Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica Mestrado Profissional em Matemática

Métodos de diferenças finitas: conceitos e interpretações

Dissertação de Mestrado

Nadson de Sousa*

CETECMA/UNIVIMA/SECTEC-MA

Prof. Dr. Ricardo Biloti

DMA/IMECC/UNICAMP
Orientador

Campinas, SP, 2009

^{*}Esta dissertação foi parcialmente financiada pela CAPES.

Métodos de diferenças finitas: conceitos e interpretações

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por Nadson de Sousa e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 20 de março de 2009.

Prof. Dr. Ricardo Biloti

Orientador

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Ricardo Biloti

Prof. Dra. Maria Amélia Novais Schleicher

Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Matemática.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP

Bibliotecária: Crisllene Queiroz Custódio - CRB8 / 7966

Sousa, Nadson de

So85m Métodos de diferenças finitas : conceitos e interpretações / Nadson de Sousa - Campinas, [S.P.: s.n.], 2009.

Orientador: Ricardo Caetano Azevedo Biloti

Dissertação (Mestrado Profissional) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

Diferenças finitas.
 Fourier, Analise de.
 Equação de advecção. I. Biloti, Ricardo Caetano Azevedo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, III. Título.

(cqc/imecc)

Título em inglês: Finite-difference methods: concepts and interpretation

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Finite differences. 2. Fourier analysis. 3. Advection equation.

Área de concentração: Análise numérica

Titulação: Mestre em Matemática

Banca examinadora: Prof. Dr. Ricardo Caetano Azevedo Biloti (IMECC-UNICAMP)

Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira (UFPR)

Prof. Dr. Maria Amélia Novais Schleicher (IMECC-UNICAMP)

Data da defesa: 20/03/2009

Programa de Pós-Graduação: Mestrado Profissional em Matemática

Dissertação de Mestrado Profissional defendida em 20 de março de 2009 e Aprovada pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.

Prof. (a). Dr (a). RICARDO CAETANO AZEVEDO BILOTI

Prof. (a). Dr (a). SAULO POMPONET OLIVEIRA

Maria amélia novais Sable de

Prof. (a). Dr (a). MARIA AMÉLIA NOVAIS SCHLEICHER

Aos meus pais, Francisco e Raimunda, por tantas lições de amor.

O conhecimento é o nosso destino [...] Sentimos a necessidade de continuar a descobrir, criar, explorar e inventar [...] Buscamos o desconhecido — o profundo, o obscuro, o nunca visto — e temos dentro de nós a capacidade para uma sabedoria ainda maior.

David E. Brody e Arnold R. Brody

Agradecimentos

A Deus, pela dádiva da vida que me permite aprender com os fracassos e sentir o prazer das conquistas.

A Ricardo Biloti, pela orientação precisa e incansável, que dirimiu muitas dúvidas, analisou resultados e, quando necessário, acrescentou idéias fundamentais na construção desse trabalho. Obrigado, Professor.

A Francisco e Raimunda, meus pais, pelas mensagens e gestos de incentivo para que eu completasse com êxito essa etapa de formação.

À Susiane Sampaio Marques, a mulher que me fez acreditar com ações, o quanto o amor pode construir uma vida. E, por ser minha ouvinte e ativamente contribuir com idéias neste trabalho.

À Sueli I. R. Costa, coordenadora do Mestrado Profissional em Matemática, e à equipe de professores da UNICAMP que transformaram possível a realização desse curso, dando oportunidade para alguns de galgar mais um degrau na formação intelectual e profissional.

Aos colegas do Mestrado Profissional, em especial, a Félix, que ajudou, sem restrições, nas formatações deste trabalho.

À coordenação e aos colegas dos Centros de Capacitação Tecnológica do Maranhão – CETECMA/UNIVIMA, pelo apoio e por acreditarem que a formação acadêmica é um dos caminhos do desenvolvimento do nosso Estado.

Resumo

O presente trabalho aborda os métodos de diferenças finitas com suas propriedades e aplicações. Iniciamos com uma revisão histórica, destacando alguns matemáticos que participaram do desenvolvimento da teoria de métodos de diferenças. Em seguida, apresentamos alguns modelos matemáticos compostos por equações diferenciais. Através da equação de advecção, estudamos métodos de diferenças explícitos, com especial enfoque para as propriedades de erro de truncamento, consistência, estabilidade e convergência dando ênfase ao Teorema de Lax. Estudamos a análise de Fourier e a condição de von Neumann para interpretar a amplitude, a dissipação e a dispersão das soluções numéricas. Abordamos os métodos Upwind, de Lax-Friedrichs e de Lax-Wendroff. Por fim, exemplificamos numericamente os conceitos e propriedades estudados com comparações entre os métodos, aplicados em um problema teste.

Palavras-chave: Métodos de Diferenças Finitas, Modelos Matemáticos, Equação de Advecção, Teorema de Lax, Análise de Fourier, Condição de von Neumann, Upwind, Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff.

Abstract

The present work approaches finite-difference methods, their properties, and their applications. We present a historical review, including some mathematicians who participated in the development of the theory of differences. Furthermore, we present some mathematical models consisting of differential equations. Through the advection equation, we study explicit finite-difference methods, detailing their truncation error, consistency, stability and convergence properties. We employ Fourier analysis and the von Neumann condition to study the amplitude, dissipation and dispersion of numerical solutions. We compare three methods: Upwind, Lax–Friedrichs and Lax–Wendroff. Finally, we perform numerical tests to illustrate the concepts and properties studied in this work.

keywords: Finite-difference Methods, Mathematical Models, Advection Equation, Lax Theorem, Fourier Analysis, von Neumann Condition, Lax-Friedrichs, Upwind, Lax-Wendroff.

Sumário

Agradecimentos				
\mathbf{R}	esum	10	vii	
\mathbf{A}	bstra	act	viii	
Sumário				
In	trod	ução	1	
1	Mo	delos e definições básicas de equações diferenciais	3	
	1.1	Contexto histórico	3	
	1.2	Modelos matemáticos e equações diferenciais	7	
	1.3	Equações hiperbólicas	11	
2	Mé	todos de diferenças finitas	15	
	2.1	Equação de advecção	16	
	2.2	Métodos de diferenças finitas	18	
	2.3	Condição CFL	26	
	2.4	Propriedades dos métodos de diferenças	31	

Sumário

3	Con	nparações de métodos de diferenças finitas	39		
	3.1	Método upwind	40		
	3.2	Análise de Fourier	42		
		3.2.1 Análise da equação diferencial	43		
		3.2.2 Análise do esquema numérico	45		
	3.3	Método de Lax–Friedrichs	50		
	3.4	Método de Lax-Wendroff	55		
	3.5	Comparação de métodos de diferenças finitas	59		
Conclusão					
Re	Referências Bibliográficas				
Apêndice					

Introdução

A Matemática tem uma propriedade intrínseca de colaborar com muitas outras ciências. Vários problemas observados em fenômenos naturais estudados na Biologia, na Física, na Engenharia são traduzidos para uma linguagem matemática dando origem a modelos matemáticos. Esses modelos geralmente são formados por equações diferenciais. Muitas vezes, eles não têm soluções analíticas. Assim, os métodos numéricos aparecem como um recurso para determinar aproximações de um problema. Entre esses, está o tradicional método de diferenças finitas. Eles unem a teoria concercente ao estudo do método e a prática através de sua implementação em computador.

Por outro lado, a proposta do Mestrado Profissional em Matemática, UNICAMP—SP, abrange em seus objetivos a interdisciplinaridade e a incorporação de recursos computacionais. Além disso, esse Programa visa fornecer uma experiência intelectual formadora nos trabalhos desenvolvidos por seus alunos.

Os fatores supracitados foram decisivos na escolha do tema deste trabalho, o estudo dos métodos de diferenças finitas, suas propriedades, com as simulações numéricas e interpretações. O objetivo é exemplificar numericamente os conceitos associados aos métodos de diferenças finitas.

O Capítulo 1 traz uma revisão histórica, destacando alguns matemáticos que participaram do desenvolvimento da teoria dos métodos de diferenças. Em seguida,

Introdução 2

apresentamos alguns problemas modelados por equações diferenciais [3], [8] e [18].

No Capítulo 2 estuda-se os métodos de diferenças explícitos através da equação de advecção com enfoque para a condição CFL e as propriedades de erro de truncamento, consistência, estabilidade e convergência dando ênfase ao Teorema de Lax [5], [6], [14], [16] e [17].

No Capítulo 3 aborda-se a análise de Fourier e a condição de von Neumann para interpretar a amplitude, a dissipação e a dispersão das soluções numéricas obtidas ao aplicar os métodos de diferenças finitas *Upwind*, *de Lax–Friedrichs e de Lax–Wendroff* [13], [14] e [17]. Por fim, comparamos as aproximações obtidas em computador desses métodos, através de um estudo numérico.

As simulações numéricas foram feitas com o software Octave, ambiente de computação numérica de código aberto, similar ao Matlab [7].

Capítulo 1

Modelos e definições básicas de equações diferenciais

Neste capítulo faremos uma breve revisão histórica enfocando alguns matemáticos que colaboraram para a teoria dos métodos de diferenças finitas aplicados às equações diferenciais parciais. Após, estudaremos modelos matemáticos e algumas definições de equações diferenciais, seguidos de alguns exemplos. Para uma leitura adicional referente a esse capítulo sugere-se [3], [8] e [18].

1.1 Contexto histórico

A intenção é descrever um simples e breve histórico sobre alguns matemáticos. Esses que direta ou indiretamente colaboraram na construção da teoria dos métodos de diferenças. Começaremos com o desenvolvimento das equações diferenciais.

A motivação para se estudar as equações diferenciais nasce com problemas da Mecânica, como a explicação do movimento dos planetas, a oscilação do pêndulo e outros que foram estudados por *Leonardo da Vinci* (1452–1519), *Galileu Galilei*

(1564-1642), Johann Kepler (1571-1630).

Para Eves [8], a invenção do Cálculo por *Isaac Newton* (1642–1727) e *Gottfried Wilhelm Leibinz* (1646–1716) foi a mais notável realização matemática do século XVII. De fato, esse feito mudou a forma de resolver os problemas da época. E influenciou toda uma geração futura.

O matemático Brook Taylor (1685–1731), em 1715, publicou a obra Methodus Incrementorum Directa et Inversa onde apresenta a série

$$f(x+a) = f(a) + f'(a)x + f''(a)\frac{x^2}{2!} + f'''(a)\frac{x^3}{3!} + \dots + f^{(n)}(a)\frac{x^n}{n!} + \dots$$
 (1.1)

que hoje é conhecida como série de Taylor [3].

Ele desenvolveu o teorema de expansão de Taylor¹. Essa expansão é muito utilizada nos métodos de diferenças finitas.

Teorema 1.1.1 (Teorema de Taylor) Seja f uma função derivável até ordem n+1 em um intervalo I contendo x, então para cada x+h em I existe um número real τ entre x e x+h tal que

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}h^n + R_n(x+h),$$
 (1.2)

onde

$$R_n(x+h) = \frac{f^{(n+1)}(\tau)}{(n+1)!}h^{n+1}.$$

O valor absoluto

$$|R_n(x+h)| = |f(x+h) - P_n(x+h)| \tag{1.3}$$

é chamado de erro associado à aproximação e

$$P_n(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}h^n$$

é denominado polinômio de Taylor de ordem n.

¹A demonstração do teorema de Taylor é encontrada em [9].

Para Boyer [3], as publicações de Leonhard Euler (1707–1783) "Introductio in analysin infinitorum" (1748), "Institutiones calculi differentialis" (1755) e "Institutiones calculi integralis" (3 volumes, 1768–1770) contém o estudo mais completo de Cálculo e Análise até aquela época. Entre as contribuições de Euler estão o uso de fatores integrantes na resolução de equações diferenciais, método sistemático para resolver equações diferenciais lineares com coeficientes constantes, um desenvolvimento do cálculo de diferenças finitas e a notável fórmula

$$e^{\theta i} = \cos \theta + i \sin \theta$$
.

Jean Le Rond d'Alembert (1717–1783) publicou "Traité de Dynamique" (1743). Nessa obra, ele escreveu sobre o princípio que as ações e reações internas de um sistema de corpos rígidos, em movimento, estão em equilíbrio. Em 1747, ao estudar o problema das cordas vibrantes desenvolveu a equação

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{1.4}$$

e deu a solução u=f(x+t)+g(x-t), onde f e g são funções arbitrárias, $f,g\in C^2.$

A equação de Laplace (1780) foi estudada, primeiramente, por *Pierre-Simon Laplace* (1749–1827) em seu trabalho sobre potencial de campo gravitacional. A equação do calor (1810–1822) foi introduzida por *Joseph Fourier* (1768–1830) em sua obra "*Théorie Analytique de la Chaleur*". Assim, as equações diferenciais parciais (EDPs) de segunda ordem hiperbólica, elíptica e parabólica já eram conhecidas no começo do século XIX.

Segundo *Brezis* e *Browder* [4], os séculos XIX e XX são marcados pela dualidade de pontos de vista referente ao estudo das EDPs. De um lado a relação para modelos em Física e Engenharia. Do outro, delas servirem para o desenvolvimento de outros ramos da matemática. Essa perspectiva foi sentida por *Jules Henri Poincaré* (1854–1912) num artigo feito em 1890.

O século XX é marcado pelo desenvolvimento da Matemática Aplicada com o surgimento de métodos numéricos implementados em computador. Esses métodos tornaram-se uma ferramenta poderosa nas resoluções das EDPs.

Em 1928, Richard Courant (1888–1972), Kurt Otto Friedrichs (1901–1982) e Hans Lewy (1904–1988) publicaram um artigo sobre as equações de diferenças parciais de física matemática. A motivação de escrever esse artigo foi o uso de aproximações de diferenças finitas para provar a existência de soluções de EDPs. Nesse artigo é apresentada uma condição necessária para a estabilidade dos métodos de diferenças, conhecida como condição CFL. Em 1936, Courant migrou para os Estados Unidos, trabalhando na Universidade de Nova York, onde fundou o Instituto Courant de Ciências Matemáticas, até hoje um respeitado centro de matemática aplicada [11].

Os avanços tecnológicos dos métodos numéricos convergem para $Jonh\ von\ Neumam\ (1903–1957)$. Ele foi responsável pelo funcionamento do ENIAC², primeiro computador totalmente eletrônico. Idealizou os conceitos de armazenamento de programas. Os simuladores numéricos passam a ser utilizados para resolver EDPs.

Outro matemático que merece destaque é Peter David Lax (1926–), nasceu em Budapeste e migrou para os Estados Unidos em 1941. Participou do projeto Manhattan. Friedrichs foi seu orientador em Sistema de Equações Diferenciais Parciais Hiperbólicas não Lineares em duas Variáveis Independentes. Em 2005, ganhou o prêmio Abel Prize pela contribuições a Matemática Aplicada. Desenvolveu os métodos de diferenças Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff, respectivamente, com Friedrichs e Burton Wendroff (1930–). E ainda, o Teorema de Lax, no qual se estabelece as condições em que uma solução numérica é uma boa aproximação para solução de uma equação diferencial.

²ENIAC significa Electronic Numerical Integrator and Computer.

1.2 Modelos matemáticos e equações diferenciais

A tradução dos fenômenos da natureza para a linguagem matemática é um recurso importantíssimo nos estudos científicos. Nesse caso, as características do fenômeno são estudadas e hipóteses são elaboradas. O resultado são equações com uma descrição muito próxima da realidade. Dessa forma, criamos um modelo matemático.

Segundo Bassanezi [1], "modelo matemático é um conjunto de símbolos e relações matemáticas que representam de alguma forma o objeto estudado".

Todo o processo de traduzir um fenômeno para uma linguagem matemática é a modelagem matemática. Para Biembengut [2], "a modelagem matemática é o processo que envolve a obtenção de um modelo".

As soluções ou aproximações desse modelo constituem outra etapa desse estudo. Nessa etapa, a utilização de programas específicos em computador é fundamental. Geralmente apresentam uma quantidade de operações em que o ser humano gastaria muito tempo para sua execução.

Um modelo resolvido e interpretado poderá ser usado em outras situações de pesquisa, com peculiaridades semelhantes ao fenômeno que originou o modelo.

O modelo predador—presa criado por *Vito Volterra* (1860–1940) era baseado na interação de duas espécies no mesmo habitat. Ele foi usado para estudar as variações das espécies de tubarão e peixes no mar Adriático. Após o modelo construído, ele foi adaptado para analisar outras espécies com características semelhantes.

Apresentaremos definições de uma equação diferencial, sua ordem e solução. Definiremos ainda, equação diferencial ordinária (EDO) e equação diferencial parcial (EDP), com alguns exemplos.

Definição 1.2.1 (Equação Diferencial – ED) Sejam x_1, \ldots, x_n n variáveis in-

dependentes, então uma equação da forma

$$F\left(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_n}, \dots, \frac{\partial^k u}{\partial x_n^k}\right) = 0$$
 (1.5)

é uma equação diferencial, onde $x = (x_1, ..., x_n) \in I$, I é um subconjunto aberto de \mathbb{R}^n , F é uma função dada e u = u(x) é uma função incógnita³.

Definição 1.2.2 (Ordem da Equação Diferencial) Seja n um número natural. Dizemos que a equação diferencial é de ordem n, quando a ordem da mais alta derivada dessa equação é n.

Definição 1.2.3 (Equação Diferencial Ordinária – EDO) A equação diferencial é dita ordinária, se a função incógnita depende somente de uma variável independente.

Exemplo 1.1 (Velocidade de Queda de um Corpo) Um corpo de massa m é lançado de uma certa altura. Ele cai a partir do repouso numa trajetória retilínea. Vamos supor que as forças que atuam nesse corpo são apenas a força gravitacional mg e a força de resistência do ar -kv, onde g, v e k representam, respectivamente, a aceleração da gravidade, a velocidade do corpo e uma constante positiva.

A segunda lei de Newton diz: a soma das forças que atuam num corpo em qualquer instante é igual ao produto de sua massa pela aceleração adquirida por esse corpo. Assim,

$$ma = mq - kv \tag{1.6}$$

Seja s=f(t) a distância s percorrida pelo corpo em função do tempo t. E que a velocidade é $v=\frac{ds}{dt}$.

³Uma função incógnita é solução da equação diferencial.

A aceleração será dada por

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{ds}{dt}\right).$$

Logo, podemos escrever (1.6) na forma

$$\frac{d^2s}{dt^2} + \frac{k}{m}\frac{ds}{dt} - g = 0. ag{1.7}$$

Essa equação é um modelo matemático que relaciona a distância percorrida pelo corpo de massa m em queda, sofrendo uma força de resistência do ar.

A equação (1.7) é classificada como uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, pois tem apenas uma variável independente e sua maior derivada é de ordem 2.

A solução de (1.7) é dada por

$$x(t) = g\frac{m}{k}t + g\frac{m^2}{k^2}(e^{-\frac{k}{m}t} - 1), \tag{1.8}$$

determinada pelo método de variação de parâmetros⁴.

Observe que poderíamos considerar a equação (1.7) como uma equação diferencial de primeira ordem para a velocidade v. Considerando a velocidade inicial v_0 quando o tempo t=0 teríamos a solução

$$v = \frac{mg}{k} (1 - e^{-\frac{kt}{m}}) + v_0 e^{-\frac{kt}{m}}.$$
 (1.9)

Na expressão acima, quando o tempo tende ao infinito, a velocidade se aproxima do valor $\frac{mg}{k}$. Portanto, os corpos de mesma forma e massas diferentes tendem a cair mais rapidamente.

Definição 1.2.4 (Equação Diferencial Parcial – EDP) Se a função incógnita u de uma equação depender de duas ou mais variáveis independentes, com suas

 $^{^4}$ O método de variação de parâmetros foi desenvolvido por J. L. Lagrange (1736–1813).

derivadas parciais em relação as variáveis, então temos uma equação diferencial parcial⁵.

Dizemos que uma EDP é linear, se for de primeiro grau em u e em todas as derivadas parciais que aparecem na equação.

As equações diferenciais parciais podem ser classificadas pela ordem, pela linearidade e por características físicas através de assuntos que envolvem os problemas clássicos da Mecânica, como de difusão (equações parabólicas), de vibração e propagação de ondas (equações hiperbólicas) e de equilíbrio (equações elípticas).

Exemplo 1.2 (Transporte de partículas) Considere um fluido, nesse caso, a água, escoando numa razão constante c ao longo de um cano de secção transversal fixa na direção horizontal para a direita (sentido positivo). Suponha que uma substância, por exemplo um poluente, está suspenso na água. E admita que a difusão desse poluente seja insignificante. A função u = u(x,t) representa o modelo da concentração de poluente na água, em gramas por centímetros, onde x e t são, respectivamente, a distância percorrida pela substância e o tempo. Então

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \tag{1.10}$$

ou seja, a taxa de variação $\frac{\partial u}{\partial t}$ da concentração é proporcional a $\frac{\partial u}{\partial x}$.

A solução dessa equação, ou melhor, a concentração dessa substância será dada por

$$u(x,t) = g(x - ct), \tag{1.11}$$

g diferenciável, e significa que a substância é transportada com uma velocidade constante, com movimento semelhante a propagação de uma onda. Mais detalhes dessa solução em [15], Seção 1.2.

⁵Esta definição é baseada na referência [10].

Além de determinar uma equação diferencial num modelo matemático torna-se importante descrever condições iniciais que especificam o estado físico num instante particular t_0 do sistema em estudo (problema), dando uma solução no início do processo. Por exemplo, na equação (1.4) que representa o fenômeno das cordas vibrantes, podemos ter as condições iniciais

$$u(x,t_0) = u_0(x) e \frac{\partial u}{\partial t}(x,t_0) = v(x), (1.12)$$

onde $u_0(x)$ representa a posição inicial e v(x) a velocidade inicial.

Em cada sistema estudado há uma região D (domínio) na qual a equação é válida. No caso de um corda vibrando, a região D é o intervalo 0 < x < l que representa seu comprimento. Torna-se necessário especificar condições do que está ocorrendo na fronteira do sistema, as condições de contorno.

$$u(0,t) = g_1(t)$$
 e $u(l,t) = h_1(t)$ (1.13)

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = g_2(t)$$
 e $\frac{\partial u}{\partial x}(l,t) = h_2(t),$ (1.14)

onde as funções g_1, h_1, g_2 e h_2 conhecidas.

As condições dadas por (1.13) são chamadas de condição de $Dirichlet^6$ e as condições de (1.14) de condição de Neumann.

1.3 Equações hiperbólicas

As equações diferenciais parciais

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \tag{1.15}$$

são chamadas de leis de conservação. Elas aparecem em modelos matemáticos que representam princípios conservativos de grandezas físicas, na qual as funções u =

⁶As condições de contorno foram estudadas por Gustav Lejeune Dirichlet (1805–1859).

u(x,t) e f(u) correspondem, respectivamente, a uma grandeza física e ao fluxo dessa grandeza que passa nas fronteiras da região em estudo.

Num princípio conservativo: a taxa de variação de crescimento de uma grandeza física no tempo é igual à variação do fluxo dessa grandeza que passa pela fronteira do fenômeno em estudo.

Particularmente em (1.15), quando f(u) = au, a uma constante real, temos

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{1.16}$$

Essa é uma equação hiperbólica de primeira ordem ou uma equação da onda unidirecional.

No caso, de uma aproximação $f(u) = au^2$ temos para (1.15)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0 \tag{1.17}$$

que é uma equação diferencial hiperbólica não-linear. Com $a = \frac{1}{2}$, temos que (1.17) é a conhecida equação de Burger.

Exemplo 1.3 (Fluxo de Tráfego) Vamos estudar um sistema do fluxo de tráfego numa avenida. Representaremos a densidade dos carros, medida por carros por quilômetros, pela função u = (x,t) e o fluxo de tráfego, medido em carros por hora, pela função f = f(x,t), onde x representa a coordenada do espaço unidimensional na avenida e t simboliza o tempo.

Fixando um trecho da avenida entre os pontos a e b que será representado pelo intervalo [a,b] e considerando os tempos t_1 e t_2 , em que determinado número de veículos trafegam por esse trecho. Assim, podemos descrever o sistema matematicamente partindo da hipótese que a taxa de variação do número N de veículos no trecho [a,b], com respeito ao tempo, deve ser igual a diferença dos fluxos nos pontos a e b. Então,

$$\frac{dN}{dt} = f(a,t) - f(b,t). \tag{1.18}$$

Por outro lado, o número N de veículos pode ser determinado pela integração da função densidade u=(x,t), ou seja,

$$N = \int_{a}^{b} u(x,t)dx. \tag{1.19}$$

Das expressões (1.18) e (1.19) podemos escrever

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{a}^{b} u(x,t)dx\right) = f(a,t) - f(b,t). \tag{1.20}$$

Observe que

$$\frac{d}{dt}\left(\int_{a}^{b} u(x,t)dx\right) = \int_{a}^{b} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}dx. \tag{1.21}$$

O uso da derivada parcial na relação (1.21) é aceitável visto que u(x,t) também depende de x.

Pelo Teorema Fundamental do Cálculo verifica-se que

$$f(a,t) - f(b,t) = -\int_{a}^{b} \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} dx.$$
 (1.22)

Usamos a derivada parcial com respeito a x na expressão (1.22), visto que f depende de ambos x e t. Agora associando as equações (1.20), (1.21) e (1.22) temos

$$\int_{a}^{b} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} dx = -\int_{a}^{b} \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} dx,$$
(1.23)

que ainda pode ser escrita como

$$\int_{a}^{b} \left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \right) dx = 0.$$
 (1.24)

Essa relação é válida no intervalo [a, b].

Teorema 1.3.1 (Teorema de Dubois-Reymond) Seja uma função f(x) contínua num intervalo fechado I = [c, d] e supondo que

$$\int_{a}^{b} f dx = 0 \tag{1.25}$$

para qualquer intervalo $[a,b] \subset (c,d)$. Então $f \equiv 0$, em (c,d).

Usando esse resultado podemos concluir da expressão (1.24) que

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}f(x,t) = 0. \tag{1.26}$$

Essa equação representa um modelo do fluxo de tráfego numa avenida num instante qualquer. É claro que outras informações devem ser acrescentadas nesse modelo, por exemplo, conhecer a função do fluxo através de observações do trânsito em partes do trecho da avenida em estudo.

Muitos modelos matemáticos de EDPs não têm soluções analíticas. O uso de métodos numéricos torna-se uma alternativa na busca de aproximações dessas soluções. No próximo capítulo estudaremos os *métodos de diferenças finitas*.

Capítulo 2

Métodos de diferenças finitas

Mesmo para modelos simples com EDPs é, na maioria das vezes, difícil determinar expressões analíticas que sejam suas soluções, sendo portanto necessário recorrer a aproximações numéricas.

Com a ascensão do computador como auxílio matemático na primeira metade do século XX, criou-se alternativas para obter aproximações numéricas das soluções desenvolvendo-se diversos métodos numéricos para serem implementados computacionalmente.

Neste capítulo estudaremos a equação de advecção e o método de diferenças finitas para numericamente resolver uma equação diferencial parcial hiperbólica. Mostraremos alguns tipos de diferenças finitas. Apresentaremos a condição CFL, bem como, certas propriedades dos métodos de diferenças. Para esses conteúdos encontra-se uma boa literatura estrangeira [5], [13], [16] e [17]. Nas obras brasileiras sugere-se [6] e [14].

2.1 Equação de advecção

Nesta seção nosso objetivo é apresentar a equação de advecção que será o principal exemplo no decorrer desse capítulo e definir um problema contínuo com um modelo matemático para o tráfego de veículos numa avenida. Veremos que a solução dessa equação é conhecida, isso facilita interpretar os resultados. Assim, a simplicidade da equação é o maior motivo de sua escolha. Isto para que possamos exemplificar e estudar os métodos de diferenças finitas.

A equação hiperbólica

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{2.1}$$

é chamada de equação de advecção ou equação da onda unidirecional. Certamente é uma das mais simples equações diferenciais parciais.

Vamos considerar um problema de valor inicial que será o nosso ponto de partida para estudarmos a aplicação do método de diferenças finitas, com a condição inicial definida por

$$u(x,0) = u_0(x), (2.2)$$

onde x é número real. A solução exata do problema (2.1) – (2.2) é dada por

$$u(x,t) = u_0(x-at),$$
 (2.3)

com x real e t > 0.

De fato, supondo que a função $u(x,t)=u_0(x-at)$ admita derivadas parciais nas variáveis t e x e seja C=C(x,t)=x-at. Assim, pela regra da cadeia:

$$\frac{\partial}{\partial t}u_0(C) = \frac{\partial C}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial C}u_0(C) = -a\frac{\partial}{\partial C}u_0(C), \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}u_0(C) = \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial C}u_0(C) = \frac{\partial}{\partial C}u_0(C). \tag{2.5}$$

Substituindo as expressões (2.4) e (2.5) no lado direito de (2.1), concluímos que $u(x,t)=u_0(x-at)$ é solução da equação de advecção.

Note que a curva C=x-at, solução de $\frac{dx}{dt}=a(x,t)$, é chamada curva característica, veja [15].

A solução de (2.1)–(2.2) é constante ao longo da curva x - at = C, pois

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} \cdot \frac{dt}{dt} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$
 (2.6)

Exemplo 2.1 Vamos resolver a equação de advecção dada por

$$\begin{cases} u_t + 3u_x = 0 \\ u(x,0) = x^2. \end{cases}$$
 (2.7)

Encontrando as curvas características x-3t=C, soluções de $\frac{dx}{dt}=3$, que passam pelo ponto (C,0), temos então pela condição inicial dada que $u(C,0)=(x-3t)^2$. Como já mostramos, a função u é constante em todos os pontos dessas curvas. Logo, a solução é dada por

$$u(x,t) = u_0(x-3t) = (x-3t)^2. (2.8)$$

Vamos agora apresentar outro exemplo que servirá de modelo para aplicar o método de diferenças finitas.

Exemplo 2.2 (Equação do transporte) Suponha que um trecho retilíneo de uma avenida seja representada pelo eixo x e que os veículos se movimentem da esquerda para a direita, que será considerado o sentido positivo do eixo, entre pontos A e B distintos. Ressaltamos que esses pontos podem ser, por exemplo, um cruzamento e um semáforo na avenida.

Considere que o fluxo de carros f(x,t), veículos por minuto, aumenta com a densidade de carros u(x,t), veículos por unidade de comprimento no eixo x, onde

x e t representam, respectivamente, o espaço unidimensional na avenida e o tempo.

Assim, podemos supor que o fluxo é proporcional a densidade de carros, ou seja,

$$f(u) = au, (2.9)$$

onde a é uma constante real.

No exemplo 1.3 apresentamos um modelo do fluxo de tráfego numa avenida num instante qualquer que reescrevemos aqui

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}f(x,t) = 0. \tag{2.10}$$

Tomando a expressão (2.9) e aplicando na equação (2.10) temos a equação de advecção (2.1).

Acrescentaremos ainda uma informação sobre a densidade dos carros no instante de início da observação do fenômeno

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad 0 \le x \le l,$$
 (2.11)

 $denominada\ condição\ inicial,\ com\ u_0\ uma\ função\ conhecida.$

A fronteira será representada nesse problema por informações em dois pontos da avenida sobre a densidade dos carros, podendo ser num semáforo e num cruzamento. Simbolicamente

$$u(0,t) = g_1(t), \quad u(l,t) = g_2(t) \quad t \ge 0,$$
 (2.12)

que são as condições de contorno (Dirichlet), onde as funções $g_1(t)$ e $g_2(t)$ são conhecidas. Logo, nosso problema está definido com as equações (2.1), (2.11) e (2.12).

2.2 Métodos de diferenças finitas

Nesta seção apresentaremos o método de diferenças finitas. Para isso resolvere-

mos numericamente o problema definido no Exemplo 2.2 com o objetivo de compreender como o método se aplica.

O método de diferenças finitas consiste em particionar o domínio da função incógnita criando um domínio discreto e substituir as derivadas existentes no problema por aproximações de diferenças. Essas aproximações são determinadas pela expansão de Taylor. Assim, chega-se às equações discretizadas que são utilizadas em programas de computador, por exemplo o Octave¹, para encontrar soluções numéricas.

Pode-se ainda manipular as diferenças finitas de tal forma a criar vários esquemas de diferenças como, por exemplo, os métodos *Upwind*, de *Lax-Friedrichs*, de *Lax-Wendroff*, que serão discutidos em detalhes mais a frente.

Vamos aplicar o método no problema

$$u_t + au_x = 0$$
, para $0 < x < x_J$, $t > 0$, (2.13)

$$u(x,0) = g_1(x), \quad \text{para} \quad 0 \le x \le x_J,$$
 (2.14)

$$u(0,t) = g_2(t), t \ge 0,$$
 (2.15)

com $g_1(0) = g_2(0)$.

Primeiramente, dividimos o domínio numérico $[0, x_J] \times [0, t_F]$ da função u através de linhas paralelas aos eixos x e t, e que sejam igualmente espaçadas, respectivamente, pelos intervalos Δx e Δt formando o que chamamos de malha. As linhas paralelas passarão pelos pontos x_j e t_n , com

$$x_i = j\Delta x$$
 e $t_n = n\Delta t$, $j = 0, 1, \dots, J$, $n = 0, 1, \dots, F$,

onde

$$\Delta x = \frac{x_J}{J},$$

¹Octave é um software livre para cálculo numérico. Está disponível para download no site www.gnu.org/software/octave.

dando origem aos pontos da malha.

Esse processo é denominado de discretização do domínio, pois permite que um problema contínuo seja aproximado por um discreto com dimensão finita. Na representação geométrica da malha (j,n) denota o ponto (x_j,t_n) pertencente ao domínio discretizado.

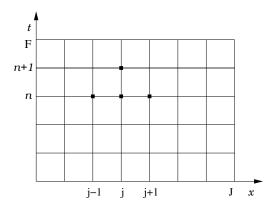


Figura 2.1: Discretização do domínio $[0, x_J] \times [0, t_F]$ com representação dos pontos $(x_{j-1}, t_n), (x_j, t_n), (x_{j+1}, t_n)$ e (x_j, t_{n+1}) .

Temos de procurar aproximações da solução da função u(x,t) sobre os pontos da malha, esses valores serão denotados por U_j^n , ou seja,

$$U_j^n \approx u(x_j, t_n). \tag{2.16}$$

O próximo passo consiste na discretização das derivadas, ou seja, em aproximar as derivadas parciais que fazem parte da equação diferencial através de diferenças entre os valores U_j^n para pontos vizinhos de (x_j, t_n) . As aproximações serão obtidas através do desenvolvimento da expansão de Taylor em torno do ponto (x_j, t_n) .

Teorema 2.2.1 Seja v uma função derivável, até a ordem (k+1) em x, então para

cada (x_j, t_n) existe um número η entre x_j e x_{j+1} tal que

$$\upsilon(x_{j+1},t_n) = \upsilon(x_j,t_n) + \frac{\partial \upsilon}{\partial x}(x_j,t_n)\Delta x + \ldots + \frac{\partial^k \upsilon}{\partial x^k}(x_j,t_n)\frac{\Delta x^k}{k!} + \frac{\partial^{(k+1)}\upsilon}{\partial x^{(k+1)}}(\eta,t_n)\frac{\Delta x^{(k+1)}}{(k+1)!},$$
(2.17)

onde o último termo de (2.17) representa o erro na aproximação da expansão pelo polinômio de Taylor de ordem k e $\Delta x = x_{j+1} - x_j$.

Supondo u uma função derivável até ordem 2 em x, então para k=1 em (2.17) temos

$$u(x_{j+1}, t_n) = u(x_j, t_n) + \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\eta_1, t_n) \frac{\Delta x^2}{2}, \tag{2.18}$$

para algum $\eta_1 \in (x_j, x_{j+1})$. Daí

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) = \frac{u(x_{j+1}, t_n) - u(x_j, t_n)}{\Delta x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\eta_1, t_n) \frac{\Delta x}{2}.$$
 (2.19)

A expressão $u(x_{j+1}, t_n) - u(x_j, t_n)$ é denominada de diferença avançada na variável x.

Assim, tomando as aproximações

$$U_{j+1}^n \approx u(x_{j+1}, t_n) \quad e \quad U_j^n \approx u(x_j, t_n),$$

obtemos de (2.19)

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j+1}^n - U_j^n}{\Delta x}.$$
 (2.20)

Analogamente, considerando u uma função derivável até ordem 2 em t, para k=1 em (2.17) em torno do ponto (x_j,t_n)

$$u(x_j, t_{n+1}) = u(x_j, t_n) + \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) \Delta t + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, \eta_2) \frac{\Delta t^2}{2}, \tag{2.21}$$

para algum $\eta_2 \in (t_n, t_{n+1})$.

A expressão $u(x_j,t_{n+1})-u(x_j,t_n)$ é chamada de diferença avançada na variável t. Obtendo então a aproximação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) \approx \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t}.$$
 (2.22)

Das equações (2.20) e (2.22) podemos aproximar a equação (2.13) pela expressão

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + a \frac{U_{j+1}^n - U_j^n}{\Delta x} = 0, (2.23)$$

ou melhor,

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \nu \left(U_{j+1}^n - U_j^n \right), \tag{2.24}$$

onde $\nu = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

Dizemos que a equação discretizada (2.24) é um esquema avançado no tempo e avançado no espaço (FTFS)².

As condições inicial e de contorno são aproximadas nesse esquema tomando

$$U_i^0 = g_1(x_j), \qquad j = 0, 1, \dots, J,$$
 (2.25)

$$U_I^n = g_2(t_n), \qquad n = 1, 2 \dots, F,$$
 (2.26)

onde as funções g_1 e g_2 são conhecidas de (2.14) e (2.15).

Teremos assim um problema discreto (2.24) – (2.26) determinado pelo método de diferenças finitas, para calcular uma aproximação numérica para a solução do problema (2.13) – (2.15).

De fato, a equação (2.25) nos dá todos os valores no nível do tempo t_0 . Da equação (2.26) determinamos as aproximações no contorno do problema. Conhecidos os valores de U_j^0 , obtemos os valores de U_j^1 usando a equação (2.24), com $j=1,2,\ldots,J-1$. Como U_J^1 é dada na condição de contorno, temos todos os valores de U_j^n no nível de tempo t_1 , ou seja,

$$U_i^1 = U_i^0 - \nu \left(U_{i+1}^0 - U_i^0 \right), \quad j = 1, 2, \dots, J - 1, \quad e \quad U_J^1 = g_2(t_1).$$

Analogamente, com os U_j^1 obtemos os valores U_j^2 , e assim sucessivamente. Dessa forma, determinamos as aproximações U_j^n para todos os pontos (x_j, t_n) gerados pela discretização do domínio.

²O termo FTFS é a abreviatura para forward in time, forward in space.

Observe que cada valor no nível do tempo t_{n+1} é calculado a partir dos valores no nível de tempo t_n caracterizando o que chamamos de um esquema de diferenças explícito.

Por outro lado, se aproximássemos $\frac{\partial u}{\partial t}$ usando a diferença $[u(x_j, t_n) - u(x_j, t_{n-1})]$ atrasada no tempo. Teríamos a equação discretizada

$$U_j^n + \nu \left(U_j^n - U_{j+1}^n \right) = U_j^{n-1}, \tag{2.27}$$

que caracteriza um método implícito.

A equação (2.27) é chamada de um esquema atrasado no tempo e avançado no espaço (BTFS)³. Nesse caso, não conhecemos os valores do lado esquerdo de (2.27) para determiná-los formamos um sistema bidiagonal de equações lineares. Neste trabalho usaremos somente métodos explícitos.

O esboço de um método no plano é feito através de um *stencil* que é uma representação geométrica dos pontos da malha de um esquema de diferenças, veja Figura 2.2.

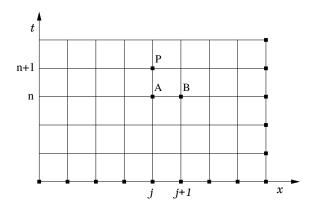


Figura 2.2: Stencil do esquema de diferença explícito FTFS com as condições inicial e contorno. Representação dos pontos $A(x_j, t_n)$, $B(x_{j+1}, t_n)$ e $P(x_j, t_{n+1})$ da malha.

³O termo BTFS é abreviatura para backward in time, forward in space.

A seguir, apresentamos um exemplo de soluções numéricas usando um esquema FTFS para mostrar a estreita relação dos resultados com as dimensões Δx e Δt .

Exemplo 2.3 (Esquema FTFS) Dado o problema

$$u_t - 3u_x = 0, \quad 0 \le x \le 1, \quad t \ge 0,$$
 (2.28)

com a condição inicial

$$u(x,0) = \begin{cases} 5x - 3, & se \quad 0.6 \le x < 0.7, \\ 4 - 5x, & se \quad 0.7 \le x \le 0.8, \\ 0, & c.c., \end{cases}$$
 (2.29)

e a condição de fronteira

$$u(1,t) = 0. (2.30)$$

A solução exata desse problema nada mais é do que a translação do gráfico da função chapéu (condição inicial) no sentido negativo do eixo das abscissas.

Apresentamos duas simulações feitas com o esquema FTFS para o problema (2.28)–(2.30). Ambas usando $\Delta x = 0.01$, veja a Figura 2.3.

O primeiro resultado é calculado com $\Delta t = 0.003$ onde encontramos uma aproximação clara da solução exata. Enquanto que o segundo resultado é determinado usando $\Delta t = 0.004$ que apresenta variações bruscas em relação a solução exata com oscilações que aumentam rapidamente com o crescimento dos valores de t.

Apesar dos valores de Δt serem muitos próximos, os resultados das aproximações são bastante diferentes. Esse comportamento é um caso típico de estabilidade ou instabilidade do esquema numérico. E depende do valor de ν , ou seja, dependem diretamente da relação entre as dimensões dos passos do tempo e do espaço.

Métodos estáveis são aqueles em que oscilações podem ser amplificadas apenas na medida em que o tempo cresce, porém independentemente da quantidade de passos no tempo. Caso contrário, o método é dito instável.

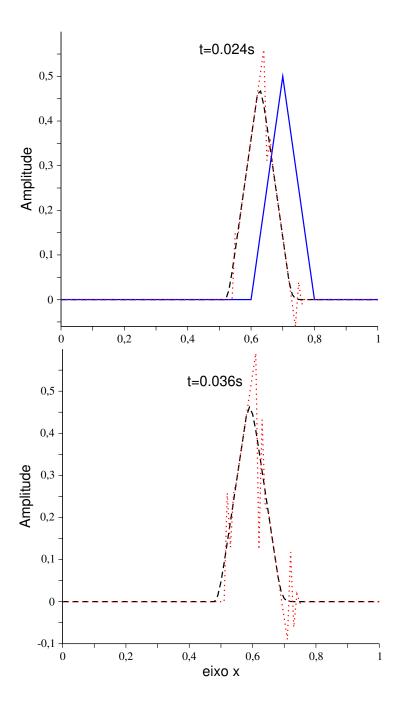


Figura 2.3: Resultado do problema (2.28) com o esquema FTFS, em 0.024s e 0.036s. (Linha contínua: condição inicial; tracejada: solução obtida para $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.003$; pontilhada: solução obtida para $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.004$.)

Existem três tipos principais de diferenças finitas [13]: diferenças avançadas

$$\Delta_{+t}\nu(x,t) := \nu(x,t+\Delta t) - \nu(x,t), \tag{2.31}$$

$$\Delta_{+x}\nu(x,t) := \nu(x + \Delta x, t) - \nu(x,t); \tag{2.32}$$

diferenças atrasadas

$$\Delta_{-t}\upsilon(x,t) := \upsilon(x,t) - \upsilon(x,t-\Delta t),\tag{2.33}$$

$$\Delta_{-x}\upsilon(x,t) := \upsilon(x,t) - \upsilon(x - \Delta x,t); \tag{2.34}$$

diferenças centradas

$$\delta_t v(x,t) := v(x,t + \frac{1}{2}\Delta t) - v(x,t - \frac{1}{2}\Delta t), \qquad (2.35)$$

$$\delta_x v(x,t) := v(x + \frac{1}{2}\Delta x, t) - v(x - \frac{1}{2}\Delta x, t). \tag{2.36}$$

Nas diferenças centradas (2.35) e (2.36), os pontos não estão no grid definido. Das expressões acima podemos gerar outras, como por exemplo, a diferença centrada de segunda ordem, $\delta_x^2 v(x,t)$, utilizada para discretizar a derivada de segunda ordem e o erro associado a essa discretização. Essa diferença é demonstrada abaixo:

$$\delta_x^2 v(x,t) = \delta_x \left(v(x + \frac{1}{2}\Delta x, t) - v(x - \frac{1}{2}\Delta x, t) \right)$$

$$= \delta_x \left(v(x + \frac{1}{2}\Delta x, t) \right) - \delta_x \left(v(x - \frac{1}{2}\Delta x, t) \right)$$

$$= v(x + \Delta x, t) - v(x, t) - v(x, t) + v(x - \Delta x, t)$$

$$= v(x + \Delta x, t) - 2v(x, t) + v(x - \Delta x, t)$$

2.3 Condição CFL

Apresentaremos nesta seção um resultado necessário para a convergência de um esquema numérico, conhecido como condição CFL.

Alguns anos antes do aparecimento dos computadores digitais eletrônicos, precisamente em 1928, os matemáticos Richard Courant, Kurt Otto Friedrichs e Hans Lewy publicaram o artigo "On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics" [5]. Nesse artigo estão as bases para a investigação dos métodos de diferenças finitas para as equações diferenciais parciais para problemas da física matemática. Nele foi formulada uma condição necessária para a convergência de um esquema de diferenças finitas baseado no conceito de domínio de dependência que hoje é conhecida como condição CFL⁴.

Para entender a condição, vamos utilizar o problema da equação de advecção (2.1), com a > 0. Esse problema tem solução

$$u(x,t) = u_0(x - at), (2.37)$$

onde u_0 é a função conhecida na condição inicial. A solução de u(x,t) é constante ao longo de cada curva característica x-at=C, pois u(x,t)=K quando $\frac{dx}{dt}=a$, onde K é uma constante real.

Dessa forma, a solução no ponto (x_j, t_n) é obtida desenhando a característica "crescente", a > 0, passando por esse ponto onde ela encontra a linha inicial, eixo x, no ponto $C = (x_j - at_n, 0)$, na Figura 2.4. Os valores de u na linha inicial são conhecidos devido à condição inicial, logo determinamos o valor de $u(C) = u_0(x_j - at_n)$. Como já foi demonstrado a função u(x,t) é constante em todos os pontos dessa curva. Daí

$$u(x_j, t_n) = u_0(x_j - at_n).$$

Calculamos para o problema uma aproximação por diferenças finitas usando o

⁴A denominação CFL é uma homenagem aos seus autores: Courant, Friedrichs e Lewy.

esquema avançado no tempo e atrasado no espaço (FTBS)⁵

$$\frac{\Delta_{+t}U_j^n}{\Delta t} + a\frac{\Delta_{-x}U_j^n}{\Delta x} = 0. {(2.38)}$$

Então, o valor da aproximação no nível de tempo t_{n+1} será dada por

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \nu (U_j^n - U_{j-1}^n), \tag{2.39}$$

onde $\nu = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

Fica claro que o valor de U_j^{n+1} depende dos valores de U em dois pontos sobre o nível anterior de tempo t_n estes por sua vez dependem cada um de outros dois pontos sobre o nível de tempo t_{n-1} , e assim por diante.

Generalizando, observa-se que o valor de U_j^{n+1} depende de todos os pontos contidos no triângulo de vértices $(x_j, t_{n+1}), (x_j, 0), (x_{j-n-1}, 0)$. Este triângulo é chamado de domínio de dependência de U_j^{n+1} , ou, do ponto (x_j, t_{n+1}) , para esse esquema numérico em particular.

Por outro lado, a solução do problema (2.1) no ponto (x_j, t_n) depende apenas dos valores de u(x,t) na curva característica $x_j - at_n$. Essa curva é chamada de domínio de dependência do ponto (x,t).

Segundo Thomas [17], "o domínio de dependência do ponto (x,t) é o conjunto de todos os pontos de que a solução do problema no ponto (x,t) é dependente".

Para outros tipos de equações diferenciais parciais o domínio de dependência da equação é modificado.

Dadas as definições de domínios de dependência, podemos enunciar a condição CFL que segundo as palavras de K. W. Morton [13]:

"A condição CFL diz que para um esquema ser *convergente* o domínio de dependência da equação diferencial parcial deve estar contido no domínio de dependência do esquema numérico".

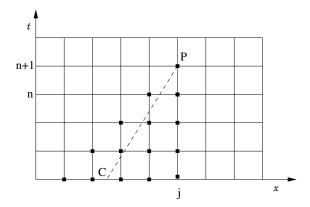


Figura 2.4: Stencil do esquema FTBS em que a condição CFL é satisfeita. Linha tracejada representa uma curva característica.

Demonstração: De fato, vamos supor que a condição CFL não seja satisfeita, Figura 2.5. Isto implica que existe pelo menos um ponto Q que pertence ao domínio de dependência da equação diferencial, mas não está no domínio de dependência do esquema numérico. Observa-se que quando calculamos a solução numérica no ponto P, o esquema não "vê" o ponto Q, porém quando determinamos a solução analítica em P, a equação diferencial através da curva característica que passa por P "vê" o ponto Q. Portanto, exceto na fronteira, numa pequena vizinhança do ponto Q, pequena bastante para que não intercepte o domínio de dependência numérico, será impossível que a solução numérica convirja para a solução analítica no ponto P, quando Δt e Δx se aproximarem de zero. Logo, se o ponto P convergir para a solução analítica da equação a condição CFL será satisfeita.

Neste exemplo, a condição CFL nos mostra que se a < 0, o esquema FTBS não pode convergir para a solução exata, uma vez que a curva característica PQ de cada ponto não estará contida no domínio de dependência numérico, veja na Figura 2.5.

⁵O termo FTBS é a abreviatura de Forward in Time, Backward in Space.

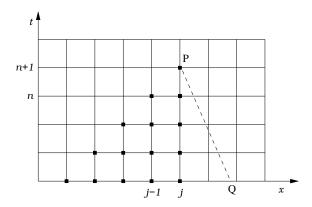


Figura 2.5: Stencil de um esquema em que a condição CFL não é satisfeita. Linha tracejada representa uma curva característica.

Uma consequência importante da condição CFL na solução do problema pelo esquema FTBS, com a > 0, é que os pontos $P(x_j, t_{n+1})$ e $S(x_s, t_n)$ pertencem a mesma curva característica X = at + C, ver Figura 2.6. Assim,

$$\begin{cases} x_s = at_n + C \\ x_j = at_{n+1} + C, \end{cases}$$
 (2.40)

que implica em

$$x_j - x_s = a\Delta t. (2.41)$$

Como, por hipótese,

$$x_{j-1} \le x_s \le x_j. \tag{2.42}$$

Obtemos das relações (2.41) e (2.42)

$$\Delta x > a\Delta t > 0$$
,

que resulta em

$$0 \le a \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1. \tag{2.43}$$

Então, pela condição CFL, a desigualdade (2.43) é condição necessária para que o esquema FTBS seja convergente para o problema dado pela equação (2.1).

Podemos concluir com um raciocínio análogo para um esquema FTFS, com a<0, que a condição necessária para convergência é

$$-1 \le a \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 0. \tag{2.44}$$

Das desigualdades (2.43) e (2.44) é definido o valor

$$\nu = |a| \frac{\Delta t}{\Delta x} \tag{2.45}$$

que é chamado de número CFL [17] ou número de Courant para equação de advecção.

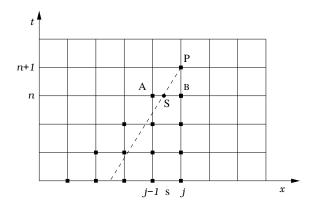


Figura 2.6: Stencil de uma esquema FTBS com os pontos $A(x_{j-1}, t_n)$, $B(x_j, t_n)$, $S(x_s, t_n)$ e $P(x_j, t_{n+1})$. Linha tracejada representa uma curva característica.

2.4 Propriedades dos métodos de diferenças

Nesta seção apresentaremos as definições das propriedades de *erro de trunca*mento, consistência, convergência e estabilidade para comparar os esquemas de diferenças. **Definição 2.4.1** O erro de truncamento, T(x,t), é a diferença entre os dois lados da equação discretizada, quando a aproximação U_j^n é substituída pela solução exata $u(x_j,t_n)$ da equação diferencial em qualquer ponto distante da fronteira.

Em relação, ao esquema (2.39) definimos o erro de truncamento da seguinte forma

$$T(x,t) = \frac{\Delta_{+t}u(x,t)}{\Delta t} + a\frac{\Delta_{-x}u(x,t)}{\Delta x}.$$
 (2.46)

Usando a expansão de Taylor para expressar o erro de truncamento temos

$$T(x,t) = \frac{\left(u_t \Delta t + u_{tt} \frac{\Delta t^2}{2!} + u_{ttt} \frac{\Delta t^3}{3!} + \cdots\right)}{\Delta t} + a \frac{\left(u_x \Delta x - u_{xx} \frac{\Delta x^2}{2!} + u_{xxx} \frac{\Delta x^3}{3!} - \cdots\right)}{\Delta x},$$

$$(2.47)$$

daí,

$$T(x,t) = (u_t + au_x) + \frac{1}{2} (u_{tt}\Delta t - au_{xx}\Delta x) + \frac{1}{6} (u_{ttt}\Delta t^2 + au_{xxx}\Delta x^2) + \cdots, (2.48)$$

como u satisfaz a equação diferencial, ou seja, $u_t + au_x = 0$ temos

$$T(x,t) = \frac{1}{2} (u_{tt} \Delta t - a u_{xx} \Delta x) + \frac{1}{6} (u_{ttt} \Delta t^2 + a u_{xxx} \Delta x^2) + \cdots, \qquad (2.49)$$

onde os termos $\frac{1}{2}(u_{tt}\Delta t - au_{xx}\Delta x)$ são chamados de parte principal do erro de truncamento.

É conveniente truncarmos a série (2.49) pelo Teorema de Taylor introduzindo o termo do resto. Assim,

$$\Delta_{+t}u(x,t) = u(x,t+\Delta t) - u(x,t) = u_t \Delta t + \frac{1}{2}u_{tt}(x,\gamma_1)\Delta t^2,$$
 (2.50)

$$\Delta_{-x}u(x,t) = u(x,t) - u(x - \Delta x, t) = u_x \Delta x - \frac{1}{2}u_{xx}(\gamma_2, t)\Delta x^2,$$
 (2.51)

onde $\gamma_1 \in (t, t + \Delta t)$ e $\gamma_2 \in (x - \Delta x, x)$

Assim, a expressão (2.49) torna-se

$$T(x,t) = \frac{1}{2} \left(u_{tt}(x,\gamma_1) \Delta t - a u_{xx}(\gamma_2,t) \Delta x \right). \tag{2.52}$$

Da equação (3.1) $u_t = -au_x$, com a constante. Se derivarmos em relação a t, temos $u_{tt} = -a(u_x)_t = -a(u_t)_x$. Logo,

$$u_{tt} = -a(-au_x)_x = a^2 u_{xx}. (2.53)$$

Com as expressões (2.53) e (2.52) conclui-se que

$$T(x,t) = \frac{1}{2} \left(a^2 u_{xx} \Delta t - a u_{xx} \Delta x \right) = -\frac{1}{2} a \Delta x u_{xx} (1 - \nu), \qquad (2.54)$$

 $com \ \nu = a \frac{\Delta t}{\Delta x}.$

O resultado acima servirá para mostrar outra propriedade dos métodos de diferenças a consistência.

Definição 2.4.2 Dizemos que um esquema é consistente se

$$T(x,t) \to 0 \quad quando \quad \Delta x, \Delta t \to 0, \quad \forall (x,t) \in (0,x_J) \times [0,t_F].$$
 (2.55)

Isso significa que num esquema consistente à medida que o tamanho da malha diminui com uma relação entre Δx e Δt , o erro de truncamento tende a zero. Nesse caso, pela condição CFL a condição é $\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{a}$.

Observamos que pelo erro de truncamento (2.54) o esquema dado em (2.39) é consistente, pois quando

$$\Delta x, \Delta t \to 0$$
 implies $T(x, t) \to 0.$ (2.56)

Outra propriedade importante para a comparação dos esquemas de diferenças é a convergência.

Definição 2.4.3 Considerando um refinamento das duas dimensões tais que Δt e Δx tendem para zero. Dizemos que o esquema é convergente se para algum ponto fixo (x^*, t^*)

$$U_j^n \to u(x^*, t^*) \quad quando \quad x_j \to x^* \quad e \quad t_n \to t^*,$$
 (2.57)

com (x^*, t^*) pertencente ao domínio $(0, x_J) \times (0, t_F)$.

Isso significa que um esquema é convergente se, quando a malha de discretização se aproximar de zero, a solução numérica tender a solução exata do problema.

Vamos agora provar que o esquema (2.39) do problema (2.13)–(2.15) é convergente para a>0 considerando um caminho de refinamento das malhas tal que $\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{a}$.

Primeiramente, definimos o erro U-u, denotado por e, na aproximação do valor na equação discretizada pelo valor da função no ponto (x_j, t_n) por

$$e_j^n = U_j^n - u(x_j, t_n).$$
 (2.58)

Por outro lado, multiplicando por Δt a equação (2.46) temos

$$u_{j}^{n+1} = u_{j}^{n} - a \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u_{j}^{n} - u_{j-1}^{n} \right) + \Delta t T_{j}^{n}$$

$$= u_{j}^{n} (1 - \nu) + \nu u_{j-1}^{n} + \Delta t T_{j}^{n}, \qquad (2.59)$$

onde T_j^n representa o erro de truncamento no ponto (x_j, t_n) .

Das expressões (2.58) e (2.59) obtemos

$$e_{j}^{n+1} = U_{j}^{n+1} - u_{j}^{n+1}$$

$$= \left[(1 - \nu)U_{j}^{n} + \nu U_{j-1}^{n} \right] - \left[(1 - \nu)u_{j}^{n} + \nu u_{j-1}^{n} + \Delta t T_{j}^{n} \right]$$

$$= (1 - \nu)e_{j}^{n} + \nu e_{j-1}^{n} - \Delta t T_{j}^{n}.$$
(2.60)

Na condição de contorno temos $e_0^n = 0$, com a > 0.

Seja T o limite superior para o erro de truncamento em toda malha de pontos, isto é, $T_j^n \leq T$, para $n \geq 0$, e E^n o erro máximo num passo do tempo n, ou seja, $E^n := \max |e_j^n|$, com $j = 0, 1, \dots, J$. Assim, podemos escrever de (2.60) a desigualdade

$$|e_j^{n+1}| \le |(1-\nu)E^n + \nu E^n| + \Delta t |T_j^n|$$

$$\le |(1-\nu)|E^n + |\nu|E^n + \Delta t T.$$
(2.61)

Num caminho de refinamento da malha que satisfaça $0 \le \nu \le 1$, os coeficientes dos termos e^n do lado direito de (2.60) são ambos não-negativos e sua soma é igual a

um. Dessa forma podemos omitir os sinais dos módulos na inequação (2.61) ficando

$$\left| e_j^{n+1} \right| \le (1 - \nu)E^n + \nu E^n + \Delta t T^n$$

$$= E^n + \Delta t T. \tag{2.62}$$

Se (2.62) vale para e_j^{n+1} qualquer, valerá para $E_j^{n+1}.$ Assim,

$$E^{n+1} \le E^n + \Delta t T \tag{2.63}$$

para todo j, n no domínio.

Concluímos de (2.63) que

$$E^{n} \leq E^{n-1} + \Delta t T$$

$$\leq E^{n-2} + 2\Delta t T$$

$$\vdots$$

$$\leq E^{n-(n-1)} + (n-1)\Delta t T$$

$$\leq E^{0} + n\Delta t T.$$

Assim,

$$E^n \le E^0 + n\Delta tT.$$

Temos da condição inicial $U_j^0=u^0(x_j)$ que resulta $E^0=0$. Logo, $E^n\leq n\Delta tT$. E como $n\Delta t\leq t_F$, conclui-se que

$$E^n < t_F T$$
.

Mostramos que com o refinamento das malhas o erro máximo E^n é sempre limitado. Consequentemente, a solução numérica tende a solução exata do problema, desde que a condição $0 \le \nu \le 1$ seja satisfeita. Este resultado é suficiente para provar a convergência desse esquema de diferença, com a > 0.

Para esse exemplo provar a convergência não foi uma tarefa tão difícil, porém para outras EDP's a prova torna-se bem mais trabalhosa. Veremos mais a frente outra forma de demonstrar que um esquema é convergente.

Apresentaremos em seguida a propriedade de estabilidade de um esquema de diferenças. O objetivo é enunciar um teorema no qual um esquema consistente é convergente se, e somente se, é estável.

Os esquemas que tratamos nesse estudo são esquemas de diferenças de dois níveis explícitos

$$U^{n+1} = BU^n, \qquad n \le 0,$$

onde B é um operador linear.

Definição 2.4.4 O esquema de diferença 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

$$||U^n|| \le Ke^{\beta t}||U^0||, \tag{2.64}$$

para $0 \le t = n\Delta t$, $0 \le \Delta x \le \Delta x_0$ e $0 \le \Delta t \le \Delta t_0$.

Segundo Thomas [17], "um esquema de diferenças é estável se pequenos erros nas condições iniciais causam pequenos erros na solução".

Exemplo 2.4 Discussão sobre a estabilidade do esquema

$$U_i^{n+1} = (1+\nu)U_i^n - \nu U_{i+1}^n \tag{2.65}$$

para a equação $u_t + au_x = 0$, com a < 0.

Notamos que

$$\begin{split} \sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_{j}^{n+1}|^{2} &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} |(1+\nu) U_{j}^{n} - \nu U_{j+1}^{n}|^{2} \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left(|1+\nu|^{2} |U_{j}^{n}|^{2} - 2|1+\nu||U_{j}^{n}||\nu||U_{j+1}^{n}| + |\nu|^{2} |U_{j+1}^{n}|^{2} \right) \\ &\leq \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left(|1+\nu|^{2} |U_{j}^{n}|^{2} + 2|1+\nu||U_{j}^{n}||\nu||U_{j+1}^{n}| + |\nu|^{2} |U_{j+1}^{n}|^{2} \right) \end{split}$$

 $pela\ designal da de\ 2ab \le a^2 + b^2\ temos$

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j^{n+1}|^2 \leq \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left(|1+\nu|^2 |U_j^n|^2 + |1+\nu| |\nu| \left(|U_j^n|^2 + |U_{j+1}^n|^2 \right) + |\nu|^2 |U_{j+1}^n|^2 \right).$$

Através de uma substituição de variável (z = j + 1) podemos concluir que

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j^n|^2 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_{j+1}^n|^2.$$
 (2.66)

Portanto, pela relação (2.66)

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j^{n+1}|^2 \le \sum_{j=-\infty}^{\infty} (|1+\nu|^2 + 2|1+\nu||\nu| + |\nu|^2) |U_j^n|^2
= (|1+\nu| + |\nu|)^2 \sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j^n|^2.$$
(2.67)

Logo,

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j^{n+1}| \le (|1+\nu|+|\nu|) \sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j^n|.$$
 (2.68)

A expressão acima em termos da norma l_2 é

$$||U^{n+1}||_2 \le ||B|| ||U^n||_2, \tag{2.69}$$

onde
$$||U||_2 = \sqrt{\sum_{j=-\infty}^{\infty} |U_j|^2} e ||B|| = |1 + \nu| + |\nu|.$$

Por outro lado.

$$U^{n} = BU^{n-1} = B(BU^{n-2}) = \dots = B^{n}U^{0}.$$
 (2.70)

De (2.70) temos

$$||U^{n+1}||_2 < ||B^{n+1}|| ||U^0||_2, \tag{2.71}$$

comparando a relação (2.71) com a definição de estabilidade (2.64), com $\beta = 0$, devemos encontrar uma constante K tal que $||B^{n+1}|| \leq K$. Para isso vamos restringir ν de tal modo que $||B|| \leq 1$. Isto implica que

$$|1 + \nu| + |\nu| \le 1. \tag{2.72}$$

Como por hipótese $\nu \leq 0$, pois a < 0 temos $|\nu| = -\nu$ e a relação (2.72) torna-se

$$|1 + \nu| \le 1 + \nu,\tag{2.73}$$

donde concluímos que $\nu \geq -1$. Logo, a condição de estabilidade para o esquema FTFS para a equação $u_t + au_x = 0$ é dada por $-1 \leq \nu \leq 0$.

Apresentaremos um resultado importante para provar a convergência de um esquema de diferenças, o $Teorema\ de\ Lax^6$. Ele relaciona os conceitos de consistência, estabilidade e convergência para um método de diferenças, num problema bemposto. Um problema bem-posto tem solução e esta é única, sem saltos consideráveis entre as informações e os resultados (estabilidade).

Peter D. Lax percebeu que para provar a convergência, poderia separar tal demonstração em duas partes verificando primeiramente a consistência e, em seguida, a estabilidade de um esquema.

Teorema 2.4.5 (Teorema de equivalência de Lax) Para um esquema de diferenças finitas de dois níveis, consistente, para um problema de valor inicial linear bem-posto, a estabilidade do esquema é condição necessária e suficiente para a convergência.

Este teorema assumiu uma forte influência nas demonstrações de convergência para esquemas de dois níveis, pois a partir dele, criou-se uma outra forma de demonstrar que um esquema consistente é convergente, sendo suficiente provar que ele é estável. A prova desse teorema pode ser encontrada nas referências [13], [14] ou [17].

⁶O teorema de Lax foi formulado por Peter D. Lax em 1953.

Capítulo 3

Comparações de métodos de diferenças finitas

Neste capítulo abordaremos os métodos de diferenças finitas *upwind*, de *Lax-Friedrichs* e de *Lax-Wendroff*. Enfatizaremos o estudo da análise de Fourier para comparar as soluções numéricas obtidas em relação as propriedades de amplitude, dissipação e dispersão de cada um desses métodos.

Iniciaremos descrevendo o método *upwind* e um exemplo que será usado nas seções seguintes como plataforma de comparação entre os métodos. Por último, apresentaremos outro exemplo que será resolvido com os três métodos e faremos alguns comentários. Para mais detalhes recomenda-se [6], [13], [14] e [17].

Os exemplos citados nesta seção são da forma da equação de advecção que reescrevemos aqui:

$$u_t + au_x = 0$$
, para $0 < x < x_J$, $t > 0$, (3.1)

$$u(x,0) = g_1(x), \quad \text{para} \quad 0 \le x \le x_J,$$
 (3.2)

$$u(0,t) = g_2(t), t \ge 0, com g_1(0) = g_2(0).$$
 (3.3)

3.1 Método upwind

Estudaremos aqui o *método upwind*¹ para a equação hiperbólica (3.1) e um exemplo de aplicação na resolução numérica de um problema.

Vimos na Seção 2.4 que o esquema FTFS é estável, com a<0, desde que $-1 \le \nu \le 0$. E que o esquema FTBS, com a>0, é estável, contanto que $0 \le \nu \le 1$. Nesse caso, ambos são convergentes pelo Teorema de Lax.

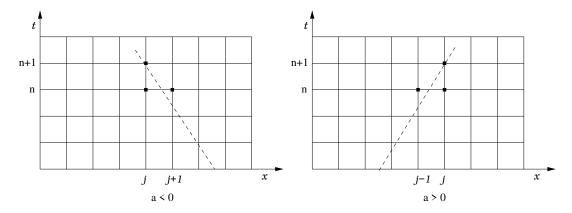


Figura 3.1: Stencil do esquema *upwind*. Linha tracejada representa uma curva característica.

Para construir um método que seja estável para a qualquer, usamos os esquemas estáveis FTFS, com a < 0 e FTBS, com a > 0, e definimos o método upwind como:

$$U_j^{n+1} = \begin{cases} U_j^n - \nu \Delta_{+x} U_j^n, & \text{se } a < 0, \\ U_j^n - \nu \Delta_{-x} U_j^n, & \text{se } a > 0, \end{cases}$$
 (3.4)

onde $\nu = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$. Observe que o esquema acima também pode ser escrito na forma

$$U_j^{n+1} = \begin{cases} (1+\nu) U_j^n - \nu U_{j+1}^n, & \text{se } a < 0, \\ (1-\nu) U_j^n + \nu U_{j-1}^n, & \text{se } a > 0. \end{cases}$$
(3.5)

¹ *Upwind*, do inglês, significa "a favor do vento".

Pela análise de estabilidade apresentada no Capítulo 2 podemos afirmar que o esquema upwind, aplicado na equação hiperbólica (3.1), satisfaz a condição CFL, desde que Δt e Δx satisfaçam a desigualdade $|a|\Delta t \leq \Delta x$, ou ainda $|\nu| \leq 1$, veja Figura 3.1.

Exemplo 3.1 (Esquema numérico) Vamos utilizar o esquema upwind para determinar soluções numéricas da equação

$$u_t + u_x = 0, \quad x \ge 0, \quad t \ge 0,$$
 (3.6)

com a condição inicial

$$u(x,0) = \begin{cases} 10x - 2, & se \quad 0.2 \le x < 0.3, \\ 4 - 10x, & se \quad 0.3 \le x \le 0.4, \\ 0, & se \quad x < 0.2 \text{ ou } x > 0.4, \end{cases}$$
(3.7)

e a condição de fronteira

$$u(0,t) = 0. (3.8)$$

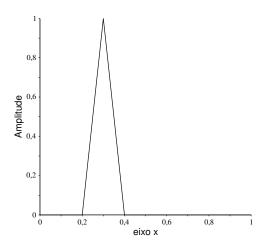


Figura 3.2: Condição inicial do Exemplo 3.1.

A solução exata de (3.6)–(3.8) é a translação do gráfico da função chapéu (condição inicial) para a direita.

As soluções numéricas serão dadas na região do domínio discretizado $[0, 2] \times [0, 1]$. Para resolver numericamente esse problema utilizamos a rotina *upwind* implementada no Octave, veja apêndice. Exibiremos três experimentos numéricos, obtidos com o emprego dos valores de Δx e Δt , apresentados na Tabela 3.1.

Δx	Δt	ν
0.010	0.010	1.000
0.010	0.005	0.500
0.020	0.010	0.500

Tabela 3.1: Valores de Δx , Δt e ν utilizados no Exemplo 3.1.

Observe que a condição CFL é satisfeita em todo os três experimentos, o que nos garante a estabilidade e, portanto, a convergência do esquema.

Notamos que apesar da convergência do esquema há uma perda de amplitude em relação a solução exata, veja Figura 3.3. Observamos que para os valores de $\nu=0.5$ os resultados numéricos foram distintos e que para $\Delta x=0.02$ e $\Delta t=0.010$ há um forte amortecimento e uma maior dispersão da solução.

Na próxima seção vamos estudar conceitos para justificar o comportamento das soluções numéricas apresentadas nesse exemplo.

3.2 Análise de Fourier

Nesta seção apresentaremos uma análise de Fourier para os métodos de diferenças finitas aplicados a equação hiperbólica (3.1). Estudaremos a dissipação e a dispersão de um esquema. E ainda, abordaremos a condição de von Neumann para estabilidade de um esquema.

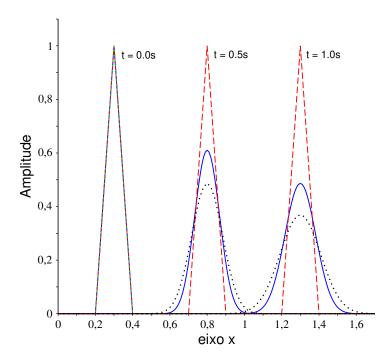


Figura 3.3: Solução numérica de (3.6)–(3.8) usando o esquema upwind em t=0.0s, t=0.5s e t=1.0s. (Linha tracejada: Solução obtida para $\Delta x=0.01$, $\Delta t=0.01$; contínua: Solução obtida para $\Delta x=0.01$, $\Delta t=0.005$; pontilhada: Solução obtida para $\Delta x=0.02$, $\Delta t=0.01$.)

3.2.1 Análise da equação diferencial

Devido as equações hiperbólicas descreverem fenômenos de propagação de uma onda, a análise de Fourier se transforma numa ferramenta eficaz para o estudo de métodos de diferenças para estas equações.

Veja que o modo de Fourier

$$v(x,t) = e^{i(kx+\omega t)} \tag{3.9}$$

é a solução da equação diferencial (3.1). De fato, determinando as derivadas parciais v_t e v_x temos

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \omega v(x, t)i$$
 e $\frac{\partial v}{\partial x} = kv(x, t)i$. (3.10)

Substituindo as expressões acima em (3.1), obtemos

$$u_t + au_x = i(\omega + ak)v(x,t) = 0$$
(3.11)

dado que ω e k satisfaçam a expressão

$$\omega = -ak, \tag{3.12}$$

conhecida como relação de dispersão.

O modo de Fourier (3.9) descreve uma onda propagando-se no espaço. As quantidades ω e k são interpretadas como a freqüência angular e o número de onda, respectivamente. A grandeza $kx + \omega t$ é denominada de fase, medida em radianos.

Observamos que para o modo de Fourier, a fase no tempo $t+\Delta t$ é dada por $kx+\omega(t+\Delta t)$. Isso significa, que num passo de tempo Δt , a alteração na fase é de $\omega \Delta t = -ak\Delta t$.

Repare também que o modo de Fourier não sofre alteração em sua amplitude uma vez que $|e^{i(kx+\omega t)}|=1$. Nesse caso, dizemos que a equação (3.1) é não dissipativa. Quando ocorre a dissipação das soluções há uma diminuição da amplitude da curva também denominada de amortecimento. Assim, dizemos que o modo (3.9) é não amortecido.

A velocidade da onda é a velocidade com que um ponto se desloca na onda, tal que a fase permaneça constante. Isso implica

$$kx + \omega t = c, (3.13)$$

onde c é uma constante arbitrária.

Observe que derivando (3.13) em relação ao tempo t temos

$$k\frac{dx}{dt} + \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dx}{dt} = -\frac{\omega}{k}.$$
 (3.14)

Assim, a velocidade da onda é dada por $-\frac{\omega}{k}$.

Quando o modo de Fourier de diferentes números de onda k se propagam com diferentes velocidades dizemos que há dispersão das soluções da equação diferencial. Para a equação hiperbólica do nosso exemplo, o modo (3.9) é não dispersivo, pois $-\frac{\omega}{k} = a$ é constante.

Para simplificar usando a relação de dispersão (3.12) a solução de (3.9) torna-se

$$u(x,t) = e^{ik(x-at)}. (3.15)$$

3.2.2 Análise do esquema numérico

Nesta seção estudaremos um modo de Fourier solução do esquema FTBS na equação (3.1).

O modo de Fourier²

$$U_j^n = \lambda^n e^{ik(j\Delta x)},\tag{3.16}$$

onde λ complexo, é uma solução do esquema FTBS $\left[U_j^{n+1} = (1-\nu)\,U_j^n + \nu U_{j-1}^n\right]$, a>0, para (3.1), desde que

$$\lambda^{n+1}e^{ik(j\Delta x)} = (1-\nu)\,\lambda^n e^{ik(j\Delta x)} + \nu\lambda^n e^{ik((j-1)\Delta x)},$$

que implica em

$$\lambda = 1 - \nu + \nu e^{-ik\Delta x}.\tag{3.17}$$

O número λ depende de k e, por isso, escrevemos $\lambda = \lambda(k)$.

Tomando $\xi = k\Delta x$ podemos escrever λ em função de ξ , ou seja,

$$\lambda(\xi) = 1 - \nu + \nu e^{-i\xi}$$

 $^{^{2}}$ O valor de n do lado esquerdo de (3.16) representa o passo no nível n do tempo, enquanto do lado direito representa a n-ésima potência de λ .

Em (3.16) é fácil ver que

$$U_j^{n+1} = \lambda U_j^n. (3.18)$$

O número $\lambda(k)$ é chamado de fator de amplificação do modo, pois representa a razão com que a amplitude da solução do esquema aumenta ou diminui quando avançamos um passo no tempo.

Já verificamos que esse esquema é consistente e estável e, portanto, convergente, contanto que

$$0 \le \nu \le 1. \tag{3.19}$$

Observe que manipulando a desigualdade acima obtemos

$$1 - 4\nu \sin^2 \frac{\xi}{2} \le 1 + 4\nu(\nu - 1)\sin^2 \frac{\xi}{2} \le 1. \tag{3.20}$$

Donde podemos concluir

$$1 - 4\nu(1 - \nu)\sin^2\frac{\xi}{2} \le 1. \tag{3.21}$$

Por outro lado,

$$|\lambda(k)|^2 = [(1-\nu) + \nu\cos\xi]^2 + [\nu\sin\xi]^2 = 1 - 2\nu(1-\nu)(1-\cos\xi).$$
 (3.22)

Usando a identidade $1-\cos\theta=2\sin^2\frac{\theta}{2}$ em (3.22), encontramos

$$|\lambda(k)|^2 = 1 - 4\nu(1 - \nu)\sin^2\frac{\xi}{2}.$$
 (3.23)

Das expressões (3.21) e (3.23) concluímos que

$$|\lambda(k)|^2 \le 1.$$

Então, $0 \le \nu \le 1$ implica que $|\lambda(k)| \le 1$, para todo k.

O mesmo modo de Fourier (3.16) satisfaz o esquema FTFS, com a < 0, desde que

$$\lambda(k) = 1 + \nu - \nu e^{-ik\Delta x} \tag{3.24}$$

e seja válida a condição $|\lambda| \leq 1$ para que o esquema seja estável.

O enunciado que veremos agora nos fornece uma outra forma de verificar a estabilidade de um esquema de diferenças.

Teorema 3.2.1 Um esquema de diferenças finitas (com coeficientes constantes) é estável, se existem constantes positivas Δt_0 e Δx_0 tais que

$$|\lambda(k)| \le 1,\tag{3.25}$$

para todo $0 \le \Delta t \le \Delta t_0$ e $0 \le \Delta x \le \Delta x_0$.

Uma consequência do teorema é que a estabilidade de um esquema de diferenças se reduz a análise do fator de amplificação. A relação (3.25) é conhecida como condição de von Neumann³. A demonstração pode ser vista no livro do Thomas [17].

Pela expressão (3.18), o módulo de λ nos mostra o quanto a amplitude (amortecimento) da onda se altera no tempo t. Por outro lado, o argumento de λ no esquema é igual a fase para o modo de Fourier (3.16) e, assim, ele nos informa sobre a frequência que a onda se propaga. Portanto, vamos estudar e analisar o módulo e o argumento de λ de alguns métodos de diferenças finitas.

Note que o modo $U_j^n = \lambda^n e^{ik(j\Delta x)}$, com a>0, satisfaz o esquema upwind desde que $\lambda=1-\nu+\nu e^{-ik\Delta x}$. Isto nos leva a $|\lambda(k)|^2=1-4\nu(1-\nu)\sin^2\frac{\xi}{2}$. Nesse caso, observamos que quando $\nu\neq 1$ implica que $|\lambda|<1$, a amplitude é alterada, e o modo é considerado amortecido. Somente no caso de $\nu=1$ em que $|\lambda|=1$ o modo é não amortecido.

Por outro lado, o argumento de λ é dado por

$$\arg \lambda = \tan^{-1} \left[\frac{-\nu \sin \xi}{1 - \nu + \nu \cos \xi} \right] = -\tan^{-1} \left[\frac{\nu \sin \xi}{1 - \nu + \nu \cos \xi} \right]. \tag{3.26}$$

 $^{^3}$ O estudo de estabilidade de um esquema com o teorema (3.2.1) é chamado de análise de von Neumann.

Estamos interessados em avaliar arg λ quando ξ é pequeno, para mostrar como esses modos podem ser aproximados sobre a malha de pontos. Para isto será útil o seguinte resultado apresentado em p. 97 de [13]:

Lema 3.2.2 Se q possui uma expansão em potências de p da forma

$$q \sim c_1 p + c_2 p^2 + c_3 p^3 + c_4 p^4 + \cdots$$

 $quando\ p \rightarrow 0,\ ent \tilde{a}o$

$$\tan^{-1} q \sim c_1 p + c_2 p^2 + (c_3 - \frac{1}{3}c_1^3)p^3 + (c_4 - c_1^2 c_2)p^4 + \cdots$$

De fato, a hipótese $p \to 0$ garante o uso da série

$$\tan^{-1} x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \dots \quad para - 1 < x < 1.$$
 (3.27)

Assim,

$$\tan^{-1} q \sim \left(c_1 p + c_2 p^2 + c_3 p^3 + \cdots\right) - \frac{1}{3} \left(c_1 p + c_2 p^2 + c_3 p^3 + \cdots\right)^3 + \cdots$$
 (3.28)

Utilizamos o binômio de Newton em (3.28) e encontramos

$$\tan^{-1} q \sim c_1 p + c_2 p^2 + (c_3 - \frac{1}{3}c_1^3)p^3 + (c_4 - c_1^2 c_2)p^4 + (c_5 - c_1^2 c_3 - c_1 c_2^2 + \frac{1}{5}c_1^5)p^5 + \cdots$$
 (3.29)

Vamos agora determinar o argumento de λ . Para isso usaremos as séries

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots$$
 e $\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots$

para todo x real. Logo,

$$\arg \lambda = -\tan^{-1} \left[\frac{\nu \left(\xi - \frac{\xi^3}{3!} + \frac{\xi^5}{5!} - \frac{\xi^7}{7!} + \cdots \right)}{1 - \nu \left(\frac{\xi^2}{2!} - \frac{\xi^4}{4!} + \frac{\xi^6}{6!} - \cdots \right)} \right]. \tag{3.30}$$

A série

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \dots, \quad \text{para } |x| < 1, \tag{3.31}$$

faz com que (3.30) seja escrito como segue,

$$\arg \lambda = -\tan^{-1} \left[\nu \xi - \frac{1}{6} \nu (1 - 3\nu) \xi^3 + \frac{1}{120} \nu (1 - 15\nu + 30\nu^2) \xi^5 + \cdots \right]. \tag{3.32}$$

Para $\xi \to 0$ aplicamos o Lema 3.2.2 em (3.32) e encontramos

$$\arg \lambda = -\nu \xi \left[1 - \frac{1}{6} (1 - \nu)(1 - 2\nu) \xi^2 - \frac{1}{120} (1 - \nu)(1 - 2\nu)(12\nu^2 - 12\nu + 1) \xi^4 + \cdots\right].$$
(3.33)

O módulo (3.23) e o argumento (3.33) do fator de amplificação nos fazem concluir sobre o método upwind que: quando $\nu=1$ temos $|\lambda|=1$ e arg $\lambda\sim-\nu\xi$ que implica a solução numérica não apresenta dissipação, nem dispersão, nos dando a solução mais próxima do modo (3.9); para qualquer outro valor de ν aceitável, tal que $|\lambda|\leq 1$, o esquema possui um erro de amplitude, que de (3.23), é da ordem ξ^2 , num passo do tempo; já o erro de fase relativo ao observar (3.33), é da ordem de ξ^2 , sendo que o sinal depende do valor de ν ; observa-se ainda que esse erro vai evanescendo quando $\nu=\frac{1}{2}\left(\arg\lambda\sim-\frac{1}{2}\xi\right)$.

Vamos retornar ao Exemplo 3.1 para analisar o comportamento da solução numérica, quanto à dissipação e dispersão encontradas com o esquema upwind.

Determinamos os valores de $|\lambda|$ e arg λ para os dados da Tabela 3.1 e encontramos

$$0 < |\lambda_{\Delta x 0.02}| < |\lambda_{\Delta x 0.01}| < 1$$
 e $|arg\lambda_{0.02}| > |arg\lambda_{0.01}|$.

Os resultados confirmam que:

• Quando ν é constante, quanto mais próximo de 1 estiver o módulo de λ , menor será a dissipação;

• Quando ν é constante, quanto maior o valor do argumento de λ maior é a dispersão.

Vamos continuar resolvendo o Exemplo 3.1 para os valores da Tabela 3.2.

Δx	Δt	ν	$ \lambda ^2$	$arg \lambda$
0.01	0.002	0.20	$1 - 0.64\sin^2\frac{\xi}{2}$	$-0.2\xi \left(1 - 0.08\xi^2 + \cdots \right)$
0.01	0.005	0.50	$1-\sin^2\frac{\xi}{2}$	-0.5ξ
0.01	0.010	1.00	1	$-\xi$

Tabela 3.2: Valores de Δx , Δt , ν , $|\lambda|^2$ e arg λ utilizados no Exemplo 3.1 para o esquema upwind.

Observando os dados na Tabela 3.2 e os resultados na Figura 3.4, podemos afirmar que:

- \bullet Quando $\nu=1,$ a solução numérica está mais próxima da solução exata;
- Quanto mais próximo de 1 estiver o módulo de λ, menor será o amortecimento e a dissipação;
- Quanto maior o valor do argumento de λ , maior é a dispersão.

3.3 Método de Lax-Friedrichs

Aqui trataremos do método de *Lax-Friedrichs* apresentando sua fórmula de diferenças. Resolveremos o Exemplo 3.1 para este método e faremos a análise de Fourier.

O esquema de diferenças finitas Lax-Friedrichs foi desenvolvido por Peter David Lax e Kurt Otto Friedrichs e consiste em discretizar a equação diferencial parcial

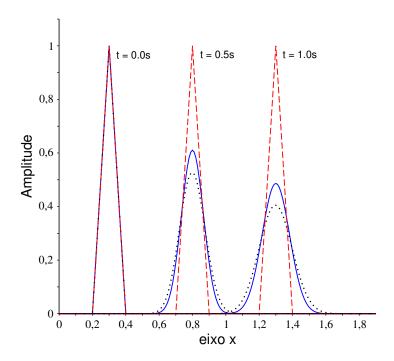


Figura 3.4: Solução numérica de (3.6)–(3.8) usando o esquema upwind em t=0.0s, t=0.5s e t=1.0s. (Linha tracejada: solução obtida para $\Delta t=0.010$, $\nu=1.0$; contínua: solução obtida para $\Delta t=0.005$, $\nu=0.5$; pontilhada: solução obtida para $\Delta t=0.002$, $\nu=0.2$.)

com uma diferença avançada no tempo, usando a média para determinar U_j^n , e uma diferença centrada no espaço, ver Figura 3.5. Assim, desenvolvemos a aproximação para a equação (3.1) obtendo

$$\frac{U_j^{n+1} - \tilde{U}_j^n}{\Delta t} + a \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0, \tag{3.34}$$

onde $\tilde{U}_j^n \equiv \frac{U_{j-1}^n + U_{j+1}^n}{2}$. Manipulando a equação de diferença anterior, temos

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2}(1+\nu)U_{j-1}^n + \frac{1}{2}(1-\nu)U_{j+1}^n,$$
(3.35)

com erro da ordem de $\Delta t + \Delta x^2$.

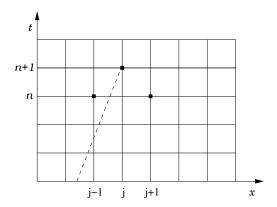


Figura 3.5: Stencil do esquema de Lax-Friedrichs com os pontos (x_{j-1}, t_n) , (x_{j+1}, t_n) e (x_j, t_{n+1}) . Linha tracejada representa uma curva característica.

Vamos calcular os valores do módulo e do argumento de λ , para interpretar através da análise de Fourier a aproximação numérica obtida pelo método.

Da mesma forma que deduzimos algebricamente a condição CFL para o método upwind, determinamos que no esquema de Lax–Friedrichs a condição é $|\nu| \leq 1$.

O modo de Fourier (3.16) satisfaz o esquema numérico, então o fator de amplificação necessário no estudo da estabilidade é dado por

$$\lambda = \frac{1}{2}(1-\nu)e^{i\xi} + \frac{1}{2}(1+\nu)e^{-i\xi} = \cos\xi - i\nu\sin\xi.$$
 (3.36)

Logo, o módulo de λ é dado por

$$|\lambda|^2 = \cos^2 \xi + \nu^2 \sin^2 \xi$$

= 1 - (1 - \nu^2) \sin^2 \xi. (3.37)

Para que o esquema seja estável devemos ter $|\lambda| \le 1$, ou seja,

$$1 - (1 - \nu^2)\sin^2 \xi \le 1 \quad \Rightarrow \quad (1 - \nu^2)\sin^2 \xi \ge 0. \tag{3.38}$$

Como $\sin^2 \xi \ge 0$, temos que a desigualdade anterior implica que

$$(1 - \nu^2) \ge 0 \quad \Rightarrow \quad |\nu| \le 1. \tag{3.39}$$

Assim, a condição de estabilidade desse esquema é $|\nu| \leq 1$, que também atende a condição CFL. Portanto, pelo teorema de Lax, se $|\nu| \leq 1$ este esquema é convergente.

Vamos determinar o valor do argumento de λ . Veja que

$$\arg \lambda = -\tan^{-1} \left[\frac{\nu \sin \xi}{\cos \xi} \right], \tag{3.40}$$

$$\frac{\nu \sin \xi}{\cos \xi} = \frac{\nu \left(\xi - \frac{\xi^3}{6} + \cdots\right)}{1 - \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi^4}{24} + \cdots\right)}$$

$$= \nu \left(\xi - \frac{\xi^3}{6} + \cdots\right) \left[1 + \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi^4}{24} + \cdots\right) + \cdots\right]$$

$$= \nu \xi + \frac{1}{3} \nu \xi^3 + \cdots$$
(3.41)

Logo, aplicamos o Lema 3.2.2 em (3.40) e obtemos

$$\arg \lambda = -\nu \xi - \left(\frac{1}{3}\nu - \frac{1}{3}\nu^{3}\right)\xi^{3} - \cdots$$

$$= -\nu \xi \left[1 + \frac{1}{3}(1 - \nu)(1 + \nu)\xi^{2} + \cdots\right].$$
(3.42)

Vamos comentar o método Lax–Friedrichs baseado nas informações do fator de amplificação λ .

Em relação ao $|\lambda|$, para o mesmo ν , temos que o do esquema upwind está mais próximo de 1 que o módulo de Lax-Friedrichs, com ξ pequeno. Isso pressupõe que esse esquema é mais amortecido. Por outro lado, para ξ pequeno, temos que $|\arg \lambda_{upwind}| \leq |\arg \lambda_{Lax-Friedrichs}|$. Essa comparação nos faz pensar que a dispersão é maior, para um mesmo tempo, no esquema Lax-Friedrichs.

Os comentários acima são confirmados através das aproximações numéricas do Exemplo 3.1, apresentadas nas Figuras 3.4 e 3.6.

As soluções para o Exemplo 3.1, aplicado ao método Lax-Friedrichs, foram determinadas com os dados da Tabela 3.3.

Δx	Δt	ν	$ \lambda ^2$	$\arg \lambda$
0.01	0.002	0.20	$1 - 0.96\sin^2\xi$	$-0.2\xi \left(1+0.32\xi^2+\cdots\right)$
0.01	0.005	0.50	$1 - 0.75\sin^2\xi$	$-0.5\xi \left(1+0.25\xi^2+\cdots\right)$
0.01	0.010	1.00	1	$-\xi$

Tabela 3.3: Valores de Δx , Δt , ν , $|\lambda|^2$ e arg λ utilizados no Exemplo 3.1 para o esquema de Lax–Friedrichs.

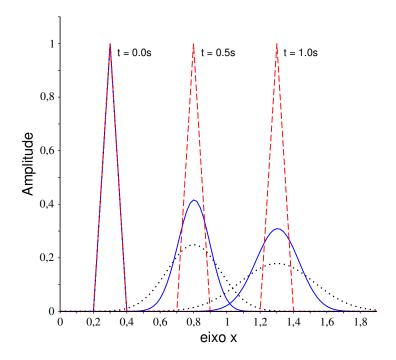


Figura 3.6: Solução numérica de (3.6)–(3.8) usando o esquema Lax–Friedrichs em t=0.0s, t=0.5s e t=1.0s. (Linha tracejada: solução obtida para $\Delta t=0.010$, $\nu=1.0$; contínua: solução obtida para $\Delta t=0.005$, $\nu=0.5$; pontilhada: solução obtida para $\Delta t=0.002$, $\nu=0.2$.)

3.4 Método de Lax-Wendroff

Nesta seção apresentaremos o esquema Lax—Wendroff, bem como analisaremos as condições de estabilidade, dispersão e dissipação desse esquema através da solução numérica do Exemplo 3.1.

A Figura 3.7 apresenta os pontos $A, B \in C$ que servirão para aproximar o valor de $U_S \equiv U_P$.

No esquema upwind, U_S era aproximado interpolando-se linearmente U_A e U_B . No método de Lax-Wendroff, U_S é aproximado por uma interpolação quadrática, utilizando-se U_A , U_B e U_C , ver Figura 3.7, onde encontramos a fórmula

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2}\nu(1+\nu)U_{j-1}^n + (1-\nu^2)U_j^n - \frac{1}{2}\nu(1-\nu)U_{j+1}^n.$$
 (3.43)

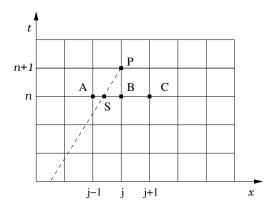


Figura 3.7: Stencil do Esquema de Lax-Wendroff com representação dos pontos $A(x_{j-1},t_n), B(x_j,t_n), C(x_{j+1},t_n)$ e $P(x_j,t_{n+1})$.

Este esquema foi estudado e aplicado pela primeira vez em 1960, por Peter David Lax e Burton Wendroff, em aproximações de leis de conservação com equações hiperbólicas [12]. Ele também pode ser obtido através da expansão de Taylor em

torno de (x_j, t_n) para u

$$u(x_j, t_{n+1}) = u(x_j, t_n) + \Delta t u_t(x_j, t_n) + \frac{\Delta t^2}{2!} u_{tt}(x_j, t_n) + \cdots$$
 (3.44)

Substituindo $u_t = -au_x$ e $u_{tt} = a^2u_{xx}$, obtemos

$$u(x_j, t_{n+1}) = u(x_j, t_n) - a\Delta t u_x(x_j, t_n) + a^2 \frac{\Delta t^2}{2!} u_{xx}(x_j, t_n) + \cdots$$
 (3.45)

Aproximando u_x por uma diferença centrada com passo $2\Delta x$,

$$u_x(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j+1}^n - U_j^n}{2\Delta x},$$

e u_{xx} por uma diferença de segunda ordem,

$$u_{xx}(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2},$$

obtemos o método de Lax-Wendroff

$$U_j^{n+1} = U_j^n - a\Delta t \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\Delta x} + a^2 \frac{\Delta t^2}{2!} \left(\frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right)$$
(3.46)

ou

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2}\nu(1+\nu)U_{j-1}^n + (1-\nu^2)U_j^n - \frac{1}{2}\nu(1-\nu)U_{j+1}^n,$$
 (3.47)

com erro da ordem de $\Delta t^2 + \Delta x^2$.

Vamos realizar a análise de Fourier deste esquema. Substituindo o modo de Fourier $U_j^n=\lambda^n e^{ij\xi}$ em (3.47), temos

$$\lambda = \frac{1}{2}\nu(1+\nu)e^{-i\xi} + (1-\nu^2) - \frac{1}{2}\nu(1-\nu)e^{i\xi}$$

$$= \frac{1}{2}\nu(1+\nu)(\cos\xi - i\sin\xi) + (1-\nu^2) - \frac{1}{2}\nu(1-\nu)(\cos\xi + i\sin\xi)$$

$$= (1-\nu^2 + \nu^2\cos\xi) - i\nu\sin\xi$$

$$= 1 - 2\nu^2\sin^2\frac{\xi}{2} - i\nu\sin\xi.$$
(3.48)

Para analisar a estabilidade desse esquema calculamos o módulo de λ

$$|\lambda|^{2} = \left[1 - 2\nu^{2} \sin^{2}\left(\frac{\xi}{2}\right)\right]^{2} + \left[\nu \sin \xi\right]^{2}$$

$$= 1 + 4\nu^{4} \sin^{4}\left(\frac{\xi}{2}\right) - 4\nu^{2} \sin^{2}\left(\frac{\xi}{2}\right) + 4\nu^{2} \sin^{2}\left(\frac{\xi}{2}\right) \cos^{2}\left(\frac{\xi}{2}\right)$$

$$= 1 - 4\nu^{2}(1 - \nu^{2}) \sin^{4}\left(\frac{\xi}{2}\right).$$
(3.49)

Para garantir que o esquema é estável podemos impor que $|\lambda(k)| \leq 1$, ou seja,

$$0 \le 1 - 4\nu^2 (1 - \nu^2) \sin^4 \frac{\xi}{2} \le 1, \tag{3.50}$$

que implica em

$$0 \le 4\nu^2 (1 - \nu^2) \sin^4 \frac{\xi}{2} \le 1. \tag{3.51}$$

A resolução de (3.51) nos dá $(1-\nu^2) \geq 0$, donde concluímos $|\nu| \leq 1$. Esse resultado abrange todo o intervalo permitido pela condição CFL para a convergência desse esquema.

Outra informação importante sobre o esquema é dada pelo argumento de λ que determinamos como sendo

$$\arg \lambda = -\tan^{-1} \left[\frac{\nu \sin \xi}{1 - \nu^2 + \nu^2 \cos \xi} \right]. \tag{3.52}$$

Utilizando as séries $\sin x = \cos x$ temos

$$\frac{\nu \sin \xi}{1 - \nu^2 + \nu^2 \cos \xi} \sim \frac{\nu \left(\xi - \frac{\xi^3}{3!} + \cdots\right)}{1 - \nu^2 \left(\frac{\xi^2}{2!} - \frac{\xi^4}{4!} + \cdots\right)}$$

$$= \nu \left(\xi - \frac{\xi^3}{3!} + \cdots\right) \frac{1}{1 - \nu^2 \left(\frac{\xi^2}{2!} - \frac{\xi^4}{4!} + \cdots\right)}$$

$$= \nu \left(\xi - \frac{\xi^3}{6} + \cdots\right) \left(1 + \nu^2 \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi^4}{24} + \cdots\right) + \cdots\right)$$

$$= \nu \xi + \left(\frac{\nu^3}{2} - \frac{\nu}{6}\right) \xi^3 + \cdots$$
(3.53)

Pelo Lema (3.2.2) em (3.52) encontramos

$$\arg \lambda = -\nu \xi \left[1 - \frac{1}{6} (1 - \nu)(1 + \nu) \xi^2 + \cdots \right]. \tag{3.54}$$

Exceto quando $\nu=1$, onde $|\lambda|=1$ e arg $\lambda\sim-\nu\xi$, que nos dá a solução do modo de Fourier, podemos afirmar que para $-1\leq\nu\leq1$: o módulo de λ , de (3.49), reescrito na forma

$$|\lambda|^2 = 1 - 4\nu^2(1 - \nu^2)(\frac{1}{16}\xi^4 - \frac{1}{2}\xi^3\tilde{\xi} + \frac{3}{2}\xi^2\tilde{\xi}^2 - 2\xi\tilde{\xi}^3 + \tilde{\xi}^4),$$

onde $\tilde{\xi} = \frac{\xi^3}{8.3!} - \frac{\xi^5}{32.5!} + \cdots$, nos mostra que o erro de amplitude, num passo do tempo, é da ordem de ξ^4 , com ξ pequeno; em relação aos esquemas *upwind* e de Lax–Friedrichs pressupõe-se que a dissipação da solução numérica é menor no Lax–Wendroff; o argumento de λ , de (3.54), nos diz que o erro de dispersão é da ordem de ξ^2 .

Agora vamos resolver o Exemplo 3.1 com o esquema de Lax-Wendroff utilizando os valores da Tabela 3.4.

Δx	Δt	ν	$ \lambda ^2$	$\arg \lambda$
0.01	0.002	0.20	$1 - 0.1532\sin^4\frac{\xi}{2}$	$-0.2\xi \left(1 - 0.16\xi^2 + \cdots\right)$
0.01	0.005	0.50	$1 - 0.75 \sin^4 \frac{\xi}{2}$	$-0.5\xi \left(1 - 0.125\xi^2 + \cdots \right)$
0.01	0.010	1.00	1	$-\xi$

Tabela 3.4: Valores de Δx , Δt , ν , $|\lambda|^2$ e arg λ utilizados no Exemplo 3.1 com o esquema de Lax–Wendroff.

As soluções numéricas em relação ao método de Lax-Wendroff são apresentadas na Figura 3.8. Aproveitamos para descrever algumas observações:

- Se $\nu = 1$, então a solução numérica está mais próxima da solução exata;
- Quando ν é constante, quanto mais próximo de 1 estiver o módulo de λ menor será a perda de amplitude e a dissipação;
- Quando ν é constante, quanto maior o valor do argumento de λ maior é a dispersão;

• A dissipação da soluções é menor no esquema de Lax-Wendroff do que nos outros dois esquemas.

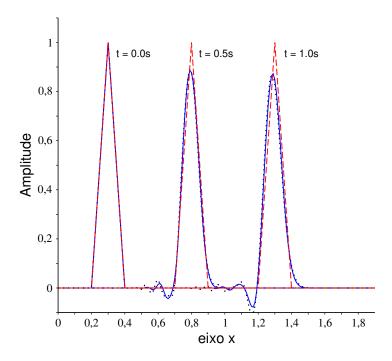


Figura 3.8: Solução numérica de (3.6)–(3.8) usando o esquema Lax–Wendroff em t=0.0s, t=0.5s e t=1.0s. (Linha tracejada: solução obtida para $\Delta t=0.010$, $\nu=1.0$; contínua: solução obtida para $\Delta t=0.005$, $\nu=0.5$; pontilhada: solução obtida para $\Delta t=0.002$, $\nu=0.2$.)

3.5 Comparação de métodos de diferenças finitas

Nosso objetivo nesta seção é resolver numericamente um exemplo aplicando os métodos de diferenças *upwind*, de Lax–Friedrichs e de Lax–Wendroff e comparando-os baseados na análise de Fourier.

Pela análise de Fourier $u(x,t)=e^{i(kx+\omega t)}$ é solução de (3.1), a>0, desde que

 $\omega=-ak$. A amplitude não é amortecida e a cada passo do tempo a fase é alterada por $-ak\Delta t$. Já a solução numérica é dada pelo modo de Fourier $U_j^n=\lambda^n e^{ik(j\Delta x)}$, onde λ é função de k, Δx e Δt . Em um passo do tempo o modo é multiplicado por λ . Segundo a condição de von Neumann, se $\lambda<1$ o modo é amortecido e estável.

Para os métodos estudados neste capítulo foram calculados os valores de $|\lambda|^2$ e arg λ que estão resumidos na Tabela 3.5.

	$ \lambda ^2$	$rg \lambda$
Upwind	$1 - 4\nu(1-\nu)\sin^2\frac{\xi}{2}$	$-\nu \xi [1 - \frac{1}{6}(1 - \nu)(1 - 2\nu)\xi^2 + \cdots]$
Lax-Friedrichs	$1 - (1 - \nu)(1 + \nu)\sin^2 \xi$	$-\nu \xi [1 + \frac{1}{3}(1 - \nu)(1 + \nu)\xi^2 + \cdots]$
Lax-Wendroff	$1 - 4\nu^2(1 - \nu)(1 + \nu)\sin^4\frac{\xi}{2}$	$-\nu \xi [1 - \frac{1}{6}(1 - \nu)(1 + \nu)\xi^2 + \cdots]$

Tabela 3.5: Valores de $|\lambda|^2$ e arg λ para os métodos upwind, Lax–Friedrichs e Lax–Wendroff.

Estudaremos agora um exemplo de uma equação de advecção onde a condição inicial é derivável em todos os seus pontos.

Exemplo 3.2 (Função suave) O problema em questão é solucionar numericamente a equação

$$u_t + 0.5u_x = 0, \quad x > 0, \quad t > 0,$$
 (3.55)

com a condição inicial

$$u(x,0) = \exp\left[-11(5x - 1.1)^2\right] \tag{3.56}$$

e a condição de contorno

$$u(0,t) = 0. (3.57)$$

A solução exata de (3.55)-(3.57), veja Figura 3.10, é dada pela função

$$u(x,t) = \exp\left[-11(5x - 2.5t - 1.1)^2\right]. \tag{3.58}$$

Tal solução é a translação para a direita do gráfico da função dada na condição inicial, Figura 3.9.

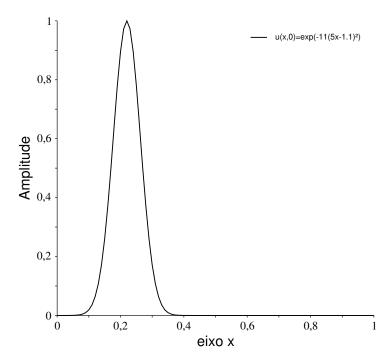


Figura 3.9: Condição inicial do Exemplo 3.2.

Primeiramente, nota-se que as condições de estabilidade, nesse caso, $-1 \le \nu \le 1$ são satisfeitas para os três métodos. Logo, as soluções convergem para a solução exata.

Três experimentos numéricos, para cada método estudado, foram realizados utilizando os valores dados na Tabela 3.6, na região $[0,2] \times [0,2]$.

As Figuras 3.11, 3.12 e 3.13 representam as soluções obtidas, respectivamente, pelos esquemas *upwind*, de Lax–Friedrichs e de Lax–Wendroff, onde constatamos:

 A perda de amplitude e a dissipação são menores no esquema Lax-Wendroff isso se justifica pela ordem de erro, ξ⁴, do módulo do seu fator de amplificação, quando ξ é pequeno, enquanto do upwind e Lax-Friedrichs é da ordem de ξ²;

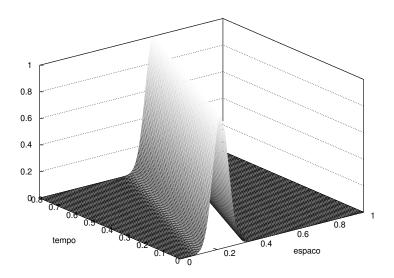


Figura 3.10: Solução exata do Exemplo 3.2.

Δx	Δt	ν
0.005	0.0025	0.25
0.005	0.005	0.50
0.005	0.010	1.0

Tabela 3.6: Valores de $\Delta x,\,\Delta t$ e ν utilizados no Exemplo 3.2.

Para ν constante, em cada passo do tempo a dispersão é maior no esquema
 Lax-Friedrichs, quando ξ é pequeno. Isso se confirma pelo valor do argumento
 de seu fator de amplificação em relação aos outros dois esquemas.

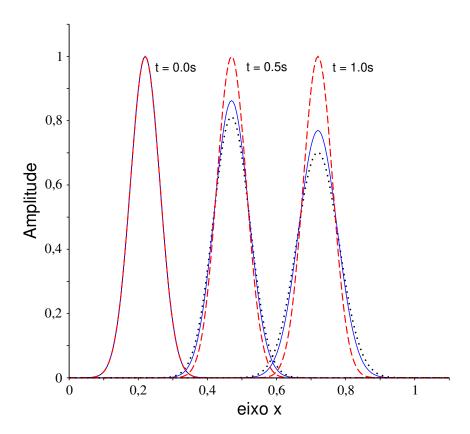


Figura 3.11: Solução numérica do Exemplo 3.2 usando o esquema upwind em 0.0s, 0.5s e 1.0s. (Linha tracejada: solução obtida para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.01$; contínua: solução obtida para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.005$; pontilhada: solução para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.0025$.)

As Figuras 3.14 e 3.15 mostram os gráficos de $|\lambda|$ em função de ξ , onde $0 \le \xi \le \frac{\pi}{2}$, dos quais podemos afirmar, em relação a perda de amplitude, que:

• a perda é menor para o método Lax-Wendroff, seguido do método upwind;

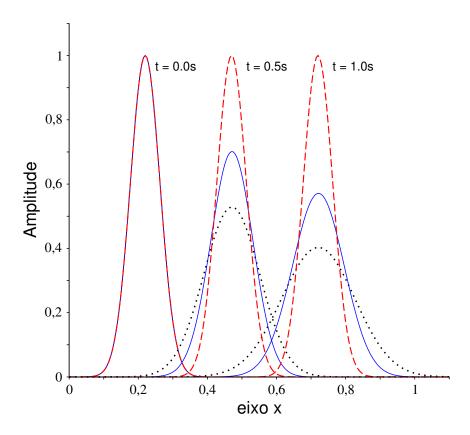


Figura 3.12: Solução numérica do Exemplo 3.2 usando o esquema Lax–Friedrichs em 0.0s, 0.5s e 1.0s. (Linha tracejada: solução obtida para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.01$; contínua: solução obtida para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.005$; pontilhada: solução para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.0025$.)

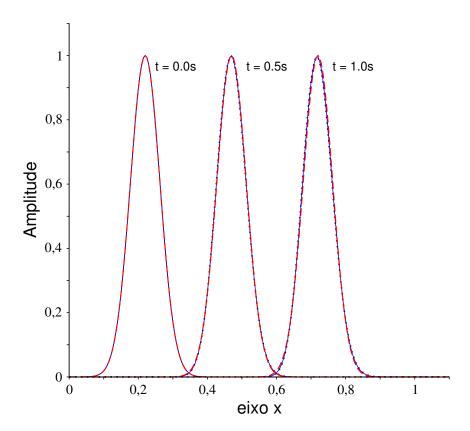


Figura 3.13: Solução numérica do Exemplo 3.2 usando o esquema Lax–Wendroff em 0.0s, 0.5s e 1.0s. (Linha tracejada: solução obtida para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.01$; contínua: solução obtida para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.005$; pontilhada: solução para $\Delta x=0.005$ e $\Delta t=0.0025$.)

- a perda é maior no Lax-Friedrichs para $\nu = 0.2$;
- quão próximo ν está de 1, mais o valor do módulo de λ se aproxima da solução exata.

A grandeza dada pela razão $\frac{\arg \lambda}{\nu \xi}$ é chamada de fase relativa. Ela também é uma medida utilizada para analisar o erro numérico do esquema. Através das Figuras 3.16 e 3.17 ilustramos a fase relativa que mostra que o esquema upwind possui o menor erro de dispersão dos três métodos, isso é confirmado nas soluções numéricas do exemplo. Todavia, esse método apresenta um amortecimento muito forte comparado ao método de Lax-Wendroff. Essas análises são importantes na decisão de qual método escolher na aproximação do problema.

Para finalizar, as comparações mostram que o método de Lax–Wendroff fornece as melhores aproximações para o problema. Essa afirmação está baseada na análise de Fourier, mais precisamente, nos valores de $|\lambda|$ e arg λ .

É importante frisar que se optarmos por resolver um problema numericamente, devemos considerar todas as hipóteses e características que o envolvem. Além disso, precisamos trabalhar com vários métodos para verificar quais terão os melhores resultados.

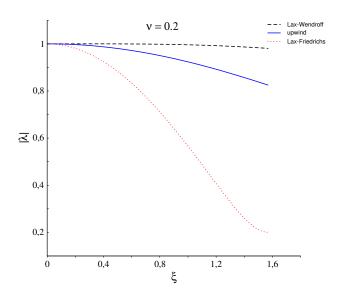


Figura 3.14: Gráfico de $|\lambda|$ em função de ξ para $\nu=0.2$. (Linha tracejada: Lax-Wendroff; contínua: upwind; pontilhada: Lax-Friedrichs.)

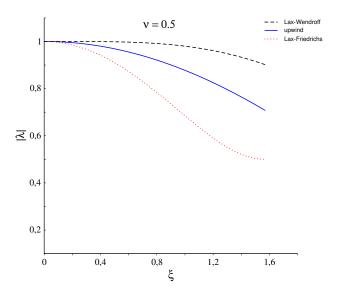


Figura 3.15: Gráficos de $|\lambda|$ em função de ξ , para $\nu=0.5$. (Linha tracejada: Lax-Wendroff; contínua: upwind; pontilhada: Lax-Friedrichs.)

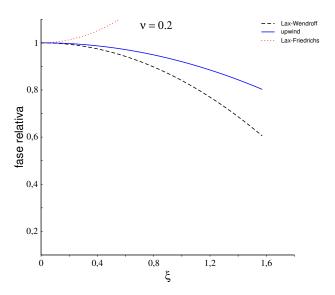


Figura 3.16: Gráfico de $\frac{\arg \lambda}{-\nu \xi}$ em função de ξ para $\nu=0.2$. (Linha tracejada: Lax-Wendroff; contínua: upwind; pontilhada: Lax-Friedrichs.)

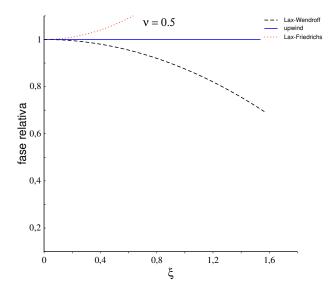


Figura 3.17: Gráfico de $\frac{\arg \lambda}{-\nu \xi}$ em função de ξ para $\nu = 0.5$. (Linha tracejada: Lax–Wendroff; contínua: upwind; pontilhada: Lax–Friedrichs.)

Conclusão

Neste trabalho abordamos métodos de diferenças finitas para equações hiperbólicas de primeira ordem. Estudamos as propriedades de três métodos clássicos, upwind, de Lax-Friedrichs e de Lax-Wendroff e as exemplificamos através de testes numéricos.

No Capítulo 1, vimos exemplos sobre o transporte de partículas e o fluxo de tráfego, ambos modelados por uma equação hiperbólica. Assim, a solução dessa equação pode apresentar respostas a problemas de fenômenos diferentes, mas com características semelhantes.

No Capítulo 2, mostramos através de um problema, uma equação do transporte, as etapas de construção do método de diferenças finitas e o resolvemos numericamente. Caracterizamos os métodos explícitos e implícitos. Ao apresentarmos a condição CFL, deduzimos a desigualdade $|a|\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ como sendo a condição necessária para que os esquemas de diferenças finitas estudados neste trabalho sejam convergentes. Mostramos as condições necessárias para que os esquemas de diferenças FTFS e FTBS sejam estáveis. Vimos ainda que o Teorema de Lax é uma outra forma de mostrar a convergência de um esquema consistente.

Notamos que através da análise de von Neumann, vista no Capítulo 3, para estudar a estabilidade de um esquema, basta avaliar o valor de $|\lambda|$. E percebemos que para um esquema de diferenças finitas ser estável, devemos ter $|\lambda| \leq 1$.

Conclusão 70

No Capítulo 3, estudamos a análise de Fourier onde vimos que o estudo numérico de um esquema de diferenças ficou resumido na observação dos valores do módulo e do argumento do fator de amplificação, pois estes nos fornecem informações sobre os fenômenos de dissipação e dispersão numa aproximação numérica.

Fizemos um estudo dos métodos upwind, de Lax-Friedrichs e de Lax-Wendroff onde apresentamos as condições de convergência desses esquemas e os valores de $|\lambda|$ e arg λ para cada um deles. Como esse valores dependem das variáveis Δt , Δx e ξ , as análises foram realizadas admitindo uma ou outra variável constante. Resolvemos numericamente um exemplo para equação $u_t + au_x = 0$, a constante, com a condição CFL satisfeita, onde constatamos que: quando ν é constante, quanto mais próximo de 1 estiver o módulo de λ menor será a perda de amplitude e a dissipação; quando ν é constante, quanto maior o valor do argumento de λ maior é a dispersão; se $\nu = 1$, então a solução numérica é mais próxima da solução exata.

Comparamos os métodos *upwind*, de Lax-Friedrichs e de Lax-Wendroff através da análise de Fourier, quanto a dissipação e a dispersão das soluções numéricas obtidas, ao resolver um problema modelado por uma equação de advecção.

Embora o método *upwind* apresente a menor dispersão, a sua perda de amplitude é grande em relação ao método Lax-Wendroff, que apresenta a menor dissipação das soluções. Além disso, as maiores dissipação e dispersão foram encontradas no método de Lax-Friedrichs. Assim, as melhores aproximações foram feitas pelo método de Lax-Wendroff.

As aproximações numéricas feitas com os três métodos também são justificadas pelos gráficos de $|\lambda|$ e $\frac{\arg \lambda}{-\nu \xi}$ em função de ξ , onde confrontamos os erros de amplitude e de dispersão, para ξ pequeno. Verificamos que quanto mais próximo de 1 estiver o módulo de λ e a fase relativa, reduz-se os efeitos da dissipação e dispersão das soluções.

Conclusão 71

Firmamos definitivamente que ao optarmos por resolver um problema numericamente, precisamos analisar várias características dos métodos, pois cada um deles apresentará vantagens e desvantagens. Assim sendo, uma análise de qual ou quais esquemas trabalhar, indicará certamente os melhores resultados numéricos.

As simulações e os gráficos foram desenvolvidos nos programas Octave e Grace. Mediante a experiência neste trabalho, somada a nossa atividade docente, afirmamos que o uso desses recursos auxiliam o processo ensino-aprendizagem, desde que haja uma orientação adequada.

Finalmente, sugerimos para continuidade deste trabalho um estudo dos métodos de diferenças para leis de conservação. Isso se justifica pela relação destas com as equações diferenciais estudadas e pelos vários fenômenos modelados por essas leis.

Referências Bibliográficas

- [1] BASSANEZI, Rodney Carlos. Ensino-aprendizagem com modelagem matemática: uma nova estratégia. São Paulo: Contexto, 2006.
- [2] BIEMBENGUT, Maria Sallet. Modelagem matemática & implicações no ensino e aprendizagem de matemática. Blumenau: Editora FURB,1999.
- [3] BOYER, Carl B. História da Matemática. São Paulo: Edgard Blücher Ltda, 1974.
- [4] BREZIS, Haïm, BROWDER, Felix., 1998. Partial Differential Equations in the 20th Century. Advances in Mathematics 135, 76–144.
- [5] COURANT, Richard, FRIEDRICHS, Kurt O., e LEWY, Hans. On the partial difference equations of mathematical physics, IBM Journal, 11, 215-234.
- [6] CUNHA, M. Cristina C. Métodos númericos. 2ª ed. São Paulo: UNICAMP, 2003.
- [7] EATON, John W., BATEMAN, D., HAUBERG,S. **GNU Octave Manual** Version 3. Bristol, Network Theory Ltd., 2008.
- [8] EVES, Howard. Introdução à História da Matemática. Tradução de Hygino H. Domingues. São Paulo: UNICAMP, 2004.

- [9] FINNEY, Ross L., WEIR, Maurice D., GIORDANO, Frank R. Cálculo de George B. Thomas Jr., volume 2. 10^a ed., New York: Addison Wesley Longman, 2003.
- [10] IÓRIO, Valéria de Magalhães. EDP, um curso de graduação. 2ª ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2005.
- [11] LAX, Peter D. Richard Courant: january 8, 1888 january 27, 1972, Biographical Memoirs, National Academy Sciences 82 (2003), 79–97.
- [12] LAX, Peter D., WENDROFF, Burton, 1960, Systems of conservation laws, Comm. Pure and Appl. Math. 13, 217–237.
- [13] MORTON, K. W., MAYERS, David. Numerical Solution of Partial Differential Equations. Cambridge University Press, 1994.
- [14] NOVAIS, Amélia, CUNHA, Maria C. C. Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais. São Paulo: SBMAC, 2003.
- [15] STRAUSS, Walter A. Partial Differential Equations: an introduction. New York: John Wiley e Sons, 1973.
- [16] STRIKWERDA, J. C. Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations. SIAM, Second edition, 2004.
- [17] THOMAS, James William. Numerical Partial Differential Equations: finite difference methods. New York: Springer Verlag, 1995.
- [18] THOMÉE, Vidar. From finite differences to finite elements: A short history of numerical analysis of partial differential equations. Journal of Computational and Applied Mathematics 128 (2001), 1–54.

Apresentamos as rotinas utilizadas no Octave para gerar as soluções numéricas dos exemplos "Esquema FTFS", "Esquema numérico" e "Função suave", respectivamente, nas páginas 24, 41 e 60 deste trabalho.

"Esquema FTFS"

Condição inicial

```
function U0 = initialA(dx,x1,x2,x3,xf)
x=0:dx:xf;
nx=length(x);
i1=floor(x1/dx)+1;
i2=floor(x2/dx)+1;
i3=floor(x3/dx)+1;
U0=zeros(1,nx)
U0(i1:i2)=5*x(i1:i2)-3
U0(i2:i3)=4-5*x(i2:i3)
endfunction

Condição de contorno

function UC = contour(dt,tf)
nt=floor(tf/dt)+1;
```

```
UC=zeros(1,nt-1)
endfunction
   Solução numérica
function [U,x,t,nt] = ftfs(dx,dt,xf,tf,a,ci,cc)
x=0:dx:xf;
t=0:dt:tf;
nx=length(x);
nt=length(t);
v=a*dt/dx;
U=zeros(nt,nx);
U(1,:)=ci;
U(2:nt,nx)=cc;
for i=1:nt-1
   U(i+1,1:nx-1) = (1+v)*U(i,1:nx-1)-v*U(i,2:nx);
endfor
endfunction
  "Esquema numérico"
   Condição inicial
function U0 = initialB(dx,x1,x2,x3,xf)
x=0:dx:xf;
nx=length(x);
i1=floor(x1/dx)+1;
i2=floor(x2/dx)+1;
i3=floor(x3/dx)+1;
U0=zeros(1,nx)
U0(i1:i2)=10*x(i1:i2)-2
```

```
U0(i2:i3)=4-10*x(i2:i3)
endfunction
   Condição de contorno
function UC = contour(dt,tf)
nt=floor(tf/dt)+1;
UC=zeros(1,nt-1)
endfunction
   Solução numérica
   Método Upwind
function [U,x,t,nt] = upwind(dx,dt,xf,tf,a,ci,cc)
x=0:dx:xf;
t=0:dt:tf;
nx=length(x);
nt=length(t);
v=a*dt/dx;
U=zeros(nt,nx);
U(1,:)=ci;
if (a<0)
  U(2:nt,nx)=cc;
  for i=1:nt-1
     U(i+1,1:nx-1) = (1+v)*U(i,1:nx-1)-v*U(i,2:nx);
  endfor
else
  U(2:nt,1)=cc;
  for i=1:nt-1
     U(i+1,2:nx) = (1-v)*U(i,2:nx)+v*U(i,1:nx-1);
```

```
endfor
endif
endfunction
   Método de Lax-Friedrichs
function [U,x,t,nt] = laxfriedrichs(dx,dt,xf,tf,a,ci,cc)
x=0:dx:xf;
t=0:dt:tf;
nx=length(x);
nt=length(t);
v=a*dt/dx;
U=zeros(nt,nx);
U(1,:)=ci;
U(2:nt,1)=cc;
U(2:nt,nx)=cc;
for i=1:nt-1
   U(i+1,2:nx-1) = 0.5*(1+v)*U(i,1:nx-2)+0.5*(1-v)*U(i,3:nx);
endfor
endfunction
   Método de Lax-Wendroff
function [U,x,t,nt] = laxwendroff(dx,dt,xf,tf,a,ci,cc)
x=0:dx:xf;
t=0:dt:tf;
nx=length(x);
nt=length(t);
v=a*dt/dx;
U=zeros(nt,nx);
```

```
U(1,:)=ci;
U(2:nt,1)=cc;
U(2:nt,nx)=cc;
for i=1:nt-1
  U(i+1,2:nx-1) = 0.5*v*(1+v)*U(i,1:nx-2)+(1-v)*(1+v)*U(i,2:nx-1)-
                   0.5*v*(1-v)*U(i,3:nx);
endfor
endfunction
  "Função suave"
   Condição inicial
function U0 = initialC(dx,xf)
x=0:dx:xf;
nx=length(x);
U0=exp(-11*(5*x-1.1).^2)
endfunction
   Condição de contorno
function UC = contour(dt,tf)
nt=floor(tf/dt)+1;
UC=zeros(1,nt-1)
endfunction
```

Para determinar a solução numérica, nesse exemplo, foram usadas as mesmas rotinas do exemplo "Esquema numérico" para os métodos *upwind*, de Lax-Friedrichs e de Lax-Wendroff.