

# MAP5724 - Exercício-Programa 2

Octavio Augusto Potalej - NUSP 12558676

## Atividade 1 - Métodos explícitos

**Questão (1.1).** Utilizando a análise de estabilidade de von Neumann, determine a condição sobre  $\Delta t$ ,  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $b_1$  e  $b_2$  que garante a estabilidade deste método explícito.

A análise de estabilidade de von Neumann em duas dimensões se dá substituindo  $v_{a,b}^n$  por  $g^n \exp\{i(a\theta_x + b\theta_y)\}$ , onde  $\theta_x = \Delta x \xi_x$  e  $\theta_y = \Delta y \xi_y$ . Para facilitar a notação, considere  $e_a = e^{ia\theta_x}$  e  $e_b = e^{ib\theta_y}$ .

Substituindo no método de Euler explícito:

$$g^{n+1} e_a e_b = g^n e_a e_b + \frac{b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} g^n e_a e_b (e^{i\theta_x} - 2 + e^{-i\theta_x}) + \frac{b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} g^n e_a e_b (e^{i\theta_y} - 2 + e^{-i\theta_y}).$$

Dividindo ambos os lados por  $g^n e_a e_b$ :

$$g = 1 + \frac{b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} (e^{i\theta_x} - 2 + e^{-i\theta_x}) + \frac{b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} (e^{i\theta_y} - 2 + e^{-i\theta_y}).$$

Agora, veja que

$$e^{i\omega} + e^{-i\omega} = 2 \cos \omega,$$

então:

$$g = 1 + \frac{2b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} (\cos \theta_x - 1) + \frac{2b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} (\cos \theta_y - 1).$$

Queremos verificar sob quais condições temos  $|g| \leq 1$ . Observe que  $g \leq 1$ , pois  $-2 \leq \cos \theta - 1 \leq 0$ , para todo  $\theta$ . A condição deve ser imposta então pelo caso negativo. No pior caso,  $\cos \theta = -1$ ,  $\theta = \theta_x, \theta_y$ , então queremos:

$$g \geq 1 - \frac{4b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{4b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} \geq -1 \iff \frac{b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} \leq 1/2.$$

A condição de estabilidade para o tamanho de passo  $\Delta t$  fica:

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2 (\Delta y)^2}{2b_1 (\Delta y)^2 + 2b_2 (\Delta x)^2}.$$

Se a grade é simétrica e temos  $h = \Delta x = \Delta y$ , então o critério fica:

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{2(b_1 + b_2)}.$$

**Questão (1.2).** Implemente computacionalmente o esquema explícito para resolver a Equação 1. Defina um domínio computacional, escolha valores adequados para  $b_1$  e  $b_2$ , e estabeleça condições iniciais  $u(0, x, y) = f(x, y)$  e condições de fronteira (e.g., Dirichlet homogêneas) apropriadas. Verifique empiricamente a condição de estabilidade obtida na Questão 1.1.

Implementei o método matricialmente. Os operadores de diferenças centradas de segunda ordem:

```
def A_x (v, delta_x:float):
    vet = np.zeros_like(v)
    vet[1:-1, 1:-1] = v[2:, 1:-1] - 2 * v[1:-1, 1:-1] + v[:-2, 1:-1]
    return vet / (delta_x*delta_x)

def A_y (v, delta_y:float):
    vet = np.zeros_like(v)
    vet[1:-1, 1:-1] = v[1:-1, 2:] - 2 * v[1:-1, 1:-1] + v[1:-1, :-2]
    return vet / (delta_y*delta_y)
```

e o método em si:

```
def ftcs (v0:np.array, delta_t:float, delta_x:float, delta_y:float, b_1:
          float, b_2:float, fronteira=0.0)->np.array:
    # Aplicando os operadores de diferenças centradas
    Ax_v0 = A_x(v0, delta_x)[1:-1,1:-1]
    Ay_v0 = A_y(v0, delta_y)[1:-1,1:-1]

    # Condição de fronteira
    v = np.zeros_like(v0) + fronteira
    # Método ftcs
    v[1:-1,1:-1] = v0[1:-1,1:-1] + delta_t * (b_1 * Ax_v0 + b_2 * Ay_v0)

    return v
```

Escolhendo  $b_1 = b_2 = 1/4$  e uma grade  $50 \times 50$  (i.e.  $h = 1/50$ ), o critério de estabilidade fica:

$$\Delta t \leq \frac{1}{2 * (1/2) * 50^2} = \frac{1}{2500} = 4 \cdot 10^{-4}.$$

A condição de fronteira escolhida foi  $u(t, x_f, y_f) = 0$ ,  $\forall (x_f, y_f) \in \partial([0, 1] \times [0, 1])$ , e a condição inicial será  $u(0, x, y) = 1$ ,  $\forall (x, y) \in (0, 1) \times (0, 1)$ . O comportamento esperado nessas condições é uma dissipação isotrópica de fora para dentro.

Escolhendo um tamanho de passo dentro do critério de estabilidade ( $\Delta t = 4 \cdot 10^{-4}$ ), o resultado ficou dentro do esperado (figura 1).

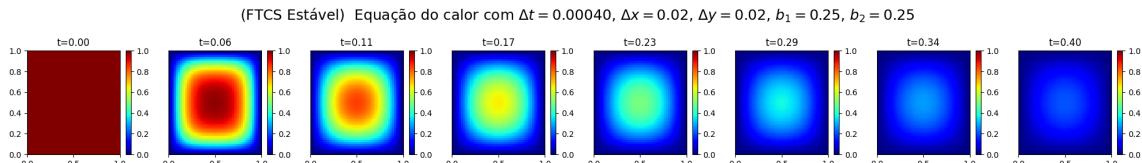


Figura 1: Teste com  $\Delta t$  dentro do critério de estabilidade.

Agora utilizando um tamanho de passo ligeiramente acima do critério ( $\Delta t = 4.1 \cdot 10^{-4}$ ), o resultado obtido se distancia rapidamente do resultado esperado (figura (2)), exibindo um comportamento instável.

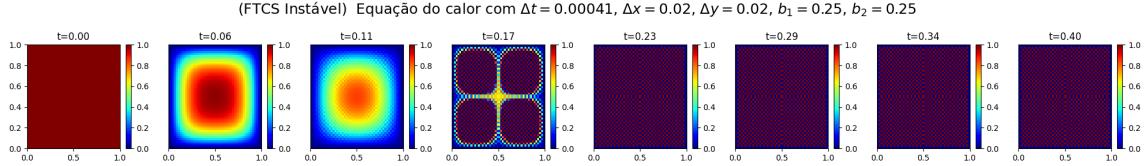


Figura 2: Teste com  $\Delta t$  ligeiramente fora do critério de estabilidade.

---

## Atividade 2 - Métodos implícitos

Considere agora o método de Euler implícito (BTCS - Backward-Time Central-Space):

$$v_{i,j}^{n+1} - \Delta t(b_1 A_x v_{i,j}^{n+1} + b_2 A_y v_{i,j}^{n+1}) = v_{i,j}^n$$

**Questão (2.1).** Demonstre, utilizando a análise de von Neumann, que este método implícito é incondicionalmente estável para quaisquer  $\Delta t > 0$ .

Com a mesma notação da questão 1.1, tomando  $v_{a,b}^n = g^n e_a e_b$  temos:

$$g^{n+1} e_a e_b - \frac{b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} g^{n+1} e_a e_b (e^{i\theta_x} - 2 + e^{-i\theta_x}) - \frac{b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} g^{n+1} e_a e_b (e^{i\theta_y} - 2 + e^{-i\theta_y}) = g^n e_a e_b.$$

Dividindo ambos os lados por  $g^n e_a e_b$  e usando que  $2 \cos \theta = e^{i\theta} + e^{-i\theta}$ :

$$g = \frac{1}{\left(1 - \frac{2b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} (\cos \theta_x - 1) - \frac{2b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} (\cos \theta_y - 1)\right)}.$$

Observe que  $-2 \leq \cos \theta - 1 \leq 0$ , e como  $b_1 > 0$ ,  $b_2 > 0$  e  $\Delta t > 0$ , temos que

$$-\frac{2b_1 \Delta t}{(\Delta x)^2} (\cos \theta_x - 1) - \frac{2b_2 \Delta t}{(\Delta y)^2} (\cos \theta_y - 1) > 0,$$

então o lado direito atinge seu máximo quando  $\cos \theta_x = 1$  e  $\cos \theta_y = 1$ , resultando em 1, e logo:

$$0 < g \leq 1.$$

Portanto, o método é incondicionalmente estável.  $\square$

---

**Questão (2.2).** Reescreva o esquema na forma matricial  $\mathbf{A}\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n$ , onde  $\mathbf{v}^n$  é o vetor de todas as incógnitas  $v_{i,j}^n$ . Analise a estrutura da matriz de coeficientes  $\mathbf{A}$  e discuta por que, embora esparsa, ela possui um acoplamento que torna sua resolução computacionalmente mais custosa do que a resolução de sistemas tridimensionais unidimensionais.

Para transformar a matriz de estados em um vetor  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{M \cdot N}$ , é necessário escolher alguma ordenação. Por facilidade, considere a ordem lexicográfica:

$$v_{i,j} = \mathbf{v}_\mu, \quad \mu = i + (j-1)M, \quad 1 \leq i \leq M, \quad 1 \leq j \leq N.$$

Por exemplo:  $(v_{1,1}, v_{2,1}, v_{1,2}, v_{2,2}, v_{1,3}, v_{2,3})$ . Com essa ordem, os operadores de diferenças finitas ficam:

$$\mathbf{A}_x v_{i,j} = \bar{\mathbf{A}}_x \vec{v}_{i+(j-1)M} = \frac{\vec{v}_{i+1+(j-1)M} - 2\vec{v}_{i+(j-1)M} + \vec{v}_{i-1+(j-1)M}}{(\Delta x)^2},$$

$$\mathbf{A}_y v_{i,j} = \bar{\mathbf{A}}_y \vec{v}_{i+(j-1)M} = \frac{\vec{v}_{i+jM} - 2\vec{v}_{i+(j-1)M} + \vec{v}_{i+(j-2)M}}{(\Delta y)^2}.$$

O operador  $\bar{\mathbf{A}}_x$  utiliza pontos consecutivos, sendo portanto uma matriz tridiagonal com elementos tridiagonais  $(1, -2, 1)/(\Delta x)^2$ .

Já o operador  $\bar{\mathbf{A}}_y$  captura elementos distantes e tem um formato tridiagonal por blocos na forma:

$$\bar{\mathbf{A}}_y = \frac{1}{(\Delta y)^2} \begin{bmatrix} -2I_M & I_M & 0_M & \cdots & 0_M \\ I_M & -2I_M & I_M & \ddots & \vdots \\ 0_M & I_M & -2I_M & \ddots & 0_M \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0_M & \cdots & 0_M & I_M & -2I_M \end{bmatrix}$$

Com isso, o método BTCS toma a forma matricial:

$$\begin{aligned} \mathbf{I}\vec{v}^{n+1} - \Delta t(b_1\bar{\mathbf{A}}_x\vec{v}^{n+1} + b_2\bar{\mathbf{A}}_y\vec{v}^{n+1}) &= \vec{v}^n \\ &= (\mathbf{I} - \Delta t b_1 \bar{\mathbf{A}}_x - \Delta t b_2 \bar{\mathbf{A}}_y) \vec{v}^{n+1} = \vec{v}^n. \end{aligned}$$

A dificuldade de resolver esse tipo de sistema aparece dessa distância entre os termos dos blocos tridiagonais oriundos do operador  $\bar{\mathbf{A}}_y$ , gerando uma banda maior que 3. Isso eleva o custo da resolução do sistema linear.

---



---



---

## Atividade 3 - O método ADI

**Questão (3.1).** Demonstre que a equação de Crank-Nicolson

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(\mathbf{A}_x \mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{A}_x \mathbf{v}^n) + \frac{1}{2}(\mathbf{A}_y \mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{A}_y \mathbf{v}^n)$$

pode ser rearranjada para a forma (denotando  $k = \Delta t$ ):

$$\left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{A}_x - \frac{k}{2} \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^{n+1} = \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{A}_x + \frac{k}{2} \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^n + O(k^3).$$

Sendo  $t_{n+1} = t_n + \Delta t = t_n + k$ , podemos expandir  $\mathbf{v}^{n+1}$  em Taylor em relação ao tempo (supondo suavidade suficiente):

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + k \mathbf{v}_t^n + \frac{1}{2} k^2 \mathbf{v}_{tt}^n + O(k^3).$$

Por simplicidade, foi tomado que  $b_1 = b_2 = 1$  no enunciado de Crank-Nicolson. Então, considerando a equação original que se está resolvendo numericamente

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

temos que:

$$\mathbf{v}_t^n = (\mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y) \mathbf{v}^n.$$

A derivada temporal de segunda ordem por sua vez consiste simplesmente de uma composição:

$$\mathbf{v}_{tt}^n = (\mathbf{v}_t^n)_t = (\mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y) \mathbf{v}_t^n = (\mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y)^2 \mathbf{v}^n.$$

Para facilitar a notação, seja  $\mathbf{D} = \mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y$ . Com tudo isso, temos então:

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{D} \right) \mathbf{v}^{n+1} &= \left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{D} \right) \left( \mathbf{I} + k \mathbf{D} + \frac{k^2}{2} \mathbf{D}^2 + O(k^3) \right) \mathbf{v}^n \\ &= \left( \mathbf{I} + k \mathbf{D} + \cancel{\frac{k^2}{2} \mathbf{D}^2} - \frac{k}{2} \mathbf{D} - \cancel{\frac{k^2}{2} \mathbf{D}^2} - \underbrace{\frac{k^3}{4} \mathbf{D}^3}_{O(k^3)} \right) \mathbf{v}^n + O(k^3) \\ &= \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{D} \right) \mathbf{v}^n + O(k^3). \quad \square \end{aligned}$$

---

**Questão (3.2).** Prove que o termo  $\frac{k^2}{4} \mathbf{A}_x \mathbf{A}_y (\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n)$  é de ordem  $O(k^3)$  (assumindo suavidade suficiente da solução  $u$ ). Dica: Note que  $\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n = O(k)$ .

Conclua que, ao mover os termos de  $O(k^3)$  para o lado direito, a equação

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{D} + \frac{k^2}{4} \mathbf{A}_x \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^{n+1} - \frac{k^2}{4} \mathbf{A}_x \mathbf{A}_y \mathbf{v}^{n+1} &= \\ \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{D} + \frac{k^2}{4} \mathbf{A}_x \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^n - \frac{k^2}{4} \mathbf{A}_x \mathbf{A}_y \mathbf{v}^n + O(k^3) & \end{aligned} \tag{1}$$

pode ser reescrita como

$$\left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_x\right)\left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right)\mathbf{v}^{n+1} = \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{A}_x\right)\left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right)\mathbf{v}^n + O(k^3).$$

Primeiro, observe que, por Taylor (supondo suavidade suficiente):

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + O(k) \implies \mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n = O(k),$$

então:

$$\frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y(\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n) = \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_yO(k) = O(k^3).$$

Substituindo na equação (1), temos:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{D} + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y\right)\mathbf{v}^{n+1} &= \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{D} + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y\right)\mathbf{v}^n + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y(\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n) + O(k^3) \\ &= \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{D} + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y\right)\mathbf{v}^n + O(k^3). \end{aligned} \quad (2)$$

O restante consiste em manipulação algébrica. Veja que:

$$\begin{aligned} \mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{D} + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y &= \mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_x - \frac{k}{2}\mathbf{A}_y + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y \\ &= \mathbf{I} \left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right) - \frac{k}{2}\mathbf{A}_x \left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right) \\ &= \left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_x\right) \left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right). \end{aligned} \quad (3)$$

Analogamente, obtém-se que

$$\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{D} + \frac{k^2}{4}\mathbf{A}_x\mathbf{A}_y = \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{A}_x\right) \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right). \quad (4)$$

Substituindo (3) e (4) em (2), temos:

$$\left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_x\right) \left(\mathbf{I} - \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right) \mathbf{v}^{n+1} = \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{A}_x\right) \left(\mathbf{I} + \frac{k}{2}\mathbf{A}_y\right) \mathbf{v}^n + O(k^3). \quad \square$$

---

## Atividade 4 - Estudo de caso

**Questão** (4.1 - Análise Teórica da Estabilidade). Demonstrem formalmente, utilizando a análise de estabilidade de von Neumann, que ambos os esquemas - Peaceman-Rachford e Douglas-Rachford - são incondicionalmente estáveis.

- Começando por Peaceman-Rachford, dado pelo seguinte:

$$\left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{A}_x \right) \mathbf{v}^* = \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^n, \quad \left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^{n+1} = \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{A}_x \right) \mathbf{v}^*, \quad (5)$$

onde  $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^{n+1/2}$ . Considere a notação

$$r_x = \frac{k}{(\Delta x)^2} (\cos \theta_x - 1), \quad r_y = \frac{k}{(\Delta y)^2} (\cos \theta_y - 1).$$

De antemão, como  $\cos \theta - 1 \in [-2, 0]$ , temos que  $r_x \leq 0$  e  $r_y \leq 0$  para  $k > 0$ .

Podemos reescrever a primeira parte do esquema (5) como:

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{A}_x \right) \mathbf{v}^* &= g^{n+1/2} e_a e_b (1 - r_x), \\ \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^n &= g^n e_a e_b (1 + r_y). \end{aligned}$$

Juntando os dois e dividindo ambos os lados por  $g^n e_a e_b$ , obtemos:

$$g^{1/2} = \frac{1 + r_y}{1 - r_x}. \quad (6)$$

Para a segunda parte de (5) temos:

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{I} - \frac{k}{2} \mathbf{A}_y \right) \mathbf{v}^{n+1} &= g^{n+1} e_a e_b (1 - r_y), \\ \left( \mathbf{I} + \frac{k}{2} \mathbf{A}_x \right) \mathbf{v}^* &= g^{n+1/2} e_a e_b (1 + r_x). \end{aligned}$$

Juntando as equações e dividindo ambos os lados por  $g^n e_a e_b$ :

$$g^{1/2} = \frac{1 + r_x}{1 - r_y}. \quad (7)$$

Multiplicando (6) e (7), temos:

$$g = \frac{1 + r_x}{1 - r_x} \frac{1 + r_y}{1 - r_y}.$$

Como  $r_x, r_y \leq 0$ , então

$$|g| = \left| \frac{1 + r_x}{1 - r_x} \right| \left| \frac{1 + r_y}{1 - r_y} \right| \leq 1,$$

pois  $|1+r| \leq |1-r|$ . Portanto o esquema de Peaceman-Rachford é incondicionalmente estável.  
□

- Para o esquema de Douglas-Rachford, dado por

$$(\mathbf{I} - k\mathbf{A}_x)\mathbf{v}^* = (\mathbf{I} + k\mathbf{A}_y)\mathbf{v}^n, \quad (\mathbf{I} - k\mathbf{A}_y)\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^* - k\mathbf{A}_y\mathbf{v}^n, \quad (8)$$

o processo é análogo. Da primeira parte de (8) temos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} - k\mathbf{A}_x)v_{a,b}^* &= g^{n+1/2}e_ae_b(1 - 2r_x), \\ (\mathbf{I} + k\mathbf{A}_y)v_{a,b}^n &= g^n e_ae_b(1 + 2r_y). \end{aligned}$$

Juntando as equações e dividindo por  $g^n e_ae_b$ :

$$g^{1/2} = \frac{1 + 2r_y}{1 - 2r_x}. \quad (9)$$

Para a segunda parte de (8) temos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} - k\mathbf{A}_y)v_{a,b}^{n+1} &= g^{n+1}e_ae_b(1 - 2r_y), \\ v_{a,b}^n - k\mathbf{A}_yv_{a,b}^n &= g^{n+1/2}e_ae_b - 2g^n e_ae_b r_y. \end{aligned}$$

Juntando as equações e dividindo ambos os lados por  $g^n e_ae_b$ :

$$g = \frac{g^{1/2} - 2r_y}{1 - 2r_y}. \quad (10)$$

Substituindo (9) em (10):

$$g = \frac{1}{1 - 2r_y} \frac{1 + 2r_y - 2r_y(1 - 2r_x)}{1 - 2r_x} = \frac{1 + 4r_xr_y}{1 + 4r_xr_y - 2(r_x + r_y)}. \quad (11)$$

Observe que  $r_xr_y \geq 0$  e que  $r_x + r_y \leq 0$ . Dessa forma,  $0 \leq g \leq 1$ , então  $|g| \leq 1$ . Portanto, o esquema de Douglas-Rachford é incondicionalmente estável.  $\square$

---



---

**Questão** (4.2 - Implementação e visualização). *Implementem computacionalmente ambos os esquemas (PR e DR) para resolver o problema modelo definido acima. Utilizem um algoritmo eficiente (e.g. Algoritmo de Thomas) para a inversão dos sistemas tridiagonais em cada estágio. Gerem uma visualização (e.g., um mapa de calor ou gráfico de superfície) da solução numérica  $v_{i,j}^n$  e do erro absoluto  $|u_e - v|$  em um tempo  $t = T$  (ex.,  $T = 0.5$ ).*

Apesar da possibilidade de incorporar o algoritmo de Thomas nos métodos PR e DR e poupar alguma memória, fiz funções separadas para facilitar a legibilidade. Além disso, para melhorar um pouco o tempo do programa (especialmente na questão 4.3), usei o decorador `@jit` do pacote Numba, que compila o código Python decorado e acelera um pouco as coisas.

### Algoritmo de Thomas

```
def thomas (a:float, b:float, c:float, d:np.array)->np.array:  
    """  
        Algoritmo de Thomas para resolucao de  
        sistemas tridiagonais.  
    """  
    x = np.zeros_like(d)  
    n = len(d)  
    x[-1] = d[-1]  
  
    c_ = np.zeros(n-1)  
    c_[0] = c / b  
    d[0] = d[0] / b  
  
    for i in range(1, n):  
        if i < n - 1: c_[i] = c / (b - c_[i-1] * a)  
        d[i] = (d[i] - d[i-1] * a) / (b - c_[i-1] * a)  
  
    x[-1] = d[-1]  
    for i in range(n-2, -1, -1):  
        x[i] = d[i] - c_[i] * x[i+1]  
  
    return x
```

### Método de Peaceman-Rachford

```
def metodo_pr (v:np.array, delta_t:float, delta_x:float, delta_y:float, b_1:  
    float, b_2:float)->np.array:  
    """  
        Integracao numerica da equacao do calor usando o metodo Peaceman-Rachford.  
    """  
    M, N = v.shape  
  
    # Constantes  
    mu_x = delta_t / (delta_x**2)  
    mu_y = delta_t / (delta_y**2)  
  
    # Vetor de estados intermediario  
    v_tilde = np.copy(v)  
  
    # Primeiro fazemos a integracao em x a partir de v  
    # Termos das diagonais principal e secundarias  
    diag_pri = 1. + b_1 * mu_x  
    diag_sec = -.5 * b_1 * mu_x  
  
    # Integracao  
    for b in range(1, N-1):  
        lado_direito = v[1:-1,b] + 0.5 * b_2 * mu_y * (v[1:-1,b-1] - 2 * v[1:-1,  
            b] + v[1:-1,b+1])  
        v_tilde[1:-1,b] = thomas(diag_sec, diag_pri, diag_sec, lado_direito)  
  
    # Agora fazemos a integracao em y a partir de v_tilde
```

```

# Termos das diagonais principal e secundarias
diag_pri = 1. + b_2 * mu_y
diag_sec = -.5 * b_2 * mu_y

# Integracao
for a in range(1, M-1):
    lado_direito = v_tilde[a,1:-1] + 0.5 * b_1 * mu_x * (v_tilde[a-1,1:-1] -
        2 * v_tilde[a,1:-1] + v_tilde[a+1,1:-1])
    v[a,1:-1] = thomas(diag_sec, diag_pri, diag_sec, lado_direito)

return v

```

Método de Douglas-Rachford

```

def metodo_dr (v:np.array, delta_t:float, delta_x:float, delta_y:float, b_1:
    float, b_2:float)->np.array:
"""
Integracao numerica da equacao do calor usando o metodo Douglas-Rachford.
"""

M, N = v.shape

# Constantes
mu_x = delta_t / (delta_x**2)
mu_y = delta_t / (delta_y**2)

# Vetor de estados intermediario
v_tilde = np.zeros((M,N))

# Primeiro fazemos a integracao em y a partir de v
# Termos das diagonais principal e secundarias
diag_pri = 1. + 2. * b_1 * mu_x
diag_sec = - b_1 * mu_x
# Integracao
for b in range(1, N-1):
    lado_direito = v[1:-1,b] + b_2 * mu_y * (v[1:-1,b-1] - 2 * v[1:-1,b] + v
        [1:-1,b+1])
    v_tilde[1:-1,b] = thomas(diag_sec, diag_pri, diag_sec, lado_direito)

# Agora fazemos a integracao em x a partir de v_tilde
# Termos das diagonais principal e secundarias
diag_pri = 1. + 2. * b_2 * mu_y
diag_sec = -b_2 * mu_y
v_prox = np.zeros((M,N))

# Integracao
for a in range(1, M-1):
    lado_direito = v_tilde[a,1:-1] - b_2 * mu_y * (v[a,0:-2] - 2.*v[a,1:-1]
        + v[a,2:])
    v_prox[a, 1:-1] = thomas(diag_sec, diag_pri, diag_sec, lado_direito)

return v_prox

```

O problema modelo foi resolvido usando um tamanho de passo temporal fixo  $\Delta t = 0.005$  e uma grade  $50 \times 50$ . Usando o método de Peaceman-Rachford, temos os resultados nas figuras 3 e 4. No Peaceman-Rachford tivemos um erro crescente mas limitado por  $10^{-4}$ .

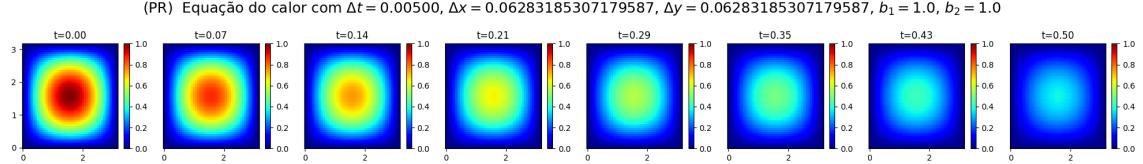


Figura 3: Solução aproximada via Peaceman-Rachford.

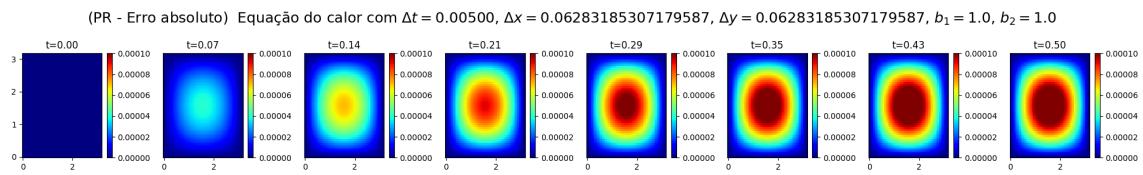


Figura 4: Erro absoluto do Peaceman-Rachford. Escala de cores entre 0 e  $10^{-4}$ .

Já com o Douglas-Rachford temos as figuras 5 e 6. Dessa vez, o erro foi limitado por 0.003, maior que o de Peaceman-Rachford.

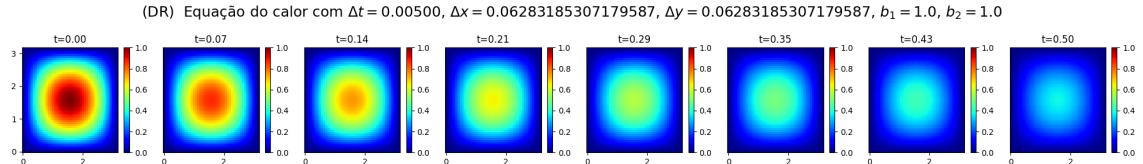


Figura 5: Solução aproximada via Douglas-Rachford.

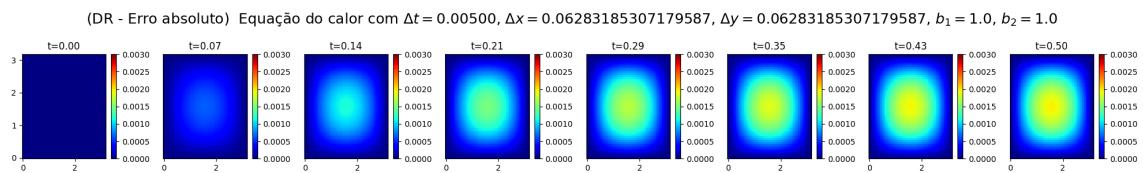


Figura 6: Erro absoluto do Douglas-Rachford. Escala de cores entre 0 e 0.003.

---

== / ==

---

**Questão (4.3 - Estudo Numérico da Ordem de Consistência).** O ponto central desta investigação é verificar se a convergência numérica observada condiz com a consistência teórica dos métodos.

- Definam um tempo final  $T$  (e.g.,  $T = 0.5$ ).
- Para um refinamento  $N$ , definam  $\Delta x = \Delta y = h = \pi/N$ .
- Sigam a diretriz  $\Delta t = \Delta x = \Delta y$ , ou seja,  $k = h$ .
- Calculem o erro global no tempo  $T$  usando a norma do máximo (erro  $L_\infty$ ):

$$E(h) = \max_{i,j} |u_e(T, x_i, y_j) - v_{i,j}^{N_t}|, \quad (\text{onde } N_t h = T).$$

- Construam uma tabela para cada método (PR e DR) contendo  $h$ , o erro  $E(h)$  e a taxa de convergência  $p$  (calculada por  $p \approx \log_2(E(2h)/E(h))$ ) Utilizem uma série de refinamentos (e.g.,  $N = 10, 20, 40, 80$ ).

Utilizando  $N = 10, 20, 40, 80$ , tive o seguinte:

Tabela 1: Erro e convergência estimada de PR e DR com  $\Delta t = h$

Tabela 2: Peaceman-Rachford

$h$	$E(h)$	$p(h)$
0.3142	1.96e-05	-
0.1571	1.21e-06	4.0114
0.0785	7.75e-08	3.9689
0.0393	4.86e-09	3.9943

Tabela 3: Douglas-Rachford

$h$	$E(h)$	$p(h)$
0.3142	0.122	-
0.1571	0.0591	1.0461
0.0785	0.0294	1.0087
0.0393	0.0146	1.0107

---

====

**Questão (4.4 - Discussão).** Analisem os resultados. A taxa de convergência  $p$  observada para  $k = h$  é consistente com as ordens de truncamento teóricas? Discutam qualquer discrepância ou confirmação.

No método Peaceman-Rachford o obtido foi uma superconvergência. Conforme o enunciado, o esperado seria algo de ordem  $O(k^3) = O(h^3)$ , mas encontramos  $O(h^4)$ ! Uma possível razão para isso pode ser o problema modelo compensar alguns termos de ordem menor quando usamos  $\Delta t = h$ , fazendo sobrar os de ordem 4 e acima. O uso de outros valores de  $\Delta t$  traz resultados diferentes, como veremos.

Já o Douglas-Rachford teve ordem 1. Conforme o enunciado, é esperado que DR tenha ordem temporal menor, mas não foi dito qual ordem. A suspeita é que seja  $O(k)$ .

Para verificar a validade desses resultados, decidi rodar mais dois testes. No primeiro, fixei  $\Delta t = 10^{-4}$  e usei os mesmos valores de  $M$ , conforme a tabela 4. Dessa vez, o método Peaceman-Rachford apresentou ordem 2 e Douglas-Rachford começou com ordem 2 mas decresceu. O comportamento de DR reforça a ordem 1 obtida no caso  $\Delta t = h$ , pois conforme  $h$  diminuiu e se aproximou do  $\Delta t$  fixo, a ordem diminuiu.

Tabela 4: Erro e convergência estimada de PR e DR com  $\Delta t = 10^{-4}$

Tabela 5: Peaceman-Rachford

$h$	$E(h)$	$p(h)$
0.3142	0.00303	-
0.1571	0.000757	2.0009
0.0785	0.000189	2.0002
0.0393	4.73e-05	2.0001

Tabela 6: Douglas-Rachford

$h$	$E(h)$	$p(h)$
0.3142	0.00306	-
0.1571	0.000793	1.9498
0.0785	0.000226	1.8123
0.0393	8.41e-05	1.4261

No segundo teste decidi usar  $\Delta t = h^2$ , para cada valor de  $h$ . Se DR realmente tem ordem temporal  $O(k)$ , o esperado nesse caso é que a ordem suba para 2, alcançando a ordem espacial. De fato, foi o que obtive, conforme a tabela 7.

Tabela 7: Erro e convergência estimada de PR e DR com  $\Delta t = h^2$

Tabela 8: Peaceman-Rachford

$h$	$E(h)$	$p(h)$
0.3142	0.00303	-
0.1571	0.000756	1.9998
0.0785	0.000189	1.9999
0.0393	4.73e-05	2.0000

Tabela 9: Douglas-Rachford

$h$	$E(h)$	$p(h)$
0.3142	0.00668	-
0.1571	0.00167	1.9964
0.0785	0.000419	1.9991
0.0393	0.000105	1.9998

Dessa forma, foi possível verificar ordem  $O(h^4)$  para o método Peaceman-Rachford usando  $k = h$  e também foi possível inferir a ordem  $O(k)$  do método Douglas-Rachford.