

1. Seja o problema transiente-difusivo-reactivo não linear:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{8}{\delta^2} u^2(1 - u) = 0, \quad (x, t) \in [a, b] \times [0, T] \quad (1)$$

$$u(a, t) = 1 \quad \text{e} \quad u(b, t) = 0. \quad (2)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x). \quad (3)$$

A solução exata para este problema é dada por:

$$u(x, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{x - 2t/\delta}{\delta} \right) \right]. \quad (4)$$

Supondo o domínio $x \in [-10, 90]$, o tempo final $T = 4$ e velocidade da frente de onda $\delta = 2$, a condição inicial (3) é dada por:

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{x}{2} \right) \right]. \quad (5)$$

- a) Uma discretização implícita de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço $\mathcal{O}(\Delta t, h^2)$ proposta para o problema acima é:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} = \frac{8}{\delta^2} u^2(1 - u) \quad (6)$$

- b) Uma possível discretização de segunda ordem no tempo e no espaço $\mathcal{O}(\Delta t^2, h^2)$ para o problema acima é:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} = \frac{8}{\delta^2} (u_j^n)^2(1 - u_j^n) \quad (7)$$

Porém, para obter segunda ordem no tempo, precisamos, antes de aplicar o método (7), aproximar o primeiro passo de tempo u^1 a partir da condição inicial $\phi(x)$. Essa aproximação para o primeiro passo de tempo, para manter a taxa de convergência de segunda ordem, é feita com $\Delta t = h^2$.

Optou-se para a aproximação do primeiro passo da solução, utilizar o método implícito descrito em (6) para que não haja restrição ao tamanho de Δt , por ser um método implícito.

- c) Ao apresentar gráficos comparando a solução exata com a aproximada, utilizando os métodos desenvolvidos nos itens (a) e (b), para diferentes valores de h no tempo final $T = 4$, observa-se que a utilização da diferença central para aproximação da derivada no tempo $\frac{\partial u}{\partial t}$, apesar de entregar uma segunda ordem na taxa de convergência, apresenta um erro bem mais elevado no início da solução.

A diferença central, quando utilizada de maneira implícita, é incondicionalmente estável segundo Von Neumann, por isso, não são observadas oscilações ao aplicar esse método. Porém, percebe-se que quando o número de partições do intervalo de tempo é pequeno, a aproximação não converge à solução.

Os gráficos apresentados abaixo possuem, respectivamente $h = 100, h = 400, h = 1000, h = 2000$ partições no espaço, e discretização no tempo $\Delta t = \Delta x$ para ambos os métodos.

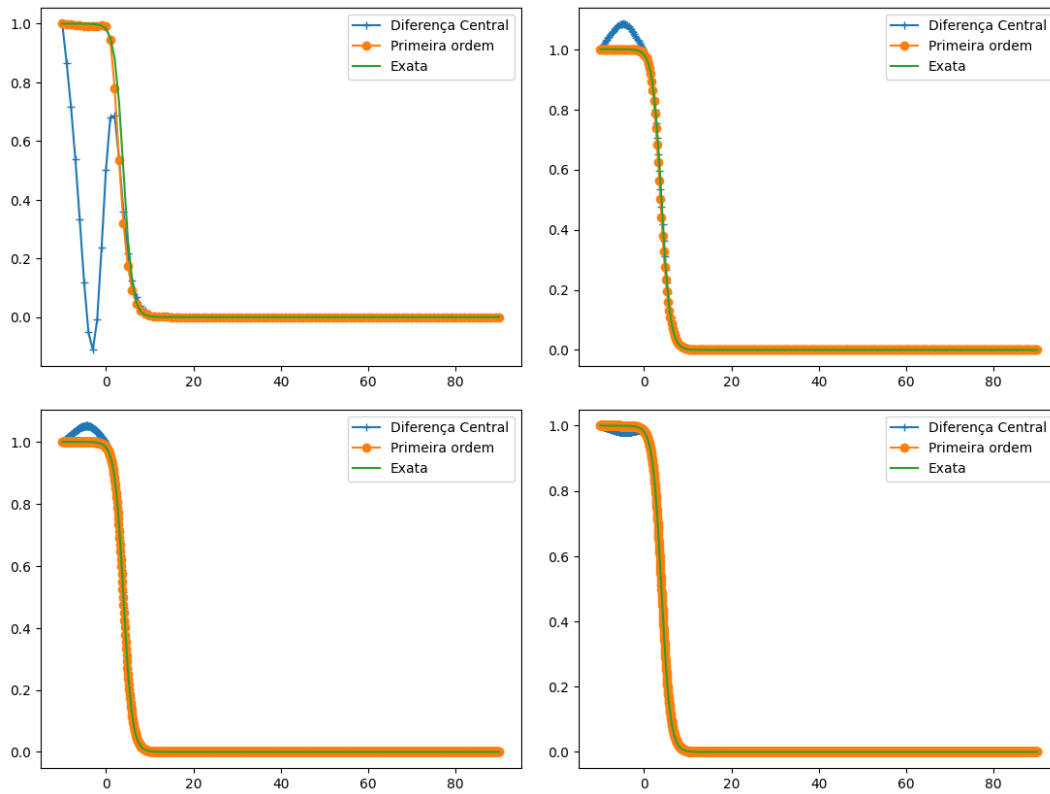


Figura 1: Gráficos com comparação entre a solução exata (em verde) e aproximações com método de diferença central para o tempo (em azul) e um método implícito de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço(em laranja) com discretização do tempo em ambos $\Delta t = \Delta x$

- d) Dado o gráfico indicando as taxas de convergências dos métodos apresentados nos itens (a) e (b), é possível observar que tanto utilizando o método de Euler Implícito quanto o método da diferença central para a aproximação da derivada no tempo entregam taxas de convergência semelhantes.

Como o termo difusivo é aproximado da mesma maneira nos dois métodos, pode-se concluir que ambos apresentam a mesma taxa de erro para o termo difusivo, e o que causa a divergência entre os métodos é a aproximação do tempo.

É possível observar que ao discretizar o tempo com $\Delta t = \Delta x$, ambos os métodos apresentam uma solução muito melhor.

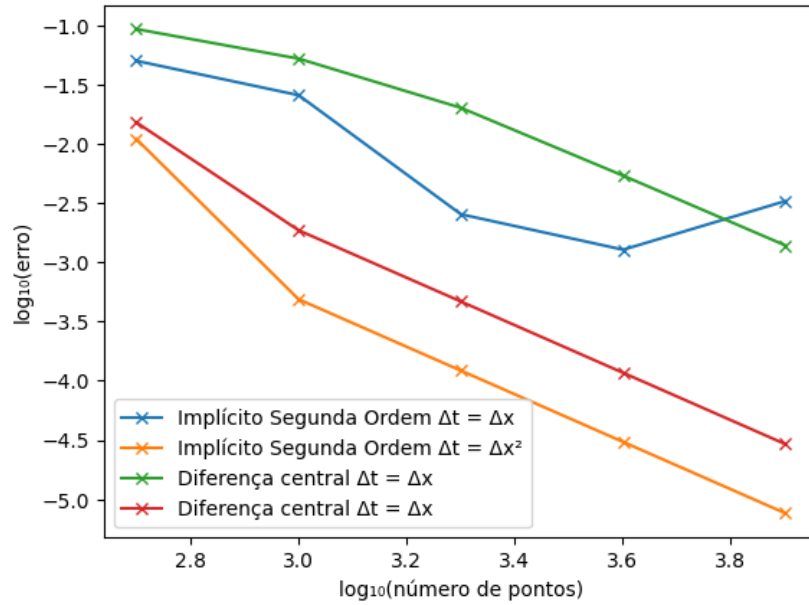


Figura 2: Gráfico relacionando o erro com o número de pontos para a discretização do espaço para as aproximações, utilizando diferentes discretizações para o tempo

Euler implícito $\Delta t = \Delta x$			
Passos no tempo	Discretização no espaço	Erro (norma do máximo)	Taxa convergência
20	500	0.05005529187365021	-
40	1000	0.025693222363317336	0.96
81	2000	0.002541265026840933	3.33
161	4000	0.0012766587856370415	0.99
320	8000	0.0032864123924194466	-1.36

Tabela 1: Tabela com erros, passos de tempo e discretização do espaço do ensaio com o método Euler implícito e $\Delta t = \Delta x$ com taxa de convergência média no tempo 1.6

Diferença central $\Delta t = \Delta x^2$			
Passos no tempo	Discretização no espaço	Erro (norma do máximo)	Taxa de convergência
100	500	0.015142416575295914	-
401	1000	0.0018602228595155923	3.02
1601	2000	0.00046656726663596437	1.99
6401	4000	0.00011673687326438364	1.99
25601	8000	2.9190168260584404e-05	1.99

Tabela 4: Tabela com erros, passos de tempo e discretização do espaço do ensaio com o método Euler implícito e $\Delta t = \Delta x^2$ com taxa de convergência média no tempo 1.2

Euler implícito $\Delta t = \Delta x^2$			
Passos no tempo	Discretização no espaço	Erro (norma do máximo)	Taxa de convergência
100	500	0.010958451253887225	-
401	1000	0.00048685775088938565	4.49
1601	2000	0.0001218645764429066	1.99
6401	4000	3.048090437027251e-05	1.99
25601	8000	7.620794222423788e-06	1.99

Tabela 2: Tabela com erros, passos de tempo e discretização do espaço do ensaio com o método Euler implícito e $\Delta t = \Delta x^2$ com taxa de convergência média no tempo 1.3

Diferença Central $\Delta t = \Delta x$			
Passos no tempo	Discretização no espaço	Erro (norma do máximo)	Taxa de convergência
24	500	0.09281973770692353	
49	1000	0.052252320969769284	0.82
100	2000	0.02010367938953661	1.37
200	4000	0.005379675576594356	1.90
399	8000	0.0013874697187816754	1.95

Tabela 3: Tabela com erros, passos de tempo e discretização do espaço do ensaio com o método Diferença Central e $\Delta t = \Delta x$ com taxa de convergência média no tempo 1.5

Apesar da aproximação de segunda ordem para a derivada no tempo, o método da Diferença Central não apresenta uma solução melhor que a aproximação utilizando Euler Implícito, tendo ambas a mesma taxa de convergência nos ensaios feitos.

Tendo isso em vista, observa-se que houve a falha na criação de um método de segunda ordem para aproximação da derivada no tempo ao utilizada a diferença central para esse fim.

2. Seja a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \kappa \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (x, t) \in \Omega \times [0, T], \quad (8)$$

com $\kappa > 0$ suplementada por condições inicial e de contorno. Considere a seguinte discretização para este problema

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \kappa \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} = 0, \quad \text{FTCS Implícito} \quad (9)$$

- a) Para analisar a estabilidade da metodologia (9) utilizando o critério de Von Neumann, precisamos fazer as seguintes substituições $u_j^n = \lambda^n e^{ijwh}$ e $\rho = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x}$

$$\lambda^{n+1} e^{ijwh} + \frac{\rho}{2} (\lambda^{n+1} e^{i(j+1)wh} - \lambda^{n+1} e^{i(j-1)wh}) = \lambda^n e^{ijwh} \quad (10)$$

Dividindo toda a equação por $\lambda^n e^{ijwh}$ temos:

$$\lambda + \frac{\lambda \rho}{2} (e^{iwh} - e^{-iwh}) = 1 \quad (11)$$

Aplicando a identidade trigonométrica $e^{ijw} - e^{-ijw} = 2i\text{sen}(wh)$ temos:

$$\lambda + \lambda\rho(i\text{sen}(wh)) = 1 \quad (12)$$

Elevando tudo ao quadrado:

$$\lambda^2 - \lambda^2\rho^2\text{sen}(wh) = 1 \quad (13)$$

$$\lambda^2(1 - \rho^2\text{sen}^2(wh)) = 1 \quad (14)$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{1}{1 - \rho^2\text{sen}^2(wh)}} \quad (15)$$

Como $|\lambda| < 1$, o método é **incondicionalmente estável**.

- b) O problema escolhido para apresentação dos resultados foi $\Phi = 1$ se $x \in [0.1, 0.4]$ e 0 caso contrário. Não foi possível aplicar o método FTCS Implícito.
- c) inclua na comparação do item (b) os métodos upwind explícito e Lax Friedrichs adotando 400 elementos e $\Delta t = 1.1h$ e $\Delta t = h/2$. Comente os resultados.

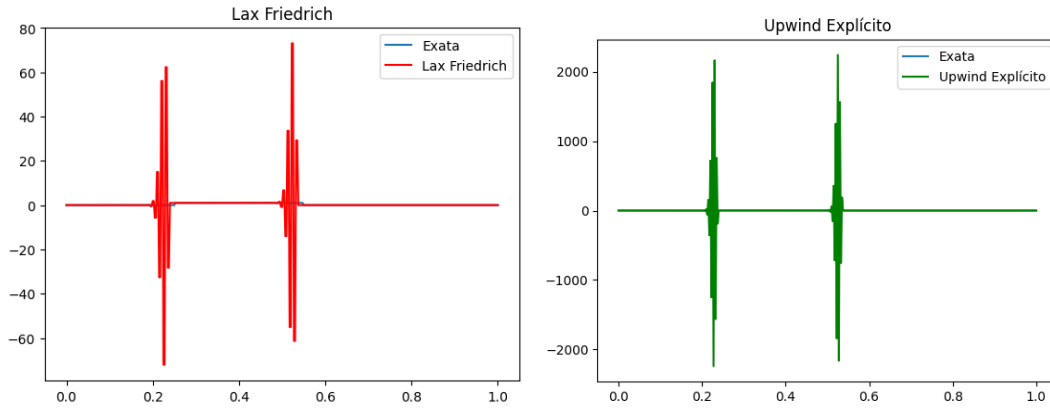


Figura 3: Gráficos comparando a solução para o problema descrito em (b) com o método do Upwind Explícito e o Lax Friedrich ambos com $\Delta t = 1.1\Delta x$ e 400 elementos

Observe que em ambos os métodos, o tamanho do passo de tempo não satisfaz as condições de estabilidade do método, por isso, a aproximação apresenta fortes oscilações próximas as descontinuidades da solução exata.

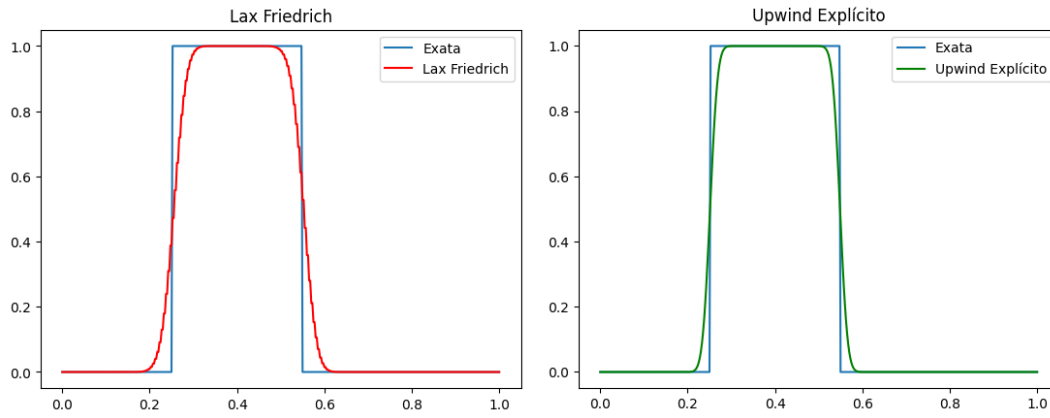


Figura 4: Gráficos comparando a solução para o problema descrito em (b) com o método do Upwind Explícito e o Lax Friedrich ambos com $\Delta t = \frac{\Delta x}{2}$ e 400 elementos

Para a discretização do passo de tempo como $\Delta t = \frac{\Delta x}{2}$, observa-se que a condição de estabilidade é satisfeita para ambos os métodos. Além disso, ambos os métodos apresentam uma difusão artificial relacionada ao erro da aproximação, isso faz com que as discontinuidades da solução exata sejam suavizadas na aproximação.

No gráfico abaixo, é possível concluir que o método de Lax Friedrich possui mais difusão artificial do que o Upwind Explícito:

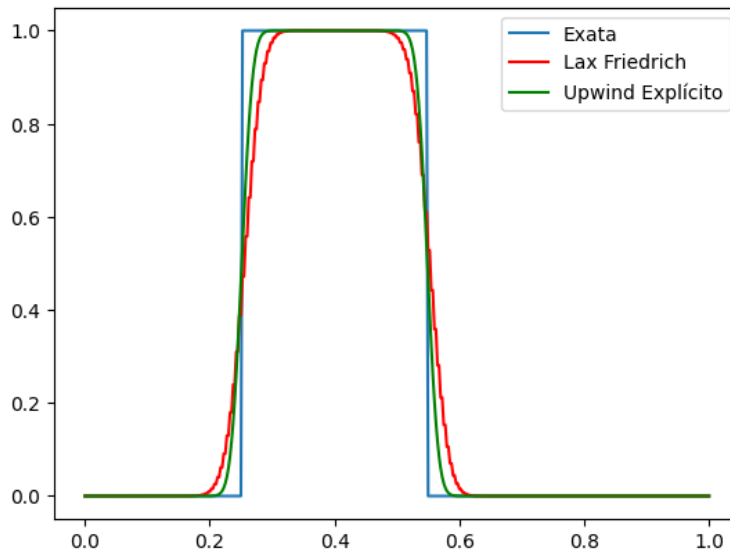


Figura 5: Comparação entre os métodos Lax Friedrich e o Upwind Explícito mostrando a diferença das difusões artificiais causadas pelo erro das aproximações dos métodos

3. Seja o problema:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \kappa \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (x, t) \in \Omega \times [0, T], \quad (16)$$

cujas solução exata é dada por:

$$u(x, t) = \exp(-\varepsilon t) \sin(x - \kappa t)$$

- a) Um método upwind implícito para aproximar o problema (16) será proposto abaixo, e serão comparadas graficamente a solução exata com a aproximada para $\Delta t = h$ e $\Delta t = h^2$, a partir de escolher diferentes para h .

$$0 = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \varepsilon \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \begin{cases} \frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^n}{h}, & \text{se } \kappa > 0 \\ \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^n}{h}, & \text{se } \kappa < 0 \end{cases} \quad (17)$$

Inicialmente, vamos testar a aproximação para o problema predominantemente convectivo com $\varepsilon = 1$ e $\kappa = 10$ avaliado no tempo final $T = 2$:

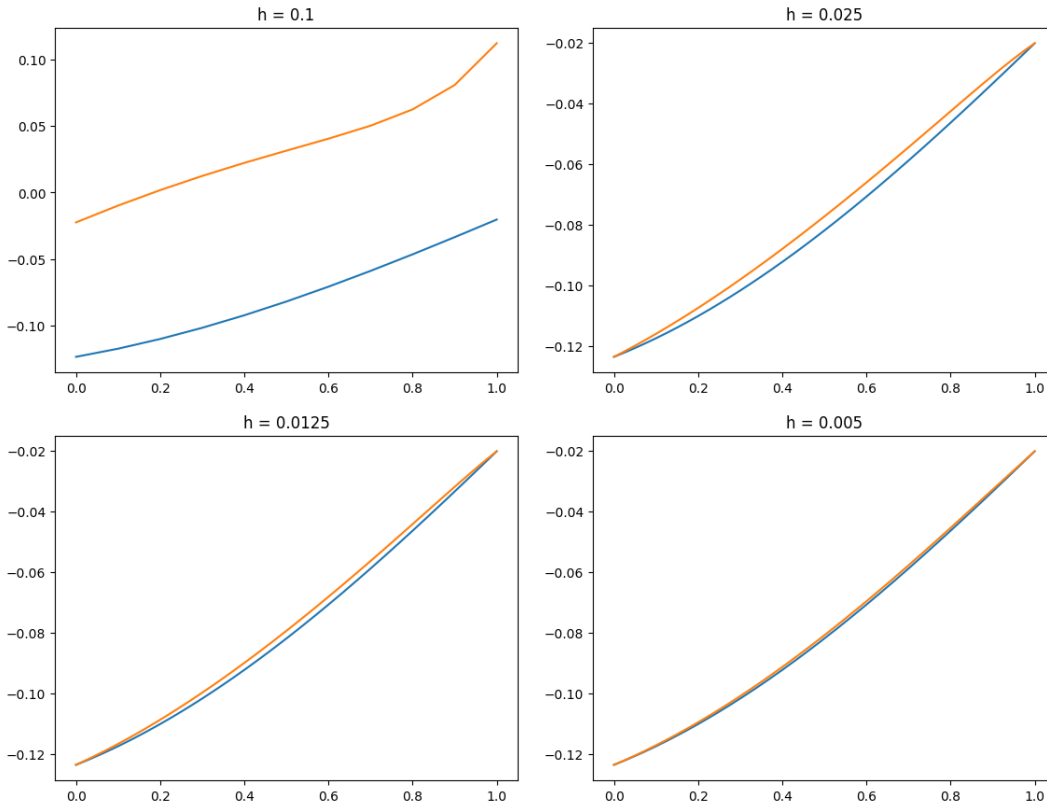


Figura 6: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 1$ e $\kappa = 10$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h$

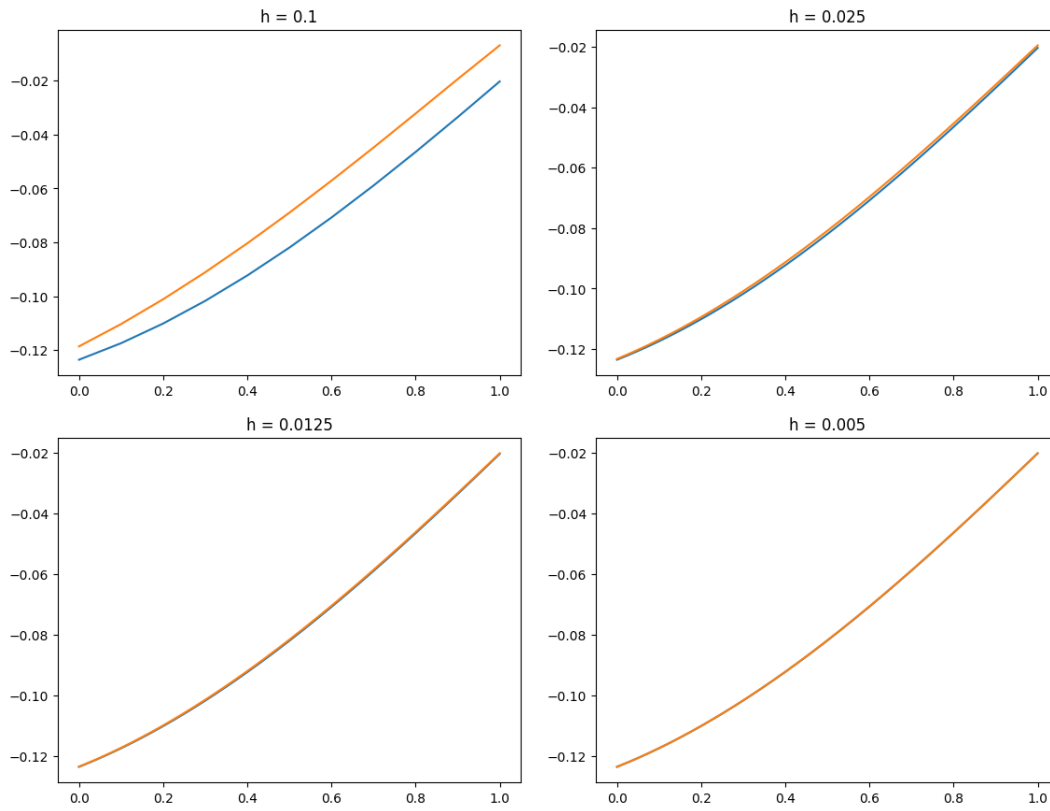


Figura 7: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 1$ e $\kappa = 10$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h^2$

Visualmente, a aproximação com o passo de tempo $\Delta t = h^2$ se aproxima da solução exata com uma taxa de convergência maior. Esse estudo será feito no último item da lista.

Para um problema predominantemente difusivo, com $\varepsilon = 10$ e $\kappa = -1$ avaliado no tempo final $T = 2$:

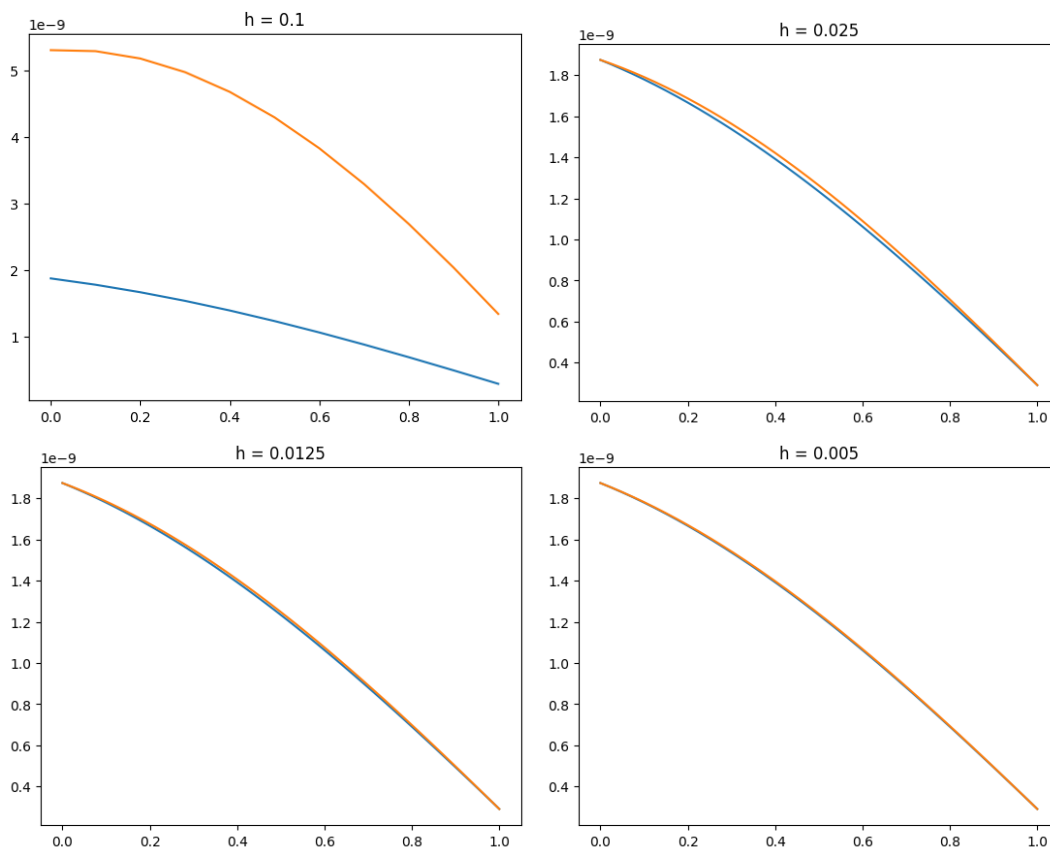


Figura 8: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 10$ e $\kappa = -1$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h$

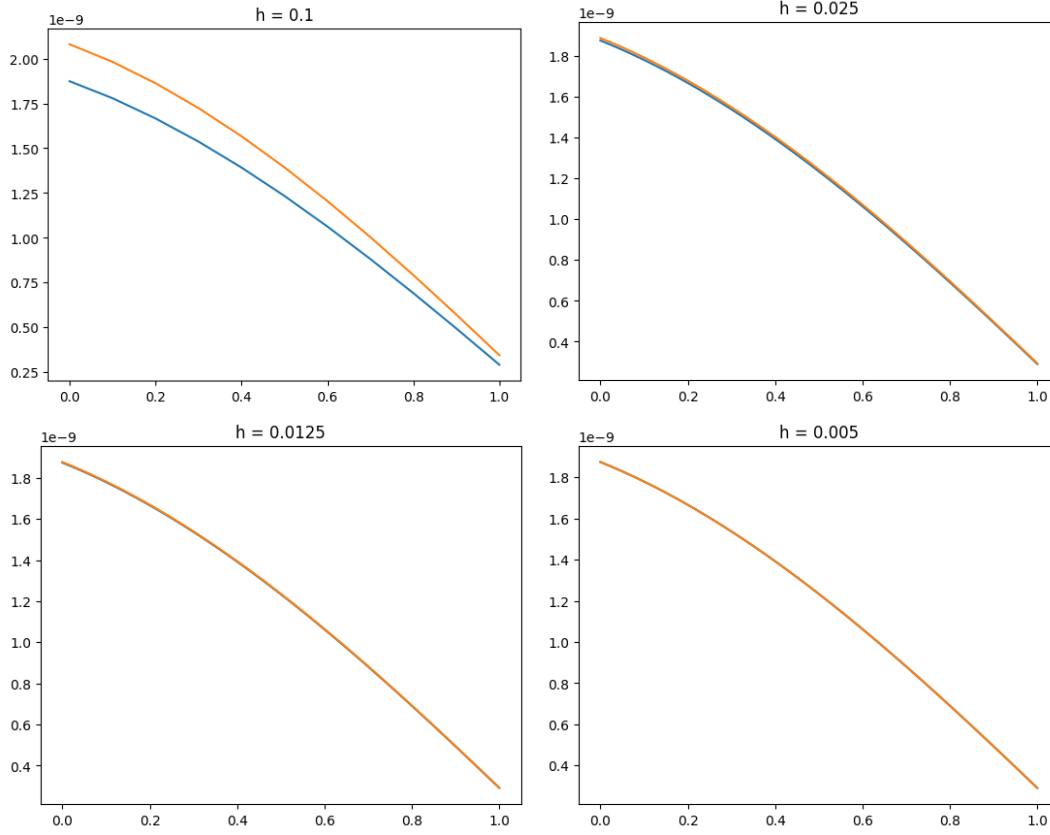


Figura 9: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 10$ e $\kappa = -1$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h^2$

Novamente, a aproximação feita por upwind implícito parece convergir mais rapidamente quando utilizamos um passo de tempo $\Delta t = h^2$.

- b) Proponha um método implícito de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço para o problema (16) e compare graficamente a solução exata com a aproximada para $\Delta t = h$ e $\Delta t = h^2$, escolhendo diferentes valores de h .

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \varepsilon \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \kappa \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} = 0 \quad (18)$$

Vamos utilizar os mesmos problemas estudados no item anterior para que seja possível fazer uma comparação entre as aproximações do termo convectivo com upwind implícito e com diferença central. Sendo assim, iremos inicialmente resolver o problema com $\varepsilon = 1$ e $\kappa = 10$ avaliado no tempo $T = 2$

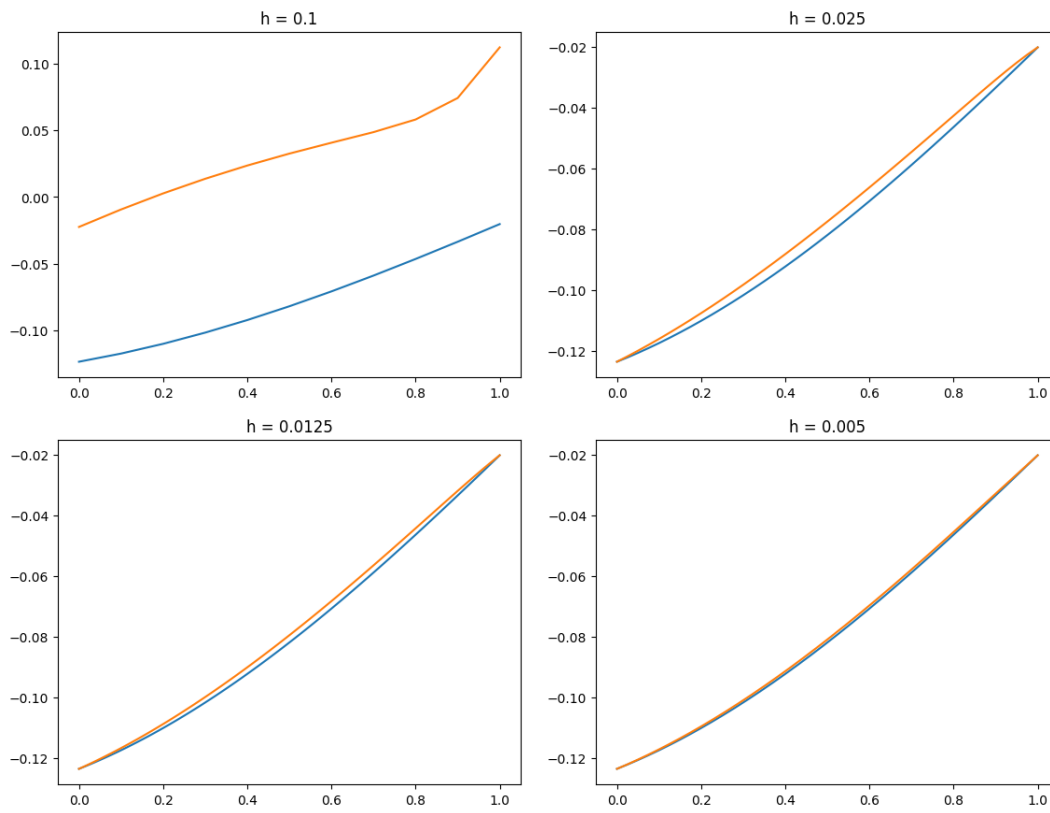


Figura 10: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 1$ e $\kappa = 10$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h$

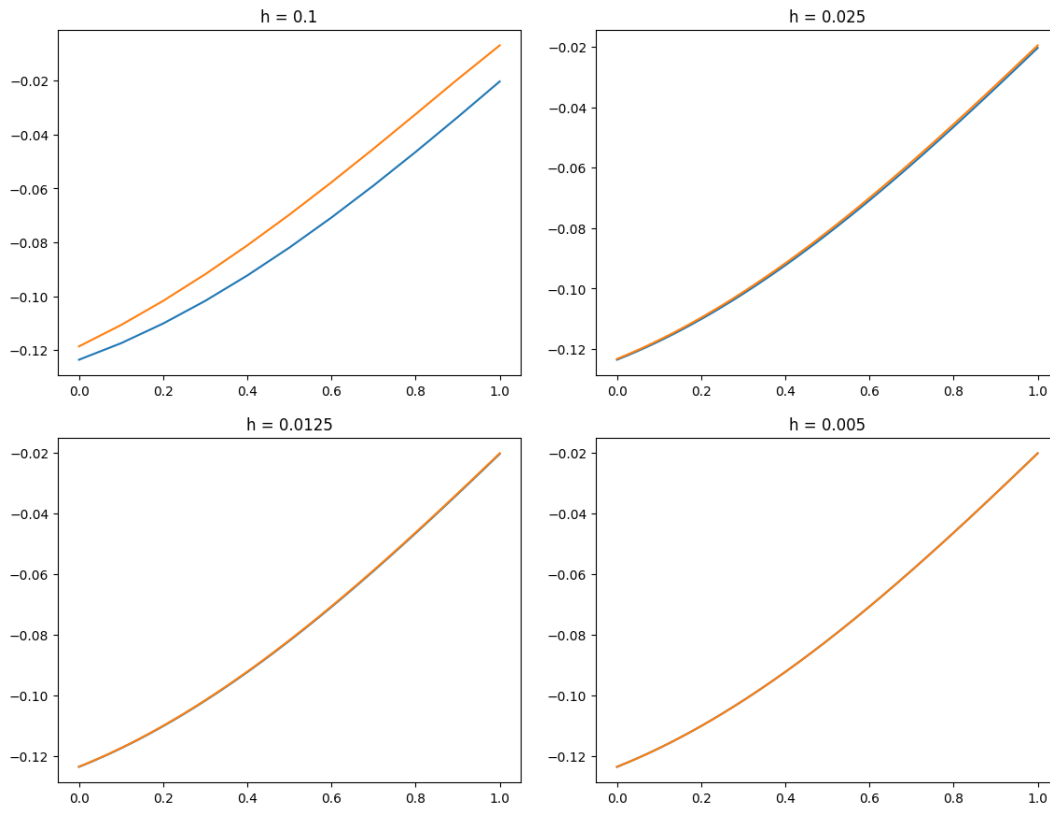


Figura 11: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 1$ e $\kappa = 10$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h^2$

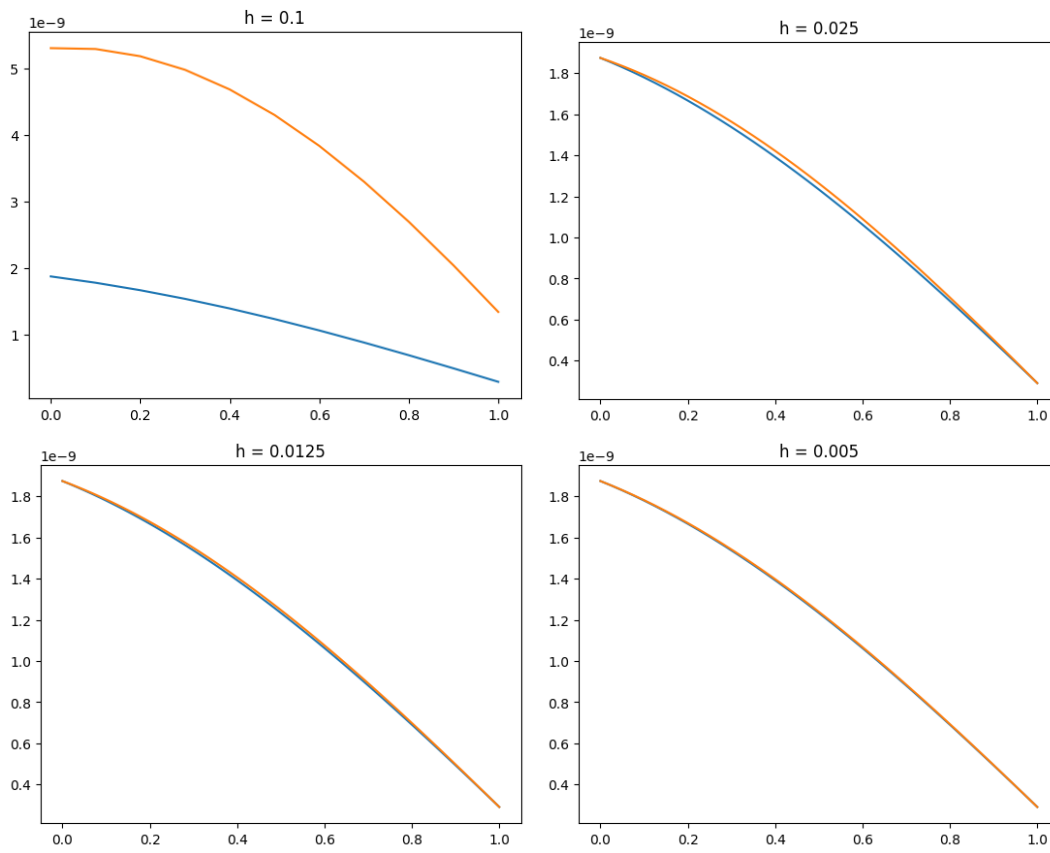


Figura 12: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 10$ e $\kappa = -1$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h$

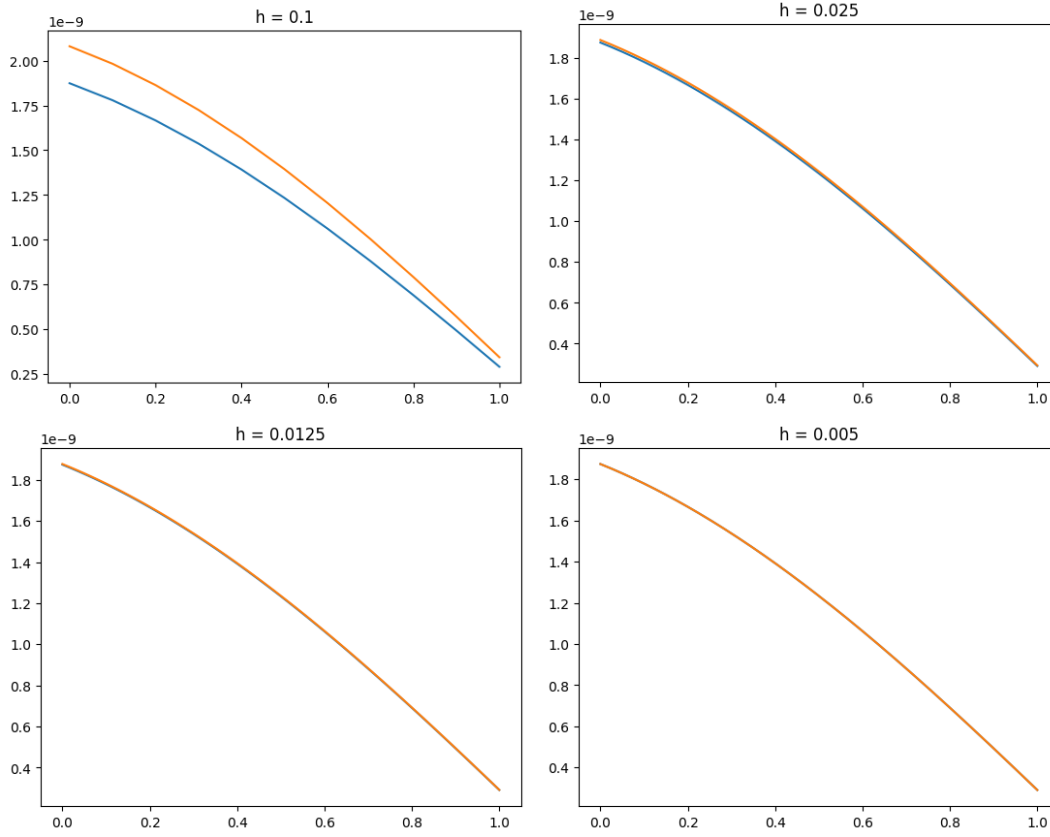


Figura 13: Comparação entre solução exata (em azul) e aproximação (em laranja) do problema com $\varepsilon = 10$ e $\kappa = -1$ para diferentes valores de h com o passo de tempo $\Delta t = h^2$

- c) mostre graficamente que a ordem de convergência do método proposto está de acordo com o esperado $O(\Delta t, h^2, h)$ para o item (a) e $O(\Delta t, h^2, h^2)$ para o item (b). Faça esse estudo para $\Delta t = h$ e $\Delta t = h^2$.

Para verificar a taxa de convergência do termo difusivo, fixou-se o passo de tempo $\Delta t = \Delta x$, definiu-se $\kappa = 0$ e $\varepsilon = 1$

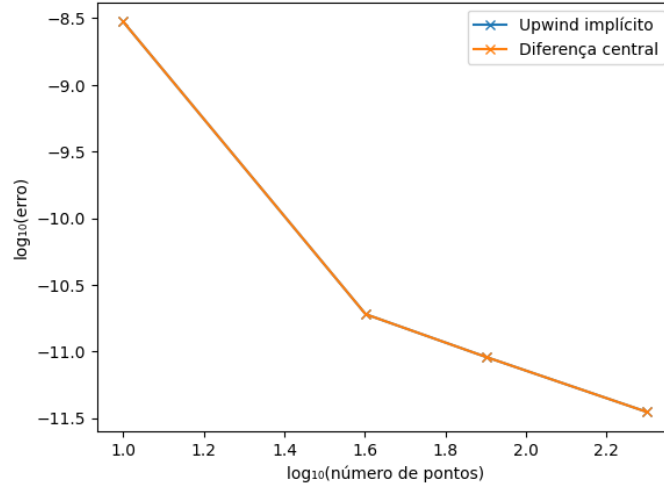


Figura 14: Gráfico de decaimento de erro na aproximação do termo difusivo com o passo de tempo $\Delta t = \Delta x$

Observa-se que o erro de ambas as implementações são idênticos e decaem com taxa de convergência 1.91. O erro das duas aproximações é idêntico, porque ambas as implementações apresentam a mesma aproximação para o termo convectivo:

$$\frac{\delta^2 u}{\delta x^2} = \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} \quad (19)$$

Para verificar a taxa de convergência do termo difusivo, fixou-se o passo de tempo $\Delta t = \Delta x$ e definiu-se $\varepsilon = 0$.

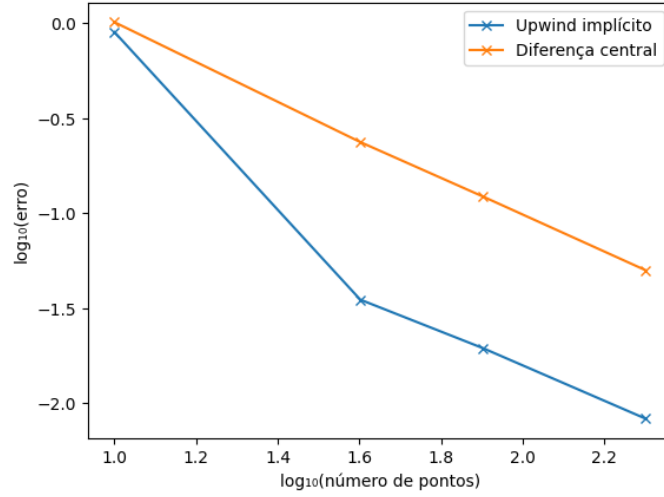


Figura 15: Gráfico de decaimento de erro na aproximação do termo convectivo com o passo de tempo $\Delta t = \Delta x$

Observa-se que o método de diferença central apresentou taxa de convergência 1.00 mesmo sendo um método de segunda ordem. O método do upwind implícito decai em taxa semelhante (1.37).

Experimenta-se fixar o passo de tempo $\Delta t = h^2$ para estudar o mesmo caso descrito acima:

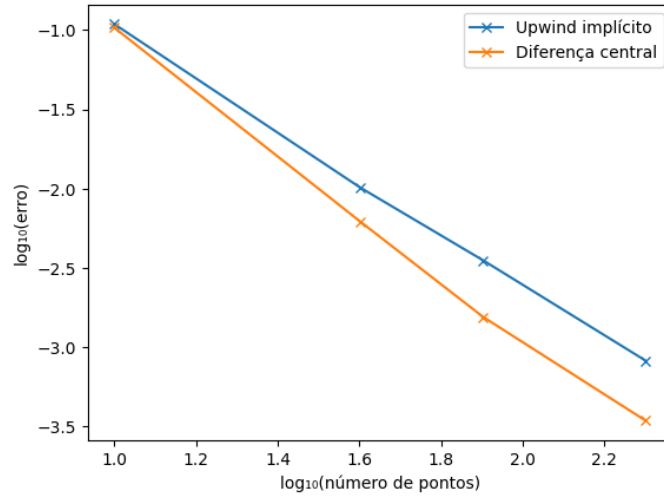


Figura 16: Gráfico de decaimento de erro na aproximação do termo convectivo com o passo de tempo $\Delta t = \Delta x^2$

Com uma maior discretização do tempo para ambos os métodos, a diferença central apresenta

maior taxa de convergência (1.90) enquanto a upwind implícito apresenta (1.61). Apesar do método de upwind ser de primeira ordem, aparentemente nessa solução ele apresenta uma taxa maior que a esperada.

Para o termo da derivada no tempo $\frac{\delta u}{\delta x}$, fixou-se $\varepsilon = 10$ e $\kappa = 0$. A escolha de zerar o termo convectivo se deve ao interesse de verificar a taxa de convergência do apenas do termo da derivada no tempo, e como o termo convectivo é aproximado por métodos diferentes, ele iria produzir diferentes taxas de convergência. Além disso, fixou-se a discretização no tempo com $h = 0.005$ e variou-se o passo do tempo entre $\Delta t = h$ e $\Delta t = h^2$.

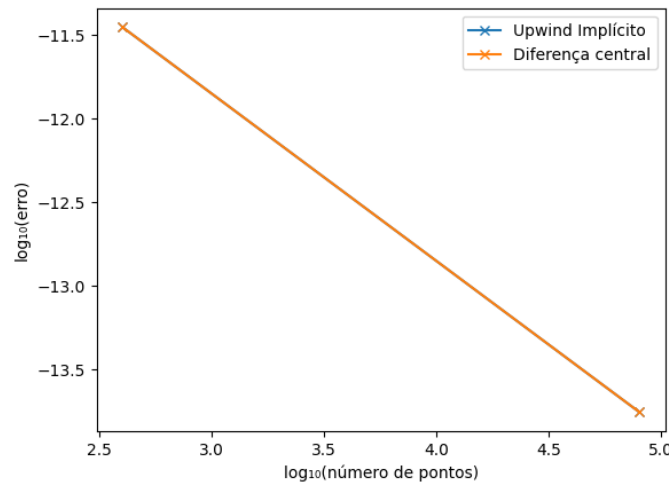


Figura 17: Gráfico de decaimento de erro relacionado ao termo de derivada no tempo

Novamente ambas as implementações apresentam taxa de convergência idênticas (1.00) devido ao fato de utilizarem a mesma aproximação para o termo da derivada no tempo

$$\frac{\delta u}{\delta t} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \quad (20)$$