

André Luiz Nogueira

FÓRMULA TRAPEZOIDAL ESTENDIDA
PARA A EQUAÇÃO DE DIFUSÃO



1910001190



**FÓRMULA TRAPEZOIDAL ESTENDIDA
PARA A EQUAÇÃO DE DIFUSÃO**

André Luiz Nogueira

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada
MAP - 076

† 517.944:518.7
N778p

10102051

Nogueira, André Luiz.

Fórmula Trapezoidal Estendida para a Equação de Difusão/André
Luiz Nogueira - São José do Rio Preto: [s.n.], 2003
104 f. : il. ; 30 cm.

Orientador: Maurílio Boaventura

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Instituto
de Biociências, Letras e Ciências Exatas

1. Cálculos numéricos. 2. Equação do calor. 3. Equações
diferenciais parciais - Soluções numéricas. 4. Equação de difusão. 5.
Equação de convecção-difusão. 6. Equação de reação-difusão. 7.
Cálculos numéricos - Fórmula trapezoidal estendida. I. Boaventura,
Maurílio. II. Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências,
Letras e Ciências Exatas . III. Título.

CDU - 517.95



Agradecimentos

Este trabalho não teria sido possível sem a ajuda de muitas pessoas. Agradeço a todos que me apoiaram e incentivaram ao longo deste caminho.

Em especial:

Aos meus pais, Luiz Carlos e Alaide, por todo o amor e apoio incondicional.

Aos meus irmãos, Aline e Tiago, por sua presença e incentivo constante.

Aos amigos, especialmente aos que estiveram comigo nos momentos mais difíceis.

Aos professores, especialmente ao Prof. Dr. [nome], por sua orientação e sabedoria.

Aos colegas de trabalho, especialmente ao [nome], por sua ajuda e colaboração.

Aos amigos de infância, especialmente ao [nome], por sua amizade e apoio.

A todos, um grande abraço.

Aos meus pais, Luiz Carlos e Alaide.

Aos meus irmãos, Aline e Tiago.

Dedico

Agradecimentos

À todas as pessoas que de alguma forma me ajudaram durante a realização deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Maurílio Boaventura, pela orientação, incentivo e paciência na elaboração deste trabalho, e todos professores e funcionários do DCCE que de alguma forma contribuíram para a elaboração deste trabalho.

Aos meus pais e irmãos que sempre me apoiam.

Aos amigos pós-graduandos.

À CAPES e aos meus pais, pelo auxílio financeiro.

A Deus, por tudo.

Resumo

O objetivo deste trabalho é analisar um método localmente unidimensional (LOD), apresentado por Chawla & Al-Zanaidi [4], para integração no tempo da equação de difusão em um espaço bidimensional, baseado na fórmula trapezoidal estendida (ETF), resultando em um método de terceira ordem no tempo e incondicionalmente estável. Extensões desse método para as equações de convecção-difusão e reação-difusão não linear são também apresentadas. Além disso, propomos, uma linearização deste método para as equações de reação-difusão não lineares.

Palavras-chave: equação de difusão, fórmula trapezoidal estendida, estabilidade, equação de reação-difusão não linear, equações diferenciais parciais.

Abstract

The main purpose of this work is to analyse the locally one-dimensional (LOD) time integration method of the diffusion equation in two spatial dimensions presented by Chawla & Al-Zanaidi [4]. This scheme is based on the extended trapezoidal formula (ETF). The resulting LOD-ETF scheme is third order in time and unconditionally stable. We also present extensions of this method for nonlinear reaction-diffusion equations and for the convection-diffusion equations in two spatial dimensions. A linearization of this method for the nonlinear reaction-diffusion equation is proposed in this work.

Keywords: diffusion equation, extended trapezoidal formula, stability, nonlinear reaction-diffusion equations, partial differential equations.



Sumário

Introdução	9
1 Fórmula Trapezoidal Estendida	13
1.1 Conceitos Preliminares	13
1.2 Propriedades	24
1.3 Fórmula Trapezoidal Estendida	25
1.3.1 Análise da Estabilidade	29
1.4 Uma Família de Métodos Estendidos	32
1.4.1 Análise da Estabilidade	36
2 Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais Parabólicas	39
2.1 Conceitos Preliminares	39
2.1.1 Classificação das EDPs de Segunda Ordem	41
2.1.2 Condições de Contorno e Iniciais	42
2.1.3 Exemplos de EDPs	43
2.2 Equações Parabólicas em Duas Dimensões	45
2.2.1 Método Explícito	47
2.2.2 Métodos de Direções Alternadas Implícitos (ADI)	49
2.2.3 Método Localmente Unidimensional	51
2.3 Equação de Difusão em Duas Dimensões	53
2.3.1 Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional (ETF-LOD)	54



2.3.2	Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional (CN-LOD)	63
2.4	Equação de Convecção-Difusão em Duas Dimensões	65
2.4.1	Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimen- sional (ETF-LOD)	66
2.4.2	Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional (CN-LOD)	75
3	Equações de Reação-Difusão Não-Lineares	78
3.1	Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional (ETF- LOD)	78
3.2	Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional (CN- LOD)	83
3.3	Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional Lin- earizada (ETF-LOD-L)	84
3.4	Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional Lineariza- do (CN-LOD-L)	89
4	Resultados Numéricos	90
4.1	Implementação dos Métodos	92
4.2	Problemas Considerados	92
4.2.1	Problema 1	93
4.2.2	Problema 2	94
4.2.3	Problema 3	98
5	Conclusão	101

Introdução

Podemos descrever matematicamente fenômenos físicos através de equações que envolvem derivadas parciais da função incógnita. Isto ocorre porque as entidades físicas envolvidas são funções que dependem, geralmente, de mais de uma variável.

As equações diferenciais parciais constituem uma ferramenta bastante importante da matemática, pois são usadas para modelar problemas significativos. Podemos citar, por exemplo, problemas advindos das engenharias e ciências naturais.

Uma vez estabelecidas as equações que descrevem matematicamente o objetivo de estudo, o passo seguinte é resolvê-las. Desejamos, então, estabelecer soluções através de expressões analíticas, de preferência envolvendo poucos cálculos na sua avaliação. Infelizmente nem sempre isto ocorre, pois nem o atual estágio de desenvolvimento da matemática, nem as técnicas disponíveis nos permitem atingir esse objetivo. Devemos então, optar por simplificações no equacionamento, ou utilizar métodos numéricos para calcular uma aproximação para a solução. Os métodos numéricos dividem-se em: explícitos, métodos onde a solução aproximada pode ser obtida explicitamente a partir da equação que o descreve, e implícitos, os quais requerem a solução de um sistema, uma vez que a solução aproximada descrita pela equação não é explícita.

Os métodos estendidos são obtidos pelo acoplamento de métodos lineares de passo múltiplo e, apesar de serem implícitos de passo um, utilizam infor-



mações nos pontos imediatamente posteriores ao ponto de integração.

Dentre os métodos numéricos voltados para resolução de equações diferenciais parciais, mais especificamente, equação de difusão, reação-difusão e convecção-difusão, encontra-se o método trapezoidal estendido localmente unidimensional, baseado na fórmula trapezoidal estendida, que é de terceira ordem, L-estável e incondicionalmente estável. Os conceitos de estabilidade absoluta, A-estabilidade e L-estabilidade são apresentados no capítulo 1.

Em [9] I. B. Jacques propôs uma fórmula trapezoidal estendida para integrar Problemas de Valores Iniciais que consiste em dada a EDO

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0,$$

a solução discreta deste problema é obtida pelo par de equações:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2})$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = y_n + 2hf_{n+1}.$$

Nosso objetivo principal é aplicar a fórmula trapezoidal estendida para obter solução das equações

- de difusão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),$$

- convecção-difusão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c_1 \frac{\partial u}{\partial x} + c_2 \frac{\partial u}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),$$

- reação-difusão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + p(u), \quad (\nu, \quad c_1 \quad \text{e} \quad c_2 \quad \text{são constantes}).$$

Para isto estas equações devem ser reescritas na seguinte forma:

$$\frac{1}{2}u_t = \nu u_{xx} \quad \text{e} \quad \frac{1}{2}u_t = \nu u_{yy},$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}u_t + c_1 u_x &= \nu u_{xx} & \text{e} & \quad \frac{1}{2}u_t + c_2 u_y = \nu u_{yy}, \\ \frac{1}{2}u_t &= \nu u_{xx} + p(u) & \text{e} & \quad \frac{1}{2}u_t = \nu u_{yy} + p(u) \end{aligned}$$

O passo seguinte é aplicar a fórmula trapezoidal estendida para cada par de equação. Por exemplo, para o primeiro par agimos da seguinte forma: integra-se as equações $\frac{1}{2}u_t = \nu u_{xx}$, no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$ e $\frac{1}{2}u_t = \nu u_{yy}$ no intervalo $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$. O mesmo raciocínio é utilizado para as demais equações.

No caso da equação de reação-difusão não linear, apresentamos ainda uma linearização que consiste em avaliarmos a função $p(u)$ no tempo t_n e não nos tempos $t_{n+\frac{1}{2}}$ e t_{n+1} , ou seja,

$$\frac{1}{2}u_t = \nu u_{xx} + p(u)|_{t_n} \quad \text{e} \quad \frac{1}{2}u_t = \nu u_{yy} + p(u)|_{t_n},$$

a linearização apresentada acima diminui substancialmente o tempo de processamento, sem um aumento significativo do erro. A título de comparação, o método de Crank-Nicolson, também na forma localmente unidimensional, é apresentado.

Uma vez que a fórmula trapezoidal estendida não é L-estável como mostrado por Agarwal & Usmani [1], isso incentivou Jacques [9] a investigar a precisão e estabilidade dos métodos trapezoidais estendidos, mostrando que os coeficientes podem ser escolhidos, de modo que se obtenha um método L-estável.

O presente trabalho encontra-se dividido em 5 capítulos. No capítulo 1 apresentamos alguns conceitos básicos relacionados aos problemas de valor inicial, juntamente com a fórmula trapezoidal estendida a qual é A-estável, mas não L-estável e, por fim, tratamos de uma família de métodos estendidos, família esta que possui um método não apenas A-estável mas também L-estável.

Novamente no capítulo 2 apresentamos conceitos básicos que muito nos auxiliarão no decorrer deste trabalho. Feito isso fizemos um breve estudo sobre métodos numéricos para equações diferenciais parciais parabólicas em duas dimensões, tais como: método explícito, de direções alternadas implícito



(ADI), localmente unidimensionais e a fórmula trapezoidal estendida localmente unidimensional (ETF-LOD).

No capítulo 3, apresentamos o método (ETF-LOD) para as equações de reação-difusão não lineares, o qual conduz à resolução de sistemas não lineares. Para contornarmos este problema propomos uma linearização, com isso, passamos a trabalhar com um sistema linear, sem que haja um aumento significativo do erro.

No capítulo 4 são apresentados os resultados numéricos obtidos da implementação dos métodos envolvidos, utilizando a linguagem Fortran 77 [10] para a equação de reação-difusão não linear e, para as demais equações implementamos o método em linguagem C, no sistema operacional linux. Os gráficos foram elaborados utilizando o software "Mathematica 4.0".

Na seqüência, no capítulo 5, apresentamos a conclusão.



Capítulo 1

Fórmula Trapezoidal Estendida

Neste capítulo apresentamos, inicialmente, a fórmula trapezoidal clássica, que sabemos ser A-estável e, na sequência tratamos da fórmula trapezoidal estendida (ETF) proposta por Agarwal & Usmani [1]. Por fim, uma família de fórmulas trapezoidais estendidas (ETFs) é apresentada, proposta por Jacques [9] e dentro desta família destacamos um método L-estável.

1.1 Conceitos Preliminares

O cálculo numérico de integrais utiliza a aproximação da função a ser integrada $f(x)$ por um polinômio de um dado grau, dentro de um certo intervalo de integração. O método mais simples consiste na aproximação da função $f(x)$, por uma reta dentro desse intervalo.

Nas fórmulas aqui tratadas, consideramos pontos de integração igualmente espaçados, o número real h é chamado de passo e a malha de passo h associada a x_0 é o conjunto de pontos:

$$x_n = x_0 \pm nh, \quad n = 1, 2, \dots$$

As aproximações para $f(x)$ são calculadas nos pontos desta malha.



A fórmula trapezoidal que corresponde à aproximação da função a ser integrada por um polinômio de grau $m = 1$ é apresentada a seguir. Antes, porém, faremos uma breve descrição da fórmula de interpolação de Lagrange e o erro cometido quando usamos esta fórmula. Por fim, integramos o erro da fórmula de Lagrange obtendo, assim, o erro da regra do trapézio.

Sejam $x_0, x_1, \dots, x_m$ números reais, e $f_0, f_1, \dots, f_m$ valores de uma função associada. Trataremos agora do problema de encontrar um polinômio $p(x)$ que interpole a função $f(x)$ nos pontos $x_0, x_1, \dots, x_m$, ou seja, encontrar um polinômio $p(x)$ tal que:

$$p(x_n) = f_n, \quad n = 0, \dots, m.$$

Um polinômio que satisfaz a condição acima é dado por:

$$p(x) = \sum_{n=0}^m f_n l_n(x),$$

onde $l_k(x) = \frac{w(x)}{(x-x_k)w'(x_k)}$, $w(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_m)$.

Teorema 1.1. *Seja $[a, b]$ um intervalo dado e finito e $x_0, x_1, \dots, x_m$, $m + 1$ pontos distintos de $[a, b]$. Suponha que f seja uma função com derivadas contínuas da ordem de pelo menos $m + 1$. Então, para todo $x \in [a, b]$, $\exists \xi \in [a, b]$, tal que:*

$$f(x) - L_m(f : x) = \frac{f^{m+1}(\xi)}{(m+1)!} w(x),$$

onde

$$L_m(f : x) = \sum_{k=0}^m f(x_k) l_k(x), \text{ (Fórmula de Lagrange para o polinômio interpolador).}$$

A demonstração do teorema acima pode ser encontrada em [6].

Nosso problema é calcular numericamente,

$$\int_a^b f(x) dx,$$

usando os valores da função em pontos equidistantes e tomando $x_0 = a$.

Graficamente temos:

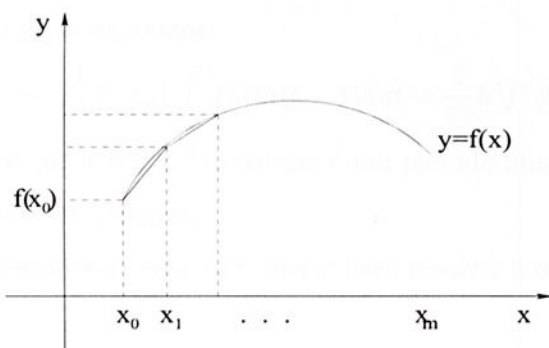


Figura 1.1: Aproximação da integral pela regra do trapézio

Sabemos que a área do trapézio

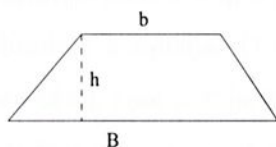


Figura 1.2: Área do trapézio

$$\text{é } A_T = \frac{(B+b)h}{2}.$$

Utilizando a expressão anterior temos que:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &\cong T(h) = \frac{h(f_0 + f_1)}{2} + \frac{h(f_1 + f_2)}{2} + \dots + \frac{h(f_{m-1} + f_m)}{2} = \\ &= h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \dots + f_{m-1} + \frac{1}{2}f_m\right). \end{aligned}$$

O método utilizado para aproximar a integral acima é conhecido como regra trapezoidal (ou regra do trapézio). Do Teorema 1.1 temos que o erro de truncamento local da regra trapezoidal em cada intervalo $[x_{n-1}, x_n]$, $n = 1, \dots, m$ é:

$$\varepsilon_n = T(h) - \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx = - \int_{x_{n-1}}^{x_n} \frac{f''(\xi(x))}{2} (x - x_{n-1})(x - x_n)dx,$$

$$\xi(x) \in [x_{n-1}, x_n].$$

Usando o teorema do valor médio para integrais, cuja demonstração pode ser encontrada em [12], temos:

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{2}f''(\xi_n) \int_{x_{n-1}}^{x_n} (x - x_{n-1})(x - x_n)dx, \quad \xi_n \in [x_{n-1}, x_n],$$

e tomando $x = x_{n-1} + ht$, temos:

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{2}f''(\xi_n) \int_0^1 (ht)h(t-1)h dt = \frac{1}{12}h^3 f''(\xi_n).$$

Assim, temos que a regra do trapézio é um método numérico de ordem 3 para a aproximação de integrais.

A seguir, utilizamos a regra do trapézio para resolver a equação diferencial ordinária:

$$y' = f(x, y), \quad (1.1)$$

que é chamada equação diferencial de primeira ordem. Nesta equação, f é uma função real dada de duas variáveis reais x e y , e y é uma função incógnita da variável independente x . Resolver a equação (1.1) corresponde a determinar uma função $y = y(x)$, diferenciável, com $x \in [a, b]$ tal que $y'(x) = f(x, y(x))$.

Qualquer função que satisfaça essa propriedade é uma solução da equação diferencial (1.1). Por exemplo, a função $y(x) = Ce^x$ é, para qualquer valor da constante C , uma solução da equação diferencial $y' = y$. Assim, a equação diferencial de primeira ordem $y' = y$ possui um número infinito de soluções. Contudo, podemos selecionar uma solução particular, se junto com a equação diferencial for dado o valor da solução $y(x)$ em um ponto, por exemplo, $y(x_0) = y_0$ (chamada condição inicial). Se, para a equação diferencial $y' = y$ é dado que $y(0) = 1$, então obtemos $C = 1$ e assim a solução de $y' = y$ é $y(x) = e^x$.

A equação diferencial juntamente com a condição inicial constitui um problema de valor inicial (p.v.i), isto é:

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad a \leq x \leq b. \quad (1.2)$$

Como nem todos os problemas possuem uma única ou mesmo alguma solução, o teorema que se segue nos fornece condições suficientes sobre $f(x, y)$ que garantem a existência e unicidade da solução, sempre que para tais problemas as hipóteses do teorema sejam satisfeitas.

Usaremos como medida de distância entre dois pontos no espaço de dimensão m , a norma do máximo, ou seja dados $u = (u_1, \dots, u_m)$ e $v = (v_1, \dots, v_m)$ a distância entre eles é dada por:



$$\|u - v\| \equiv \max_{1 \leq k \leq m} |u_k - v_k|.$$

Teorema 1.2. *Seja $f(x, y)$ uma função, onde $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $y = (y_1, \dots, y_m)$, definida e contínua para todo (x, y) na região D , para $a \leq x \leq b$, $-\infty < y_i < \infty$, $i = 1, \dots, m$, onde a, b são constantes finitas e suponha que exista uma constante L tal que:*

$$\|f(x, y) - f(x, y^*)\| \leq L\|y - y^*\|, \quad (1.3)$$

para todo $(x, y), (x, y^*) \in D$. Então, para qualquer $y_0 \in \mathbb{R}^m$, existe uma única solução $y(x)$ para o p.v.i. (1.2), onde $y(x)$ é contínua e diferenciável para todo $(x, y) \in D$.

A condição (1.3) é conhecida como condição de Lipschitz e a constante L , como constante de Lipschitz.

A demonstração desse teorema para o caso $m = 1$ pode ser encontrada em [7].

Voltando à equação diferencial de primeira ordem do p.v.i. (1.2), integrando de x_n até x_{n+k} , obtemos:

$$\int_{x_n}^{x_{n+k}} y'(x) dx = \int_{x_n}^{x_{n+k}} f(x, y(x)) dx.$$

Integrando o lado esquerdo da equação acima, exatamente, obtemos:

$$y(x_{n+k}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+k}} f(x, y(x)) dx,$$

para quaisquer dois pontos x_n e x_{n+k} em $[a, b]$. Fazendo $k = 1$,

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx,$$

e, em seguida utilizamos a regra do trapézio para calcular a integral na expressão acima desde que a mesma esteja sendo avaliada entre dois pontos consecutivos. Fazendo isso, segue que:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{h}{2} [f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))].$$

Substituindo na expressão acima $y(x_n)$, $y(x_{n+1})$, $f(x_n, y(x_n))$ e $f(x_{n+1}, y(x_{n+1}))$ por y_n , y_{n+1} , f_n e f_{n+1} , respectivamente, obtemos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_n + f_{n+1}],$$

que é um método de passo 1 chamado método do trapézio (ou regra trapezoidal).

Assim, a regra trapezoidal para a integração do p.v.i. (1.2) poder ser escrita como:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})], \quad (1.4)$$

onde os pontos x_n são definidos por $x_n = a + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots$, e y_n é uma aproximação para $y(x_n)$, onde $y(x)$ é a solução do p.v.i. (1.2). O valor y_{n+1} pode ser obtido diretamente, de forma não linear, pela solução da equação não linear (1.4), ou pode ser estimado por um outro método, como o método de Euler, dada por:

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n),$$

e então, o valor estimado pode ser melhorado pelo esquema:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n) + f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})], \quad j = 0, 1, \dots$$

A seguir, apresentamos algumas definições que serão utilizadas no decorrer deste trabalho.

Definição 1.1. Denominamos método linear de passo múltiplo, ou linear de passo k , todo método numérico para a discretização do p.v.i (1.2) dado pela seguinte equação de diferenças:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n+j}, y_{n+j}),$$

onde α_j e β_j são constantes reais sujeitas às condições,

$$\alpha_k = 1, \quad |\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0.$$

Se $\beta_k \neq 0$ chamamos o método linear de passo k de implícito, caso contrário ($\beta_k = 0$), dizemos que o método é explícito.

Definição 1.2. O erro global no ponto x_n é definido por:

$$e_n = y(x_n) - y_n,$$

onde $y(x_n)$ denota a solução exata do p.v.i. e y_n a solução aproximada obtida pelo método.

Definição 1.3. Um método numérico é convergente se, o erro global e_n converge para zero quando n tende para infinito de maneira que, o ponto x_n permaneça fixo.

Definição 1.4. Definimos como erro de truncamento local, o erro cometido ao substituirmos a solução exata na equação de diferenças.

A seguir, definimos os conceitos de A-estabilidade e L-estabilidade estes conceitos podem ser encontrados em Lambert [11]. Para isso vamos considerar a equação teste:

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C} \text{ e } \operatorname{Re}(\lambda) < 0, \quad (1.5)$$

cuja solução $y(x) = Ke^{\lambda x}$ tende a zero quando x tende para infinito e, K é uma constante arbitrária.

Aplicando a forma geral do método linear de passo k da definição (1.1) para $k = 1$, na equação acima, vamos obter uma equação de diferenças da forma:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^1 \alpha_j y_{n+j} &= h \sum_{j=0}^1 \beta_j f(x_{n+j}, y_{n+j}) \\ \Rightarrow \alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n+1} &= h\beta_0 f(x_n, y_n) + h\beta_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) \\ &= h\beta_0 \lambda y_n + h\beta_1 \lambda y_{n+1} \\ &= \mu\beta_0 y_n + \mu\beta_1 y_{n+1} \\ \Rightarrow y_{n+1} &= \left(\frac{\mu\beta_0 - \alpha_0}{\alpha_1 - \mu\beta_1} \right) y_n \\ y_{n+1} &= R(\mu)y_n, \end{aligned} \quad (1.6)$$

onde $\mu = h\lambda$ e $R(\mu) = \left(\frac{\mu\beta_0 - \alpha_0}{\alpha_1 - \mu\beta_1} \right)$ é a função estabilidade do método.

A solução geral de (1.6) é da forma:

$$y_n = \{R(\mu)\}^n y_0$$

e claramente $y_n \rightarrow 0$ com $n \rightarrow \infty$ se, e somente se,

$$|R(\mu)| < 1,$$

e o método é dito absolutamente estável para os valores de μ que satisfazem a desigualdade acima.

Definição 1.5. Denominamos a região R_A do plano complexo, definida por $R_A = \{\mu \in \mathbb{C}: |R(\mu)| < 1\}$, de região de estabilidade absoluta do método.

Definição 1.6. Um método é A-estável se $R_A \supseteq \{\mu | \operatorname{Re}(\mu) < 0\}$.

A A-estabilidade garante que, para qualquer $h > 0$ escolhido, a solução numérica de (1.5) não crescerá indefinidamente com o aumento de n .

Entretanto, quando $\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty$, a exigência de que a solução numérica não cresça em magnitude pode não ser suficiente e uma nova condição deve ser imposta.

Se considerarmos, por exemplo, a aplicação da Regra Trapezoidal,

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2}[f_n + f_{n+1}],$$

à equação teste (1.5), obtemos

$$y_{n+1} = \frac{1 + \frac{1}{2}h\lambda}{1 - \frac{1}{2}h\lambda} y_n.$$

Como a regra trapezoidal é A-estável (ver Lambert [11]), $y_n \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, para todo valor positivo de h . Contudo,

$$\left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1 + \frac{h\lambda}{2}}{1 - \frac{h\lambda}{2}} \right| = \left[\frac{1 + h\operatorname{Re}(\lambda) + \frac{1}{4}h^2|\lambda|^2}{1 - h\operatorname{Re}(\lambda) + \frac{1}{4}h^2|\lambda|^2} \right]^{\frac{1}{2}},$$

e, se $|Re(\lambda)| \gg 0$ e h não é pequeno, então $|y_{n+1}/y_n|$ estará próximo de $+1$. De fato, quando $Re(\lambda) \rightarrow -\infty$, o lado direito da equação acima tende para 1. Assim, $|y_n|$ decairá para zero rapidamente quando $n \rightarrow \infty$. Ao contrário, o método $y_{n+1} - y_n = hf_{n+1}$ (método de Euler Implícito) fornecerá

$$\left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1}{1 - h\lambda} \right| = \left[\frac{1}{1 - 2hRe(\lambda) + h^2|\lambda|^2} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Neste caso, o lado direito da equação acima tende a zero com $Re(\lambda) \rightarrow -\infty$, e podemos esperar um rápido decaimento de $|y_n|$ mesmo para valores de h moderadamente grandes. Temos a seguinte definição:

Definição 1.7. Um método é L -estável se for A -estável e além disso, $|R(\mu)| \rightarrow 0$, quando $Re(\mu) \rightarrow -\infty$.

Definição 1.8. O operador diferença $\mathcal{L}$ associado ao método linear de passo múltiplo é definido por:

$$\mathcal{L}[z(x) : h] = \sum_{j=0}^k [\alpha_j z(x + jh) - h\beta_j z'(x + jh)],$$

onde $z(x)$ é uma função arbitrária, continuamente diferenciável em $[a, b]$.

Expandindo $z(x + jh)$ e $z'(x + jh)$ em série de Taylor em torno do ponto x temos:

$$\begin{aligned} z(x + jh) &= z(x) + jhz'(x) + \frac{(jh)^2}{2!} z''(x) + \frac{(jh)^3}{3!} z^{(3)}(x) + \dots \\ z'(x + jh) &= z'(x) + jhz''(x) + \frac{(jh)^2}{2!} z^{(3)}(x) + \frac{(jh)^3}{3!} z^{(4)}(x) + \dots \end{aligned}$$

O resultado apresentado a seguir será utilizado no capítulo 2.

Tomando $Dz(x) = z'(x)$, $D^2z(x) = z''(x)$, $D^3z(x) = z^{(3)}(x)$..., segue que:

$$\begin{aligned} z(x + jh) &= z(x) + jhDz(x) + \frac{(jh)^2}{2!} D^2z(x) + \frac{(jh)^3}{3!} D^3z(x) + \dots \\ &= (1 + jhD + \frac{(jh)^2}{2!} + \frac{(jh)^3}{3!} + \dots)z(x) \\ \implies z(x + jh) &= \exp((jh)D)z(x) = e^{jhD}z(x). \end{aligned} \quad (1.7)$$



Voltando ao cálculo de $\mathcal{L}[z(x) : h]$, substituindo $z(x+jh)$ e $z'(x+jh)$ por suas expansões em série de Taylor apresentadas anteriormente, temos:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}[z(x) : h] &= \sum_{j=0}^k \alpha_j [z(x) + jhz'(x) + \frac{(jh)^2}{2!} z''(x) + \frac{(jh)^3}{3!} z^{(3)}(x) + \dots] \\
 &\quad - h \sum_{j=0}^k \beta_j [z'(x) + jhz''(x) + \frac{(jh)^2}{2!} z^{(3)}(x) + \frac{(jh)^3}{3!} z^{(4)}(x) + \dots] \\
 &= \sum_{j=0}^k [\alpha_j z(x) + h(j\alpha_j - \beta_j) z'(x) + \left(\frac{j^2}{2} \alpha_j - j\beta_j\right) h^2 z''(x) \\
 &\quad + \left(\frac{j^3}{3!} \alpha_j - \frac{j^2}{2} \beta_j\right) h^3 z^{(3)}(x) + \dots]. \\
 \Rightarrow \mathcal{L}[z(x) : h] &= \sum_{j=0}^k \alpha_j z(x) + \sum_{j=0}^k (j\alpha_j - \beta_j) h z'(x) \\
 &\quad + \sum_{j=0}^k (j^2 \alpha_j - j\beta_j) h^2 z''(x) + \sum_{j=0}^k \left(\frac{j^3}{3!} \alpha_j - \frac{j^2}{2} \beta_j\right) h^3 z^{(3)}(x) + O(h^4). \\
 &= C_0 z(x) + C_1 h z'(x) + C_2 h^2 z''(x) + C_3 h^3 z^{(3)}(x) + O(h^4),
 \end{aligned}$$

onde,

$$C_0 = \sum_{j=0}^k \alpha_j, C_1 = \sum_{j=0}^k (j\alpha_j - \beta_j), C_2 = \sum_{j=0}^k (j^2 \alpha_j - j\beta_j), C_3 = \sum_{j=0}^k \left(\frac{j^3}{3!} \alpha_j - \frac{j^2}{2} \beta_j\right).$$

Definição 1.9. O método linear de passo múltiplo e o operador diferença associado $\mathcal{L}$ tem ordem p , se $C_0 = C_1 = \dots = C_p = 0$ e $C_{p+1} \neq 0$. A constante C_{p+1} é chamada constante de erro.

Definição 1.10. O erro de truncamento local (ETL) em x_{n+k} de um método linear de passo múltiplo é definido por:

$$T_{n+k} = \mathcal{L}[y(x_n) : h] = \sum_{j=0}^k [\alpha_j y(x_n + jh) - h\beta_j y'(x_n + jh)],$$

onde, $y(x)$ é a solução exata do p.v.i.

Se o método tem ordem p , então temos que $T_{n+k} = C_{p+1}h^{p+1}y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2})$, ou seja, $T_{n+k} = O(h^{p+1})$.

Mostramos abaixo que a regra trapezoidal

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_n + f_{n+1}], \quad (1.8)$$

é A-estável, mas não é L-estável. Aplicando (1.8) na equação teste (1.5), temos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{2}y_n + \frac{h\lambda}{2}y_{n+1}, \quad \text{tomando } \mu = h\lambda,$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\mu}{2}y_n + \frac{\mu}{2}y_{n+1}.$$

Daí,

$$y_{n+1} = \frac{[1 + \frac{\mu}{2}]}{[1 - \frac{\mu}{2}]}y_n.$$

Logo,

$$R(\mu) = \frac{[1 + \frac{\mu}{2}]}{[1 - \frac{\mu}{2}]}.$$

Verifiquemos que a regra trapezoidal é A-estável, mostrando que a função $R(\mu)$, satisfaz $|R(\mu)| < 1$ para $Re(\mu) < 0$. Considerando $\mu = \rho e^{i\theta}$,

$$\begin{aligned} |R(\mu)|^2 &= R(\mu)R(\bar{\mu}) \\ &= \left(\frac{1 + \rho \frac{1}{2}e^{i\theta}}{1 - \rho \frac{1}{2}e^{i\theta}} \right) \left(\frac{1 + \rho \frac{1}{2}e^{-i\theta}}{1 - \rho \frac{1}{2}e^{-i\theta}} \right) \\ &= \frac{1 + \frac{\rho}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) + \frac{\rho^2}{4}}{1 - \frac{\rho}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) + \frac{\rho^2}{4}} \\ &= \frac{1 + \rho(\cos(\theta)) + \frac{\rho^2}{4}}{1 - \rho(\cos(\theta)) + \frac{\rho^2}{4}} \\ &= \frac{N}{D}. \end{aligned}$$

Daí segue que, $D - N = -2\rho(\cos(\theta)) = -2Re(\mu) > 0$. Como $D > 0$, temos:

$$\frac{D - N}{D} = 1 - \frac{N}{D} > 0 \implies \frac{N}{D} < 1,$$

portanto,

$$|R(\mu)| = \sqrt{\frac{N}{D}} < 1, \quad \text{com } Re(\mu) < 0.$$

Assim, a regra trapezoidal é A-estável.

Para ser L-estável o método deve satisfazer:

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0.$$

como $\mu \in \mathbb{C}$, $\mu = a + bi$, $a, b \in \mathbb{R}$, daí

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} \left| \frac{1 + \frac{\mu}{2}}{1 - \frac{\mu}{2}} \right| = \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{1 + \frac{(a+bi)}{2}}{1 - \frac{(a+bi)}{2}} \right| = \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{a \left(\frac{1}{a} + \frac{(a+bi)}{2a} \right)}{a \left(\frac{1}{a} - \frac{(a+bi)}{2a} \right)} \right| = 1 \neq 0.$$

portanto, a regra trapezoidal não é L-estável.

1.2 Propriedades

A seguir, apresentamos algumas propriedades envolvendo autovalores que serão utilizadas no estudo da estabilidade de alguns métodos numéricos apresentados no Capítulo 2.

Propriedade 1.2.1. *Seja:*

$$B = \begin{pmatrix} a & b & & \\ c & a & b & \\ & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & c & a & b \\ & & & c & a \end{pmatrix}$$

uma matriz quadrada de ordem N , onde a , b e c podem ser constantes reais ou complexas. Os autovalores de B , denotados por λ_s , são

$$\lambda_s = a + 2\{\sqrt{bc}\} \cos \left(\frac{s\pi}{N+1} \right), \quad s = 1, \dots, N.$$

A demonstração desta propriedade pode ser encontrada em [14].

Suponha que uma matriz quadrada A de ordem N tenha como autovalores as constantes α_i , $i = 1, \dots, N$.

Propriedade 1.2.2. *A transposta de A tem os mesmos autovalores que A .*

Propriedade 1.2.3. *A matriz kA tem como autovalores $k\alpha_i$.*

Propriedade 1.2.4. *A matriz A^p , tem como autovalores α_i^p , p inteiro e positivo.*

Propriedade 1.2.5. *Se A possui inversa, A^{-1} tem como autovalores $\frac{1}{\alpha_i}$.*

Propriedade 1.2.6. *Se $f(x)$ é um polinômio em x , A uma matriz quadrada, então $f(A)$ representa a matriz obtida substituindo x^i por A^i (e x^0 por I) no polinômio f . Se λ é um autovalor de A , então $f(\lambda)$ é autovalor de $f(A)$.*

Na próxima seção descrevemos a fórmula trapezoidal estendida para o p.v.i. (1.2) e fazemos um estudo da estabilidade da mesma.

1.3 Fórmula Trapezoidal Estendida

Abordamos, nesta seção, a fórmula trapezoidal estendida para a solução do p.v.i. (1.2) proposta por Agarwal & Usmani [1], que a definiram através do acoplamento de dois métodos lineares de passo múltiplo:

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})], \quad (1.9)$$

onde,

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_0 y_n + \beta_1 y_{n+1} + h[\beta_2 f(x_n, y_n) + \beta_3 f(x_{n+1}, y_{n+1})], \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.10)$$

Para construir um método de terceira ordem, esses autores escolheram os coeficientes da fórmula (1.9), considerando-a como método de passo múltiplo, com erro de truncamento local da ordem de h^4 . Se designarmos o erro por $\mathcal{T}_{n+1}(h)$ e a solução exata do p.v.i. (1.2) em x_n por Y_n , temos a seguinte discretização da equação (1.2):

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, Y_{n+2})] + \mathcal{T}_{n+1}(h). \quad (1.11)$$



Desenvolvendo em série de Taylor as funções $Y_{n+1}, Y'_{n+1} = f(x_{n+1}, Y_{n+1})$ e $Y'_{n+2} = f(x_{n+2}, Y_{n+2})$, temos:

$$Y_{n+1} = Y_n + Y'_n + \frac{h^2}{2!} Y''_n + \frac{h^3}{3!} Y'''_n + \frac{h^4}{4!} Y^{(4)}_n + \frac{h^5}{5!} Y^{(5)}_n + \dots,$$

$$\alpha_1 Y'_{n+1} = \alpha_1 Y'_n + \alpha_1 h Y''_n + \alpha_1 \frac{h^2}{2!} Y'''_n + \alpha_1 \frac{h^3}{3!} Y^{(4)}_n + \alpha_1 \frac{h^4}{4!} Y^{(5)}_n + \alpha_1 \frac{h^5}{5!} Y^{(6)}_n + \dots,$$

e

$$\alpha_2 Y'_{n+2} = \alpha_2 Y'_n + \alpha_2 2h Y''_n + \alpha_2 \frac{4h^2}{2} Y'''_n + \alpha_2 \frac{8h^3}{6} Y^{(4)}_n + \alpha_2 \frac{16h^4}{24} Y^{(5)}_n + \dots$$

Substituindo as expressões acima na equação (1.11), temos:

$$\begin{aligned} Y_n + Y'_n + \frac{h^2}{2!} Y''_n + \frac{h^3}{3!} Y'''_n + \frac{h^4}{4!} Y^{(4)}_n + \frac{h^5}{5!} Y^{(5)}_n + \dots = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + (\alpha_1 Y'_n + \alpha_1 h Y''_n \\ + \alpha_1 \frac{h^2}{2!} Y'''_n + \alpha_1 \frac{h^3}{3!} Y^{(4)}_n + \alpha_1 \frac{h^4}{4!} Y^{(5)}_n + \alpha_1 \frac{h^5}{5!} Y^{(6)}_n + \dots) + (\alpha_2 Y'_n + \alpha_2 2h Y''_n \\ + \alpha_2 \frac{4h^2}{2} Y'''_n + \alpha_2 \frac{8h^3}{6} Y^{(4)}_n + \alpha_2 \frac{16h^4}{24} Y^{(5)}_n + \dots)] + t_{n+1}(h). \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} (1 - \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2) h Y'_n + \left(\frac{1}{2} - \alpha_1 - 2\alpha_2 \right) h^2 Y''_n + \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2} \alpha_1 - 2\alpha_2 \right) h^3 Y'''_n \\ + \left(\frac{1}{24} - \frac{1}{6} \alpha_1 - \frac{4}{3} \alpha_2 \right) h^4 Y^{(4)}_n + \left(\frac{1}{120} - \frac{1}{24} \alpha_1 - \frac{2}{3} \alpha_2 \right) h^5 Y^{(5)}_n + O(h^6) - \mathcal{T}_{n+1}(h) = 0. \end{aligned}$$

Como queremos que o método tenha ordem 3, os coeficientes de h, h^2 e h^3 devem ser nulos. Daí segue o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 1 - \alpha_0 - \alpha_1 - \alpha_2 = 0 \\ \frac{1}{2} - \alpha_1 - 2\alpha_2 = 0 \\ \frac{1}{6} - \frac{1}{2} \alpha_1 - 2\alpha_2 = 0, \end{cases}$$

que possui uma única solução, dada por:

$$\alpha_0 = \frac{5}{12}, \quad \alpha_1 = \frac{2}{3}, \quad \alpha_2 = -\frac{1}{12}.$$

Substituindo esses valores nos termos h^4 e h^5 , obtemos a expressão do erro de truncamento local $\mathcal{T}_{n+1}(h)$, da fórmula linear de passo múltiplo (1.9):

$$\mathcal{T}_{n+1}(h) = \frac{h^4}{24} Y_n^{(4)} + \frac{13h^5}{360} Y_n^{(5)} + O(h^6). \quad (1.12)$$

Considerando a fórmula (1.10) como um método linear de passo múltiplo, com erro de truncamento local $\tau_{n+1}(h)$ de ordem h^4 , obtemos:

$$Y_{n+2} = \beta_0 Y_n + \beta_1 Y_{n+1} + h[\beta_2 f(x_n, Y_n) + \beta_3 f(x_{n+1}, Y_{n+1})] + \tau_{n+1}(h), \quad (1.13)$$

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

Através do desenvolvimento em série de Taylor das funções Y_{n+i} , para $i = 1, 2$ e Y'_{n+1} , obtemos:

$$\beta_1 Y_{n+1} = \beta_1 Y_n + \beta_1 Y'_n h + \beta_1 \frac{h^2}{2} Y''_n + \beta_1 \frac{h^3}{3!} Y'''_n + \beta_1 \frac{h^4}{4!} Y^{(4)}_n + \beta_1 \frac{h^5}{5!} Y^{(5)}_n + \dots,$$

$$Y_{n+2} = Y_n + 2hY'_n + \frac{4h^2}{2} Y''_n + \frac{8h^3}{3!} Y'''_n + \frac{16h^4}{4!} Y^{(4)}_n + \frac{32h^5}{5!} Y^{(5)}_n + \dots,$$

$$\beta_3 Y'_{n+1} = \beta_3 Y'_n + \beta_3 h Y''_n + \beta_3 \frac{h^2}{2} Y'''_n + \beta_3 \frac{h^3}{3!} Y^{(4)}_n + \beta_3 \frac{h^4}{4!} Y^{(5)}_n + \beta_3 \frac{h^5}{5!} Y^{(6)}_n + \dots$$

Substituindo em (1.13), temos:

$$\begin{aligned} Y_n + 2hY'_n + \frac{4h^2}{2} Y''_n + \frac{8h^3}{3!} Y'''_n + \frac{16h^4}{4!} Y^{(4)}_n + \frac{32h^5}{5!} Y^{(5)}_n + \dots &= \beta_0 Y_n + (\beta_1 Y_n + \beta_1 Y'_n h \\ &+ \beta_1 \frac{h^2}{2} Y''_n + \beta_1 \frac{h^3}{3!} Y'''_n + \beta_1 \frac{h^4}{4!} Y^{(4)}_n + \beta_1 \frac{h^5}{5!} Y^{(5)}_n + \dots) + h[\beta_2 f(x_n, Y_n) + (\beta_3 Y'_n \\ &+ \beta_3 h Y''_n + \beta_3 \frac{h^2}{2} Y'''_n + \beta_3 \frac{h^3}{3!} Y^{(4)}_n + \beta_3 \frac{h^4}{4!} Y^{(5)}_n + \beta_3 \frac{h^5}{5!} Y^{(6)}_n + \dots)] + \tau_{n+1}(h), \end{aligned}$$

logo,

$$\begin{aligned} (1 - \beta_0 - \beta_1)Y_n + (2 - \beta_1 - \beta_2 - \beta_3)hY'_n + \left(2 - \frac{1}{2}\beta_1 - \beta_3\right)h^2Y''_n \\ + \left(\frac{4}{3} - \frac{1}{6}\beta_1 - \frac{1}{2}\beta_3\right)h^3Y'''_n + \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{24}\beta_1 - \frac{1}{6}\beta_3\right)h^4Y^{(4)}_n \\ + \left(\frac{4}{15} - \frac{1}{120}\beta_1 - \frac{1}{24}\beta_3\right)Y_n^{(5)} + O(h^6) - \tau_{n+1}(h) = 0. \end{aligned}$$

Novamente, tratando a equação (1.10) como um método de ordem 3, os coeficientes de h^0 , h , h^2 e h^3 devem ser nulos, ou seja:

$$\begin{cases} 1 - \beta_0 - \beta_1 = 0 \\ 2 - \beta_1 - \beta_2 - \beta_3 = 0 \\ 2 - \frac{1}{2}\beta_1 - \beta_3 = 0 \\ \frac{4}{3} - \frac{1}{6}\beta_1 - \frac{1}{2}\beta_3 = 0. \end{cases}$$

Este sistema linear tem uma única solução:

$$\beta_0 = 5, \quad \beta_1 = -4, \quad \beta_2 = 2, \quad \beta_3 = 4.$$

Substituindo estes valores nos termos das potências de h^4 e h^5 , obtemos o erro de truncamento local $\tau_{n+1}(h)$ da fórmula (1.10):

$$\tau_{n+1}(h) = \frac{h^4}{6} Y_n^{(4)} + \frac{2h^5}{15} Y_n^{(5)} + O(h^6). \quad (1.14)$$

A seguir, tomemos

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_0 y_n + \beta_1 y_{n+1} + h[\beta_2 f(x_n, y_n) - \beta_3 f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (1.15)$$

e a discretização da equação (1.11) como sendo um método de passo um, definida por:

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})] + T_{n+1}(h) \quad (1.16)$$

Para obtermos a expressão do erro de truncamento local $T_{n+1}(h)$, da fórmula estendida, tomamos a diferença entre (1.11) e (1.16) e então:

$$T_{n+1}(h) = \mathcal{T}_{n+1}(h) + h\{\alpha_2[f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})]\}.$$

De (1.13) e (1.15), temos:

$$Y_{n+2} = \hat{y}_{n+2} + \tau_{n+1}(h),$$

e, pelo desenvolvimento em série de Taylor de $f(x_{n+2}, Y_{n+2})$ na variável y , na vizinhança do ponto $(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ e usando a equação acima obtemos:

$$\begin{aligned} f(x_{n+2}, Y_{n+2}) &= f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})(Y_{n+2} - \hat{y}_{n+2}) \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})(Y_{n+2} - \hat{y}_{n+2})^2 \\ &= f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})(Y_{n+2} - \hat{y}_{n+2}) \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})(\tau_{n+1})^2 \\ &= f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})(Y_{n+2} - \hat{y}_{n+2}) + O(h^8) \\ &= f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) + \frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})\tau_{n+1}(h) + O(h^8). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Logo podemos escrever T_{n+1} em função de $\mathcal{T}_{n+1}$ e τ_{n+1} como

$$T_{n+1}(h) = \mathcal{T}_{n+1}(h) + h[\alpha_2 \tau_{n+1}(h) \frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})] + O(h^9), \quad (1.18)$$

expandindo, em série de Taylor, $\frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ nas vizinhanças do ponto $(x_n, \hat{y}_{n+2})$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial y} f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}) = \frac{\partial}{\partial y} f(x_n, \hat{y}_{n+2}) + 2h \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f(x_n, \hat{y}_{n+2}) + O(h^2),$$

e substituindo na equação (1.18), temos:

$$T_{n+1}(h) = \mathcal{T}_{n+1}(h) + h\alpha_2 \tau_{n+1}(h) \left[\frac{\partial}{\partial y} f(x_n, \hat{y}_{n+2}) + 2h \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f(x_n, \hat{y}_{n+2}) + O(h^2) \right] + O(h^9). \quad (1.19)$$

Utilizando (1.12) e (1.14) e sabendo que $\alpha_2 = -\frac{1}{12}$, temos a seguinte expressão para o erro de truncamento local:

$$T_{n+1}(h) = \frac{h^4}{24} Y_n^{(4)} + \frac{h^5}{360} \left(-5 \left(\frac{\partial}{\partial y} f(x_n, \hat{y}_{n+2}) \right) Y_n^{(4)} + 13 Y_n^{(5)} \right) + O(h^6). \quad (1.20)$$

Desprezando o erro de truncamento local, temos um método de passo um de terceira ordem dado por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} [5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}], \quad (1.21)$$

com $\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ e

$$\hat{y}_{n+2} = 5y_n - 4y_{n+1} + h[2f_n + 4f_{n+1}], \quad (1.22)$$

que foi denominado, por Agarwal & Usmani [1], de Fórmula Trapezoidal Estendida (ETF), o qual é um método de ordem 3, como pode ser observado em (1.20).

1.3.1 Análise da Estabilidade

Para investigar a estabilidade da ETF, consideramos novamente a equação teste (1.5). Aplicando à esta equação o método proposto definido por (1.21) e (1.22), temos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{12} [5y_n + 8y_{n+1} - \hat{y}_{n+2}] \quad (1.23)$$



e

$$\hat{y}_{n+2} = 5y_n - 4y_{n+1} + h\lambda[2y_n + 4y_{n+1}]. \quad (1.24)$$

Substituindo (1.24) em (1.23), obtemos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{12}[5y_n + 8y_{n+1} - [5y_n - 4y_{n+1} + h\lambda(2y_n + 4y_{n+1})]],$$

logo,

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{5h\lambda}{12}y_n + \frac{8h\lambda}{12}y_{n+1} - \frac{5h\lambda}{12}y_n + \frac{4h\lambda}{12}y_{n+1} - \frac{2h^2\lambda^2}{12}y_n - \frac{4h^2\lambda^2}{12}y_{n+1} \\ &= y_n(1 - \frac{\mu^2}{6}) + y_{n+1}(\mu - \frac{\mu^2}{3}). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Então

$$\begin{aligned} y_{n+1}(1 - \mu + \frac{\mu^2}{3}) &= y_n(1 - \frac{1}{6}\mu^2) \\ \Rightarrow y_{n+1} &= \frac{y_n(1 - \frac{1}{6}\mu^2)}{(1 - \mu + \frac{\mu^2}{3})} \\ \Rightarrow y_{n+1} &= y_n R(\mu), \end{aligned} \quad (1.26)$$

onde $\mu = \lambda h$. Mostraremos que a fórmula trapezoidal estendida é A-estável, verificando que a função racional $R(\mu)$ satisfaz $|R(\mu)| < 1$ para $Re(\mu) < 0$.

Considerando $\mu = \rho e^{i\theta}$, ($Re(\mu) = \rho \cos(\theta)$), temos:

$$\begin{aligned} |R(\mu)|^2 &= R(\mu)R(\bar{\mu}) = \\ &= \left(\frac{1 - \frac{1}{6}\rho^2 e^{2i\theta}}{1 - \rho e^{i\theta} + \frac{1}{3}\rho^2 e^{2i\theta}} \right) \left(\frac{1 - \frac{1}{6}\rho^2 e^{-2i\theta}}{1 - \rho e^{-i\theta} + \frac{1}{3}\rho^2 e^{-2i\theta}} \right) = \\ &= \frac{1 - \frac{\rho^2}{6}(e^{2i\theta} + e^{-2i\theta}) + \frac{1}{36}\rho^4}{1 - \rho(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) + \frac{\rho^2}{3}(e^{2i\theta} + e^{-2i\theta} + 3) - \frac{1}{3}\rho^3(e^{-i\theta} + e^{i\theta}) + \frac{1}{9}\rho^4} = \\ &= \frac{1 - \frac{1}{3}\rho^2 \cos(2\theta) + \frac{1}{36}\rho^4}{1 - 2\rho \cos(\theta) + \rho^2(1 + \frac{2}{3}\cos(2\theta)) - \frac{2}{3}\rho^3 \cos(\theta) + \frac{1}{9}\rho^4} = \frac{N}{D}, \end{aligned}$$

para obtermos a expressão acima utilizamos as seguintes relações:

$$\begin{cases} z \in \mathbb{C} \Rightarrow \cos(z) = \frac{1}{2}(e^{iz} + e^{-iz}) \\ \cos(2a) = 2\cos^2(a) - 1. \end{cases}$$

Notamos que $N, D > 0$, pois são resultantes do produto de um número complexo pelo seu conjugado. Fazendo a diferença entre o denominador e o numerador da função da estabilidade $R(\mu)$ temos:

$$\begin{aligned} D - N &= -2\rho \cos(\theta) + \rho^2(1 + \cos(2\theta)) - \frac{2}{3}\rho^3 \cos(\theta) + \frac{1}{12}\rho^4 = \\ &= -2\operatorname{Re}(\mu) + 2[\operatorname{Re}(\mu)]^2 - \frac{2}{3}\rho^2 \operatorname{Re}(\mu) + \frac{1}{12}\rho^4, \end{aligned}$$

Daí segue que $D - N > 0$, uma vez que $\operatorname{Re}(\mu) < 0$. Assim, temos que:

$$\frac{D - N}{D} > 0,$$

o que implica na seguinte desigualdade:

$$\frac{N}{D} < 1,$$

Portanto,

$$|R(\mu)| = \sqrt{\frac{N}{D}} < 1, \quad \text{com} \quad \operatorname{Re}(\mu) = \rho \cos(\theta) < 0.$$

Logo, o método é A-estável. Para ser L-estável deve satisfazer a propriedade adicional:

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0.$$

Como $\mu \in \mathbb{C}$ $\mu = a + bi$, $a, b \in \mathbb{R}$, daí segue que:

$$\begin{aligned} \lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} \left| \frac{(1 - \frac{1}{6}\mu^2)}{(1 - \mu + \frac{\mu^2}{3})} \right| &= \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{(1 - \frac{1}{6}(a + bi)^2)}{(1 - (a + bi) + \frac{(a + bi)^2}{3})} \right| = \\ &= \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{(1 - \frac{1}{6}(a^2 - b^2 + 2abi))}{(1 - (a + bi) + \frac{(a^2 - b^2 + 2abi)}{3})} \right| = \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{(1 - \frac{1}{6}(a^2 - b^2)) + \frac{2}{6}abi}{(1 - a + \frac{a^2 - b^2}{3}) + (bi + \frac{2abi}{3})} \right| = \\ &= \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{a^2[(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{6a^2}(a^2 - b^2)) + \frac{2}{6a^2}ab]}{a^2[(\frac{1}{a^2} - \frac{a}{a^2} + \frac{a^2 - b^2}{3a^2}) + (bi + \frac{2abi}{3a^2})]} \right| = \lim_{a \rightarrow -\infty} \left| \frac{-\frac{1}{6}}{\frac{1}{3}} \right| = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

(1.27)

Daí,

$$\lim_{\operatorname{Re}(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = \frac{1}{2} \neq 0.$$

Assim, o método possui a propriedade de ser A-estável, mas não é L-estável.

Descrevemos, na próxima seção, uma família de métodos estendidos. Será feito um estudo da estabilidade dessa família de modo a se obter um método L-estável.

1.4 Uma Família de Métodos Estendidos

Como vimos na seção anterior, a fórmula trapezoidal estendida não é L-estável. Isso incentivou Jacques [9] a investigar a precisão e estabilidade dos métodos na forma geral (1.9) e (1.10), mostrando que os coeficientes α_i e β_j , podem ser escolhidos de forma a construir um método que não é apenas A-estável, mas também L-estável.

Inicialmente, analisamos a ordem de convergência do método na forma geral (1.9) e (1.10). Tomando a equação (1.9) com erro de truncamento local de ordem $k + 1$, denotado por $\mathcal{T}_{n+1}(h)$, e a solução exata do p.v.i. (1.2) no ponto x_n dada por Y_n , temos:

$$Y_{n+1} = Y_n + h[\alpha_0 f(x_n, Y_n) + \alpha_1 f(x_{n+1}, Y_{n+1}) + \alpha_2 f(x_{n+2}, Y_{n+2})] + \mathcal{T}_{n+1}(h), \quad (1.28)$$

onde $|\mathcal{T}_{n+1}(h)| \leq M_1 h^{k+1}$, para alguma constante positiva M_1 .

De modo análogo, se a equação (1.10) tem erro de truncamento local $\tau_{n+1}(h)$ de ordem k , então:

$$Y_{n+2} = \beta_0 Y_n + \beta_1 Y_{n+1} + h[\beta_2 f(x_n, Y_n) + \beta_3 f(x_{n+1}, Y_{n+1})] + \tau_{n+1}(h), \quad (1.29)$$

onde $|\tau_{n+1}(h)| \leq M_2 h^k$, para alguma constante positiva M_2 .

Suponhamos que f é uma função contínua satisfazendo a condição de Lipschitz com constante de Lipschitz L . Podemos, então, subtrair (1.28) de



(1.9), para deduzir que:

$$\begin{aligned} (Y_{n+1} - y_{n+1}) &= (Y_n - y_n) + h[\alpha_0(f(x_n, Y_n) - f(x_n, y_n)) \\ &+ \alpha_1(f(x_{n+1}, Y_{n+1}) - f(x_{n+1}, y_{n+1})) + \alpha_2(f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2}))] + t_{n+1}(h). \\ \implies |Y_{n+1} - y_{n+1}| &\leq |Y_n - y_n| + h[|\alpha_0||f(x_n, Y_n) - f(x_n, y_n)| \\ &+ |\alpha_1||f(x_{n+1}, Y_{n+1}) - f(x_{n+1}, y_{n+1})| + |\alpha_2||f(x_{n+2}, Y_{n+2}) - f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})|] + |t_{n+1}(h)|. \end{aligned}$$

Utilizando a condição de Lipschitz, segue que

$$\begin{aligned} |Y_{n+1} - y_{n+1}| &\leq |Y_n - y_n| + h[|\alpha_0|L(Y_n - y_n)| \\ &+ |\alpha_1|L(Y_{n+1} - y_{n+1})| + |\alpha_2|L(Y_{n+2} - \hat{y}_{n+2})|] + |t_{n+1}(h)| \\ \implies e_{n+1} &\leq e_n + hL(|\alpha_0|e_n + |\alpha_1|e_{n+1} + |\alpha_2|\hat{e}_{n+2}) + M_1h^{k+1}. \end{aligned} \quad (1.30)$$

De modo análogo, subtraindo (1.10) de (1.29) podemos concluir que:

$$\hat{e}_{n+2} \leq |\beta_0|e_n + |\beta_1|e_{n+1} + hL(|\beta_2|e_n + |\beta_3|e_{n+1}) + M_2h^k, \quad (1.31)$$

onde

$$e_i = |Y_i - y_i| \quad \text{e} \quad \hat{e}_i = |Y_i - \hat{y}_i|.$$

Utilizando a desigualdade (1.31) podemos reescrever (1.30) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} e_{n+1} &\leq e_n + hL(|\alpha_0|e_n + |\alpha_1|e_{n+1} + |\alpha_2|(|\beta_0|e_n + |\beta_1|e_{n+1} + hL(|\beta_2|e_n \\ &+ |\beta_3|e_{n+1}) + M_2h^k)) + M_1h^{k+1} = e_n(hL(|\alpha_0| + |\alpha_2\beta_0| + 1) + h^2L^2|\alpha_2\beta_2|) \\ &+ e_{n+1}(hL(|\alpha_1| + |\alpha_2\beta_1|) + h^2L^2|\alpha_2\beta_3|) + hLM_2h^k|\alpha_2| + M_1h^{k+1}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} &e_{n+1}(1 - (hL(|\alpha_1| + |\alpha_2\beta_1|) + h^2L^2|\alpha_2\beta_3|)) \leq \\ &\leq e_n(hL(|\alpha_0| + |\alpha_2\beta_0|) + h^2L^2|\alpha_2\beta_2| + 1) + (LM_2|\alpha_2| + M_1)h^{k+1} \\ \implies e_{n+1} &\leq \frac{(LM_2|\alpha_2| + M_1)h^{k+1} + (1 + (hL(|\alpha_0| + |\alpha_2\beta_0|) + h^2L^2|\alpha_2\beta_2|))e_n}{(1 - (hL(|\alpha_1| + |\alpha_2\beta_1|) + h^2L^2|\alpha_2\beta_3|))}. \end{aligned}$$

Então:

$$e_{n+1} \leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_n + \frac{T}{1-C}, \quad (1.32)$$

onde

$$B = Lh(|\alpha_0| + |\alpha_2\beta_0|) + h^2L^2|\beta_2\alpha_2|,$$

$$C = hL(|\alpha_1| + |\alpha_2\beta_1|) + h^2L^2|\beta_3\alpha_2|,$$

$$T = (LM_2|\alpha_2| + M_1)h^{k+1}$$

e h é escolhido suficientemente pequeno para assegurar que $C < 1$.

Sabemos que $e_0 = 0$, pois y_0 é a condição inicial dada. A desigualdade (1.32) pode, portanto, ser resolvida recursivamente para obtermos um limitante superior para e_n , para qualquer n , como segue:

$$\begin{aligned} e_1 &\leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_0 + \frac{T}{1-C} = \frac{T}{1-C} \\ e_2 &\leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_1 + \frac{T}{1-C} \leq \left(\frac{1+B}{1-C} + 1 \right) \left(\frac{T}{1-C} \right) \\ e_3 &\leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_2 + \frac{T}{1-C} \leq \left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^2 + \frac{1+B}{1-C} + 1 \right) \left(\frac{T}{1-C} \right) \\ e_4 &\leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_3 + \frac{T}{1-C} \leq \left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^3 + \left(\frac{1+B}{1-C} \right)^2 + \frac{1+B}{1-C} + 1 \right) \left(\frac{T}{1-C} \right) \\ &\vdots \\ e_{n+1} &\leq \left(\frac{1+B}{1-C} \right) e_n + \frac{T}{1-C} \leq \left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^n + \left(\frac{1+B}{1-C} \right)^{n-1} + \cdots + 1 \right) \left(\frac{T}{1-C} \right). \end{aligned}$$

Da equação acima notamos que,

$$\left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^n + \left(\frac{1+B}{1-C} \right)^{n-1} + \cdots + 1 \right) = S_{n+1},$$

é uma progressão geométrica (P.G.) de razão $q = \frac{1+B}{1-C}$ cujo termo inicial $a_1 = 1$.

Somando os primeiros termos dessa P.G. $\left(S_n = \sum_{k=0}^{n-1} a_1 q^k = a_1 \frac{q^n - 1}{q - 1} \right)$, temos:

$$S_{n+1} = \frac{\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^{n+1} - 1}{\left(\frac{1+B}{1-C} \right) - 1} = \left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^{n+1} - 1 \right) \left(\frac{1-C}{B+C} \right).$$

Logo,

$$\begin{aligned} e_{n+1} &\leq \left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^{n+1} - 1 \right) \left(\frac{1-C}{B+C} \right) \left(\frac{T}{1-C} \right) \\ &\Rightarrow e_{n+1} \leq \frac{T}{B+C} \left(\left(\frac{1+B}{1-C} \right)^{n+1} - 1 \right) \\ &\Rightarrow e_{n+1} \leq \frac{T}{B+C} \left(\left(1 + \frac{1+B}{1-C} \right)^{n+1} - 1 \right). \end{aligned} \quad (1.33)$$

A relação apresentada abaixo pode ser encontrada em [11], (página 58),

$$(1+t) \leq \exp(t), \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Assim

$$1 + \frac{B+C}{1-C} \leq \exp \left(\frac{B+C}{1-C} \right),$$

e

$$\left(1 + \frac{B+C}{1-C} \right)^n \leq \exp \left(n \left(\frac{B+C}{1-C} \right) \right).$$

Utilizando a relação acima em (1.33), temos:

$$e_n \leq \frac{T}{B+C} \left[\exp \left(\frac{n(B+C)}{1-C} \right) - 1 \right].$$

Como $B+C$ contém um fator de h , o termo entre colchetes é limitado quando $h \rightarrow 0$, com x_n fixo. Finalmente, notamos que T contém um fator de h^{k+1} e o termo $B+C$ tem um fator de h , podemos deduzir que o erro global, $e_n = O(h^k)$. Desta forma, mostramos que o método é convergente de ordem k , quando supomos erros de truncamento local da ordem de $(k+1)$ e k para (1.9) e (1.10), respectivamente.

No erro de truncamento local do método estendido (1.19), τ_{n+1} é multiplicado por h . Portanto basta que o passo de $\hat{y}_{n+2}$ tenha erro de ordem h^3 para que o erro de truncamento local seja da ordem de h^4 .

Utilizando um processo análogo ao considerado para a fórmula trapezoidal estendida e tomando a fórmula principal (1.9) como um método linear de passo múltiplo, com erro de truncamento local $t_{n+1}(h)$ da ordem de h^4 , obtemos:

$$\alpha_0 = \frac{5}{12}, \quad \alpha_1 = \frac{2}{3}, \quad \alpha_2 = -\frac{1}{12},$$

$$t_{n+1}(h) = \frac{h^4}{24}Y_n^{(4)} + \frac{13}{360}h^5Y_n^{(5)} + O(h^6).$$

Os cálculos utilizados para se obter os valores acima, podem ser encontrados na página 23 deste trabalho.

Consideremos, agora, a fórmula intermediária (1.10) como um método de passo múltiplo com erro de truncamento $\tau_{n+1}(h)$ da ordem h^3 , o que nos fornecerá o seguinte sistema:

$$\begin{cases} 1 - \beta_0 - \beta_1 = 0 \\ 2 - \beta_1 - \beta_2 - \beta_3 = 0 \\ 2 - \frac{1}{2}\beta_1 - \beta_3 = 0 \end{cases}$$

O qual é formado pelas três primeiras equações do sistema apresentado na página 25 e tem como solução geral:

$$\beta_1 = 1 - \beta_0, \quad \beta_2 = \frac{1}{2}\beta_0 - \frac{1}{2}, \quad \beta_3 = \frac{1}{2}\beta_0 + \frac{3}{2}.$$

Com esses valores, obtemos uma família de métodos convergentes de terceira ordem que dependem de um parâmetro dado (β_0), dada por,

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}] \quad (1.34)$$

com $\hat{f}_{n+2} = f(x_{n+2}, \hat{y}_{n+2})$ e

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_0 y_n + (1 - \beta_0)y_{n+1} + \frac{h}{2}[(\beta_0 - 1)f_n + (\beta_0 + 3)f_{n+1}]. \quad (1.35)$$

1.4.1 Análise da Estabilidade

Nesta seção construímos, a partir da família de métodos estendidos apresentada na seção anterior, um método que é L-estável.



Veremos agora para que valores de β_0 a família de métodos, dada por (1.34) e (1.35) satisfaz a condição $\lim_{Re(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0$. Aplicando à equação teste definida por (1.5), obtemos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h\lambda}{12} [5y_n + 8y_{n+1} - \hat{y}_{n+2}] \quad (1.36)$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = \beta_0 y_n + (1 - \beta_0) y_{n+1} + \frac{h\lambda}{2} [(\beta_0 - 1)y_n + (\beta_0 + 3)y_{n+1}]. \quad (1.37)$$

Substituindo (1.37) em (1.36) obtemos:

$$y_{n+1} = R(\mu)y_n,$$

com $\mu = \lambda h$, e a função de estabilidade, $R(\mu)$ é:

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{(5-\beta_0)}{12}\mu + \frac{(1-\beta_0)}{24}\mu^2}{1 + \frac{(-7-\beta_0)}{12}\mu + \frac{(\beta_0+3)}{24}\mu^2}. \quad (1.38)$$

Vamos supor que o fator de μ^2 no numerador seja nulo, isto é

$$\frac{1 - \beta_0}{24} = 0.$$

Daí, $\beta_0 = 1$.

Assim, substituindo β_0 em (1.38) obtemos a função de estabilidade

$$R(\mu) = \frac{1 + \frac{1}{3}\mu}{1 - \frac{2}{3}\mu + \frac{1}{6}\mu^2},$$

e fazendo $Re(\mu) \rightarrow -\infty$, temos que $R(\mu) \rightarrow 0$, o que nos fornece

$$\lim_{Re(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0.$$

Verifiquemos agora que o método é A-estável. Seja $\mu = \rho e^{i\theta}$ então:

$$\begin{aligned} |R(\mu)|^2 &= R(\mu)R(\bar{\mu}) = \\ &= \frac{(1 + \frac{1}{3}\rho e^{i\theta})(1 + \frac{1}{3}\rho e^{-i\theta})}{(1 - \frac{2}{3}\rho e^{i\theta} + \frac{1}{6}\rho^2 e^{2i\theta})(1 - \frac{2}{3}\rho e^{-i\theta} + \frac{1}{6}\rho^2 e^{-2i\theta})} \end{aligned}$$

$$= \frac{1 + \frac{2}{3}\rho \cos(\theta) + \frac{\rho^2}{9}}{1 - \frac{4}{3}\rho \cos(\theta) + \frac{4}{9}\rho^2 + \frac{\rho^2}{3} \cos(2\theta) - \frac{2}{9}\rho^3 \cos(\theta) + \frac{\rho^4}{36}} = \frac{N}{D}.$$

Fazendo a diferença

$$D - N = -2\rho \cos(\theta) + \frac{1}{3}\rho^2(1 + \cos(2\theta)) - \frac{2}{9}\rho^3 \cos(\theta) + \frac{1}{36}\rho^4,$$

onde $D - N > 0$, sendo $Re(\mu) = \rho \cos(\theta) < 0$.

Logo, $\frac{D-N}{D} > 0 \Rightarrow \frac{N}{D} < 1$. Assim, $|R(\mu)| = \sqrt{\frac{N}{D}} < 1$, ou seja, obtemos a A-estabilidade do método. Como esse método é A-estável e $\lim_{Re(\mu) \rightarrow -\infty} |R(\mu)| = 0$, temos que ele é L-estável.

Portanto, tomando $\beta_0 = 1$ temos um método de terceira ordem que é L-estável, dado por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}] \quad (1.39)$$

e

$$\hat{y}_{n+2} = y_n + 2hf_{n+1}. \quad (1.40)$$

Capítulo 2

Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais Parabólicas

Mostramos, neste capítulo, alguns exemplos de equações envolvendo derivadas parciais. Nas próximas seções introduzimos os seguintes métodos: explícito, de direções alternadas implícitos e localmente unidimensional. Finalizamos com um método numérico implícito localmente unidimensional para resolução das equações de difusão e convecção-difusão em duas dimensões.

2.1 Conceitos Preliminares

Seja u uma função, $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, onde $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. A derivada parcial de u em relação à variável x , que é a primeira variável, poderá ser denotada por

$$\frac{\partial u}{\partial x}, \quad u_x \quad \text{ou} \quad \partial_x u,$$

e a derivada total de u com relação à x será denotada



$$\frac{du}{dx}.$$

De maneira análoga, as derivadas parciais de segunda ordem em relação às variáveis x e/ou y poderão ser denotadas por:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad u_{xx}, \quad \partial_x^2 u, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} \quad \text{ou} \quad u_{xy}.$$

A seguir, daremos algumas definições envolvendo equações diferenciais parciais (EDPs).

Definição 2.1. *Uma equação diferencial parcial é uma equação que envolve uma função incógnita de duas ou mais variáveis e suas derivadas. Logo, uma equação diferencial parcial de n variáveis independentes, $x_1, \dots, x_n$, é uma equação na forma:*

$$F\left(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 x_2}, \dots\right) = 0$$

Definição 2.2. *A ordem de uma equação diferencial parcial é dada pela mais alta ordem da derivada que ocorre na equação.*

Definição 2.3. *Uma equação diferencial parcial é dita linear se for de primeiro grau em u e em todas as suas derivadas parciais que ocorrem na equação. Caso contrário, dizemos que a equação é não-linear.*

Uma equação linear de primeira ordem é uma expressão na forma:

$$\sum_{i=1}^n a_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} + b(x)u + c(x) = 0,$$

onde $x = (x_1, \dots, x_n)$ e pelo menos um dos coeficientes a_i é não-nulo.

Logo, uma equação linear de segunda ordem é uma equação dada por:

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{j=1}^n b_j(x) \frac{\partial u}{\partial x_j} + c(x)u + d(x) = 0.$$

Com pelo menos um dos a_i , não nulo.

Definição 2.4. *A parcela da equação que apresenta derivada de ordem mais alta recebe o nome de parte principal. Dessa forma, a parte principal da equação a é:*

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}.$$

A seguir, vamos classificar as EDPs de segunda ordem em três grandes grupos.

2.1.1 Classificação das EDPs de Segunda Ordem

Dentre as equações não-lineares, as que tem parte principal linear são chamadas semi-lineares. Assim, uma equação diferencial parcial semi-linear de segunda ordem é dada por:

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = f\left(x, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}\right).$$

Representamos as equações diferenciais parciais de segunda ordem semi-lineares da seguinte forma:

$$a(x, y)u_{xx} + 2b(x, y)u_{xy} + c(x, y)u_{yy} = f(x, y, u, u_x, u_y), \quad (2.1)$$

com funções $a(x, y)$, $b(x, y)$ e $c(x, y)$, tais que,

$$a^2 + b^2 + c^2 \neq 0,$$

onde $u(x, y)$ é a função incógnita.

A EDP (2.1) pode ser classificada, segundo [8], da seguinte forma:

- elítica em um ponto (x_0, y_0) , se $b^2(x_0, y_0) - a(x_0, y_0)c(x_0, y_0) < 0$;
- parabólica em um ponto (x_0, y_0) , se $b^2(x_0, y_0) - a(x_0, y_0)c(x_0, y_0) = 0$;
- hiperbólica em um ponto (x_0, y_0) , se $b^2(x_0, y_0) - a(x_0, y_0)c(x_0, y_0) > 0$.

A classificação das EDPs em três grandes grupos tem grande importância nas aplicações, na análise teórica do problema e na elaboração de algoritmos numéricos, que devem ser convenientes para cada grupo.



2.1.2 Condições de Contorno e Iniciais

Em 1902, o matemático Hadamard introduziu o conceito de problema *bem posto* [5]. Um problema bem posto é aquele que apresenta exatamente uma solução (existência e unicidade), a qual varia continuamente com os dados (estabilidade). Este conceito, fornece uma indicação da adaptação do modelo matemático ao sistema real que se pretende estudar.

Uma importante diferença entre as equações diferenciais ordinárias (EDOs) e as EDPs é a informação necessária para garantir a unicidade de solução. No caso de EDOs obtemos unicidade impondo condições iniciais, isto é, fixando os valores da solução e de suas derivadas até certa ordem, em um determinado ponto, chamadas condições de valores iniciais. Já no caso de EDPs, como temos mais de uma variável dependente, é natural fixar uma das variáveis e impor o valor da solução e de suas derivadas parciais em relação à variável fixa como função das outras variáveis.

Generalizando o conceito de condições iniciais, impondo o valor da solução e suas derivadas ao longo de uma curva inicial (se $n = 2$) ou superfície inicial (se $n = 3$), o problema correspondente pode ser chamado de problema de *Cauchy* ou de *valor inicial*. Podemos, também, obter unicidade no caso de intervalos finitos, impondo condições nos extremos dos intervalos, as chamadas condições de contorno.

No caso de EDPs procuramos soluções definidas em um aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$; é natural substituir os extremos do intervalo ($n = 1$) pela fronteira da região Ω ($\partial\Omega$). Quando impomos condições sobre o valor da solução e de suas derivadas na fronteira da região, temos um problema de valores de contorno ou, simplesmente, problema de contorno.

A seguir exibiremos alguns exemplos de EDPs.



2.1.3 Exemplos de EDPs

O primeiro exemplo, trata-se da equação de Poisson, que se refere a fenômenos que não dependem do tempo.

Defini-se o operador ∇ em $\mathbb{R}^n$ da seguinte forma:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$$

e

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}.$$

Utilizaremos o símbolo Δ para denotar laplaciano, isto é,

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$$

é o laplaciano em $\mathbb{R}^n$.

Equação de Poisson

Considere a equação diferencial definida numa região $\mathbf{R}$ do plano, dada por:

$$u_{xx} + u_{yy} = f(x, y), \quad (x, y) \in \mathbf{R} \subset \mathbb{R}^2. \quad (2.2)$$

Observando a representação geral, temos: $a = c = 1$ e $b = 0$. Portanto, (2.2) é uma equação elítica chamada *equação do potencial* ou *equação de Poisson*. Se $f(x, y) = 0$ é comum chamá-la de equação de Laplace.

As notações usuais para equação de Poisson são:

$$\Delta u = f(x, y) \quad \text{ou} \quad \nabla^2 u = f(x, y).$$

Para definir um problema bem posto para (2.2), devemos impor condições para $u(x, y)$ no contorno da região $\mathbf{R}$.

O próximo exemplo, refere-se à equação do calor não-homogênea que está associada a fenômenos de difusão e transmissão do calor em sólidos.

Equação do Calor

Seja $I = (c, d)$ um intervalo na reta e $a(x, t) > 0$. Considere a equação diferencial em $u(x, t)$

$$a(x, t)u_{xx} - u_t = f(x, t), \quad x \in I \subset \mathbb{R} \quad \text{e} \quad t > 0. \quad (2.3)$$

Nos problemas de evolução uma das variáveis é o tempo, por isso, por conveniência, trocamos a variável y por t . Esta última variável merece um tratamento especial, pois temos na variável tempo um problema de valor inicial e na variável (ou variáveis) espacial (espaciais), um problema de valor de contorno.

Como $a(x, y) > 0$, $b = c = 0$, a equação (2.3) é do tipo parabólica, chamada *equação do calor* (ou da *difusão*). A equação do calor para sistemas bi e tridimensionais nas variáveis espaciais é dada por:

$$u_t - a(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y, t), \quad a(x, y, t) > 0, \quad (x, y) \in \mathbf{R} \subset \mathbb{R}^2, \quad t > 0,$$

$$u_t - a(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) = f(x, y, z, t), \quad a(x, y, z, t) > 0, \quad (x, y, z) \in \mathbf{V} \subset \mathbb{R}^3 \quad \text{e} \quad t > 0.$$

Como último exemplo apresentamos a equação da onda, que está associada à propagação de ondas.

Equação da Onda

Seja $a(x, t) > 0$ e seja o intervalo na reta $I = (c, d)$. Tomemos o seguinte problema de evolução:

$$a(x, t)u_{xx} - u_{tt} = f(x, t), \quad x \in I \quad \text{e} \quad t > 0. \quad (2.4)$$

Como $a(x, y) > 0$, $b = 0$ e $c = -1$ temos, então, pela classificação apresentada na seção 2.1.1, que se trata de uma equação hiperbólica. Como já dissemos anteriormente, esta equação é chamada *equação da onda*, pois descreve o fenômeno da propagação de ondas. No caso de uma variável espacial, a solução $u(x, t)$ representaria a posição de uma partícula da corda vibrante no instante t .

Para os casos bi e tridimensionais, na variável espacial, a equação da onda assume as formas:

$$u_{tt} - a(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y, t), \quad a(x, y, t) > 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad t > 0,$$

$$u_{tt} - a(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) = f(x, y, z, t), \quad a(x, y, z, t) > 0 \quad (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0.$$

Nas equações hiperbólicas, a função incógnita aparece sob duas derivadas com relação à variável tempo. Para que elas sejam um problema bem-posto são necessárias duas condições iniciais, $u(x, 0)$ e $u_t(x, 0)$. Dessa maneira, são necessárias condições de contorno nas variáveis espaciais, que podem envolver a função incógnita u e suas derivadas e condições iniciais.

As equações de Poisson, do Calor e da Onda são exemplos clássicos que representam cada uma das três categorias descritas anteriormente.

Na seção que se segue tratamos alguns métodos numéricos associados às equações diferenciais parabólicas, as quais são o objetivo de estudo deste trabalho.

2.2 Equações Parabólicas em Duas Dimensões

Nesta seção, faremos um breve estudo envolvendo métodos numéricos para equações diferenciais parciais parabólicas em duas dimensões. Este estudo nos auxiliará na dedução de alguns métodos explícitos e implícitos que serão apresentados posteriormente.

Dada equação:

$$u_t = a_1 u_{xx} + a_2 u_{yy} \quad (= Lu), \quad u = u(x, y, t), \quad a_1 = a_1(x, y, t), \quad a_2 = a_2(x, y, t), \quad (2.5)$$

chamamos de malha espacial o conjunto M de pontos:

$$M = \{(x, y) | x = lh_1, \quad y = mh_2 \quad l, m \in \mathbb{Z}\}, \quad h_1, h_2 > 0.$$

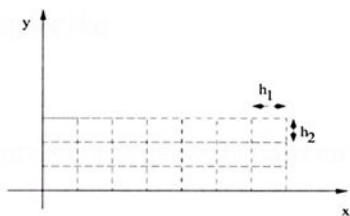


Figura 2.1: Malha de Discretização

Expandindo $u(x, y, t_{n+1}) = u(x, y, t_n + k)$ em série de Taylor em torno de (x, y, t_n) , temos:

$$u(x, y, t_{n+1}) = u(x, y, t_n) + ku_t(x, y, t_n) + \frac{k^2}{2!}u_{tt}(x, y, t_n) + \frac{k^3}{3!}u_{ttt}(x, y, t_n) + \dots \quad (2.6)$$

Como $u_t = Lu$ e L independe de t , temos:

$$u_{tt} = (Lu)_t = Lu_t = LLu = L^2u, \quad \text{logo} \quad \frac{\partial^p u}{\partial t^p} = L^p u.$$

Usando esse resultado em (2.6), temos:

$$\begin{aligned} u(x, y, t_{n+1}) &= u(x, y, t_n) + kLu(x, y, t_n) \\ &+ \frac{k^2}{2!}L^2u(x, y, t_n) + \frac{k^3}{3!}L^3u(x, y, t_n) + \dots \\ &= \left(I + kL + \frac{k^2}{2!}L^2 + \frac{k^3}{3!}L^3 + \dots \right) u(x, y, t_n) = \exp(kL)u(x, y, t_n). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Assim,

$$u(x, y, t_{n+1}) = \exp(kL)u(x, y, t_n). \quad (2.8)$$

Esta igualdade será utilizada para dedução dos métodos apresentados a seguir.

Para um inteiro positivo N , consideremos a malha espacial retangular (x_i, y_j) , $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$, $i, j = 0, \dots, N+1$, com incremento $\Delta x = \frac{l_x}{N+1}$, $\Delta y = \frac{l_y}{N+1}$ e $t_n = n\Delta t$, $n = 1, 2, 3, \dots$, $\Delta t > 0$.

2.2.1 Método Explícito

Utilizando a teoria apresentada na seção anterior, vamos deduzir um método explícito [13]. Seja:

$$Lu = u_{xx} + u_{yy} = (D_1^2 + D_2^2)u, \quad a_1 = a_2 = 1, \quad D_1 u = u_x, D_2 u = u_y.$$

A equação (2.8) torna-se então $u(x, y, t_{n+1}) = \exp(kD_1^2) \exp(kD_2^2)u(x, y, t_n)$.

A seguir, vamos relacionar os operadores D_1 e D_2 , com os operadores de diferenças centradas $\delta_x f(x, y) = f(x + \frac{h_1}{2}, y) - f(x - \frac{h_1}{2}, y) = E_x^{\frac{h_1}{2}} f(x, y) - E_x^{-\frac{h_1}{2}} f(x, y)$ e $\delta_y f(x, y) = f(x, y + \frac{h_2}{2}) - f(x, y - \frac{h_2}{2}) = E_y^{\frac{h_2}{2}} f(x, y) - E_y^{-\frac{h_2}{2}} f(x, y)$.

Utilizando a notação apresentada anteriormente e o fato de $E^{jh} z(x) = z(x + jh) = \exp((jh)D)z(x) = e^{jhD} z(x)$. Temos que $E^h = e^{hD}$ e assim:

$$\begin{aligned} \delta &= E^{\frac{1}{2}h} - E^{-\frac{1}{2}h} \implies e^{\frac{1}{2}hD} - e^{-\frac{1}{2}hD} = 2\sinh\left(\frac{1}{2}hD\right) \\ &\implies \frac{\delta}{2} = \sinh\left(\frac{1}{2}hD\right) \\ &\implies \sinh^{-1}\left(\frac{\delta}{2}\right) = \frac{hD}{2} \\ &\implies 2\sinh^{-1}\left(\frac{\delta}{2}\right) = hD. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Como

$$\sinh^{-1}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2k)! x^{2k+1}}{2^{2k} (k!)^2 (2k+1)}, \quad (2.10)$$

utilizando a equação acima temos que:

$$\begin{aligned} 2\sinh^{-1}\left(\frac{\delta}{2}\right) &= 2 \left(\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2k)!}{2^{2k} (k!)^2 (2k+1)} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{2k+1} \right) \\ &= 2 \left(\frac{\delta}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{3} \left(\frac{\delta}{2}\right)^3 + \frac{3}{2} \frac{1}{4} \frac{1}{5} \left(\frac{\delta}{2}\right)^5 - \frac{45}{4} \frac{1}{36} \frac{1}{7} \left(\frac{\delta}{2}\right)^7 + \dots \right). \end{aligned}$$

Daí, segue que:

$$\left(2\sinh^{-1}\left(\frac{\delta}{2}\right) \right)^2 = \left(2 \left(\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2k)!}{2^{2k} (k!)^2 (2k+1)} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{2k+1} \right) \right)^2$$

$$\begin{aligned}
 &= 4 \left(\frac{\delta}{2} - \frac{1}{6} \left(\frac{\delta}{2} \right)^3 + \frac{3}{40} \left(\frac{\delta}{2} \right)^5 - \dots \right)^2 \\
 &= 4 \left(\frac{\delta^2}{4} - \left(\frac{1}{2 \cdot 6} + \frac{1}{2 \cdot 6} \right) \frac{\delta^4}{2^3} + \left(\frac{3}{40} \frac{1}{2^4} + \frac{3}{40} \frac{1}{2^4} + \frac{1}{36} \frac{1}{2^4} \right) \frac{\delta^6}{4} - \dots \right) \\
 &= 4 \left(\frac{\delta^2}{4} - \frac{1}{12} \frac{\delta^4}{4} + \frac{256}{23040} \frac{\delta^6}{4} - \dots \right) \\
 &= \delta^2 - \frac{1}{12} \delta^4 + \frac{1}{90} \delta^6 - \dots
 \end{aligned}$$

Assim, tomando $D = D_1$, $\delta = \delta_x$ e depois $D = D_2$ e $\delta = \delta_y$, temos:

$$D_1^2 = \frac{1}{h^2} \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 + \frac{1}{90} \delta_x^6 \dots \right)$$

e

$$D_2^2 = \frac{1}{h^2} \left(\delta_y^2 - \frac{1}{12} \delta_y^4 + \frac{1}{90} \delta_y^6 \dots \right).$$

Substituindo as expressões anteriores na equação

$$u(x, y, t_{n+1}) = \exp(kD_1^2) \exp(kD_2^2) u(x, y, t_n),$$

obtemos:

$$u(x, y, t_{n+1}) = \exp \left(\sigma \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 + \frac{1}{90} \delta_x^6 \dots \right) \right) \exp \left(\sigma \left(\delta_y^2 - \frac{1}{12} \delta_y^4 + \frac{1}{90} \delta_y^6 \dots \right) \right) u(x, y, t_n).$$

Expandindo em Série de Taylor, temos:

$$\begin{aligned}
 &\exp \left(\sigma \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 + \frac{1}{90} \delta_x^6 \dots \right) \right) = \\
 &= 1 + \sigma \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 + \frac{1}{90} \delta_x^6 \dots \right) + \frac{\sigma^2}{2} \left(\delta_x^2 - \frac{1}{12} \delta_x^4 + \frac{1}{90} \delta_x^6 \dots \right)^2 + \dots
 \end{aligned}$$

onde, $\sigma = \frac{k}{h^2}$ e $h_1 = h_2$. Logo,

$$u(x, y, t_{n+1}) = \left[1 + \sigma \delta_x^2 + \frac{1}{2} \sigma \left(\sigma - \frac{1}{6} \right) \delta_x^4 + \dots \right] \left[1 + \sigma \delta_y^2 + \frac{1}{2} \sigma \left(\sigma - \frac{1}{6} \right) \delta_y^4 + \dots \right] u(x, y, t_n). \quad (2.11)$$

Calculando o produto entre as duas séries e em seguida considerando somente os termos de primeira ordem em σ obtemos:

$$u_{l,m}^{n+1} = [1 + \sigma(\delta_x^2 + \delta_y^2)] u_{l,m}^n + O(k^2 + kh^2), \quad (2.12)$$

(notação: $u_{l,m}^n = u(x_l, y_m, t_n)$), que é o método explícito padrão envolvendo 5 pontos no nível $t = nk$. Outro método simples é dado truncando-se a equação (2.11) nos termos de primeira ordem em σ , ou seja,

$$u_{l,m}^{n+1} = (1 + \sigma\delta_x^2)(1 + \sigma\delta_y^2)u_{l,m}^n + O(k^2 + kh^2). \quad (2.13)$$

2.2.2 Métodos de Direções Alternadas Implícitos (ADI)

A discretização de uma equação parabólica em duas dimensões por um método implícito leva à necessidade de solução de sistemas lineares. A discretização implícita, por exemplo, equivalente a (2.12) é:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \sigma(\delta_x^2 + \delta_y^2)u_{i,j}^{n+1},$$

ou seja,

$$(1 - \sigma(\delta_x^2 + \delta_y^2))u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n. \quad (2.14)$$

Métodos ADI são métodos de 2-passos [13], onde em cada passo uma das variáveis é tratada implicitamente.

Da equação (2.8) temos:

$$u(x, y, t_{n+1}) = \exp(k(D_1^2 + D_2^2))u(x, y, t_n) = \exp\left(\frac{k}{2}(D_1^2 + D_2^2) + \frac{k}{2}(D_1^2 + D_2^2)\right)u(x, y, t_n).$$

Logo,

$$\exp\left(-\frac{k}{2}(D_1^2 + D_2^2)\right)u(x, y, t_{n+1}) = \exp\left(\frac{k}{2}(D_1^2 + D_2^2)\right)u(x, y, t_n). \quad (2.15)$$

$$\Rightarrow \exp\left(-\frac{k}{2}D_1^2\right)\exp\left(-\frac{k}{2}D_2^2\right)u(x, y, t_{n+1}) = \exp\left(\frac{k}{2}D_1^2\right)\exp\left(\frac{k}{2}D_2^2\right)u(x, y, t_n),$$

cujas expansões e truncamento da série fornece a equação:

$$\left(1 - \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2\right)\left(1 - \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2\right)u_{i,j}^{n+1} = \left(1 + \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2\right)\left(1 + \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2\right)u_{i,j}^n + O(k^3 + h^2k). \quad (2.16)$$

Esta é uma modificação do método de Crank-Nicolson em 2 dimensões que é dado por:

$$\left(1 - \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2 - \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2\right) u_{i,j}^{n+1} = \left(1 + \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2 + \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2\right) u_{i,j}^n + O(k^3 + kh^2). \quad (2.17)$$

Para obter (2.16) de (2.17) foi adicionado do lado esquerdo da equação (2.17) $\frac{\sigma}{4}\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}^{n+1}$ e $\frac{\sigma}{4}\delta_x^2\delta_y^2 u_{i,j}^n$ do lado direito.

A equação (2.16) pode ser implementada de uma forma mais conveniente computacionalmente, introduzindo-se um passo intermediário para decompô-la em duas equações. Para isso tomamos:

$$X = \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2, \quad Y = \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2, \quad (2.18)$$

Considerando que os operadores $(1+X)$, $(1-X)$, $(1+Y)$ e $(1-Y)$ admitem inversa, segue da equação (2.16) que

$$\begin{aligned} (1+X)^{-1}(1-X)(1-Y)u_{i,j}^{n+1} &= (1+Y)u_{i,j}^n \\ \Rightarrow (1-X)^{-1}(1+X)^{-1}(1-X)(1-Y)u_{i,j}^{n+1} &= \underbrace{(1-X)^{-1}(1+Y)u_{i,j}^n}_{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

assim

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} &= (1-X)^{-1}(1+Y)u_{i,j}^n \\ \Rightarrow (1-X)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} &= (1+Y)u_{i,j}^n \end{aligned} \quad (2.20)$$

Por outro lado segue da equação (2.19) que

$$\begin{aligned} (1+X)^{-1}(1-X)(1-Y)u_{i,j}^{n+1} &= (1-X)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow (1-X)(1-Y)u_{i,j}^{n+1} &= (1+X)(1-X)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Usando o fato dos operadores $(1+X)$ e $(1-X)$ comutarem temos

$$\begin{aligned} (1-X)(1-Y)u_{i,j}^{n+1} &= (1-X)(1+X)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow (1-Y)u_{i,j}^{n+1} &= (1+X)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.21)$$



Assim, a decomposição da equação (2.16) é dada por:

$$\left(1 - \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2\right) u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \left(1 + \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2\right) u_{i,j}^n, \quad (2.22)$$

$$\left(1 - \frac{1}{2}\sigma\delta_y^2\right) u_{i,j}^{n+1} = \left(1 + \frac{1}{2}\sigma\delta_x^2\right) u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.23)$$

No método ADI descrito pelas equações (2.22) e (2.23), no primeiro passo a variável y é tratada explicitamente e a variável x implicitamente, porém no segundo passo os papéis se invertem.

2.2.3 Método Localmente Unidimensional

Vamos ilustrar os métodos localmente unidimensionais (LOD) [13] resolvendo a equação:

$$u_t = u_{xx} + u_{yy},$$

que pode ser escrita como o par de equações:

$$\frac{1}{2}u_t = u_{xx}, \quad \text{e} \quad \frac{1}{2}u_t = u_{yy}. \quad (2.24)$$

A idéia é portanto, aproximar a solução de um problema em duas dimensões, resolvendo-se dois problemas unidimensionais que localmente representam o problema original. As discretizações mais simples dessas equações são:

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

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

que podem ser escritas na forma compacta:

$$u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = (1 + \sigma\delta_x^2)u_{i,j}^n \quad \text{e} \quad u_{i,j}^{n+1} = (1 + \sigma\delta_y^2)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.25)$$

Substituindo-se $u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$ temos:

$$u_{i,j}^{n+1} = (1 + \sigma\delta_y^2)(1 + \sigma\delta_x^2)u_{i,j}^n.$$

Obtemos assim a equação (2.13), que aproxima a solução com erro de truncamento $O(k^2 + kh^2)$.

A seguir apresentamos um exemplo de um método LOD, o método de CN-LOD para o par de equações (2.24) o qual toma a forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^n}{\frac{k}{2}} \right) &= \frac{\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x^2 u_{i,j}^n}{2h^2} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\frac{k}{2}} \right) &= \frac{\delta_y^2 u_{i,j}^{n+1} + \delta_y^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{2h^2}, \end{aligned}$$

que pode ser reescrito como:

$$\left(1 - \frac{\sigma}{2} \delta_x^2\right) u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \left(1 + \frac{\sigma}{2} \delta_x^2\right) u_{i,j}^n, \quad (2.26)$$

$$\left(1 - \frac{\sigma}{2} \delta_y^2\right) u_{i,j}^{n+1} = \left(1 + \frac{\sigma}{2} \delta_y^2\right) u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.27)$$

Utilizando a notação apresentada em (2.18) e a equação (2.26) temos:

$$u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = (1 - X^2)^{-1} (1 + X^2) u_{i,j}^n,$$

Substituindo $u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$ na equação (2.27), obtemos:

$$\begin{aligned} (1 - Y^2) u_{i,j}^{n+1} &= (1 + Y^2) (1 - X^2)^{-1} (1 + X^2) u_{i,j}^n \\ \Rightarrow (1 - X)(1 - Y) u_{i,j}^{n+1} &= (1 - X^2) (1 + Y^2) (1 - X^2)^{-1} (1 + X^2) u_{i,j}^n. \end{aligned}$$

Como $(1 - X)$ e $(1 + Y)$ comutam temos

$$\begin{aligned} (1 - X)(1 - Y) u_{i,j}^{n+1} &= (1 + Y)(1 - X)(1 - X)^{-1} (1 + X) u_{i,j}^n \\ \Rightarrow (1 - X)(1 - Y) u_{i,j}^{n+1} &= (1 + Y)(1 + X) u_{i,j}^n \\ \Rightarrow (1 - X)(1 - Y) u_{i,j}^{n+1} &= (1 + X)(1 + Y) u_{i,j}^n \end{aligned} \quad (2.28)$$

Então,

$$\left(1 - \frac{\sigma}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{\sigma}{2} \delta_y^2\right) u_{i,j}^{n+1} = \left(1 + \frac{\sigma}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{\sigma}{2} \delta_y^2\right) u_{i,j}^n.$$

Assim, notamos que o método ADI descrito pelas equações (2.22) e (2.23) e o método LOD descrito por (2.26) e (2.27) são equivalentes.

Na próxima seção tratamos da fórmula trapezoidal estendida aplicada à equação de difusão.

2.3 Equação de Difusão em Duas Dimensões

Será descrito, nesta seção, um método de integração no tempo localmente unidimensional para a equação de difusão em duas dimensões, baseado na fórmula trapezoidal estendida, com condições de fronteira de Dirichlet e Neumann.

Consideremos, então, a equação de difusão em duas dimensões:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \quad t > 0, \quad (\nu \text{ constante}), \quad (2.29)$$

com condição inicial:

$$u(x, y, 0) = f(x, y), \quad 0 \leq x \leq l_x, \quad 0 \leq y \leq l_y,$$

e condições de fronteira de Dirichlet:

$$u(0, y, t) = g_0(y, t), \quad u(l_x, y, t) = g_1(y, t), \quad (2.30)$$

$$u(x, 0, t) = f_0(x, t), \quad u(x, l_y, t) = f_1(x, t), \quad t > 0.$$

A idéia do método é reescrever a equação (2.29) na forma de duas EDPs, que representam o problema original em uma dimensão (espacial):

$$\frac{u_t}{2} = \nu u_{xx}, \quad \frac{u_t}{2} = \nu u_{yy},$$

e, então, aplicar a fórmula trapezoidal estendida no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$ para a primeira equação e no intervalo $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$ para a segunda equação.

Como já vimos, um método estendido L-estável associado ao p.v.i., $y' = f(x, y)$, $y(a) = \eta$, é dado por:

$$\hat{y}_{n+2} = y_n + 2h f_{n+1}$$

$$\hat{f}_{n+2} = f(t_{n+2}, \hat{y}_{n+2}),$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}[5f_n + 8f_{n+1} - \hat{f}_{n+2}].$$

Tomando o passo igual a $\frac{h}{2}$, temos:

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + hf_{n+\frac{1}{2}}.$$

$$\hat{f}_{n+1} = f(t_{n+1}, \hat{y}_{n+1}),$$

$$y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \frac{h}{24}[5f_n + 8f_{n+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{n+1}].$$

2.3.1 Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional (ETF-LOD)

Da discretização da derivada espacial em $u_t = 2\nu u_{xx}$, pela fórmula de diferença centrada, para $j = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)], \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.31)$$

Fixando j e fazendo $i = 1, \dots, N$ temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)],$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{2,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{3,j}(t) - 2u_{2,j}(t) + u_{1,j}(t)],$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N-1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N,j}(t) - 2u_{N-1,j}(t) + u_{N-2,j}(t)],$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)].$$

Tomando

$$u_j = \begin{pmatrix} u_{1,j}(t) \\ u_{2,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N-1,j}(t) \\ u_{N,j}(t) \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad a_j = \begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix},$$

obtemos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u_{1,j}(t) \\ u_{2,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N-1,j}(t) \\ u_{N,j}(t) \end{pmatrix} &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} \left(\underbrace{\begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix}}_{a_j} - \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}}_J \underbrace{\begin{pmatrix} u_{1,j}(t) \\ u_{2,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N-1,j}(t) \\ u_{N,j}(t) \end{pmatrix}}_{u_j} \right) \\ &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t) \\ u_{3,j}(t) - 2u_{2,j}(t) + u_{1,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N,j}(t) - 2u_{N-1,j}(t) + u_{N-2,j}(t) \\ u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j(t) - J u_j(t)), \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.32)$$

(onde $a_j(t)$ é um vetor de N -componentes contendo informações das condições de fronteira), com a condição inicial:

$$u_j(0) = (f(x_1, y_j), \dots, f(x_N, y_j))^t.$$

Aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração no tempo em (2.32), no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, temos:

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+1} &= u_j^n + \Delta t F^{n+\frac{1}{2}} \\ &= u_j^n + \Delta t \left(\frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+\frac{1}{2}} - J u_j^{n+\frac{1}{2}}) \right) \\ &= u_j^n - 2r_x J u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde $r_x = \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}$ e

$$\begin{aligned} u_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} (5F^n + 8F^{n+\frac{1}{2}} - F^{n+1}) \\ &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} \left(5 \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^n - J u_j^n) + 8 \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+\frac{1}{2}} - J u_j^{n+\frac{1}{2}}) \right) \end{aligned}$$

$$- \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+1} - J\hat{u}_j^{n+1}) \Big),$$

ou seja,

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n + \frac{r_x}{12} (5a_j^n + 8a_j^{n+\frac{1}{2}} - a_j^{n+1}) - \frac{r_x J}{12} (5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - \hat{u}_j^{n+1}). \quad (2.34)$$

Substituindo (2.33) em (2.34), obtemos:

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n + \frac{r_x}{12} (5a_j^n + 8a_j^{n+\frac{1}{2}} - a_j^{n+1}) - \frac{r_x J}{12} (5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - (u_j^n - 2r_x J u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}})).$$

Então,

$$\begin{aligned} & \left(I + \frac{2}{3} r_x J + \frac{1}{6} (r_x J)^2 \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \\ & = \left(I - \frac{1}{3} r_x J \right) u_j^n + \frac{5}{12} r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} (4I + r_x J) a_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} r_x a_j^{n+1}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde I denota a matriz identidade. Na equação (2.35), para cada $j = 1, \dots, N$, devemos resolver um sistema linear pentadiagonal.

Novamente, discretizando a derivada espacial em $u_t = 2\nu u_{yy}$ pela fórmula de diferença centrada para $i = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta y^2} [u_{i,j+1}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i,j-1}(t)], \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.36)$$

Seja

$$v_i = \begin{pmatrix} u_{i,1}(t) \\ u_{i,2}(t) \\ \vdots \\ u_{i,N-1}(t) \\ u_{i,N}(t) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad b_i = \begin{pmatrix} u_{i,0}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{i,N+1}(t) \end{pmatrix}.$$

Dessa forma, (2.36) pode ser reescrita na forma matricial como:

$$\frac{\partial}{\partial t} v_i(t) = \frac{2\nu}{\Delta y^2} (b_i(t) - Jv_i(t)), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.37)$$

(o vetor $b_i(t)$ traz informações das condições de fronteira), com a condição inicial:

$$v_i(0) = (f(x_i, y_1), \dots, f(x_i, y_N))^t.$$

Agora, aplicando a (ETF) para integração no intervalo $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$, temos:

$$\hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}} = v_i^{n+\frac{1}{2}} - 2r_y J v_i^{n+1} + 2r_y b_i^{n+1}, \quad \left(r_y = \frac{\nu \Delta t}{\Delta y^2} \right), \quad (2.38)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{12} \left(5b_i^{n+\frac{1}{2}} + 8b_i^{n+1} - b_j^{n+\frac{3}{2}} \right) - \frac{r_y J}{12} \left(5v_i^{n+\frac{1}{2}} + 8v_i^{n+1} - \hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}} \right). \quad (2.39)$$

Substituindo (2.38) em (2.39) para $i = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\begin{aligned} & \left(I + \frac{2}{3} r_y J + \frac{1}{6} (r_y J)^2 \right) v_i^{n+1} \\ &= \left(I - \frac{1}{3} r_y J \right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12} r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6} (4I + r_y J) b_i^{n+1} - \frac{1}{12} r_y b_i^{n+\frac{3}{2}}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

As equações:

$$\begin{aligned} & \left(I + \frac{2}{3} r_x J + \frac{1}{6} (r_x J)^2 \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \\ &= \left(I - \frac{1}{3} r_x J \right) u_j^n + \frac{5}{12} r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} (4I + r_x J) a_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} r_x a_j^{n+1}, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} & \left(I + \frac{2}{3} r_y J + \frac{1}{6} (r_y J)^2 \right) v_i^{n+1} = \\ &= \left(I - \frac{1}{3} r_y J \right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12} r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6} (4I + r_y J) b_i^{n+1} - \frac{1}{12} r_y b_i^{n+\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

descrevem o método ETF-LOD.

Do método descrito acima temos a seguinte relação:

$$u_{i,j=1}^N = [u_1, u_2, \dots, u_N] = [v_1^T, v_2^T, \dots, v_N^T].$$

O método calcula os vetores coluna u_j para o nível $t_{n+\frac{1}{2}}$ em (2.35), a seguir calcula os vetores linha v_i^T no nível t_{n+1} em (2.40).

Da mesma maneira que o método trapezoidal estendido é de terceira ordem na variável tempo, é claro que o método dado por (2.35) e (2.40) do nível t_n a t_{n+1} é de terceira ordem no tempo.

Para estudarmos a estabilidade de alguns métodos numéricos envolvidos neste trabalho, aplicamos o método ETF-LOD às equações de difusão e convecção-difusão com condições de contorno homogêneas e obtemos um sistema da forma:

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = Qu_j^n, \quad v_i^{n+1} = Qv_i^{n+\frac{1}{2}},$$

onde Q é uma matriz quadrada pentadiagonal de ordem N .

Definições alternativas às apresentadas anteriormente, para o conceito de estabilidade, são apresentadas a seguir.

Definição 2.5. *O método numérico é estável se os autovalores de Q são em módulo menores ou iguais a um, ou seja,*

$$|\lambda(Q)| \leq 1.$$

Definição 2.6. *Um método será incondicionalmente estável quando a desigualdade anterior for satisfeita para qualquer tamanho de passo. Caso contrário, o método será condicionalmente estável.*

Análise da Estabilidade

Analisamos, nesta seção, a estabilidade do método ETF-LOD. Antes, porém, introduzimos algumas notações que serão usadas posteriormente:

$$U^n = [u_1^n, u_2^n, \dots, u_N^n], \quad A_x = I + \frac{2}{3}r_x J + \frac{1}{6}(r_x J)^2, \quad B_x = I - \frac{1}{3}r_x J,$$

A_y e B_y são definidos de modo análogo. Então, para condições de fronteira homogêneas, o método (ETF-LOD) descrito por (2.35) e (2.40), é dado por:

$$A_x U^{n+\frac{1}{2}} = B_x U^n \quad (2.41)$$

$$A_y U^{n+1} = B_y U^{n+\frac{1}{2}} \quad (2.42)$$

Assim, $U^{n+\frac{1}{2}} = A_x^{-1} B_x U^n$, substituindo $U^{n+\frac{1}{2}}$ em (2.42) temos:

$$A_y U^{n+1} = B_y (A_x^{-1} B_x U^n) \implies U^{n+1} = A_y^{-1} B_y (A_x^{-1} B_x U^n) = Q U^n,$$

$$Q = (A_y^{-1} B_y)(A_x^{-1} B_x).$$

A matriz J tem N autovalores distintos e positivos dados por $\lambda_s = 4 \operatorname{sen}^2 \frac{(s\pi)}{2(N+1)}$, $s = 1, \dots, N$. Para um autovalor λ de J associado ao autovetor θ , utilizando as propriedades apresentadas na página 21 e tomando $\sigma_x = \lambda r_x$, temos:

$$\begin{aligned} (A_x^{-1} B_x) \theta &= A_x^{-1} (B_x) \theta \\ &= A_x^{-1} \left(1 - \frac{1}{3} \sigma_x \right) \theta \\ &= \left(1 - \frac{1}{3} \sigma_x \right) A_x^{-1} \theta \\ &= \left(\frac{1 - \frac{1}{3} \sigma_x}{1 + \frac{2}{3} \sigma_x + \frac{1}{6} \sigma_x^2} \right) \theta. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Logo, o autovalor μ_x de $A_x^{-1} B_x$ é dado por:

$$\mu_x = \frac{1 - \frac{1}{3} \sigma_x}{1 + \frac{2}{3} \sigma_x + \frac{1}{6} \sigma_x^2}.$$

É fácil verificar que $|\mu_x| \leq 1$. De modo análogo, para um autovalor μ_y de $A_y^{-1} B_y$, $|\mu_y| \leq 1$. Assim, se μ denota um autovalor de Q , $\mu = \mu_x \mu_y$ e deste modo $|\mu| \leq 1$. Segue da definição 2.6 que o método ETF-LOD é incondicionalmente estável.

Método ETF-LOD para Condições de Fronteira de Neumann

Há várias possibilidades nas quais as condições de fronteira de Neumann podem ser especificadas. Para ilustrar a extensão do método ETF-LOD consideramos condições de contorno de Neumann dadas como a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial x}u(0, y, t) = a_1u(0, y, t) - b_1, \quad \frac{\partial}{\partial x}u(l_x, y, t) = -a_2u(l_x, y, t) + b_2, \quad (2.44)$$

onde a_1, a_2, b_1 e b_2 são constantes não-negativas. Para este caso é útil redefinir a malha na direção x , com $x_i = (i - 1)\Delta x$, $i = 1, \dots, N$, onde $\Delta x = \frac{l_x}{N-1}$. Primeiro consideramos a discretização da fronteira ao longo da linha $x_1 = 0$. Introduzindo uma linha fictícia $x = x_0$ e substituindo a derivada da primeira equação em (2.44), pela aproximação de diferença centrada, temos:

$$\frac{1}{2\Delta x}[u_{2,j}(t) - u_{0,j}(t)] = a_1u_{1,j}(t) - b_1.$$

Desta equação segue que, $u_{0,j}(t) = -2\Delta xa_1u_{1,j}(t) + 2\Delta xb_1 + u_{2,j}(t)$.

Da discretização de $u_t = 2u_{xx}$, realizada anteriormente, segue que:

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)].$$

Tomando $i = 1$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)].$$

Substituindo $u_{0,j}(t)$ na equação acima

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}u_{1,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) - 2\Delta xa_1u_{1,j}(t) + 2\Delta xb_1 + u_{2,j}(t)] \\ &= \frac{2\nu}{\Delta x^2}[2u_{2,j}(t) - 2(1 + \Delta xa_1)u_{1,j} + 2\Delta xb_1]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

De maneira análoga, para a condição de contorno em $x = l_x$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[2u_{N-1,j}(t) - 2(1 + \Delta xa_2)u_{N,j} + 2\Delta xb_2]. \quad (2.46)$$

Agora, seja

$$M = \begin{pmatrix} 2(1 + \Delta x)a_1 & -2 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -2 & 2(1 + \Delta x)a_2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad c = \begin{pmatrix} 2\Delta x b_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 2\Delta x b_2 \end{pmatrix},$$

isto é:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j(t) = 2 \frac{2\nu}{\Delta x^2} \{c - M u_j(t)\}, \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.47)$$

Aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração no tempo em (2.47), no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, obtemos:

$$\hat{u}_j^{n+1}(t) = u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c$$

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n - \frac{r_x}{12} M [5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - \hat{u}_j^{n+1}] + r_x c.$$

Substituindo $\hat{u}_j^{n+1}$ na equação acima, para $j = 1, \dots, N$, segue que

$$\begin{aligned} u_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n - \frac{r_x}{12} M [5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - (u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c)] + r_x c \\ &= u_j^n - 4\frac{r_x}{12} M u_j^n + 8\frac{r_x}{12} M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2\frac{r_x^2}{12} M^2 u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2\frac{r_x^2}{12} M c + r_x c \\ &= u_j^n - \frac{r_x}{3} M u_j^n + 2\frac{r_x}{3} M u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x^2}{6} M^2 u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x^2}{6} M c + r_x c. \end{aligned}$$

Assim,

$$\left(I + \frac{2}{3} r_x M + \frac{1}{6} (r_x M)^2 \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{1}{3} r_x M \right) u_j^n + r_x \left(I + \frac{1}{6} r_x M \right) c. \quad (2.48)$$

Aqui, novamente, notamos que a primeira equação do método ETF-LOD para a equação de difusão com condições de fronteira de Neumann, nos leva a resolver sistemas lineares pentadiagonais, essa mesma propriedade se verifica para a segunda equação do método como pode ser observado a seguir.

De modo análogo para as condições de Neumann, na variável y temos:

$$\frac{\partial}{\partial y} u(x, 0, t) = d_1 u(x, 0, t) - f_1, \quad \frac{\partial}{\partial y} u(x, l_y, t) = -d_2 u(x, l_y, t) + f_2, \quad (2.49)$$

onde d_1, d_2, f_1 e f_2 são constantes não negativas.

Com o mesmo raciocínio utilizado anteriormente temos:

$$\bar{M} = \begin{pmatrix} 2(1 + \Delta y)d_1 & -2 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -2 & 2(1 + \Delta y)d_2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad g = \begin{pmatrix} 2\Delta y f_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 2\Delta y f_2 \end{pmatrix}.$$

e finalmente

$$\left(I + \frac{2}{3}r_y\bar{M} + \frac{1}{6}(r_y\bar{M})^2\right)v_i^{n+1}(t) = \left(I - \frac{1}{3}r_y\bar{M}\right)v_i^{n+\frac{1}{2}} + r_y\left(I + \frac{1}{6}r_y\bar{M}\right)g. \quad (2.50)$$

As equações (2.48) e (2.50) descrevem o método ETF-LOD com condições de fronteira de Neumann.

Análise da Estabilidade

Para mostrar a estabilidade do método descrito por (2.48) e (2.50), primeiro notamos que os autovalores da matriz M (denotados por ξ) são não negativos, pelo teorema de Gerschgorin [14]. Com condições de fronteira homogêneas podemos reescrever as equações que descrevem o método da seguinte maneira:

$$\bar{A}_x U^{n+\frac{1}{2}} = \bar{B}_x U^n \implies U^{n+\frac{1}{2}} = \bar{A}_x^{-1} \bar{B}_x U^n \quad \text{e} \quad (2.51)$$

$$\bar{A}_y U^{n+1} = \bar{B}_y U^{n+\frac{1}{2}} \implies U^{n+1} = \bar{A}_y^{-1} \bar{B}_y U^{n+\frac{1}{2}} \quad (2.52)$$

onde

$$\bar{A}_x = \left(I + \frac{2}{3}r_x M + \frac{1}{6}(r_x M)^2\right), \quad \bar{B}_x = \left(I - \frac{1}{3}r_x M\right),$$

$$\bar{A}_y = \left(I + \frac{2}{3}r_y \bar{M} + \frac{1}{6}(r_y \bar{M})^2\right), \quad \bar{B}_y = \left(I - \frac{1}{3}r_y \bar{M}\right).$$

Substituindo $U^{n+\frac{1}{2}}$ de (2.51) em (2.52) temos:

$$U^{n+1} = \bar{A}_y^{-1} \bar{B}_y \bar{A}_x^{-1} \bar{B}_x U^n.$$

O autovalor η_x de $\bar{A}_x^{-1}\bar{B}_x$ de acordo com as propriedades das páginas 21 e 22 é dado por:

$$\eta_x = \frac{1 - \frac{1}{3}r_x\eta_x}{1 + \frac{2}{3}r_x\eta_x + \frac{1}{6}(r_x\eta_x)^2},$$

como $r_x\eta_x \geq 0$, logo $|\eta_x| \leq 1$. Por outro lado, utilizando o mesmo raciocínio temos $|\eta_y| \leq 1$. Então, se $\eta = \eta_x\eta_y$, temos $|\eta| < 1$.

Assim o método descrito pelas equações (2.48) e (2.50) é incondicionalmente estável.

A seguir, aplicamos o método de Crank-Nicolson localmente unidimensional à equação de difusão (2.29).

2.3.2 Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional (CN-LOD)

Reescrevemos a equação (2.29) na forma de duas EDPs, que representam o problema original em uma dimensão (espacial):

$$\frac{u_t}{2} = \nu u_{xx}, \quad \frac{u_t}{2} = \nu u_{yy},$$

O método de Crank-Nicolson é um dos métodos mais utilizados na resolução de equações parabólicas. Usamos a fórmula centrada para aproximar a derivada em relação a variável t e a derivada em relação a x será aproximada pela média das discretizações da segunda derivada (usando a fórmula centrada) nos níveis de tempo t_n e $t_{n+\frac{1}{2}}$. Assim, o método de Crank-Nicolson para

$\frac{u_t}{2} = \nu u_{xx}$, é dado por:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{i,j}^n(t)}{\frac{\Delta t}{2}} \right) = \frac{u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t)}{2\Delta x^2} + \frac{u_{i+1,j}^n(t) - 2u_{i,j}^n(t) + u_{i-1,j}^n(t)}{2\Delta x^2}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{i,j}^n(t) &= \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \left(u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i+1,j}^n(t) - 2u_{i,j}^n(t) + u_{i-1,j}^n(t) \right) \\ &= \frac{r_x}{2} \left(u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i+1,j}^n(t) - 2u_{i,j}^n(t) + u_{i-1,j}^n(t) \right). \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(-u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) \right) \\ = u_{i,j}^n(t) + \frac{r_x}{2} \left(u_{i+1,j}^n(t) - 2u_{i,j}^n(t) + u_{i-1,j}^n(t) \right). \end{aligned}$$

Fixando j e variando $i = 1, \dots, N$, temos:

$$u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(-u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + 2u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{0,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) \right) = u_{1,j}^n(t) + \frac{r_x}{2} \left(u_{2,j}^n(t) - 2u_{1,j}^n(t) + u_{0,j}^n(t) \right)$$

$$u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(-u_{3,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + 2u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) \right) = u_{2,j}^n(t) + \frac{r_x}{2} \left(u_{3,j}^n(t) - 2u_{2,j}^n(t) + u_{1,j}^n(t) \right)$$

$\vdots$

$$\begin{aligned} u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(-u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + 2u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{N-2,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) \right) \\ = u_{N-1,j}^n(t) + \frac{r_x}{2} \left(u_{N,j}^n(t) - 2u_{N-1,j}^n(t) + u_{N-2,j}^n(t) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(-u_{N+1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + 2u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) - u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) \right) \\ = u_{N,j}^n(t) + \frac{r_x}{2} \left(u_{N+1,j}^n(t) - 2u_{N,j}^n(t) + u_{N-1,j}^n(t) \right). \end{aligned}$$

Utilizando as condições de fronteira (2.30), podemos escrever as equações acima na forma matricial:

$$\left(I + \frac{1}{2} r_x J \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{1}{2} r_x J \right) u_j^n + \frac{r_x}{2} (a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}).$$

Com raciocínio análogo para a equação $\frac{u_t}{2} = \nu u_{yy}$, temos que:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j}^{n+1}(t) - u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t)}{\frac{\Delta t}{2}} \right) = \frac{u_{i,j+1}^{n+1}(t) - 2u_{i,j}^{n+1}(t) + u_{i,j-1}^{n+1}(t)}{2\Delta y^2} + \frac{u_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}}(t) - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}(t)}{2\Delta y^2}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(-u_{i,j+1}^{n+1}(t) + 2u_{i,j}^{n+1}(t) - u_{i,j-1}^{n+1}(t) \right) \\ = u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + \frac{r_x}{2} \left(u_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}}(t) - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}(t) + u_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}(t) \right). \end{aligned}$$

Na forma matricial temos:

$$\left(I + \frac{1}{2} r_y J \right) v_i^{n+1} = \left(I - \frac{1}{2} r_y J \right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2} (v_i^{n+\frac{1}{2}} + a_j^{n+1}).$$

Assim, as equações abaixo descrevem o método de Crank-Nicolson-LOD.

$$\left(I + \frac{1}{2}r_x J\right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{1}{2}r_x J\right) u_j^n + \frac{r_x}{2}(a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}).$$

e

$$\left(I + \frac{1}{2}r_y J\right) v_i^{n+1} = \left(I - \frac{1}{2}r_y J\right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2}(v_i^{n+\frac{1}{2}} + a_j^{n+1}).$$

A seguir, apresentamos a ETF-LOD para a equação de convecção-difusão.

2.4 Equação de Convecção-Difusão em Duas Dimensões

Será tratado, nesta seção, um método de integração no tempo localmente unidimensional para a equação de convecção-difusão em duas dimensões, baseado na fórmula trapezoidal estendida, com condições de fronteira de Dirichlet e Neumann.

Consideremos a equação de convecção-difusão em duas dimensões espaciais:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c_1 \frac{\partial u}{\partial x} + c_2 \frac{\partial u}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (c_1, c_2, \nu \text{ constantes}) \quad (2.53)$$

com condição inicial:

$$u(x, y, 0) = f(x, y), \quad 0 \leq x \leq l_x, \quad 0 \leq y \leq l_y, \quad (2.54)$$

e condições de fronteira de Dirichlet:

$$\begin{aligned} u(0, y, t) &= g_0(y, t), & u(l_x, y, t) &= g_1(y, t), \\ u(x, 0, t) &= f_0(x, t), & u(x, l_y, t) &= f_1(x, t), \end{aligned} \quad t > 0.$$

Para um inteiro positivo N , consideremos a malha espacial retangular (x_i, y_j) , isto é $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$, para $i, j = 0, \dots, N+1$, com incrementos $\Delta x = \frac{l_x}{N+1}$, $\Delta y = \frac{l_y}{N+1}$ e $t_n = n\Delta t$, para $n = 1, 2, 3, \dots$, $\Delta t > 0$.

Reescrevendo a equação (2.53) na forma de duas EDPs que representam a equação original localmente em uma dimensão, temos:

$$\frac{1}{2}u_t + c_1u_x = \nu u_{xx}, \quad \frac{1}{2}u_t + c_2u_y = \nu u_{yy}.$$

2.4.1 Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional (ETF-LOD)

Discretizando as derivadas espaciais em $u_t + 2c_1u_x = 2\nu u_{xx}$, pelas fórmulas de diferenças centradas para $j = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{i,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x}[u_{i+1,j}(t) - u_{i-1,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)], \quad i = 1, \dots, N.$$

Fixando j e fazendo $i = 1, \dots, N$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{1,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x}[u_{2,j}(t) - u_{0,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)],$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{2,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x}[u_{3,j}(t) - u_{1,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{3,j}(t) - 2u_{2,j}(t) + u_{1,j}(t)],$$

$\vdots$

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{N-1,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x}[u_{N,j}(t) - u_{N-2,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{N,j}(t) - 2u_{N-1,j}(t) + u_{N-2,j}(t)],$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{N,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x}[u_{N+1,j}(t) - u_{N-1,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)].$$

Sejam

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad e \quad b_j = \begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u_{1,j}(t) \\ u_{2,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N-1,j}(t) \\ u_{N,j}(t) \end{pmatrix} - \frac{c_1}{\Delta x} \begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j}(t) \\ u_{2,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N-1,j}(t) \\ u_{N,j}(t) \end{pmatrix} = \\ = \frac{2\nu}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j}(t) \\ u_{2,j}(t) \\ \vdots \\ u_{N-1,j}(t) \\ u_{N,j}(t) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Na forma matricial temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j(t) - Ju_j(t)) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j(t) - Bu_j(t)) \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.55)$$

com condição inicial:

$$u_j(0) = (f(x_1, y_j), \dots, f(x_N, y_j))^t.$$

Aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração no tempo da equação

(2.55) no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, temos:

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+1} &= u_j^n + \Delta t F^{n+\frac{1}{2}} \\ &= u_j^n + \Delta t \left(\frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+\frac{1}{2}} - Ju_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^{n+\frac{1}{2}} - Bu_j^{n+\frac{1}{2}}) \right), \end{aligned}$$

ou seja,

$$\hat{u}_j^{n+1} = u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} - \rho_x Bu_j^{n+\frac{1}{2}} + \rho_x b_j^{n+\frac{1}{2}}, \quad (2.56)$$

onde, $\rho_x = \frac{c_1 \Delta t}{\Delta x}$.

Agora,

$$\begin{aligned} u_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} \left[5 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^n - Ju_j^n) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^n - Bu_j^n) \right\} \right. \\ &\quad \left. + 8 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+\frac{1}{2}} - Ju_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^{n+\frac{1}{2}} - Bu_j^{n+\frac{1}{2}}) \right\} \right] \end{aligned}$$

$$- \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+1} - J\hat{u}_j^{n+1}) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^{n+1} - B\hat{u}_j^{n+1}) \right\} \Bigg]. \quad (2.57)$$

Substituindo (2.56) em (2.57) temos:

$$\begin{aligned} u_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} \left[5 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^n - Ju_j^n) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^n - Bu_j^n) \right\} \right. \\ &+ 8 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+\frac{1}{2}} - Ju_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^{n+\frac{1}{2}} - Bu_j^{n+\frac{1}{2}}) \right\} \\ &- \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (a_j^{n+1} - J(u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} - \rho_x Bu_j^{n+\frac{1}{2}} \right. \\ &+ \rho_x b_j^{n+\frac{1}{2}})) + \frac{c_1}{\Delta x} (b_j^{n+1} - B(u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &+ 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} - \rho_x Bu_j^{n+\frac{1}{2}} + \rho_x b_j^{n+\frac{1}{2}})) \Bigg] \\ &= u_j^n + \frac{5}{12} r_x (a_j^n - Ju_j^n) + \frac{5}{24} \rho_x (b_j^n - Bu_j^n) \\ &+ \frac{8}{12} r_x (a_j^{n+\frac{1}{2}} - Ju_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{8}{24} \rho_x (b_j^{n+\frac{1}{2}} - Bu_j^{n+\frac{1}{2}}) \\ &- \frac{1}{12} r_x a_j^{n+1} + \frac{1}{12} r_x Ju_j^n - \frac{1}{6} r_x^2 J^2 u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{6} r_x^2 J a_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &- \frac{1}{12} r_x \rho_x J B u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{12} r_x \rho_x J b_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \rho_x b_j^{n+1} + \frac{1}{24} \rho_x B u_j^n \\ &- \frac{1}{12} \rho_x r_x B J u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{12} \rho_x r_x B a_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \rho_x^2 B^2 u_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{24} \rho_x^2 B b_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &= u_j^n + \frac{5}{12} r_x (a_j^n - Ju_j^n) + \frac{5}{24} \rho_x (b_j^n - Bu_j^n) \\ &+ \frac{8}{12} r_x (a_j^{n+\frac{1}{2}} - Ju_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{8}{24} \rho_x (b_j^{n+\frac{1}{2}} - Bu_j^{n+\frac{1}{2}}) \\ &- \frac{1}{12} r_x (a_j^{n+1} - J(u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} - \rho_x Bu_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &+ \rho_x b_j^{n+\frac{1}{2}})) - \frac{1}{24} \rho_x (b_j^{n+1} - B(u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &+ 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} - \rho_x Bu_j^{n+\frac{1}{2}} + \rho_x b_j^{n+\frac{1}{2}})) \Bigg], \quad (2.58) \end{aligned}$$

e então,

$$\begin{aligned} &\left[I + \frac{2}{3} \left(r_x J + \frac{\rho_x}{2} B \right) + \frac{1}{6} \left(r_x J + \frac{\rho_x}{2} B \right)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3} \left(r_x J + \frac{\rho_x}{2} B \right) \right] u_j^n \\ &+ \frac{5}{12} \left(r_x a_j^n + \frac{\rho_x}{2} b_j^n \right) + \frac{1}{6} \left[4I + \left(r_x J + \frac{\rho_x}{2} B \right) \right] \left(r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\rho_x}{2} b_j^{n+\frac{1}{2}} \right) \\ &- \frac{1}{12} \left(r_x a_j^{n+1} + \frac{1}{2} \rho_x b_j^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Tomando $C_x = r_x J + \frac{\rho_x}{2} B$ e $c_j = r_x a_j + \frac{\rho_x}{2} b_j$, temos:

$$\left[I + \frac{2}{3} C_x + \frac{1}{6} C_x^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3} C_x \right] u_j^n + \frac{5}{12} c_j^n + \frac{1}{6} [4I + C_x] c_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} c_j^{n+1}. \quad (2.59)$$

Novamente, da discretização das derivadas espaciais em $u_t + 2c_1 u_y = 2\nu u_{yy}$, pelas fórmulas de diferenças centradas para $i = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [u_{i,j+1}(t) - u_{i,j-1}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{i,j+1}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i,j-1}(t)], \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.60)$$

Sejam

$$d_i(t) = \begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad e_i(t) = \begin{pmatrix} u_{0,j}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -u_{N+1,j}(t) \end{pmatrix}.$$

Usando as condições de fronteira podemos escrever a equação (2.60) como:

$$\frac{\partial}{\partial t} v_i(t) = \frac{2\nu}{\Delta y^2} (d_i(t) - J v_i(t)) + \frac{c_2}{\Delta y} (e_i(t) - B v_i(t)), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.61)$$

Aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração de (2.61) no intervalo $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$ temos:

$$\hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}} = v_i^{n+\frac{1}{2}} - 2C_y v_i^{n+1} + 2f_i^{n+1} \quad (2.62)$$

e

$$v_i^{n+1} = v_i^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} [5v_i^{n+\frac{1}{2}} + 8v_i^{n+1} - \hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}}] + \frac{1}{12} [5f_i^{n+\frac{1}{2}} + 8v_i^{n+1} - f_i^{n+\frac{3}{2}}], \quad (2.63)$$

onde

$$\rho_y = \frac{c_2 \Delta t}{\Delta y}, \quad f_i(t) = r_y d_i + \frac{\rho_y}{2} e_i \quad \text{e} \quad C_y = r_y J + \frac{\rho_y}{2} B.$$

Substituindo (2.62) em (2.63) para $i = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\left[I + \frac{2}{3} C_y + \frac{1}{6} C_y^2 \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{1}{3} C_y \right] v_j^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12} f_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{6} [4I + C_y] f_i^{n+1} - \frac{1}{12} f_i^{n+\frac{3}{2}}. \quad (2.64)$$

As equações (2.59) e (2.64) descrevem o método (ETF-LOD) para as equações de convecção-difusão e, para resolvê-las devemos solucionar sistemas lineares pentadiagonais.

Análise da Estabilidade

Para condições de fronteira homogêneas, podemos reescrever as equações (2.59) e (2.64), da seguinte forma:

$$\left[I + \frac{2}{3}C_x + \frac{1}{6}C_x^2 \right] U^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3}C_x \right] U^n, \quad (2.65)$$

$$\left[I + \frac{2}{3}C_y + \frac{1}{6}C_y^2 \right] U^{n+1} = \left[I - \frac{1}{3}C_y \right] U^{n+\frac{1}{2}}, \quad (2.66)$$

das equações acima temos que:

$$\begin{aligned} U^{n+\frac{1}{2}} &= \left[I + \frac{2}{3}C_x + \frac{1}{6}C_x^2 \right]^{-1} \left[I - \frac{1}{3}C_x \right] U^n \\ &= M_x^{-1} N_x U^n \end{aligned} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} U^{n+1} &= \left[I + \frac{2}{3}C_y + \frac{1}{6}C_y^2 \right]^{-1} \left[I - \frac{1}{3}C_y \right] U^{n+\frac{1}{2}} \\ &= M_y^{-1} N_y U^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (2.68)$$

onde

$$\begin{aligned} C_x &= r_x J + \frac{\rho_x}{2} B = \\ &= \begin{pmatrix} 2r_x & -r_x & & & \\ -r_x & 2r_x & -r_x & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -r_x & 2r_x & -r_x \\ & & & -r_x & 2r_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \frac{\rho_x}{2} & & & \\ -\frac{\rho_x}{2} & 0 & \frac{\rho_x}{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\frac{\rho_x}{2} & 0 & \frac{\rho_x}{2} \\ & & & -\frac{\rho_x}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2r_x & -r_x + \frac{\rho_x}{2} & & & \\ -r_x - \frac{\rho_x}{2} & 2r_x & -r_x + \frac{\rho_x}{2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -r_x - \frac{\rho_x}{2} & 2r_x & -r_x + \frac{\rho_x}{2} \\ & & & -r_x - \frac{\rho_x}{2} & 2r_x \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Substituindo U^{n+1} da equação (2.67) na equação (2.68), temos:

$$U^{n+1} = M_y^{-1} N_y M_x^{-1} N_x U^n \quad (2.69)$$

$$= \Theta_y \Theta_x U^n, \quad (2.70)$$

onde $\Theta_x = M_x^{-1} N_x$, $\Theta_y = M_y^{-1} N_y$.

Pela propriedade 1.2.1 os autovalores de C_x são dados por:

$$\begin{aligned} \lambda_s(C_x) &= 2r_x + 2\sqrt{\left(-r_x - \frac{\rho_x}{2}\right)\left(-r_x + \frac{\rho_x}{2}\right)} \cos\left(\frac{s\pi}{N+1}\right) \\ &= 2\left\{r_x + \sqrt{(-1)}\sqrt{\left(\frac{\rho^2}{4} - r_x^2\right)} \cos\left(\frac{s\pi}{N+1}\right)\right\}, \quad 2r_x \leq \rho_x. \end{aligned}$$

Utilizando as propriedades da página 21, temos que os autovalores da matriz Θ_x , são dados por:

$$\lambda_s(\Theta_x) = \frac{1 - \frac{1}{3}\lambda_s(C_x)}{1 + \frac{2}{3}\lambda_s(C_x) + \frac{1}{6}(\lambda_s(C_x))^2},$$

escrevendo $\lambda_s(C_x) = x + y\sqrt{(-1)}$, $\lambda_s(\Theta_x) = \frac{NUM}{DEN}$, $x > 0$. Logo,

$$\begin{aligned} |DEN|^2 &= \left|1 + \frac{2}{3}(x + y\sqrt{(-1)}) + \frac{1}{6}(x + y\sqrt{(-1)})^2\right|^2 \\ &= \left|1 + \frac{2}{3}x + \frac{2}{3}\sqrt{(-1)}y + \frac{1}{6}x^2 - \frac{1}{6}y^2 + \frac{2}{6}\sqrt{(-1)}xy\right|^2 \\ &= \left|\left[1 + \frac{2}{3}x + \frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right] + \left[\frac{2}{3}\sqrt{(-1)}y + \frac{2}{6}\sqrt{(-1)}xy\right]\right|^2 \\ &= \left[1 + \frac{2}{3}x + \frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right]^2 + \left[\frac{2}{3}y + \frac{2}{6}xy\right]^2 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} |NUM|^2 &= \left|1 + \frac{1}{3}(x + \sqrt{(-1)}y)\right|^2 \\ &= \left|1 + \frac{1}{3}x + \frac{\sqrt{(-1)}}{3}y\right|^2 \\ &= \left[1 + \frac{1}{3}x\right]^2 + \left[\frac{1}{3}y\right]^2. \end{aligned}$$

Assim,

$$|DEN|^2 - |NUM|^2 = \left[1 + \frac{2}{3}x + \frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right]^2 + \left[\frac{2}{3}y + \frac{2}{6}xy\right]^2 - \left[1 + \frac{1}{3}x\right]^2 - \left[\frac{1}{3}y\right]^2$$

$$\begin{aligned}
 &= \left[1 + \frac{2}{3}x\right]^2 + \left[\frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right]^2 + \left[2 + \frac{4}{3}x\right] \left[\frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right] + \left[\frac{2}{3}y + \frac{2}{6}xy\right]^2 \\
 &- \left[1 + \frac{1}{3}x\right]^2 - \left[\frac{1}{3}y\right]^2 \\
 &= \left[1 + \frac{4}{3}x + \frac{4}{9}x^2\right] + \left[\frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right]^2 + \left[\frac{2}{6}x^2 - \frac{2}{6}y^2 + \frac{4}{18}x^3 - \frac{4}{18}xy^2\right] \\
 &+ \left[\frac{4}{9}y^2 + \frac{8}{18}xy^2 + \frac{4}{36}x^2y^2\right] - \left[1 - \frac{2}{3}x + \frac{1}{9}x^2\right] - \frac{1}{9}y^2 \\
 &= 2x + \frac{10}{18}x^2 + \left[\frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right]^2 + \frac{4}{18}x^3 + \frac{4}{36}x^2y^2 \\
 &= 2x + \frac{5}{9}x^2 + \left[\frac{1}{6}(x^2 - y^2)\right]^2 + \frac{2}{9}x^3 + \frac{1}{9}x^2y^2.
 \end{aligned}$$

Como $x > 0$, temos:

$$|DEN|^2 - |NUM|^2 \geq 0 \implies |DEN|^2 \geq |NUM|^2 \implies \frac{|NUM|^2}{|DEN|^2} \leq 1.$$

Portanto, os autovalores da matriz Θ_x são menores que 1 em módulo, ou seja, $|\lambda_s(\Theta_x)| \leq 1$. Seguindo os mesmos passos para os autovalores da matriz Θ_y , temos que $|\lambda_s(\Theta_y)| \leq 1$, logo, $|\lambda_s(\Theta_x)\lambda_s(\Theta_y)| \leq 1$. Assim, o método ETF-LOD para a equação de convecção-difusão é incondicionalmente estável.

Método ETF-LOD para Condições de Fronteira de Neumann

Aplicamos agora, o método ETF-LOD com a mesma condição inicial (2.54) mas, com condições de contorno de Neumann na variável x , dadas por (2.44).

Como $\frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta x}(u_{i+1,j} - u_{i-1,j})$, para $i = 1$ temos:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2\Delta x}[u_{2,j}(t) - u_{0,j}(t)] &= a_1 u_{1,j}(t) - b_1 \\
 \implies u_{0,j}(t) &= -2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) + 2\Delta x b_1 + u_{2,j}(t). \quad (2.71)
 \end{aligned}$$

Da discretização de $u_t + 2c_1 u_x = 2\nu u_{xx}$, para $j = 1, \dots, N$ temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x}[u_{i+1,j}(t) - u_{i-1,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2}[u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)], \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.72)$$

Para $i = 1$,

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [u_{2,j}(t) - u_{0,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)],$$

e substituindo (2.71) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [u_{2,j}(t) + 2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) - 2\Delta x b_1 - u_{2,j}(t)] = \\ & = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) - 2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) + 2\Delta x b_1 + u_{2,j}(t)] \\ \Rightarrow & \frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [2\Delta x (a_1 u_{1,j}(t) - b_1)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [2u_{2,j} - 2(1 + \Delta x a_1)u_{1,j} + 2\Delta x b_1]. \end{aligned}$$

De modo análogo, para a segunda equação de (2.44), obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\Delta x} [u_{N+1,j}(t) - u_{N-1,j}(t)] = -a_2 u_{N,j}(t) + b_2 \\ \Rightarrow & u_{N+1,j}(t) = -2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t). \end{aligned} \quad (2.73)$$

Para $i = N$, podemos reescrever (2.72) da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [u_{N+1,j}(t) - u_{N-1,j}(t)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)].$$

Substituindo (2.73) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [-2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t) - u_{N-1,j}(t)] = \\ & = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [-2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)], \\ \Rightarrow & \frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) + \frac{c_1}{\Delta x} [2\Delta x (-a_2 u_{N,j}(t) + b_2)] = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [2u_{N-1,j} - 2(1 + \Delta x a_2)u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2]. \end{aligned}$$

Sejam

$$P = \begin{pmatrix} 2\Delta x a_1 & 0 & & & \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ & & & 0 & -2\Delta x a_2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{c} = \begin{pmatrix} 2\Delta x b_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -2\Delta x b_2 \end{pmatrix}.$$

Fixando j e variando $i = 1, 2, \dots, N$, obtemos da equação (1.24) um conjunto de equações que pode ser reescrito na forma matricial, obtemos:

$$\frac{\partial u_j(t)}{\partial t} = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [c - Mu_j(t)] + \frac{c_1}{\Delta x} [\bar{c} - Pu_j(t)].$$

Aplicando na equação acima a ETF-LOD para integração no tempo no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, obtemos:

$$\hat{u}_j^{n+1} = u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c - \rho_x P u_j^{n+\frac{1}{2}} + \rho_x \bar{c} \quad (2.74)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} \left[5 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M u_j^n) + \frac{c_1}{\Delta x} (\bar{c} - P u_j^n) \right\} \right. \\ &\quad + 8 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M u_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{c_1}{\Delta x} (\bar{c} - P u_j^{n+\frac{1}{2}}) \right\} \\ &\quad \left. - \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M \hat{u}_j^{n+1}) + \frac{c_1}{\Delta x} (\bar{c} - P \hat{u}_j^{n+1}) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Substituindo (2.74) na equação acima, obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{5}{12} r_x (c - M u_j^n) + \frac{5}{24} \rho_x (\bar{c} - P u_j^n) + \frac{8}{12} r_x (c - M u_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{8}{24} \rho_x (\bar{c} \\ &\quad - P u_j^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{1}{12} r_x \left\{ c - M (u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c - \rho_x P u_j^{n+\frac{1}{2}} + \rho_x \bar{c}) \right\} \\ &\quad - \frac{\rho_x}{24} \left\{ \bar{c} - P (u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c - \rho_x P u_j^{n+\frac{1}{2}} + \rho_x \bar{c}) \right\}. \\ \Rightarrow &\left[I + \frac{2}{3} r_x M + \frac{1}{3} \rho_x P + \frac{1}{6} r_x^2 M^2 + \frac{1}{12} r_x \rho_x M P + \frac{1}{12} \rho_x r_x P M + \frac{1}{24} \rho_x^2 P^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &= \left[I - \frac{1}{3} r_x M - \frac{1}{6} \rho_x P \right] u_j^n + r_x c + \frac{1}{2} \rho_x \bar{c} + \frac{1}{6} r_x^2 M c + \frac{1}{12} r_x \rho_x M \bar{c} + \frac{1}{12} r_x \rho_x P c \\ &\quad - \frac{1}{24} \rho_x^2 P \bar{c}. \end{aligned}$$

Podemos reescrever a equação acima, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} &\left[I + \frac{1}{3} (2r_x M + \rho_x P) + \frac{1}{6} \left(r_x M + \frac{1}{2} \rho_x P \right)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \\ &= \left[I - \frac{1}{3} \left(r_x M - \frac{1}{2} \rho_x P \right) \right] u_j^n + \frac{1}{2} r_x \rho_x (M \bar{c} + P c) + \frac{1}{6} r_x (6c + r_x M c) - \frac{1}{12} \rho_x \left(-6\bar{c} + \frac{1}{2} \rho_x P \bar{c} \right). \end{aligned} \quad (2.76)$$

Utilizando o mesmo raciocínio e a condição de fronteira dada por (2.49) e tomando

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} 2\Delta y d_1 & 1 & & & \\ & -1 & 0 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & 0 & 1 \\ & & & & -1 & -2\Delta y d_2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{g} = \begin{pmatrix} 2\Delta y f_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -2\Delta y f_2 \end{pmatrix},$$

temos a segunda equação que descreve o método, dada por:

$$\begin{aligned} & \left[I + \frac{1}{3} (2r_y \bar{M} + \rho_y \bar{P}) + \frac{1}{6} \left(r_y \bar{M} + \frac{1}{2} \rho_y \bar{P} \right)^2 \right] v_i^{n+1} \\ &= \left[I - \frac{1}{3} \left(r_y \bar{M} - \frac{1}{2} \rho_y \bar{P} \right) \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} r_y \rho_y (\bar{M} \bar{g} + \bar{P} g) \\ &+ \frac{1}{6} r_y (6g + r_y \bar{M} g) - \frac{1}{12} \rho_y \left(6\bar{g} + \frac{1}{2} \rho_y \bar{P} \bar{g} \right). \end{aligned} \quad (2.77)$$

Assim, as equações (2.76) e (2.77) descrevem o método ETF-LOD para a equação de convecção-difusão (2.53), com condições de fronteira de Neumann. Cada uma destas equações envolve a solução de sistemas lineares pentadiagonais.

2.4.2 Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional (CN-LOD)

Descrevemos agora o método de CN-LOD para a equação de convecção-difusão. Utilizando o mesmo raciocínio feito para a equação de difusão, ou seja, reescrevendo a equação (2.53) na forma de duas EDPs, que representam o problema original em uma dimensão:

$$\frac{1}{2} u_t + c_1 u_x = \nu u_{xx}, \quad \frac{1}{2} u_t + c_2 u_y = \nu u_{yy}.$$

Aplicando o método de Crank-Nicolson à equação

$$\frac{1}{2} u_t = \nu u_{xx} - c_1 u_x,$$

temos:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^n}{\frac{\Delta t}{2}} \right) = \nu \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x^2 u_{i,j}^n}{2\Delta x^2} \right) - c_1 \left(\frac{\delta_x u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x u_{i,j}^n}{2 \times 2 \times \Delta x} \right).$$

Daí:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^n &= \frac{\nu \Delta t}{2\Delta x^2} (\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x^2 u_{i,j}^n) - \frac{c_1 \Delta t}{4\Delta x} (\delta_x u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x u_{i,j}^n) \\ &= \frac{r_x}{2} (u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) \\ &\quad - \frac{\rho_x}{4} (u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n), \end{aligned}$$

isto é,

$$\begin{aligned} &u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2} (-u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\rho_x}{4} (-u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= u_{i,j}^n + \frac{r_x}{2} (+u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) + \frac{\rho_x}{4} (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n). \end{aligned}$$

Fixando j , variando $i = 1, \dots, N$ e usando as condições de fronteira, temos:

$$\begin{aligned} u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2} (-u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{0,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\rho_x}{4} (-u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{0,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= u_{1,j}^n + \frac{r_x}{2} (+u_{2,j}^n - 2u_{1,j}^n + u_{0,j}^n) + \frac{\rho_x}{4} (u_{2,j}^n - u_{0,j}^n), \\ u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2} (-u_{3,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\rho_x}{4} (-u_{3,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= u_{2,j}^n + \frac{r_x}{2} (+u_{3,j}^n - 2u_{2,j}^n + u_{1,j}^n) + \frac{\rho_x}{4} (u_{3,j}^n - u_{1,j}^n), \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2} (-u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{N-2,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\rho_x}{4} (-u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{N-2,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= u_{N-1,j}^n + \frac{r_x}{2} (+u_{N,j}^n - 2u_{N-1,j}^n + u_{N-2,j}^n) + \frac{\rho_x}{4} (u_{N,j}^n - u_{N-2,j}^n), \\ u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2} (-u_{N+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\rho_x}{4} (-u_{N+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= u_{N,j}^n + \frac{r_x}{2} (+u_{N+1,j}^n - 2u_{N,j}^n + u_{N-1,j}^n) + \frac{\rho_x}{4} (u_{N+1,j}^n - u_{N-1,j}^n), \end{aligned}$$

Usando as condições de fronteira e reescrevendo as equações acima na forma matricial, temos:

$$\left(I + \frac{r_x}{2} J + \frac{\sigma_x}{4} B \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{r_x}{2} J - \frac{\sigma_x}{4} B \right) u_j^n + \left(\frac{r_x}{2} + \frac{\sigma_x}{4} \right) (a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}). \quad (2.78)$$

Com um raciocínio análogo para a equação $\frac{u}{2} + c_2 u_x = \nu u_{xx}$, obtemos:

$$\left(I + \frac{r_y}{2}J + \frac{\sigma_y}{4}B\right) v_i^{n+1} = \left(I - \frac{r_y}{2}J - \frac{\sigma_y}{4}B\right) v_i^{n\frac{1}{2}} + \left(\frac{r_y}{2} + \frac{\sigma_y}{4}\right) \left(b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}\right). \quad (2.79)$$

As equações (2.78) e (2.79) descrevem o método de Crank-Nicolson-LOD para a equação de convecção-difusão.

O objetivo principal de nosso trabalho é o estudo do método ETF-LOD. O desenvolvimento do método CN-LOD foi exposto neste capítulo e também no próximo apenas a título de curiosidade, uma vez que o mesmo será utilizado para efeito de comparação nos resultados numéricos que serão apresentados no capítulo 4.

Capítulo 3

Equações de Reação-Difusão Não-Lineares

Neste capítulo, apresentamos o método ETF-LOD para a equação de reação-difusão não linear. Ao aplicamos este método, nos deparamos com sistemas de equações não lineares. Como o custo computacional para resolução desses sistemas é relativamente alto, propomos neste trabalho uma linearização do método, linearização esta que diminui substancialmente o tempo de processamento sem um aumento significativo do erro.

3.1 Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional (ETF-LOD)

A seguir, estendemos o método ETF-LOD para equações de reação-difusão não lineares, dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + p(u), \quad (3.1)$$

com condição inicial:



$$u(x, y, 0) = f(x, y), \quad 0 \leq x \leq l_x, \quad 0 \leq y \leq l_y, \quad (3.2)$$

e condições de fronteira de Dirichlet:

$$\begin{aligned} u(0, y, t) &= g_0(y, t), & u(l_x, y, t) &= g_1(y, t), \\ u(x, 0, t) &= f_0(x, t), & u(x, l_y, t) &= f_1(x, t), \quad t > 0. \end{aligned}$$

Podemos reescrever a equação (3.1) como duas EDPs, que representam o problema original em uma dimensão, da seguinte forma:

$$\frac{u_t}{2} = \nu u_{xx} + p(u) \quad e \quad \frac{u_t}{2} = \nu u_{yy} + p(u).$$

Discretizando a derivada espacial em $u_t = 2\nu u_{xx} + 2p(u)$ pela fórmula de diferença centrada, para $j = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)] + 2p(u_{i,j}(t)), \quad i = 1, \dots, N,$$

para j fixo e variando $i = 1, 2, \dots, N$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)] + 2p(u_{1,j}(t)), \\ \frac{\partial}{\partial t} u_{2,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{3,j}(t) - 2u_{2,j}(t) + u_{1,j}(t)] + 2p(u_{2,j}(t)), \\ &\vdots \\ \frac{\partial}{\partial t} u_{N-1,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N,j}(t) - 2u_{N-1,j}(t) + u_{N-2,j}(t)] + 2p(u_{N-1,j}(t)), \\ \frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)] + 2p(u_{N,j}(t)), \end{aligned}$$

tomando

$$p(u_j(t)) = [p(u_{1,j}(t)), \dots, p(u_{N,j}(t))]^T,$$

então,

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} \{a_j(t) - Ju_j(t)\} + 2p(u_j(t)), \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.3)$$

Agora aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração no tempo de (3.3) no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, temos:

$$\hat{u}_j^{n+1} = u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} + 2\Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) \quad (3.4)$$

e

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n - \frac{r_x}{12} J[5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - \hat{u}_j^{n+1}] + \frac{r_x}{12} [5a_j^n + 8a_j^{n+\frac{1}{2}} - a_j^{n+1}] + \quad (3.5)$$

$$+ \frac{\Delta t}{12} [5p(u_j^n) + 8p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) - p(\hat{u}_j^{n+1})].$$

Substituindo (3.4) no termo linear de (3.5) e variando para $j = 1, \dots, N$, obtemos:

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n - \frac{r_x}{12} J[5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - (u_j^n - 2r_x J u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} + 2\Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}}))] +$$

$$+ \frac{r_x}{12} [5a_j^n + 8a_j^{n+\frac{1}{2}} - a_j^{n+1}] + \frac{\Delta t}{12} [5p(u_j^n) + 8p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) - p(\hat{u}_j^{n+1})],$$

então

$$\left[I + \frac{2}{3} r_x J + \frac{1}{6} (r_x J)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3} r_x J \right] u_j^n + \frac{5}{12} r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} [4I + r_x J] a_j^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.6)$$

$$- \frac{r_x}{12} a_j^{n+1} + \frac{5}{12} \Delta t p(u_j^n) + \frac{\Delta t}{6} [4I + r_x J] p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\Delta t}{12} p(\hat{u}_j^{n+1}).$$

Novamente discretizando a derivada espacial em $u_t = 2\nu u_{yy} + 2p(u)$ pela fórmula centrada e tomando

$$p(v_i(t)) = [p(u_{i,1}(t)), \dots, p(u_{i,N}(t))]^T,$$

obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} v_i(t) = \frac{2\nu}{\Delta y^2} \{b_i(t) - Jv_i(t)\} + 2p(v_i(t)), \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.7)$$

Aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração no tempo de (3.7) no intervalo $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$, temos:

$$\hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}} = v_i^{n+1} - 2r_y J v_i^{n+1} + 2r_y b_i^{n+1} + 2\Delta t p(v_i^{n+1}) \quad (3.8)$$

e

$$v_i^{n+1} = v_i^{n+\frac{1}{2}} - \frac{r_y}{12} J[5v_i^{n+\frac{1}{2}} + 8v_i^{n+1} - \hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}}] + \frac{r_y}{12} [5b_i^{n+\frac{1}{2}} + 8b_i^{n+1} - b_i^{n+\frac{3}{2}}] + \quad (3.9)$$

$$+ \frac{\Delta t}{12} [5p(v_i^{n+\frac{1}{2}}) + 8p(v_i^{n+1}) - p(\hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}})].$$

Substituindo (3.8) no termo linear de (3.9) obtemos para $i = 1, \dots, N$,

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{2}{3}r_y J + \frac{1}{6}(r_y J)^2 \right] v_i^{n+1} &= \left[I - \frac{1}{3}r_x J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} \\ &+ \frac{r_y}{6} [4I + r_y J] b_i^{n+1} - \frac{r_y}{12} b_i^{n+\frac{3}{2}} + \frac{5}{12} \Delta t p(v_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{6} [4I + r_y J] p(v_i^{n+1}) \\ &- \frac{\Delta t}{12} p(v_i^{n+\frac{3}{2}}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

O par de equações (3.6) e (3.10) descrevem o método ETF-LOD para a equação de reação-difusão (3.1). Os sistemas não lineares que aparecem em cada passo podem ser resolvidos pelo método de Newton.

Método ETF-LOD para Condições de Fronteira de Neumann

Tratamos agora da equação (3.1) com condições de fronteira de Neumann dadas por (2.44) e com a condição inicial (3.2). Das condições de contorno temos que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x} [u_{2,j}(t) - u_{0,j}(t)] &= a_1 u_{1,j}(t) - b_1, \\ \Rightarrow u_{0,j}(t) &= -2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) + 2\Delta x b_1 + u_{2,j}(t). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Segue da discretização de $u_t = 2\nu u_{xx} + 2p(u)$, para $i = 1, \dots, N$, que:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)] + 2p(u_{i,j}(t)), \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.12)$$

para $i = 1$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)] + 2p(u_{1,j}(t)), \quad (3.13)$$

Substituindo (3.11) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) - 2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) + 2\Delta x b_1 + u_{2,j}(t)] + 2p(u_{1,j}(t)) \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [2u_{2,j} - 2(1 + \Delta x a_1)u_{1,j} + 2\Delta x b_1] + 2p(u_{1,j}(t)). \end{aligned}$$

Utilizando o mesmo raciocínio para a segunda equação de (2.44), obtemos:

$$\frac{1}{2\Delta x} [u_{N+1,j}(t) - u_{N-1,j}(t)] = -a_2 u_{N,j}(t) + b_2$$

$$\Rightarrow u_{N+1,j}(t) = -2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t). \quad (3.14)$$

Tomando $i = N$, podemos escrever (3.12) da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)] + 2p(u_{N,j}(t)),$$

substituindo (3.14) na equação acima temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [-2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)] + 2p(u_{N,j}(t)),$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [2u_{N-1,j} - 2(1 + \Delta x a_2)u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2] + 2p(u_{N,j}(t)).$$

Na forma matricial podemos escrever (3.12) como:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [c - M u_j] + 2p(u_j).$$

Aplicando na equação acima, a ETF-LOD para integração no tempo no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, obtemos:

$$\hat{u}_j^{n+1} = u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c + 2\Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) \quad (3.15)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} \left[5 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M u_j^n) + 2p(u_j^n) \right\} \right. \\ &\quad + 8 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M u_j^{n+\frac{1}{2}}) + 2p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) \right\} \\ &\quad \left. - \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M \hat{u}_j^{n+1}) + 2p(\hat{u}_j^{n+1}) \right\} \right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

substituindo (3.15) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{5}{12} r_x (c - M u_j^n) + \frac{5}{12} \Delta t p(u_j^n) \\ &\quad + \frac{8}{12} r_x (c - M u_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{8}{12} \Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) \\ &\quad - \frac{1}{12} r_x \left[c - M \left\{ u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c + 2\Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) \right\} \right] - \frac{1}{12} \Delta t p(\hat{u}_j^{n+1}). \\ \Rightarrow &\left[I + \frac{2}{3} r_x M + \frac{1}{6} r_x^2 M^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3} r_x M \right] u_j^n \\ &+ \frac{\Delta t}{12} [5p(u_j^n) + 8p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) - p(u_j^{n+1})] + \frac{r_x}{6} \Delta t M p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{6} r_x^2 M c. \end{aligned} \quad (3.17)$$

De modo análogo para as condições de Neumann dadas por (2.49), temos:

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{2}{3}r_y\bar{M} + \frac{1}{6}r_y^2\bar{M}^2 \right] v_i^{n+1} &= \left[I - \frac{1}{3}r_y\bar{M} \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} \\ &+ \frac{\Delta t}{12} [5p(v_i^{n+\frac{1}{2}}) + 8p(v_i^{n+1}) - p(v_i^{n+\frac{3}{2}})] \\ &- \frac{r_y}{12}g + \frac{r_y}{6}\Delta t\bar{M}p(v_i^{n+1}) + \frac{1}{6}r_y^2\bar{M}g. \quad (3.18) \end{aligned}$$

As equações (3.17) e (3.18) descrevem o método ETF-LOD para equação de reação difusão (3.1), com condições de fronteira de Neumann. Novamente nos deparamos com o aparecimento sistemas não lineares.

3.2 Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional (CN-LOD)

Apresentamos nesta seção o método de CN-LOD para a equação de reação-difusão não linear. Novamente reescrevendo a equação (3.1) na forma de duas EDPs,

$$\frac{u_t}{2} = \nu u_{xx} + p(u), \quad \text{e} \quad \frac{u_t}{2} = \nu u_{yy} + p(u),$$

que representa o problema original em uma dimensão. Aplicando o método de Crank-Nicolson à equação $\frac{u_t}{2} = \nu u_{xx} + p(u)$, temos:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^n}{\frac{\Delta t}{2}} \right) = \nu \left(\frac{\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x^2 u_{i,j}^n}{2\Delta x^2} \right) + p(u_{i,j}).$$

Logo,

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^n &= \frac{\nu\Delta t}{2\Delta x^2} (\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_x^2 u_{i,j}^n) + \Delta t p(u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= \frac{r_x}{2} (u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) + \Delta t p(u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ \Rightarrow u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} &+ \frac{r_x}{2} (-u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &= u_{i,j}^n + \frac{r_x}{2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) + \Delta t p(u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}), \end{aligned}$$

fixando j e variando $i = 1, \dots, N$, temos:

$$\begin{aligned} u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2}(-u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{0,j}^{n+\frac{1}{2}}) &= u_{1,j}^n + \frac{r_x}{2}(+u_{2,j}^n - 2u_{1,j}^n + u_{0,j}^n) + \Delta t p(u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2}(-u_{3,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{1,j}^{n+\frac{1}{2}}) &= u_{2,j}^n + \frac{r_x}{2}(+u_{3,j}^n - 2u_{2,j}^n + u_{1,j}^n) + \Delta t p(u_{2,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ &\vdots \\ u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2}(-u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{N-2,j}^{n+\frac{1}{2}}) &= u_{N-1,j}^n + \frac{r_x}{2}(+u_{N,j}^n - 2u_{N-1,j}^n + u_{N-2,j}^n) + \Delta t p(u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) \\ u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{2}(-u_{N+1,j}^{n+\frac{1}{2}} + 2u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{N-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) &= u_{N,j}^n + \frac{r_x}{2}(+u_{N+1,j}^n - 2u_{N,j}^n + u_{N-1,j}^n) + \Delta t p(u_{N,j}^{n+\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

Utilizando as condições de fronteira podemos reescrever as equações acima na forma matricial:

$$\left(I + \frac{r_x}{2}J\right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{r_x}{2}J\right) u_j^n + \frac{r_x}{2} \left(a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}\right) + \Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}}). \quad (3.19)$$

Seguindo o mesmo raciocínio para a equação $\frac{u}{2} = \nu u_{yy} + p(u)$, obtemos:

$$\left(I + \frac{r_y}{2}J\right) v_i^{n+1} = \left(I - \frac{r_y}{2}J\right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2} \left(b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}\right) + \Delta t p(v_i^{n+1}). \quad (3.20)$$

As equações (3.19) e (3.20) descrevem o método de Crank-Nicolson-LOD para a equação de reação-difusão não linear.

3.3 Fórmula Trapezoidal Estendida Localmente Unidimensional Linearizada (ETF-LOD-L)

Vimos anteriormente que o método ETF-LOD aplicado à equação de reação-difusão, nos obriga a resolver sistemas não lineares. Para tentar contornar essa situação, apresentamos a seguir um processo para linearização do método. Com essa linearização a solução aproximada da equação é dada resolvendo-se sistemas lineares, o que representa uma diminuição considerável no tempo de processamento, sem aumentar muito a taxa do erro, como poderá ser observado no capítulo 4.

A idéia é substituir a equação:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + p(u)$$

por duas equações que representam o problema original em uma dimensão (espacial), avaliando $p(u)$ no tempo t_n ,

$$\frac{u_t}{2} = u_{xx} + p(u) \Big|_{t_n} \quad e \quad \frac{u_t}{2} = u_{yy} + p(u) \Big|_{t_n}.$$

Discretizando a derivada espacial em $\frac{u_t}{2} = u_{xx} + p(u) \Big|_{t_n}$ pela fórmula de diferença centrada, para $j = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)] + 2p(u_{i,j}(t_n)), \quad i = 1, \dots, N.$$

Para j fixo e $i = 1, 2, \dots, N$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)] + 2p(u_{1,j}(t_n)),$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{2,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{3,j}(t) - 2u_{2,j}(t) + u_{1,j}(t)] + 2p(u_{2,j}(t_n)),$$

$\vdots$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N-1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N,j}(t) - 2u_{N-1,j}(t) + u_{N-2,j}(t)] + 2p(u_{N-1,j}(t_n)),$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)] + 2p(u_{N,j}(t_n)),$$

e utilizando as condições de fronteira de Dirichlet, as equações acima podem ser escritas na forma matricial:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} \{a_j(t) - Ju_j(t)\} + 2p(u_j(t_n)), \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.21)$$

Aplicando agora a ETF no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, temos:

$$\hat{u}_j^{n+1} = u_j^n - 2r_x Ju_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x a_j^{n+\frac{1}{2}} + 2\Delta t p(u_j^n) \quad (3.22)$$

e

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n - \frac{r_x}{12} J[5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - \hat{u}_j^{n+1}] + \frac{r_x}{12} [5a_j^n + 8a_j^{n+\frac{1}{2}} - a_j^{n+1}] + \quad (3.23)$$

$$+\frac{\Delta t}{12}[5p(u_j^n) + 8p(u_j^n) - p(u_j^n)].$$

Substituindo (3.22) em (3.23), e variando para $j = 1, \dots, N$, obtemos:

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n - \frac{r_x}{12}J[5u_j^n + 8u_j^{n+\frac{1}{2}} - (u_j^n - 2r_xJu_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_xa_j^{n+\frac{1}{2}} + 2\Delta tp(u_j^n)] + \\ + \frac{r_x}{12}[5a_j^n + 8a_j^{n+\frac{1}{2}} - a_j^{n+1}] + \frac{\Delta t}{12}[5p(u_j^n) + 8p(u_j^n) - p(u_j^n)].$$

Logo,

$$\left[I + \frac{2}{3}r_xJ + \frac{1}{6}(r_xJ)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3}r_xJ \right] u_j^n + \frac{5}{12}r_xa_j^n + \frac{r_x}{6}[4I + r_xJ]a_j^{n+\frac{1}{2}} \\ - \frac{r_x}{12}a_j^{n+1} + \Delta tp(u_j^n) + \frac{\Delta t}{6}r_xJp(u_j^n). \quad (3.24)$$

Novamente discretizando a derivada espacial em $u_t = 2\nu u_{yy} + 2p(u)|_{t_n}$ pela fórmula centrada, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}v_i(t) = \frac{2\nu}{\Delta y^2}\{b_i(t) - Jv_i(t)\} + 2p(v_i(t_n)), \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.25)$$

Aplicando a fórmula trapezoidal estendida para integração no tempo de (3.25) no intervalo $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$, temos:

$$\hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}} = v_i^{n+1} - 2r_yJv_i^{n+1} + 2r_yb_i^{n+1} + 2\Delta tp(v_i^n) \quad (3.26)$$

e

$$v_i^{n+1} = v_i^{n+\frac{1}{2}} - \frac{r_y}{12}J[5v_i^{n+\frac{1}{2}} + 8v_i^{n+1} - \hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}}] + \frac{r_y}{12}[5b_i^{n+\frac{1}{2}} + 8b_i^{n+1} - b_i^{n+\frac{3}{2}}] + \\ + \frac{\Delta t}{12}[5p(v_i^n) + 8p(v_i^n) - p(v_i^n)]. \quad (3.27)$$

Substituindo (3.26) em (3.27) para $i = 1, \dots, N$, obtemos:

$$\left[I + \frac{2}{3}r_yJ + \frac{1}{6}(r_yJ)^2 \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{1}{3}r_xJ \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_yb_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6}[4I + r_yJ]b_i^{n+1} \\ - \frac{r_y}{12}b_i^{n+\frac{3}{2}} + \frac{5}{12}\Delta tp(v_j^n) + \frac{\Delta t}{6}[4I + r_yJ]p(v_i^n) - \frac{\Delta t}{12}p(v_i^n). \quad (3.28)$$

Logo,

$$\left[I + \frac{2}{3}r_yJ + \frac{1}{6}(r_yJ)^2 \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{1}{3}r_yJ \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_yb_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6}[4I + r_yJ]b_i^{n+1} \\ - \frac{r_y}{12}b_i^{n+\frac{3}{2}} + \Delta tp(v_j^n) + \frac{\Delta t}{6}r_yJp(v_i^n).$$

Logo, o método linearizado é descrito pelas equações:

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{2}{3}r_x J + \frac{1}{6}(r_x J)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} &= \left[I - \frac{1}{3}r_x J \right] u_j^n + \frac{5}{12}r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} [4I + r_x J] a_j^{n+\frac{1}{2}} \\ &- \frac{r_x}{12} a_j^{n+1} + \Delta t p(u_j^n) + \frac{\Delta t}{6} r_x J p(u_j^n) \end{aligned} \quad (3.29)$$

e

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{2}{3}r_y J + \frac{1}{6}(r_y J)^2 \right] v_i^{n+1} &= \left[I - \frac{1}{3}r_y J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6} [4I + r_y J] b_i^{n+1} \\ &- \frac{r_y}{12} b_i^{n+\frac{3}{2}} + \Delta t p(v_i^n) + \frac{\Delta t}{6} r_y J p(v_i^n). \end{aligned} \quad (3.30)$$

As equações acima também poderiam ser obtidas substituindo na equação (3.6) $p(u_j^{n+\frac{1}{2}})$ e $p(\hat{u}_j^{n+1})$ por $p(u_j^n)$. Na equação (3.10) substituímos $p(v_i^{n+\frac{1}{2}})$, $p(v_i^{n+1})$ e $p(v_i^{n+\frac{3}{2}})$ por $p(v_i^n)$.

Método ETF-LOD-Linearizado para Condições de Fronteira de Neumann

Tratamos agora da equação (3.1) com condições de Neumann dadas por (2.44) e com a condição inicial (3.2). Das condições de contorno temos que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x} [u_{2,j}(t) - u_{0,j}(t)] &= a_1 u_{1,j}(t) - b_1, \\ \Rightarrow u_{0,j}(t) &= -2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) + 2\Delta x b_1 + u_{2,j}(t). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Segue da discretização de $u_t = 2\nu u_{xx} + 2p(u)|_{t_n}$, para $i = 1, \dots, N$, que

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{i,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{i+1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i-1,j}(t)] + 2p(u_{i,j}(t_n)), \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.32)$$

para $i = 1$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) + u_{0,j}(t)] + 2p(u_{1,j}(t_n)), \quad (3.33)$$

Substituindo (3.31) na equação acima, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{2,j}(t) - 2u_{1,j}(t) - 2\Delta x a_1 u_{1,j}(t) + 2\Delta x b_1 + u_{2,j}(t)] + 2p(u_{1,j}(t_n))$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} u_{1,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [2u_{2,j} - 2(1 + \Delta x a_1)u_{1,j} + 2\Delta x b_1] + 2p(u_{1,j}(t_n)).$$

Utilizando o mesmo raciocínio para a segunda equação de (2.44), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x} [u_{N+1,j}(t) - u_{N-1,j}(t)] &= -a_2 u_{N,j}(t) + b_2 \\ \Rightarrow u_{N+1,j}(t) &= -2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Tomando $i = N$, podemos escrever (3.32), da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [u_{N+1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)] + 2p(u_{N,j}(t_n)),$$

substituindo (3.34) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x} [-2\Delta x a_2 u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2 + u_{N-1,j}(t) - 2u_{N,j}(t) + u_{N-1,j}(t)] + 2p(u_{N,j}(t_n)), \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} u_{N,j}(t) &= \frac{2\nu}{\Delta x^2} [2u_{N-1,j} - 2(1 + \Delta x a_2)u_{N,j}(t) + 2\Delta x b_2] + 2p(u_{N,j}(t_n)). \end{aligned}$$

Na forma matricial podemos escrever (3.32), como:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j = \frac{2\nu}{\Delta x^2} [c - M u_j] + 2p(u_j(t_n)).$$

Aplicando na equação acima, a ETF-LOD para integração no tempo no intervalo $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}})$, obtemos:

$$\hat{u}_j^{n+1} = u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c + 2\Delta t p(u_j^n) \quad (3.35)$$

e

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{\Delta t}{2 \times 12} \left[5 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M u_j^n) + 2p(u_j^n) \right\} \right. \\ &\quad + 8 \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M u_j^{n+\frac{1}{2}}) + 2p(u_j^n) \right\} \\ &\quad \left. - \left\{ \frac{2\nu}{\Delta x^2} (c - M \hat{u}_j^{n+1}) + 2p(u_j^n) \right\} \right], \end{aligned} \quad (3.36)$$

substituindo (3.35) na equação acima, temos:

$$\begin{aligned} \hat{u}_j^{n+\frac{1}{2}} &= u_j^n + \frac{5}{12} r_x (c - M u_j^n) + \frac{5}{12} \Delta t p(u_j^n) \\ &\quad + \frac{8}{12} r_x (c - M u_j^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{8}{12} \Delta t p(u_j^n) \\ &\quad - \frac{1}{12} r_x \left[c - M \left\{ u_j^n - 2r_x M u_j^{n+\frac{1}{2}} + 2r_x c + 2\Delta t p(u_j^n) \right\} \right] + \frac{1}{12} \Delta t p(u_j^n). \end{aligned} \quad (3.37)$$

então,

$$\begin{aligned}
 & \left[I + \frac{2}{3}r_x M + \frac{1}{6}r_x^2 M^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3}r_x M \right] u_j^n \\
 & + \frac{\Delta t}{12} [5p(u_j^n) + 8p(u_j^n) - p(u_j^n)] \\
 & + \frac{r_x}{6} \Delta t M p(u_j^n) + \frac{r_x}{6} \Delta t M p(u_j^n) - \frac{r_x}{12} c + \frac{1}{6} r_x^2 M c. \\
 \Rightarrow & \left[I + \frac{2}{3}r_x M + \frac{1}{6}r_x^2 M^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3}r_x M \right] u_j^n \\
 & + \Delta t p(u_j^n) + \frac{r_x}{6} \Delta t M p(u_j^n) + \frac{r_x}{12} c + \frac{1}{6} r_x^2 M c. \quad (3.38)
 \end{aligned}$$

De modo análogo, para as condições de Neumann dadas por (2.49), temos:

$$\begin{aligned}
 \left[I + \frac{2}{3}r_y \bar{M} + \frac{1}{6}r_y^2 \bar{M}^2 \right] v_i^{n+1} &= \left[I - \frac{1}{3}r_y \bar{M} \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} \\
 &+ \Delta t p(v_i^n) + \frac{r_y}{6} \Delta t \bar{M} p(v_i^n) \frac{r_y}{12} g + \frac{1}{6} r_y^2 \bar{M} g. \quad (3.39)
 \end{aligned}$$

As equações (3.38) e (3.39) descrevem o método ETF-LOD-L (Linearizado) para equação de reação difusão (3.1), com condições de fronteira de Neumann.

Observamos que as equações (3.38) e (3.39) podem ser obtidas substituindo-se diretamente na equação (3.17) $p(u_j^{n+\frac{1}{2}})$ e $p(\hat{u}_j^{n+1})$ por $p(u_j^n)$ e na equação (3.18) substituímos $p(v_i^{n+\frac{1}{2}})$, $p(v_i^{n+1})$ e $p(v_i^{n+\frac{3}{2}})$ por $p(v_i^n)$.

3.4 Método de Crank-Nicolson Localmente Unidimensional Linearizado (CN-LOD-L)

Seguindo os mesmos passos da seção 3.1.1, calculando $p(u)$ no tempo t_n , obtemos as duas equações que descrevem o método:

$$\left(I + \frac{r_x}{2} J \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{r_x}{2} J \right) u_j^n + \frac{r_x}{2} (a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}) + \Delta t p(u_j^n), \quad (3.40)$$

e

$$\left(I + \frac{r_y}{2} J \right) v_i^{n+1} = \left(I - \frac{r_y}{2} J \right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2} (b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}) + \Delta t p(v_i^n). \quad (3.41)$$

Capítulo 4

Resultados Numéricos

Vamos agora avaliar o desempenho do método ETF-LOD para as equações de difusão, reação-difusão e convecção-difusão. Consideramos para isso alguns problemas testes e para todos os casos apresentados a seguir utilizamos $N = 19$ e $l_x = l_y = 1$. Os métodos utilizados para cada equação estão descritos a seguir.

Equação de Difusão (2.29)

◇ ETF-LOD com condições de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} & \left[I + \frac{2}{3}r_x J + \frac{1}{3}(r_x J)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \\ & = \left[I - \frac{1}{3}r_x J \right] u_j^n + \frac{5}{12}r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} [4I + r_x J] a_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}r_x a_j^{n+1} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} & \left[I + \frac{2}{3}r_y J + \frac{1}{6}(r_y J)^2 \right] v_i^{n+1} = \\ & = \left[I - \frac{1}{3}r_y J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6} [4I + r_y J] b_i^{n+1} - \frac{1}{12}r_y b_i^{n+\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

◇ CN-LOD com condições de contorno de Dirichlet:

$$\left(I + \frac{r_x}{2} J \right) u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left(I - \frac{r_x}{2} J \right) u_j^n + \frac{r_x}{2} (a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}})$$

e

$$\left(I + \frac{r_y}{2} J \right) v_i^{n+1} = \left(I - \frac{r_y}{2} J \right) v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2} (b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}).$$

Equação de Reação-Difusão (3.1)

◇ ETF-LOD com condições de contorno de Dirichlet:

$$\left[I + \frac{2}{3}r_x J + \frac{1}{6}(r_x J)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3}r_x J \right] u_j^n + \frac{5}{12}r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} [4I + r_x J] a_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{r_x}{12} a_j^{n+1} + \frac{5}{12} \Delta t p(u_j^n(t)) + \frac{\Delta t}{6} [4I + r_x J] p(u_j^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\Delta t}{12} p(\hat{u}_j^{n+1}).$$

e

$$\left[I + \frac{2}{3}r_y J + \frac{1}{6}(r_y J)^2 \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{1}{3}r_y J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6} [4I + r_y J] b_i^{n+1} - \frac{r_y}{12} b_i^{n+\frac{3}{2}} + \frac{5}{12} \Delta t p(v_i^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{6} [4I + r_y J] p(v_i^{n+1}) - \frac{\Delta t}{12} p(\hat{v}_i^{n+\frac{3}{2}}).$$

◇ CN-LOD com condições de contorno de Dirichlet:

$$\left[I + \frac{r_x}{2} J \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{r_x}{2} J \right] u_j^n + \frac{r_x}{2} [a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}] + \Delta t p(u_j^{n+\frac{1}{2}})$$

e

$$\left[I + \frac{r_y}{2} J \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{r_y}{2} J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2} [b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}] + \Delta t p(v_i^{n+1}).$$

◇ ETF-LOD-L com condições de contorno de Dirichlet:

$$\left[I + \frac{2}{3}r_x J + \frac{1}{6}(r_x J)^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{1}{3}r_x J \right] u_j^n + \frac{5}{12}r_x a_j^n + \frac{r_x}{6} [4I + r_x J] a_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{r_x}{12} a_j^{n+1} + \frac{1}{2} \Delta t p(u_j^n) + \frac{r_y \Delta t J}{12} p(u_j^n)$$

e

$$\left[I + \frac{2}{3}r_y J + \frac{1}{6}(r_y J)^2 \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{1}{3}r_y J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{5}{12}r_y b_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{6} [4I + r_y J] b_i^{n+1} - \frac{r_y}{12} b_i^{n+\frac{3}{2}} + \Delta t p(v_j^n) + \frac{\Delta t}{6} r_y J p(v_i^n).$$

◇ CN-LOD-L com condições de contorno de Dirichlet:

$$\left[I + \frac{r_x}{2} J \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{r_x}{2} J \right] u_j^n + \frac{r_x}{2} [a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}] + \Delta t p(u_j^n)$$

e

$$\left[I + \frac{r_y}{2} J \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{r_y}{2} J \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{r_y}{2} [b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}] + \Delta t p(v_i^n).$$

Equação de Convecção-Difusão (2.53)

◇ ETF-LOD com condições de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{2}{3}C_x + \frac{1}{6}C_x^2 \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} &= \left[I - \frac{1}{3}C_x \right] u_j^n + \\ &+ \frac{5}{12}c_j^n + \frac{1}{6}[4I + C_x]c_j^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}c_j^{n+1} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{2}{3}C_y + \frac{1}{6}C_y^2 \right] v_i^{n+1} &= \left[I - \frac{1}{3}C_y \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{5}{12}f_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{6}[4I + C_y]f_i^{n+1} - \frac{1}{12}f_i^{n+\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

◇ CN-LOD com condições de contorno de Dirichlet:

$$\left[I + \frac{r_x}{2}J + \frac{\sigma_x}{2}B \right] u_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{r_x}{2}J - \frac{\sigma_x}{2}B \right] u_j^n + \left[\frac{r_x}{2} + \frac{\sigma_x}{4} \right] [a_j^n + a_j^{n+\frac{1}{2}}]$$

e

$$\left[I + \frac{r_y}{2}J + \frac{\sigma_y}{2}B \right] v_i^{n+1} = \left[I - \frac{r_y}{2}J - \frac{\sigma_y}{2}B \right] v_i^{n+\frac{1}{2}} + \left[\frac{r_y}{2} + \frac{\sigma_y}{4} \right] [b_i^{n+\frac{1}{2}} + b_i^{n+1}].$$

4.1 Implementação dos Métodos

Os métodos envolvidos neste trabalho foram implementados utilizando a linguagem Fortran 77 [10] para a equação de reação-difusão não linear e, os métodos para as demais equações foram implementados na linguagem C, executando no sistema linux. Os gráficos foram feitos no software "Mathematica 4.0", executando em windows 98.

4.2 Problemas Considerados

A seguir apresentamos três problemas considerados neste trabalho para avaliação dos resultados numéricos.

4.2.1 Problema 1

Consideremos a equação de difusão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad 0 < x, y < 1, \quad t > 0,$$

com a condição inicial:

$$u(x, y, 0) = \text{sen}(\pi x)\text{sen}(2\pi y),$$

com condições de fronteira de Dirichlet:

$$\begin{aligned} u(0, y, t) &= 0, & u(1, y, t) &= 0, \\ u(x, 0, t) &= 0, & u(x, 1, t) &= 0. \end{aligned}$$

A solução exata desta equação é dada por: $u(x, y, t) = e^{-5\pi^2 t}\text{sen}(\pi x)\text{sen}(2\pi y)$.

Resolvemos o problema 1, com $\Delta t = 0.01$. Uma tabela com o erro máximo absoluto no cálculo da solução obtida pelo método ETF-LOD é apresentada abaixo:

t	ETF-LOD	CN-LOD	t	ETF-LOD	CN-LOD
0.1	2.5(-2)	1.2(-1)	0.6	3.9(-11)	1.8(-6)
0.2	2.8(-4)	1.2(-2)	0.7	1.0(-12)	2.2(-7)
0.3	6.5(-6)	1.3(-3)	0.8	7.2(-14)	4.1(-8)
0.4	1.1(-7)	1.5(-4)	0.9	9.2(-15)	2.5(-8)
0.5	2.1(-9)	1.6(-5)	1	1.3(-15)	2.0(-8)

Tabela 1: Erro Máximo

Abaixo uma tabela mostrando a solução exata e as soluções aproximadas nos pontos $u(0.5, 0.025, t)$, $t = 0.01, 0.02, \dots, 0.1$, para os métodos considerados.

t	EXATA	ETF-LOD	CN-LOD	t	EXATA	ETF-LOD	CN-LOD
0.1	7.2(-3)	-1.8(-2)	1.1(-1)	0.6	1.4(-13)	3.9(-11)	1.8(-6)
0.2	5.2(-5)	3.3(-4)	1.2(-2)	0.7	9.9(-16)	-3.3(-13)	-1.9(-7)
0.3	3.7(-7)	-6.6(-6)	-1.3(-3)	0.8	7.1(-18)	6.0(-14)	2.9(-8)
0.4	2.6(-9)	1.1(-7)	1.5(-4)	0.9	5.1(-20)	6.3(-15)	4.2(-9)
0.5	1.9(-11)	-2.0(-9)	-1.6(-5)	1	3.7(-22)	9.0(-16)	6.3(-9)

Tabela 1.1:

O gráfico abaixo mostra aproximações para $x = \frac{1}{2}$ para o tempo $t = 0.2$.

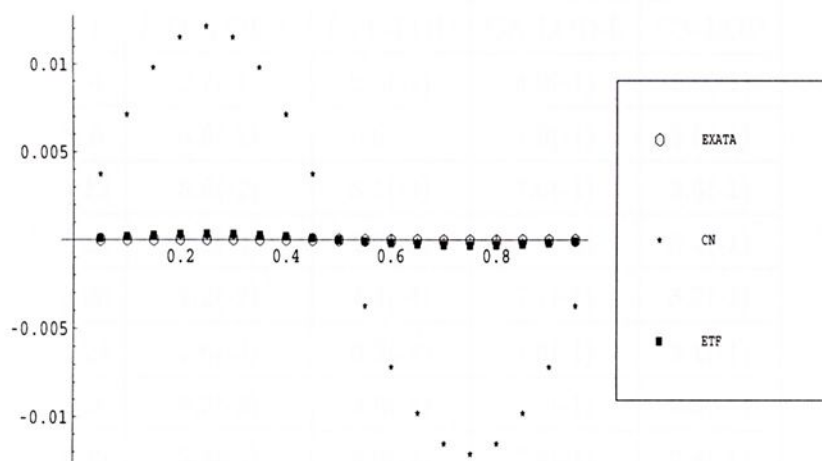


Figura 4.1: *Problema 1*

Observamos que o método de CN produz oscilações na solução calculada, o que não ocorre com o método ETF-LOD e que ainda apresenta melhores aproximações para a solução exata.

4.2.2 Problema 2

Consideremos a equação de reação-difusão não linear:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + u^2(1-u), \quad 0 < x, y < 1, \quad t > 0,$$

Com condição inicial dada por: $u(x, y, 0) = \frac{1}{1+e^{p(x+y)}}$, $p = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e com condições de fronteira de Dirichlet:

$$u(0, y, t) = \frac{1}{1+e^{p(y-pt)}}, \quad u(1, y, t) = \frac{1}{1+e^{p(1+y-pt)}},$$

$$u(x, 0, t) = \frac{1}{1+e^{p(x-pt)}}, \quad u(x, 1, t) = \frac{1}{1+e^{p(x+1-pt)}}.$$

A solução exata é: $u(x, y, t) = \frac{1}{1+e^{p(x+y-pt)}}$.

No cálculo da solução do problema 2, usamos $\Delta t = 4$. A seguir uma tabela é apresentada, na qual apresentamos novamente o erro máximo absoluto.

t	ETF-LOD-L	ETF-LOD	CN-LOD-L	CN-LOD
4	2.7(-1)	2.6(-1)	4.9(-1)	2.5(-1)
8	5.8(-2)	5.6(-2)	7.0(-1)	3.5(-1)
12	5.0(-2)	8.1(-3)	7.6(-1)	3.5(-1)
16	4.0(-3)	1.0(-3)	7.7(-1)	3.4(-1)
20	2.2(-2)	4.4(-4)	7.7(-1)	3.2(-1)
24	7.6(-3)	3.9(-4)	7.8(-1)	3.1(-1)
28	8.2(-3)	2.8(-4)	7.8(-1)	2.9(-1)
32	5.8(-3)	3.0(-4)	7.8(-1)	2.8(-1)
36	2.3(-3)	3.2(-4)	7.9(-1)	2.7(-1)
40	3.4(-3)	3.4(-4)	7.9(-1)	2.6(-1)

Tabela 2: Erro Máximo

Abaixo apresentamos uma tabela com os valores da solução exata e aproximadas nos pontos $u(0.15, 0.15, t)$, $t = 4, 8, \dots, 40$.

t	EXATA	ETF-LOD-L	ETF-LOD	CN-LOD-L	CN-LOD
4	7.18(-1)	9.28(-1)	9.51(-1)	4.46(-1)	6.15(-1)
8	9.49(-1)	1.00	9.99(-1)	5.14(-1)	7.59(-1)
12	9.28(-1)	1.02	9.99(-1)	5.45(-1)	8.35(-1)
16	9.99(-1)	1.00	9.99(-1)	5.66(-1)	8.84(-1)
20	9.99(-1)	9.88(-1)	9.99(-1)	5.79(-1)	9.18(-1)
24	9.99(-1)	9.96(-1)	9.99(-1)	5.88(-1)	9.41(-1)
28	9.99(-1)	1.00(-1)	9.99(-1)	5.94(-1)	9.58(-1)
32	9.99(-1)	1.00(-1)	9.99(-1)	5.98(-1)	9.70(-1)
36	9.99(-1)	9.98(-1)	9.99(-1)	6.00(-1)	9.78(-1)
40	9.99(-1)	9.98(-3)	9.99(-1)	6.01(-1)	9.80(-1)

Tabela 2.1



Os gráficos a seguir mostram aproximações para $x = \frac{2}{5}$ para o tempo $t = 16$, para os método descritos na tabela acima.

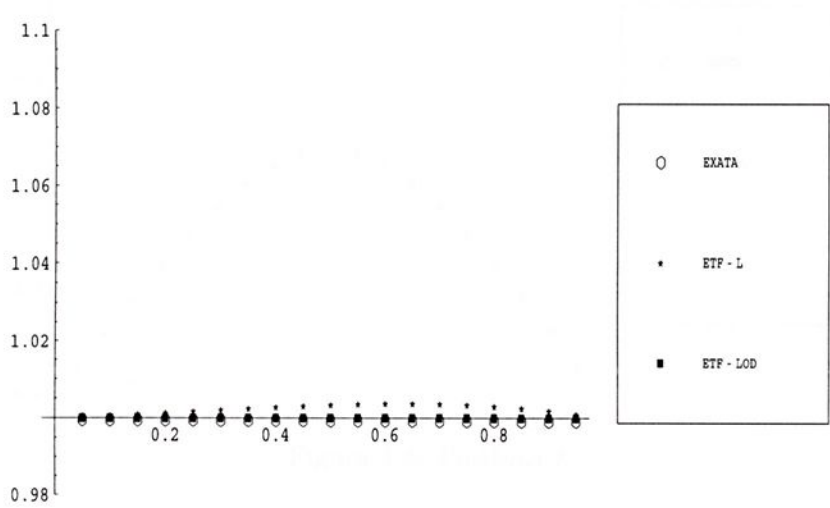


Figura 4.2: Problema 2

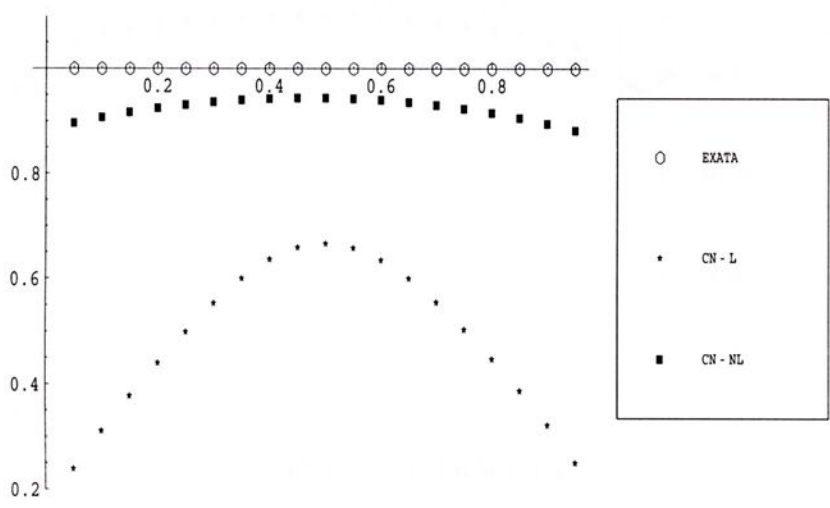


Figura 4.3: Problema 2

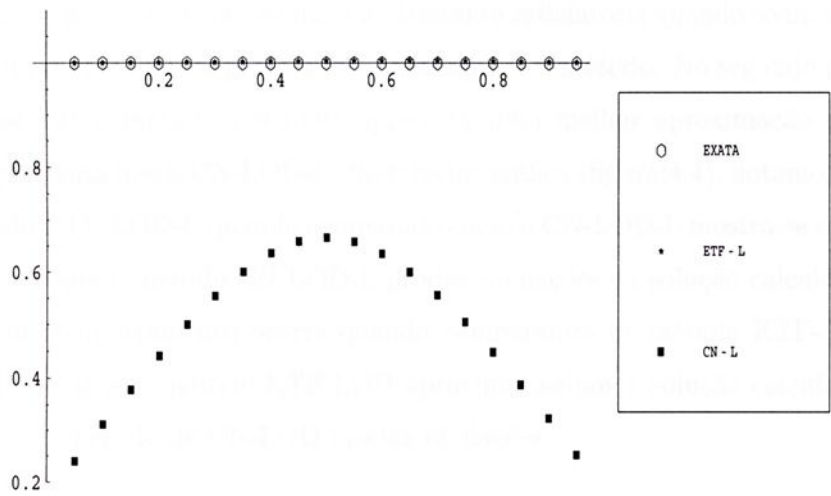


Figura 4.4: Problema 2

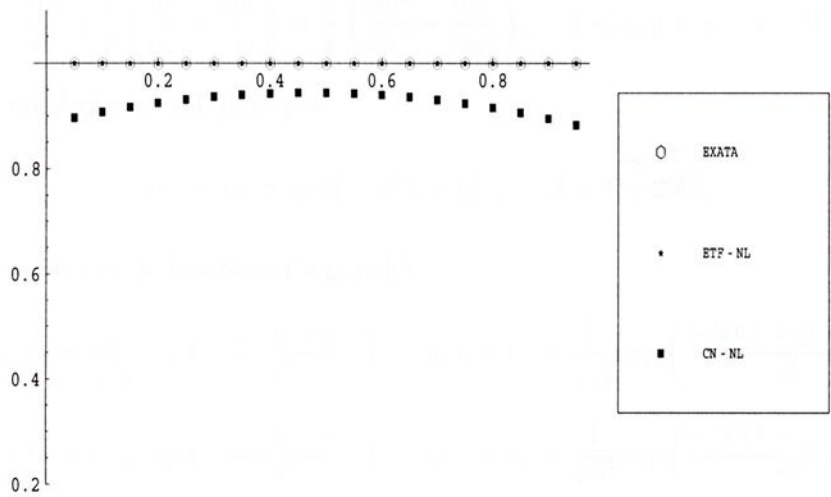


Figura 4.5: Problema 2

Observamos que no primeiro gráfico (figura:4.2) o método ETF-LOD-L aproxima a solução exata de maneira bastante satisfatória quando comparado o método ETF-LOD, haja vista que linearizamos o método. No segundo gráfico (figura:4.3) o método CN-LOD apresenta uma melhor aproximação para a solução exata que o CN-LOD-L. No terceiro gráfico (figura:4.4), notamos que o método ETF-LOD-L quando comparado como o CN-LOD-L mostra-se melhor, uma vez que o método CN-LOD-L produz oscilações na solução calculada. O mesmo comportamento ocorre quando comparamos os métodos ETF-LOD e CN-LOD, pois o método ETF-LOD aproxima melhor a solução calculada da exata e o método de CN-LOD produz oscilações.

4.2.3 Problema 3

Consideremos a equação de convecção-difusão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad 0 < x, y < 1, \quad t > 0,$$

Com condição inicial dada por:

$$u(x, y, 0) = \exp(-50(x + y)^2), \quad S = 1 + 200t,$$

com condições de fronteira de Dirichlet:

$$\begin{aligned} u(0, y, t) &= \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(\frac{-50(y - t)^2}{S^2}\right), & u(1, y, t) &= \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(\frac{-50(1 + y - t)^2}{S^2}\right) \\ u(x, 0, t) &= \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(\frac{-50(x - t)^2}{S^2}\right), & u(x, 1, t) &= \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(\frac{-50(1 + x - t)^2}{S^2}\right). \end{aligned}$$

A solução exata é:

$$u(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(\frac{-50(x + y - t)^2}{S^2}\right).$$

No cálculo da solução do problema 3, usamos $\Delta t = 0.2$. A seguir uma tabela é apresentada:

t	ETF-LOD	CN-LOD	t	ETF-LOD	CN-LOD
0.2	5.7(-3)	2.5(-1)	1.2	2.4(-6)	2.7(-2)
0.4	5.5(-4)	9.9(-2)	1.4	1.7(-6)	2.8(-2)
0.6	6.9(-5)	6.4(-2)	1.6	1.3(-6)	2.8(-2)
0.8	1.0(-5)	3.7(-2)	1.8	1.0(-6)	2.8(-2)
1.0	3.3(-6)	2.6(-2)	2.2	8.3(-7)	2.7(-2)

Tabela 3: Erro Máximo

Na tabela abaixo são apresentadas as soluções exatas e aproximadas nos pontos $u(0.5, 0.5, t)$, $t = 0.2, 0.4, \dots, 2.0$.

t	EXATA	ETF-LOD	CN-LOD	t	EXATA	ETF-LOD	CN-LOD
0.2	7.15(-1)	6.66(-1)	3.77(-2)	1.2	6.38(-2)	6.38(-2)	6.34(-2)
0.4	8.89(-1)	8.89(-1)	6.60(-2)	1.4	5.79(-2)	5.79(-2)	5.87(-2)
0.6	8.50(-1)	8.50(-1)	7.23(-2)	1.6	5.27(-2)	5.27(-2)	5.42(-2)
0.8	7.78(-1)	7.78(-1)	7.17(-2)	1.8	4.81(-2)	4.81(-2)	5.00(-2)
1.0	7.05(-1)	7.05(-1)	6.80(-2)	2.0	4.40(-2)	4.40(-2)	4.62(-2)

Tabela 3



O gráfico abaixo mostra aproximações para $x = \frac{3}{5}$ para o tempo $t = 0.6$.

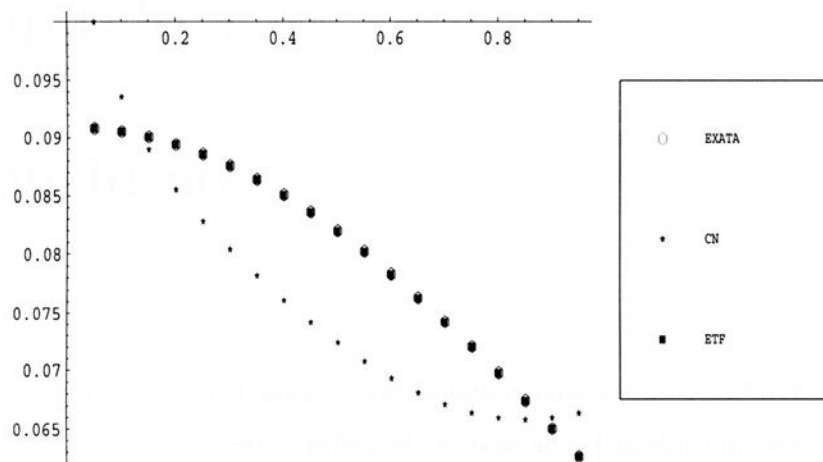


Figura 4.6: *Problema 3*

Aqui notamos que o método ETF produz melhores aproximações que o método CN, aproximando-se bastante da solução exata.

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho inicialmente apresentamos uma classe de métodos estendidos, tendo como objetivo principal, contornar a barreira imposta pela A-estabilidade sobre os métodos lineares de passo múltiplo. Apresentamos então um método estendido, de passo 1 e ordem três, dado pelo acoplamento de dois métodos lineares de passo múltiplo, o qual foi denominado por Usmani e Agarwal [1] de regra trapezoidal estendida. Diminuindo a ordem do erro de truncamento local da equação (1.10), podemos encontrar uma família de métodos estendidos de terceira ordem com um parâmetro livre, que é escolhido de forma a se obter um método L-estável.

Em seguida uma aplicação da ETF para as equações diferenciais parciais de difusão, convecção-difusão e reação difusão, proposta em [4] é apresentada. Mostramos que os métodos obtidos desta aplicação para as equações de difusão e convecção-difusão são incondicionalmente estáveis, o que nos permite utilizar passos relativamente grandes.

Ao aplicarmos o método ETF-LOD para a equação de reação-difusão não linear, devemos resolver sistemas não lineares, como estes sistemas não são de fácil manuseio, propomos uma linearização do método, obtendo, dessa forma, sistemas lineares. Essa linearização se mostrou bastante eficiente uma vez que o



método obtido produz uma boa aproximação da solução exata, mesmo quando comparado com o método ETF-LOD, como pode ser observado pelo gráfico do problema 2 (figura 4.2) e além disso diminui o esforço computacional.

Na comparação dos resultados obtidos, com a ETF-LOD e o CN-LOD, com os valores da solução exata, notamos que o método ETF-LOD produziu aproximações bastante satisfatórias e melhores que as apresentadas pelo método CN-LOD para a solução do problema.



Referências Bibliográficas

- [1] AGARWL, R. A., USMANI R. A., *An A-Stable Extended Trapezoidal rule for the Integration of Ordinary Differential Equations*, *Comp. & Maths., with Appls.*, v.11, p.1183-1191, 1985.
- [2] CHAWLA, M. M., AL-ZANAIDI, M. A. *An Extended Trapezoidal Formula for the Diffusion Equation*, *Comp. Appl. Math.*, v.38, p.51-59, 1999.
- [3] CHAWLA, M. M., AL-ZANAIDI, M. A. and Al-Aslab, M. G., *Extended One-Step Time-Integration Schemes for Convection-Diffusion Equations*, *Comp. Appl. Math.*, v.39, p.71-84, 2000.
- [4] CHAWLA, M. M., AL-ZANAIDI, M. A., *An Extended Trapezoidal Formula for the Diffusion Equation in Two Space Dimensions*, *Comp. Appl. Math.*, v.42, p.157-168, 2001.
- [5] CUNHA, M. C. C., *Métodos Numéricos*, UNICAMP, 2000.
- [6] DAHLQUIST, G., BJORCK, A., *Numerical Methods*, PRENTICE HALL, Englewood Cliffs, 1974.
- [7] HENRICI, P., *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*, John Wiley and Sons, 1962.
- [8] IÓRIO, V., *EDP Um Curso de Graduação*, IMPA, Coleção Matemática Universitária 1991.



-
- [9] JACQUES, I. B., *Extended One-Step Methods for the Numerical Solution of Ordinary Differential Equation*, em *Intern. J. Computer Math.*, v.29, p.247-255, 1988.
- [10] KAHANER, D., MOLER, C., NASH, S., *Numerical Methods and Software*, PRENTICE HALL, 1988.
- [11] LAMBERT, J.D. *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, Jhon Wiley & Sons, London, 1973.
- [12] LIMA, E. L., *Curso de Análise*, IMFA. projeto Euclides, 2000.
- [13] MITCHELL, A. R., GRIFFITHS, D. F., *The finite Method in Partial differential equations*, JHON WILEY & SONS, 1980.
- [14] NOBLE, B., DANIEL J. W., *Applied Linear Algebra*, PRENTICE HALL, Englewood Cliffs, 1986.



