

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 Δt , Δx , Δy , 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 θ . 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 Δt 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]

    # Condicao de fronteira
    v = np.zeros_like(v0) + fronteira
    # Metodo 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 50×50 (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).

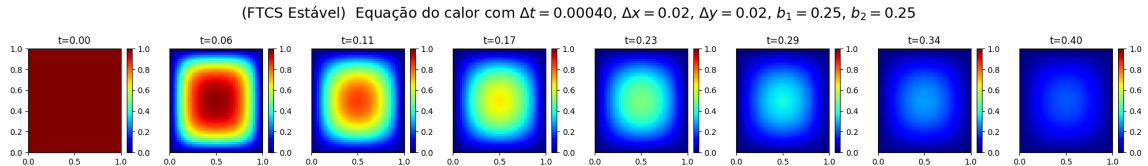


Figura 1: Teste com Δt dentro do critério de estabilidade.

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.

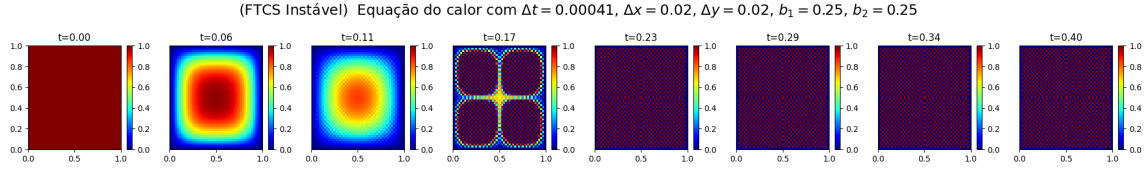


Figura 2: Teste com Δt ligeiramente fora do critério de estabilidade.

==/==

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:

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

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

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

pode ser reescrita como

$$\left(I - \frac{k}{2}A_x\right)\left(I - \frac{k}{2}A_y\right)v^{n+1} = \left(I + \frac{k}{2}A_x\right)\left(I + \frac{k}{2}A_y\right)v^n + O(k^3).$$

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

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

então:

$$\frac{k^2}{4}A_xA_y(v^{n+1} - v^n) = \frac{k^2}{4}A_xA_yO(k) = O(k^3).$$

Substituindo na equação (1), temos:

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

O restante consiste em manipulação algébrica. Veja que:

$$\begin{aligned} I - \frac{k}{2}D + \frac{k^2}{4}A_xA_y &= I - \frac{k}{2}A_x - \frac{k}{2}A_y + \frac{k^2}{4}A_xA_y \\ &= I\left(I - \frac{k}{2}A_y\right) - \frac{k}{2}A_x\left(I - \frac{k}{2}A_y\right) \\ &= \left(I - \frac{k}{2}A_x\right)\left(I - \frac{k}{2}A_y\right). \end{aligned} \quad (3)$$

Analogamente, obtém-se que

$$I + \frac{k}{2}D + \frac{k^2}{4}A_xA_y = \left(I + \frac{k}{2}A_x\right)\left(I + \frac{k}{2}A_y\right). \quad (4)$$

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

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

==/=

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:

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

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

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

Para a segunda parte de (8) temos:

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

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

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

Substituindo (9) em (10):

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

Observe que $r_x r_y \geq 0$ 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 50×50 . 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} .

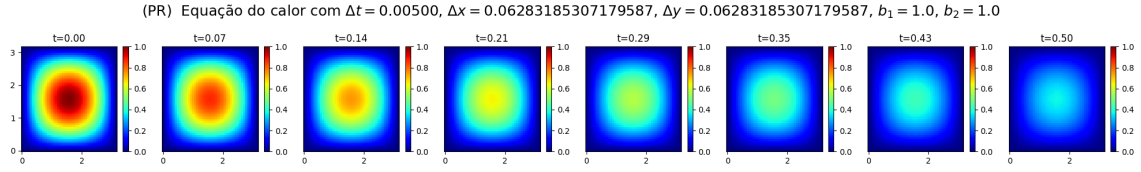


Figura 3: Solução aproximada via Peaceman-Rachford.

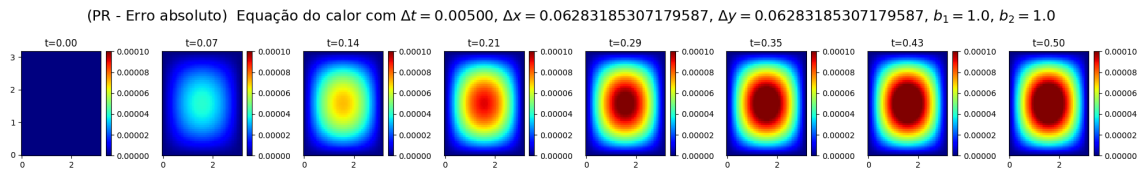


Figura 4: Erro absoluto do Peaceman-Rachford. Escala de cores entre 0 e 10^{-4} .

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.

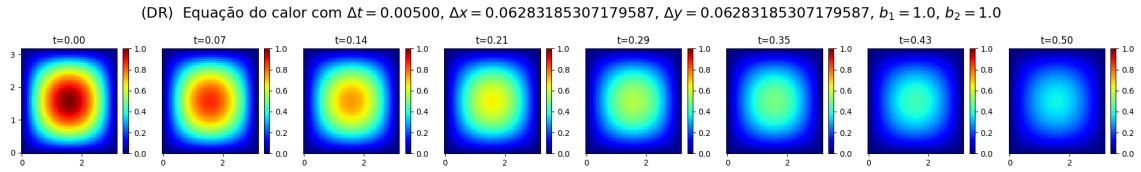


Figura 5: Solução aproximada via Douglas-Rachford.

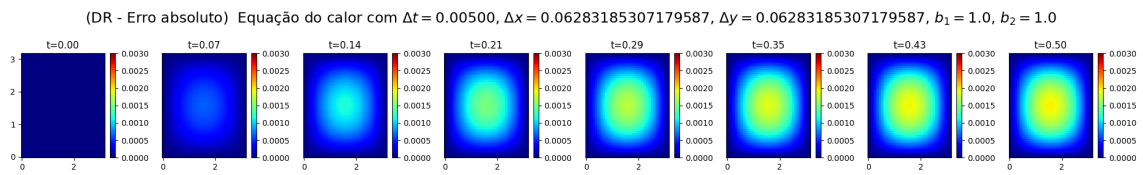


Figura 6: Erro absoluto do Douglas-Rachford. Escala de cores entre 0 e 0.003.

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_∞):

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

- 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). *Analise 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 Δt 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 Δt 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.