Considerando a E.D.P dada por

$c = c(x,t)$, $x \in \Omega = [0,h]$ e $t \in J = (0,T]$,

com $c(0,t) = 0$, $\forall t \in J$,

e com $\frac{\partial c}{\partial x}(h,t) = 0$, $\forall t \in J$;

mais a condição inicial $c(x,0) = c_0(x)$, $\forall x \in \Omega$

A discretização já foi vista quando se tem o caso estacionário isto é: $\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) \equiv 0$ $\forall x$, $\forall t$

Mas e se temos a variação no tempo – ou seja, quando $\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) \not\equiv 0$

Então temos <u>MUITAS</u> possibilidades das quais se destacam 3.

1º) <u>Método Explícito</u>

Notação $c(x_i, t_k) \cong c_i^{(k)}$ sendo x_i de uma partição de Ω e t_k da partição de J

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v . \frac{\partial c}{\partial x} + \mu . c = f$$

$$\downarrow$$

$$\frac{c_i^{(k+1)} - c_i^{(k)}}{\Delta t} - \alpha \left[\frac{c_{i-1}^{(k)} - 2c_i^{(k)} + c_{i+1}^{(k)}}{\Delta x^2} \right] + v \left[\frac{c_{i+1}^{(k)} - c_{i-1}^{(k)}}{2 \Delta x} \right] + \mu c_i^{(k)} = f_i^{(k)}$$

A condição inicial é discretizada com

$$c^{(0)} = \left(c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, c_3^{(0)}, \ldots, c_i^{(0)}, \ldots, c_{nx}^{(0)} \right)$$

com $c_i^{(0)} = c_0(x_i)$

Então, isolando os valores de $C^{(k+1)}$ do lado esquerdo e os de $C^{(k)}$ temos:

$$C_i^{(k+1)} = \left(\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{v.\Delta t}{2\Delta x}\right) C_{i-1}^{(k)} + \left(1 - \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} - \mu.\Delta t\right) C_i^{(k)} +$$
$$+ \left(\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{v \Delta t}{2\Delta x}\right) C_{i+1}^{(k)} + \Delta t. f_i^{(k)}$$

Para $i = 1, 2, \ldots, nx$ <Atenção: com aquele malabarismo quando $x = h$>

$$\Rightarrow \quad \mathbb{C}^{(k+1)} = \mathbb{M}\, \mathbb{C}^{(k)} + \mathbb{f}^{(k)}$$

No lugar de $\mathbb{C}^{(k)}$, usamos $\mathbb{C}^{(0)}$ e obtemos $\mathbb{C}^{(1)}$ e, depois, de $\mathbb{C}^{(1)}$ se obtem $\mathbb{C}^{(2)}$ e assim sucessivamente.

Obs. 1: A aproximação de $\frac{\partial C}{\partial t}(x_i, t_k)$, dada por $\frac{C_i^{(k+1)} - C_i^{(k)}}{\Delta t}$ é da ordem de Δt

Obs. 2: Dado $\mathbb{C}^{(0)}$ a obtenção de $\mathbb{C}^{(1)}$ "custa" um produto de $\mathbb{M}$ por $\mathbb{C}^{(0)}$ + o vetor $\mathbb{f}^{(0)}$

$\Rightarrow$ a cada passo, esse é o custo.

Mas (era bom demais para ser assim!) este método (o explícito) é condicionalmente convergente e a condição depende da relação entre Δt e Δx
Isto pode vir a exigir um Δt muito pequeno, o que equivale a um nt muito grande

2ª) Método Implícito

Nesta técnica numérica, usa-se a mesma aproximação para $\frac{\partial c}{\partial t}(x_i, t_k)$ ou seja

$$\frac{c_i^{(k+1)} - c_i^{(k)}}{\Delta t}$$

e para os demais termos, em vez de aproximar em t_k, isto é feito em t_{k+1}:

$$\frac{c_i^{(k+1)} - c_i^{(k)}}{\Delta t} = \left(\frac{\alpha}{\Delta x^2} + \frac{v}{2\Delta x}\right) c_{i-1}^{(k+1)} + \left(-\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \mu\right) c_i^{(k+1)} +$$

$$+ \left(\frac{\alpha}{\Delta x^2} - \frac{v}{2\Delta x}\right) c_{i+1}^{(k+1)} + \Delta t\, f_i^{(k+1)}.$$

Isolando $c_i^{(k+1)}$ do lado esquerdo e $c_i^{(k)}$ do lado direito teremos

$$\left(-\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{v \Delta t}{2\Delta x}\right) c_{i-1}^{(k+1)} + \left(1 + \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \mu \Delta t\right) c_i^{(k+1)} +$$

$$+ \left(-\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{v \Delta t}{2\Delta x}\right) c_{i+1}^{(k+1)} = c_i^{(k)} + \Delta t \; {}_i^{(k+1)}$$

isto é

$$\mathbb{P}\, \mathbb{C}^{(k+1)} = \mathbb{C}^{(k)} + \mathbb{f}^{(k+1)}$$

lembrando, sempre, da mudança na última linha da matriz $\mathbb{P}$ onde o valor de $P_{nt,\, nt-1} =$

$$= -\frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2},$$

mantendo o valor da diagonal principal para $P_{nt,\, nt}$.

<u>Obs. 1:</u> A aproximação ainda é $\mathcal{O}(\Delta t)$ mas, como é Implícito, o método é incondicionalmente convergente e, então, não há imposição sobre a relação entre Δt e Δx.

Mas é mais caro: em vez de "custar" o produto de uma matriz por um vetor ($\sim n^2$ operações) "custa" uma solução de sistema ($\sim n^3$ operações).

Há métodos híbridos que "misturam" aspectos Explícitos e aspectos Implícitos.

(*)

A não ser em casos excepcionais, não iremos usar nem um nem outro. Usaremos o Método de Crank-Nicolson que "custa" tanto quanto o Método Implícito mas as aproximações são da ordem de Δt^2: $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.