

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

PICME

**Método das Diferenças Finitas para a Equação da Onda
Unidimensional**

Aluno:

Renan O. Domingues

Orientadores:

Prof. Abel S. Siqueira

Prof. Roberto R. S. J.

Curitiba

Março de 2017

Introdução

O presente trabalho foi desenvolvido como relatório do programa PICME, visando o estudo do método das diferenças finitas aplicado no problema da equação da onda unidimensional.

A descrição do método das diferenças finitas é feita após uma breve introdução aos problemas descritos por equações diferenciais parciais. Foram demonstrados e implementados alguns dos mais conhecidos esquemas de diferenças finitas para a equação da onda unidimensional. A implementação dos problemas foi feita na linguagem Julia, com exemplos ilustrativos buscando destacar as ideias apresentadas ao longo do texto.

Os conceitos fundamentais de convergência, consistência e estabilidade foram discutidos e aplicados nos esquemas de diferenças finitas usados, com ênfase na análise de estabilidade de Von-Neumann.

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Equações Diferenciais Parciais | 3 |
| 1.1 | Advecção, Difusão e Dispersão | 3 |
| 1.2 | EDP's Hiperbólicas (Fenômenos Advectivos) | 4 |
| 1.3 | EDP's Parabólicas (Fenômenos Difusivos) | 6 |
| 2 | Método das Diferenças Finitas | 7 |
| 2.1 | Fórmulas de Diferenças Finitas | 7 |
| 2.2 | MDF para a Equação de Advecção | 9 |
| 2.3 | Difusão e Dispersão Numéricas em MDF's para EDP's Hiperbólicas | 12 |
| 2.4 | Método Lax-Friedrichs | 14 |
| 2.5 | Método Lax-Wendroff | 15 |
| 2.6 | Método Leapfrog de Quarta Ordem no Espaço | 16 |
| 2.7 | Exemplos | 17 |
| 3 | Convergência, Consistência e Estabilidade | 18 |
| 3.1 | Convergência e Teorema de Equivalência de Lax-Richtmyer | 18 |
| 3.2 | Consistência | 19 |
| 3.3 | Estabilidade | 19 |
| 3.4 | Condição de Courant-Friedrichs-Lewy | 20 |
| 3.5 | Análise de Estabilidade de Von-Neumann | 22 |
| 3.5.1 | Estabilidade do esquema up-wind | 22 |
| 3.5.2 | Estabilidade do Esquema Lax-Wendroff | 24 |
| 3.5.3 | Estabilidade do Esquema Leapfrog de Quarta Ordem | 25 |
| A | - Códigos | 28 |

1 Equações Diferenciais Parciais

Equações Diferenciais Parciais (EDP's) relacionam derivadas de funções em relação a duas ou mais variáveis. Sua importância é decorrente do fato que descrevem fenômenos ou comportamentos em função de diferentes taxas de variações físicas, como a posição e o tempo.

1.1 Advecção, Difusão e Dispersão

Uma das aplicações de EDP's é na modelagem de fenômenos de transporte. Esses fenômenos incluem o transporte de massa, como a diluição de um soluto em solvente, e o transporte de energia, como o fluxo de calor em um corpo. Alguns conceitos relacionados a fenômenos de transporte são importantes para auxiliar o estudo dos métodos que serão vistos adiante.

Imaginemos que uma chaminé em certa fábrica emite uma nuvem de fumaça tóxica. Pela ação do vento, essa nuvem é transportada em direção à uma cidade. Nessa situação, surge o interesse de estudar o transporte dessa nuvem em relação a posição espacial e ao tempo. Para simplificar esse exemplo, são feitas as suposições de que a nuvem viaja com altura e velocidade constantes e em linha reta, que será adotada como eixo x , na direção e sentido da cidade. Além disso, no instante inicial a concentração da substância tóxica será considerada homogênea no interior da nuvem. A figura 1 ilustra um esboço do gráfico da concentração $u(x, t)$ dessa substância no instante inicial.

No contexto do exemplo descrito, podemos dividir o transporte da fumaça em três fenômenos principais. O primeiro deles é a advecção, ou apenas transporte, que é o fenômeno onde a nuvem de fumaça mantém a forma e composição da condição inicial enquanto se propaga com certa velocidade. Um exemplo dessa situação foi plotado no gráfico da figura 2. Outro tipo de transporte é o difusivo, onde a nuvem de fumaça vai se “diluindo”, ou seja, passando do meio mais concentrado (interior da nuvem) para o meio menos concentrado (arredores da nuvem). A figura 3 mostra um esboço do gráfico da concentração onde ocorre tanto advecção quanto difusão.

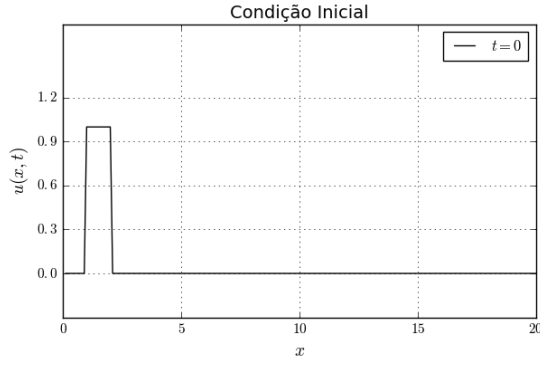


Figura 1: Condição Inicial

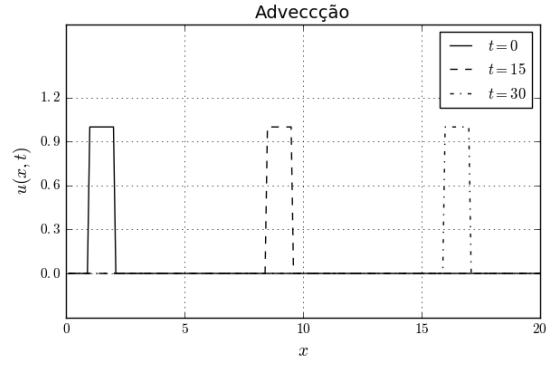


Figura 2: Advecção Pura

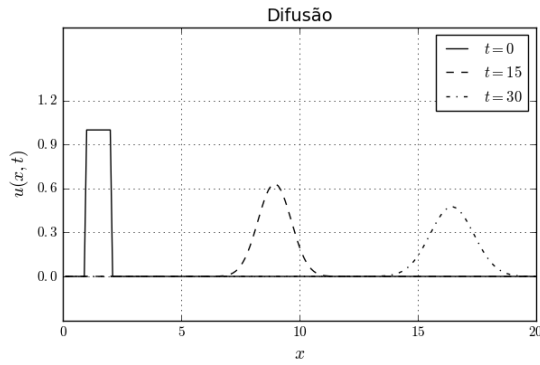


Figura 3: Advecção e Difusão

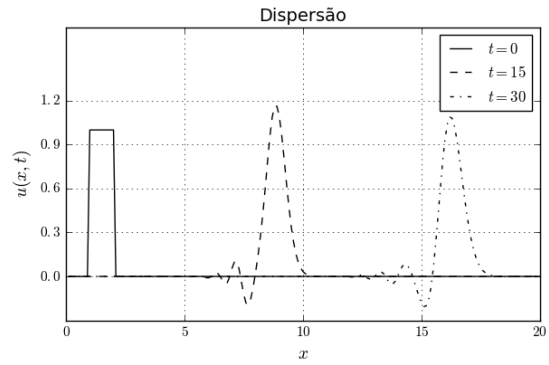


Figura 4: Advecção e Dispersão

O último tipo de transporte a ser apresentado é o dispersivo. Nele a nuvem da condição inicial irá se dividir em diferentes nuvens menores, cada uma com velocidade de propagação diferente. O fenômeno onde uma onda se divide em várias de diferentes comprimentos de onda enquanto se propaga é chamado de dispersão. A figura 4 ilustra uma situação onde ocorre advecção, difusão e dispersão.

1.2 EDP's Hiperbólicas (Fenômenos Advectivos)

As EDP's hiperbólicas podem ser descritas como aquelas cuja solução, que depende da posição e do tempo, tem forma de onda propagando com o tempo. Elas modelam fenômenos de transporte onde a forma da condição inicial é conservada, se não houverem perturbações, enquanto se propaga com certa velocidade. Fenômenos com essas características são chamados de advectivos.

A Equação de Advecção ou Transporte é a EDP hiperbólica mais simples

$$\begin{aligned} u_t + \alpha u_x &= 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde u é função da posição e do tempo, e α tem valor constante.

A solução da Equação de Advecção é única e dada por

$$u(x, t) = u_0(\xi), \tag{1.2}$$

onde $\xi = x - \alpha t$.

Essa solução indica que, para α constante, a onda mantém a forma da condição inicial enquanto se propaga com velocidade α . Para verificar que a solução satisfaz o problema basta substituir (1.2) em (1.1) e aplicar a regra da cadeia. De fato,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_0(\xi)}{\partial t} + \alpha \frac{\partial u_0(\xi)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} &= 0 \\ -\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} + \alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} &= 0. \end{aligned}$$

Também pode-se verificar que satisfaz a solução inicial notando que $\xi(x, 0) = x$.

A figura 5 permite visualizar o transporte de uma onda por advecção onde $\alpha = 1$. É fácil notar que a energia de uma onda transportada puramente por advecção é conservada, já que sua forma original é mantida.

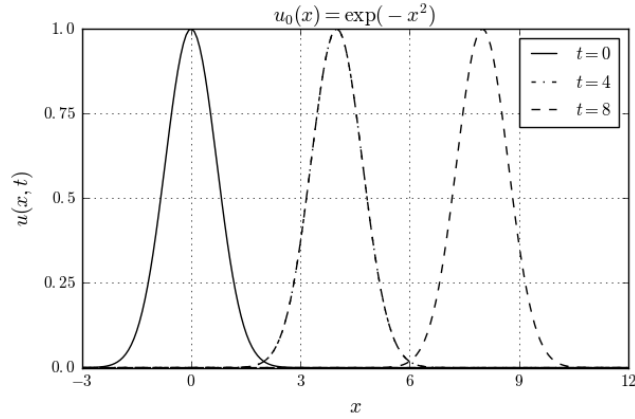


Figura 5: Gráfico mostrando a solução da Equação de Advecção para uma Gaussiana.

1.3 EDP's Parabólicas (Fenômenos Difusivos)

As EDP's parabólicas modelam problemas em que a condição inicial se modifica espontaneamente buscando atingir certo estado de equilíbrio, através de um processo movido por gradientes de concentração, onde o fluxo ocorre das regiões mais concentradas para as menos concentradas. Fenômenos com essas características são conhecidos como processos difusivos.

A mais simples EDP Parabólica é conhecida como Equação do Calor

$$u_t = ku_{xx} \quad (1.3)$$

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

onde k é a constante de difusão. Na equação do calor a função u representa a temperatura em função da posição e do tempo. Sabe-se, pela Segunda Lei da Termodinâmica, que o fluxo térmico movido por gradiente de temperatura ocorre espontaneamente sempre da região de maior temperatura para a de menor temperatura, caracterizando assim um fenômeno difusivo.

Um exemplo de aplicação para a Equação do Calor é o caso de uma barra fina de comprimento L , na qual só ocorre troca térmica pelas extremidades de temperaturas constantes $u(0, t) = u(L, t) = 0$, cujo perfil inicial de temperatura é

$$u(x, 0) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right). \quad (1.4)$$

Pela forma da condição inicial, podemos supor que a solução terá forma

$$u(x, t) = a(t) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right). \quad (1.5)$$

Substituindo (1.5) na Equação do Calor (1.3) chegamos à seguinte expressão para a amplitude

$$\begin{aligned} \frac{\partial (a(t) \sin(\frac{\pi x}{L}))}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 (a(t) \sin(\frac{\pi x}{L}))}{\partial x^2} \\ \frac{da}{dt} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) &= -a(t) k \frac{\pi^2}{L^2} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ da &= -k \frac{\pi^2}{L^2} dt \\ a(t) &= \exp\left(-\frac{k\pi^2 t}{L^2}\right). \end{aligned}$$

Com isso, a solução desse exemplo é

$$u(x, t) = \exp\left(-\frac{k\pi^2 t}{L^2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right).$$

Podemos observar o fenômeno de difusão na figura 6, para o exemplo (1.4) com $L = 1$ e $k = 0.04$. O fenômeno difusivo gera perda de energia na onda original, ocasionando decaimento exponencial na solução com o tempo.

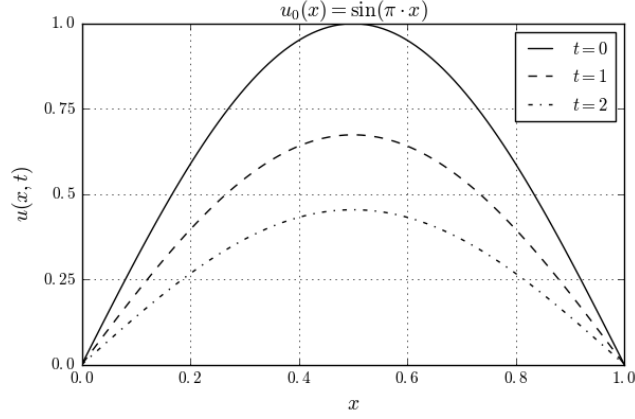


Figura 6: Gráfico mostrando a solução da Equação do calor para uma senoidal.

2 Método das Diferenças Finitas

O Método das Diferenças Finitas (MDF's) é caracterizado por aproximar as derivadas das funções por esquemas de diferenças, que são deduzidos a partir de expansões de Taylor da função. Ao substituir esses esquemas na EDP original, tem-se como resultado um MDF.

2.1 Fórmulas de Diferenças Finitas

Usaremos a notação $u_j^n = u(x_n, t_j)$. Sabe-se que a expansão de Taylor da função u no tempo em u_j^{n+1} é

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \frac{\Delta t^4}{24} \frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} + \frac{\Delta t^5}{120} \frac{\partial^5 u_j^n}{\partial t^5} + \mathcal{O}(\Delta t^6). \quad (2.1)$$

Truncando essa expressão no segundo termo, é obtida a fórmula avançada de diferenças finitas

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \\ \therefore \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &\approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Fazendo a expansão de Taylor de u no tempo em u_j^{n-1} obtemos

$$u_j^{n-1} = u_j^n - \Delta t \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \frac{\Delta t^4}{24} \frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} - \frac{\Delta t^5}{120} \frac{\partial^5 u_j^n}{\partial t^5} + \mathcal{O}(\Delta t^6). \quad (2.3)$$

Truncando essa expressão no segundo termo, é obtida a fórmula atrasada de diferenças finitas

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\ \therefore \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &\approx \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t}.\end{aligned}\quad (2.4)$$

Subtraindo (2.1) por (2.3) obtém-se a fórmula centrada de diferenças finitas (2.6) para a primeira derivada.

$$\begin{aligned}u_j^{n+1} - u_j^{n-1} &= 2\Delta t \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^3}{3} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^5) \\ \therefore \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4)\end{aligned}\quad (2.5)$$

$$\frac{\partial u_j^n}{\partial t} \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t}.\quad (2.6)$$

Somando (2.1) e (2.3) obtém-se a fórmula centrada de diferenças finitas (2.7) para a segunda derivada.

$$\begin{aligned}u_j^{n+1} + u_j^{n-1} &= 2u_j^n + \Delta t^2 \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^4}{12} \frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} + \mathcal{O}(\Delta t^6) \\ \therefore \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} &= \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{\Delta t^2}{12} \frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} &\approx \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\Delta t^2}.\end{aligned}\quad (2.7)$$

Pode-se subtrair a expansão de Taylor em u_j^{n+2}

$$u_j^{n+2} = u_j^n + 2\Delta t \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{(2\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{(2\Delta t)^3}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \frac{(2\Delta t)^4}{24} \frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} + \mathcal{O}(\Delta t^5),$$

pela a expansão em u_j^{n-2}

$$u_j^{n-2} = u_j^n - 2\Delta t \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{(2\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - \frac{(2\Delta t)^3}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \frac{(2\Delta t)^4}{24} \frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} + \mathcal{O}(\Delta t^5),$$

para gerar uma aproximação da primeira derivada

$$\begin{aligned}u_j^{n+2} - u_j^{n-2} &= 4\Delta t \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{8\Delta t^3}{3} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^5), \\ \therefore \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= \frac{u_j^{n+2} - u_j^{n-2}}{4\Delta t} - \frac{2\Delta t^2}{3} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4).\end{aligned}\quad (2.8)$$

Devido à semelhança entre as expressões, subtraindo (2.5) por um quarto de (2.8) elimina-se o termo $(\Delta t)^2$ e com isso é obtida uma fórmula de diferença finita de quarta ordem para a primeira

derivada (2.9).

$$\begin{aligned}
\frac{3}{4} \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{u_j^{n+2} - u_j^{n-2}}{16\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\
\therefore \frac{\partial u_j^n}{\partial t} &= \frac{2(u_j^{n+1} - u_j^{n-1})}{3\Delta t} - \frac{u_j^{n+2} - u_j^{n-2}}{12\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\
\frac{\partial u_j^n}{\partial t} &\approx \frac{2(u_j^{n+1} - u_j^{n-1})}{3\Delta t} - \frac{u_j^{n+2} - u_j^{n-2}}{12\Delta t}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

A mesmas deduções podem ser feitas para qualquer outra variável, como x , gerando fórmulas análogas.

2.2 MDF para a Equação de Advecção

Aplicar o MDF para a Equação de Advecção significa aproximar suas derivadas por fórmulas de diferenças. Aplicando a fórmula avançada (2.2) no tempo e a atrasada (2.4) no espaço, por exemplo, com $\alpha = 1$ obtemos

$$\begin{aligned}
u_t + u_x &= 0 \\
\therefore \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} &= 0
\end{aligned}$$

Uma vantagem de usar a fórmula avançada no tempo é que isso torna o método explícito, ou seja, é possível obter os valores em um instante posterior u^{n+1} diretamente em função de valores no instante atual u^n . Basta separar os valores do instante atual para o lado direito da equação para obter essa relação.

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n) \tag{2.10}$$

O MDF descrito em (2.10) é conhecido por up-wind. Uma notação que permite visualizar como ocorre a propagação de informação pelo método na malha é a molécula do método. A molécula do método liga os pontos da malha que são usados em uma iteração com aquele que é estimado nessa iteração. A molécula do esquema up-wind, por exemplo, pode ser observada na figura 7. Para visualizar a propagação de um método basta repetir a molécula em iterações consecutivas, como foi feito na figura 8.

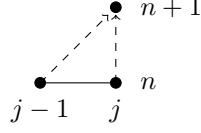


Figura 7: Molécula do esquema up-wind.

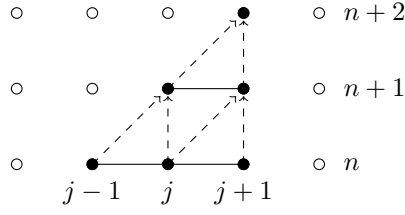


Figura 8: Propagação pelo esquema up-wind.

Aplicaremos o método up-wind com a condição inicial

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 1 \leq x \leq 2, \\ 0 & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (2.11)$$

A implementação é feita na forma matricial, sendo que cada vetor é obtido por $U^{n+1} = AU^n$ onde A é a matriz característica da discretização. Nesse caso,

$$\begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{J-1} \\ u_J \end{bmatrix}^{n+1} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{\Delta t}{\Delta x} & 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Delta t}{\Delta x} & 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} & \frac{\Delta t}{\Delta x} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\Delta t}{\Delta x} & 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{J-1} \\ u_J \end{bmatrix}^n$$

Por se tratar de um problema de advecção de velocidade positiva, a solução é a onda viajando para a direita mantendo a forma original. A figura 9 mostra a aproximação pelo esquema implementado na forma matricial acima, com $\Delta x = \Delta t = 0.1$. Se aplicamos exatamente o mesmo método alterando apenas o espaçamento do eixo x para $\Delta x = 0.2$, fica evidente um fenômeno difusivo que altera a forma da onda, conforme a figura 10. Esse efeito difusivo pode ser amenizado reduzindo os espaçamentos em x e em t , mantendo a razão $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ constante, como no

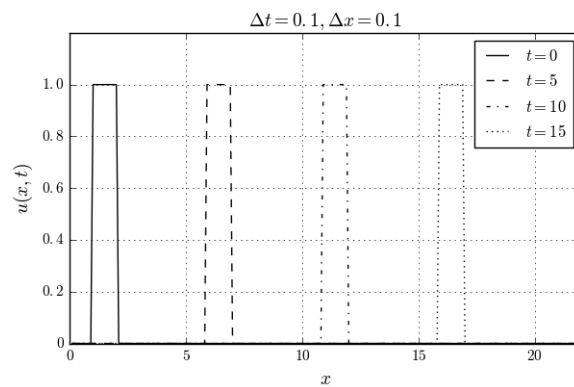


Figura 9: Solução da Equação de Advecção para a quadrada (2.11).

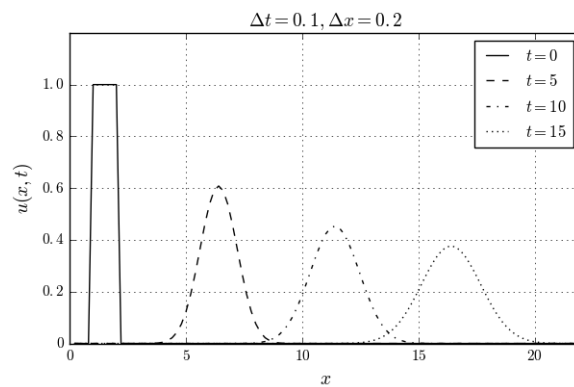


Figura 10: Solução da Equação de Advecção para a quadrada (2.11).

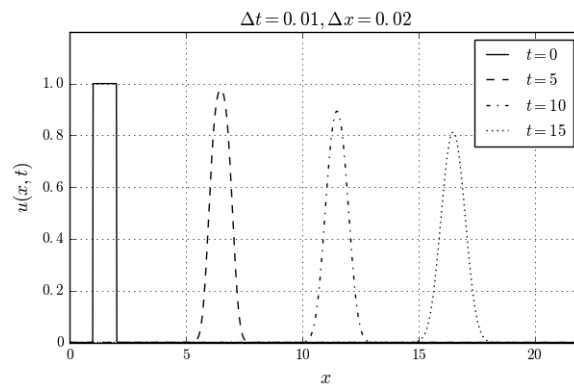


Figura 11: Solução da Equação de Advecção para a quadrada (2.11).

caso da figura 11. Pode-se concluir, portanto, que o próprio método numérico empregado gera um efeito difusivo, que depende dos valores Δx e Δt .

É conveniente chamar a razão $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ de velocidade numérica. No mesmo exemplo, se a velocidade numérica for alterada de forma a ficar menor que a velocidade de propagação da onda, nesse caso $\alpha = 1$, o método passa a fornecer valores absurdamente altos, ou seja, o método passa a ser instável. Isso pode ser verificado fazendo o mesmo exemplo com $\Delta x = 0.1$ e $\Delta t = 0.2$. De fato, a condição $\sigma = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ é necessária para a convergência de qualquer MDF aplicado à Equações Hiperbólicas, conhecida como condição de CFL, como veremos posteriormente.

Agora será aplicada no mesmo exemplo (2.11) a fórmula avançada (2.2) no espaço e no tempo, esquema de expressão (2.12) conhecido como Down-Wind

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(u_{j+1}^n - u_j^n). \quad (2.12)$$

Antes mesmo de implementar esse exemplo, é possível notar que o valor de u_j^{n+1} depende apenas dos valores u_{j+1}^n e u_j^n e, portanto, não é possível que a solução desse método seja uma onda que viaja da esquerda para a direita. Isso fica visível pela molécula desse esquema, conforme a figura 12.

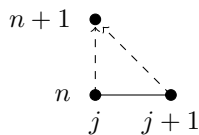


Figura 12: Molécula do esquema down-wind.

Realmente, ao implementar esse método obtemos o gráfico da figura 13 onde verifica-se que a solução cresce de forma ilimitada, ou seja, que o método é instável.

Com essas implementações fica claro que vários fatores influenciam a qualidade da aproximação de um MDF, incluindo a velocidade numérica, os espaçamentos da malha e a fórmula de diferenças finitas usada.

2.3 Difusão e Dispersão Numéricas em MDF's para EDP's Hiperbólicas

Como observado nas figuras 10 e 11, MDF's podem ser responsáveis por significativos efeitos de difusão em um problema hiperbólico, e portanto não difusivo. Pode surgir assim o interesse em chegar à EDP difusiva causadora do fenômeno, a partir do resto de Taylor dos esquemas de diferenças finitas.

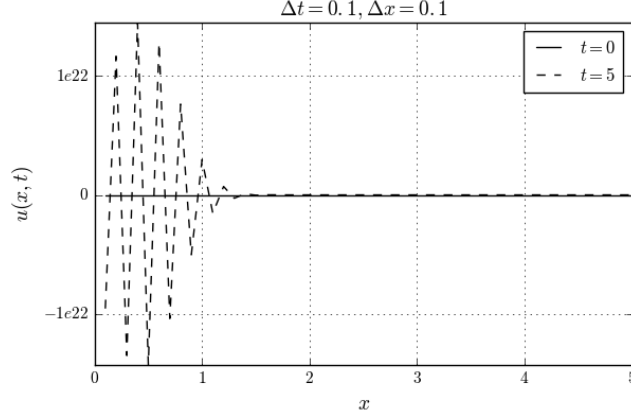


Figura 13: Solução da Equação de Advecção para a quadrada 2.11 usando o método Down-Wind.

Nos exemplos das figuras 10 e 11, onde observamos o fenômeno difusivo, foi usado o MDF resultante dos esquemas de diferenças finitas avançado no tempo e atrasado no espaço. Esses esquemas tem as seguintes expressões, respectivamente

$$\begin{cases} \frac{\partial u_j^n}{\partial t} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \\ \frac{\partial u_j^n}{\partial x} = \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^3). \end{cases}$$

Substituindo na Equação de Advecção,

$$u_t + \alpha u_x = \left[\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} u_{tt} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right] + \alpha \left[\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \right].$$

Mas como

$$\begin{aligned} u_t &= -\alpha u_x \Rightarrow u_{tt} = -\alpha u_{xt} \\ &\Rightarrow u_{tx} = -\alpha u_{xx}, \\ \therefore u_{tt} &= \alpha^2 u_{xx}, \end{aligned}$$

podemos escrever

$$u_t + \alpha u_x = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \alpha^2 u_{xx} + \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \alpha u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta t^2).$$

Por fim, reescrevendo essa expressão, temos à direita da igualdade a EDP modificada, que é uma operação de Advecção-Difusão. Aqui foi definido $\sigma = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = u_t + \alpha u_x - \alpha \frac{\Delta x}{2} (1 - \sigma) u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta t^2)$$

Pode-se definir o operador da EDP modificada como $\tilde{\mathcal{L}}$ de forma que

$$\tilde{\mathcal{L}} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} - \tilde{k} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (2.13)$$

Onde $\tilde{k} = \alpha \frac{\Delta x}{2} (1 - \sigma)$.

Nota-se que caso $\sigma > 1$, então o efeito difusivo gera um crescimento ilimitado na solução numérica. Porém, caso $\sigma = 1$, a difusão numérica é “desligada”. Fazendo $\tilde{\mathcal{L}}u = 0$ temos a equação difusiva numérica na forma geral

$$u_t + \alpha u_x = \tilde{k} u_{xx}.$$

2.4 Método Lax-Friedrichs

Usando a fórmula centrada (2.6) para a posição e a avançada (2.2) para o tempo é obtida a expressão

$$\left[\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} u_{tt} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right] + \alpha \left[\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \right] = 0$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - \alpha^2 \frac{\Delta t}{2} u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^2) = 0. \quad (2.14)$$

Para chegar na fórmula de Lax-Friedrichs é feita a aproximação $u_j^n \approx \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2}$, fornecendo assim

$$\frac{u_j^{n+1}}{\Delta t} - \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2\Delta t} + \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0,$$

e por fim a fórmula explícita é dada por

$$u_j^{n+1} = \frac{u_{j-1}^n + u_{j+1}^n}{2} - \frac{\sigma}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n), \quad (2.15)$$

sendo a molécula desse método representada na figura 14.

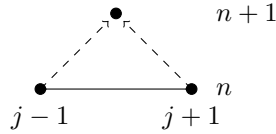


Figura 14: Molécula do esquema Lax-Friedrichs.

Podemos organizar a expressão de Lax-Friedrichs (2.15) na forma

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{2\Delta t} = 0,$$

para isso basta lembrar que supomos $\frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2} - u_j^n = 0$. Reescrevendo o terceiro termo temos

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} = 0.$$

É importante notar que o terceiro termo inclui a expressão da fórmula de diferenças finitas centrada para a derivada de segunda ordem (2.7). Aplicando as respectivas expressões de Taylor

$$u_t + \frac{1}{2}u_{tt}\Delta t - \alpha u_x - \frac{\alpha\Delta x^2}{6}u_{xxx} - \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}u_{xx} - \frac{\Delta x^4}{24\Delta t} + \dots = 0,$$

podemos isolar o operador de difusão numérica de Lax-Friedrichs

$$\begin{aligned} u_t - \alpha u_x &= \frac{u_{xx}}{2} \left(\frac{\Delta x^2}{\Delta t} - \alpha^2 \Delta t \right) + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta t^2), \\ u_t - \alpha u_x &= \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} (1 - \sigma^2) u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta t^2), \\ u_t - \alpha u_x &= \tilde{k} u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta t^2). \end{aligned}$$

É interessante notar que sem a aproximação $u_j^n \approx \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2}$, ou seja, na expressão (2.14) o termo dissipativo é $\tilde{k} = -\alpha^2 \frac{\Delta t}{2}$ e portanto sempre haverá difusão negativa ocasionando em crescimento ilimitado do erro. Já se comparado ao esquema Up-Wind, o expoente quadrado em σ confere vantagem ao esquema Lax-Friedrichs.

2.5 Método Lax-Wendroff

De forma semelhante ao método Lax-Friedrich, as fórmulas avançada (2.2) no tempo e centrada (2.6) no espaço são substituídas na Equação de Advecção (1.1), resultando em (2.14)

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - \alpha^2 \frac{\Delta t}{2} u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^2) = 0.$$

Para derivar o esquema Lax-Wendroff a derivada segunda no espaço é substituída pela fórmula de diferença finita centrada (2.7), fornecendo

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \alpha \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - \alpha^2 \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta t^2) = 0.$$

Organizando essa expressão obtemos a fórmula de Lax-Wendroff

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\sigma}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{\sigma^2}{2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n), \quad (2.16)$$

cujá molécula pode ser vista na figura 15.

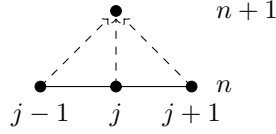


Figura 15: Molécula do esquema Lax-Wendroff.

Um fato notável desse método é a ausência de fator difusivo. O principal fator de erro nesse método é um operador dispersivo, que atribui propriedades ondulatórias na solução que não existiam na condição inicial. A equação de dispersão numérica é

$$u_t + \alpha u_x = \alpha \frac{\Delta x^2}{6} (\sigma^2 - 1) u_{xxx}.$$

2.6 Método Leapfrog de Quarta Ordem no Espaço

Aplicando a fórmula centrada (2.6) no tempo e a de quarta ordem (2.9) no espaço na equação de advecção (1.1) tem-se

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \alpha \frac{2(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)}{3\Delta x} - \alpha \frac{u_{j+2}^n - u_{j-2}^n}{12\Delta x} = 0.$$

Organizando a expressão é gerado um método centrado no tempo, conhecido como Leapfrog, e de quarta ordem no espaço

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{4}{3}\sigma(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{6}\sigma(u_{j+2}^n - u_{j-2}^n). \quad (2.17)$$

Esse esquema não apresenta difusão numérica, conforme os restos da expansão de Taylor em (2.5) e (2.8). Sua molécula, na figura 16, é consideravelmente distinta daquelas dos métodos vistos nas seções anteriores, pois utiliza pontos em dois instantes distintos para fazer a aproximação. Nesse caso é preciso fornecer a condição inicial $u_0(x)$ em dois instantes distintos $t = 0$ e $t = \Delta t$, ou aproximar $u_0(x, \Delta t)$ usando outro esquema de diferença finita.

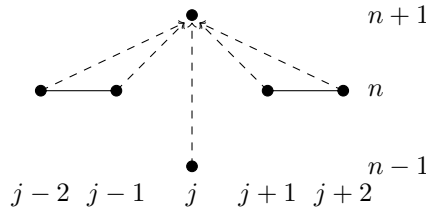


Figura 16: Molécula do esquema descrito por (2.17).

2.7 Exemplos

Analisando a derivação das fórmulas up-wind e Lax-Wendroff, foi possível verificar que o primeiro apresenta difusão numérica e o segundo dispersão numérica. As figuras abaixo permitem observar esses fenômenos em exemplos numéricos. Os exemplos terão como condição inicial a heavyside

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 1 \leq x \leq 2 \\ 0 & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (2.18)$$

ou a gaussiana

$$u_0(x) = \exp(-x^2) \quad (2.19)$$

A difusão é evidenciada na figura 17 pela perda de energia e na figura 19 pela suavização da “quina” não diferenciável. Já a dispersão pode ser observada nas figuras 18 e 20. Fazendo $\sigma = 1$ “desligamos” tanto a difusão quanto a dispersão numéricas, pois os respectivos coeficientes passam a valer zero. Isso é verificado nas figuras 21 e 22.

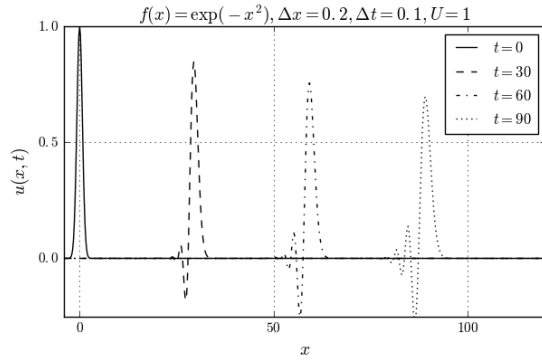
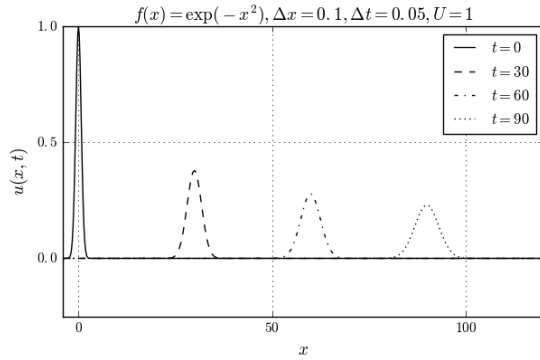


Figura 17: Solução da 2.19 pelo método up-wind. Figura 18: Solução da 2.19 pelo método Lax-Wendroff.

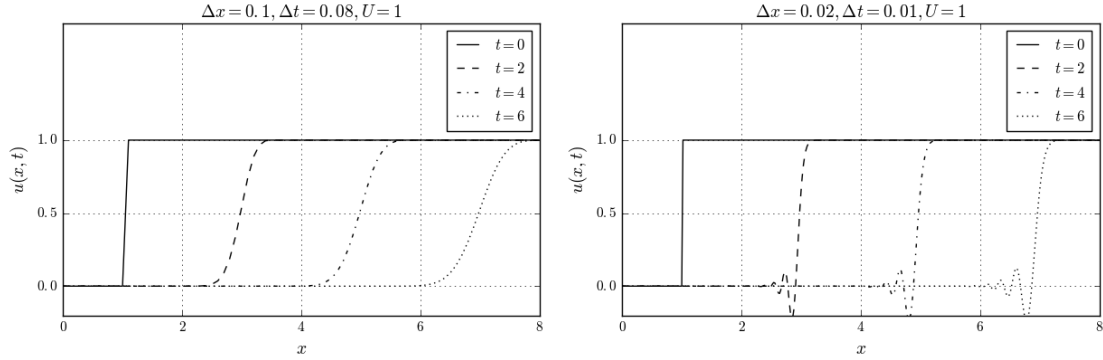


Figura 19: Solução da 2.18 pelo método up-wind. Figura 20: Solução da 2.18 pelo método Lax-Wendroff.

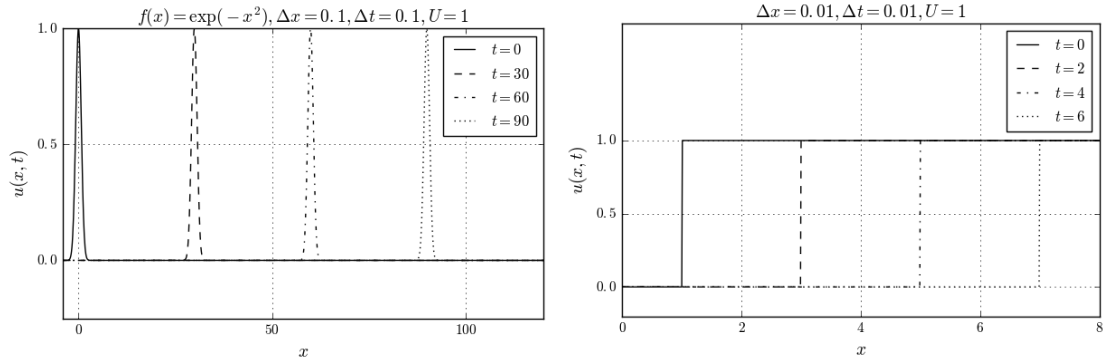


Figura 21: Solução da 2.19 pelo método Lax-Wendroff sem difusão. Figura 22: Solução da 2.18 pelo método Lax-Wendroff sem dispersão.

3 Convergência, Consistência e Estabilidade

Observando os exemplos anteriores de aplicações do MDF para a Equação de Advecção fica claro que nem todo esquema de diferenças finitas é útil. Por isso é importante avaliar a utilidade dos MDF's, o que é uma tarefa mais complicada que a derivação e implementação desses métodos.

3.1 Convergência e Teorema de Equivalência de Lax-Richtmyer

Uma característica fundamental para MDF's é a convergência, ou seja, quando os espaçamentos Δx e Δt tendem a zero a solução numérica deve convergir para a solução exata. A notação usada será u para a solução exata e v para a aproximação, ou seja, $v_j^n \approx u_j^n = u(x_j, t_n)$.

Deve-se ressaltar que para a solução numérica convergir à exata é preciso, antes de qualquer coisa, que a solução exista, seja única e tenha dependência contínua dos dados iniciais. Problemas cuja solução atendem a esses critérios são chamados de bem-postos.

Definição 3.1. *Um MDF é dito convergente se toda aproximação numérica v_j^n tende à $u(j\Delta x, n\Delta t)$ quando Δx e Δt tendem a zero.*

$$\begin{aligned}\Delta x, \Delta t &\rightarrow 0 \\ \Rightarrow v_j^n &\rightarrow u(j\Delta x, n\Delta t)\end{aligned}$$

Essa é uma definição geral e provar a convergência de um esquema de diferenças finitas é uma tarefa complicada. Porém, fica mais fácil com a introdução dos conceitos de consistência e estabilidade devido ao Teorema de Equivalência de Lax-Richtmyer.

Teorema 3.1. *Um MDF para problema bem-posto é convergente se e somente se for consistente e estável.*

Embora a demonstração rigorosa desse teorema seja uma tarefa complicada, uma abordagem intuitiva será feita com a apresentação de consistência e estabilidade nas próximas seções.

3.2 Consistência

Como os MDF's são construídos substituindo derivadas das funções por fórmulas de diferença finita é claro que, para o método ser convergente, as fórmulas de diferença finita devem tender ao valor exato dessas derivadas quando os espaçamentos tenderem a zero. Essa é a ideia do conceito de consistência.

Definição 3.2. *Um esquema de diferenças finitas é dito consistente caso seu esquema $\mathcal{L}_{\Delta x, \Delta t} u$ tenda à respectiva equação diferencial $\mathcal{L}u$ quando Δx e Δt tendem a zero.*

$$\Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \Rightarrow \mathcal{L}_{\Delta x, \Delta t} u - \mathcal{L}u \rightarrow 0$$

Esse conceito é relativamente simples e é válido para todos os esquemas de diferenças finitas, uma vez que o resto das fórmulas de diferenças finitas sempre dependem de Δx ou Δt , conforme se pode verificar em suas deduções a partir da expansão da série de Taylor da função.

3.3 Estabilidade

Uma região de estabilidade é uma área limitada e não nula no primeiro quadrante do \mathbb{R}^2 , composta pelos pontos $(\Delta x, \Delta t)$ para os quais o MDF é estável. Um exemplo comum de região

de estabilidade para MDF's é o conjunto $\{(\Delta x, \Delta t) : 0 < \Delta t \leq c\Delta x \leq C\}$, onde c e C são constantes positivas. Por consequência do Teorema de Equivalência de Lax-Richtmyer, a região de convergência sempre inclui a origem.

Definição 3.3. *Um esquema de diferenças finitas $\mathcal{L}_{\Delta x, \Delta t} v_j^n$ é dito estável em certa região de estabilidade Λ se existir um inteiro M tal que para qualquer valor positivo de tempo T , exista uma constante C_T tal que*

$$\|v^n\|_{\Delta x} \leq C_T^* \sum_{m=0}^M \|v^m\|_{\Delta x},$$

para $0 \leq n\Delta t \leq T$, sendo $(\Delta x, \Delta t) \in \Lambda$.

É possível interpretar de forma simplificada a definição de estabilidade como a imposição de que a norma da solução numérica obtida deve ser limitada por uma constante positiva.

Seja um esquema de diferenças finitas para a equação de advecção, a condição de estabilidade é dada, no geral, por uma desigualdade que relaciona a razão da velocidade α de propagação pela velocidade de propagação numérica $\frac{\Delta x}{\Delta t}$. A condição de Courant-Friedrichs-Lewy, por exemplo, é dada por

$$\left| \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| \leq 1.$$

3.4 Condição de Courant-Friedrichs-Lewy

Teorema 3.2. *Todo esquema de diferenças finitas para a equação de advecção (1.1) que pode ser escrito na forma*

$$v_j^{n+1} = av_{j-1}^n + bv_j^n + cv_{j+1}^n, \quad (3.1)$$

com $\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x}$ constante, a condição de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), necessária para a estabilidade do esquema, é

$$|\alpha\lambda| \leq 1. \quad (3.2)$$

Demonstração. Para demonstrar a condição CFL é interessante notar primeiramente que um esquema de diferenças finitas de forma 3.1 tem v_0^n dependente de v_j^0 apenas para $|j| \leq n$. A figura 23 permite visualizar essa desigualdade.

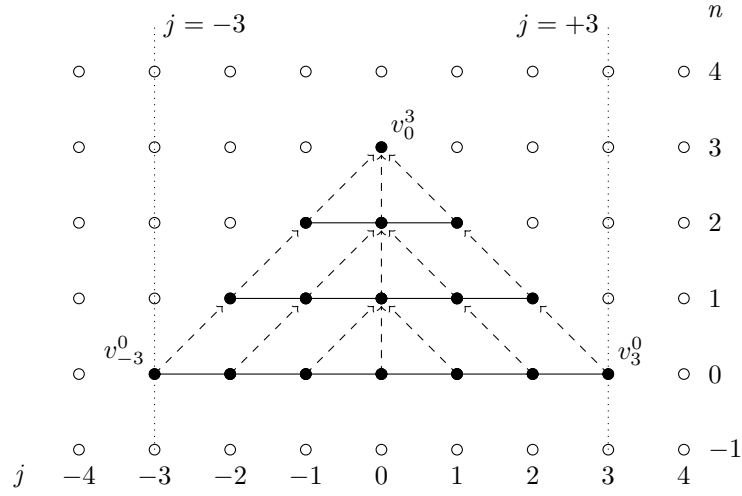


Figura 23: Propagação de um esquema na forma (3.1).

Como $\Delta x = \lambda^{-1} \Delta t$ e $|j| \leq n$, temos $|j| \Delta x \leq \lambda^{-1} n \Delta t$. Mas $|j| \Delta x = |x_j|$ e, já que estamos considerando o ponto $(0, 1)$, onde $n \Delta t = t_n = 1$, conclui-se que $|x_j| \leq \lambda^{-1}$. A figura 24 ilustra de forma geral o que foi discutido até aqui.

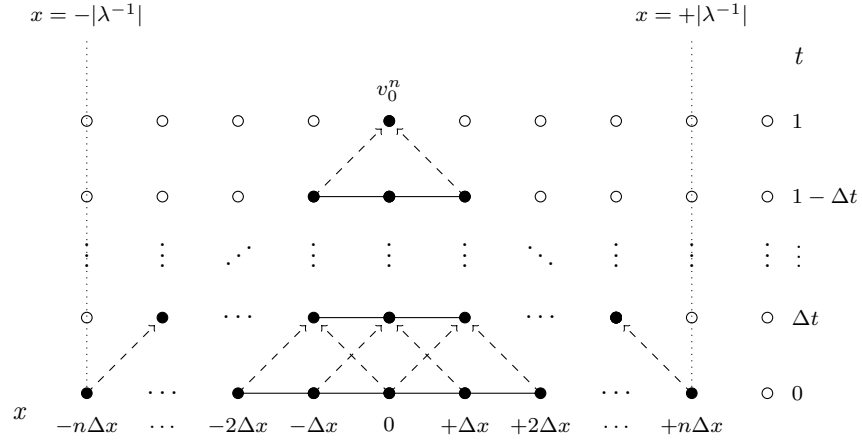


Figura 24: Propagação geral de um esquema na forma (3.1) para o ponto $(0,1)$.

Sabe-se que a solução da equação diferencial (1.2) no ponto $(0, 1)$ depende dos valores de u_j^0

em $x = -\alpha$, já que $\xi = x - \alpha t$. Então, para o ponto $(0, 1)$, o valor de v_0^n só poderá convergir se a região de dependencia numérica conter o valor $x = -\alpha$, ou seja, $|\alpha| \leq |\lambda^{-1}| \Rightarrow |\alpha\lambda| \leq 1$. \square

É importante notar que a condição CFL sozinha não é suficiente para garantir a estabilidade de um esquema. Essa condição é suficiente apenas para provar a instabilidade de um método. Um exemplo disso foi observado com o método Down-Wind, na figura 13, onde o método se mostrou instável mesmo satisfazendo a CFL.

3.5 Análise de Estabilidade de Von-Neumann

Como vimos anteriormente, os principais fatores de erro em MDF's hiperbólicos são a difusão e a dispersão numéricas. Em ambos os casos, podemos escrever o MDF na forma $\mathcal{L}v^n = a(t)v^n$, onde $a(t)$ é uma função de amplificação. De fato, através de análise Fourier se verifica que a solução de problemas hiperbólicos pode ser escrita na forma $v_j^n = g^n e^{i\xi j \Delta x}$, o que indica a existência de um fator de amplificação $g_{\Delta t}(\xi) = \frac{g^{n+1}}{g^n}$ relacionado ao MDF.

É claro que para um MDF ser estável o módulo do fator de amplificação $|g_{\Delta t}(\xi)|$ deve ser menor que 1 quando Δx tende a zero, pois caso contrário a aproximação numérica não seria limitada. Ou seja,

$$|g_{\Delta t}(\xi)| \leq 1 + \mathcal{O}(\Delta t). \quad (3.3)$$

A análise de estabilidade de Von-Neumann consiste em obter o $g_{\Delta t}(\xi)$ do método e verificar a condição necessária para atender esse critério.

Uma maneira prática para aplicar a análise de estabilidade de Von-Neumann é substituindo as respectivas expressões de forma $v_j^n = g^n e^{i\xi j \Delta x}$ na fórmula do MDF e então simplificando o termo $e^{i\xi j \Delta x}$. Essa técnica será aplicada para alguns dos esquemas de diferenças finitas apresentados.

3.5.1 Estabilidade do esquema up-wind

Fazendo a substituição $v_j^n = g^n e^{i\xi j \Delta x}$ na fórmula up-wind (2.10)

$$\mathcal{L}v_j^n = v_j^{n+1} = v_j^n - \sigma(v_j^n - v_{j-1}^n),$$

por exemplo, obtém-se

$$g^{n+1} e^{i\xi j \Delta x} = g^n e^{i\xi j \Delta x} - \sigma(g^n e^{i\xi j \Delta x} - g^n e^{i\xi(j-1)\Delta x}).$$

Simplificando chegamos à expressão

$$\begin{aligned}\frac{g^{n+1}}{g^n} &= g_{\Delta t}(\xi) = 1 - \sigma(1 - e^{-i\xi\Delta x}) \\ g_{\Delta t}(\xi) &= 1 - \sigma + \sigma e^{i\varphi},\end{aligned}$$

onde $\varphi = -\xi\Delta x$.

Aplicando a fórmula de Euler na expressão do fator de amplificação para o up-wind chega-se à expressão

$$\begin{aligned}|g_{\Delta t}(\xi)| &= |1 - \sigma + \sigma e^{i\varphi}| \\ &= |1 - \sigma + \sigma(\cos(\varphi) + i\sin(\varphi))| \\ &= |1 - \sigma + \sigma\cos(\varphi) + i\sigma\sin(\varphi)|,\end{aligned}$$

onde calcularemos o módulo quadrado desse fator

$$\begin{aligned}|g_{\Delta t}(\xi)|^2 &= (1 - \sigma + \sigma\cos(\varphi))^2 + (i\sigma\sin(\varphi))^2 \\ &= 1 - \sigma + \sigma\cos(\varphi) - \sigma + \sigma^2 - \sigma^2\cos(\varphi) + \sigma\cos(\varphi) - \sigma^2\cos(\varphi) + \sigma^2\cos^2(\varphi) + \sigma^2\sin^2(\varphi) \\ &= 1 - 2\sigma + 2\sigma\cos(\varphi) - 2\sigma^2\cos(\varphi) + \sigma^2 + \sigma^2(\cos^2(\varphi) + \sin^2(\varphi)) \\ &= 1 - 2\sigma + 2\sigma\cos(\varphi) - 2\sigma^2\cos(\varphi) + 2\sigma^2 \\ &= 1 + 2\sigma(\cos(\varphi) - 1) + 2\sigma^2(1 - \cos(\varphi)) \\ &= 1 + 2\sigma(1 - \cos(\varphi))(\sigma - 1).\end{aligned}$$

Substituindo a expressão do fator de amplificação na condição de estabilidade de Von-Neumann (3.3) é obtida a condição

$$\begin{aligned}|g_{\Delta t}(\xi)| \leq 1 &\Rightarrow |g_{\Delta t}(\xi)|^2 \leq 1 \\ 1 + 2\sigma(1 - \cos(\varphi))(\sigma - 1) &\leq 1 \\ \therefore 2\sigma(1 - \cos(\varphi))(\sigma - 1) &\leq 0.\end{aligned}$$

Estamos interessados em obter alguma restrição útil a partir dessa desigualdade que sirva como critério de estabilidade para o esquema. Como $\cos(\varphi)$ é limitado em $[-1, 1]$, então pode-se afirmar que $0 \leq (1 - \cos(\varphi))$. Com isso fica claro que para valer essa desigualdade é preciso satisfazer $\sigma(\sigma - 1) \leq 0$. Supondo um valor negativo para σ , ou seja, $\sigma < 0$, é preciso que $(\sigma - 1) \geq 0 \Rightarrow \sigma \geq 1$, resultando em contradição. Resta assim apenas $\sigma \geq 0$, que resulta em $(\sigma - 1) \leq 0 \Rightarrow \sigma \leq 1$. Portanto a condição para estabilidade do método up-wind é $0 \leq \sigma \leq 1$, que satisfaz a condição de CFL (3.2), como já era esperado.

Porém, há uma restrição além da CFL, $\sigma = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x} \geq 0$, indicando que o método up-wind só é estável para problemas de velocidade α positiva. Realmente, observando a molécula do método up-wind (figura 7) é possível notar que esse método não é capaz de propagar uma onda com velocidade negativa.

3.5.2 Estabilidade do Esquema Lax-Wendroff

Aplicando a análise de Von-Neumann para o método Lax-Wendroff (2.16)

$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\sigma}{2}(v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) + \frac{\sigma^2}{2}(v_{j-1}^n - 2v_j^n + v_{j+1}^n),$$

temos

$$g^{n+1} e^{i\xi j \Delta x} = g^n e^{i\xi j \Delta x} - g^n \frac{\sigma}{2}(e^{i\xi(j+1)\Delta x} - e^{i\xi(j-1)\Delta x}) + g^n \frac{\sigma^2}{2}(e^{i\xi(j-1)\Delta x} - 2e^{i\xi j \Delta x} + e^{i\xi(j+1)\Delta x}),$$

$$\therefore g_{\Delta t}(\xi) = 1 - \frac{\sigma}{2}(e^{i\xi \Delta x} - e^{-i\xi \Delta x}) + \frac{\sigma^2}{2}(e^{-i\xi \Delta x} - 2 + e^{i\xi \Delta x}).$$

É possível simplificar essa expressão em

$$g_{\Delta t}(\xi) = 1 + \sigma^2(\cos(\xi \Delta x) - 1) - i\sigma \sin(\xi \Delta x),$$

onde aplicando o módulo quadrado

$$\begin{aligned} |g_{\Delta t}(\xi)|^2 &= [1 + \sigma^2(\cos(-\varphi) - 1)]^2 + (\sigma \sin(-\varphi))^2 \\ &= 1 + 2\sigma^2 \cos(-\varphi) - 2\sigma^2 + \sigma^4(\cos(-\varphi) - 1)^2 + \sigma^2 \sin^2(-\varphi) \\ &= 1 + 2\sigma^2 \cos(-\varphi) - 2\sigma^2 + \sigma^4(\cos(-\varphi) - 1)^2 + \sigma^2 - \sigma^2 \cos^2(-\varphi) \\ &= 1 + \sigma^2[\sigma^2(\cos(-\varphi) - 1)^2 - \sigma^2 \cos^2(-\varphi) + 2\sigma^2 \cos(-\varphi) - \sigma^2] \\ &= 1 + \sigma^2[\sigma^2(\cos(-\varphi) - 1)^2 - (\cos(-\varphi) - 1)^2] \\ &= 1 + \sigma^2(\sigma^2 - 1)(\cos(-\varphi) - 1)^2. \end{aligned}$$

Verificando a condição de estabilidade de Von-Neumann (3.3)

$$\begin{aligned} |g_{\Delta t}(\xi)| \leq 1 &\Rightarrow |g_{\Delta t}(\xi)|^2 \leq 1 \\ 1 + \sigma^2(\sigma^2 - 1)(\cos(-\varphi) - 1)^2 &\leq 1 \\ \therefore \sigma^2(\sigma^2 - 1)(\cos(-\varphi) - 1)^2 &\leq 0, \end{aligned}$$

nota-se que a desigualdade só vale quando $(\sigma^2 - 1) \leq 0 \Rightarrow |\sigma| \leq 1$, novamente de acordo com a CFL. É interessante observar que para o esquema Lax-Wendroff não há restrição quanto ao valor

de σ ser negativo como ocorreu no caso do up-wind. De fato, o esquema Lax-Wendroff é estável para velocidade α negativa, enquanto o up-wind é instável. Não é possível perceber isso apenas com a condição CFL, o que deixa evidente que a análise de Von-Neumann é mais completa.

3.5.3 Estabilidade do Esquema Leapfrog de Quarta Ordem

Um exemplo de esquema cuja condição de estabilidade é mais restrita que a CFL é o método leapfrog de quarta ordem no Espaço (2.17). Reescrevendo o esquema com as respectivas funções de amplitude temos

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^{n-1} - \frac{4}{3}\sigma(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{6}\sigma(u_{j+2}^n - u_{j-2}^n) \\ g^{n+1}e^{i\xi\Delta x j} &= g^{n-1}e^{i\xi\Delta x j} - \frac{4}{3}\sigma g^n(e^{i\xi\Delta x(j+1)} - e^{i\xi\Delta x(j-1)}) + \frac{1}{6}\sigma g^n(e^{i\xi\Delta x(j+2)} - e^{i\xi\Delta x(j-2)}) \\ \therefore \frac{g^{n+1}}{g^{n-1}}e^{-i\varphi j} &= e^{-i\varphi j} - \frac{g^n}{g^{n-1}}\frac{4}{3}\sigma(e^{-i\varphi(j+1)} - e^{-i\varphi(j-1)}) + \frac{g^n}{g^{n-1}}\frac{1}{6}\sigma(e^{-i\varphi(j+2)} - e^{-i\varphi(j-2)}). \end{aligned}$$

Notando que $g_{\Delta t}(\xi) = \frac{g^{n+1}}{g^n} = \frac{g^n}{g^{n-1}} \Rightarrow g_{\Delta t}^2(\xi) = \frac{g^{n+1}}{g^{n-1}}$, e simplificando o fator $e^{-i\varphi j}$ chega-se em

$$\begin{aligned} g_{\Delta t}^2(\xi) &= 1 - g_{\Delta t}(\xi)\sigma \left[\frac{4}{3}(e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) - \frac{1}{6}(e^{-2i\varphi} - e^{2i\varphi}) \right], \\ \therefore g_{\Delta t}^2(\xi) + g_{\Delta t}(\xi)\sigma \left[\frac{4}{3}(e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) - \frac{1}{6}(e^{-2i\varphi} - e^{2i\varphi}) \right] - 1 &= 0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Usando a fórmula de Euler podemos escrever

$$\begin{aligned} e^{-i\varphi} - e^{i\varphi} &= \cos(-\varphi) + i\sin(-\varphi) - \cos(\varphi) - i\sin(\varphi) = -2i\sin(\varphi) \\ e^{-2i\varphi} - e^{2i\varphi} &= \cos(-2\varphi) + i\sin(-2\varphi) - \cos(2\varphi) - i\sin(2\varphi) = -2i\sin(2\varphi), \end{aligned}$$

substituindo em (3.4) obtém-se

$$g_{\Delta t}^2(\xi) + g_{\Delta t}(\xi)\frac{i\sigma}{3}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)] - 1 = 0,$$

cujas raízes são

$$\begin{aligned} g_{\Delta t}(\xi) &= \frac{\left\{ -\frac{i\sigma}{3}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)] \pm \sqrt{\left[\frac{i\sigma}{3}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)]\right]^2 + 4} \right\}}{2} \\ &= -\frac{i\sigma}{6}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)] \pm \sqrt{1 - \left[\frac{\sigma}{6}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)]\right]^2}. \end{aligned}$$

Podemos calcular agora os módulos quadrados dessas raízes

$$|g_{\Delta t}(\xi)|^2 = \left[\frac{\sigma}{6}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)]\right]^2 \pm \left\{ 1 - \left[\frac{\sigma}{6}[\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)]\right]^2 \right\}.$$

Para a raiz

$$|g_{\Delta t}(\xi)|^2 = \left[\frac{\sigma}{6} [\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)] \right]^2 + 1 - \left[\frac{\sigma}{6} [\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)] \right]^2 = 1,$$

sempre vale a condição de Von Neumann, então resta verificar qual é a restrição dada pela raiz

$$\begin{aligned} |g_{\Delta t}(\xi)|^2 &= \left[\frac{\sigma}{6} [\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)] \right]^2 - 1 + \left[\frac{\sigma}{6} [\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)] \right]^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{18} [\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)]^2 - 1. \end{aligned}$$

Substituindo na condição de Von Neumann (3.3), é gerada a desigualdade

$$\begin{aligned} |g_{\Delta t}(\xi)|^2 \leq 1 &\Rightarrow \frac{\sigma^2}{18} [\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)]^2 - 1 \leq 1 \\ \sigma^2 &\leq \frac{36}{[\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)]^2} \\ |\sigma| &\leq \frac{6}{|\sin(2\varphi) - 8 \sin(\varphi)|}. \end{aligned}$$

Essa desigualdade equivale a

$$|\sigma| \leq 0.728745\dots,$$

que é mais restritiva que a condição CFL, reforçando assim o fato da CFL não garantir a estabilidade de um esquema de diferenças finitas para EDP's parabólicas.

É possível notar a importância da análise de estabilidade de um método através de um exemplo. Na figura 25 temos a implementação do método leapfrog de quarta ordem no espaço com $\sigma = 0.71428\dots$, e portanto estável. Já na figura 26 o mesmo método foi empregado para $\sigma = 0.76923\dots$, não obedecendo a região de estabilidade, e de fato se apresenta instável. Fica claro assim que os métodos de diferença finita são muito sensíveis às suas condições de estabilidade.

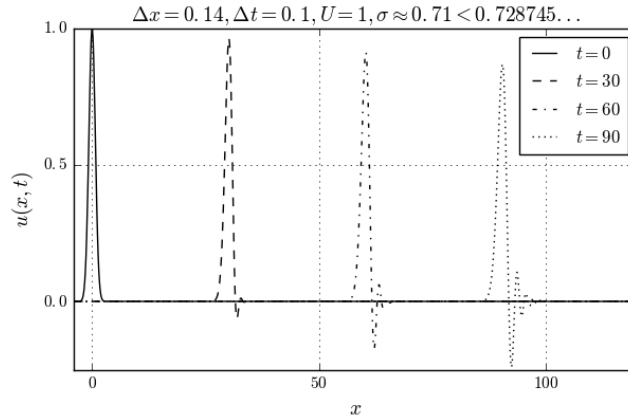


Figura 25: Leapfrog de quarta ordem no espaço estável para (2.19), com $\sigma < 0.728745\dots$

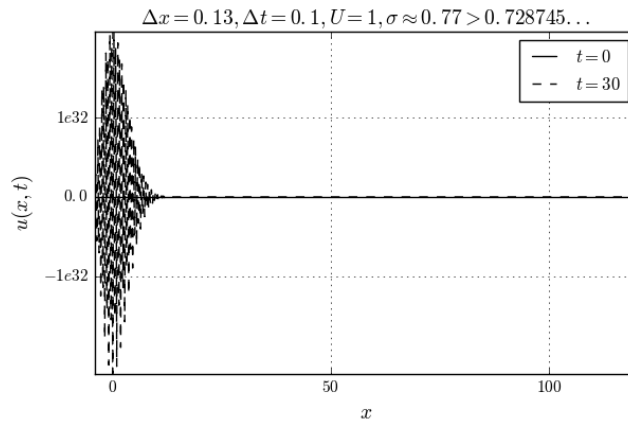


Figura 26: Leapfrog de quarta ordem no espaço instável para (2.19), com $\sigma > 0.728745 \dots$.

Referências:

- [1] André Nachbin e Esteban Tabak. “Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais”. URL: w3.impa.br/~nachbin/AndreNachbin/Courses_files/IMPA_EDPNum.pdf.
- [2] John C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. 2ª ed. SIAM, 2004.
- [3] *The Julia Language*. URL: julialang.org.
- [4] Lloyd N. Trefethen. “Finite Difference and Spectral Methods for Ordinary and Partial Differential Equations”. 1996. URL: people.maths.ox.ac.uk/trefethen/pdetext.html.

A - Códigos

Algorithm 1 Esquema up-wind

```
1: function UP_WIND( $f, \alpha, \Delta x, \Delta t, x0, xf, tf$ )
2:    $\sigma = \alpha * \Delta t / \Delta x$   $\triangleright$  define  $\sigma$ 
3:    $J = \text{ROUND}((xf - x0) / \Delta x) + 1$   $\triangleright$  calcula o tamanho do vetor  $X$ 
4:    $X = \text{Linspace}(x0, xf, J)$   $\triangleright$  cria o vetor  $X$ 
5:    $N = \text{ROUND}(tf / \Delta t) + 1$   $\triangleright$  calcula o número de passos no tempo
6:    $S = \text{ARRAY}(\text{Float64}, J, N)$   $\triangleright$  cria a matriz solução
7:    $S[:, 1] = f(X)$   $\triangleright$  calcula e inclui a condição inicial
8:    $A = \text{EYE}(J, J)$   $\triangleright$  cria a matriz  $A$ 
9:    $A[1, 1] = 1 - \sigma$ 
10:  for  $i$  in  $2 : J$  do  $\triangleright$  preenche a matriz  $A$ 
11:     $A[i, i] = 1 - \sigma$ 
12:     $A[i, i - 1] = \sigma$ 
13:  end for
14:  for  $i$  in  $2 : N$  do  $\triangleright$  preenche a matriz solução
15:     $S[:, i] = A * S[:, i - 1]$ 
16:  end for
17:  return  $S$ 
18: end function
```

Algorithm 2 Esquema Lax-Wendroff

```
1: function LAX_WENDROFF( $f, \alpha, \Delta x, \Delta t, x0, xf, tf$ )
2:    $\sigma = \alpha * \Delta t / \Delta x$   $\triangleright$  define  $\sigma$ 
3:    $J = \text{ROUND}((xf - x0) / \Delta x) + 1$   $\triangleright$  calcula o tamanho do vetor  $X$ 
4:    $X = \text{Linspace}(x0, xf, J)$   $\triangleright$  cria o vetor  $X$ 
5:    $N = \text{ROUND}(tf / \Delta t) + 1$   $\triangleright$  calcula o número de passos no tempo
6:    $S = \text{ARRAY}(\text{Float64}, J, N)$   $\triangleright$  cria a matriz solução
7:    $S[:, 1] = f(X)$   $\triangleright$  calcula e inclui a condição inicial
8:    $A = \text{EYE}(J, J)$   $\triangleright$  cria a matriz  $A$ 
9:    $A[1, 1] = 1 - \sigma^2$ 
10:   $A[1, 2] = (\sigma^2 - \sigma) / 2$ 
11:   $A[J, J] = 1 - \sigma^2$ 
12:   $A[J, J - 1] = (\sigma^2 + \sigma) / 2$ 
13:  for  $i$  in  $2 : J - 1$  do  $\triangleright$  preenche a matriz  $A$ 
14:     $A[i, i] = 1 - \sigma^2$ 
15:     $A[i, i - 1] = (\sigma^2 + \sigma) / 2$ 
16:     $A[i, i + 1] = (\sigma^2 - \sigma) / 2$ 
17:  end for
18:  for  $i$  in  $2 : N$  do  $\triangleright$  preenche a matriz solução
19:     $S[:, i] = A * S[:, i - 1]$ 
20:  end for
21:  return  $S$ 
22: end function
```

Algorithm 3 Esquema leap-frog de quarta ordem no espaço

```
1: function LEAP_FROG4( $f, \alpha, \Delta x, \Delta t, x0, xf, tf$ )
2:    $\sigma = \alpha * \Delta t / \Delta x$  ▷ define  $\sigma$ 
3:    $J = \text{ROUND}((xf - x0) / \Delta x) + 1$  ▷ calcula o tamanho do vetor  $X$ 
4:    $X = \text{Linspace}(x0, xf, J)$  ▷ cria o vetor  $X$ 
5:    $N = \text{ROUND}(tf / \Delta t) + 1$  ▷ calcula o número de passos no tempo
6:    $S = \text{ARRAY}(\text{Float64}, J, N)$  ▷ cria a matriz solução
7:    $S[:, 1] = f(X)$  ▷ calcula e inclui a condição inicial
8:    $S[:, 2] = f(X - \alpha * \Delta t)$  ▷ calcula e inclui o segundo passo no tempo
9:    $A = \text{ZEROS}(J, J)$  ▷ cria a matriz  $A$ 
10:   $A[1, 2] = -4\sigma/3$ 
11:   $A[1, 3] = \sigma/6$ 
12:   $A[2, 1] = 4\sigma/3$ 
13:   $A[2, 3] = -4\sigma/3$ 
14:   $A[2, 4] = \sigma/6$ 
15:   $A[J, J - 1] = 4\sigma/3$ 
16:   $A[J, J - 2] = -\sigma/6$ 
17:   $A[J - 1, J] = -4\sigma/3$ 
18:   $A[J - 1, J - 2] = 4\sigma/3$ 
19:   $A[J - 1, J - 3] = -\sigma/6$ 
20:  for  $i$  in  $3 : J - 2$  do ▷ preenche a matriz  $A$ 
21:     $A[i, i - 1] = 4\sigma/3$ 
22:     $A[i, i + 1] = -4\sigma/3$ 
23:     $A[i, i - 2] = -\sigma/6$ 
24:     $A[i, i + 2] = \sigma/6$ 
25:  end for
26:  for  $i$  in  $3 : N$  do ▷ preenche a matriz solução
27:     $S[:, i] = A * S[:, i - 1]$ 
28:     $S[:, i] += \text{EYE}(J, J) * S[:, i - 2]$ 
29:  end for
30:  return  $S$ 
31: end function
```
