio de conservação do calor temos:

$$\int_m^n \frac{\partial}{\partial t} (c\rho Su) dx = \int_m^n \frac{\partial}{\partial x} \left(kS \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right) dx + \int_m^n Sf(x, t)dx, \quad (1.10)$$

ou ainda,

$$\int_m^n \left(\frac{\partial}{\partial t} (c\rho Su) - \frac{\partial}{\partial x} \left(kS \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right) - Sf(x, t) \right) dx = 0. \quad (1.11)$$

Esta é a equação do calor, escrita na **forma integral**, ou **forma conservativa** como também é chamada. Para escrevê-la na forma de uma equação diferencial, usamos um argumento matemático demonstrado por Dubois-Reymond: sendo a integral nula num intervalo genérico (m, n) , então o integrando é necessariamente nulo. Assim, como S é constante, chegamos à **equação do calor**, também chamada **equação da difusão**:

$$\frac{\partial}{\partial t} (c\rho u) - \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right) - f(x, t) = 0. \quad (1.12)$$

Se admitimos que o calor específico e a densidade não variam com o tempo nem com x , podemos dividir a equação pela constante $c\rho$, obtendo a forma mais comum na literatura,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{k} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \tilde{f}(x, t), \quad (1.13)$$

com $\tilde{k} = k/c\rho$ e $\tilde{f} = f/c\rho$.

Os problemas físicos têm **condições de contorno** que devem descrever matematicamente o que está acontecendo no contorno do corpo em estudo. Além da razão física, adicionar condições extras à equação diferencial é crucial na descrição adequada do problema, do ponto de vista matemático. Em outras palavras, o conjunto **equação diferencial, condições de contorno e condições iniciais**, deve ser um problema bem posto: ter uma única solução e esta solução deve depender continuamente dos dados do problema (pequenas perturbações nos dados implicam em pequenas variações da solução).

Através da condição inicial informamos como é a solução no início do processo em estudo, $t = 0$. No caso da equação do calor, equação (1.13), a condição inicial é uma função que traduz a distribuição da temperatura no tempo que consideramos inicial:

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq L. \quad (1.14)$$

As condições de contorno devem ser usadas nas seções retas localizadas em $x = 0$ e $x = L$, as quais podem ser dos seguintes tipos.

A temperatura conhecida nos extremos, **Condição de Dirichlet**:

$$u(0, t) = g_1(t) \quad \text{e} \quad u(L, t) = g_2(t), \quad t \geq 0. \quad (1.15)$$

O fluxo de calor é conhecido, incluindo o caso de fronteiras isoladas $h_1(t) = h_2(t) = 0$, **Condição de Neumann**:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = h_1(t) \quad \text{e} \quad \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = h_2(t), \quad t \geq 0. \quad (1.16)$$

A temperatura da vizinhança da fronteira é conhecida, **Condição Mista**. Neste caso podemos usar a Lei do Fourier para obter a seguinte relação (Farlow, pag 23):

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \lambda_1[u(0, t) - g_1(t)] \quad \text{e} \quad \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = \lambda_2[u(L, t) - g_2(t)], \quad t \geq 0. \quad (1.17)$$

A equação (1.6) caracteriza os processos difusivos, nos quais a magnitude do fluxo depende da diferença entre $u(x, t)$ e os valores em pontos vizinhos, $u(x + \Delta x, t)$. Esta diferença é representada em (1.6) pela derivada $\partial u / \partial x$. Embora Fourier tenha estabelecido esta relação no estudo da difusão do calor, a mesma idéia pode ser usada no estudo de difusão de substâncias, como, por exemplo, no estudo da poluição, ou em outros modelos.

A seguir vamos aproveitar o desenvolvimento realizado para estudar a difusão do calor para estabelecer um modelo matemático para a distribuição de poluentes.

Suponhamos agora que $u(x, t)$ mede a *concentração de uma substância*, i.e., sua massa por unidade de volume de um meio que se desloca, por exemplo, uma nuvem de fumaça. O movimento da substância se dá tanto pela difusão quanto por correntes do meio. Denomina-se, em analogia ao transporte de calor, **convecção** a transferência da substância que ocorre devido ao movimento do próprio meio. Vamos realizar o balanço de material numa porção do meio, no caso unidimensional, $V = [x, x + \Delta x]$,

Varição da massa em V = massa gerada em V + variação devido à Difusão na fronteira + variação devido à Convecção de massa através da fronteira.

Os três primeiros termos deste balanço podem ser tratados como fizemos na obtenção da equação (1.13). Assim, nos resta incluir em (1.13) o termo convectivo. Vamos admitir que o fluido se move com uma velocidade v , constante, positiva no sentido do eixo- x . A variação de massa de substância em V (o que entra menos o que sai) é:

$$vSu(m, t) - vSu(n, t) = -v \int_m^n S \frac{\partial u}{\partial x} dx. \quad (1.18)$$

Incluindo esta expressão em (1.11) e fazendo os devidos ajustes, obtemos a **equação convecção-difusão**:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) - v \frac{\partial u}{\partial x} + f(x, t). \quad (1.19)$$

O modelo acima foi deduzido para barras, isto é, corpos físicos nos quais a dimensão numa das direções predomina sobre as dimensões nas outras duas direções. Se quisermos estudar a distribuição de temperatura em placas, corpos físicos nos quais as dimensões em duas direções são bem maiores que na terceira direção, repetimos as mesmas idéias aplicando os dois princípios físicos usados: conservação da energia, no caso na forma de calor, e a lei de Fourier numa região do plano. Desta forma obtemos a equação do calor no caso bidimensional, na qual estamos interessados numa função $u(x, y, t)$ que satisfaça à equação diferencial:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{k}_1 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\tilde{k}_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \tilde{f}(x, y, t), \quad (1.20)$$

na qual podemos admitir valores diferentes para a condutividade, \tilde{k}_1 na direção x e \tilde{k}_2 na direção y . Análogo ao caso unidimensional devemos fornecer condições iniciais e de contorno que tornem o problema bem posto.

1.4 Movimento longitudinal numa barra: equações hiperbólicas

Nesta seção vamos analisar o movimento ao longo de uma barra cujo diâmetro médio das seções retas é pequeno quando comparado com o comprimento da barra. Embora estas seções retas possam variar nós vamos supor que a variação de um ponto da barra para outro é pequena. Sob estas hipóteses é razoável supor que as seções retas permanecem planas durante movimentos longitudinais na barra. Também admitimos que a matéria que compõe a barra está continuamente distribuída e que os deslocamentos são suaves, o que nos permite trabalhar com derivadas, expansões em série e outras técnicas matemáticas usadas na análise.

Nas hipóteses acima é possível simplificar o modelo considerando-o unidimensional, isto é, com uma variável espacial, x , a coordenada num eixo pré definido.

Inicialmente, vamos considerar o **Princípio da Conservação de Massa**:

A massa de uma porção arbitrária da barra permanece constante durante o movimento.

Para representar matematicamente este princípio consideremos a porção da barra contida em $m(t) \leq x \leq n(t)$. Lembrando que a massa num elemento de volume é o produto da densidade $\rho(x, t)$ por este volume, $\sigma(x, t)\Delta x$, onde $\sigma(x, t)$ é uma função que representa a área de uma seção reta localizada em x no instante t . Nesta notação o princípio da conservação de massa pode ser rescrito pela equação:

$$\frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho(x, t) \sigma(x, t) dx = 0. \quad (1.21)$$

A seguir passaremos as manipulações matemáticas para reformular convenientemente esta equação. Para evitar derivadas dos limites de integração vamos usar uma mudança da variável x de modo que os limites de integração fiquem fixos na

nova variável. Para este fim, observemos que a trajetória percorrida por uma seção reta posicionada em x , no tempo t , é uma função da posição inicial desta seção (que não varia com o tempo), isto é,

$$x = x(A, t), \text{ onde } A = x(A, 0). \quad (1.22)$$

Se admitimos que $x = x(A, t)$ tem uma única inversa, $A = A(x, t)$, podemos trabalhar tanto com a coordenada espacial x , quanto com a posição inicial A , designada coordenada material por alguns autores. Desta forma, a porção da barra que inicialmente, $t = 0$, é delimitada por $M \leq A \leq N$ no tempo t ocupará a porção denotada por $m(t) \leq x \leq n(t)$, onde $x(M, t) = m(t)$ e $x(N, t) = n(t)$.

Substituímos $x = x(A, t)$ na integral (1.21), definindo as funções na coordenada espacial, densidade $\delta(A, t)$, área da seção, $S(A, t)$:

$$\delta(A, t) = \rho(x(A, t), t) \quad \text{e} \quad S(A, t) = \sigma(x(A, t), t), \quad (1.23)$$

e sendo $\partial x / \partial A$ o Jacobiano desta transformação de variáveis, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho(x, t) \sigma(x, t) dx &= \frac{d}{dt} \int_M^N \delta(A, t) S(A, t) \frac{\partial x}{\partial A} dA = \\ &= \int_M^N \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\delta S) \frac{\partial x}{\partial A} + \delta S \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial A} \right\} dA. \end{aligned} \quad (1.24)$$

A seguir, trocamos a ordem da derivação no último termo da integral e usamos também a definição de velocidade, $v(x(A, t), t) = \frac{\partial x}{\partial t}(A, t)$, para obter:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial A} = \frac{\partial}{\partial A} \left(\frac{\partial x}{\partial t}(A, t) \right) = \frac{\partial}{\partial A} (v(x(A, t), t)) = \frac{\partial v}{\partial x}(x(A, t), t) \frac{\partial x}{\partial A}. \quad (1.25)$$

Desta forma, obtemos

$$\frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho(x, t) \sigma(x, t) dx = \int_M^N \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\delta S) + \delta S \frac{\partial v}{\partial x} \right\} \frac{\partial x}{\partial A} dA. \quad (1.26)$$

Antes de retornar à variável espacial x , observemos que a **derivada material** Df/Dt de uma função genérica $f(x, t) = f(x(A, t), t) = F(A, t)$ é definida por:

$$\frac{Df}{Dt}(x, t) = \frac{\partial F}{\partial t}(A, t) = \frac{\partial f}{\partial x}(x, t) v(x, t) + \frac{\partial f}{\partial t}(x, t). \quad (1.27)$$

Desta forma, lembrando (1.23), voltamos à integral em $n(t) \leq x \leq m(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho(x, t) \sigma(x, t) dx &= \int_M^N \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\delta(A, t) \cdot S(A, t)) + \delta S \frac{\partial v}{\partial x} \right\} \frac{\partial x}{\partial A} dA \\ &= \int_{m(t)}^{n(t)} \left\{ \frac{D}{Dt} (\rho \sigma) + \rho \sigma \frac{\partial v}{\partial x} \right\} dx = 0. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Como o intervalo $m(t) \leq x \leq n(t)$ representa uma porção arbitrária da barra, o integrando na equação acima é nulo (Lema de Dubois-Reymond).

Com este argumento chegamos à **Equação da Continuidade** ou, como também é conhecida, **Equação do Balanço de Massa**:

$$\frac{D}{Dt}(\rho\sigma) + \rho\sigma \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (1.29)$$

que é uma nova forma de expressar (1.21), a conservação de massa numa região arbitrária.

A seguir vamos usar o princípio da conservação da quantidade de movimento, ou momento, que juntamente com o princípio de conservação de massa são usados no estudo do movimento longitudinal na barra, o objetivo desta seção.

Na mecânica newtoniana define-se o momento de um corpo pelo produto de sua massa pela velocidade. Assim, o momento associado a uma porção genérica da barra, compreendida por $m(t) \leq x \leq n(t)$, é dado pela integral

$$\int_{m(t)}^{n(t)} \rho\sigma v dx, \quad (1.30)$$

onde, conforme a notação já usada nesta seção, $\rho(x, t)$ é a densidade da substância que compõe a barra, $\sigma(x, t)$ é a área de uma seção reta genérica. Como estamos considerando o movimento longitudinal, o vetor velocidade tem a direção da barra, $v(x, t)$.

O **Princípio da Conservação do Momento** nos diz que:

A taxa de variação do momento, no tempo, numa porção da barra é igual a soma das forças externas que atuam nesta porção.

As forças externas que atuam na porção da barra podem ser as que atuam em todos os pontos (por exemplo, a gravidade), chamadas **forças de corpo**, ou as forças são transmitidas de uma porção do corpo para outra, através das seções retas, as chamadas **forças de superfície**.

A resultante das forças de corpo pode ser calculada usando $f(x, t)$, a força de corpo por unidade de massa:

$$\int_{m(t)}^{n(t)} \rho\sigma f dx. \quad (1.31)$$

Com relação às forças de superfície consideremos uma seção reta fictícia, de área $\sigma(x, t)$, de uma barra sob pressão, como ilustra a Figura 1.1(a). Quando atua um esforço, $T(x, t)$, entre as duas partes da barra da Figura 1.1(a), o produto $T(x, t)\sigma(x, t)$ fornece a resultante da força de superfície exercida pela porção hachurada sobre a porção não hachurada (Figura 1.1(b)). De forma análoga, $-T(x, t)\sigma(x, t)$ representa a resultante das forças que a parte não hachurada exerce sobre a hachurada (Figura 1.1(c)).

Nesta notação, e usando (1.30) e (1.31), o princípio da conservação do momento é representado matematicamente pela equação:

$$\frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho\sigma v dx = \int_{m(t)}^{n(t)} \rho\sigma f dx + T(n, t)\sigma(n, t) - T(m, t)\sigma(m, t), \quad (1.32)$$

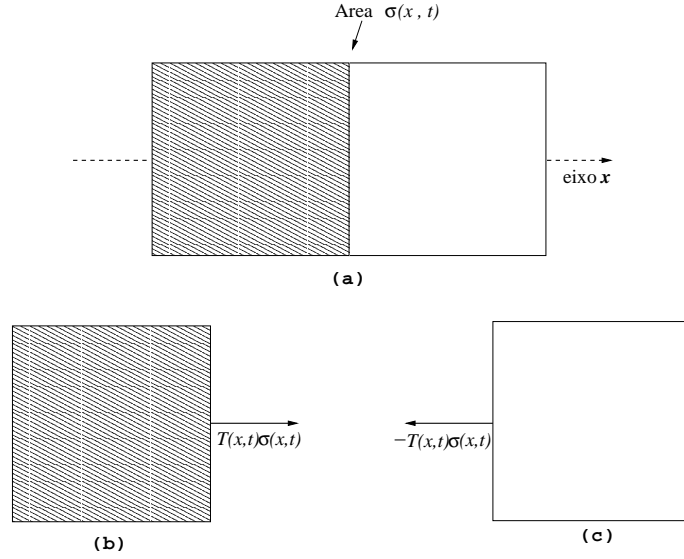


Figura 1.1: (a) Barra sob pressão, (b) a parte esquerda da barra exerce (hachurada) a força $T(x, t)\sigma(x, t)$ sobre a parte direita (não hachurada), (c) a parte direita da barra (não hachurada) exerce a força $-T(x, t)\sigma(x, t)$ sobre a parte esquerda (hachurada).

ou ainda, usando a definição de integral definida:

$$\frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho \sigma v dx = \int_{m(t)}^{n(t)} \rho \sigma f dx + \int_{m(t)}^{n(t)} \frac{\partial(T\sigma)}{\partial x} dx. \quad (1.33)$$

No cálculo do termo da esquerda desta equação repetimos as manipulações realizadas na obtenção da equação da continuidade: fazemos uma mudança de variável de modo a manter fixos os limites de integração e realizamos as derivadas do produto deixando (δS) agrupado. Nesta passagem vamos usar a função velocidade na variável material, $V(A, t) = v(x(A, t), t) = \frac{\partial x}{\partial t}(A, t)$ e as funções definidas em (1.23). Usamos também a passagem deduzida em (1.25)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho \sigma v dx &= \frac{d}{dt} \int_M^N \delta(A, t) S(A, t) V(A, t) \frac{\partial x}{\partial A} dA = \\ &= \int_M^N \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\delta S) V \frac{\partial x}{\partial A} + \delta S \frac{\partial V}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial A} + \delta S V \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial A} \right\} dA = \\ &= \int_M^N \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\delta S) V + \delta S \frac{\partial V}{\partial t} + \delta S V \frac{\partial v}{\partial x}(x(A, t), t) \right\} \frac{\partial x}{\partial A} dA. \end{aligned} \quad (1.34)$$

De (1.28), equação da continuidade, vemos que a soma do primeiro e terceiro termo de (1.34) se anula. Usando a definição de derivada material, (1.27), no

segundo termo de (1.34), temos $\frac{\partial v}{\partial t}(A, t) = \frac{Dv}{Dt}(x, t)$. Assim, podemos voltar à variável espacial na qual (1.34) é:

$$\frac{d}{dt} \int_{m(t)}^{n(t)} \rho \sigma v dx = \int_{m(t)}^{n(t)} \rho \sigma \frac{Dv}{Dt} dx, \quad (1.35)$$

Finalmente, usando (1.35), a equação (1.33) é reescrita na forma:

$$\int_{m(t)}^{n(t)} \left\{ \rho \sigma \frac{Dv}{Dt} - \rho \sigma f - \frac{\partial(T\sigma)}{\partial x} \right\} dx = 0, \quad (1.36)$$

que, sendo válida para qualquer intervalo $m(t) \leq x \leq n(t)$, nos fornece a equação diferencial que representa o balanço do momento:

$$\rho \sigma \frac{Dv}{Dt} = \rho \sigma f + \frac{\partial(T\sigma)}{\partial x}. \quad (1.37)$$

A descrição do movimento de uma seção reta, inicialmente localizada em A , pode ser feita pela função **deslocamento**, $U(A, t)$, que somada à posição inicial fornece a posição da seção num instante genérico, t ,

$$x(A, t) = A + U(A, t). \quad (1.38)$$

Derivando esta expressão, e lembrando que a velocidade é $V(A, t) = \frac{\partial x}{\partial t}(A, t)$, temos $V(A, t) = \frac{\partial U}{\partial t}(A, t)$. Passando para a coordenada espacial, sendo $u(x, t) = U(A(x, t), t)$, temos $v(x, t) = \frac{Du}{Dt}(x, t)$. Assim, (1.37) pode ser escrita em termos do deslocamento:

$$\rho \sigma \frac{D^2 u}{Dt^2} = \rho \sigma f + \frac{\partial(T\sigma)}{\partial x}. \quad (1.39)$$

A natureza particular do material que compõe a barra tem de ser usada. Caso contrário, esta equação diferencial descreveria o movimento independente das características do material. Esta informação, específica do material, é fornecida pela **relação constitutiva**, a relação que fornece a deformação provocada pelo esforço $T(x, t)$ (como a Lei de Hooke para a mola):

$$T(x, t) = E(x, t) \frac{\partial u / \partial x}{1 - \partial u / \partial x} \cong E(x, t) \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (1.40)$$

Em (1.40) a função $E(x, t)$ é chamada de módulo de Young e a aproximação é válida quando u e suas derivada são pequenas. Como $v = \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x}$, que resolvida na velocidade, ainda na hipótese de u e suas derivadas pequenas, nos fornece:

$$v = \frac{\partial u / \partial t}{1 - \partial u / \partial x} \cong \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (1.41)$$

Ainda na direção de obter formas simplificadas para (1.39), usamos a aproximação linear na expansão em série das funções envolvidas nos cálculos, obtendo a linearização:

$$\sigma(x, t) = S(A, t) = S(A, 0) = S(x - u(x, t), 0) \cong S(x, 0) = \sigma(x). \quad (1.42)$$

De forma análoga, as seguintes aproximações são razoáveis, nas hipóteses de pequenos deslocamentos: $\rho(x, t) \cong \rho(x)$, $E(x, t) \cong E(x)$, $f(x, t) \cong f(x)$. Essencialmente, o processo de linearização corresponde a não fazer distinção entre as coordenadas espacial e material, na derivação, e admitir que densidade, ρ , área da seção reta, σ , e módulo de Young, E , podem ser consideradas funções apenas da posição.

Assim, obtemos a **versão linearizada do princípio de conservação do momento**:

$$\rho(x)\sigma(x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \rho(x)\sigma(x)f(x) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma(x)E(x, t)\frac{\partial u}{\partial x} \right], \quad (1.43)$$

uma equação diferencial que tem uma única incógnita, a função deslocamento. Dentre as possíveis condições de contorno para esta equação diferencial podemos tomar:

- Extremidades fixas (deslocamento nulo): $u = 0$;
- Extremidades livres (ausência de esforços): $\sigma E \partial u / \partial x = 0$;
- Extremidade conectadas a molas (lei de Hooke): $\sigma E \partial u / \partial x + k^2 u = 0$.

Para finalizar, consideremos um caso importante que ocorre quando o material e as propriedades geométricas, ρ , σ e E , são independentes de x e a densidade da força de corpo é nula, $f = 0$. Nestas condições a equação (1.43) se reduz a **Equação da Onda**:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (1.44)$$

na qual a constante c , chamada velocidade do som, é dada por $c^2 = E/\rho$.

1.5 Fluxo não linear: as leis de conservação

Vimos nas seções anteriores exemplos de equações diferenciais parciais como representações matemáticas de princípios de conservação de quantidades físicas como a massa, a energia, a quantidade de movimento, etc. Se $u(x, t)$ é uma quantidade física e não há geração interna desta quantidade, um princípio conservativo nos diz que a taxa de crescimento da quantidade física, no tempo, $\partial u / \partial t$ é igual à variação do fluxo desta quantidade que passa pela fronteira da região onde estamos aplicando o princípio. Se usamos a função f para representar o fluxo, por convenção medido da esquerda para a direita, a expressão matemática do princípio conservativo, como veremos no exemplo desta seção, é:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0. \quad (1.45)$$

Vimos que a expressão para o fluxo de calor estabelecida por Fourier (1.6), envolve a derivada da temperatura, a incógnita da equação. Neste caso e (1.45) se reduz à equação do calor (1.13) com fonte nula. Na dinâmica dos fluidos $u(x, t)$ poderia ser a densidade do fluido e f a quantidade de fluido que atravessa a fronteira.

A seguir vamos desenvolver um modelo matemático para simular o tráfego numa avenida. Por convenção vamos supor que o movimento dos carros seja da esquerda para a direita e identificamos a avenida ao eixo- x . Neste exemplo $u(x, t)$ é a densidade de carros, o número de carros por unidade de comprimento em x ; e f é o fluxo de carros, carros por minuto que passam na avenida em um determinado trecho.

Se consideramos um trecho arbitrário da avenida, representado por $m \leq x \leq n$, a variação do número de carros neste trecho pode ser calculada usando as duas expressões:

$$\frac{d}{dt} \int_m^n u(x, t) dx \quad \text{ou} \quad f(m, t) - f(n, t) = - \int_m^n \frac{\partial f}{\partial x} dx. \quad (1.46)$$

Sendo os extremos de integração fixos, podemos inverter a ordem derivação-integração na primeira expressão. Igualando as duas expressões, uma vez que nenhum carro foi fabricado neste trecho, temos

$$\int_m^n \left\{ \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \right\} dx = 0. \quad (1.47)$$

Como o trecho é arbitrário, o integrando é nulo, isto é, em qualquer ponto da avenida, a qualquer tempo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0. \quad (1.48)$$

Precisamos de mais informações uma vez que temos uma equação (1.48) e duas incógnitas, u e f . Em geral o controle de tráfego fornece informações sobre a quantidade de carros que passa em alguns pontos e portanto é possível ajustar estes dados observados, usando as funções conhecidas da matemática, obtendo expressões para o fluxo. Sabemos, por exemplo, que o fluxo aumenta com a densidade de carros até um limite, o do congestionamento. Assim, o fluxo depende da densidade de carros, $f(u)$. Poderíamos usar aproximações linear ou quadrática:

$$f(u) = au \quad f(u) = au(1 - u). \quad (1.49)$$

Escolhendo a aproximação linear temos uma **Equação Hiperbólica de primeira ordem**:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (1.50)$$

a qual também é conhecida como a **equação da onda unidirecional**.

Se escolhemos a segunda expressão temos uma **Equação Não Linear**:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial [u(1 - u)]}{\partial x} = 0. \quad (1.51)$$

De um modo geral, as equações do tipo (1.48) são chamadas de **Leis de Conservação**. Nelas o fluxo depende de forma não linear da função incógnita, isto é, $f(u)$ é uma função não linear.

Várias questões matemáticas aparecem quando queremos resolver, tanto analiticamente quanto numericamente, as leis de conservação. Questões complicadas de como lidar com soluções descontínuas e/ou perda de unicidade. Como as leis de conservação têm grande interesse prático, muitos avanços foram conseguidos nas últimas décadas. Mas ainda existem muitos desafios, principalmente do ponto de vista numérico [2]. Para um estudo mais aprofundado aconselhamos a consultar o livro de LeVeque.

As condições adicionais à equação (1.48) devem ser duas. A condição inicial, $u(x, 0)$, é a densidade de carros no instante em que vamos iniciar o estudo. Como condições de contorno o fluxo de carros, ou a densidade de carros, deve ser fornecido num ponto da avenida que convencionamos ser a fronteira, que poderia ser um pedágio ou um semáforo, por exemplo. Assim, devemos fornecer $u(0, t)$ ou $f(u(0, t))$.

1.6 Teoria do potencial: equações elípticas

Nos cursos introdutórios da física aprendemos que o potencial gravitacional, a função escalar U num ponto $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$, devido a uma massa m localizada em $\vec{y} = (y_1, y_2, y_3)$ é dado por:

$$U(\vec{x}) = -G \frac{m}{\|\vec{x} - \vec{y}\|}, \quad (1.52)$$

na qual $G = 6.67 \text{ N} \times \text{m}^2 / \text{kg}^2$ é chamada constante gravitacional. Por definição, o potencial é uma quantidade escalar tal que o negativo de seu gradiente fornece a força gravitacional \vec{g} . Assim, calculando as derivadas parciais de (1.52), temos:

$$g_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i} = -G m \frac{x_i - y_i}{\|\vec{x} - \vec{y}\|^3}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.53)$$

Calculando as derivadas parciais de segunda ordem, derivando (1.53), temos

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_i^2} = -G m \{ \|\vec{x} - \vec{y}\|^{-3} - 3(x_i - y_i)^2 \|\vec{x} - \vec{y}\|^{-5} \}, \quad (1.54)$$

o que permite verificarmos diretamente que o potencial gravitacional associado a uma massa pontual satisfaz à **Equação de Laplace**:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_3^2} = 0. \quad (1.55)$$

O lado esquerdo desta equação define um operador diferencial que é conhecido por laplaciano e usualmente é denotado por:

$$\Delta U = \nabla^2 U = \frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_3^2}. \quad (1.56)$$

O potencial associado a um número de massas pontuais, m_1, m_2, \dots, m_s , localizadas em $\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_s$ é obtido somando as contribuições individuais, isto é, usando o princípio da superposição:

$$U(\vec{x}) = -G \sum_{k=1}^s \frac{m_k}{\|\vec{x} - \vec{y}_k\|}. \quad (1.57)$$

Pode-se verificar diretamente que o potencial associado a um conjunto finito de massas pontuais também satisfaz à equação de Laplace, (1.55).

A pergunta natural seria: o potencial associado à uma massa uniformemente distribuída também satisfaz à equação de Laplace? Como veremos a seguir, a resposta é não.

Consideremos uma região, R , que contem uma massa uniformemente distribuída, com densidade $\rho(\vec{y})$. Como $\Delta m = \rho \Delta V$ é a relação entre elemento de massa e elemento de volume, pode-se obter o potencial num ponto genérico, \vec{x} , usando o limite de (1.57):

$$U(\vec{x}) = -G \iiint_R \frac{\rho(\vec{y})}{\|\vec{x} - \vec{y}\|} dV, \quad (1.58)$$

onde dV é o elemento de volume e a integração é em \vec{y} , que percorre a região R , na qual está distribuída a massa e que neste texto será considerada uma sub-região do espaço tridimensional. Se o ponto \vec{x} não pertence a R , então a integral acima pode ser calculada (seguindo os mesmos passos (1.52)–(1.55)) para deduzirmos que o potencial também satisfaz à equação de Laplace. Entretanto, se \vec{x} pertence a R temos uma **singularidade** pois o denominador se anula num ponto da região de integração. A seguir vamos examinar este caso com mais detalhe.

Vamos definir o fluxo da força gravitacional $\vec{g} = -\nabla U$ na fronteira de R por:

$$F = \iint_{\partial R} \vec{g} \cdot \vec{n} dS, \quad (1.59)$$

na qual \vec{n} é o vetor unitário na direção da normal exterior à fronteira de R , ∂R . No caso de uma massa pontual, não contida na região R , aplicando o teorema da divergência, temos

$$F = \iint_{\partial R} \vec{g} \cdot \vec{n} dS = \iiint_R \nabla \cdot \vec{g} dV = \iiint_R \nabla^2 U dV = 0. \quad (1.60)$$

Na última igualdade usamos a equação (1.55). Concluímos que o fluxo num contorno que não contem a massa pontual é nulo.

No caso de uma massa pontual, m , estar num ponto P contido em R , vamos “extraí-la” usando a esfera de centro em P e raio ε , como ilustra a Figura 1.2. Desta forma podemos usar (1.60) na região que está entre a superfície esférica, S , e o contorno ∂R :

$$\iint_{\partial R} \vec{g} \cdot \vec{n} dS + \iint_S \vec{g} \cdot \vec{n} dS = 0. \quad (1.61)$$

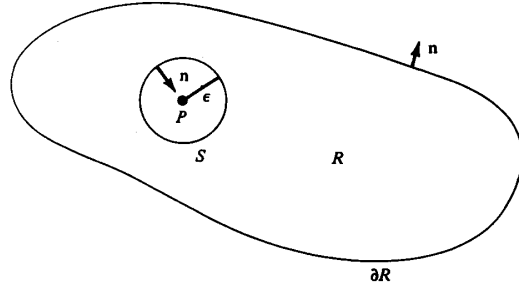


Figura 1.2: Uso de uma esfera de raio pequeno, ε , para excluir uma singularidade no ponto P do domínio R . Os vetores \vec{n} são os vetores unitários na direção da normal exterior à fronteira da região formada por $R - S$.

Como a normal em S deve ser dirigida para seu centro, que é a normal externa da região que estamos trabalhando, temos $n_i = -\frac{x_i - y_i}{\|\vec{x} - \vec{y}\|}$ e usando (1.53), temos $\vec{n} \cdot \vec{g} = G m/\varepsilon^2$. Assim, usando a expressão da área da superfície esférica, $4\pi\varepsilon^2$, obtemos $\iint_S \vec{g} \cdot \vec{n} dS = 4\pi Gm$, que usada em (1.61) nos diz que o fluxo no caso de uma massa pontual, m , localizada no interior de R é:

$$F = \iint_{\partial R} \vec{g} \cdot \vec{n} dS = -4\pi Gm. \quad (1.62)$$

No caso de várias massa pontuais com massa total M aplicamos (1.62) em cada uma das massas, que corresponde a aplicar o princípio da superposição, e teremos o fluxo resultante,

$$F = \iint_{\partial R} \vec{g} \cdot \vec{n} dS = -4\pi GM. \quad (1.63)$$

No caso em que \vec{x} está numa região que contem uma massa uniformemente distribuída, com densidade ρ , podemos recorrer a (1.62) em cada elemento de massa:

$$\iint_{\partial R} \vec{g} \cdot \vec{n} dS = -4\pi G \iiint_R \rho dV. \quad (1.64)$$

Aplicando o teorema da divergência no termo da esquerda, temos

$$\iiint_R (\nabla \cdot \vec{g} + 4\pi G\rho) dV = 0. \quad (1.65)$$

Como esta expressão vale numa região genérica, temos

$$-\nabla \cdot \vec{g} = 4\pi G\rho. \quad (1.66)$$

Finalmente, lembrando que o gradiente potencial é o negativo da força gravitacional, como em (1.53), concluímos que o potencial gravitacional num ponto

qualquer do interior de uma massa uniformemente distribuída satisfaz à **Equação de Poisson**:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_3^2} = 4\pi G\rho. \quad (1.67)$$

A dedução acima nos dá oportunidade de ressaltar o importante papel unificador da matemática. A lei de Newton, base para toda a teoria do potencial apresentada acima, nos diz que a força de atração entre dois corpos de massas m_1 e m_2 , é diretamente proporcional ao produto de suas massas e inversamente proporcional à distância destes corpos. De forma semelhante, pela lei de Coulomb a força de atração entre duas cargas elétricas q_1 e q_2 é diretamente proporcional ao produto destas cargas e inversamente proporcional ao quadrado da distância entre elas. As expressões matemáticas são:

$$\text{Lei de Newton: } F_{grav} = G \frac{m_1 m_2}{r^2},$$

$$\text{Lei de Coulomb: } F_{elctr} = C \frac{q_1 q_2}{r^2}.$$

Por razões históricas usa-se $C = 1/(4\pi\epsilon_0)$, onde $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} C^2/(N \times M^2)$ é chamada **constante de permissividade**. Da analogia entre as expressões matemáticas que traduzem estas duas leis físicas concluímos que o que foi deduzido no caso do potencial gravitacional vale para o potencial eletrostático, e vice-versa, bastando alterar os símbolos. Assim, o potencial eletrostático num ponto \vec{x} associado a uma carga distribuída, com densidade σ , também satisfaz à equação de Poisson (1.67) agora escrita na forma em que é usualmente encontrada nos textos de eletrostática:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_3^2} = \frac{\sigma}{\epsilon_0}. \quad (1.68)$$

Terminamos esta seção apresentando as **Equações Elíticas**, que generalizam as equações de Poisson. Voltando à Seção 1.3, consideremos um processo físico no qual a distribuição de temperatura é estacionária. Neste caso podemos tomar $\partial u/\partial t = 0$ na equação (1.20), obtendo o modelo

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(k_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(k_3 \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) = F(x_1, x_2, x_3), \quad (1.69)$$

no qual $k_i(x_1, x_2, x_3) > 0$, $i = 1, 2, 3$. Esta é a forma geral das equações elíticas 3D.

1.7 Resumo

Terminamos este capítulo apresentando um sumário dos modelos que foram deduzidos e que serão usados nos próximos capítulos. Nas equações parabólicas, modelos de fenômenos de difusão, procuramos $u(x, t)$ que satisfaz, como em (1.13),

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{k} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \tilde{f}(x, t), \quad (1.70)$$

com $\tilde{k}(x) > 0$. As condições de contorno para esta equação estão em (1.15)–(1.17).

Se além da difusão também há transporte de u provocado por correntes, temos a equação convecção-difusão, equação (1.19),

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) - v \frac{\partial u}{\partial x} + f(x, t). \quad (1.71)$$

As equações hiperbólicas, aqui apresentadas como modelo de movimentos longitudinais numa barra (1.43) são

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x), \quad (1.72)$$

que, caso os coeficientes sejam constantes e a fonte nula é conhecida como equação da onda unidimensional, (1.44),

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.73)$$

As condições de contorno associadas às equações hiperbólicas estão no final da Seção 1.4.

As leis de conservação não lineares são equações diferenciais do tipo (1.48):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, \quad (1.74)$$

onde $f(u)$ é uma função não linear.

Se $f(u) = au$, a é uma constante, temos a equação da onda unidirecional, ou equação hiperbólica de primeira ordem (1.50),

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1.75)$$

O potencial associado a cargas, ou massas pontuais, satisfaz à equação de Laplace (1.55)

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_3^2} = 0. \quad (1.76)$$

Se as cargas, ou massas, são uniformemente distribuídas, o potencial satisfaz à equação de Poisson (1.67),

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_3^2} = f(x_1, x_2, x_3). \quad (1.77)$$

Estas duas últimas equações são casos particulares das equações elípticas, (1.69).

Capítulo 2

Convergência, consistência e estabilidade de esquemas numéricos

2.1 Introdução

No capítulo anterior apresentamos alguns exemplos que ilustram como as equações diferenciais parciais são usadas como modelos matemáticos para processos da natureza. O passo seguinte é encontrar soluções para o problema, i.e., funções que satisfaçam tanto à equação diferencial quanto às condições adicionais, impostas no contorno e no início do processo.

Várias são as dificuldades que podem surgir na busca destas **soluções exatas**: complexidade da região, os coeficientes da equação diferencial podem variar ponto a ponto e até mesmo depender da própria solução (problemas não lineares).

Uma alternativa às soluções exatas que tem sido cada vez mais usada desde o advento dos computadores são as aproximações numéricas. A idéia central é a discretização do contínuo, i.e., da região na qual queremos resolver a equação diferencial e também das derivadas que aparecem na equação diferencial e nas condições adicionais. Via de regra, esta discretização nos permite passar de um problema contínuo, a equação diferencial e suas condições adicionais, para um problema de dimensão finita, um sistema de equações. Por exemplo, um dos métodos mais tradicionais e mais populares chama-se **Método de Diferenças Finitas**. O objetivo deste capítulo é construir uma base para que o leitor possa fazer uso deste método.

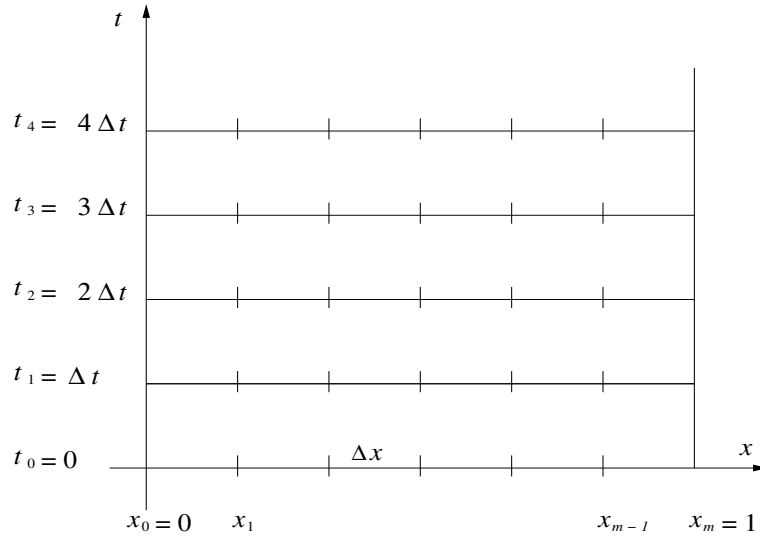


Figura 2.1: Discretização do domínio $[0, x_m] \times [0, \infty)$

2.2 Malhas, discretização de derivadas e erro de truncamento

Vamos iniciar esta seção trabalhando no problema de valor inicial e de contorno dado pelas equações (1.13), (1.14) e (1.15) cuja solução exata é conhecida. Porém, vamos resolvê-lo numericamente para o entendimento do método de diferenças finitas. Desta forma consideremos o seguinte problema

$$u_t = \nu u_{xx}, \quad x \in (0, x_m), \quad t > 0 \quad (2.1)$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad x \in [0, x_m] \quad (2.2)$$

$$u(0, t) = a(t); \quad u(x_m, t) = b(t), \quad t \geq 0, \quad (2.3)$$

com $f(0) = a(0)$, e $f(x_m) = b(0)$.

Para resolver o problema (2.1)-(2.3) numericamente, temos que discretizá-lo. Inicialmente, vamos **discretizar o domínio**. Na variável espacial usamos a seguinte malha uniforme: $x_k = k\Delta x$, $k = 0, \dots, m$ e $\Delta x = x_m/m$, e na variável temporal usamos: $t_n = n\Delta t$, $n = 0, 1, \dots$ (Veja Figura 2.1).

A aproximação da solução do problema (2.1)-(2.3) no ponto (x_k, t_n) será denotada por v_k^n .

Observamos que a equação (2.1) apresenta derivadas parciais que também devem ser discretizadas. Usando o desenvolvimento em série de Taylor na variável x em torno de (x_k, t_n) para calcular $v(x_{k+1}, t_n)$ e $v(x_{k-1}, t_n)$ e combinando estes desenvolvimentos, obtemos

$$v_{xx}(x_k, t_n) = \frac{v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(x_k, t_n) - \frac{2\Delta x^4}{6} \frac{\partial^6 v}{\partial x^6}(x_k, t_n) - \dots \quad (2.4)$$

De forma análoga, usando agora o desenvolvimento em série de Taylor na variável t , em torno de (x_k, t_n) para calcular $v(x_k, t_{n+1})$, obtemos uma aproximação para a derivada temporal

$$v_t(x_k, t_n) = \frac{v_k^{n+1} - v_k^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} v_{tt}(x_k, t_n) - \frac{\Delta t^2}{6} v_{ttt}(x_k, t_n) - \dots \quad (2.5)$$

Portanto, podemos aproximar a equação diferencial parcial no ponto (x_k, t_n) pela **equação discretizada**

$$\frac{v_k^{n+1} - v_k^n}{\Delta t} = \nu \frac{v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n}{\Delta x^2}, \quad (2.6)$$

com erro de truncamento local $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Isolando o termo v_k^{n+1} na equação (2.6), obtemos

$$v_k^{n+1} = v_k^n + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} (v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n), \quad (2.7)$$

i.e., uma expressão para a aproximação no tempo t_{n+1} em função dos valores em t_n .

A condição inicial e a de fronteira, pode ser aproximada da seguinte forma

$$v_k^0 = f(x_k), \quad k = 0, \dots, m \quad (2.8)$$

$$v_0^{n+1} = a(t_{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.9)$$

$$v_m^{n+1} = b(t_{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.10)$$

Agora, podemos calcular uma aproximação para a solução do problema (2.1)–(2.3), resolvendo o **problema discreto** (2.7)–(2.10).

Observe que a equação (2.8) nos dá v_k^0 para $k = 0, \dots, m$, então se usarmos a equação (2.7) para $n = 0$, obtemos v_k^1 para $k = 1, \dots, m - 1$. Para o caso de $k = 0$ e m , usamos v_k^1 das equações (2.9) e (2.10), respectivamente. Portanto, seguindo o mesmo raciocínio, obtemos a aproximação $v(x_k, t_n)$ para todos (x_k, t_n) do domínio discretizado.

Um esquema numérico para o problema de valor inicial (2.1)–(2.3) é dito **explícito**, se para calcular v_k^{n+1} precisamos apenas usar informações nos níveis anteriores. Caso contrário, dizemos que o esquema é **implícito**.

Antes de continuarmos com as nossas discussões, vamos introduzir a seguinte notação para as diferenças discutidas acima

$$\delta_+ v_k = v_{k+1} - v_k, \quad (2.11)$$

$$\delta_- v_k = v_{k-1} - v_k, \quad (2.12)$$

$$\delta_0 v_k = v_{k+1} - v_{k-1}, \quad (2.13)$$

$$\delta^2 v_k = v_{k+1} - 2v_k + v_{k-1}, \quad (2.14)$$

para o operador de diferenças **avançado**, **atrasado**, **centrado** e **centrado de segunda ordem**, respectivamente. Quando a variável na qual a diferença é aplicada

não é óbvia, a indicamos também no índice, por exemplo, como $\delta_{t+} v_k^n$. Portanto, o esquema (2.6) pode ser rescrito da seguinte forma

$$v_k^{n+1} = v_k^n - \nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \delta_x^2 v_k^n. \quad (2.15)$$

O passo seguinte é questionar se estes cálculos fornecem resultados que estão próximos dos valores obtidos com solução exata. Isso corresponde a estudar a convergência da sequência de aproximações discretas.

Das equações (2.4) e (2.5), temos

$$\frac{v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n}{\Delta x^2} = v_{xx}(x_k, t_n) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (2.16)$$

e

$$\frac{v_k^{n+1} - v_k^n}{\Delta t} = v_t(x_k, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t). \quad (2.17)$$

Portanto,

$$v_t(x_k, t_n) - \nu v_{xx}(x_k, t_n) = \frac{v_k^{n+1} - v_k^n}{\Delta t} - \nu \frac{v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.18)$$

A equação (2.18) mostra que a equação de diferenças é uma aproximação da equação diferencial com erro de truncamento local $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$. Porém, não podemos afirmar que a solução da equação de diferenças irá se aproximar da solução da equação diferencial parcial, quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$. Agora, aumentamos a ordem de aproximação no tempo, t , usando a aproximação

$$\frac{v_k^{n+1} - v_k^{n-1}}{2\Delta t} = v_t + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (2.19)$$

A última equação é obtida fazendo a diferença entre as expansões em série de Taylor de v_k^{n+1} com a de v_k^{n-1} em torno de (x_k, t_n) . Então, usando as equações (2.19) e (2.16), temos o seguinte esquema

$$v_k^{n+1} = v_k^{n-1} + \frac{2\nu\Delta t}{\Delta x^2} (v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n), \quad (2.20)$$

o qual é chamado de **esquema leapfrog**. Observamos que este esquema apresenta erro de truncamento local igual a $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$. Sendo assim, a expectativa é de que os resultados obtidos pelo uso do método explícito (2.7) sejam piores que os resultados obtidos com o uso do esquema (2.20). O exemplo abaixo mostra que isso é falso.

Exemplo: Calculamos a solução numérica do problema (2.1)-(2.3), com $\nu = 1/6$, $f(x) = \sin 2\pi x$, $x \in [0, 1]$ e $a(t) \equiv b(t) \equiv 0$, usando os esquemas (2.7) e (2.20), com $\Delta t = 0.005$ s e $\Delta x = 0.05$ m.

A Figura 2.2 mostra as soluções numéricas em alguns instantes de tempo, obtidas usando o esquema avançado no tempo e centrado no espaço (2.7) e o esquema

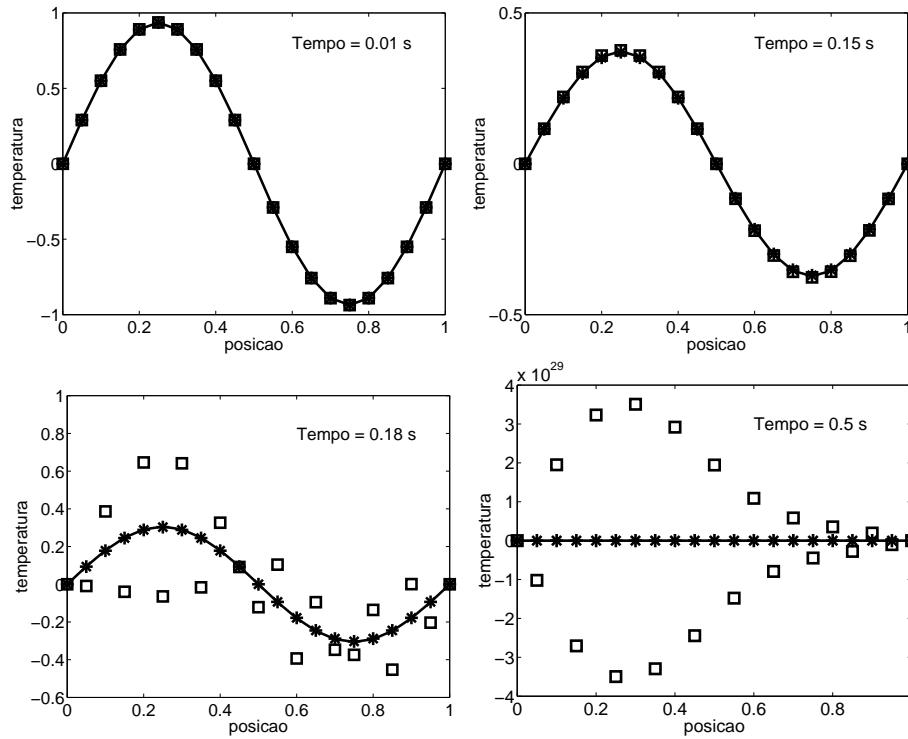


Figura 2.2: Solução do problema (2.1)-(2.3), com $\nu = 1/6$, $f(x) = \sin 2\pi x$, $x \in [0, 1]$ e $a(t) \equiv b(t) \equiv 0$, Linha sólida: Solução exata; \square : Solução numérica obtida usando o esquema leapfrog; e $*$: Solução numérica obtida usando o esquema avançado no tempo e centrado no espaço.

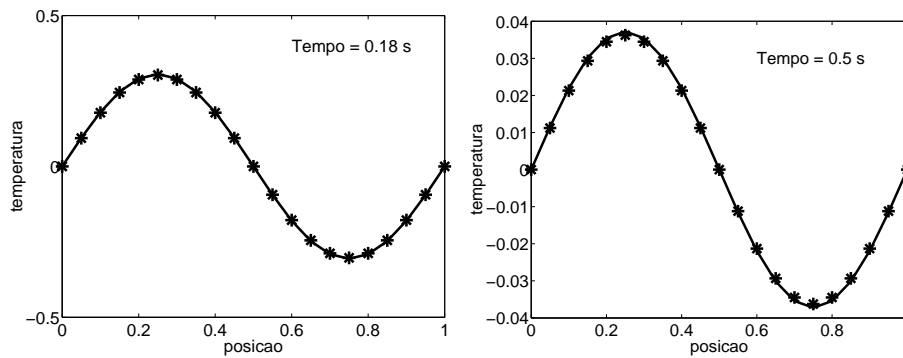


Figura 2.3: Solução do problema (2.1)-(2.3) usando o esquema avançado no tempo e centrado no espaço, detalhe. (Linha sólida: Solução exata; $*$: Solução numérica obtida usando o esquema avançado no tempo e centrado no espaço.)

leapfrog (2.20), juntamente com a solução exata ($u(x, t) = e^{-(2\pi^2 t)/3} \sin(2\pi x)$). Podemos observar que o resultado obtido em ambos os esquemas até o tempo 0.15 s é bastante satisfatório, porém a partir de um determinado tempo \hat{t} a solução obtida usando o esquema leapfrog apresenta resultados desastrosos (veja, por exemplo, Figura 2.2 para Tempo = 0.18 s e Tempo = 0.5 s). Na Figura 2.3 podemos ver que os resultados obtidos com o esquema avançado no tempo e centrado no espaço para os mesmos instantes de tempo permanecem bastante satisfatório, com o devido Δx e Δt escolhidos. Portanto, o fato da ordem do erro de truncamento local ser maior para o esquema leapfrog do que para o esquema avançado no tempo e centrado no espaço não implica que a solução numérica obtida por ele convirja para a solução exata.

Observamos que o esquema leapfrog é um esquema de três níveis, i.e., ele necessita de dois níveis anteriores para calcular o atual. Porém, no problema original só é dado um (aproximação inicial). Geralmente, usamos um esquema de dois níveis para gerar o nível que precisamos para iniciar o esquema leapfrog.

Neste ponto, também devemos lembrar que se a condição de fronteira for de Neumann, então se faz necessário uma aproximação para u_x . Se usarmos uma aproximação do tipo avançado no espaço para u_x junto com o esquema leapfrog (2.20), então é possível que nosso resultado final seja de primeira ordem no espaço. Agora, se ao invés dessa aproximação para u_x , usássemos a centrada no espaço, teríamos o seguinte

$$\frac{v_1^{n+1} - v_{-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0. \quad (2.21)$$

Neste caso, o grid teria que ter mais um ponto, o qual seria um ponto fictício.

É importante entender precisamente que tipo de convergência que o esquema tem, que tipo de suposições são feitas para se ter a convergência, etc. A abordagem mais comum para analisar a convergência de aproximações fornecidas por equações de diferenças é através dos conceitos de consistência e de estabilidade, pois como veremos mais adiante, o Teorema de Lax permite provar a convergência de esquemas de diferenças que são consistentes e estáveis, que é mais fácil de mostrar.

2.3 Convergência

Nos gostaríamos que a solução da equação de diferenças estivesse tão próxima da solução da equação diferencial parcial quanto desejássemos. Este conceito de tão próximo está matematicamente associado ao conceito de convergência.

Considere o seguinte problema de valor inicial

$$\mathcal{L}u = F, \quad x \in \quad, \quad t > 0 \quad (2.22)$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad x \in \quad, \quad (2.23)$$

onde \mathcal{L} é um operador diferencial, F uma fonte e f é a condição inicial.

Agora, considere o operador de diferenças associado ao problema (2.22)–(2.23)

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_k^n v_k^n &= G_k^n, \quad -\infty < k < \infty, \quad n = 0, 1, \dots \\ v_k^0 &= f(k\Delta x).\end{aligned}$$

Definição 2.3.1 *Um esquema de diferenças $\mathcal{L}_k^n v_k^n = G_k^n$ que aproxima a equação diferencial parcial $\mathcal{L}u = F$ é um esquema pontualmente convergente, se para qualquer (x, t) , quando $(k\Delta x, (n+1)\Delta t) \rightarrow (x, t)$, então $v_k^n \rightarrow u(x, t)$, quando $\Delta x \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$.*

Exemplo: Mostraremos que a solução do esquema explícito (2.7), rescrito na forma

$$v_k^{n+1} = (1 - 2r)v_k^n + r(v_{k-1}^n + v_{k+1}^n), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.24)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$$v_k^0 = f(k\Delta x), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.25)$$

com $r = \nu\Delta t/\Delta x^2$, $0 \leq r \leq 1/2$, converge pontualmente para a solução do problema de valor inicial

$$u_t = \nu u_{xx}, \quad (2.26)$$

$$u(x, 0) = f(x). \quad (2.27)$$

Seja $z_k^n = v_k^n - u(k\Delta x, n\Delta t)$, onde u é solução do problema (2.26)–(2.27). Então, substituindo u na equação (2.18) e multiplicando-a por Δt , obtemos

$$u_k^{n+1} = (1 - 2r)u_k^n + r(u_{k-1}^n + u_{k+1}^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t\Delta x^2). \quad (2.28)$$

Subtraindo a equação (2.28) da equação (2.24), obtemos

$$z_k^{n+1} = (1 - 2r)z_k^n + r(z_{k+1}^n + z_{k-1}^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t\Delta x^2). \quad (2.29)$$

Se $0 \leq r \leq 1/2$, temos

$$|z_k^{n+1}| \leq (1 - 2r)|z_k^n| + r|z_{k+1}^n| + r|z_{k-1}^n| + A(\Delta t^2 + \Delta t\Delta x^2) \quad (2.30)$$

$$\leq Z^n + A(\Delta t^2 + \Delta t\Delta x^2), \quad \forall k \quad (2.31)$$

onde $Z^n = \sup_k |z_k^n|$ e A é a constante associada a $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e $\mathcal{O}(\Delta t\Delta x^2)$, a qual depende da suposição da limitação das derivadas de alta ordem de u .

Tomando o sup em k no lado esquerdo, temos

$$\begin{aligned}Z^{n+1} &\leq Z^n + A(\Delta t^2 + \Delta t\Delta x^2) \\ &\leq Z^{n-1} + 2A(\Delta t^2 + \Delta t\Delta x^2) \\ &\vdots \\ &\leq Z^0 + (n+1)A(\Delta t^2 + \Delta t\Delta x^2) \\ &= (n+1)\Delta t A(\Delta t + \Delta x^2),\end{aligned}$$

pois $Z^0 = 0$ (erro inicial é nulo). Como $|u_k^{n+1} - v(k\Delta x, (n+1)\Delta t)| \leq Z^{n+1}$ e $(n+1)\Delta t \rightarrow t$, temos

$$|u_k^{n+1} - v(k\Delta x, (n+1)\Delta t)| \leq (n+1)\Delta t A(\Delta t + \Delta x^2) \rightarrow 0, \quad (2.32)$$

quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$. Isto prova que a solução obtida pelo esquema (2.24) converge pontualmente para a solução do problema (2.26)-(2.27). Observe que é importante que $(n+1)\Delta t$ tenda para t .

Geralmente, é difícil provar a convergência pontual. Além disso, ela não é útil para saber se a convergência é uniforme. Um conceito mais útil neste sentido é a chamada convergência na norma, definida a seguir. Usaremos a notação $\vec{u}^n = (\dots, u_{-1}^n, u_0^n, u_1^n, \dots)$.

Definição 2.3.2 *O esquema $\mathcal{L}_k^n v_k = G_k^n$ é convergente na norma $\|\cdot\|$ para a solução da equação diferencial parcial $\mathcal{L}u = F$ no tempo t , se quando $(n+1)\Delta t \rightarrow t$, temos*

$$\|\vec{v}^{n+1} - \vec{u}^{n+1}\| \rightarrow 0,$$

quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$.

Observe que a norma usada na Definição 2.3.2 não é especificada. Do exemplo anterior, vemos também que o esquema (2.24) é também convergente, na norma do sup.

Deve ficar claro que as duas definições acima são diferentes. A definição de convergência pontual garante que o esquema converge para alguns valores de (x, t) , não necessariamente para outros. Além disso, se $\|\vec{v}^{n+1} - \vec{u}^{n+1}\|$ é muito pequeno, v_k^n deve estar próximo de u_k^n para todo k .

A próxima definição nos fala da taxa de convergência.

Definição 2.3.3 (Ordem de Convergência) *O esquema $\mathcal{L}_k^n v_k = G_k^n$ que aproxima a equação diferencial parcial $\mathcal{L}u = F$ é um esquema convergente de ordem (p, q) , se quando $(n+1)\Delta t \rightarrow t$, temos*

$$\|\vec{v}^{n+1} - \vec{u}^{n+1}\| = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q), \quad (2.33)$$

quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$.

Lembrando a definição de ordem de aproximação \mathcal{O} , a equação (2.33) significa que existe uma constante C que depende do t , tal que

$$\|\vec{v}^{n+1} - \vec{u}^{n+1}\| = C(\Delta x^p + \Delta t^q). \quad (2.34)$$

O esquema (2.24) analisado no exemplo anterior é convergente de ordem (2,1). Isto pode ser verificado tomando $v = u$ no lado esquerdo de (2.18).

Nesta seção analisamos convergência somente para problemas de valor inicial; podemos trabalhar com problemas de valor inicial e de contorno de forma similar, adaptando convenientemente as normas e definições.

2.4 Consistência

Definição 2.4.1 *O esquema de diferenças finitas $L_k^n v_k^n = G_k^n$ é pontualmente consistente com a equação diferencial parcial $\mathcal{L}u = F$ no ponto (x, t) , se para qualquer função suave $\phi(x, t)$,*

$$(\mathcal{L}\phi - F)(k\Delta x, n\Delta t) - [L_k^n \phi(k\Delta x, n\Delta t) - G_k^n] \rightarrow 0, \quad (2.35)$$

quando $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$ e $(k\Delta x, (n+1)\Delta t) \rightarrow (x, t)$.

Os esquemas de dois níveis são aqueles que podem ser escritos na forma

$$\vec{v}^{n+1} = Q\vec{v}^n + \Delta t \vec{G}^n, \quad (2.36)$$

onde

$$\begin{aligned} \vec{v}^n &= (\dots, v_{-1}^n, v_0^n, v_1^n, \dots)^T, \\ \vec{G}^n &= (\dots, G_{-1}^n, G_0^n, G_1^n, \dots)^T, \end{aligned}$$

e Q é um operador atuando sobre o apropriado espaço.

A definição de consistência dos esquemas de dois níveis pode ser reescrita de uma forma mais fácil de ser trabalhada:

Definição 2.4.2 *O esquema (2.36) é consistente com a respectiva equação diferencial parcial, na norma $\|\cdot\|$, se a solução da equação diferencial parcial, u , satisfaz*

$$\vec{u}^{n+1} = Q\vec{u}^n + \Delta t \vec{G}^n + \Delta t \vec{\tau}^n \quad (2.37)$$

e

$$\|\vec{\tau}^n\| \rightarrow 0, \quad (2.38)$$

quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$, onde \vec{u}^n denota um vetor cujo a k -ésima componente do vetor é $u(k\Delta x, n\Delta t)$.

Observamos que na consistência na norma, todas as componentes de $\vec{\tau}^n$ convergem para zero de forma uniforme.

Definição 2.4.3 *O esquema de diferenças (2.36) é dito ter precisão de ordem (p, q) para uma dada equação diferencial parcial, se*

$$\|\vec{\tau}^n\| = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q), \quad (2.39)$$

onde $\vec{\tau}^n$ ou $\|\vec{\tau}^n\|$ é o erro de truncamento.

Observe que se um esquema é preciso de ordem (p, q) , $p, q \geq 1$, então ele é um esquema consistente.

Geralmente, a análise da consistência é feita usando série de Taylor, vejamos isso no exemplo abaixo.

Exemplo: Vamos discutir a consistência do seguinte esquema de diferenças explícito

$$v_k^{n+1} = v_k^n + r(v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n), \quad (2.40)$$

com $r = \nu\Delta t/\Delta x^2$, para a equação do calor $u_t = \nu u_{xx}$, $x \in \mathbb{R}$, $t > 0$.

Para mostrarmos que (2.40) é consistente, e tem precisão de ordem (2,1), devemos primeiro observar que o esquema (2.40) já está escrito na forma (2.36).

Usando (2.37) e os respectivos desenvolvimentos em série de Taylor, temos

$$\begin{aligned} \Delta t \tau_k^n &= u_k^{n+1} - \{u_k^n + r[u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n]\} \\ &= u_k^n + (u_t)_k^n \Delta t + u_{tt}(k\Delta x, t_1) \frac{\Delta t^2}{2} \\ &\quad - \left\{ u_k + r \left[u_k^n + (u_x)_k^n \Delta x + (u_{xx})_k^n \frac{\Delta x^2}{2} + (u_{xxx})_k^n \frac{\Delta x^3}{6} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + u_{xxxx}(x_1, n\Delta t) \frac{\Delta x^4}{24} - 2u_k^n + u_k^n - (u_x)_k^n \Delta x \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (u_{xx})_k^n \frac{\Delta x^2}{2} - (u_{xxx})_k^n \frac{\Delta x^3}{6} + u_{xxxx}(x_2, n\Delta t) \frac{\Delta x^4}{24} \right] \right\} \\ &= (u_t)_k^n \Delta t - r \Delta x^2 (u_{xx})_k^n + u_{tt}(k\Delta x, t_1) \frac{\Delta t^2}{2} \\ &\quad - r u_{xxxx}(x_1, n\Delta t) \frac{\Delta x^4}{24} - r u_{xxxx}(x_2, n\Delta t) \frac{\Delta x^4}{24} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} &= (u_t - \nu u_{xx})_k^n \Delta t + u_{tt}(k\Delta x, t_1) \frac{\Delta t^2}{2} \\ &\quad - \nu u_{xxxx}(x_1, n\Delta t) \frac{\Delta x^2}{24} \Delta t - \nu u_{xxxx}(x_2, n\Delta t) \frac{\Delta x^2}{24} \Delta t, \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde t_1 , x_1 e x_2 provêm das expressões do erro na série de Taylor.

Agora, como $u_t - \nu u_{xx} = 0$, por ser u solução da equação do calor, obtemos

$$\tau_k^n = u_{tt}(k\Delta x, t_1) \frac{\Delta t}{2} - \nu (u_{xxxx}(x_1, n\Delta t) + u_{xxxx}(x_2, n\Delta t)) \frac{\Delta x^2}{24} \Delta t. \quad (2.43)$$

Para aplicarmos a Definição 2.4.2, devemos decidir que norma usar. Por exemplo, suponhamos que u_{tt} e u_{xxxx} são uniformemente limitados em $\mathbb{R} \times [0, t_0]$, para algum $t_0 > t$, então podemos usar a norma do sup, e, concluímos que o esquema é consistente e tem precisão de ordem (2,1) com respeito à norma do sup.

2.5 Estabilidade

A noção de estabilidade traz para os esquemas numéricos uma idéia usada na definição de problemas bem postos em equações diferenciais: a continuidade com relação aos dados do problema.

Assim, queremos que pequenos erros na condição inicial causem pequenos erros nas aproximações calculadas pelo esquema numérico.

Considere o esquema de diferenças finitas de dois níveis

$$\vec{v}^{n+1} = Q\vec{v}^n, \quad n \geq 0. \quad (2.44)$$

Definição 2.5.1 *O esquema de diferenças (2.44) é dito estável com respeito a norma $\|\cdot\|$, se existem constantes positivas Δx_0 e Δt_0 , e constantes não negativas K e β tais que*

$$\|\vec{v}^{n+1}\| \leq Ke^{\beta t} \|\vec{v}^0\|, \quad (2.45)$$

para $0 \leq t = (n+1)\Delta t$, $0 < \Delta x \leq \Delta x_0$ e $0 < \Delta t \leq \Delta t_0$.

A proposição abaixo estabelece uma equivalência que pode ser útil nas demonstrações de estabilidade. Nela usamos o conceito da norma do operador Q induzida pela norma do espaço no qual ele atua. O leitor não familiarizado com estes conceitos pode consultar a Seção 2.2.3 do livro de Thomas [6].

Proposição 2.5.1 *O esquema de diferenças (2.44) é estável com respeito a norma $\|\cdot\|$, se, e somente se, existem constantes positivas Δx_0 e Δt_0 e constantes não negativas K e β tal que*

$$\|Q^{n+1}\| \leq Ke^{\beta t}, \quad (2.46)$$

para $0 \leq t = (n+1)\Delta t$, $0 < \Delta x \leq \Delta x_0$ e $0 < \Delta t \leq \Delta t_0$.

Demonstração: Inicialmente devemos observar que

$$\vec{v}^{n+1} = Q\vec{v}^n = Q(Q\vec{v}^{n-1}) = Q^2\vec{v}^{n-1} = \dots = Q^{n+1}\vec{v}^0, \quad (2.47)$$

e, portanto,

$$\|\vec{v}^{n+1}\| = \|Q^{n+1}\vec{v}^0\|. \quad (2.48)$$

(\Rightarrow) Supondo que o esquema é estável, temos da Definição 2.5.1 e da equação (2.48)

$$\|Q^{n+1}\vec{v}^0\| \leq Ke^{\beta t} \|\vec{v}^0\|. \quad (2.49)$$

Ou seja,

$$\frac{\|Q^{n+1}\vec{v}^0\|}{\|\vec{v}^0\|} \leq Ke^{\beta t}. \quad (2.50)$$

Tomando o supremo em ambos os lados desta desigualdade, em todos os \vec{v}^0 não nulos, temos

$$\|Q^{n+1}\| \leq Ke^{\beta t}. \quad (2.51)$$

(\Leftarrow) Temos $\|Q^{n+1}\vec{v}^0\| \leq \|Q^{n+1}\| \|\vec{v}^0\|$. Usando (2.46), temos a desigualdade (2.45), ou seja, o esquema de diferenças é estável. ■

Exemplo: Vamos mostrar que um esquema do tipo

$$v_m^{n+1} = \alpha v_m^n + \beta v_{m+1}^n, \quad (2.52)$$

para a equação diferencial $u_t + au_x = 0$ é estável.

Para isto, observamos que

$$\begin{aligned}
\sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_m^{n+1}|^2 &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} |\alpha v_m^n + \beta v_{m+1}^n|^2 \\
&\leq \sum_{m=-\infty}^{\infty} (|\alpha|^2 |v_m^n|^2 + 2|\alpha||\beta| |v_m^n| |v_{m+1}^n| + |\beta|^2 |v_{m+1}^n|^2) \\
&\leq \sum_{m=-\infty}^{\infty} [|\alpha|^2 |v_m^n|^2 + |\alpha||\beta| (|v_m^n|^2 + |v_{m+1}^n|^2) + |\beta|^2 |v_{m+1}^n|^2] \\
&= \sum_{m=-\infty}^{\infty} (|\alpha|^2 + 2|\alpha||\beta| + |\beta|^2) |v_m^n|^2 \\
&= (|\alpha| + |\beta|)^2 \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_m^n|^2, \tag{2.53}
\end{aligned}$$

onde do segundo para a terceiro passo usamos a desigualdade $2cd \leq c^2 + d^2$. Portanto, se $(|\alpha| + |\beta|) \leq 1$, então o esquema é estável (Definição 2.5.1, com $K = 1$ e $\beta = 0$). Daí, podemos concluir que o esquema avançado no tempo e avançado no espaço para a equação $u_t + au_x = 0$ é estável, se $|1 + R| + |R| \leq 1$ ($R = a\Delta t/\Delta x$).

2.6 Teorema de Lax

Nesta seção nos vamos apresentar o resultado que faz a conexão entre consistência e estabilidade com convergência.

Teorema 2.6.1 (Teorema de Lax) *Considere um esquema de diferenças finitas*

$$\vec{v}^{n+1} = Q\vec{v}^n + \Delta t G^n \tag{2.54}$$

preciso de ordem (p, q) na norma $\|\cdot\|$ para um problema de valor inicial linear e bem-posto. Se este esquema é estável com respeito a norma $\|\cdot\|$, então ele é convergente de ordem (p, q) com respeito a norma $\|\cdot\|$.

Demonstração: Seja $u(x, t)$ a solução exata do problema de valor inicial. Se o esquema de diferenças é preciso de ordem (p, q) , então

$$\vec{u}^{n+1} = Q\vec{u}^n + \Delta t G^n + \Delta t \vec{\tau}^n, \tag{2.55}$$

com $\|\vec{\tau}^n\| = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q)$. Definimos $\vec{w}^j = \vec{u}^j - \vec{v}^j$, então \vec{w}^j satisfaz

$$\vec{w}^{n+1} = Q\vec{w}^n + \Delta t \vec{\tau}^n. \tag{2.56}$$

Aplicação repetida da equação (2.56), fornece

$$\begin{aligned}
\vec{w}^{n+1} &= Q\vec{w}^n + \Delta t \vec{\tau}^n \\
&= Q(Q\vec{w}^{n-1} + \Delta t \vec{\tau}^{n-1}) + \Delta t \vec{\tau}^n \\
&\vdots \\
&= Q^{n+1}\vec{w}^0 + \Delta t \sum_{j=0}^n Q^j \vec{\tau}^{n-j}.
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Como $\vec{w}^0 = \vec{0}$, temos

$$\vec{w}^{n+1} = \Delta t \sum_{j=0}^n Q^j \vec{\tau}^{n-j}. \tag{2.58}$$

Agora, lembrando que o esquema de diferenças é estável, temos, para qualquer j

$$\|Q^j\| \leq K e^{\beta t}. \tag{2.59}$$

Usando esta desigualdade na equação (2.58), obtemos

$$\begin{aligned}
\|\vec{w}^{n+1}\| &\leq \Delta t \sum_{j=0}^n \|Q^j\| \|\vec{\tau}^{n-j}\| \\
&\leq \Delta t K \sum_{j=0}^n K e^{\beta j \Delta t} \|\vec{\tau}^{n-j}\| \\
&\leq \Delta t K e^{\beta(n+1)\Delta t} \sum_{j=0}^n \|\vec{\tau}^{n-j}\| \\
&\leq (n+1) \Delta t K e^{\beta(n+1)\Delta t} C^*(t) (\Delta x^p + \Delta t^q),
\end{aligned} \tag{2.60}$$

onde $C^*(t) = \sup_{0 \leq s \leq t} C(s)$ e $C(s)$ é a constante que aparece na definição de ordem de aproximação, \mathcal{O} , de $\vec{\tau}^{n-j}$. Fazendo $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ com $(n+1)\Delta t \rightarrow t$ ($n \rightarrow \infty$), obtemos

$$\|\vec{v}^{n+1} - \vec{u}^{n+1}\| \rightarrow 0. \tag{2.61}$$

Agora, para ver que o esquema é convergente de ordem (p, q) , basta observar que a equação (2.60) pode ser escrita da seguinte forma

$$\|\vec{v}^{n+1} - \vec{u}^{n+1}\| \leq \tilde{K}(t) (\Delta x^p + \Delta t^q) = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q). \tag{2.62}$$

■

Este teorema é muito importante porque para mostrarmos que um esquema de dois níveis, consistente é convergente, basta mostrar que ele é estável.

Além do Teorema de Lax, apresentamos o Teorema de equivalência de Lax, o qual enunciamos abaixo e o leitor interessado na demonstração pode consultar o livro do Strikwerda [5].

Teorema 2.6.2 (Teorema de equivalência de Lax) *Um esquema de diferenças finitas de dois níveis, consistente, para um problema de valor inicial linear e bem-posto, é convergente, se e somente se, é estável.*

2.7 Análise de esquemas de diferenças finitas

Nesta seção apresentamos uma ferramenta importante da análise de Fourier, com a qual podemos analisar esquemas de diferenças finitas e sua solução. Vamos usar a análise de Fourier tanto na reta real, \mathbb{R} , quanto num conjunto $h = \{hm \mid m \in \mathbb{Z}\}$, sendo h um número real dado.

Definimos a transformada de Fourier de $u \in L_2(\mathbb{R})$ (ver nota no rodapé*) por

$$\hat{u}(\omega, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} u(x, t) dx \quad (2.63)$$

e sua transformada inversa por

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} \hat{u}(\omega, t) d\omega. \quad (2.64)$$

Observamos que a fórmula da transformada inversa de Fourier expressa a função u como a superposição (i.e., a “soma”) das ondas, $e^{i\omega x}$, com diferentes amplitudes $\hat{u}(\omega)$.

De forma similar, se \vec{v} é uma função definida no conjunto dos números inteiros, \mathbb{Z} , sua transformada de Fourier discreta é dada por

$$\hat{v}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\xi} v_m \quad (2.65)$$

para $\xi \in [-\pi, \pi]$, e $\hat{v}(-\pi) = \hat{v}(\pi)$. Se $\hat{v} \in L_2([-\pi, \pi])$, $\vec{v} \in \ell_2$, definimos a sua transformada inversa, $\vec{v} = (\dots, v_{-1}, v_0, v_1, \dots)$, por

$$v_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{im\xi} \hat{v}(\xi) d\xi. \quad (2.66)$$

Se o espaçamento entre os pontos é Δx , então podemos fazer uma mudança de variáveis e definir a transformada por

$$\hat{v}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\Delta x \xi} v_m \Delta x \quad (2.67)$$

para $\xi \in [-\pi/\Delta x, \pi/\Delta x]$, e portanto a fórmula de inversão é calculada por

$$v_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} e^{im\Delta x \xi} \hat{v}(\xi) d\xi. \quad (2.68)$$

*Usamos as seguintes notações:

$$L_2(\mathbb{R}) = \left\{ u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx < \infty \right\}$$

$$\ell_2 = \left\{ \vec{u} = (\dots, u_{-1}, u_0, u_1, \dots)^T \mid \sum_{k=-\infty}^{\infty} |u_k|^2 < \infty \right\}$$

Uma consequência importante da definição (2.63) é que a norma em L_2 de u ,

$$\|u\|_2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx \right)^{1/2}, \quad (2.69)$$

é a igual a norma em L_2 de $\hat{u}(\omega)$, i.e.,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{u}(\omega)|^2 d\omega. \quad (2.70)$$

Isto pode ser verificado diretamente das definições.

Também para o caso da transformada de Fourier discreta (2.67), pode-se mostrar que também temos a igualdade para a norma em ℓ_2 de v , i.e.,

$$\|\hat{v}\|_{\Delta x}^2 = \int_{\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} |\hat{v}(\xi)|^2 d\xi = \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_m|^2 \Delta x = \|\vec{v}\|_{\Delta x}^2. \quad (2.71)$$

As relações (2.70) e (2.71) são conhecidas como **identidade de Parseval**.

Quando trabalhamos com equações diferenciais parciais, manipulamos com derivadas parciais da função. Portanto, veremos agora quem é a transformada de Fourier da derivada de uma função. Se diferenciarmos a fórmula da inversão (2.64), obtemos

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} i\omega \hat{u}(\omega, t) d\omega, \quad (2.72)$$

daí, concluímos por (2.63), que

$$\widehat{\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)} = i\omega \hat{u}(\omega). \quad (2.73)$$

A relação (2.73) mostra o “poder” da transformada de Fourier, pois ela transforma a operação de diferenciação na operação de multiplicação. Esta transformação permite resolver com maior facilidade alguns problemas de difícil resolução.

2.7.1 Análise de von Neumann

Uma importante aplicação da análise de Fourier é a chamada análise de estabilidade de von Neumann para esquemas de diferenças finitas. Com o uso da análise de Fourier podemos obter condições necessárias e suficientes para a estabilidade de esquemas de diferenças finitas.

Vamos considerar um exemplo particular para ilustrar e discutir o método geral. Como vamos ver a seguir, com o uso da transformada de Fourier, a determinação da estabilidade do esquema é reduzida a considerações algébricas.

Considere o esquema avançado no tempo e atrasado no espaço

$$\frac{v_m^{n+1} - v_m^n}{\Delta t} + a \frac{v_m^n - v_{m-1}^n}{\Delta x} = 0, \quad (2.74)$$

para equação diferencial parcial

$$u_t + au_x = 0. \quad (2.75)$$

O esquema (2.74) pode ser rescrito na forma

$$v_m^{n+1} = (1 - R)v_m^n + Rv_{m-1}^n, \quad (2.76)$$

onde $R = a\Delta t/\Delta x$. Usando a transformada inversa de Fourier, equação (2.68), no nível de tempo $n + 1$, temos

$$v_m^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} e^{im\Delta x\xi} \hat{v}^{n+1}(\xi) d\xi. \quad (2.77)$$

Por outro lado, usando a definição (2.68) para v_m^n e v_{m-1}^n em (2.76), obtemos

$$v_m^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} e^{im\Delta x\xi} [(1 - R) + Re^{-i\Delta x\xi}] \hat{v}^n(\xi) d\xi. \quad (2.78)$$

Como (2.77) e (2.78) são válidas para todo Δx , deduzimos que os integrandos de (2.78) e de (2.77) são iguais. Então, temos que

$$\begin{aligned} \hat{v}^{n+1}(\xi) &= [(1 - R) + Re^{-i\Delta x\xi}] \hat{v}^n(\xi) \\ &= g(\Delta x\xi) \hat{v}^n(\xi), \end{aligned} \quad (2.79)$$

onde $g(\Delta x\xi) = (1 - R) + Re^{-i\Delta x\xi}$.

A fórmula (2.79) nos diz que a transformada de Fourier da solução do esquema em um passo no tempo posterior é igual a transformada de Fourier da solução do esquema no tempo atual multiplicada por uma função g , que na literatura recebe o nome de *fator de amplificação* [5] ou *senal do esquema numérico* [6]. O nome fator de amplificação se deve ao fato de que g descreve a razão na qual a transformada de Fourier da solução do esquema aumenta ($g > 1$) ou diminui ($g < 1$) quando a transformada de Fourier da solução do esquema avança por um passo no tempo. Usando repetidas vezes a equação (2.79), nós obtemos a importante fórmula

$$\hat{v}^n(\xi) = g(\Delta x\xi)^n \hat{v}^0(\xi). \quad (2.80)$$

Lembramos aqui que o sobrescrito em \hat{v} é um índice do nível no tempo, enquanto o de g é uma potência, desta função.

Seguindo a metodologia acima vemos que por meio da transformada de Fourier todo esquema de um passo pode ser escrito na forma (2.80) que, como veremos abaixo, é útil para estudar estabilidade e precisão.

A seguir, usamos a equação (2.80) para estudar a estabilidade do esquema (2.74). Pela identidade de Parseval, equação (2.71), e por (2.80),

$$\begin{aligned} \|\hat{v}^n\|_{\Delta x}^2 &= \Delta x \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_m^n|^2 = \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} |\hat{v}^n(\xi)|^2 d\xi \\ &= \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} |g(\Delta x\xi)|^{2n} |\hat{v}^0(\xi)|^2 d\xi. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Portanto, vemos que a desigualdade (2.45) que define estabilidade na Definição 2.5.1 será válida, se $|g(\Delta x \xi)|^{2n}$ é devidamente limitada. Para avaliar $|g(\theta)|$, $\theta = \Delta x \xi$, usamos algumas identidades trigonométricas

$$\begin{aligned}
|g(\theta)|^2 &= |(1 - R) + Re^{-i\theta}|^2 \\
&= |(1 - R) + R(\cos \theta - i \sin \theta)|^2 \\
&= (1 - R + R \cos \theta)^2 + R^2 \sin^2 \theta \\
&= [1 - R(1 - \cos \theta)]^2 + 4R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \\
&= \left(1 - 2R \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^2 + 4R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \\
&= 1 - 4R \sin^2 \frac{\theta}{2} + 4R^2 \sin^4 \frac{\theta}{2} + 4R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \\
&= 1 - 4R(1 - R) \sin^2 \frac{\theta}{2}. \tag{2.82}
\end{aligned}$$

Observe que $|g(\theta)| \leq 1$, se $0 \leq R \leq 1$, portanto, por (2.80), temos

$$\begin{aligned}
\|\hat{v}^n\|^2 &= \Delta x \sum_{m=-\infty}^{\infty} |\hat{v}_m^n|^2 \leq \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} |\hat{v}^0(\xi)|^2 d\xi \\
&= \Delta x \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_m^0|^2 = \|v^0\|^2, \tag{2.83}
\end{aligned}$$

e o esquema é estável pela Definição 2.5.1 ($K = 1$, $\beta = 0$).

Contudo, se R não está entre 0 e 1 e $\Delta t/\Delta x$ é fixado quando Δx e Δt tende a zero, então $|g(\theta)| \geq 1$ para alguns valores de θ , e o esquema é instável, como veremos no próximo teorema.

O próximo teorema dá a condição para estabilidade para um esquema de passo simples com coeficientes constantes. Embora no exemplo anterior nós consideramos o fator de amplificação, g , como função somente de $\theta = \Delta x \xi$, em geral, g também dependerá de Δx e Δt .

Teorema 2.7.1 *Um esquema de diferenças finitas (com coeficientes constantes) é estável, se e somente se, existe uma constante K (independente de θ , Δx e Δt) e números positivos $\Delta \tilde{t}$ e $\Delta \tilde{x}$, tais que*

$$|g(\theta, \Delta t, \Delta x)| \leq 1 + K \Delta t, \tag{2.84}$$

para todo θ , $0 < \Delta t \leq \Delta \tilde{t}$ e $0 < \Delta x \leq \Delta \tilde{x}$. Se $g(\theta, \Delta t, \Delta x)$ é independente de Δx e Δt , a condição de estabilidade (2.84) pode ser substituída por

$$|g(\theta)| \leq 1. \tag{2.85}$$

A prova deste teorema pode ser encontrada no livro do Strikwerda [5]. Este teorema mostra que para determinar a estabilidade do esquema de diferenças

finitas, necessitamos considerar apenas o fator de amplificação $g(\theta, \Delta t, \Delta x)$. Esta observação é devido a von Neumann, e por causa disso, esta análise é usualmente chamada de **análise de von Neumann**.

Exemplo: Considerando o esquema avançado no tempo e no espaço para a equação $u_t + au_x = 0$, temos que o fator de amplificação é

$$g(\Delta x\xi) = 1 + R - Re^{i\Delta x\xi}, \quad (2.86)$$

onde a é positivo e $R = a\Delta t/\Delta x$ é constante. Daí, temos que

$$\begin{aligned} |g(\Delta x\xi)|^2 &= |1 + R - R\cos\theta - iR\sin\theta|^2 \\ &= [1 + R(1 - \cos\theta)]^2 + R^2\sin^2\theta \\ &= [1 + 2R\sin^2\frac{\theta}{2}]^2 + 4R^2\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} \\ &= 1 + 4R(1 + R)\sin^2\frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Se $\Delta t/\Delta x$ é constante, então podemos usar a condição de estabilidade (2.85), e vemos que $|g|$ é maior que 1 para $\theta \neq 0$. Portanto, o esquema é instável.

Aqui chamamos atenção que para obter o fator de amplificação, g , não é necessário escrever a integral (2.68) e obter expressões tais como (2.78). Um procedimento equivalente, porém mais simples, é substituir v_m^n no esquema por $g^n e^{im\theta}$ para cada valor de n e m . A equação resultante pode ser resolvida para o fator de amplificação.

Exemplo: Para ilustrar o procedimento mencionado acima, vamos considerar o esquema avançado no tempo e centrado no espaço,

$$\frac{v_m^{n+1} - v_m^n}{\Delta t} + a\frac{v_{m+1}^n - v_{m-1}^n}{2\Delta x} = 0, \quad (2.88)$$

para a equação diferencial parcial $u_t + au_x = 0$.

Substituindo v_m^n por $g^n e^{im\theta}$ na expressão (2.88), obtemos

$$\frac{g^{n+1}e^{im\theta} - g^n e^{im\theta}}{\Delta t} + a\frac{g^n e^{i(m+1)\theta} - g^n e^{i(m-1)\theta}}{2\Delta x} = 0, \quad (2.89)$$

ou seja,

$$g^n e^{im\theta} \left(\frac{g - 1}{\Delta t} + a\frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2\Delta x} \right) = 0, \quad (2.90)$$

que tem fator de amplificação

$$g = 1 - iR\sin\theta, \quad (2.91)$$

onde $R = a\Delta t/\Delta x$.

Se $\Delta t/\Delta x$ é constante, então g é independente de Δx e Δt e

$$|g(\theta)|^2 = 1 + R^2\sin^2\theta. \quad (2.92)$$

Como $|g(\theta)|$ é sempre maior que 1 para $\theta \neq 0$ ou π , temos pelo Teorema 2.7.1 que este esquema é instável.

2.8 Dispersão e dissipação para equações diferenciais parciais

Observamos que quando resolvemos a equação diferencial analiticamente, geralmente usamos séries ou transformadas de Fourier, que faz a solução depender de termos da forma

$$u(x, t) = \hat{u}e^{i(\omega t + \beta x)} = \hat{u}e^{i\omega t}e^{i\beta x}. \quad (2.93)$$

O termo dado em (2.93) é uma equação descrevendo uma onda no espaço e no tempo. Na expressão dada na equação (2.93), ω é a **frequência** da onda e β é o **número de onda** que é relacionado ao **comprimento de onda**, $\lambda_c = 2\pi/\beta$.

Se considerarmos que (2.93) é a solução de uma das equações diferenciais

$$u_t = \nu u_{xx}, \quad (2.94)$$

ou

$$u_t + au_x = 0, \quad (2.95)$$

vemos que existe uma relação entre ω e β . Escrevemos esta relação como $\omega = \omega(\beta)$ e a chamamos de **relação de dispersão**. Para a equação (2.94), temos que a relação de dispersão é $\omega = i\nu\beta^2$, e, portanto, a solução de (2.94) torna-se

$$u(x, t) = \hat{u}e^{-\nu\beta^2 t}e^{i\beta x}. \quad (2.96)$$

Observa-se que a onda não se move e decai com o tempo. Para o caso da onda unidirecional (2.95), temos que a relação de dispersão é $\omega = -a\beta$, e então a solução é

$$u(x, t) = \hat{u}e^{i\beta(x-at)}. \quad (2.97)$$

Neste caso, observamos que a onda se propaga com velocidade $-\omega/\beta$ e sua amplitude não decai. Em geral, este é o caso quando ω é real.

Iniciamos, enfatizando que o esquema será instável se alguns termos de Fourier crescem sem limite. Definimos **dissipação** de soluções de equações diferenciais quando os termos de Fourier não crescem com o tempo e ao menos um termo decai. Dizemos que a equação diferencial é **não dissipativa**, se os termos de Fourier nem crescem e nem decaem. Definimos **dispersão** da solução da equação diferencial parcial quando os termos de Fourier de diferentes números de onda, propagam com velocidades diferentes.

Mediante a discussão acima, vemos que a equação (2.94) é dissipativa (se $\nu > 0$, então todos os termos associados com todos os números de onda, $\beta \neq 0$ dissipam). Também observamos que a equação hiperbólica (2.95) nem é dispersiva e nem dissipativa.

2.9 Dispersão e dissipação de esquemas de diferenças finitas

Desejamos saber se os esquemas de diferenças finitas que usamos para aproximar as equações diferenciais parciais têm as mesmas propriedades de dissipatividade e

dispersividade que suas correspondentes equações diferenciais parciais.

Iniciamos, considerando o termo de Fourier discreto

$$u_k^n = \hat{u} e^{i(\omega n \Delta t + \beta k \Delta x)}. \quad (2.98)$$

Como no caso contínuo, temos a relação $\omega = \omega(\beta)$ quando substituímos (2.98) no esquema de diferenças finitas. A função $\omega = \omega(\beta)$ será chamada de **relação de dispersão discreta**.

Antes de continuarmos, observamos que $\omega = \omega(\beta)$ geralmente será complexa. Portanto, escrevemos $\omega = \alpha + ib$, com $\alpha = \alpha(\beta)$ e $b = b(\beta)$, e as chamamos de **relação de dispersão discreta real** e de **relação de dispersão discreta imaginária**, respectivamente. Se substituirmos $\omega = \alpha + ib$ em (2.98), temos

$$u_k^n = \hat{u} e^{i[\alpha n \Delta t + i b n \Delta t + \beta k \Delta x]} = \hat{u} (e^{-b \Delta t})^n e^{i\beta[k \Delta x - (\alpha/\beta)n \Delta t]}. \quad (2.99)$$

Portanto, vemos que

- se $b > 0$ para algum β , então o esquema de diferenças finitas é dissipativo.
- se $b < 0$ para algum β , então soluções para o esquema serão ilimitadas (e o esquema será instável).
- se $b = 0$ para todo β , o esquema será não dissipativo.

Além disso, temos

- se $\alpha = 0$ para todo β , então não se tem propagação de ondas.
- se $\alpha \neq 0$ para algum β , ocorre propagação de ondas com velocidade $-\alpha/\beta$.
- se $-\alpha/\beta$ é uma função não constante de β , então o esquema será dispersivo.

Exemplo: Análise da dispersão e a da dissipação do esquema

$$v_k^{n+1} = v_k^n - R(v_{k+1}^n - v_k^n), \quad (2.100)$$

onde $R = a\Delta t/\Delta x$, para a equação diferencial parcial $u_t + au_x = 0$ ($a < 0$).

Fazendo a análise de von Neumann, obtemos o fator de amplificação dado em (2.86). Portanto, considerando $a < 0$, temos que ter $|R| \leq 1$ para que o esquema (2.100) seja estável.

Para analisarmos a dissipação deste esquema, introduzimos (2.98) no esquema (2.100) e depois dividimos por $\hat{u} e^{i(\omega n \Delta t + \beta k \Delta x)}$, obtendo

$$\begin{aligned} e^{i\omega \Delta t} &= e^{i\alpha \Delta t} e^{-b \Delta t} \\ &= 1 - R\{e^{i\beta \Delta x} - 1\} \\ &= 1 + R - R \cos \beta \Delta x - iR \sin \beta \Delta x. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} e^{-b \Delta t} &= |1 + R - R \cos \beta \Delta x - iR \sin \beta \Delta x| \\ &= \sqrt{(1 + R)^2 - 2R(1 + R) \cos \beta \Delta x + R^2}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Observamos que para $\beta \neq 0$ há decaimento e para $\beta = 0$ não há crescimento nem decaimento. Portanto, o esquema é dissipativo. Agora, quando $R = -1$, temos $b = 0$ para todo β e o esquema é não dissipativo.

Para analisar a dispersão do esquema (2.100), dividimos a expressão (2.101) pela expressão (2.102), obtendo

$$e^{i\alpha\Delta t} = \frac{1 + R - R \cos \beta\Delta x - iR \sin \beta\Delta x}{|1 + R - R \cos \beta\Delta x - iR \sin \beta\Delta x|} \quad (2.103)$$

ou

$$\tan \alpha\Delta t = \frac{-R \sin \beta\Delta x}{1 + R - R \cos \beta\Delta x}. \quad (2.104)$$

Portanto a parte real da relação de dispersão pode ser escrita como

$$\alpha = -\frac{1}{\Delta t} \tan^{-1} \left\{ \frac{R \sin \beta\Delta x}{1 + R - R \cos \beta\Delta x} \right\}. \quad (2.105)$$

Como α é não linear em β , então o esquema (2.100) é dispersivo.

Expandingo α , dado em (2.105), em série de Taylor em torno de $\Delta x = 0$, obtemos

$$\alpha \approx -a\beta(1 - \beta^2\Delta x^2(1 + 3R + 2R^2)/6), \quad (2.106)$$

ou seja,

$$-\alpha/\beta \approx a - a\beta^2\Delta x^2(1 + 3R + 2R^2)/6. \quad (2.107)$$

Logo, para que a dispersão seja reduzida, devemos ter: $1 + 3R + 2R^2 = 0$, ou seja, $R = -1$ ou $R = -1/2$.

2.10 Problemas bidimensionais

Nesta seção nós vamos tratar de problemas bidimensionais. Para isto, vamos, inicialmente, considerar um problema específico.

Consideremos o seguinte problema parabólico:

$$u_t = \nu(u_{xx} + u_{yy}) + F(x, y, t), \quad (x, y) \in R, \quad t > 0 \quad (2.108)$$

$$u(x, y, t) = g(x, y, t), \quad (x, y) \in \partial R, \quad t > 0, \quad (2.109)$$

$$u(x, y, 0) = f(x, y), \quad (x, y) \in R \cup \partial R. \quad (2.110)$$

onde $R \subset \mathbb{R}^2$.

Consideraremos $R = [0, 1] \times [0, 1]$. Para podermos calcular uma aproximação para a solução do problema (2.108) – (2.110), consideramos a seguinte malha: $x_j = j\Delta x$, $j = 0, 1, \dots, M_x$, e $y_k = k\Delta y$, $k = 0, 1, \dots, M_y$ (veja Figura 2.4). A aproximação da função $u(x, y, t)$ no ponto da malha (x_j, y_k) no n -ésimo nível de tempo será denotada por $v_{j,k}^n$.

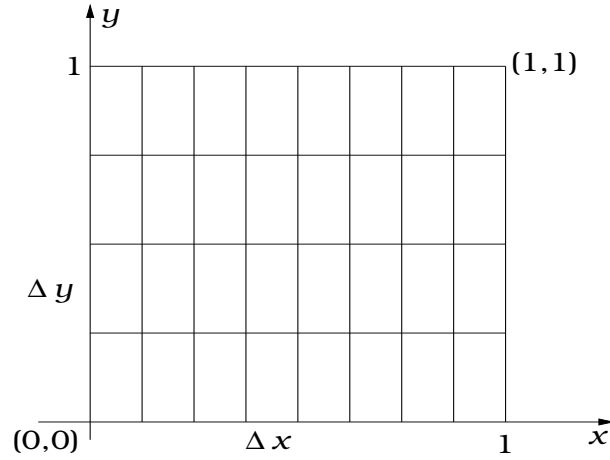


Figura 2.4: Malha bidimensional no domínio $[0,1] \times [0,1]$.

Usando o mesmo raciocínio para o caso da discretização unidimensional, equação (2.16), temos

$$\begin{aligned} (v_{xx})_{j,k}^n &= \frac{1}{\Delta x^2} [v_{j+1,k}^n - 2v_{j,k}^n + v_{j-1,k}^n] \\ &= \frac{1}{\Delta x^2} \delta_x^2 v_{j,k}^n, \end{aligned} \quad (2.111)$$

e

$$\begin{aligned} (v_{yy})_{j,k}^n &= \frac{1}{\Delta y^2} [v_{j,k+1}^n - 2v_{j,k}^n + v_{j,k-1}^n] \\ &= \frac{1}{\Delta y^2} \delta_y^2 v_{j,k}^n. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Então, podemos aproximar a equação diferencial (2.108) por

$$\frac{v_{j,k}^{n+1} - v_{j,k}^n}{\Delta t} = \frac{\nu}{\Delta x^2} \delta_x^2 v_{j,k}^n + \frac{\nu}{\Delta y^2} \delta_y^2 v_{j,k}^n + F_{j,k}^n, \quad (2.113)$$

a qual pode ser reescrita

$$v_{j,k}^{n+1} = v_{j,k}^n + (r_x \delta_x^2 + r_y \delta_y^2) v_{j,k}^n + \Delta t F_{j,k}^n, \quad (2.114)$$

onde $r_x = \nu \Delta t / \Delta x^2$ e $r_y = \nu \Delta t / \Delta y^2$.

A discretização das condições de fronteira (2.109) é

$$u_{0,k}^n = g(0, k\Delta y, n\Delta t), \quad k = 0, \dots, M_y, \quad n \geq 0 \quad (2.115)$$

$$u_{M_x,k}^n = g(1, k\Delta y, n\Delta t), \quad k = 0, \dots, M_y, \quad n \geq 0 \quad (2.116)$$

$$u_{j,0}^n = g(j\Delta x, 0, n\Delta t), \quad j = 0, \dots, M_x, \quad n \geq 0 \quad (2.117)$$

$$u_{j,M_y}^n = g(j\Delta x, 1, n\Delta t), \quad j = 0, \dots, M_x, \quad n \geq 0 \quad (2.118)$$

e da condição inicial (2.110) é

$$u_{j,k}^0 = f(j\Delta x, k\Delta y), \quad j = 0, \dots, M_x, \quad k = 0, \dots, M_y. \quad (2.119)$$

Vamos discutir a convergência, a consistência e a estabilidade para o esquema avançado no tempo e centrado no espaço (2.114). Então, iniciamos a nossa discussão com o fato que as definições de convergência (Definição 2.3.2), de consistência (Definição 2.4.2) e de estabilidade (Definição 2.5.1) são válidas para problemas bi e tri-dimensionais. Além disso, o Teorema de Lax e o Teorema de Equivalência de Lax também permanecem válidos. Portanto, a única diferença do caso unidimensional para o caso bi e tri-dimensional será a norma.

Iniciamos, discutindo a consistência, a qual não é difícil de ver que é semelhante ao caso unidimensional. É claro, que a expansão em série de Taylor agora é em duas e três dimensões. Portanto, usando a expansão em série de Taylor podemos determinar que o esquema (2.114) tem erro de truncamento local: $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta y^2)$.

Então nosso próximo passo seria abordar a convergência, mas isso seria extremamente difícil em duas e três dimensões se não usássemos o Teorema de Lax. Portanto, estudaremos a estabilidade do esquema (2.113).

Vamos usar a análise de von Neumann, isto é, vamos substituir $v_{j,k}^n = g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma}$ no esquema (2.113) e depois usar o Teorema 2.7.1 (estendendo-o para o caso bidimensional). Então, fazendo a devida substituição, temos

$$\begin{aligned} \frac{g^{n+1} e^{ij\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma} - g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma}}{\Delta t} = \\ \frac{\nu}{\Delta x^2} \left(g^n e^{i(j+1)\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma} - 2g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma} + g^n e^{i(j-1)\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma} \right) \\ + \frac{\nu}{\Delta y^2} \left(g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{i(k+1)\Delta y\gamma} - 2g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma} + g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{i(k-1)\Delta y\gamma} \right). \end{aligned} \quad (2.120)$$

Agora, dividindo ambos os lados da equação (2.120) por $g^n e^{ij\Delta x\xi} e^{ik\Delta y\gamma}$, obtemos

$$\frac{g-1}{\Delta t} = \frac{\nu}{\Delta x^2} (e^{i\Delta x\xi} - 2 + e^{-i\Delta x\xi}) + \frac{\nu}{\Delta y^2} (e^{i\Delta y\gamma} - 2 + e^{-i\Delta y\gamma}), \quad (2.121)$$

ou seja,

$$g = 1 - 4r_x \sin^2 \frac{\theta_x}{2} - 4r_y \sin^2 \frac{\theta_y}{2}, \quad (2.122)$$

onde $\theta_x = \Delta x\xi$ e $\theta_y = \Delta y\gamma$. Se r_x e r_y são constantes, então o fator de amplificação não depende de Δx , Δy e Δt , então pelo Teorema 2.7.1, temos

$$|g| \leq 1. \quad (2.123)$$

Portanto,

$$-1 \leq g \leq 1. \quad (2.124)$$

O lado direito da desigualdade (2.124) é sempre verdadeira para quaisquer θ_x , θ_y , r_x e r_y . Porém, o lado esquerdo só será válido, se

$$r_x \sin^2 \frac{\theta_x}{2} + r_y \sin^2 \frac{\theta_y}{2} \leq \frac{1}{2}. \quad (2.125)$$

Daí, vemos que, para quaisquer θ_x e θ_y , a desigualdade será válida, se

$$r_x + r_y \leq \frac{1}{2}, \quad (2.126)$$

a qual é a condição de estabilidade do esquema explícito (2.114). Observe que, se $\Delta x = \Delta y$, temos

$$r_x = \nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{4}. \quad (2.127)$$

Capítulo 3

Equações hiperbólicas

3.1 Introdução

Neste capítulo abordamos esquemas numéricos para resolver equações hiperbólicas. Como exemplo, utilizamos a equação hiperbólica mais simples, a saber, a equação da onda unidirecional (1.75), a qual, por comodidade, rescrevemos aqui

$$u_t + au_x = 0. \quad (3.1)$$

Vamos estudar o problema de valor inicial. Portanto, considere o dado inicial

$$u(x, 0) = u_0(x). \quad (3.2)$$

Por inspeção, i.e., calculando as derivadas observamos que a solução do problema (3.1) – (3.2) é

$$u(x, t) = u_0(x - at), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (3.3)$$

A fórmula (3.3) nos diz que a solução em qualquer tempo \tilde{t} é uma cópia da função original deslocada para direita (para esquerda), se $a > 0$ (se $a < 0$). As retas no plano xt onde $x - at$ é constante são chamadas de **características**. O parâmetro a tem dimensão de distância dividida por tempo e é chamado **velocidade de propagação ao longo da característica**. Portanto, a solução de (3.1) pode ser considerada como uma onda que se propaga com velocidade a e não muda a forma e nem perde amplitude (veja Figura 3.1). Em outras palavras, não há dissipação na solução da (3.1). Lembramos que dissipação está naturalmente contida nas equações parabólicas, o que ajuda na estabilidade dos esquemas numéricos para estas equações.

Observamos que (3.1) só faz sentido se u é diferenciável, porém a equação (3.3) não requer a diferenciabilidade de u_0 . Em geral, permite-se soluções descontínuas para problemas hiperbólicos, assunto que será mais detalhado no Capítulo 4.

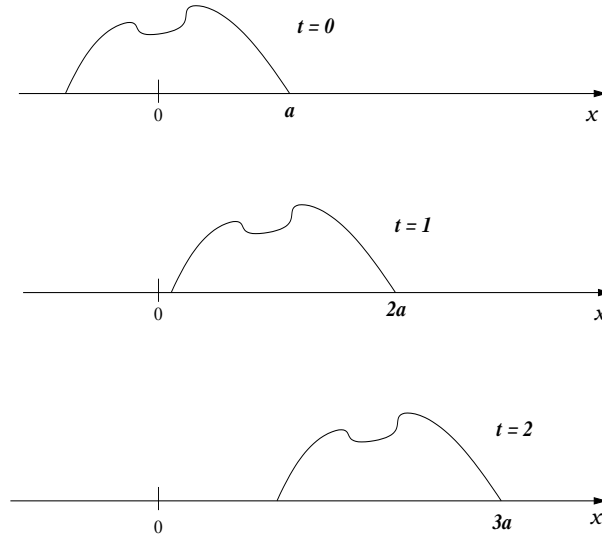


Figura 3.1: Soluções nos tempos $t = 0, 1$ e 2 s.

3.2 Métodos *upwind*

Alguns esquemas de diferenças finitas para a equação (3.1) foram visto no Capítulo 2. Nesta seção, vamos analisar dois esquemas, os quais são conhecidos como esquema *upwind* [2] (ou esquema unilateral [6]).

Vamos considerar primeiro o esquema avançado no tempo e avançado no espaço

$$v_k^{n+1} = v_k^n - R(v_{k+1}^n - v_k^n). \quad (3.4)$$

com $R = a\Delta t/\Delta x$ e $a < 0$. O esquema (3.4) é consistente de ordem $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x)$ o que pode ser mostrado facilmente usando a fórmula (2.17) e uma fórmula análoga para a derivada u_x . Quando a estabilidade do esquema foi analisada no Capítulo 2, obtemos o fator de amplificação (2.86)

$$g(\theta) = 1 + R - Re^{i\theta}. \quad (3.5)$$

Naquele exemplo analisamos o esquema (3.4) para $a > 0$ e concluímos que ele é instável. Agora, estamos analisando o mesmo esquema para $a < 0$. Usando o resultado obtido em (2.87), temos

$$|g(\theta)|^2 = 1 + 4R(1 + R) \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (3.6)$$

o qual deve ser menor ou igual a 1 para que o esquema seja estável. Isto é,

$$4R(1 + R) \leq 0. \quad (3.7)$$

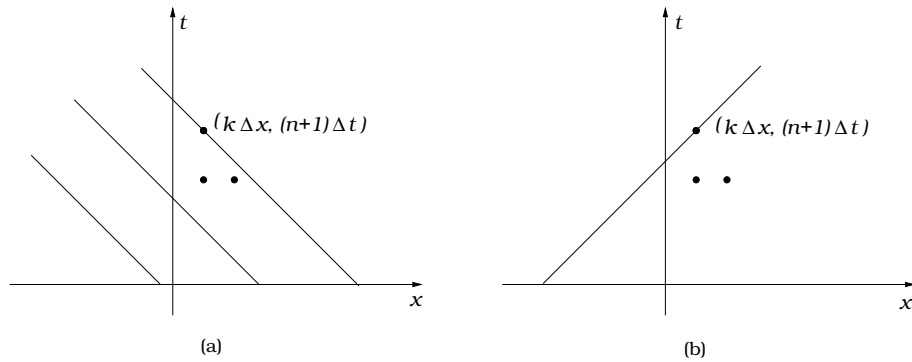


Figura 3.2: Características para equação diferencial (3.1) e base do esquema (3.4): (a) quando $a < 0$, (b) quando $a > 0$.

Esta desigualdade implica que

$$-1 \leq R \leq 0, \quad (3.8)$$

condição que só pode ser satisfeita para $a < 0$.

Não é difícil entender por que o esquema (3.4) é um bom esquema para a equação diferencial parcial (3.1) quando $a < 0$ e ruim quando $a > 0$. A Figura 3.2 mostra as características para equação (3.1), (a) quando $a < 0$ e (b) quando $a > 0$, junto com a base do esquema para calcular v no ponto $(k\Delta x, (n+1)\Delta t)$. Observe que a característica que passa por $(k\Delta x, (n+1)\Delta t)$ quando $a < 0$, sobe da direita para a esquerda indicando a propagação na direção negativa do eixo x , quando t cresce. O esquema (3.4) realiza os cálculos na mesma direção, transportando os valores em $(k\Delta x, n\Delta t)$ e $((k+1)\Delta x, n\Delta t)$ para $(k\Delta x, (n+1)\Delta t)$. O nome *upwind* é uma referência a esta característica do método, no qual os valores “transportados” para o próximo nível de tempo se adequam ao sentido da corrente. Por outro lado, se $a > 0$ (Figura 3.2 (b)) o esquema (3.4) usa pontos em direção contrária das características, que agora vão da esquerda para a direita.

O análogo para o esquema de diferenças finitas (3.4) para resolver a equação (3.1) com $a > 0$ é o esquema avançado no tempo e atrasado no espaço (2.74). Podemos ver que este esquema é consistente com a equação parcial (3.1), com ordem $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x)$, com o uso de expansão em série de Taylor. A análise de estabilidade foi feita no Capítulo 2, onde concluímos que o esquema é estável se $0 \leq R \leq 1$, i.e., ele é *upwind* para $a > 0$.

3.3 Método Lax-Wendroff

Estamos interessados em obter um esquema para a equação (3.1) de ordem superior aos esquemas *upwind*. Para isto, inicialmente, observamos de (3.1) que $u_t = -au_x$. Derivando novamente em t , obtemos

$$u_{tt} = (-au_x)_t = -a(u_t)_x = -a(-au_x)_x = a^2 u_{xx}. \quad (3.9)$$

Então, substituindo estas derivadas na série de Taylor

$$\begin{aligned}
u_k^{n+1} &= u_k^n + (u_t)_k^n \Delta t + (u_{tt})_k^n \frac{\Delta t^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
&= u_k^n + (-au_x)_k^n \Delta t + (a^2 u_{xx})_k^n \frac{\Delta t^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
&= u_k^n - a \left(\frac{u_{k+1}^n - u_{k-1}^n}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \right) \Delta t \\
&\quad + a^2 \left(\frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \right) \frac{\Delta t^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
&= u_k^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} \delta_0 u_k^n + \frac{a^2 \Delta t^2}{2\Delta x^2} \delta^2 u_k^n + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^3),
\end{aligned}$$

Assim, podemos aproximar a equação diferencial (3.1) pelo esquema de diferenças finitas

$$v_k^{n+1} = v_k^n - \frac{R}{2} \delta_0 v_k^n + \frac{R^2}{2} \delta^2 v_k^n. \quad (3.10)$$

O esquema (3.10) é chamado de **esquema de Lax-Wendroff**.

Usando a análise de von Neumann no esquema (3.10), obtemos que o fator de amplificação para o esquema (3.15) é

$$g(\theta) = 1 - \frac{R}{2}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) + \frac{R^2}{2}(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}) \quad (3.11)$$

$$= 1 - 2R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - iR \sin \theta. \quad (3.12)$$

Então, a magnitude de $g(\theta)$ é

$$|g(\theta)|^2 = \left(1 - 2R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^2 + \left(2R \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}\right)^2 \quad (3.13)$$

$$= 1 - 4R^2(1 - R^2) \sin^4 \frac{\theta}{2}. \quad (3.14)$$

Como o Teorema de Lax garante a convergência da solução numérica para a solução exata, se $|g(\theta)| \leq 1$, condição que será verificada se $1 - R^2 \geq 0$. Portanto, o esquema (3.10) será estável se, e somente se, $|R| \leq 1$.

3.4 Método Lax-Friedrichs

O método Lax-Friedrichs é um esquema de diferenças finitas para equação diferencial (3.1) que tem consistência condicionada. A discretização deste método é:

$$\frac{v_k^{n+1} - \frac{1}{2}(v_{k+1}^n + v_{k-1}^n)}{\Delta t} + a \frac{v_{k+1}^n - v_{k-1}^n}{2\Delta x} = 0. \quad (3.15)$$

Inicialmente, vamos mostrar que o esquema (3.15) é consistente com a equação diferencial parcial (3.1). Para isto, vamos usar a Definição 2.4.1. O operador associado ao esquema (3.15), aplicado numa função suave ϕ é

$$\mathcal{L}_k^n \phi = \frac{\phi_k^{n+1} - \frac{1}{2}(\phi_{k+1}^n + \phi_{k-1}^n)}{\Delta t} + a \frac{\phi_{k+1}^n + \phi_{k-1}^n}{2\Delta x}. \quad (3.16)$$

Usando as séries de Taylor,

$$\phi_{k\pm 1}^n = \phi_k^n \pm \Delta x \phi_x + \frac{1}{2} \Delta x^2 \phi_{xx} \pm \frac{1}{6} \Delta x^3 \phi_{xxx} + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (3.17)$$

onde as derivadas são calculadas no ponto (x_k, t_n) . Assim, temos

$$\frac{1}{2}(\phi_{k+1}^n + \phi_{k-1}^n) = \phi_k^n + \frac{1}{2} \Delta x^2 \phi_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (3.18)$$

e

$$\frac{\phi_{k+1}^n - \phi_{k-1}^n}{2\Delta x} = \phi_x + \frac{1}{6} \Delta x^2 \phi_{xxx} + \mathcal{O}(\Delta x^4). \quad (3.19)$$

Substituindo estas expressões em (3.16), obtemos

$$\mathcal{L}_k^n \phi = \phi_t + a \phi_x + \frac{1}{2} \Delta t \phi_{tt} - \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \phi_{xx} \quad (3.20)$$

$$+ \frac{1}{6} a \Delta x^2 \phi_{xxx} + \mathcal{O}(\Delta x^4 + \Delta x^4/\Delta t + \Delta t^2). \quad (3.21)$$

Logo,

$$\mathcal{L} \phi - \mathcal{L}_k^n \phi = \frac{1}{2} \Delta t \phi_{tt} - \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \phi_{xx} + \frac{1}{6} a \Delta x^2 \phi_{xxx} + \mathcal{O}(\Delta x^4 + \Delta x^4/\Delta t + \Delta t^2) \rightarrow 0, \quad (3.22)$$

quando $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ e $\Delta x^2/\Delta t \rightarrow 0$. Ou seja, esse esquema é condicionalmente consistente.

Para estudar a estabilidade, vamos usar a análise de von Neumann no esquema (3.15), rescrito como

$$v_k^{n+1} = \frac{1}{2}(v_{k+1}^n + v_{k-1}^n) + \frac{R}{2}(v_{k+1}^n - v_{k-1}^n). \quad (3.23)$$

Calculando o fator de amplificação do esquema (3.23), temos

$$g = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) + \frac{R}{2}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}). \quad (3.24)$$

Para que o esquema (3.23) seja estável, precisamos que $|g| \leq 1$ (ou $|g|^2 \leq 1$), i.e.,

$$|g|^2 = \cos^2 \theta + R^2 \sin^2 \theta \leq 1. \quad (3.25)$$

Conclui-se que $|R| \leq 1$ é a condição de estabilidade.

Então usando o Teorema de Lax, concluímos que a solução numérica obtida usando o esquema (3.23) converge para a solução da equação diferencial (3.1), se $|R| \leq 1$.

Para finalizar esta seção, resumimos na Tabela 3.1 as principais características de cada esquema de diferenças finitas apresentados aqui para a equação diferencial (3.1).

Nome	Esquema	Estabilidade	Ordem
Avançado no tempo Centrado Espaço	(2.88)	instável	$\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$
Avançado no tempo Avançado no Espaço	(3.4)	estável ($-1 \leq R \leq 0$)	$\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x)$
Avançado no tempo Atrasado no Espaço	(2.74)	estável ($0 \leq R \leq 1$)	$\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x)$
Lax-Wendroff	(3.10)	estável ($ R \leq 1$)	$\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$
Lax-Friedrichs	(3.15)	estável ($ R \leq 1$)	Condicionalmente consistente, $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2/\Delta t)$

Tabela 3.1: Características de esquemas de diferenças finitas para a equação da onda unidirecional: $u_t + au_x = 0$.

3.5 Equação da onda unidimensional

A equação hiperbólica estudada no Capítulo 2 e na seção anterior é de primeira ordem no tempo. Nesta seção vamos estudar uma equação hiperbólica de segunda ordem. A equação hiperbólica de segunda ordem mais simples é a equação da onda unidimensional (1.44), a qual rescrevemos aqui

$$u_{tt} = c^2 u_{xx}, \quad (3.26)$$

onde c é um número real não negativo. Equações do tipo (3.26), as quais são de segunda ordem no tempo, requerem duas funções como dados iniciais, tipicamente

$$u(x, 0) = f(x), \quad (3.27)$$

$$u_t(x, 0) = f_1(x). \quad (3.28)$$

Além disso, condições de fronteiras deverão ser dadas, por exemplo,

$$u(0, t) = h_1(t), \quad \text{e} \quad u(1, t) = h_2(t), \quad t \geq 0. \quad (3.29)$$

De forma análoga às análises das equações diferenciais de primeira ordem no tempo, usamos expansão em série de Taylor na variável t em torno do ponto (x_k, t_n) para calcular $u(x_k, t_{n+1})$ e $u(x_k, t_{n-1})$, e obtemos a derivada temporal de segunda ordem

$$u_{tt}(x_k, t_n) = \frac{u_k^{n+1} - 2u_k^n + u_k^{n-1}}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.30)$$

Usando (3.30) e (2.4), obtemos o esquema para a equação (3.26)

$$\frac{v_k^{n+1} - 2v_k^n + v_k^{n-1}}{\Delta t^2} = c^2 \frac{v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n}{\Delta x^2}, \quad (3.31)$$

o qual tem erro de truncamento local $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$, i.e., ele é de segunda ordem no tempo e no espaço. Rescrevendo o esquema (3.31), temos

$$v_k^{n+1} = (c\lambda)^2(v_{k+1}^n - v_{k-1}^n) + 2(1 - (c\lambda)^2)v_k^n - v_k^{n-1}, \quad (3.32)$$

onde $\lambda = \Delta t/\Delta x$. Para calcular v_k^{n+1} com o esquema (3.32) precisamos conhecer v_k^n e v_k^{n-1} , ou seja, é necessário conhecer dois níveis de tempo anteriores. Felizmente, para equação de segunda ordem no tempo temos duas condições iniciais. Discretizando as condições (3.27) e (3.28), temos

$$\begin{aligned} v_k^0 &= f(x_k), \\ v_t(x_k, 0) &= f_1(x_k) \approx \frac{v_k^1 - v_k^0}{\Delta t}. \end{aligned}$$

Ou seja, adotamos os seguintes valores para iniciar o procedimento

$$v_k^0 = f(x_k), \quad (3.33)$$

$$v_k^1 = v_k^0 + \Delta t f_1(x_k), \quad k = 0, \dots, m. \quad (3.34)$$

Assim, para implementar o esquema (3.32) usamos (3.33), (3.34) e as condições de fronteira (3.29).

As definições de convergência, consistência e ordem de precisão para esquemas de diferenças finitas apresentadas no Capítulo 2 permanecem sem modificações para equações de segunda ordem no tempo. A análise de von Neumann também permanece válida.

Vamos mostrar que o esquema (3.32) é condicionalmente estável. Para isto, usamos a análise de von Neumann, de forma similar à do Capítulo 2. O fator de ampliação é solução da equação quadrática

$$g^2 - 2g + 1 = -4c^2\lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} g. \quad (3.35)$$

Portanto,

$$g^2 + 2 \left(2c^2\lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - 1 \right) g + 1 = 0. \quad (3.36)$$

Observe que a equação (3.36) é do tipo

$$g^2 + 2bg + 1 = 0, \quad (3.37)$$

a qual tem solução

$$g = -b \pm \sqrt{b^2 - 1}, \quad \text{se } |b| \geq 1, \quad (3.38)$$

ou

$$g = -b \pm i\sqrt{1 - b^2}, \quad \text{se } |b| < 1. \quad (3.39)$$

Se $|b| \leq 1$, então $|g|^2 = b^2 + 1 - b^2 = 1$. Portanto, o esquema é estável. Por outro lado, se $|b| > 1$, temos $|g|^2 = b^2 + b^2 - 1 \mp 2b\sqrt{b^2 - 1}$. Então pelo menos uma das soluções da equação (3.37) terá um valor absoluto maior que 1. Portanto, o

esquema não será estável. Mediante esta análise, vemos que o esquema (3.31) será estável se

$$|b| = \left| 2c^2 \lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - 1 \right| \leq 1, \quad (3.40)$$

ou seja,

$$-1 \leq 2c^2 \lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - 1 \leq 1. \quad (3.41)$$

Daí, concluímos que o esquema (3.31) será estável se $c\lambda \leq 1$, $\lambda = \Delta t / \Delta x$.

Agora, vamos apresentar outro esquema para a equação da onda (3.26), o qual tem erro de truncamento local $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^4)$,

$$\frac{v_k^{n+1} - 2v_k^n + v_k^{n-1}}{\Delta t^2} = c^2 \frac{-v_{k+2}^n + 16v_{k+1}^n - 30v_k^n + 16v_{k-1}^n - v_{k-2}^n}{\Delta x^2}. \quad (3.42)$$

Para ver que o esquema (3.42) é de quarta ordem no espaço basta usar as expansões em série de Taylor na variável x em torno do ponto (x_k, t_n) de $v(x_{k+2}, t_n)$, $v(x_{k-2}, t_n)$, $v(x_{k+1}, t_n)$ e $v(x_{k-1}, t_n)$ e alguns cálculos algébricos.

A equação para os fatores de amplificação para o esquema (3.42) é

$$g^2 - 2g + 1 = c^2 \lambda^2 \left(\frac{-e^{2i\theta} + 16e^{i\theta} - 30 + 16e^{-i\theta} - e^{-2i\theta}}{12} \right) g \quad (3.43)$$

$$= c^2 \lambda^2 \left(\frac{-2 \cos 2\theta + 32 \cos \theta - 30}{12} \right) g. \quad (3.44)$$

Após algumas manipulações das fórmulas trigonométricas obtemos: $-2 \cos 2\theta + 32 \cos \theta - 30 = -16 \sin^2 \frac{\theta}{2} (3 + \sin^2 \frac{\theta}{2})$. Rescrevendo a equação (3.44), temos

$$g^2 + \left[\frac{4}{3} c^2 \lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \left(3 + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) - 2 \right] g + 1 = 0, \quad (3.45)$$

que é uma equação do tipo (3.37) com $b = \frac{2}{3} c^2 \lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} (3 + \sin^2 \frac{\theta}{2}) - 1$. Portanto, o esquema será estável se

$$\left| \frac{2}{3} c^2 \lambda^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \left(3 + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) - 1 \right| \leq 1. \quad (3.46)$$

Daí, tiramos que o esquema (3.42) será estável, se

$$c\lambda \leq \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (3.47)$$

Observe que o esquema (3.42) requer o uso de $v_{k\pm 2}^n$, o que significa que vamos precisar de pontos fictícios na malha espacial.

Para finalizar esta seção vamos fazer a análise de von Neumann para mais um esquema de diferenças finitas para equação (3.26). Para derivá-lo, lembramos que:

$u_{tt} = c^2 u_{xx}$, e, portanto, $u_{tttx} = c^2 u_{xxxx}$. Substituindo estas expressões na equação (2.4), obtemos

$$\frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{\Delta x^2} = \frac{1}{c^2} u_{tt}(x_k, t_n) + \frac{\Delta x^2}{12c^2} u_{xxtt} + \mathcal{O}(\Delta x^4). \quad (3.48)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{\Delta x^2} &= \frac{1}{c^2} \frac{u_k^{n+1} - 2u_k^n + u_k^{n-1}}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &+ \frac{\Delta x^2}{12c^2} \left(\frac{\delta_x^2 \delta_t^2 u_k^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right) + \mathcal{O}(\Delta x^4), \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{\Delta x^2} &= \frac{1}{c^2} \frac{u_k^{n+1} - 2u_k^n + u_k^{n-1}}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &+ \frac{1}{12c^2 \Delta t^2} (u_{k+1}^{n+1} - 2u_{k+1}^n + u_{k+1}^{n-1} + u_k^{n+1} - 2u_k^n + u_k^{n-1} \\ &+ u_{k-1}^{n+1} - 2u_{k-1}^n + u_{k-1}^{n-1}) + \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^4). \end{aligned}$$

Assim, temos o esquema implícito de segunda ordem no tempo e quarta ordem no espaço

$$\begin{aligned} v_{k+1}^{n+1} + 10v_k^{n+1} + v_{k-1}^{n+1} - 2(v_{k+1}^n + 10v_k^n + v_{k-1}^n) + v_{k+1}^{n-1} + 10v_k^{n-1} + v_{k-1}^{n-1} \\ = 12c^2 \lambda^2 (v_{k+1}^n - 2v_k^n + v_{k-1}^n), \end{aligned} \quad (3.49)$$

para a equação (3.26).

Embora este esquema requeira a solução de um sistema tridiagonal em cada passo de tempo, ele tem a vantagem sobre o esquema (3.42) de não usar $v_{k\pm 2}^n$ para calcular v_k^{n+1} .

Vejamos que este esquema, embora implícito, não é incondicionalmente estável. O fator de amplificação para o esquema (3.49) é obtido através

$$g^2(e^{i\theta} + 10 + e^{-i\theta}) - 2g(e^{i\theta} + 10 + e^{-i\theta}) + (e^{i\theta} + 10 + e^{-i\theta}) = 12c^2 \lambda^2 (e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}), \quad (3.50)$$

ou seja,

$$g^2(2 \cos \theta + 10) - 2g(2 \cos \theta + 10) + (2 \cos \theta + 10) = 12c^2 \lambda^2 (2 \cos \theta - 2)g. \quad (3.51)$$

A equação (3.51) pode ser rescrita

$$g^2 + 2 \left[\frac{-2 \cos \theta - 10 - 6c^2 \lambda^2 (2 \cos \theta - 2)}{2 \cos \theta + 10} \right] g + 1 = 0. \quad (3.52)$$

Observamos que a equação (3.52) é do mesmo tipo da equação (3.37). Portanto, para que o esquema seja estável, temos que ter

$$\left| \frac{-2 \cos \theta - 10 - 6c^2 \lambda^2 (2 \cos \theta - 2)}{2 \cos \theta + 10} \right| \leq 1. \quad (3.53)$$

Isto nos fornece a condição

$$c\lambda \leq \sqrt{\frac{2}{3}}. \quad (3.54)$$

Não é difícil satisfazer esta restrição para que o esquema seja estável, por que ela nos diz que o esquema será estável desde que Δt seja pequeno quando comparado com Δx (lembre-se: $\lambda = \Delta t/\Delta x$).

Capítulo 4

Leis de conservação

4.1 Introdução

Neste capítulo vamos trabalhar com leis de conservação não linear, as equações diferenciais parciais do tipo:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f(u)) &= 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x),\end{aligned}\tag{4.1}$$

na qual a **função fluxo**, $f(u)$, é, em geral, uma função não linear. Na Seção 1.5 destas notas vimos que estas equações são modelos matemáticos de processos que envolvam transporte, como, por exemplo, o tráfego em rodovias.

As leis de conservação formam um capítulo à parte no estudo das equações diferenciais parciais. Nas últimas décadas, muitos matemáticos têm se dedicado à tarefa de melhor entender estas equações diferenciais que admitem soluções com descontinuidades. A questão central é conciliar dois conceitos matemáticos contraditórios: equações diferenciais, que pressupõem continuidade das funções que estão sendo derivadas, e suas soluções descontínuas, que as aplicações práticas exigem.

O espaço do qual dispomos nesta notas não permite abordar o assunto com todo o formalismo matemático. Entretanto, vamos apresentar algumas idéias que julgamos úteis aos leitores interessados em resolver problemas deste tipo sem necessariamente se aprofundar muito na matemática. Para maiores detalhes sugerimos as referências [2], que pode parecer difícil mas é básica no assunto, e [7], um livro mais extenso e detalhado.

Neste capítulo apresentamos inicialmente os conceitos básicos da teoria das leis de conservação, que são também básicos nos métodos numéricos para este tipo de problema. Definimos um conceito mais amplo de solução chamada solução fraca, condições que as soluções devem satisfazer, que são as condições de Rankine-Hugoniot e de entropia. Também introduzimos os problemas de Riemann para então apresentar dois métodos para resolver estes problemas: os métodos Godunov e TVD (*total variation diminishing*).

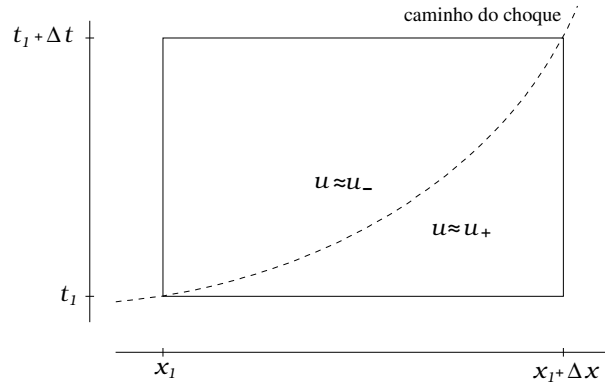


Figura 4.1: Região de integração para calcular a velocidade do choque.

4.2 Solução fraca

Uma função descontínua não pode ser solução no sentido clássico de equações diferenciais. A matemática contorna esta dificuldade usando formulações integrais da equação diferencial. Multiplicando $u_t + f(u)_x = 0$ por uma função suave com suporte compacto, $\phi(x, t)$, integrando o resultado na região $(-\infty, \infty) \times (0, \infty)$, obtemos

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [u_t + f(u)_x] \phi \, dx \, dt = 0, \quad (4.2)$$

e passando a derivada para as função suave,

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [u \phi_t + f(u) \phi_x] \, dx \, dt + \int_{-\infty}^\infty u(x, 0) \phi(x, 0) \, dx = 0, \quad (4.3)$$

que abre espaço para uma definição mais geral de solução.

Dizemos que $u(x, t)$ é **solução fraca** da lei de conservação definida em (4.1), se ela satisfaz a equação (4.2) ou (4.3), qualquer que seja $\phi(x, t)$ com derivadas de primeira ordem integráveis e suporte compacto.

4.3 Condição de salto, Rankine-Hugoniot

Vamos mostrar que descontinuidades que podem ocorrer em soluções fracas de leis de conservação devem satisfazer condições pré-estabelecidas.

Tomemos um pequeno retângulo como o mostrado na Figura 4.1, na qual $x_2 = x_1 + \Delta x$ e $t_2 = t_1 + \Delta t$. Integrando $u_t + f(u)_x = 0$ neste retângulo, temos:

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} (u_t + f(u)_x) \, dx \, dt &= \int_{x_1}^{x_2} u(x, t_2) \, dx - \int_{x_1}^{x_2} u(x, t_1) \, dx \\ &+ \int_{t_1}^{t_2} f(u(x_2, t)) \, dt - \int_{t_1}^{t_2} f(u(x_1, t)) \, dt = 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Admitindo que a descontinuidade de $u(x, t)$ se dá ao longo de uma trajetória como a representada na Figura 4.1 pela linha tracejada, e que $u(x, t) = u_+$ à direita desta trajetória e $u(x, t) = u_-$ à sua esquerda, a integral acima nos fornece:

$$u_- \Delta x - u_+ \Delta x + f(u_+) \Delta t - f(u_-) \Delta t = 0, \quad (4.5)$$

ou seja, usando também a notação de salto de uma função:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{f(u_+) - f(u_-)}{u_+ - u_-} = \frac{[f]}{[u]}. \quad (4.6)$$

Mostramos assim que a velocidade s com a qual a descontinuidade avança em x e t , i.e. propaga, deve satisfazer a **condição de salto**, ou **condição de Rankine-Hugoniot**:

$$s = \frac{f(u_+) - f(u_-)}{u_+ - u_-} = \frac{[f]}{[u]}, \quad (4.7)$$

que é chamada de **velocidade do choque**, uma vez que descontinuidades e choque têm o mesmo significado neste assunto.

4.4 Não unicidade de solução: Condição de entropia

Para contornar o problema matemático de solução descontínua em equações diferenciais, ampliamos o conceito de solução e criamos uma outra dificuldade, a existência de mais de uma solução fraca. Como os fenômenos naturais, em geral, têm apenas uma solução, devemos estabelecer critérios de escolha da solução fisicamente relevante. É possível perturbar a equação introduzindo um termo difusivo na lei de conservação:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (f(u)) = \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (4.8)$$

que, com as condições adicionais coerentes, em geral tem uma única solução $u_\varepsilon(x, t)$. Podemos então definir a solução da lei de conservação tomando o limite, $u(x, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon(x, t)$. Embora este raciocínio seja elegante, é pouco objetivo se queremos cálculos efetivos. Felizmente, é possível estabelecer relações matemáticas que viabilizem a utilização prática deste procedimento para escolha da solução fisicamente correta. Estas relações são conhecidas como **Condições de Entropia** e as versões mais usadas são as seguintes:

Versão I: Uma descontinuidade que se propaga com velocidade s , dada por (4.7), satisfaz a condição de entropia, se

$$f'(u_-) > s > f'(u_+). \quad (4.9)$$

Versão II (Oleinik): $u(x, t)$ é uma solução de entropia, se todas as descontinuidades calculadas por (4.7) satisfazem a seguinte propriedade:

$$\frac{f(u) - f(u_-)}{u - u_-} \geq s \geq \frac{f(u) - f(u_+)}{u - u_+}, \quad (4.10)$$

qualquer que seja u entre u_- e u_+ .

4.5 Problema de Riemann centrado na origem

A lei de conservação que tem como condição inicial uma função constante por partes com uma única descontinuidade,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f(u)) &= 0 \\ u(x, 0) &= \begin{cases} u_-, & x < 0 \\ u_+, & x > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.11)$$

é conhecido como **Problema de Riemann** centrado na origem. O problema de Riemann é bem estudado na matemática, principalmente por fornecer uma base teórica para as leis de conservação, tanto do ponto de vista analítico quanto numérico. Veremos alguns detalhes a seguir.

Observe que ao longo das retas $\xi = x/t$, admitindo suavidade de $u(\xi)$, temos:

$$u_t = \frac{du}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\frac{x}{t^2} u'(\xi) \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial x}(f(u(\xi))) = f'(u) \frac{du}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{t} f'(u) u'(\xi),$$

e portanto,

$$u_t + (f(u))_x = \frac{1}{t} u'(\xi) (-\xi + f'(u)) = 0. \quad (4.12)$$

De (4.12) concluímos que: se $u(\xi)$ é solução suave, então deve satisfazer a pelo menos uma das duas alternativas: (i) $u = \text{constante}$ ou (ii) $f'(u(\xi)) = \xi$. As soluções do segundo tipo são chamadas **rarefações** e podem ser obtidas se soubermos calcular a inversa de $f'(u)$.

Em resumo, a condição de entropia, (4.9), e a condição (4.12) nos fornecem a pista para achar a solução do problema de Riemann (4.12), pelo menos no caso de $f(u)$ ser uma função convexa:

1. Uma descontinuidade, ou **choque**, cuja velocidade é calculada por (4.7) deve satisfazer a (4.8), o que só é possível se $f'(u_-) > f'(u_+)$. Neste caso a solução de (4.12) é:

$$u(x, t) = \begin{cases} u_-, & x < st \\ u_+, & x > st \end{cases}. \quad (4.13)$$

2. Se $f'(u_-) < f'(u_+)$, choques não podem ocorrer. Podemos pensar em soluções suaves, usando as **rarefações**. Assim, o problema de Riemann (4.12) têm solução suave:

$$u(x, t) = \begin{cases} u_-, & x < f'(u_-)t \\ w(x/t), & f'(u_-)t \leq x \leq f'(u_+)t \\ u_+, & x > f'(u_+)t \end{cases}, \quad (4.14)$$

onde $w(\xi)$ satisfaz $f'(w(\xi)) = \xi$, i.e., w é a função inversa de f' .

4.6 O método de Godunov

Em 1959, Godunov propôs seu método cuja idéia básica é a interpretação da solução discretizada obtida no nível de tempo t_n como a condição inicial para a obtenção da solução no nível t_{n+1} através de vários problemas de Riemann.

Detalhando mais, usamos a solução numérica num nível de tempo t_n , $v^n = \{v_j^n\}$, para construir uma função constante por partes, $\tilde{v}(x, t_n)$, definida por:

$$\tilde{v}(x, t_n) = v_j^n, \quad x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}. \quad (4.15)$$

Esta função constante por partes é usada como condição inicial para resolver analiticamente a lei de conservação no intervalo $t_n \leq t \leq t_{n+1}$. Observe que $\tilde{v}(x, t_n)$ define um problema de Riemann local em $x_{j+1/2}$.

Integrando a lei de conservação no retângulo $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \times [t_n, t_{n+1}]$, de forma análoga ao que foi feito para estabelecer a condição do salto, temos

$$\begin{aligned} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{v}(x, t_{n+1}) dx &= \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{v}(x, t_n) dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{v}(x_{j-1/2}, t)) dt \\ &\quad - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{v}(x_{j+1/2}, t)) dt. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Podemos definir a solução aproximada no nível t_{n+1} , $v^{n+1} = \{v_j^{n+1}\}$, tomando as médias da solução exata:

$$v_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{v}(x, t_{n+1}) dx \quad (4.17)$$

e a função fluxo numérico, F , também tomando a média:

$$F(v_j^n, v_{j+1}^n) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{v}^n(x_{j+1/2}, t)) dt. \quad (4.18)$$

Usando (4.16) dividida por Δx e lembrando que $\tilde{v}(x, t_n) = v_j^n$, $x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}$, temos

$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F(v_j^n, v_{j+1}^n) - F(v_{j-1}^n, v_j^n)]. \quad (4.19)$$

Observe que como método de Godunov é obtido diretamente da lei de conservação, temos uma discretização consistente com a lei de conservação. Em outras palavras não estamos discretizando a **forma não conservativa** da lei de conservação:

$$u_t + f'(u)u_x = 0. \quad (4.20)$$

Como se vê, a forma não conservativa da lei de conservação é obtida aplicando a regra da cadeia no termo $(f(u))_x$.

Veremos a seguir que embora a discretização (4.19) origine da forma conservativa, a expressão (4.20) será útil nos cálculos efetivos da solução pois ela gera a

conexão com o método *upwind* no qual o sentido do fluxo define os pontos usados na discretização. No caso de lei de conservação o sentido do fluxo é definido pelo sinal de $f'(u)$.

O cálculo da integral (4.18) é fácil por que $\tilde{v}(x, t_n)$ é uma função contínua por partes, a condição inicial para resolver o problema em $[t_n, t_{n+1}]$. Temos então, localmente, um problema de Riemann centrado em $x_{j+1/2}$ cuja solução é auto-similar, isto é, constante ao longo das retas $(x - x_{j+1/2})/t = \text{constante}$. O valor constante de $\tilde{v}(x, t_n)$ ao longo da reta $x = x_{j+1/2}$ depende dos dados que definem o problema de Riemann, que neste caso são v_j^n e v_{j+1}^n , fornecidos pela condição inicial, à esquerda e à direita de $x_{j+1/2}$, respectivamente. Assim, se denotamos este valor da solução constante por $v^*(v_j^n, v_{j+1}^n)$, o fluxo numérico definido pela integral (4.18) será:

$$F(v_j^n, v_{j+1}^n) = f(v^*(v_j^n, v_{j+1}^n)). \quad (4.21)$$

Na notação que estamos empregando, o esquema (4.19) do método Godunov se escreve na forma:

$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [f(v^*(v_j^n, v_{j+1}^n)) - f(v^*(v_{j-1}^n, v_j^n))]. \quad (4.22)$$

Nos resta decidir como escolher uma aproximação para $v^*(v_j^n, v_{j+1}^n)$. Neste estágio vamos obter um método que generaliza o *upwind*, o método explícito que, como vimos no Capítulo 3, é condicionalmente estável para a equação hiperbólica de primeira ordem,

$$u_t + au_x = 0. \quad (4.23)$$

No método *upwind* as aproximações são calculadas por:

$$\begin{cases} v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (v_j^n - v_{j-1}^n), & a > 0 \\ v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (v_{j+1}^n - v_j^n), & a < 0 \end{cases}. \quad (4.24)$$

Comparando (4.20) com (4.23) e as definições dos respectivos fluxo numéricos em (4.19) e (4.24), obtemos $v^*(v_j^n, v_{j+1}^n)$ em duas das quatro possibilidades dos sinais de $f'(u_-)$ e $f'(u_+)$:

I. Se $f'(u_-), f'(u_+) \geq 0 \Rightarrow v^* = u_-$;

II. Se $f'(u_-), f'(u_+) \leq 0 \Rightarrow v^* = u_+$.

Uma terceira possibilidade seria $f'(u_-) \geq 0 \geq f'(u_+)$. Neste caso, como a condição de entropia (4.9) é satisfeita por soluções com choque de velocidades calculadas pela condição de Rankine-Hugoniot (4.7), podemos definir a solução de acordo com o sinal desta velocidade, ainda seguindo a idéia do método *upwind*, ou seja:

III. Se $f'(u_-) \geq 0 \geq f'(u_+) \Rightarrow \begin{cases} v^* = u_-, & \text{se } [f]/[u] > 0 \\ v^* = u_+, & \text{se } [f]/[u] < 0 \end{cases}.$

Finalmente resta o caso $f'(u_-) < 0 < f'(u_+)$, que não permite choques entrópicos. Este caso é conhecido como rarefação transônica, numa referência a choques que em certas circunstâncias ocorrem na propagação do som. Neste caso a solução é suave e escolhemos como aproximação para $v^*(v_j^n, v_{j+1}^n)$ o valor intermediário u_s tal que $f'(u_s) = 0$, no qual a característica tem velocidade nula. Obtemos assim a quarta, e última, possibilidade:

IV. Se $f'(u_-) < 0 < f'(u_+) \Rightarrow v^* = u_s$, $f'(u_s) = 0$, i.e., $u_s = w(0)$.

Um bom exercício é verificar que o fluxo numérico do método Godunov no caso em que $f(u)$ é uma função convexa pode ser escrito como a equação (13.24) do livro de LeVeque [2]:

$$F(u_-, u_+) = \begin{cases} \min_{u_- \leq u \leq u_+} f(u), & \text{se } u_- \leq u_+ \\ \max_{u_- \leq u \leq u_+} f(u), & \text{se } u_- > u_+ \end{cases}. \quad (4.25)$$

Estudos posteriores a Godunov mostraram que estas expressões são também válidas no caso mais geral, isto é, para funções $f(u)$ não convexas.

4.7 Os métodos de alta resolução: TVD

Os exemplos apresentados no Capítulo 2 indicam uma fato que pode ser demonstrado matematicamente: apenas os métodos numéricos com aproximação de primeira ordem reproduzem, sem oscilações, as descontinuidades que ocorrem em soluções de leis de conservação não linear. Isto se justifica pelo fato do erro de truncamento dos métodos de primeira ordem depender do espaçamento da malha e da derivada de segunda ordem da solução. Assim, o erro de truncamento do método de primeira ordem é semelhante ao termo difusivo introduzido no critério de entropia, equação (4.8), usado na escolha de uma solução fisicamente correta.

Uma alternativa para melhorar a resolução das aproximações seria refinar a malha, o que pode ser excessivamente caro, principalmente no problema tridimensional e nos métodos implícitos que demandam resolução de sistemas de grande porte.

Em geral, as descontinuidades ocorrem em regiões isoladas do domínio, e, portanto, só nestas regiões isoladas deveríamos adotar métodos de primeira ordem. Isto nos conduz a possibilidade de adotar métodos de ordem superior em regiões de suavidade da solução deixando os de primeira ordem para as regiões, isoladas, nas quais há descontinuidade. Este é o princípio dos **métodos de alta resolução**, que tem sido estudados a partir da década 70.

Nesta notas apresentaremos apenas o método TVD, um exemplo ilustrativo da idéia geral destes métodos adaptativos para leis de conservação,

$$u_t + (f(u))_x = 0. \quad (4.26)$$

Maiores detalhes sobre o assunto podem ser encontrados, por exemplo, no livro de LeVeque e nas suas referências sobre o assunto.

Na forma geral dos métodos TVD para (4.26), adotamos a expressão do método Godunov, (4.19) em uma forma mais geral,

$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F(\vec{v}^n, j) - F(\vec{v}^n, j-1)], \quad (4.27)$$

na qual, como anteriormente, v_j^n representa a aproximação fornecida pelo método, no ponto (x_j, t_n) , i.e., $v_j^n \approx u(x_j, t_n)$, e F representa o fluxo numérico, a ser definido pelo método. Em geral, F pode depender de um número arbitrário de níveis anteriores, p , e posteriores, q , a j , simbolizado pela notação

$$F(\vec{v}^n, j) = F(\vec{v}_{j-p}^n, \vec{v}_{j-p+1}^n, \dots, \vec{v}_{j+q}^n). \quad (4.28)$$

Na seção anterior vimos que no método *upwind* para resolver (4.26), o fluxo numérico é:

$$\begin{cases} F_L(\vec{v}^n, j) = F(v_j^n, v_{j+1}^n) = f(v_j^n), & \text{se } f'(u) > 0 \\ F_L(\vec{v}^n, j) = F(v_j^n, v_{j+1}^n) = f(v_{j+1}^n), & \text{se } f'(u) < 0 \end{cases}. \quad (4.29)$$

Como o método *upwind* tem erro de truncamento $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x)$, usamos o subscrito L em F_L , para associar este fluxo ao de baixa resolução (*Low*) usado no método TVD.

Para usar o método Lax-Wendroff na discretização de (4.26) adaptamos (3.10) para obter o seguinte fluxo numérico:

$$F_H(\vec{v}^n, j) = F(v_j^n, v_{j+1}^n) = \frac{1}{2} [f(v_{j+1}^n) + f(v_j^n)] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)]. \quad (4.30)$$

Como foi mostrado na Seção 3.1.2, o método Lax-Wendroff tem erro de truncamento $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ e por isso usamos o subscrito H para definir (4.30) como fluxo de alta (*High*) resolução.

O objetivo do método é usar F_L em regiões com descontinuidade e F_H nas regiões de suavidade da solução. Para atingir este objetivo usamos funções, denominadas **limitadores de fluxo**, para “interpolar” convenientemente os fluxos de baixa ordem e alta ordem. Nesta linha de raciocínio definimos o fluxo numérico do método TVD por:

$$F(\vec{v}^n, j) = F_L(\vec{v}^n, j) + \Phi(\vec{v}^n, j) [F_H(\vec{v}^n, j) - F_L(\vec{v}^n, j)], \quad (4.31)$$

na qual $\Phi(\vec{v}^n, j)$, o limitador de fluxo, é tal que: se $\Phi \equiv 0$, então $F = F_L$, o fluxo de primeira ordem, e se $\Phi \equiv 1$, então $F = F_H$, o fluxo de alta ordem.

Vamos detalhar do caso $f'(u) > 0$, o que pode ser repetido para o caso $f'(u) < 0$ com as devidas adaptações.

O último termo de (4.31), com o método *upwind* (para $f'(u) > 0$) e Lax-Wendroff é:

$$\begin{aligned} F_H - F_L &= \frac{1}{2} (f(v_{j+1}^n) + f(v_j^n)) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)) - f(v_j^n) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) (f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Desta forma, substituindo (4.32) em (4.31) obtemos o fluxo, com limitador Φ :

$$F(\bar{v}^n, j) = F(v_j^n, v_{j+1}^n) = f(v_j^n) + \frac{\Phi(\bar{v}^n, j)}{2} \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) (f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)). \quad (4.33)$$

Como o objetivo do limitador de fluxo é usar o fluxo de baixa ordem apenas em regiões com descontinuidades, é necessário detectar estas regiões. Uma das formas usadas para testar a suavidade de funções é comparar valores de suas derivadas em pontos próximos. Trabalhando com discretizações, isto pode ser efetuada calculando valores de derivadas discretizadas em pontos consecutivos, isto é, através da relação

$$\theta_j^n = \frac{v_j^n - v_{j-1}^n}{v_{j+1}^n - v_j^n + \varepsilon}, \quad (4.34)$$

na qual acrescentamos ε ao denominador para evitar divisões por zero. Observando (4.34), vemos que nas regiões de suavidade, nas quais derivadas não devem apresentar variações bruscas, $\theta_j^n \approx 1$, ao passo que $|\theta_j^n| \gg 1$ ou $|\theta_j^n| \ll 1$ indica alguma singularidade de $u(x, t)$ em $x = x_j$. Assim, podemos usar o parâmetro (4.34) na definição de um limitador de fluxo, $\Phi(\bar{v}^n, j) = \phi(\theta_j^n)$, desde que $\phi(0) = 0$, o que significa $F = F_L$, e $\phi(1) = 1$ para permitir o fluxo de alta ordem, $F = F_H$.

Vários autores estudaram expressões para os limitadores de fluxo a partir da década de 70, o que pode ser conferido na referência [2]. Determinou-se que a função $\phi(\theta)$ possui as melhores propriedades quando é dada por uma combinação convexa entre $\phi(\theta) = 1$ (que fornece o método de Lax-Wendroff) e $\phi(\theta) = \theta$ (que fornece o método chamado *beam-warning*). Além disso, ϕ deve satisfazer a condição $|\phi(\theta_j^n)/\theta_j^n - \phi(\theta_{j-1}^n)| \leq 2$, para que o método seja TVD. Citamos dois limitadores de fluxo mais populares: Roe (1985) sugere

$$\phi(\theta) = \max\{0, \min(1, 2\theta), \min(\theta, 2)\} \quad (4.35)$$

e VanLeer (1974), propõe

$$\phi(\theta) = \frac{|\theta| + \theta}{1 + |\theta|}. \quad (4.36)$$

Escolhido o limitador de fluxo, usamos (4.33) em (4.27), estabelecendo a expressão final do esquema TVD para o caso $f'(u) > 0$. Com a devida adaptação do fluxo, usando a idéia do esquema *upwind*, obtemos a correspondente expressão para o caso $f'(u) < 0$. Então, o esquema TVD consiste de:

Caso I: $f'(u) > 0$

$$\text{Se } \frac{f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)}{v_{j+1}^n - v_j^n} > 0: \quad \theta_j^n = \frac{v_j^n - v_{j-1}^n}{v_{j+1}^n - v_j^n + \varepsilon}; \quad \phi_j^n = \phi(\theta_j^n),$$

$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f(v_j^n) - f(v_{j-1}^n)) + \frac{\phi_j^n \Delta t}{2\Delta x} \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) (f(v_{j+1}^n) - 2f(v_j^n) + f(v_{j-1}^n)).$$

Caso II: $f'(u) < 0$

$$\text{Se } \frac{f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)}{v_{j+1}^n - v_j^n} < 0: \quad \theta_j^n = \frac{v_{j+2}^n - v_{j+1}^n}{v_{j+1}^n - v_j^n + \varepsilon}; \quad \phi_j^n = \phi(\theta_j^n),$$

$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f(v_{j+1}^n) - f(v_j^n)) + \frac{\phi_j^n \Delta t}{2\Delta x} \left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) (f(v_{j+1}^n) - 2f(v_j^n) + f(v_{j-1}^n)).$$

Bibliografia

- [1] Farlow, S. J., 1982, *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, John Wiley.
- [2] LeVeque, R., 1990, *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser-Verlag.
- [3] Lin, C. C., Segel, L. A., & Handelman, G. H., 1974, *Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences*, Macmillan Publishing Co., Inc, New York.
- [4] Roe, P. L., 1985, *Some contributions to the modeling of discontinuous flows*, Lect. Notes Appl. Math., **22**, 163-193.
- [5] Strikwerda, J. C., 1989, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*, Wadsworth & Brooks/Cole.
- [6] Thomas, J. W., 1995, *Numerical Partial Differential Equations – Finite Difference Methods*, Springer Verlag, New York.
- [7] Thomas, J. W., 1999, *Numerical Partial Differential Equations – Conservation Laws and Elliptic Equations*, Springer Verlag, New York.
- [8] VanLeer, B., 1974, *Towards the ultimate conservative difference scheme II: monotonicity and conservation combined in a second order scheme*, J. Comput. Phys., **14**, 361-370.

Índice

- Características, 44, 46
- Choque, 57
- Comprimento de onda, 38
- Condição
 - de Rankine-Hugoniot, 54–56, 59
 - de salto, 55, 56
- Condições
 - de contorno, 6
 - de Dirichlet, 7
 - de Neumann, 7
 - mistas, 7
 - iniciais, 6
- Consistência, 28, 42
 - condicional, 48
 - na norma, 28
 - pontual, 28
- Convecção, 7
- Convergência, 25, 42
 - na norma, 27
 - ordem de, 27
 - pontual, 26
 - taxa de, 27
- Coordenada material, 9
- Derivada material, 9, 11
- Difusão, 7
- Dispersão, 38
 - relação de, 38
 - discreta, 39
 - discreta imaginária, 39
 - discreta real, 39
- Dissipação, 38
- Domínio
 - discretizado, 21
 - bidimensional, 41
- Entropia, 54
 - condição de, 56, 57
- Equação
 - constitutiva, 5, 12
 - convecção-difusão, 7, 19
 - da continuidade, 10, 11
 - da difusão, 6
 - da onda
 - unidimensional, 19, 49
 - unidirecional, 14, 19, 44
 - de Laplace, 15, 16, 19
 - de Poisson, 18, 19
 - discretizada, 22
 - do balanço de massa, 10
 - do calor, 4, 6
 - forma conservativa, 6
 - forma integral, 6
- Equações
 - diferenciais, 3
 - parciais, 4
 - elípticas, 15, 18
 - hiperbólicas, 8, 14, 19, 44
 - parabólicas, 4, 18, 40
- Erro truncamento, 28
- Esquema
 - avanzado no tempo e atrasado no espaço, 49
 - avanzado no tempo e avanzado no espaço, 49
 - avanzado no tempo e centrado no espaço, 23, 49
 - de dois níveis, 28
 - explícito, 22
 - implícito, 22, 52
 - Lax-Friedrichs, 47, 49

- Lax-Wendroff, 47, 49
- leapfrog, 23, 25
- TVD, 62
- unilateral, 45
- upwind, 45, 46
- Estabilidade, 29, 30
 - análise de von Neumann, 34, 37, 42, 48, 50, 51
 - condição de, 36
- Fator de amplificação, 35, 42, 50
- Fluxo
 - de alta resolução, 61
 - de baixa resolução, 61
 - numérico, 58, 61
- Forma não conservativa, 58
- Frequência, 38
- Função fluxo, 54
- Identidade de Parseval, 34, 35
- Lei
 - de Coulomb, 18
 - de Fourier, 5, 8
 - de Hooke, 12
 - de Newton, 18
- Leis de conservação, 13, 15, 19, 54, 56–60
- Limitadores de fluxo, 61, 62
- Método
 - de alta resolução, 60
 - de diferenças finitas, 20
 - Godunov, 54, 58, 59
 - Lax-Wendroff, 46, 61
 - TVD, 54, 60, 61
- Métodos upwind, 45, 59
- Modelos matemáticos, 1–3
- Número de onda, 38
- Operador
 - de diferenças, 22
 - atrasado, 22
 - avançado, 22
 - centrado, 22
 - diferencial, 25
- Princípio conservativo, 13
- Princípio da conservação
 - de calor, 5
 - de energia, 4
 - de massa, 8
 - do Momento, 10
 - versão linearizada, 13
- Problema bem posto, 6, 8
- Problemas
 - bidimensionais, 40, 42
 - de Riemann, 54, 57–59
- Processos difusivos, 4
- Rarefações, 57
- Simulador, 4
- Sinal do esquema numérico, 35
- Singularidade, 16, 62
- Solução
 - analítica, 4
 - auto-similar, 59
 - descontínua, 54
 - exata, 20
 - fraca, 55
 - suave, 57
- Teorema
 - de equivalência de Lax, 32, 42
 - de Lax, 25, 31, 42
- Termo difusivo, 56
- Transformada
 - de Fourier, 33
 - discreta, 33
- Transformada inversa
 - de Fourier, 33
 - discreta, 33
- Velocidade
 - de propagação, 44
 - do choque, 55, 56