

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

SIMONI RANGEL DE FREITAS OLIVEIRA

**Análise da convergência do método Hopmoc para
uma equação de convecção-difusão**

NITERÓI

2005

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

SIMONI RANGEL DE FREITAS OLIVEIRA

Análise da convergência do método Hopmoc para uma equação de convecção-difusão

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre. Área de concentração: Modelagem Computacional.

Orientador:

Mauricio Kischinhevsky

Co-orientador:

Otton Teixeira da Silveira Filho

NITERÓI

2005

Análise da convergência do método Hopmoc para uma equação de convecção-difusão

Simoni Rangel de Freitas Oliveira

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre.

Aprovada por:

Prof. Mauricio Kischinhevsky/ IC-UFF (Presidente)

Prof. Otton Teixeira da Silveira Filho/ IC-UFF

Prof. Carlos Antônio de Moura/ IME-UERJ

Profa. Denise Burgarelli Duczmal/ ICEx-UFMG

Prof. José Henrique Carneiro de Araujo/ IC-UFF

Niterói, 02 de dezembro de 2005.

A Deus, digno de toda glória.

Agradecimentos

Agradeço a Deus, fonte de toda ciência. Sem a presença dEle em minha vida não seria possível a realização deste trabalho.

Deus providenciou muitas pessoas para estarem ao meu lado nesta conquista, mas algumas foram fundamentais.

Aos meus pais José Amaro e Marli, meus anjos da guarda, que nunca mediram esforços em favor da minha educação.

Ao meu esposo Francisco de Assis, pelo amor, dedicação e paciência ao longo desses anos.

Aos meus irmãos Renato e Flávio, pela amizade e pelo companheirismo.

De forma muito especial ao estimado professor Mauricio Kichinhevsky, incansável motivador, que em nenhum momento deixou de acreditar em meu potencial. Devo a este professor a conclusão desta dissertação.

Ao Professor Otton Teixeira da Silveira Filho, co-orientador deste trabalho, pelo incentivo e apoio valiosos que me foram dispensados.

À Professora Regina Célia Paula Leal Toledo, pela dedicação durante o curso.

À Carolina, pela amizade e pelos tantos bons momentos que dividimos neste curso.

Aos amigos Duilio, Sanderson, Frederico, Renatha, Daniela, Viviane, Stênio e Jacques, que por muitas vezes, dispuseram de seu tempo para transmitir experiências e conhecimentos importantes inerentes à programação computacional.

Resumo

O método Hopmoc, proposto em 1996 por Kischinhevsky utiliza conceitos do método das características modificado (MMOC) e do método Hopscotch. Assim como no método Hopscotch, no Hopmoc é feita a decomposição do conjunto das variáveis dos pontos da discretização espacial em dois subconjuntos que são atualizados alternadamente em dois semipassos. Esta decomposição sugeriu, por analogia conceitual, utilizar as técnicas de análise empregadas nos métodos de direções alternadas (ADI). No Hopmoc, os dois semipassos são construídos ao longo das linhas características, conceito este adaptado a partir do método das características modificado (MMOC). Assim como no MMOC, as linhas características guiam a busca dos valores das variáveis discretas em instantes de tempo precedentes, compondo as atualizações implícitas das variáveis e conduzindo a uma aproximação semi-lagrangeana. Neste trabalho estudam-se a consistência e a estabilidade do método Hopmoc. A análise de convergência para uma equação de convecção-difusão apresenta condições suficientes para que o método Hopmoc seja consistente com a equação e mostra que o método é incondicionalmente estável. Os resultados são confirmados por meio de uma análise computacional de convergência.

Abstract

The Hopmoc method, was introduced in 1996 by Kischinhevsky and combines concepts which are present both in modified method of characteristics (MMOC) and in the Hopscotch method. Hopmoc resembles Hopscotch in that it decomposes the set of grid points in two subsets which have their variables updated separately within one half step. To symmetrize the procedure, each of the subsets undergoes one explicit and one implicit update of its variables. The decomposition suggested the use of convergence analysis which is similar to that of alternating direction implicit methods (ADI). As in the modified method of characteristics (MMOC), the steps are built along characteristic lines, in a semilagrangian way. In this work both consistency and stability are discussed for Hopmoc when applied to a convection-diffusion equation. The analysis produces sufficient conditions for consistency and proves its unconditional stability. Numerical results confirm the convergence analysis conducted.

Palavras-chave

1. Métodos numéricos para equações diferenciais parciais
2. Hopscotch
3. Direções alternadas
4. Método das características modificado

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Equações Diferenciais Parciais	1
1.2	Discretização por Diferenças Finitas	2
1.3	Problemas de convecção-difusão	3
1.4	Organização desta dissertação	4
2	Métodos para a equação de convecção-difusão	5
2.1	A equação de convecção-difusão	5
2.2	Método ADI	5
2.3	Método das características modificado(MMOC)	6
2.4	Método Odd-Even Hopscotch(OEH)	10
2.5	Método Hopmoc	13
3	Análise teórica de convergência do método Hopmoc	17
3.1	Consistência	18
3.2	Estabilidade	25
4	Análise computacional de convergência do método Hopmoc	33
5	Conclusão	47
	Referências	48

Capítulo 1

Introdução

Este capítulo apresenta uma breve introdução sobre alguns dos principais conceitos referentes às equações diferenciais parciais, às equações de diferenças finitas e aos problemas de convecção-difusão.

1.1 Equações Diferenciais Parciais

Muitos problemas que envolvem fenômenos em Física, Química, Biologia, Economia, e em tantas outras áreas do conhecimento, são estudados a partir de modelos matemáticos. Os modelos matemáticos da maioria destes problemas são sistemas de equações diferenciais, ordinárias ou parciais.

Uma equação diferencial relaciona uma função incógnita e suas derivadas. Se a equação diferencial possui derivadas de apenas uma variável, ou seja, a função incógnita depende de uma variável independente, então a equação é dita equação diferencial ordinária (EDO). Se mais de uma variável independente está presente então a equação é dita equação diferencial parcial (EDP).

As equações diferenciais parciais (EDPs) descrevem dois tipos básicos de fenômenos físicos: aqueles que estão em um estado de equilíbrio, os estacionários, e os que evoluem no tempo, os evolutivos.

Fenômenos estacionários descrevem apenas a distribuição espacial da grandeza, portanto a propriedade de interesse não se altera com o tempo. Problemas deste tipo são em geral, representados por EDPs elípticas, cuja equação modelo é a equação de Laplace. Fenômenos evolutivos descrevem a variação de uma grandeza física no tempo e no espaço, e são representados por EDPs parabólicas ou hiperbólicas.

A EDP modelo para problemas parabólicos é a equação evolutiva de difusão (dissipação) de calor. A EDP modelo do problema hiperbólico é a equação da onda, na qual termos dissipativos não estão presentes.

Fenômenos de equilíbrio e fenômenos evolutivos podem ser estudados com o auxílio de modelos matemáticos para problemas de valor inicial (PVI) e para problemas de valor de contorno (PVC). Os PVI necessitam de condições pré-fixadas para a grandeza física na região de interesse. Os PVC estão delimitados pelas condições impostas no domínio. Portanto, os problemas evolutivos são PVI e PVC simultaneamente.

Devido à complexidade de vários problemas físicos, frequentemente se obtêm soluções aproximadas das EDPs que descrevem estes problemas, pois a determinação da solução analítica é bastante difícil. A aplicação de técnicas computacionais é a forma mais prática para simulação de fenômenos que envolvem dinâmica dos fluidos a fim de obter a solução numérica destes problemas.

Uma abordagem mais completa sobre EDPs e métodos numéricos para EDPs é apresentada por Golub e Ortega [19].

1.2 Discretização por Diferenças Finitas

Para o tratamento computacional do modelo matemático é preciso expressar de forma adequada as equações e a região (domínio) em que elas são válidas. Assim, as EDPs que descrevem o modelo devem ser expressas na forma de operações aritméticas que o computador possa executar.

Devido à impossibilidade de se obterem soluções numéricas sobre um domínio contínuo é necessário que este domínio seja discretizado, ou seja, dividido em pontos onde as soluções serão obtidas. Esse conjunto de pontos denomina-se malha. Portanto, antes de resolver a EDP de forma numérica é preciso encontrar expressões algébricas que relacionam os valores das incógnitas escritas relativamente aos pontos da malha. Estas expressões são denominadas aproximações por diferenças finitas. Esse processo resulta em uma equação algébrica denominada equação de diferenças finitas (EDF). Resolvendo-se a equação de diferenças finitas, encontra-se a solução aproximada do problema. As formas mais comuns utilizadas para a obtenção de aproximações deste tipo são a expansão em série de Taylor.

O processo de discretização de equações estacionárias gera um sistema de equações

acopladas geralmente resolvidas por métodos iterativos. Para equações evolutivas existem duas classes de discretização: a discretização explícita e a discretização implícita. A primeira se caracteriza por encontrar uma aproximação para cada ponto da malha considerando apenas valores conhecidos em instantes de tempo precedentes da simulação. Este tipo de aproximação resulta em equações independentes que permitem solução direta. A segunda discretização necessita, além dos valores conhecidos em instantes de tempo anteriores, de valores presentes no mesmo intervalo de tempo, ou seja, as equações resultantes são acopladas e esta característica exige a resolução de um sistema de equações a cada instante de tempo. As duas formas de discretização podem ser empregadas para compor métodos híbridos explícitos-implícitos.

Os conceitos mais importantes da área de aproximações de diferenças finitas para EDPs são apresentados por Richtmyer e Morton [33]; abordagens introdutórias são apresentadas por Cunha [7], Cláudio e Marins [5], Cuminato [6] e por Fortuna [17].

1.3 Problemas de convecção-difusão

Este trabalho dedica especial atenção a um determinado tipo de equação diferencial parcial, a equação de convecção-difusão. Esta é amplamente usada em diversas áreas do conhecimento por descrever no tempo e no espaço um processo de convecção (o transporte - fluxo convectivo) com mecanismos dissipativos (a transformação - fluxo difusivo ou dissipativo) como por exemplo: um soluto na água ou na superfície da água; o movimento dos aerossóis e dos gases na atmosfera. Problemas envolvendo a equação de convecção-difusão surgem também na simulação numérica de problemas envolvendo petróleo [1], envolvendo o transporte de poluentes na camada saturada do solo (problemas de termofluidodinâmica - problemas que envolvem o comportamento dinâmico dos fluidos associados a transferência de calor e massa) e outras aplicações importantes em muitos problemas.

Com o objetivo de obter soluções aproximadas satisfatórias para problemas descritos por equações de convecção-difusão, métodos numéricos são largamente empregados. As propriedades físicas dos problemas, como por exemplo em meios porosos [1], causam com frequência sérias dificuldades numéricas. Quando o termo convectivo domina, oscilações espúrias e dispersão numérica artificial podem ocorrer [6] [8]. Muitas técnicas são usadas para a solução numérica de equações de convecção-difusão, que possuem essa particularidade, seguindo duas principais abordagens: a Euleriana e a Lagrangeana.

Métodos Eulerianos usam uma malha espacial fixa. Desse modo uma discretização do operador diferencial descreve a evolução da solução ao longo do tempo sobre uma malha espacial fixa, resultando na necessidade de um maior cuidado no controle do fluxo [?], utilizando uma malha muito refinada.

A abordagem Lagrangeana baseia-se em acompanhar a trajetória do fluido e a variação em suas propriedades em cada ponto da discretização espacial, ao longo do tempo. Métodos que fazem uso desta abordagem oferecem a possibilidade de utilizar intervalos de tempo consideravelmente maiores que os permitidos nos métodos Eulerianos. Como desvantagem métodos lagrangeanos com evolução temporal explícita podem produzir, a partir de uma discretização uniforme, uma distribuição de pontos muito irregular, acrescentando custo computacional de adaptação da malha a cada passo. A distribuição irregular pode deixar de descrever importantes características do problema onde a distribuição for mais esparsa.

1.4 Organização desta dissertação

Nesse trabalho analisa-se a convergência do método Hopmoc (Kischinhevsky em [26] e [27]), aplicado à equação de convecção-difusão.

O método Hopmoc utiliza conceitos do método das características modificado (MMOC) (Douglas e Russell [9]) e do método Hopscotch [20]. Assim como o Hopscotch, o Hopmoc compreende dois semipassos temporais. A construção destes semipassos ao longo das linhas características [6] caracteriza a semelhança do Hopmoc com o MMOC.

No capítulo 2, são apresentadas descrições dos métodos ADI, MMOC, Hopscotch e Hopmoc para a resolução da equação de convecção-difusão. As descrições dos três primeiros métodos objetivam uma melhor compreensão das contribuições destes no desenvolvimento do procedimento Hopmoc. No capítulo 3 apresenta-se a condição de consistência e a análise de estabilidade do Hopmoc, baseada no formalismo empregado por Hundsdorfer e Verwer [25]. O capítulo 4 apresenta e discute os resultados de experimentos numéricos. Finalmente, reservou-se o capítulo 5 às conclusões.

Capítulo 2

Métodos para a equação de convecção-difusão

2.1 A equação de convecção-difusão

A equação de convecção-difusão, de dimensão κ , pode ser expressa na forma:

$$u_t + v \cdot \nabla u = d \nabla^2 u, \quad t > 0, \quad X \in \mathbb{R}^\kappa, \quad (2.1)$$

onde $u(X, t)$ representa a variável conduzida e difundida, $v = v_1, \dots, v_\kappa$ a velocidade constante e positiva do fluido, d o parâmetro constante e positivo de difusão.

2.2 Método ADI

O método de direções alternadas (ADI) foi primeiro sugerido por Douglas e Peaceman [10], Douglas [11], e Peaceman e Rachford [31], nos anos 50, para a solução da equação do calor em duas dimensões espaciais.

Em problemas de dimensão κ , os métodos do tipo ADI são métodos de κ passos. Para um problema bidimensional ($\kappa = 2$) por exemplo, a atualização das variáveis da discretização espacial é dividida em dois subconjuntos sendo um para cada direção espacial. No primeiro passo um subconjunto é atualizado por um método explícito e o outro subconjunto por um método implícito. No segundo passo as atualizações são invertidas. Então, o subconjunto que foi atualizado por um método explícito é nesse passo atualizado por um método implícito e vice-versa, simetrizando as atualizações.

Considere a equação de convecção-difusão (2.1) para o caso $\kappa = 2$, com condições de contorno e iniciais adequadas,

$$u_t + v_1 u_x + v_2 u_y = d(u_{xx} + u_{yy}). \quad (2.2)$$

Uma versão da técnica ADI para (2.2) é o método de Peaceman-Rachford [31] baseado na formulação que se segue,

$$\begin{aligned}
 u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n + \delta t \, d \left[\frac{u_{i-1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] - \delta t \, v_1 \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{2\Delta x} \right] + \\
 &\quad \delta t \, d \left[\frac{u_{i,j-1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right] - \delta t \, v_2 \left[\frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right] \\
 u_{i,j}^{n+2} &= u_{i,j}^{n+1} + \delta t \, d \left[\frac{u_{i,j-1}^{n+2} - 2u_{i,j}^{n+2} + u_{i,j+1}^{n+2}}{\Delta y^2} \right] - \delta t \, v_2 \left[\frac{u_{i,j+1}^{n+2} - u_{i,j-1}^{n+2}}{2\Delta y} \right] + \\
 &\quad \delta t \, d \left[\frac{u_{i-1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] - \delta t \, v_1 \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{2\Delta x} \right]
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Onde:

$$0 \leq t \leq T ,$$

$$0 \leq x \leq 1 ,$$

$$0 \leq y \leq 1 ,$$

$$\Delta t = t_{n+2} - t_n ,$$

$$\delta t = \frac{\Delta t}{2} = t_{n+1} - t_n ,$$

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i \quad \text{e}$$

$$\Delta y = y_{i+1} - y_i .$$

Note que o método (2.3) é um método de dois passos em que valores intermediários $u_{i,j}^{n+1}$ são calculados no primeiro passo. Estes valores intermediários são interpretados como valores da solução num intervalo de tempo intermediário $n+1$, por isso aparece o fator de tamanho $\delta t = \frac{\Delta t}{2}$ no segundo membro de cada equação em (2.3).

Observe que em cada passo apenas uma das variáveis é atualizada implicitamente. No primeiro passo u_x e u_{xx} são discretizados por um método implícito, u_y e u_{yy} são tratados explicitamente. No segundo passo os papéis são invertidos e assim sucessivamente.

2.3 Método das características modificado(MMOC)

Em 1982 Douglas e Russell [9] apresentaram um método de resolução de equações de convecção-difusão com convecção dominante, que combina o método das características ([6]) com os métodos de diferenças finitas ou com os métodos dos elementos finitos. Esse método é conhecido como método das características modificado (MMOC).

O MMOC é uma modificação do método das características, método este muito utilizado na solução de equações hiperbólicas. A base do método das características é a integração dos intervalos de tempo ao longo das linhas características, linhas no espaço-tempo pelas quais as informações fluem. Esta técnica caracteriza uma abordagem Lagrangeana e minimiza o efeito da dispersão numérica.

No MMOC as linhas características guiam a busca dos valores das variáveis discretas em instantes de tempo precedentes, ao invés de avançar no tempo, como em muitos métodos das características.

O principal problema com MMOC está na busca exata da localização do “pé” da linha característica, ponto da malha correspondente ao valor da variável no intervalo de tempo precedente, assim como na manipulação de condições de contorno. Este fato pode ser uma dificuldade de aplicação do método. Uma das técnicas para evitar que o pé da característica caia fora do domínio é a diminuição do valor do intervalo de tempo. Em alguns casos a reflexão dos valores encontrados no domínio computacional constitui uma solução para esta dificuldade.

A diminuição local do intervalo de tempo (para encurtar o alcance da linha característica em intervalos de tempo anteriores) modifica somente vetores independentes nos sistemas lineares a serem resolvidos, pois a busca da informação em instantes precedentes de tempo é a única contribuição explícita. Excetuando-se isto, a discretização é inteiramente implícita em MMOC.

O desenvolvimento de métodos do tipo MMOC produziu aproximações não oscilatórias sem difusão numérica, usando longos intervalos de tempo em malhas refinadas o suficiente para representar frentes abruptas. Entretanto, o MMOC geralmente apresenta dificuldade na preservação de leis de conservação de massa ([6]) e também dificuldade no tratamento de condições de contorno ([34]). Na busca de um método numérico para superar estas dificuldades, Celia, Russell, Herrera, e Ewing desenvolveram o método Euleriano-Lagrangeano (ELLAM) [4]. Este é um método de elementos finitos seguindo os conceitos do MMOC. O desenvolvimento de ELLAM produz um esquema conservativo [6] que trata condições de contorno sistematicamente. Dessa forma, o ELLAM é uma generalização do MMOC, pois supera suas duas principais deficiências sem perder suas vantagens numéricas.

Uma descrição do MMOC, combinado com equações de diferenças finitas, para a equação de convecção-difusão é exibida a seguir.

Considere a equação de convecção-difusão (2.1) com $\phi = 1$ em uma dimensão espacial,

$$u_t + vu_x = du_{xx}. \quad (2.4)$$

Seja $\bar{x}$ o pé da linha característica. O vetor unitário

$$\tau = (v\Delta t, \Delta t) = (x - \bar{x}, t_{n+1} - t_n)$$

representa a linha característica associada ao transporte $u_t + vu_x$. A derivada na direção τ é dada por

$$\begin{aligned} u_\tau &= \nabla u \cdot \frac{\tau}{\|\tau\|} \\ &= (u_x, u_t) \cdot \frac{(v\Delta t, \Delta t)}{\sqrt{(v\Delta t)^2 + \Delta t^2}} \\ &= (u_x, u_t) \cdot \left(\frac{v\Delta t}{\Delta t\sqrt{1+v^2}}, \frac{\Delta t}{\Delta t\sqrt{1+v^2}} \right) \\ &= (u_x, u_t) \cdot \left(\frac{v}{\sqrt{1+v^2}}, \frac{1}{\sqrt{1+v^2}} \right) \\ &= \left(\frac{vu_x}{\sqrt{1+v^2}}, \frac{u_t}{\sqrt{1+v^2}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+v^2}}(vu_x + u_t). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\sqrt{1+v^2} \quad u_\tau = u_t + vu_x. \quad (2.5)$$

Substituindo (2.5) em (2.4),

$$\sqrt{1+v^2} \quad u_\tau = du_{xx}. \quad (2.6)$$

Note que (2.6) é uma equação parabólica com difusão ao longo da linha característica. O método das características modificado [9] e [16] para aproximação da derivada direcional $\sqrt{1+v^2} u_\tau$ baseia-se na equação de diferenças atrasadas, que é, para uma dimensão,

$$\sqrt{1+v^2} \quad u_\tau^{n+1} \approx \sqrt{1+v^2} \quad \frac{u^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta\tau}. \quad (2.7)$$

Substituindo $\Delta\tau = ||\tau||$ em (2.7),

$$\begin{aligned} \sqrt{1+v^2} \quad u_{\tau}^{n+1} &\approx \sqrt{1+v^2} \quad \frac{u^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t \sqrt{1+v^2}} \\ \sqrt{1+v^2} \quad u_{\tau}^{n+1} &\approx \frac{u^{n+1} - \bar{u}^n}{\Delta t}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Logo, uma discretização para (2.6), e portanto para (2.4), que caracteriza o método das características modificado é dada por

$$u_i^{n+1} = \bar{u}_i^n + \Delta t \, d \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right), \quad (2.9)$$

onde:

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i,$$

$$\bar{u}_i^n = u_i^n(\bar{x}_i^n) = u_i^n(\bar{x}(x_i, t_n)),$$

com $\bar{x}_i = x_i - v\Delta t$ definido como o “pé” da linha característica com origem em (x_i, t_{n+1}) e u_{xx} é discretizado utilizando o método Euler.

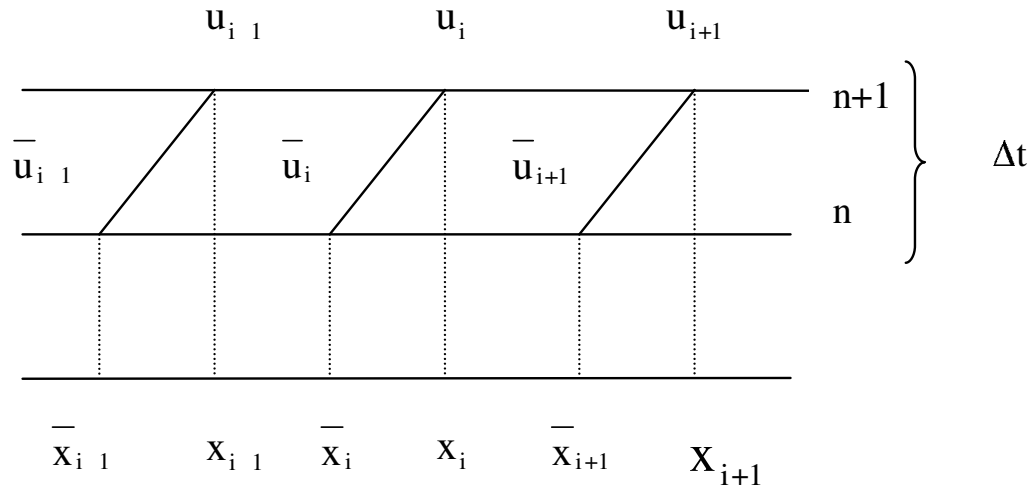


Figura 2.1: Método das características modificado.

De acordo com Douglas e Russell [9], o emprego da interpolação linear no cálculo dos valores $\bar{u}_i^n$, é apropriado quando a convecção é claramente mais importante que a difusão. Se ambas têm importância equivalente, então será mais vantajoso o uso da interpolação quadrática. Observa-se que a necessidade de buscar o valor das variáveis em instantes de tempo precedentes, ocorre somente uma vez para cada ponto da malha. Isto é

uma vantagem na perspectiva do custo computacional. O cálculo implícito no intervalo de tempo $(n+1)$ tem que ser tratado com alguma técnica para problemas elípticos, geralmente iterativa. Observa-se, também, que o valor de $\Delta\tau$ está limitado somente por exigências de precisão, não há limitação envolvendo este valor para garantir a estabilidade de todo o procedimento. É importante ressaltar que a falta da simetria relacionada à velocidade está eliminada e, conseqüentemente, o sistema linear a ser resolvido em cada intervalo de tempo é simétrico positivo definido [19].

2.4 Método Odd-Even Hopscotch(OEH)

O método Odd-Even Hopscotch (OEH) foi primeiro proposto por Gordon em 1965 [20]. Neste trabalho, o autor demonstra a consistência e a estabilidade do OEH aplicado à equação do calor unidimensional, sem discutir condições de contorno e condições iniciais. Gordon concluiu que o método tem o mesmo critério de convergência do método de DuFort-Frankel (DFF), ou seja, é consistente somente quando o quociente entre o comprimento do intervalo de tempo (Δt) e a distância entre os pontos da malha (Δx), tende para zero.

O objetivo principal do método é decompor a atualização temporal das incógnitas em duas partes: uma parte usando um método explícito e outra usando um método implícito. Assim, um intervalo de tempo do OEH é composto de dois semi-passos, ou seja, uma etapa do procedimento está concluída somente após um par de semi-passos explícitos-implícitos. Esta informação é crucial para o método HOPMOC.

Para o primeiro semi-passo do tempo obtém-se a atualização explícita de uma “metade” do conjunto de incógnitas e atualização implícita da outra “metade”. Já para o segundo semi-passo o processo anterior é invertido, isto é, as incógnitas que foram atualizadas implicitamente agora serão atualizadas pelo processo explícito e vice-versa, simetrizando as atualizações. Esta idéia de usar métodos explícitos e métodos implícitos alternadamente em subconjuntos de pontos da malha permite qualificar o OEH como da classe de métodos ADI. É importante observar que, na utilização do OEH, não há a necessidade de se resolver um sistema linear a cada instante de tempo, como acontece em métodos totalmente implícitos.

A formalização matemática do OEH deve-se a Gourlay [21], que descreve a estratégia Hopscotch como um “Peaceman-Rachford splitting”. Algumas tentativas de análise de convergência do OEH foram apresentadas, não tendo sido identificados relatos da aplica-

ção direta do critério de von Neuman [33].

O procedimento apresentado por Boonkamp e Verwer [36] discute condições de estabilidade deste método para uma classe de problemas de advecção-difusão multidimensionais. Através de analogias com o método leapfrog-Du Fort-Frankel mostrou-se que a estabilidade do método Hopscotch não depende do coeficiente de difusão. Entretanto, há uma limitação do intervalo de tempo por causa da discretização simétrica da parte convectiva do operador diferencial, como esperado.

Seja a equação de convecção-difusão (2.4) em uma dimensão espacial, com condições de contorno e condições iniciais apropriadas.

Seja u_i^n uma aproximação para u em (x_i, t_n) . Considere as discretizações centradas de diferenças finitas para (2.4),

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \delta t \left[d \left(\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \right) - v \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) \right] \quad \text{Método explícito,} \quad (2.10)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \delta t \left[d \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right) - v \left(\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) \right] \quad \text{Método implícito .} \quad (2.11)$$

Onde

$$0 \leq x \leq 1 ,$$

$$0 \leq t \leq T ,$$

$$\Delta t = t_{n+2} - t_n ,$$

$$\delta t = \frac{\Delta t}{2} = t_{n+1} - t_n \quad \text{e}$$

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i .$$

Um OEH para (2.4) combina o esquema explícito (2.10) com o esquema implícito (2.11) em pontos alternados da malha, que são divididos em subconjuntos pares e ímpares.

Um valor aproximado u_i^{n+2} atualizado usando o método implícito, em um semipasso do OEH, é dado por

$$u_i^{n+2} = u_i^{n+1} + \delta t \left[d \left(\frac{u_{i-1}^{n+2} - 2u_i^{n+2} + u_{i+1}^{n+2}}{(\Delta x)^2} \right) - v \left(\frac{u_{i+1}^{n+2} - u_{i-1}^{n+2}}{2\Delta x} \right) \right] , \quad (2.12)$$

onde o valor u_i^{n+1} foi obtido com a fórmula explícita,

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \delta t \left[d \left(\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \right) - v \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) \right] . \quad (2.13)$$

Note que a escrita destes semipassos sucessivos do OEH (2.12)-(2.13) é semelhante ao método ADI Peaceman-Rachford (2.3).

Para

$$L_h u_i^n = d \left(\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \right) - v \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right), \quad (2.14)$$

o OEH, de acordo com Gourlay ([22], [23], [24]), pode ser reescrito como

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \delta t (\theta_i^n L_h u_i^n + \theta_i^{n+1} L_h u_i^{n+1}), \quad (2.15)$$

onde

$$\theta_i^n = \begin{cases} 1 & \text{se } (n+i) \text{ é ímpar,} \\ 0 & \text{se } (n+i) \text{ é par.} \end{cases} \quad (2.16)$$

Para um valor de n fixo ao considerar somente os pontos ímpares no instante n , (2.15) é justamente método implícito. Por outro lado, para os pontos pares é empregado o método explícito. Observe que para haver um ciclo completo do método Hopscotch é necessário mais um semipasso, do instante de tempo $n+1$ para o $n+2$.

Escrevendo dois semipassos sucessivos do esquema (2.15) têm-se,

$$\begin{cases} u_i^{n+1} &= u_i^n + \delta t (\theta_i^n L_h u_i^n + \theta_i^{n+1} L_h u_i^{n+1}) \\ u_i^{n+2} &= u_i^{n+1} + \delta t (\theta_i^{n+1} L_h u_i^{n+1} + \theta_i^{n+2} L_h u_i^{n+2}). \end{cases} \quad (2.17)$$

Observa-se que para cada intervalo de tempo de tamanho δt (em cada semipasso), uma metade de pontos da malha é atualizado ou por um método explícito ou por um método implícito. Para completar um ciclo, as atualizações são invertidas.

O resultado global do esquema OEH é uma sequência de cálculos explícitos. Mesmo para as atualizações implícitas todos os valores envolvidos neste processo são conhecidos, pois foram atualizados pelo método explícito. Portanto, não há a resolução de sistemas lineares. Isto torna o OEH um método muito eficiente e, portanto, uma alternativa para resolver problemas de dimensões mais altas.

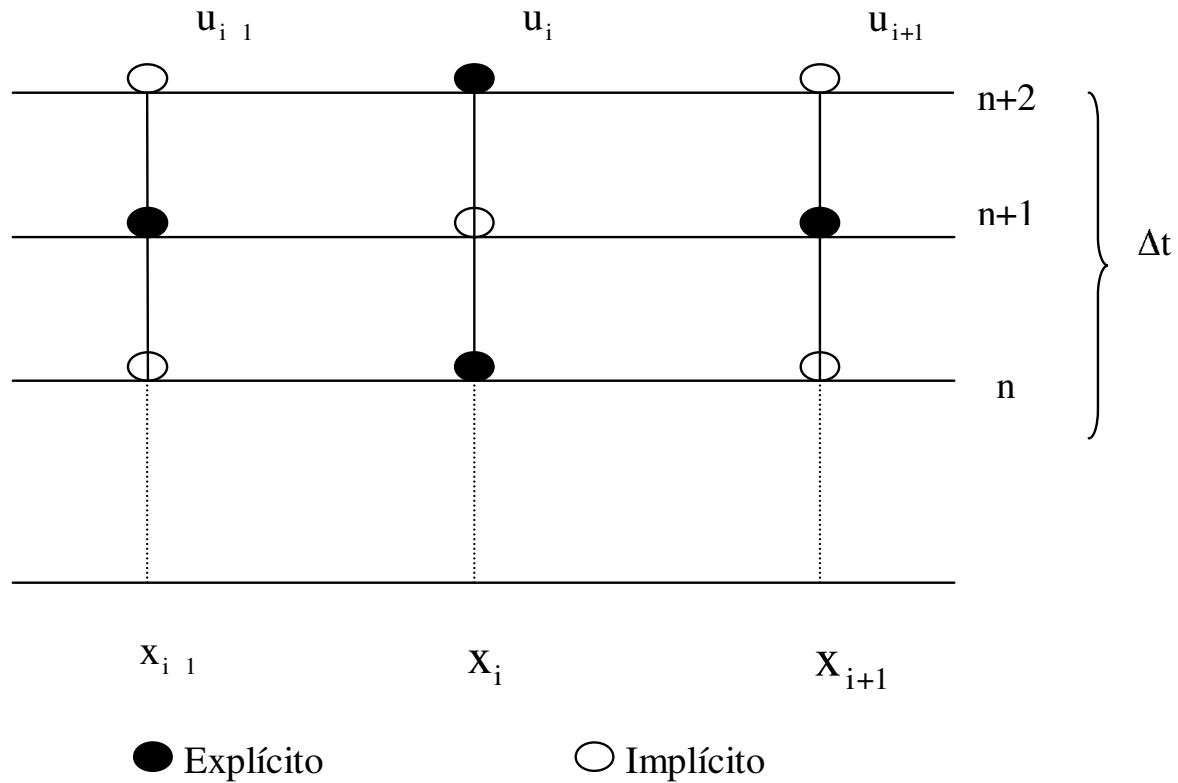


Figura 2.2: Método OEH.

2.5 Método Hopmoc

O método Hopmoc, apresentado por Kischinhevsky em [26] e [27], é baseado no Método das Características modificado MMOC (Douglas e Russell [9]) e no método Hopscotch ([20]). Seguindo a filosofia Hopscotch, o conjunto das variáveis é desacoplado em dois subconjuntos que são atualizados alternadamente por métodos explícitos e implícitos, permitindo o entendimento do Hopmoc como uma técnica similar aos métodos ADI (Douglas e Peaceman [10], Douglas [11], e Peaceman e Rachford [31]). Entretanto, a partir do conceito do MMOC os semipassos são agora construídos ao longo das linhas características. Esta discretização completa ao longo das linhas características caracteriza o Hopmoc como um método do tipo ELLAM (Celia, Russell, Herrera, e Ewing [4]).

O MMOC, por meio da equação de diferenças atrasadas de Euler, coloca toda a contribuição do intervalo de tempo precedente ao longo da derivada direcional da função em relação à linha característica. O Hopmoc utiliza este conceito, e emprega a discretização espacial ao longo da linha característica partindo de todos os pontos da malha, conduzindo assim a uma aproximação semi-lagrangeana. Assim como a técnica Hopscotch, o Hopmoc utiliza dois semipassos de tempo para simetrizar as atualizações explícitas e

implícitas.

Considere N o número de pontos do domínio do problema a cada intervalo de tempo, $\bar{u}_i^{n+1} = u(\bar{x}_i^{n+1})$ o valor da variável u no semipasso anterior de tempo no pé da linha característica $\bar{x}_i^{n+1}$ que parte de x_i^{n+2} , regressivamente (a mesma linha característica permite obter $\bar{u}_i^n$ no semipasso precedente).

Para cada intervalo de tempo de tamanho Δt (ou para cada ciclo completo) o Hopmoc pode ser resumido como:

Primeira etapa: No instante t_n - obter $\bar{u}_i^n$ para todos os pontos $\bar{x}_i^n$, $i = 1, \dots, N$, através de, por exemplo, uma interpolação.

Segunda etapa No instante t_{n+1} - calcular a variável intermediária $\bar{u}_i^{n+1}$ para todos os valores $\bar{x}_i^{n+1}$, que são obtidos dos pontos ímpares x_i^{n+1} (pontos em que a soma $n + 1 + i$ é um número ímpar), através do operador explícito. Logo a seguir, através do operador implícito, calcular os valores $\bar{u}_i^{n+1}$ provenientes dos pontos pares x_i^{n+1} (pontos em que a soma $n + 1 + i$ é um número par), $i = 1, \dots, N$.

Terceira etapa No instante t_{n+2} - calcular, por meio do operador explícito, os valores u_i^{n+2} , para todos os valores correspondentes aos pontos pares. Prosseguindo, calcular, por meio do operador implícito, todos os valores restantes correspondentes aos pontos ímpares x_i^{n+1} , $i = 1, \dots, N$.

A segunda e a terceira etapa são ambas compostas de duas partes: uma atualização explícita e uma implícita. A atualização explícita usa valores atualizados no intervalo de tempo precedente, não necessitando de nenhuma solução de sistema linear. A atualização implícita necessita de valores vizinhos do intervalo de tempo atual. Estes valores foram atualizadas explicitamente e portanto já estão disponíveis, assim nenhum sistema linear é resolvido na atualização implícita. Logo, o método Hopmoc não requer a resolução de nenhum sistema linear.

Seja a equação de convecção-difusão (2.4) em uma dimensão espacial, com condições de contorno e condições iniciais apropriadas.

Seja u_i^{n+2} , n par, uma aproximação para a solução exata u em (x_i, t_{n+2}) . A segunda etapa pode ser escrita como,

$$\begin{cases} \bar{u}_i^{n+1} &= \bar{u}_i^n + \delta t \, d \left(\frac{\bar{u}_{i-1}^n - 2\bar{u}_i^n + \bar{u}_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler explícito,} \\ \bar{u}_i^{n+1} &= \bar{u}_i^n + \delta t \, d \left(\frac{\bar{u}_{i-1}^{n+1} - 2\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler implícito.} \end{cases} \quad (2.18)$$

onde:

$$0 \leq x \leq 1 ,$$

$$0 \leq t \leq T ,$$

$$\Delta t = t_{n+2} - t_n ,$$

$$\delta t = \frac{\Delta t}{2} = t_{n+1} - t_n \text{ e}$$

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i .$$

A terceira etapa pode ser escrita como,

$$\begin{cases} u_i^{n+2} &= \bar{u}_i^{n+1} + \delta t \, d \left(\frac{\bar{u}_{i-1}^{n+1} - 2\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler explícito,} \\ u_i^{n+2} &= \bar{u}_i^{n+1} + \delta t \, d \left(\frac{u_{i-1}^{n+2} - u_i^{n+2} + u_{i+1}^{n+2}}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler implícito.} \end{cases} \quad (2.19)$$

Para o operador de diferenças

$$L_h u_i^n = d \left(\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \right), \quad (2.20)$$

essas duas etapas consecutivas podem ser reescritas como,

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^{n+1} &= \bar{\bar{u}}_i^n + \delta t \left[\theta_i^n L_h \bar{\bar{u}}_i^n + \theta_i^{n+1} L_h \bar{u}_i^{n+1} \right]; \\ u_i^{n+2} &= \bar{u}_i^{n+1} + \delta t \left[\theta_i^n L_h \bar{u}_i^{n+1} + \theta_i^{n+1} L_h u_i^{n+2} \right], \end{aligned} \quad (2.21)$$

para

$$\theta_i^n = \begin{cases} 1 & \text{se } n+i \text{ é par} \\ 0 & \text{se } n+i \text{ é ímpar,} \end{cases} \quad (2.22)$$

O valor $\bar{\bar{u}}_i^n$ é obtido por uma interpolação. Já os valores $\bar{x}_i^{n+1}$ e $\bar{\bar{x}}_i^{n+1}$ são obtidos da seguinte forma:

$$\bar{x}_i^{n+1} = x_i - v \, \delta t \quad \text{e} \quad \bar{\bar{x}}_i^n = x_i - 2v \, \delta t. \quad (2.23)$$

Observa-se que o Hopmoc emprega dois estágios de atualização ao longo das características para cada ponto da malha. Cada ponto desta malha é atualizado uma vez explicitamente e uma vez implicitamente. Isto significa que um ciclo completo do Hopscotch foi realizado.

É importante ressaltar que o desenvolvimento do Hopmoc através da técnica de desacoplamento da atualização das variáveis não requer a solução de sistemas lineares. Isto facilita a paralelização do Hopmoc, pois permite a divisão das variáveis do domínio em subconjuntos alocados a processadores diferentes. Cabral [3] apresenta a implementação paralela do método Hopmoc e do Grupo Hopmoc. Este último se diferencia do Hopmoc na atualização das variáveis em grupos de pontos e não por pontos isolados como no Hopmoc. Outra vantagem do Hopmoc é que seu custo computacional é $O(N)$ por instante de tempo.

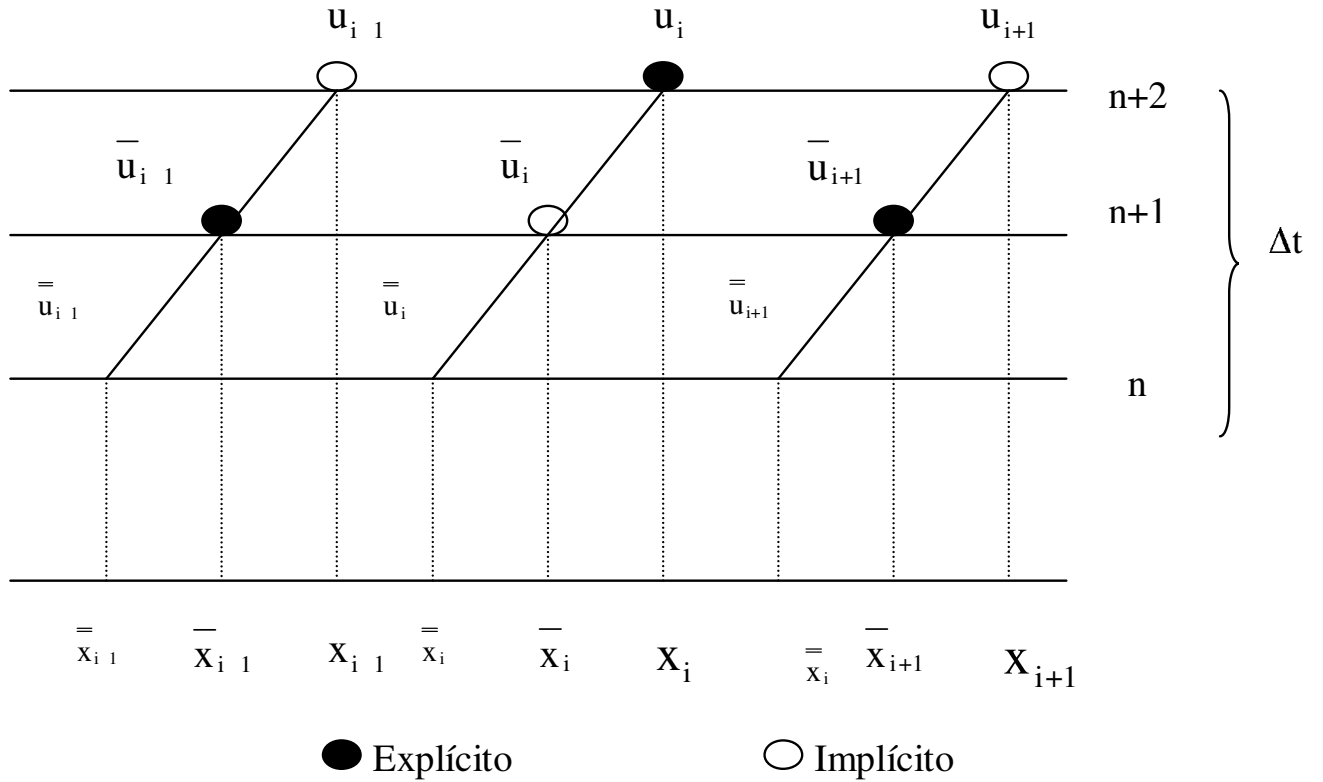


Figura 2.3: Método Hopmoc.

Capítulo 3

Análise teórica de convergência do método Hopmoc

Neste capítulo analisa-se a consistência e a estabilidade do método Hopmoc.

Ao resolver uma EDP numericamente é preciso verificar se a solução encontrada se aproxima, de alguma forma, da solução real da EDP. Esta verificação depende da consistência das equações de diferenças finitas com a EDP, da estabilidade e convergência do método numérico empregado.

A condição de consistência define uma relação entre a equação diferencial e sua formulação discreta correspondente. Para que uma discretização seja consistente com a EDP, seu erro local de truncamento deve tender a zero quando $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$.

A condição de estabilidade estabelece uma relação entre a solução calculada numericamente e a solução exata das equações discretizadas. Um método numérico é estável se quaisquer erros ou perturbação na solução não são amplificados sem limite. Assim, o conceito de estabilidade está relacionado ao crescimento, ou diminuição dos erros introduzidos nos cálculos. O acúmulo destes erros pode ser evitado a partir da determinação do critério de estabilidade do método numérico. Uma das técnicas mais empregadas para obter o critério de estabilidade de uma EDP linear é a análise de von Neumann [33].

A condição de convergência relaciona a solução numérica com a solução exata da EDP. O método numérico é convergente, se a solução numérica no domínio de interesse se aproxima da solução exata da EDP, conforme $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$. Um esquema consistente é inútil se a solução numérica não for convergente. A convergência é uma condição difícil de ser demonstrada diretamente.

Um problema é dito bem posto se ele tem uma única solução que depende continuamente dos dados iniciais e de contorno [6]. Pelo teorema de Lax (Richtmyer e Morton,

[33]), se o PVI for linear e bem posto a consistência e a estabilidade implicam a convergência de um método numérico.

A relação entre os conceitos de consistência, estabilidade e convergência, estabelecida pelo teorema de Lax pode ser esquematicamente expressa como

$$\text{Consistência} + \text{Estabilidade} \rightarrow \text{Convergência}.$$

3.1 Consistência

A análise de consistência do método Hopmoc será feita a partir de um valor aproximado pela fórmula explícita. O mesmo resultado pode ser obtido partindo de um valor aproximado implicitamente, com as expressões implícitas em (2.18) e (2.19).

Seja u_i^{n+2} um valor aproximado de $u(x_i, t_{n+2})$, atualizado utilizando-se a fórmula explícita

$$u_i^{n+2} = \bar{u}_i^{n+1} + \delta t d \frac{(\bar{u}_{i-1}^{n+1} - 2\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1})}{\Delta x^2}. \quad (3.1)$$

Os valores $\bar{u}_i^{n+1}$, da equação (3.1), são obtidos usando a fórmula implícita, ou seja

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{\bar{u}}_i^n + \delta t d \frac{(\bar{u}_{i-1}^{n+1} - 2\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1})}{\Delta x^2}. \quad (3.2)$$

Substituindo (3.2) em (3.1), obtém-se

$$\begin{aligned} u_i^{n+2} &= \bar{\bar{u}}_i^n + \delta t d \frac{(\bar{u}_{i-1}^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1})}{\Delta x^2} \left(\frac{1 - \frac{2\delta t d}{\Delta x^2}}{1 + \frac{2\delta t d}{\Delta x^2}} \right) + \\ &\quad + \delta t d \frac{(\bar{u}_{i-1}^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1})}{\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Agrupando os termos semelhantes de (3.3),

$$(1 + 2\delta t \frac{d}{\Delta x^2}) u_i^{n+2} = (1 - 2\delta t \frac{d}{\Delta x^2}) \bar{\bar{u}}_i^n + 2\delta t \frac{d}{\Delta x^2} (\bar{u}_{i-1}^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}) \quad (3.4)$$

Reescrevendo (3.4)

$$\frac{u_i^{n+2} - \bar{\bar{u}}_i^n}{2\delta t} = d \frac{(\bar{u}_{i-1}^{n+1} - u_i^{n+2} - \bar{\bar{u}}_i^n + \bar{u}_{i+1}^{n+1})}{\Delta x^2} \quad (3.5)$$

Fazendo expansões em Série de Taylor dos termos $\overline{u}_i^n$, $\overline{u}_{i-1}^{n+1}$ e $\overline{u}_{i+1}^{n+1}$ em torno do ponto (x_i, t_n) , têm-se

$$\begin{aligned}\overline{u}_i^n &= u_i^{n+2} - 2\delta t u_t|_i^{n+2} - 2v\delta t u_x|_i^{n+2} + \\ &\quad 2v^2\delta t^2 u_{xx}|_i^{n+2} + 4v\delta t^2 u_{xt}|_i^{n+2} + 2\delta t^2 u_{tt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{2}{3}\delta t^3 v^3 u_{xxx}|_i^{n+2} - 4v^2\delta t^3 u_{xxt}|_i^{n+2} - 4v\delta t^3 u_{xtt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{2}{3}\delta t^3 u_{ttt}|_i^{n+2} + O(\gamma_1)^4;\end{aligned}\tag{3.6}$$

$$\begin{aligned}\overline{u}_{i-1}^{n+1} &= u_i^{n+2} - \delta t u_t|_i^{n+2} - (h + v\delta t)u_x|_i^{n+2} + \\ &\quad \frac{(h + v\delta t)^2}{2}u_{xx}|_i^{n+2} + (h + v\delta t)\delta t u_{xt}|_i^{n+2} + \\ &\quad \frac{\delta t^2}{2}u_{tt}|_i^{n+2} - \frac{(h + v\delta t)^3}{6}u_{xxx}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{(h + v\delta t)^2\delta t}{2}u_{xxt}|_i^{n+2} - \frac{(h + v\delta t)\delta t^2}{2}u_{xtt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{\delta t^3}{6}u_{ttt}|_i^{n+2} + O(\gamma_2)^4;\end{aligned}\tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}\overline{u}_{i+1}^{n+1} &= u_i^{n+2} - \delta t u_t|_i^{n+2} + (h - v\delta t)u_x|_i^{n+2} + \\ &\quad \frac{(h - v\delta t)^2}{2}u_{xx}|_i^{n+2} - (h - v\delta t)\delta t u_{xt}|_i^{n+2} + \\ &\quad \frac{\delta t^2}{2}u_{tt}|_i^{n+2} + \frac{(h - v\delta t)^3}{6}u_{xxx}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{(h - v\delta t)^2\delta t}{2}u_{xxt}|_i^{n+2} + \frac{(h - v\delta t)\delta t^2}{2}u_{xtt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{\delta t^3}{6}u_{ttt}|_i^{n+2} + O(\gamma_3)^4.\end{aligned}\tag{3.8}$$

onde,

$$\begin{aligned}O(\gamma_1)^4 &= \frac{1}{4!} [-2v\delta t u_x - 2\delta t u_t|_i^{n+2}]^4 (a_1, b_1), \\ O(\gamma_2)^4 &= \frac{1}{4!} [-(h + v\delta t)u_x + (-\delta t)u_t]^4 (a_2, b_2), \\ O(\gamma_3)^4 &= \frac{1}{4!} [(h - v\delta t)u_x + (-\delta t)u_t]^4 (a_3, b_3),\end{aligned}\tag{3.9}$$

para valores (a_i, b_i) , tais que:

(a_1, b_1) pertence ao segmento de extremidades (x_i, t_{n+2}) e $(\overline{x}_i, t_n)$;

(a_2, b_2) pertence ao segmento de extremidades (x_i, t_{n+2}) e $(\overline{x}_{i-1}, t_{n+1})$;

(a_3, b_3) pertence ao segmento de extremidades (x_i, t_{n+2}) e $(\overline{x}_{i+1}, t_{n+1})$.

Substituindo (3.6), no primeiro membro da equação (3.5) temos

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{n+2} - \bar{\bar{u}}_i^n}{2\delta t} &= u_t|_i^{n+2} + vu_x|_i^{n+2} - v^2\delta t u_{xx}|_i^{n+2} - 2v\delta t u_{xt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \delta t u_{tt}|_i^{n+2} + \frac{v^3\delta t^2}{3} u_{xxx}|_i^{n+2} + 2v^2\delta t^2 u_{xxt}|_i^{n+2} + \\ &\quad 2v\delta t^2 u_{xtt}|_i^{n+2} + \frac{\delta t^2}{3} u_{ttt}|_i^{n+2} - \frac{O(\gamma_1)^4}{2\delta t}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Substituindo (3.7) e (3.8) no segundo membro da equação (3.5) temos

$$\begin{aligned} \frac{d(\bar{u}_{i-1}^{n+1} - u_i^{n+2} - \bar{\bar{u}}_i^n + \bar{u}_{i+1}^{n+1})}{\Delta x^2} &= \left(1 - \frac{v^2\delta t^2}{\Delta x^2}\right) du_{xx}|_i^{n+2} - \frac{2v\delta t^2}{\Delta x^2} du_{xt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{\delta t^2}{\Delta x^2} du_{tt}|_i^{n+2} + \left(-v\delta t + \frac{v^3\delta t^3}{3\Delta x^2}\right) du_{xxx}|_i^{n+2} + \\ &\quad \left(-\delta t + \frac{3v^2\delta t^3}{\Delta x^2}\right) du_{xxt}|_i^{n+2} + \frac{3v\delta t^3}{\Delta x^2} du_{xtt}|_i^{n+2} + \\ &\quad \frac{\delta t^3}{3\Delta x^2} du_{ttt}|_i^{n+2} - \frac{dO(\gamma_1)^4}{\Delta x^2} + \\ &\quad \frac{d(O(\gamma_2)^4 + O(\gamma_3)^4)}{\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

A partir de (3.10) e (3.11) temos

$$\begin{aligned} &u_t|_i^{n+2} + vu_x|_i^{n+2} - v^2\delta t u_{xx}|_i^{n+2} - 2v\delta t u_{xt}|_i^{n+2} \\ &\quad \delta t u_{tt}|_i^{n+2} + \frac{v^3\delta t^2}{3} u_{xxx}|_i^{n+2} + 2v^2\delta t^2 u_{xxt}|_i^{n+2} + \\ &\quad 2v\delta t^2 u_{xtt}|_i^{n+2} + \frac{\delta t^2}{3} u_{ttt}|_i^{n+2} - \frac{O(\gamma_1)^4}{2\delta t} = \\ &\quad \left(1 - \frac{v^2\delta t^2}{\Delta x^2}\right) du_{xx}|_i^{n+2} - \frac{2v\delta t^2}{\Delta x^2} du_{xt}|_i^{n+2} - \\ &\quad \frac{\delta t^2}{\Delta x^2} du_{tt}|_i^{n+2} + \left(-v\delta t + \frac{v^3\delta t^3}{3\Delta x^2}\right) du_{xxx}|_i^{n+2} + \\ &\quad \left(-\delta t + \frac{3v^2\delta t^3}{\Delta x^2}\right) du_{xxt}|_i^{n+2} + \frac{3v\delta t^3}{\Delta x^2} du_{xtt}|_i^{n+2} + \\ &\quad \frac{\delta t^3}{3\Delta x^2} du_{ttt}|_i^{n+2} - \frac{dO(\gamma_1)^4}{\Delta x^2} + \frac{d(O(\gamma_2)^4 + O(\gamma_3)^4)}{\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Reescrevendo (3.12), temos

$$\begin{aligned}
 \overbrace{u_t|_i^{n+2} = -vu_x|_i^{n+2} + du_{xx}|_i^{n+2} + v^2\delta tu_{xx}|_i^{n+2} +}^{EDP} & \\
 2v\delta tu_{xt}|_i^{n+2} + \delta tu_{tt}|_i^{n+2} - \frac{v^3\delta t^2}{3}u_{xxx}|_i^{n+2} - & \\
 2v^2\delta t^2u_{xxt}|_i^{n+2} - 2v\delta t^2u_{xtt}|_i^{n+2} - \frac{\delta t^2}{3}u_{ttt}|_i^{n+2} - & \\
 \frac{v^2\delta t^2}{\Delta x^2}du_{xx}|_i^{n+2} - \frac{2v\delta t^2}{\Delta x^2}du_{xt}|_i^{n+2} - \frac{\delta t^2}{\Delta x^2}du_{tt}|_i^{n+2} + & \\
 \left(-v\delta t + \frac{v^3\delta t^3}{3\Delta x^2}\right)du_{xxx}|_i^{n+2} + \left(-\delta t + \frac{3v^2\delta t^3}{\Delta x^2}\right)du_{xxt}|_i^{n+2} + & \\
 \frac{3v\delta t^3}{\Delta x^2}du_{xtt}|_i^{n+2} + \frac{\delta t^3}{3\Delta x^2}du_{ttt}|_i^{n+2} + \frac{O(\gamma_1)^4}{2\delta t} + & \\
 \frac{d(O(\gamma_2)^4 + O(\gamma_3)^4 - O(\gamma_1)^4)}{\Delta x^2}. & \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

A partir de (3.13), como $u_t|_i^n - u_{xx}|_i^n = 0$, obtém-se a expressão do erro local de truncamento

$$\begin{aligned}
 \varepsilon &= v^2\delta tu_{xx}|_i^{n+2} + 2v\delta tu_{xt}|_i^{n+2} + \delta tu_{tt}|_i^{n+2} - \frac{v^3\delta t^2}{3}u_{xxx}|_i^{n+2} - \\
 & 2v^2\delta t^2u_{xxt}|_i^{n+2} - 2v\delta t^2u_{xtt}|_i^{n+2} - \frac{\delta t^2}{3}u_{ttt}|_i^{n+2} - \frac{v^2\delta t^2}{\Delta x^2}du_{xx}|_i^{n+2} - \\
 & \frac{2v\delta t^2}{\Delta x^2}du_{xt}|_i^{n+2} - \frac{\delta t^2}{\Delta x^2}du_{tt}|_i^{n+2} + \left(-v\delta t + \frac{v^3\delta t^3}{3\Delta x^2}\right)du_{xxx}|_i^{n+2} + \\
 & \left(-\delta t + \frac{3v^2\delta t^3}{\Delta x^2}\right)du_{xxt}|_i^{n+2} + \frac{3v\delta t^3}{\Delta x^2}du_{xtt}|_i^{n+2} + \frac{\delta t^3}{3\Delta x^2}du_{ttt}|_i^{n+2} + \\
 & \frac{O(\gamma_1)^4}{2\delta t} + \frac{d(O(\gamma_2)^4 + O(\gamma_3)^4 - O(\gamma_1)^4)}{\Delta x^2}. \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

Por (3.9)

$$\frac{1}{2\delta t}O(\gamma_1)^4 = \frac{\delta t^3}{2} \left(\frac{2v^4}{3}u_{xxxx}|_i^{n+2} + \frac{8v^3}{3}u_{xxxt}|_i^{n+2} + 4v^2u_{xxtt}|_i^{n+2} + \frac{v}{3}u_{xttt}|_i^{n+2} + \frac{1}{24}u_{tttt}|_i^{n+2} \right) (a_1, b_1);$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{\Delta x^2}[O(\gamma_2)^4 + O(\gamma_3)^4 - O(\gamma_1)^4] = & \left[\left(\Delta x^2 + 4\Delta x v \delta t + 6v^2\delta t^2 + \frac{4v^3\delta t^3}{\Delta x} + \frac{v^4\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{d}{4!}u_{xxxx}|_i^{n+2} + \right. \\ & \left(\Delta x \delta t + 3v\delta t^2 + \frac{3v^2\delta t^3}{\Delta x} + \frac{v^3\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{4d}{4!}u_{xxxt}|_i^{n+2} + \\ & \left(\delta t^2 + \frac{2v\delta t^3}{\Delta x} + \frac{v^2\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{6d}{4!}u_{xxtt}|_i^{n+2} + \left(\frac{\delta t^3}{\Delta x} + \frac{v\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{4d}{4!}u_{xttt}|_i^{n+2} + \\ & \frac{\delta t^4}{\Delta x^2} \frac{d}{4!}u_{tttt}|_i^{n+2} \Big] (a_2, b_2) + \\ & \left[\left(\Delta x^2 - 4\Delta x v \delta t + 6v^2\delta t^2 - \frac{4v^3\delta t^3}{\Delta x} + \frac{\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{d}{4!}u_{xxxx}|_i^{n+2} - \right. \\ & \left(\Delta x \delta t - 3v\delta t^2 + \frac{3v^2\delta t^3}{\Delta x} - \frac{v^3\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{4d}{4!}u_{xxxt}|_i^{n+2} + \left(\delta t^2 - \frac{2v\delta t^3}{\Delta x} + \frac{v^2\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{6d}{4!}u_{xxtt}|_i^{n+2} - \\ & \left(\frac{\delta t^3}{\Delta x} - \frac{v\delta t^4}{\Delta x^2} \right) \frac{4d}{4!}u_{xttt}|_i^{n+2} + \frac{\delta t^4}{\Delta x^2} \frac{d}{4!}u_{tttt}|_i^{n+2} \Big] (a_3, b_3) - \\ & \left[\frac{\delta t^4}{4!\Delta x^2} (16v^4u_{xxxx}|_i^{n+2} + 64v^3u_{xxxt}|_i^{n+2} + 96v^2u_{xxtt}|_i^{n+2} + 64vu_{xttt}|_i^{n+2} + 16u_{tttt}|_i^{n+2}) \right] (a_1, b_1). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Portanto o erro local de truncamento (3.14) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \varepsilon = & O(\Delta t) + O\left(\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) + O(\Delta t^2) + O\left(\frac{\Delta t^3}{\Delta x^2}\right) + O(\Delta t^3) + O(\Delta x^2) + \\ & O(\Delta t \Delta x) + O\left(\frac{\Delta t^3}{\Delta x}\right) + O\left(\frac{\Delta t^4}{\Delta x^2}\right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Para que a discretização (3.27) seja consistente com a equação diferencial parcial (2.4), ε deve tender a zero quando $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$. Para analisar sob quais condições $\varepsilon \rightarrow 0$, cada termo de (3.16) deve tender a zero quando $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$. Para esse estudo será utilizada técnica semelhante à empregada por Oliveira e Kischinhevsky em [29], baseada em parametrização dos espaçamentos espacial e temporal.

Sejam $m = \epsilon^p, h = \epsilon^q$, com: p, q inteiros positivos, $0 < \epsilon < 1$ e $\epsilon \rightarrow 0$. Suponha que m tenda para zero mais rapidamente do que h . Assim, $\epsilon^p < \epsilon^q$, ou seja, $p > q$. Pretende-se mostrar que $p > q$ é uma condição para o estudo da consistência.

Considere, por exemplo, o termo $\frac{\Delta t}{\Delta x}$. Observe que

$$\lim_{h, m \rightarrow 0} \frac{\Delta t}{\Delta x} = \lim_{h, m \rightarrow 0} \frac{m}{h} = \begin{cases} c & \text{se } p = q \\ \infty & \text{se } p < q \\ 0 & \text{se } p > q. \end{cases}$$

com c constante. Ou seja,

- se $h \rightarrow 0$ com a mesma velocidade que m , isto é, $p = q$, então o limite é um valor constante, não nulo;
- se $h \rightarrow 0$ com uma velocidade maior do que m , isto é, $p < q$, então o limite diverge;
- se $h \rightarrow 0$ com uma velocidade inferior a m , isto é, $p > q$, então o limite é zero.

Conclui-se, portanto, que para $p \leq q$ não se verifica a consistência.

Logo, a partir da hipótese $p > q$ pode-se analisar sob quais condições os termos de $\varepsilon \rightarrow 0$.

Substituindo $m = \epsilon^p$ e $h = \epsilon^q$ em cada termo de ε , em (3.16), têm-se:

1. para o termo $O\left(\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right)$:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} &\approx \frac{\epsilon^{2p}}{\epsilon^{2q}} < 1 \\ \Rightarrow \epsilon^{2p} &< \epsilon^{2q}. \end{aligned} \tag{3.17}$$

Para que a desigualdade (3.17) seja verdadeira é preciso que

$$p > q \Leftrightarrow \epsilon^p < \epsilon^q \Rightarrow m < h. \tag{3.18}$$

2. para o termo $O\left(\frac{\Delta t^3}{\Delta x^2}\right)$:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta t^3}{\Delta x^2} &\approx \frac{\epsilon^{3p}}{\epsilon^{2q}} < 1 \\ \Rightarrow \epsilon^{3p} &< \epsilon^{2q}.\end{aligned}\tag{3.19}$$

Para que a desigualdade (3.19) seja verdadeira é preciso que

$$p > \frac{2}{3}q \Leftrightarrow \epsilon^p < \epsilon^{\frac{2}{3}q} \Rightarrow m < h^{\frac{2}{3}}.\tag{3.20}$$

3. para o termo $O\left(\frac{\Delta t^3}{\Delta x}\right)$:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta t^3}{\Delta x} &\approx \frac{\epsilon^{3p}}{\epsilon^q} < 1 \\ \Rightarrow \epsilon^{3p} &< \epsilon^q.\end{aligned}\tag{3.21}$$

Para que a desigualdade (3.21) seja verdadeira é preciso que

$$p > \frac{1}{3}q \Rightarrow m < h^{\frac{1}{3}}.\tag{3.22}$$

4. para o termo $O\left(\frac{\Delta t^4}{\Delta x^2}\right)$:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta t^4}{\Delta x^2} &\approx \frac{\epsilon^{4p}}{\epsilon^{2q}} < 1 \\ \Rightarrow \epsilon^{4p} &< \epsilon^{2q}.\end{aligned}\tag{3.23}$$

Para que a desigualdade (3.23) seja verdadeira é preciso que

$$p > \frac{1}{2}q \Rightarrow m < h^{\frac{1}{2}}.\tag{3.24}$$

Com base nas desigualdades obtidas em (3.18), (3.20), (3.22) e (3.24), para $h < 1$, tem-se

$$m < h < h^{\frac{2}{3}} < h^{\frac{1}{2}} < h^{\frac{1}{3}} \rightarrow m < h;\tag{3.25}$$

Portanto, conclui-se que a condição suficiente de consistência é que Δt deve tender a

zero mais rapidamente do que Δx , ou seja

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0. \quad (3.26)$$

3.2 Estabilidade

A análise de estabilidade do método Hopmoc foi apresentada por Oliveira, Kischinhevsky e Cabral [30] e utiliza procedimento semelhante ao empregado por Hundsdorfer e Verwer [25], em que a condição espectral é usada para encontrar condições de Δt e Δx que são suficientes e necessárias para demonstrar que o esquema Hopscotch, aplicado ao problema de advecção-difusão com coeficientes constantes, tem um erro de propagação limitado.

O método Hopmoc para a equação de convecção-difusão (2.4) pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \bar{u}^{n+1} &= (I - \delta t I_2 A)^{-1} (I + \delta t I_1 A) \bar{u}^n \\ u^{n+2} &= (I - \delta t I_1 A)^{-1} (I + \delta t I_2 A) \bar{u}^{n+1}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde, $I \in L(\mathbb{R}^\kappa)$, para $L(\mathbb{R}^\kappa)$ definido como o espaço de matrizes reais $\kappa \times \kappa$; $I_1 = \text{diag}(1, 0, 1, 0, \dots, 1, 0)$ e $I_2 = \text{diag}(0, 1, 0, 1, \dots, 0, 1)$ tal que $I_1 + I_2 = I$, a matriz identidade; e $A \in L(\mathbb{R}^\kappa)$, para

$$A = \left[\frac{d}{\Delta x^2} (E^T - 2I + E) \right], \quad \text{e} \quad (3.28)$$

$$E = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & & \\ & 0 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \ddots \\ & & & & & 1 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

tal que, E representa o operador deslocamento em $\mathbb{R}^\kappa$ ou $\mathbb{R}^{\kappa'}$, para $\kappa' = \frac{\kappa}{2}$ e $\Delta x = \frac{1}{\kappa+1}$, para κ par.

Pode-se reescrever (3.27) como,

$$u^{n+2} = T \bar{u}^n, \quad (3.30)$$

onde

$$T = (I - \delta t I_1 A)^{-1} (I + \delta t I_2 A) (I - \delta t I_2 A)^{-1} (I + \delta t I_1 A). \quad (3.31)$$

A condição de estabilidade do esquema é determinada pela matriz T . Desse modo, o esquema Hopmoc (3.31) será estável se e somente se $\rho(T) \leq 1$ ([25]).

Seja a matriz permutação $P \in L(\mathbb{R}^\kappa)$ tal que

$$[Pv]_i = v_{2i-1} \quad \text{e} \quad [Pv]_{\kappa'+i} = v_{2i};$$

para $1 \leq i \leq \kappa'$, $v \in \mathbb{R}^\kappa$, $\kappa' = \frac{1}{2}\kappa$.

Considerando $\beta = \delta t \frac{d}{\Delta x^2}$ e $V = \beta(E^T + I)$, tem-se que a forma permutada de A é A' , então

$$\delta t A' = \delta t (P A P^T) = \begin{bmatrix} -2\beta I & V \\ V^T & -2\beta I \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

Sabe-se que a condição espectral se verifica para T se e somente se essa mesma condição é válida para a matriz $S \in L(\mathbb{R}^k)$ que é semelhante a T . Para $A_1 = \delta t I_1 A$, $A_2 = \delta t I_2 A$ a matriz S é definida por

$$S = (I - A_2)^{-1} (I + A_2) (I - A_1)^{-1} (I + A_1), \quad (3.33)$$

para

$$T = (I - A_1)^{-1} S (I - A_1). \quad (3.34)$$

A forma permutada de S é S' ,

$$S' = P S P^T = \begin{bmatrix} \frac{1-2\beta}{1+2\beta} I & \frac{2}{1+2\beta} V \\ 2 \frac{1-2\beta}{(1+2\beta)^2} V^T & \frac{1-2\beta}{1+2\beta} I + \frac{4}{(1+2\beta)^2} (V^T V) \end{bmatrix}. \quad (3.35)$$

Esta forma permite calcular o raio espectral de S e, desse modo, de T . Para $\nu = \frac{1-2\beta}{1+2\beta}$ e $M = \frac{4}{(1+2\beta)^2} (V^T V)$, pode-se reescrever a matriz anterior

$$S' = \begin{bmatrix} \nu I & \frac{2}{1+2\beta} V \\ 2 \frac{1-2\beta}{(1+2\beta)^2} V^T & \nu I + M \end{bmatrix}. \quad (3.36)$$

Lema 3.2.1 *Sejam $M = \frac{4}{(1+2\beta)^2} (V^T V)$ e $\nu = \frac{1-2\beta}{1+2\beta}$. Tem-se que λ é um autovalor de T se e somente se $\lambda^2 - (\mu + 2\nu)\lambda + \nu^2 = 0$, para algum $\mu \in \sigma(M)$.*

Prova: Seja $\bar{\lambda} = \lambda - \nu$, para $\lambda \in \sigma(T) = \sigma(S')$. Assim, $\lambda \in \sigma(S')$ se e somente se

$S'v = \lambda v$, $v \neq 0$, ou seja, para

$$S' = \begin{bmatrix} \nu I & S_{12} \\ S_{21} & \nu I + M \end{bmatrix}, \quad (3.37)$$

então

$$S' - \lambda I = \begin{bmatrix} \nu I - \lambda I & S_{12} \\ S_{21} & \nu I + M - \lambda I \end{bmatrix}. \quad (3.38)$$

Logo, λ é um auto-valor de S' se e somente se $|S' - \lambda I| = 0$.

$$\begin{aligned} |S' - \lambda I| &= (\nu I - \lambda I)(\nu I + M - \lambda I) - S_{12}S_{21} \\ &= (\nu I)^2 + \nu I.M - \nu I.\lambda I - \lambda I.\nu I - \lambda I.M + (\lambda I)^2 - S_{12}S_{21} \\ &= (\nu I)^2 + \nu I.M - 2\nu I.\lambda I - \lambda I.M + (\lambda I)^2 - S_{12}S_{21} \\ &= (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 + \nu I.M - S_{12}S_{21}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Tem-se também que,

$$S' - \lambda I = (S' - \lambda I) + 0 = (S' - \lambda I) - \nu I + \nu I = (S' - \nu I) - (\lambda - \nu)I. \quad (3.40)$$

Para $\bar{\lambda} = \lambda - \nu$, $S' - \lambda I = (S' - \nu I) - \bar{\lambda}I$. Então,

$$|S' - \lambda I| = |(S' - \nu I) - \bar{\lambda}I| = 0 \iff \rho(\lambda) = \rho(\bar{\lambda}), \quad (3.41)$$

ou seja, $S'v = \lambda v$, e $(S' - \nu I)v = \bar{\lambda}v$, para $v \neq 0$.

$$(S' - \nu I) - \bar{\lambda}I = \begin{bmatrix} -\bar{\lambda}I & S_{12} \\ S_{21} & M - \bar{\lambda}I \end{bmatrix}, \quad (3.42)$$

Daí,

$$\begin{aligned} |(S' - \nu I) - \bar{\lambda}I| &= (-\bar{\lambda}I)(M - \bar{\lambda}I) - S_{12}S_{21} \\ &= -\bar{\lambda}I.M + (\bar{\lambda}I)^2 - S_{12}S_{21}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Como $|S' - \lambda I| = |(S' - \nu I) - \bar{\lambda} I|$, tem-se que

$$\begin{aligned}
 (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 + \nu I.M - S_{12}S_{21} &= -\bar{\lambda} I.M + (\bar{\lambda} I)^2 - S_{12}S_{21} \iff \\
 (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 + \nu I.M &= -\bar{\lambda} I.M + (\bar{\lambda} I)^2 \iff \\
 (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 &= -\bar{\lambda} I.M + (\bar{\lambda} I)^2 - \nu I.M \iff \\
 (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 &= (\bar{\lambda} I)^2 - (\bar{\lambda} + \nu)I.M \iff \\
 (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 &= \bar{\lambda}^2.I^2 - (\bar{\lambda} + \nu)M \iff \\
 (\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 &= \bar{\lambda}^2.I - (\bar{\lambda} + \nu)M. \tag{3.44}
 \end{aligned}$$

Como visto, para $\bar{\lambda} \in \sigma(S' - \nu I)$, então $(S' - \nu I)v = \bar{\lambda}v$, para $v \neq 0$, portanto

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} 0 & S_{12} \\ S_{21} & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{\lambda}v_1 \\ \bar{\lambda}v_2 \end{bmatrix} \iff \\
 \begin{cases} \bar{\lambda}v_1 = S_{12}v_2 \\ \bar{\lambda}v_2 = S_{21}v_1 + Mv_2 \end{cases} &\tag{3.45}
 \end{aligned}$$

Os autovetores v_1 e v_2 existem se e somente se $\bar{\lambda}^2 - (\bar{\lambda} + \nu).\mu = 0$.

Seja $\mu \in \sigma(M)$, portanto $Mv' = \mu v'$, para $v' \neq 0$. Como

$$\bar{\lambda}^2.I - (\bar{\lambda} + \nu)M = 0,$$

tem-se

$$\begin{aligned}
 [\bar{\lambda}^2.I - (\bar{\lambda} + \nu)M].v' &= 0 \iff \\
 (\bar{\lambda}^2.I).v' - [(\bar{\lambda} + \nu)M].v' &= 0 \iff \\
 \bar{\lambda}^2.(I.v') - (\bar{\lambda} + \nu)(M.v') &= 0 \iff \\
 \bar{\lambda}^2.v' - (\bar{\lambda} + \nu).\mu.v' &= 0 \iff \\
 [\bar{\lambda}^2 - (\bar{\lambda} + \nu).\mu].v' &= 0. \tag{3.46}
 \end{aligned}$$

Mas $v' \neq 0$, então

$$\bar{\lambda}^2 - (\bar{\lambda} + \nu).\mu = 0. \tag{3.47}$$

Portanto substituindo (3.47) em (3.44), tem-se que

$$(\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 = \bar{\lambda}^2 - (\bar{\lambda} + \nu).\mu = 0. \tag{3.48}$$

Substituindo $\bar{\lambda} = \lambda - \nu$ em (3.48),

$$(\lambda I)^2 - (M + 2\nu I)\lambda I + (\nu I)^2 = \lambda^2 - (\mu + 2\nu)\lambda + \nu^2 = 0. \quad (3.49)$$

Lema 3.2.2 *Vale que $|\lambda| \leq 1 \Leftrightarrow |\mu + 2\nu| \leq 1 + \nu^2$ e $|\nu| \leq 1$.*

Prova: Seja $\beta > 0$. Sabe-se que $\rho(T) \leq 1$ se e somente se $|\lambda| \leq 1$, para λ real e $|\lambda|^2 \leq 1$ para λ complexo. Pelo Lema 3.2.1, $\lambda^2 - (\mu + 2\nu)\lambda + \nu^2 = 0$, ou seja,

$$\lambda = \frac{\mu + 2\nu \pm \sqrt{\Delta}}{2}, \quad \text{com } \Delta = \mu^2 + 4\mu\nu. \quad (3.50)$$

O autovalor λ é um número complexo se, e somente se $\Delta < 0$, mas

$$\begin{aligned} \Delta < 0 &\Leftrightarrow \mu^2 + 4\mu\nu < 0 \\ &\Leftrightarrow \mu(\mu + 4\nu) < 0 \\ &\Leftrightarrow \mu < 0 \quad \text{ou} \quad \mu + 4\nu < 0 \end{aligned}$$

Como $\mu = \frac{4\beta^2}{(1+2\beta^2)}[2 + 2\cos(j\pi\Delta x)]$, $1 \leq j \leq m'$ (Gregory e Karney [37]), então $\mu > 0$, daí

$$\begin{aligned} \Delta < 0 &\Rightarrow \mu + 4\nu < 0 \\ &\Rightarrow 4\nu < -\mu < 0 \\ &\Rightarrow 4\nu < 0 \\ &\Rightarrow \nu < 0. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Para λ complexo a desigualdade $|\lambda|^2 \leq 1$ é sempre válida para $\beta > 0$, isto é,

$$\begin{aligned} |\lambda|^2 \leq 1 &\Leftrightarrow \frac{(\mu + 2\nu) + |\Delta|}{4} \leq 1 \\ &\Leftrightarrow \frac{\mu^2 + 4\mu\nu + 4\nu^2 - \mu^2 - 4\mu\nu}{4} \leq 1 \\ &\Leftrightarrow \nu^2 \leq 1. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Substituindo ν em (3.52),

$$\begin{aligned}
 \nu^2 \leq 1 &\Leftrightarrow \left(\frac{1-2\beta}{1+2\beta} \right)^2 \leq 1 \\
 &\Leftrightarrow \frac{(1-2\beta)^2}{(1+2\beta)^2} \leq 1 \\
 &\Leftrightarrow (1-2\beta)^2 \leq (1+2\beta)^2 \\
 &\Leftrightarrow 1-4\beta+4\beta^2 \leq 1+4\beta+4\beta^2 \\
 &\Leftrightarrow -4\beta \leq +4\beta \\
 &\Leftrightarrow -\beta \leq \beta \\
 &\Leftrightarrow -2\beta \leq 0 \\
 &\Leftrightarrow -\beta \leq 0 \\
 &\Leftrightarrow \beta \geq 0.
 \end{aligned}$$

Supondo $\Delta \geq 0$, a equação admite as raízes reais λ_1, λ_2 , onde $|\lambda| \leq 1$ se, e somente se $|\lambda_1| \leq 1$ e $|\lambda_2| \leq 1$.

Portanto, pode-se escrever $|\lambda_1| + |\lambda_2| \leq 2$ e $|\lambda_1 + \lambda_2| \leq |\lambda_1| + |\lambda_2| \leq 2$. Como $\lambda_1 + \lambda_2 = \mu + 2\nu$, então

$$|\mu + 2\nu| \leq 2. \quad (3.53)$$

Analisando $|\mu + 2\nu|$, como $\mu > 0$ e $\nu \geq 0$ então

$$|\mu + 2\nu| = \mu + 2\nu, \quad (3.54)$$

onde, $\mu = \frac{4\beta^2}{(1+2\beta)^2}(2 + 2\cos x) = \frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2} \frac{2+2\cos x}{4}$, para $x = j\pi\Delta$.

Como $0 \leq \frac{2+2\cos x}{4} \leq 1$, então $\frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2} \frac{2+2\cos x}{4} \leq \frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2}$.

Portanto,

$$\mu \leq \frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2}. \quad (3.55)$$

Substituindo (3.55) em (3.54),

$$|\mu + 2\nu| \leq \frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2} + 2\nu. \quad (3.56)$$

Substituindo ν , em (3.56),

$$\frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2} + 2\nu = \frac{16\beta^2}{(1+2\beta)^2} + \frac{2(1-2\beta)}{1+2\beta} = 1 + \nu^2.$$

Logo,

$$|\mu + 2\nu| \leq 1 + \nu^2. \quad (3.57)$$

Por (3.53) verifica-se que $1 + \nu^2 \leq 2 \Leftrightarrow |\nu| \leq 1$.

$$\begin{aligned} 1 + \nu^2 \leq 2 &\Leftrightarrow \nu^2 \leq 1 = 1^2 \\ &\Leftrightarrow \nu^2 \leq 1^2, \quad \text{como } \nu^2, 1^2 > 0 \\ &\quad \sqrt{\nu^2} \leq \sqrt{1^2} \\ &\Leftrightarrow |\nu| \leq |1| = 1 \\ &\Leftrightarrow |\nu| \leq 1 \end{aligned} \quad (3.58)$$

Para $\beta > 0$ a desigualdade (3.58) é sempre verificada,

$$\begin{aligned} |\nu| \leq 1 &\Leftrightarrow -1 \leq \nu \leq 1 \\ -1 \leq \nu &\Leftrightarrow -1 \leq \frac{1-2\beta}{1+2\beta} \\ &\Leftrightarrow -(1+2\beta) \leq 1-2\beta \\ &\Leftrightarrow -1 \leq 1; \\ \nu \leq 1 &\Leftrightarrow \frac{1-2\beta}{1+2\beta} \leq 1 \\ &\Leftrightarrow 1-2\beta \leq 1+2\beta \\ &\Leftrightarrow -4\beta \leq 0; \\ &\Leftrightarrow -\beta \leq 0; \\ &\Leftrightarrow \beta \geq 0; \end{aligned}$$

Portanto $|\nu| \leq 1$, para $\beta > 0$. Por (3.57) e (3.58)

$$|\mu + 2\nu| \leq 1 + \nu^2 \leq 2.$$

Assim,

$$|\lambda| \leq 1 \Leftrightarrow |\mu + 2\nu| \leq 1 + \nu^2 \quad \text{e} \quad |\nu| \leq 1. \quad (3.59)$$

Teorema 3.2.1 *O método Hopmoc para a equação de convecção (2.4) é incondicionalmente estável.*

Prova: Pelo Lema 3.2.2,

$$-(1 + \nu^2) \leq \mu + 2\nu \leq 1 + \nu^2. \quad (3.60)$$

Por (3.60) tem-se

$$-(1 + 2\nu + \nu^2) \leq \mu \leq (1 - 2\nu + \nu^2) \Leftrightarrow -(1 + \nu)^2 \leq \mu \leq (1 - \nu)^2. \quad (3.61)$$

Substituindo μ em (3.61),

$$-(1 + \nu)^2 \leq \frac{4\beta^2}{(1 + 2\beta)^2} (2 + 2 \cos j\pi \Delta x) \leq (1 - \nu)^2 \quad (3.62)$$

Substituindo ν em (3.62),

$$-1 \leq \beta^2 [2 + 2 \cos(j\pi \Delta x)] \leq 4\beta^2. \quad (3.63)$$

Por (3.63)

$$-\frac{1}{4} \leq \beta^2. \quad (3.64)$$

Como β^2 é positivo, a desigualdade (3.63) é válida para qualquer β , ou seja, o método Hopmoc para a equação de convecção (2.4) é incondicionalmente estável.

Capítulo 4

Análise computacional de convergência do método Hopmoc

Neste capítulo uma outra etapa de análise do método Hopmoc é feita. Esta análise emprega cálculos computacionais para verificar o grau de coerência entre os resultados teóricos, obtidos no capítulo 3, e os resultados numéricos, obtidos a partir de simulações. Para as simulações utilizou-se como modelo a evolução de um pulso gaussiano através da convecção e difusão [15]. Na programação utilizou-se a linguagem C [2] e o visualizador usado nos gráficos foi o Gnuplot [18].

Seja equação de convecção-difusão (2.4) em uma dimensão espacial, com velocidade $v = 1$ e coeficiente de difusão $d = \frac{2.0}{Re}$. A partir daí, esta equação é reescrita como,

$$u_t + u_x - \frac{2.0}{Re} u_{xx} = 0. \quad (4.1)$$

A solução exata de (4.1), em um domínio contínuo, é

$$U(x, t) = \frac{\exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x-x_o-t)^2}{\phi(t)} \right]}{\sqrt{\phi}}, \quad (4.2)$$

onde

$$\phi(t) = \phi_o \left[1 + \frac{4t}{Re\phi_o} \right], \quad (4.3)$$

x_o é a localização inicial do centro do pulso, $Re = \frac{\gamma L v}{\psi}$ é denominado número de Reynolds, onde γ, L, v e ψ representam a densidade, um comprimento característico do escoamento, uma velocidade característica e a viscosidade, respectivamente do fluido. ϕ_o é a amplitude do pulso gaussiano.

Foram realizadas simulações para um pulso gaussiano de amplitude 0.0004, cuja

localização inicial do centro é 0.2. A condição inicial e a condição de contorno assumem o valor exato $U(x, t)$ dado por (4.2), para $0 \leq x \leq 1$, e $0 \leq t \leq T$.

A figura (4.1) mostra a condição inicial e a solução exata para $t = 0.5$, obtida para três diferentes valores de Re : 1000, 2000 e 3000. Estes valores correspondem aos coeficientes de difusão: 0.002, 0.001 e $0.000\overline{6}$, respectivamente.

As simulações foram feitas para estudar o Hopmoc aplicado à equação de convecção-difusão com convecção dominante. Seguindo o mesmo critério usado para o MMOC, é empregada a interpolação linear no cálculo de $\overline{u}_i^n$. Para $v = 1$ a escolha para os valores do coeficiente de difusão: 0.002, 0.001 e $0.000\overline{6}$ é adequada uma vez que evidencia claramente a convecção dominante.

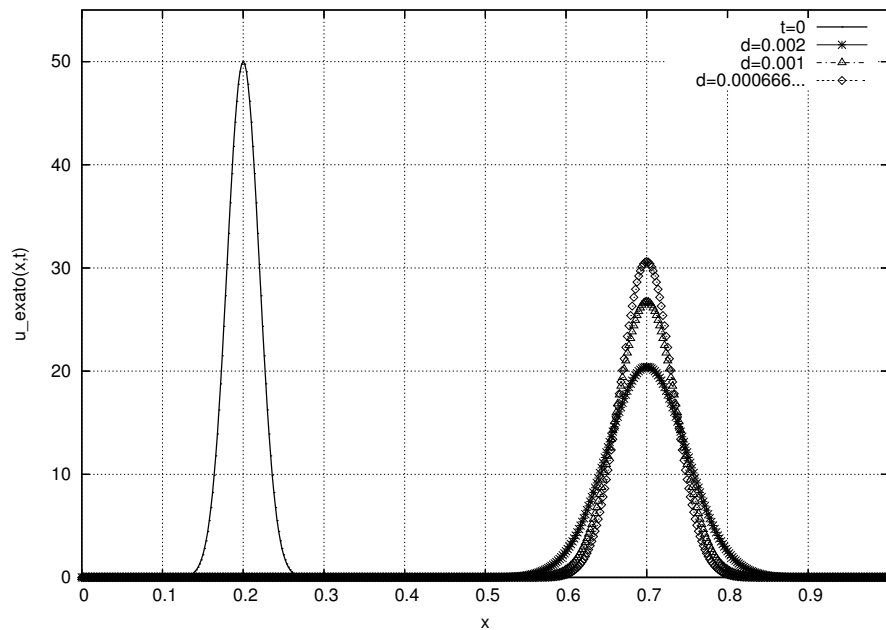


Figura 4.1: Pulso gaussiano: Solução exata - variação do coeficiente de difusão.

Em todas as simulações utilizou-se por tempo final, t , o valor 0.5. Os valores escolhidos para Δt garantiram um número de intervalos de tempo, $nt = \frac{0.5}{\Delta t}$, do tipo inteiro. Esta restrição se faz necessária para evitar a introdução de erros de arredondamento que ocorrem na representação de números reais. Como o método Hopmoc exige dois semipassos, esses erros de representação podem perturbar a simetrização das atualizações das variáveis, descaracterizando o método. Os valores para Δx também não foram escolhidos aleatoriamente. Cada um destes permitiu que o centro do pulso gaussiano fosse um ponto nodal. Isto torna a análise dos resultados numéricos mais completa, pois como o pico do pulso é o valor máximo da função, o erro máximo gerado pela aproximação será proveniente de um ponto da discretização espacial igual ou próximo ao centro do pulso.

Algumas tabelas e gráficos são apresentados para ilustrar os resultados obtidos.

A tabela (4.1) compara o erro máximo obtido para os três valores do coeficiente de difusão d da figura (4.1).

Erros para $\Delta x = 0.001$				
Δt	$\frac{\Delta t}{\Delta x}$	$d = 0.002$	$d = 0.001$	$d = 0.000\bar{6}$
0.0002	0.2	1.5138	3.1551	4.5060
0.00025	0.25	1.4929	2.9897	4.2807
0.0003125	0.3125	1.3215	2.7781	3.9905
0.0004	0.4	1.1678	2.4721	3.5678
0.0005	0.5	0.9876	2.1075	3.0590
0.000625	0.625	0.7549	1.6279	2.3807
0.0008	0.8	0.4141	0.9066	1.3410
0.001	1	0.0012	0.0008	0.0001
0.00125	1.25	0.3154	0.6906	1.0236
0.0015625	1.5625	0.3375	0.7272	1.0742
0.002	2		0.0187	0.0097
0.0025	2.5		0.4776	0.7015
0.003125	3.125		0.1717	0.2535
0.004	4	0.1695	0.0803	0.0457
0.005	5			0.0230
0.00625	6.25		0.2373	0.2788
0.01	10	1.0749	0.5188	0.3011

Tabela 4.1: Variação do erro máximo.

Na tabela (4.1) algumas combinações de Δt e d não geram resultado numérico coerente com o problema. As lacunas representam este efeito. Note que, para o menor valor do coeficiente de difusão, $d = 0.000\bar{6}$, este efeito não se verifica, mesmo para $\Delta t = 0.01$. Em todas as simulações o mesmo comportamento se faz presente e, é acentuado a medida em que a discretização espacial utiliza mais pontos nodais. Por exemplo, para uma malha com 4001 pontos nodais ($\Delta x = 0.00025$), simulações envolvendo 5000 intervalos de tempo ($\Delta t = 0.0001$) não produz resultado numérico para $d = 0.002$ e, geram erro máximo de 0.6887 para $d = 0.001$ e 1.023 para $d = 0.000\bar{6}$.

Outras considerações são feitas sobre o método Hopmoc a partir dos resultados da tabela (4.1). Observa-se que, para $\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$ o erro aumenta a medida em que Δt

diminui. Quando $\frac{\Delta t}{\Delta x} \geq 1$ o erro máximo apresenta oscilações. Se o quociente em questão é um número inteiro, ou seja, se Δt é múltiplo de Δx , obtêm-se, quando existem, as menores taxas do erro. Isto ocorre porque não há erro de interpolação linear envolvido no procedimento. Para os valores do erro em que Δt não é múltiplo de Δx a interpolação linear introduz erros nas atualizações das variáveis e contamina a solução aproximada.

A utilização da interpolação linear se faz presente no cálculo da primeira etapa de cada ciclo do método Hopmoc. Ela é responsável pela estimativa inicial do valor da função, ou seja, a interpolação linear fornece a aproximação da função no pé da linha característica.

Para exemplificar, suponha um ciclo completo do Hopmoc para calcular u_i^{n+2} , onde n é par. Sabe-se que no primeiro semipasso os valores $\bar{u}_i^{n+1}$ são atualizados por $\bar{\bar{u}}_i^n$. Estes são obtidos por interpolação linear a partir dos valores conhecidos, u_i^n , provenientes do semipasso anterior. A interpolação linear é feita como se segue,

$$\bar{\bar{u}}_i^n = \frac{(x_{i-lp} - \bar{\bar{x}}_i)u_{i-lp-1}^n + (\bar{\bar{x}}_i - x_{i-lp-1})u_{i-lp}^n}{(x_{i-lp-1} - x_{i-lp})}, \quad (4.4)$$

onde lp , parte inteira do quociente $\frac{\Delta t}{\Delta x}$, fornece o intervalo de interpolação, ou seja,

$$\bar{\bar{x}}_i \in (x_{i-lp-1}, x_{i-lp}), \quad (4.5)$$

onde $\bar{\bar{x}}_i = x_i - v\Delta t$.

Para $v = 1$, tem-se $\bar{\bar{x}}_i = x_i - \Delta t$ e $x_{i-lp} - x_{i-lp-1} = \Delta x$. Cada ponto da discretização espacial x_i é dado por $x_i = i * \Delta x$, para i inteiro, $i = 0, 1$.

Substituindo lp , $\bar{\bar{x}}_i$ e x_i em (4.4) obtém-se,

$$\bar{\bar{u}}_i^n = \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} - lp \right) (u_{i-lp-1}^n - u_{i-lp}^n) + u_{i-lp}^n. \quad (4.6)$$

A partir da versão (4.6) para o cálculo da interpolação linear, fica mais fácil verificar a causa das variações do erro.

Se $\Delta t < \Delta x$ então, $lp = 0$ e o intervalo de interpolação contém o ponto nodal x_i , ou seja, $\bar{\bar{x}}_i \in (x_{i-1}, x_i)$. Reescrevendo (4.6),

$$\bar{\bar{u}}_i^n = \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right) u_{i-1}^n + \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) u_i^n. \quad (4.7)$$

nota-se que, a medida que Δt diminui, o pé da característica se aproxima de x_i , e então, o fator $(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x})$ aumenta. Isto significa que, maior peso é atribuído ao valor u_i^n e o erro aumenta gradativamente. Mas, o valor que representa a informação trazida na direção de propagação da solução é u_{i-1}^n . Como $\bar{\bar{x}}_i = x_i - \Delta t$, é fácil verificar que, a medida em que Δt diminui, o pé da característica se aproxima de x_i . O resultado esperado é a redução do erro máximo, porém se verifica que se Δt é menor que Δx , o erro aumenta quando Δt diminui.

Se $\Delta t \geq \Delta x$ os erros obtidos nas simulações tem comportamento variado em relação ao quociente $\frac{\Delta t}{\Delta x}$. Se este quociente é um número inteiro as taxas de erro são menores, senão estas sofrem um acréscimo ou uma redução. Para facilitar a compreensão desta variação, a seguir a análise é dividida em dois casos:

1. Δt é múltiplo de Δx .

Nestes casos, a diferença $\frac{\Delta t}{\Delta x} - lp$ em (4.6) é zero. Isto significa que o pé da característica $\bar{\bar{x}}_i$ coincide com um ponto nodal. Então, cada $\bar{\bar{u}}_i^n$ é atualizado diretamente a partir do valor u_{i-lp}^n que foi atualizado após a conclusão de um ciclo do Hopmoc no segundo semipasso n , ou seja,

$$\bar{\bar{u}}_i^n = u_{i-lp}^n \quad (4.8)$$

Assim, os valores $\bar{\bar{u}}_i^{n+1}$ e portanto u_i^{n+2} serão atualizados sem a presença do erro causado pela interpolação linear. Portanto, quando o pé da característica coincide com um ponto nodal de fato não ocorre a interpolação linear. Isto faz com que o erro diminua consideravelmente se comparado às simulações em que há interpolação, como pode ser observado na tabela (4.1).

2. Δt não é múltiplo de Δx .

Nestes casos, de acordo com (4.6), o cálculo do valor interpolado $\bar{\bar{u}}_i^n$ é como segue,

$$\bar{\bar{u}}_i^n = \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} - lp \right) u_{i-lp-1}^n + \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} - lp \right) \right] u_{i-lp}^n. \quad (4.9)$$

Na tabela 4.1 observa-se que, se Δt assume o valor 0.00125 ou 0.0015625, o pé da característica cai no intervalo imediatamente à esquerda do intervalo que contém x_i , pois $lp = 1$. De forma análoga ao que foi feito para os casos que Δt é menor que Δx , se o pé da característica cai mais próximo de x_{i-lp} o fator $\left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} - lp \right) \right]$ tem maior peso. Entretanto, neste caso onde Δt é maior que Δx a redução do valor de Δt implica na redução do valor erro.

Analisando um mesmo intervalo de interpolação para Δt maior que Δx , se o pé da característica se aproxima de x_{i-lp} , e portanto de x_i , o erro diminui. Portanto, se Δt diminui o erro diminui.

Já foi mencionado que o aumento do valor do coeficiente de difusão acarreta obtenção de resultado numérico sem correspondência com o problema para algumas combinações de Δt e Δx . Porém, essa ausência resultado se justifica também pelo uso da interpolação linear no método Hopmoc. As expressões (2.18) e (2.19), mostram como é feita a atualização das variáveis e são recordadas aqui,

$$\begin{cases} \bar{u}_i^{n+1} &= \bar{u}_i^n + \delta t \, d \left(\frac{\bar{u}_{i-1}^n - 2\bar{u}_i^n + \bar{u}_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler explícito,} \\ \bar{u}_i^{n+1} &= \bar{u}_i^n + \delta t \, d \left(\frac{\bar{u}_{i-1}^{n+1} - 2\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler implícito.} \end{cases} \quad (4.10)$$

$$\begin{cases} u_i^{n+2} &= \bar{u}_i^{n+1} + \delta t \, d \left(\frac{\bar{u}_{i-1}^{n+1} - 2\bar{u}_i^{n+1} + \bar{u}_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler explícito,} \\ u_i^{n+2} &= \bar{u}_i^{n+1} + \delta t \, d \left(\frac{u_{i-1}^{n+2} - 2u_i^{n+2} + u_{i+1}^{n+2}}{\Delta x^2} \right), \text{ Euler implícito.} \end{cases} \quad (4.11)$$

O fator $\frac{\delta t}{\Delta x^2} d$ pode ser reescrito como $\frac{\Delta t}{2\Delta x^2} d$. Para um mesmo Δx e para Δt suficientemente grande, o acréscimo de d incrementa os erros trazidos pela interpolação e não fornece resultado numérico. Para um mesmo d o refinamento da malha introduz mais cálculos, logo para Δt suficientemente grande a perda de resultado se faz mais expressiva.

Se erros de truncamento não permitem que o pé da característica coincida com um ponto nodal, haverá erro proveniente da interpolação linear, mesmo para Δt múltiplo de Δx . Isto justifica a perda de resultado também nestes casos.

Com o objetivo de mostrar que a ausência do valor numérico e a oscilação do valor do erro máximo não estão especificamente relacionados às variações de d , Δt e Δx , mas sim a propagação do erro gerado pela interpolação linear, outras simulações foram feitas substituindo a interpolação linear (4.4) pelo valor exato da função no pé da característica, ou seja,

$$\bar{u}_i^n = U(\bar{x}_i, t_n). \quad (4.12)$$

Os resultados da utilização do Hopmoc sem interpolação linear são mostrados na tabela (4.2).

Erros para $\Delta x = 0.001$							
Δt	$\frac{\Delta t}{\Delta x}$	$d = 0.002$		$d = 0.001$		$d = 0.000\bar{6}$	
		H	H si	H	H si	H	H si
0.0002	0.2	1.5138	0.0253	3.1551	0.0433	4.5060	0.0568
0.00025	0.25	1.4929	0.0316	2.9897	0.0541	4.2807	0.0711
0.0003125	0.3125	1.3215	0.0395	2.7781	0.0677	3.9905	0.0888
0.0004	0.4	1.1678	0.0506	2.4721	0.0866	3.5678	0.1137
0.0005	0.5	0.9876	0.0632	2.1075	0.1083	3.0590	0.1421
0.000625	0.625	0.7549	0.0790	1.6279	0.1354	2.3807	0.1777
0.0008	0.8	0.4141	0.1012	0.9066	0.1733	1.3410	0.2274
0.001	1	0.0012	0.1265	0.0008	0.2166	0.0001	0.2843
0.00125	1.25	0.3154	0.1581	0.6906	0.2708	1.0236	0.3553
0.0015625	1.5625	0.3375	0.1976	0.7272	0.3385	1.0742	0.4441
0.002	2		0.2529	0.0187	0.4332	0.0097	0.5684
0.0025	2.5		0.3160	0.4776	0.5414	0.7015	0.7104
0.003125	3.125		0.3950	0.1717	0.6765	0.2535	0.8878
0.004	4	0.1695	0.5054	0.0803	0.8655	0.0457	1.1359
0.005	5		0.6315		1.0815	0.0230	1.4190
0.00625	6.25		0.7889	0.2373	1.3512	0.2788	1.7729
0.01	10	1.0749	1.2599	0.5188	2.1572	0.3011	2.8301

Tabela 4.2: Hopmoc com interpolação linear $\times$ Hopmoc sem interpolação linear.

Observa-se nesta tabela 4.2 que, ao utilizar o Hopmoc sem interpolação linear (H si) as aproximações não sofrem acúmulos de erro que impossibilitam na obtenção de resultado numérico e que a solução numérica se aproxima da exata à medida em que Δt diminui.

Também é relevante que, para o Hopmoc com interpolação linear (H), quando $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ não resulta em um número inteiro o erro máximo aumenta se o coeficiente de difusão diminui e que o mesmo comportamento se verifica para todos os valores de Δt e de Δx obtidos com o (H si).

De forma geral, conclui-se que o acúmulo de erros gerados pela interpolação linear influencia a atualização das variáveis contribuindo para o aumento do erro máximo.

As figuras (4.2) e (4.3) mostram a solução aproximada pelo Hopmoc com interpolação linear e sem interpolação linear, respectivamente. Nestas, utilizou-se $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0002$ e $d = 0.001$.

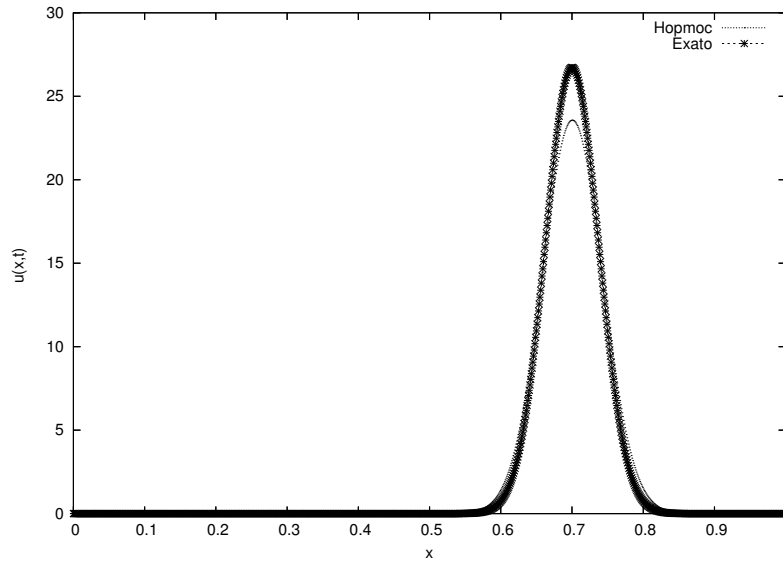


Figura 4.2: Hopmoc com interpolação linear $\times$ Solução exata.

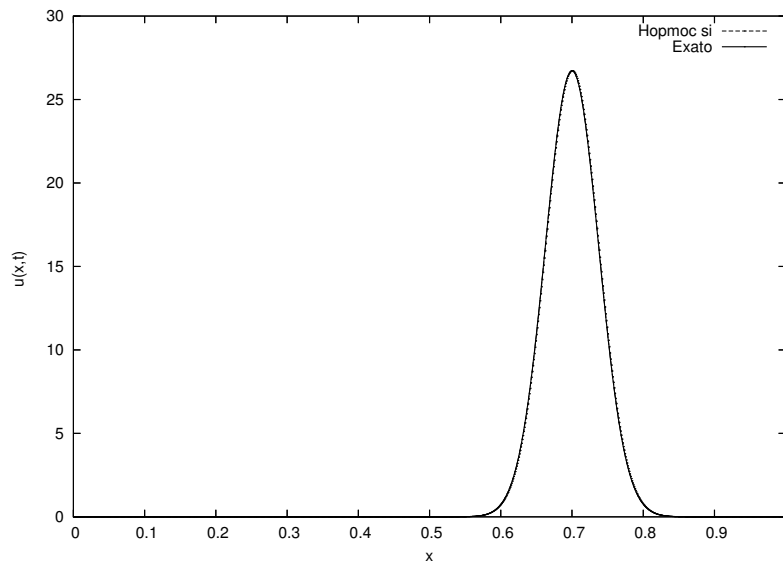


Figura 4.3: Hopmoc sem interpolação linear $\times$ Solução Exata.

Para o Hopmoc com interpolação linear observa-se que, próximo ao centro do pulso o valor aproximado é menor que o valor exato, evidenciando um amortecimento na solução aproximada. O erro máximo obtido é 3.1551. Substituída a interpolação linear pelo valor exato, o erro diminui consideravelmente e é para este caso, 0.0433.

Dando prosseguimento à análise computacional de convergência do Hopmoc, figuras são apresentadas para constatar os resultados teóricos apresentados no capítulo 3.

Para tal estudo, a condição de consistência (3.26) é recordada,

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0. \quad (4.13)$$

Mostrou-se que a condição (4.13) é verificada somente quando Δt tende a zero mais rapidamente que Δx .

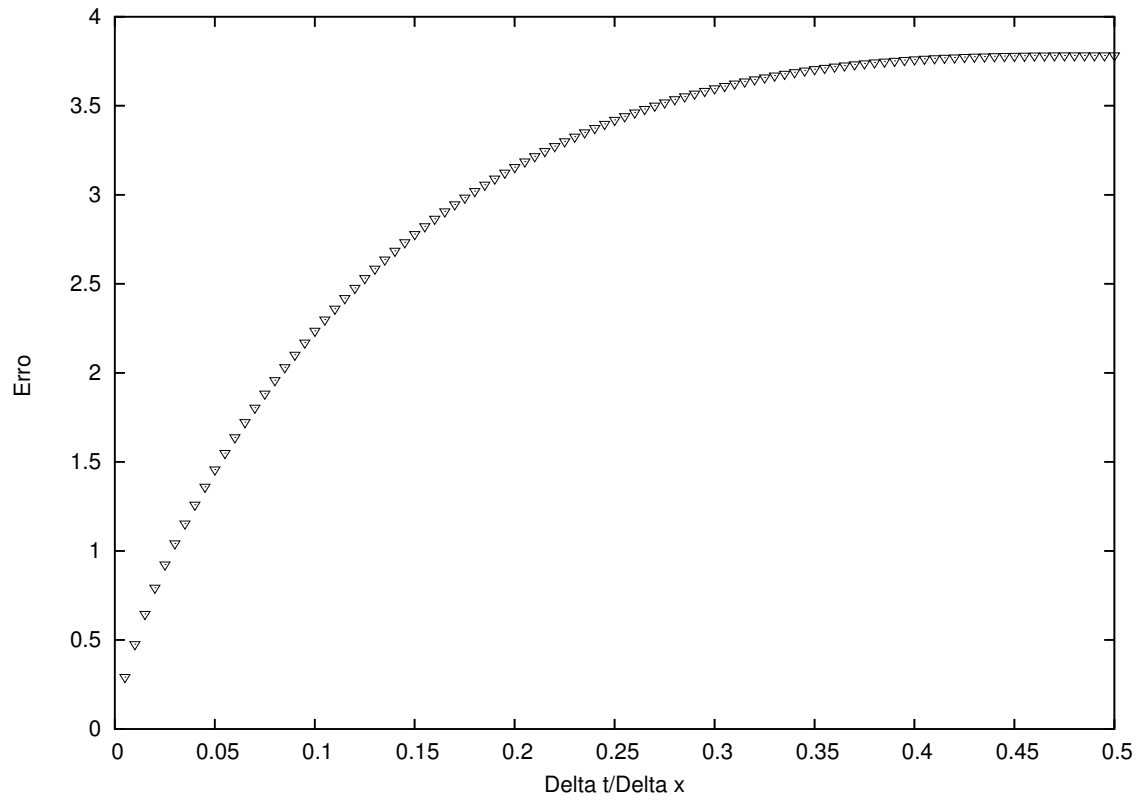


Figura 4.4: Hopmoc.

A figura (4.4) mostra a convergência do método Hopmoc quando Δt tende para zero com maior velocidade. Note que o erro tende para zero a medida em que o quociente $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ tende para zero. São utilizados os valores de partida $\Delta x = 0.002$ e $\Delta t = 0.001$. Nestas simulações Δx é dividido por 2 e Δt por 5, sucessivamente.

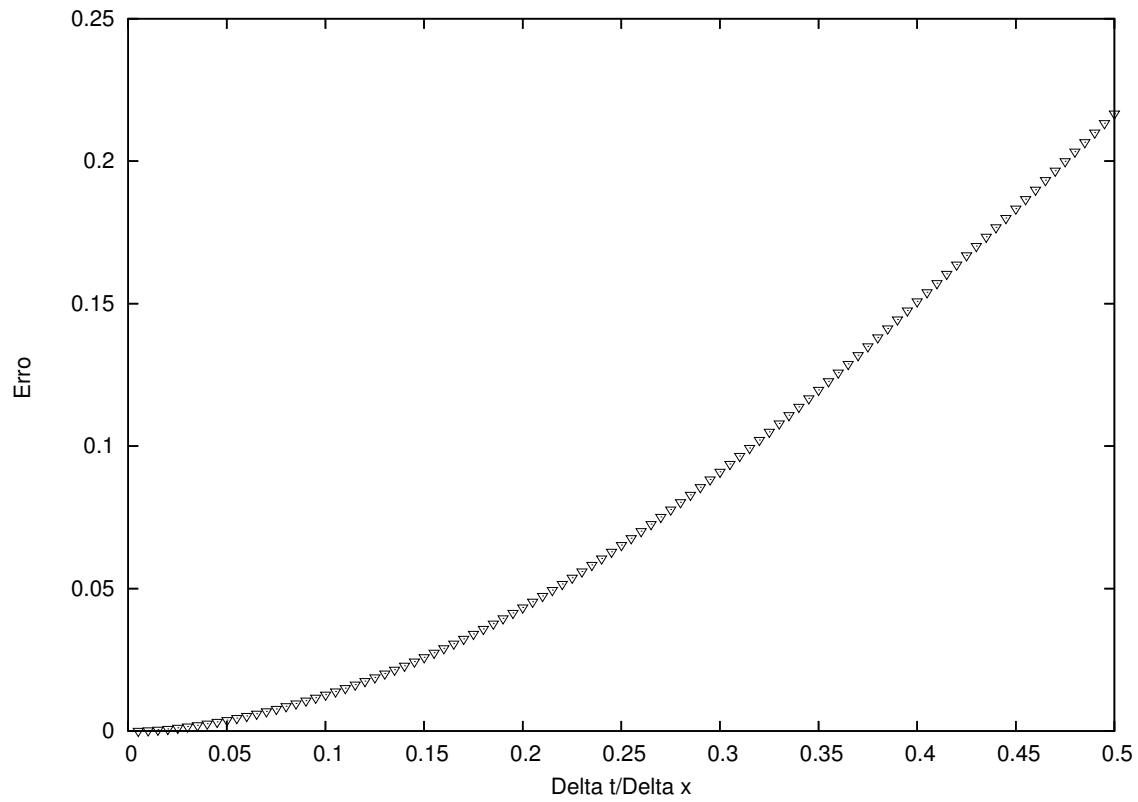


Figura 4.5: Hopmoc sem interpolação linear.

A figura (4.5) mostra o resultado da convergência do método sem a utilização da interpolação linear. Comparando esta figura com (4.4) percebe-se que o método Hopmoc converge mais lentamente, pois está contaminado pela interpolação linear, ou seja, a interpolação linear reduz a velocidade de convergência.

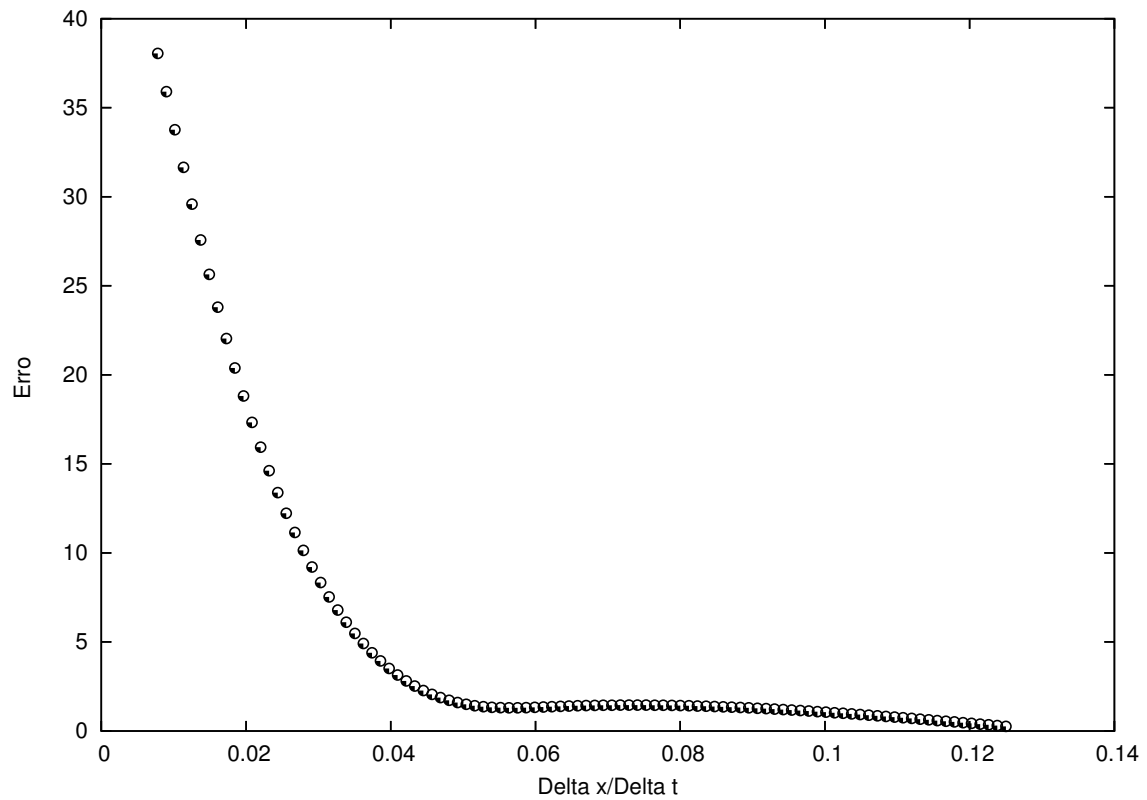


Figura 4.6: Hopmoc.

A figura (4.6) mostra que, se Δx tende para mais rapidamente que Δt o erro aumenta, ou seja, $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ adquire cada vez mais importância e passa a dominar o erro de truncamento. Portanto, a aproximação que é obtida neste caso não se refere à equação discreta. Os valores de partida são $\Delta x = 0.00625$ e $\Delta t = 0.05$. Estes são divididos respectivamente por 4 e por 2, sucessivamente.

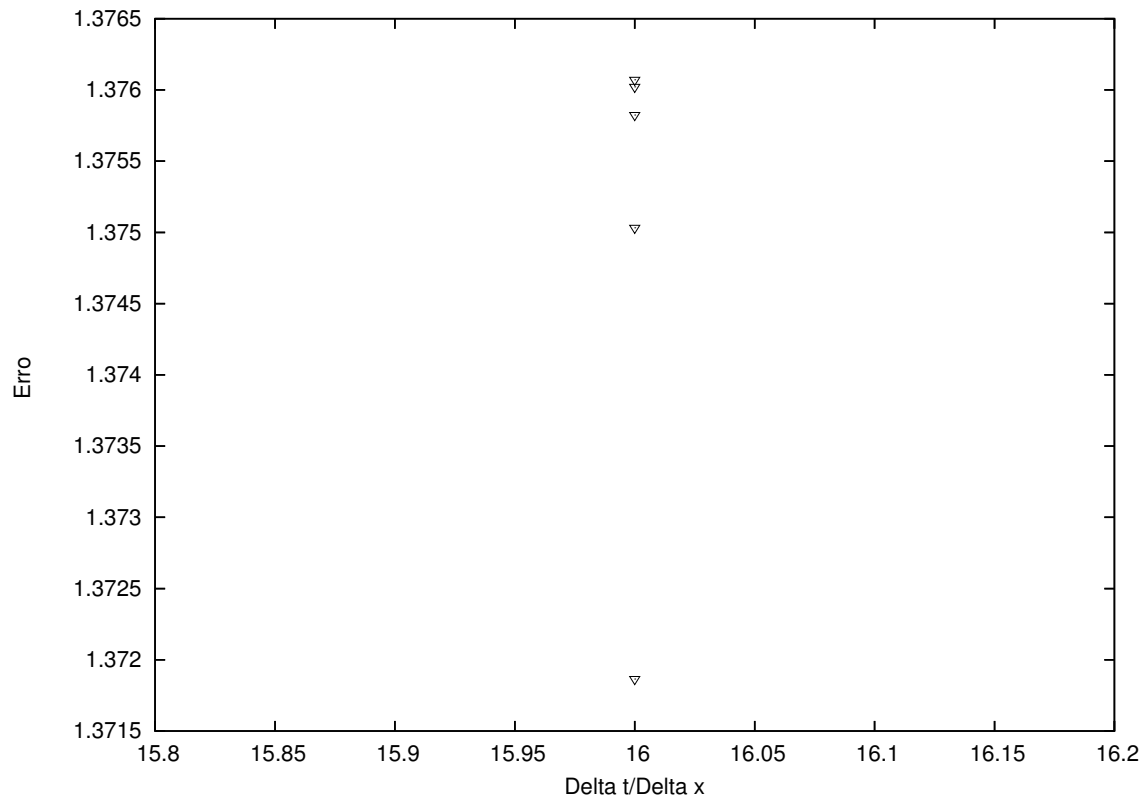


Figura 4.7: Hopmoc.

A figura (4.7) mostra o resultado de simulações em que o quociente $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ é um valor constante, 16 neste exemplo. Para auxiliar a compreensão dessa figura, observe a tabela 4.3.

Δx	Δt	Erro
0.00009765625	0.0015625	1.37607
0.0001953125	0.003125	1.37602
0.000390625	0.00625	1.37582
0.00078125	0.0125	1.37503
0.0015625	0.025	1.37186

Tabela 4.3: Hopmoc - Δt e Δx tendem para zero com a mesma velocidade.

Note que nestas simulações Δx e Δt assumem os respectivos valores de partida, 0.0015625 e 0.025. Estes são divididos por 2, sucessivamente. Conclui-se que se Δx e Δt tendem a zero com a mesma velocidade, o erro aumenta evidenciando que, também neste caso, a aproximação obtida não se refere a equação discreta.

Os resultados mostram que, respeitada a condição de consistência, o método Hopmoc é incondicionalmente estável, apesar dos erros introduzidos nas atualizações das variáveis pela utilização da interpolação linear. Portanto, a análise computacional de convergência confirma a análise teórica feita no capítulo 3.

Capítulo 5

Conclusão

Para a análise de consistência utilizou-se a parametrização do erro em função dos espaçamentos que caracterizam a discretização espacial e temporal, permitindo o estudo da aproximação.

A técnica empregada na análise de estabilidade do Hopmoc foi desenvolvida neste trabalho. Esta técnica foi construída a partir de técnica semelhante usada por Hundsdorfer e Verwer [25] na análise de estabilidade do método Hopscotch.

A análise de estabilidade mostrou que o esquema de discretização do método Hopmoc apresentado é incondicionalmente estável, entretanto a exigência da consistência limita a escolha dos valores de Δt e de Δx . Uma escolha que não respeita a condição de consistência conduz a resultados que não correspondem às aproximações da equação de convecção-difusão mas sim de alguma outra equação.

A análise computacional confirmou os resultados teóricos, apesar de influenciada pelos efeitos decorrentes da interpolação. A etapa de interpolação pode ser substituída por procedimentos de controle de fluxo numérico (TVD) [6] na determinação dos valores nos pés das linhas características.

Estão sendo examinadas a aplicabilidade do método Hopmoc para malhas não uniformes e também a possibilidade do uso do Hopmoc com uma formulação de elementos finitos de Galerkin.

Referências

- [1] K. Aziz and A. Setari, Petroleum Reservoir Simulation, Applied Science Publisher, (1979).
- [2] F.L Cabral, Métodos Hopmoc para a resolução de equações de convecção-difusão e sua implementação paralela, *IC/UFF*, Dissertação de Mestrado, IC/UFF (2001).
- [3] M.A. Celia, T.F. Russell, I. Herrera e R.E. Ewing, An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation, *Adv. in Water Resources*, 13 (1990) 187-206.
- [4] D.M. Cláudio e J.M. Marins, Cálculo Numérico Computacional 2, *Editora Atlas*, São Paulo, (1993).
- [5] J.A. Cuminato e M. Meneguette Jr, Discretização de equações diferenciais parciais: Técnicas de diferenças finitas, <http://www.lcad.icmc.usp.br/projetos/siae98/livro-poti/poti.pdf>, USP São Paulo, (2002).
- [6] C. Cunha, Métodos numéricos para as engenharias e ciências aplicadas, *Editora da Unicamp*, Campinas, (1993)
- [7] M. C. C. Cunha, Métodos numéricos, *Editora da Unicamp*, Campinas, (2000)
- [8] J. Douglas Jr. e T.F. Russel, Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures, *SIAM J. Numer. Anal.*, 19 (1982) 871-885.
- [9] J. Douglas Jr. e D. Peaceman, Numerical solution of two-dimensional heat flow problems, *A.I.Ch.E. Jour.*, 1 (1955) 505-512.
- [10] J. Douglas Jr., On the numerical integration of $u_{xx} + u_{yy} = u_t$ by implicit methods, *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 3 (1955) 42-65.
- [11] J. Douglas Jr. e J.E. Gunn, A general formulation of alternating direction methods, *Numer. Math.*, 6 (1964) 428-453.
- [12] J. Douglas Jr., Alternating direction iteration for mildly nonlinear elliptic difference equations, *Numer. Math.*, 3 (1961) 92-98.
- [13] J. Douglas Jr., Alternating direction methods for three space variables, *Numer. Math.*, 4 (1962) 41-63.
- [14] D.G. Duffy, Unsteady viscous flow around a circular cylinder found by hopscotch scheme on a vector processing machine, *Appl. Numer. Math.*, 6 (1990) 195-208.

- [15] R.E. Ewing, T.F. Russel e M.F. Wheeler, Simulation of miscible displacement using mixed methods and a modified method of characteristics, *Proceedings, Seventh SPE Symposium on Reservoir Simulation*, Paper SPE 12241, Society of Petroleum Engineers, Dallas, Texas (1983) 71-81.
- [16] A.O. Fortuna, Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos, *Edusp*, São Paulo (2000).
- [17] Gnuplot homepage, <http://www.gnuplot.info/>, (2005).
- [18] G.H. Golub e J.M. Ortega, Scientific computing and differential equations: An introduction to numerical methods, *Academic Press*, New York/London (1992).
- [19] P. Gordon, Nonsymmetric difference equations, *SIAM J. Appl. Math.*, 13 (1965) 667-673.
- [20] A.R. Gourlay, Hopscotch: a fast second order partial differential equation solver, *Jour. Inst. Math. Applics.*, 6 (1970) 375-390.
- [21] A.R. Gourlay, Some recent methods for the numerical solution of time-dependent partial differential equations, *Proc. Roy. Soc. London*, A 323 (1971) 219-235.
- [22] A.R. Gourlay, Splitting methods for time dependent partial differential equations, *D. Jacobs, ed., The State of the Art in Numerical Analysis (Academic Press, London/New York/San Francisco)*, (1977) 757-791.
- [23] A.R. Gourlay, e J.Ll. Morris, Hopscotch difference methods for nonlinear hyperbolic systems, *IBM J. Res. Develop.*, 16 (1972) 349-353.
- [24] W.H. Hundsdorfer e J.G. Verwer, Linear stability of the hopscotch scheme, *Appl. Numer. Math.*, 5 (1989) 423-433.
- [25] B. W. Kernighan and D. M. Ritchie, The C Programming Language, Second Edition, Prentice Hall, Inc., (1988).
- [26] M. Kischinhevsky, An operator splitting for optimal message-passing computation of parabolic equation with hyperbolic dominance, *SIAM, Annual Meeting, Kansas City, Missouri*, 1996.
- [27] M. Kischinhevsky, A spatially decoupled alternating direction procedure for convection-diffusion equations, *Proceedings of the XXth CILAMCE-Iberian Latin American Congress on Numerical Methods in Engineering*, (1999).
- [28] D.Y. Kwar, A norm estimate for the ADI method for nonsymmetric problems, *Linear Algebra and Its Applications*, 266 (1997) 127-141.
- [29] S.R.F. Oliveira e M. Kischinhevsky, Análise da consistência do método Odd-Even Hopscotch, *60º Seminário Brasileiro de Análise, IME/UERJ*, (2004).
- [30] S.R.F. Oliveira, M. Kischinhevsky, F.L. Cabral, Convergência do método Hopmoc para a equação de convecção-difusão, *62º Seminário Brasileiro de Análise, UNIRIO*, (2005).

- [31] D.W. Peaceman e H.H. Rachford, The numerical solution of parabolic and elliptic equations, *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 3 (1955) 28-41.
- [32] C. Percy, On convergence of alternating direction procedures, *Numer. Math.*, 4 (1962) 172-176.
- [33] R.D. Richtmyer e K.W. Morton, Difference Methods for Initial-Value Problems, *Interscience, New York*, (1967).
- [34] T. F. Russell, Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Methods for advection-dominated problems, *Longman Scientific and Technical, Harlow, U. K.*, (1990) 206-228.
- [35] G. Starke, Alternating direction preconditioning for nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, 15 (1994) 369-384.
- [36] J.H.M Ten Thije Boonkkamp e J.G.Verwer, On the odd-even hopscotch scheme for the numerical integration of time-dependent partial differential equations, *Appl. Numer. Math.*, 3 (1987) 183-193.
- [37] R.T. Gregory e D.L. Karney, A collection of matrices for testing computational algorithms, *Wiley-Interscience, New York*, (1969).