



UM NOVO MÉTODO PARA INCLUIR CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS EM ESQUEMAS EXPLÍCITOS DE EQUAÇÕES HIPERBÓLICAS UNIDIMENSIONAIS

Adriano Rodrigues de Melo

melo.a.rodrigues@gmail.com

PPGMNE, UFPR, 81531-970, Curitiba, Paraná, Brasil

Instituto Federal Catarinense, IFC, 89245-000, Araquari, Santa Catarina, Brasil

Liliana Madalena Gramani

Eloy Kaviski

l.gramani@gmail.com

eloy.dhs@ufpr.br

PPGMNE, UFPR, 81531-970, Curitiba, Paraná, Brasil

Resumo. *Este trabalho explora a estrutura de malhas uniformes, obtidas a partir de esquemas de diferenças finitas explícitos de equações hiperbólicas lineares, escalonadas por meio da relação incremental $c\Delta t = \Delta x$. Seu objetivo é apresentar formas alternativas e eficientes de inclusão de condições iniciais e de contorno. Experimentos numéricos são realizados e comparações com técnicas tradicionais de inserção são apresentadas. Concluímos que as abordagens propostas favorecem a acurácia dos esquemas explícitos utilizados, sobretudo no que tange a malhas com baixo grau de refinamento.*

Palavras-chave: *Razão de ouro, Erro de Truncamento Local, Condição de Estabilidade, Curvas Características*

1 INTRODUÇÃO

Seja $\Omega = (a, b) \times \mathbb{R}_+^* \subset \mathbb{R}^2$ e consideremos a equação hiperbólica unidimensional

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f, \quad \text{em } \Omega, \quad (1)$$

em que $c > 0$ é a velocidade de onda, f representa uma força externa e a função u um campo de deslocamento ou um campo de pressão. A Eq. (1), conhecida como equação da onda, é um exemplo canônico de equação diferencial hiperbólica.

Estamos interessados em desenvolver estratégias eficientes de inclusão de condições iniciais e de contorno para aproximações por diferenças finitas com mesma ordem de precisão no espaço e no tempo.

Observemos inicialmente o que corre no caso homogêneo. Uma discretização de segunda ordem para a referida equação homogênea é

$$\frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{\Delta t^2} = c^2 \left(\frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{\Delta x^2} \right), \quad 1 \leq i \leq n-1, j \geq 1, \quad (2)$$

em que u_i^j é a notação utilizada para significar que a função u está sendo avaliada no ponto (x_i, t_j) da malha Ψ , de tal forma que $x_i = a + i\Delta x$, $0 \leq i \leq n$, $t_j = j\Delta t$, $0 \leq j \leq q$, $2 \leq n$, $q \in \mathbb{N}$ e $\Delta x = (b-a)/n$, sendo $n+1$ o número de nós da malha e q o número de avanços no tempo.

A condição de estabilidade para a Eq. (2) é $|c\Delta t/\Delta x| \leq 1$ (Strikwerda, 1947; Iserles, 1996). Notemos que o caso limite, $|c\Delta t/\Delta x| = 1$, corresponde à situação em que o erro de truncamento local é nulo. De fato, supondo que $u \in C^\infty$ e usando série de Taylor, podemos substituir a solução verdadeira $u(x, t)$ em (2), para obtermos

$$\left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2 \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\Delta t^{2(k-1)}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial t^{2k}} \right\} \Bigg|_{(x_i, t_j)} = \left\{ c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2c^2 \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\Delta x^{2(k-1)}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \right\} \Bigg|_{(x_i, t_j)}. \quad (3)$$

Mas, como u satisfaz (1) e na hipótese de que $u \in C^\infty$, segue-se então, pelo teorema de Schwarz, que $\frac{\partial^{2k} u}{\partial t^{2k}} = c^{2k} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}}$, $k \geq 1$. Assim, os dois lados de (3) diferem por

$$T_\Psi^2(x_i, t_j) = 2 \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\gamma_k}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \Bigg|_{(x_i, t_j)}, \quad \text{em que } \gamma_k = \Delta t^{2(k-1)} c^{2k} - c^2 \Delta x^{2(k-1)}. \quad (4)$$

Portanto, se $c\Delta t = \Delta x$, então a Eq. (4), que descreve o erro de truncamento local para a aproximação (2), será igual a zero, isto é, $T_\Psi^2(x_i, t_j) = 0$. Em outras palavras, uma função u

de classe C^∞ que satisfaça a Eq. (1), satisfará também o esquema (2), quando $c\Delta t = \Delta x$. Por este motivo, esta relação é chamada de razão de ouro (Strang, 1986), e espera-se uma acurácia perfeita, visto que o esquema é perfeitamente consistente.

Veremos que uma malha Ψ escalonada dessa forma ($c\Delta t = \Delta x$), possui, além dessa interessante propriedade, uma estrutura que contribui com a alocação das condições iniciais e de contorno. Na seção 2 apresentamos a estratégia relacionada às condições iniciais, enquanto que na seção 3, desenvolvemos a abordagem que se refere às condições de contorno do tipo Neumann. Esquemas de alta ordem para problemas homogêneos e não-homogêneos são tratados na seção 4. Estudos de caso são realizados junto à seção 5, com o objetivo de verificar a efetividade dos esquemas propostos e, na seção 6, finalizamos o artigo com as considerações finais e conclusões.

2 A RELAÇÃO $c\Delta t = \Delta x$ E AS CONDIÇÕES INICIAIS

A solução para o problema de Cauchy envolvendo a Eq. (1) é a conhecida fórmula de D'Alembert:

$$u(x, t) = \frac{\phi(x + ct) + \phi(x - ct)}{2} + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} \psi(s) ds + \frac{1}{2c} \int_0^t \int_{x-c(t-\tau)}^{x+c(t-\tau)} f(s, \tau) ds d\tau, \quad (5)$$

em que $\phi(x) = u(x, 0)$ e $\psi(x) = u_t(x, 0)$ são os dados iniciais. Avaliando a Eq. (5) nos pontos $(x_i, \Delta t)$, $1 \leq i \leq n - 1$, da malha Ψ , admitindo que $c\Delta t = \Delta x$, teremos

$$u(x_i, \Delta t) = \frac{\phi(x_{i+1}) + \phi(x_{i-1}))}{2} + \frac{1}{2c} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi(s) ds + \frac{1}{2c} \int_0^{\Delta t} \int_{x_{i-1}+c\tau}^{x_{i+1}-c\tau} f(s, \tau) ds d\tau. \quad (6)$$

Assim, se os incrementos espacial e temporal de uma malha Ψ obedecerem a relação $c\Delta t = \Delta x$, então poderemos utilizar a Eq. (6) no cálculo do primeiro passo de tempo e os dados iniciais estarão inseridos de modo natural. Um problema de valor de contorno que envolva a Eq. (1) e condições de Dirichlet pode ser resolvido com as Eq. (2) e Eq. (6). Caso as condições de contorno sejam naturais (ou de Neumann), então precisaremos utilizar uma estratégia para inseri-las no modelo numérico. É o que será tratado na seção 3, a seguir.

3 A RELAÇÃO $c\Delta t = \Delta x$ E AS CONDIÇÕES DE CONTORNO

Observamos que a malha Ψ possui um padrão bem definido nos contornos esquerdo e direito, conforme esquematizações representadas na Fig. 1.

3.1 Contorno esquerdo ($x = x_0 = a$)

Suponha que $u_x(a, t) = g(t)$ seja prescrito no contorno esquerdo. Integrando a Eq. (1) ao longo do volume $V a_j$ representado na Fig. 1(a) e aplicando o teorema de Green, obtemos

$$\int_{V(a,t_j)} f dx dt = \int_{V(a,t_j)} (u_{tt} - c^2 u_{xx}) dx dt = \oint_L -c^2 u_x dt - u_t dx = \sum_{k=1}^3 \int_{L_k} -c^2 u_x dt - u_t dx. \quad (7)$$

Como estamos estabelecendo que $c\Delta t = \Delta x$, a reta que contém o lado L_1 possui coeficiente angular $\tan = \Delta t / \Delta x = c^{-1}$, isto é, $dt/dx = c^{-1}$, ou melhor, $dx = c dt$. Então, a integral sobre L_1 é

$$\int_{L_1} -c^2 u_x dt - u_t dx = -c \int_{L_1} u_x dx + u_t dt = -c [u(x_1, t_j) - u(x_0, t_{j-1})]. \quad (8)$$

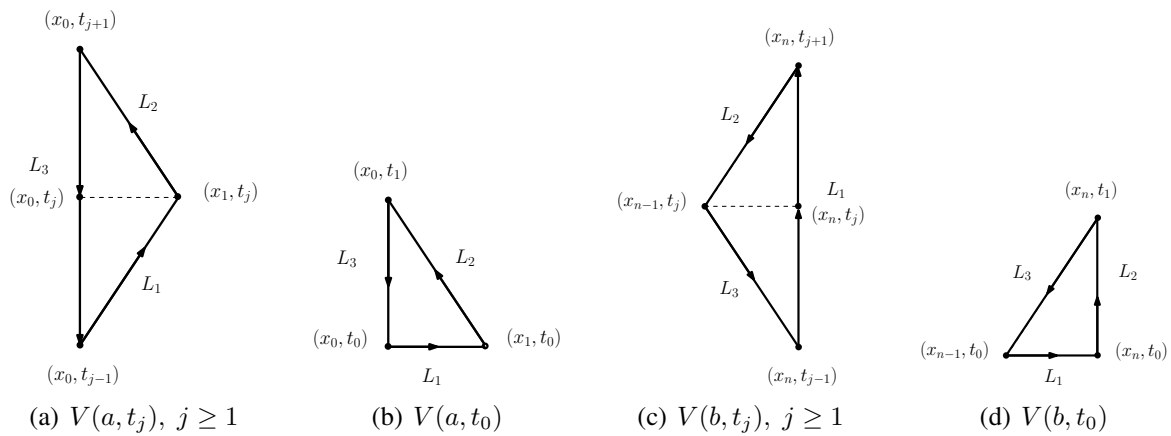


Figura 1: Formação dos volumes de controle $V(a, t_j)$ e $V(b, t_j)$ ao longo dos contornos esquerdo (a)-(b) e direito (c)-(d) direito, respectivamente, na malha Ψ , com padrão uniforme $c\Delta t = \Delta x$.

De maneira equivalente, para o lado L_2 encontramos $dx = -c dt$ e assim

$$\int_{L_2} -c^2 u_x dt - u_t dx = c \int_{L_2} u_x dx + u_t dt = c [u(x_0, t_{j+1}) - u(x_1, t_j)]. \quad (9)$$

Agora, sobre L_3 temos que $dx = 0$ e assim

$$\int_{L_3} -c^2 u_x dt - u_t dx = -c^2 \int_{t_{j-1}}^{t_{j+1}} u_x(x_0, \tau) d\tau. \quad (10)$$

Por fim, substituindo as equações (8)-(10) em (7), obtemos

$$u(x_0, t_{j+1}) = 2u(x_1, t_j) - u(x_0, t_{j-1}) + c \int_{t_{j-1}}^{t_{j+1}} g(\tau) d\tau + \frac{1}{c} \int_{x_0}^{x_1} \int_{\frac{s-x_1}{c} + t_j}^{\frac{x_1-s}{c} + t_j} f(s, \tau) d\tau ds, \quad (11)$$

para $j \geq 1$. Notemos que a Eq. (11) não pode ser utilizada para computar o primeiro passo de tempo, visto que $u(x_0, t_{-1})$ não possui significado. Por essa razão, aplicamos o mesmo raciocínio sobre o volume de controle representado na Fig. 1(b), de modo a obtermos a equação

$$u(x_0, t_1) = \phi(x_1) + \frac{1}{c} \int_{x_0}^{x_1} \psi(x) dx + c \int_{t_0}^{t_1} g(\tau) d\tau + \frac{1}{c} \int_{t_0}^{t_1} \int_{x_0}^{x_0+c(t_1-\tau)} f(s, \tau) ds d\tau, \quad (12)$$

utilizada para computar a solução numérica no contorno esquerdo, no primeiro passo de tempo.

3.2 Contorno direito ($x = x_n = b$)

Realizando o mesmo procedimento nos volumes de controle $V(b, t_j)$ e $V(b, t_0)$ representados nas Fig. 1(c) e Fig. 1(d), respectivamente, supondo que $u_x(b, t) = h(t)$ seja conhecido, obtemos as equações

$$u(x_n, t_{j+1}) = 2u(x_{n-1}, t_j) - u(x_n, t_{j-1}) + c \int_{t_{j-1}}^{t_{j+1}} h(\tau) d\tau + \frac{1}{c} \int_{x_{n-1}}^{x_n} \int_{\frac{x_{n-1}-s}{c}+t_j}^{\frac{s-x_{n-1}}{c}+t_j} f(s, \tau) d\tau ds, \quad (13)$$

para $j \geq 1$, e

$$u(x_n, t_1) = \phi(x_{n-1}) + \frac{1}{c} \int_{x_{n-1}}^{x_n} \psi(x) dx + c \int_{t_0}^{t_1} h(\tau) d\tau + \frac{1}{c} \int_{t_0}^{t_1} \int_{x_n-c(t_1-\tau)}^{x_n} f(s, \tau) ds d\tau. \quad (14)$$

Observemos a partir das equações (11)-(14), que esta abordagem nos permite incluir dados de contorno de Neumann de modo natural, isto é, sem qualquer tipo de aproximação.

Na seção a seguir abordamos o impacto da razão $c\Delta t/\Delta x$ em esquemas de alta ordem estruturados com mesma ordem no espaço e no tempo. Na subseção 4.1 consideramos o problema homogêneo enquanto que em 4.2, tratamos do problema não-homogêneo.

4 ESQUEMAS DE ALTA ORDEM

4.1 Problema homogêneo

O esquema explícito de quarta ordem no tempo e no espaço para a Eq. (1) homogênea, com $2 \leq i \leq n-2$, $j \geq 2$,

$$\frac{-u_i^{j+2} + 16u_i^{j+1} - 30u_i^j + 16u_i^{j-1} - u_i^{j-2}}{12\Delta t^2} = c^2 \left(\frac{-u_{i+2}^j + 16u_{i+1}^j - 30u_i^j + 16u_{i-1}^j - u_{i-2}^j}{12\Delta x^2} \right), \quad (15)$$

é instável, pois os fatores de amplificação obtidos por meio da análise de Von Neumann (Strikwerda, 1947; Iserles, 1996) são da forma

$$g(\theta) = \pm \frac{\sqrt{66 - \zeta}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\pm \frac{4224 - 64\zeta}{4\sqrt{66 - \zeta}} - \zeta + 126 + 4}, \quad (16)$$

em que

$$\zeta = 2 [15(1 - \varphi^2) + \varphi^2 (8 \cos(\theta) - \cos(2\theta))] \quad \text{e} \quad \varphi = c \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (17)$$

Observemos que existe pelo menos um fator de amplificação com módulo ≥ 1 . No entanto, se adotarmos $c\Delta t = \Delta x$ o mesmo se torna estável. Com efeito, temos que seu erro de truncamento local é

$$T_{\Psi}^4(x_i, t_j) = \frac{8}{3} \sum_{k=3}^{\infty} \frac{[1 - 2^{2(k-2)}] \gamma_k}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \Big|_{(x_i, t_j)}, \quad (18)$$

e, de maneira análoga ao caso de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2)$, $c\Delta t = \Delta x$ implica em $T_{\Psi}^4(x_i, t_j) = 0$, ao passo que o esquema (15) se tornará

$$\begin{aligned} u_i^{j+2} &= 16 (u_i^{j+1} + u_i^{j-1} - u_{i+1}^j - u_{i-1}^j) + u_{i+2}^j + u_{i-2}^j - u_i^{j-2}, \\ &= u_{i+2}^j + u_{i-2}^j - u_i^{j-2}, \quad 2 \leq i \leq n-2, \quad j \geq 2, \end{aligned} \quad (19)$$

sendo que

$$u_i^{j+1} + u_i^{j-1} - u_{i+1}^j - u_{i-1}^j = 0, \quad 1 \leq i \leq n-1, \quad j \geq 1, \quad (20)$$

corresponde ao esquema de diferenças finitas de “segunda” ordem (2), após simplificações. Note que estamos substituindo (20) em (19), o que faz com que o erro de truncamento do esquema (19) seja

$$T_{\Psi}^{4+}(x_i, t_j) = 16T_{\Psi}^2(x_i, t_j) + T_{\Psi}^4(x_i, t_j) = 0, \quad \text{para} \quad c\Delta t = \Delta x. \quad (21)$$

Situação análoga ocorre para esquemas de ordem 6 e 8, estruturados como (2) e (15), isto é, com mesma ordem no espaço e no tempo, visto que seus erros de truncamento são, respectivamente,

$$T_{\Psi}^6(x_i, t_j) = \frac{3}{5} \sum_{k=4}^{\infty} \frac{(3^{2k-3} - 2^{2k-1} + 5) \gamma_k}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \Big|_{(x_i, t_j)} \quad (22)$$

e

$$T_{\Psi}^8(x_i, t_j) = \frac{16}{35} \sum_{k=5}^{\infty} \frac{[7 - 2 \cdot 4^{2(k-2)} + 3^{2(k-1)} - 7 \cdot 2^{2k-3}] \gamma_k}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \Big|_{(x_i, t_j)}, \quad (23)$$

de modo que suas respectivas equações tomarão as formas

$$u_i^{j+3} = u_{i+3}^j + u_{i-3}^j - u_i^{j-3} \quad \text{e} \quad u_i^{j+4} = u_{i+4}^j + u_{i-4}^j - u_i^{j-4}. \quad (24)$$

Importante salientar, no entanto, que: (i) estes resultados são válidos somente para o caso homogêneo; (ii) todas as equações em (19), (20) e (24) possuem a mesma acurácia, visto que $T_{\Psi}^{2k} = 0$, $1 \leq k \leq 4$; (iii) todos estes esquemas são estáveis, visto que possuem a mesma estrutura.

4.2 Problema não-homogêneo

Os resultados de acurácia demonstrados na seção 4.1 não são válidos para o caso em que $f \neq 0$. Desenvolveremos nesta seção um esquema de quarta ordem para o problema não-homogêneo. Consideremos a formulação

$$\frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{\Delta t^2} = c^2 \left(\frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{\Delta x^2} \right) + f_i^j + \frac{\Delta t^2}{12} (c^2 (f_{xx})_i^j + (f_{tt})_i^j), \quad (25)$$

para $1 \leq i \leq n-1$, $j \geq 1$. Seguindo os raciocínio da seção 1, vemos que o erro de truncamento local para esta equação é

$$T_{\Psi}^{2+}(x_i, t_j) = \left\{ \frac{\Delta t^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} - \frac{c^2 \Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{\Delta t^2}{12} \left(c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right) + 2 \sum_{k=3}^{\infty} \left[\frac{\Delta t^{2(k-1)}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial t^{2k}} - c^2 \frac{\Delta x^{2(k-1)}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \right] \right\} \Big|_{(x_i, t_j)}. \quad (26)$$

Do teorema de Schwarz, temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} &= \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f \right) = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) + \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f \right) + \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}, \\ &= c^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}. \end{aligned} \quad (27)$$

Então, substituindo (27) em (26), obtemos

$$T_{\Psi}^{2+}(x_i, t_j) = \left\{ \frac{\Delta t^2 c^4 - c^2 \Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + 2 \sum_{k=3}^{\infty} \left[\frac{\Delta t^{2(k-1)}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial t^{2k}} - c^2 \frac{\Delta x^{2(k-1)}}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} u}{\partial x^{2k}} \right] \right\} \Bigg|_{(x_i, t_j)}, \quad (28)$$

que é de quarta ordem, desde que escolhamos $c\Delta t = \Delta x$.

O esquema em (25) é semelhante àquele obtido pelo emprego do Método da Equação Modificada (Warming & Hyett, 1974; Villatoro & Ramos, 1999), que fornece esquemas de alta ordem ao se adicionar derivadas adequadas da variável u e do termo fonte f . O esquema aqui proposto difere, no entanto, pois adiciona somente derivadas do termo fonte (Agut et al., 2010).

Na seção 5 a seguir, apresentamos uma breve discussão envolvendo métodos tradicionais de inclusão de condições de contorno e condições iniciais e aquele apresentado no presente texto (seções 2 e 3). Referimo-nos a métodos tradicionais àqueles que aproximam a velocidade inicial u_t e as condições de Neumann através de diferenças progressivas, regressivas, centrais, etc.

5 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Nesta seção apresentamos dois típicos estudos de caso envolvendo a Eq. (1). Fixamos $a = 0$, $b = L = 2$ e $c = 3$.

5.1 Exemplo I: condições de Dirichlet

O primeiro problema considerado consiste na modelagem de uma corda percutida por um martelo de largura 2δ (Figueiredo, 2012) e possui dados iniciais descontínuos

$$u(x, 0) = 0 \quad \text{e} \quad u_t(x, 0) = \begin{cases} \nu, & \text{para } |x - \xi| \leq \delta, \\ 0, & \text{para } |x - \xi| > \delta, \end{cases} \quad (29)$$

em que $0 < \xi < L$, com condições de contorno do tipo Dirichlet, ambas nulas nos extremos e termo fonte $f = 0$.

Neste problema, construímos aproximações do primeiro passo de tempo através de 3 abordagens: diferenças centrais (DF_{C_2} e DF_{C_4}), diferenças regressivas (DF_{R_2} e DF_{R_4}) e pela combinação da equação diferencial com uma expansão de Taylor (Strikwerda, 1947, p. 197) no tempo $t = 0$ s (DF_{T_2} e DF_{T_4}). Essas aproximações, no entanto, acabaram por serem idênticas pelo fato da posição inicial $u(x, 0)$ ser nula, razão pela qual, serão apresentados apenas os resultados de DF_{C_2} e DF_{C_4} . Como se trata de um problema com condições essenciais (ou de Dirichlet), dois esquemas foram propostos: o primeiro formado pelas Eq. (6) e Eq. (20), denotado por D' Alembert₂, e o segundo, referenciado por D' Alembert₄ e composto por (6) e (19).

Na Fig. 2 apresentamos o gráfico relativo ao comportamento do erro absoluto $\varepsilon^j = \|\mathbf{u}^j - \hat{\mathbf{u}}^j\|_{\Psi}$ com norma L^2 na malha (Leveque, 2004, p. 140), sendo \mathbf{u}^j e $\hat{\mathbf{u}}^j$ os j -ésimos vetores solução analítico e numérico, respectivamente, em $t_j = j\Delta t$, $0 \leq j \leq q$. Vemos que o erro apresenta um comportamento periódico ao longo do tempo.

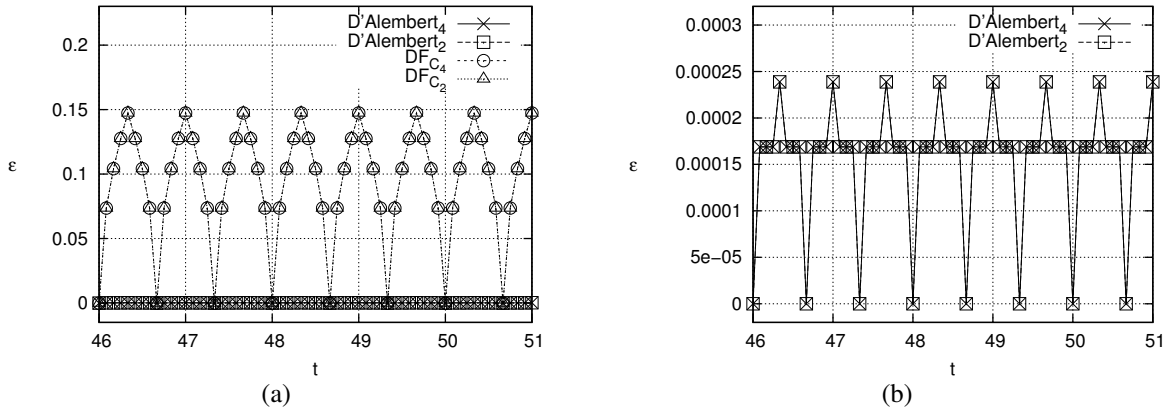


Figura 2: (a) Erro absoluto ε para os esquemas D'Alembert₂, D'Alembert₄, DF_{C₂} e DF_{C₄}, com parâmetros $\xi = 1$, $\delta = 0,5$ e $\nu = 2,5$ e incremento $\Delta x = L/8$, calculados na norma L^2 ; (b) Ampliação da Fig. 2(a).

Na Fig. 3 temos os gráficos log-log dos erros em função do incremento Δx , calculados no tempo¹ $t = 51s$. Está presente neste mesmo gráfico a estimativa do erro de truncamento ε_F da série de Fourier (solução analítica do problema truncada em $N = 500$), para este mesmo tempo.

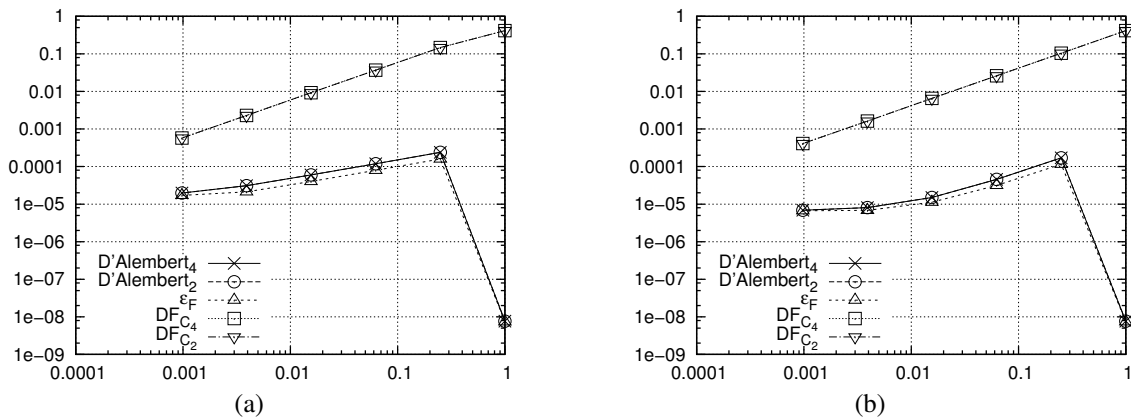


Figura 3: Gráficos em escala log-log dos erros no tempo $t = 51s$ versus incremento espacial Δx para os esquemas D'Alembert₂, D'Alembert₄, DF_{C₂} e DF_{C₄} aplicados no problema de onda governado pela Eq. (1) homogênea, com condições iniciais descontínuas: (a) Norma L^2 , (b) Norma L^1 .

Observamos das Fig. 3(a) e Fig. 3(b) que: (i) independente da aproximação utilizada no primeiro passo de tempo, os esquemas de ordem 2 e 4 possuem a mesma acurácia (os gráficos

¹Utilizamos os gráficos da Fig. 2 para tomar a decisão de avaliar a ordem de convergência no tempo $t = 51s$, pois os erros atingem seus picos (também) neste tempo.

só comprovam os resultados das Eq. (4) e Eq. (18)); (ii) os esquemas propostos (com passo inicial (6)) apresentam erros que acompanham as estimativas do erro de truncamento da série de Fourier. Esse resultado se deve ao fato de que ambos os esquemas possuem erro de truncamento localmente nulo ($c\Delta t = \Delta x$) e, além disso, o primeiro passo de tempo está sendo calculado “analiticamente”, razão pela qual, a solução numérica produzida coincide com a analítica.

5.2 Exemplo II: condições de Neumann

O segundo estudo de caso exemplifica a situação em que as condições de contorno são do tipo Neumann: $u_x(a, t) = 0$ e $u_x(b, t) = -4\sin(\omega t)$. Os dados iniciais prescritos são $u(x, 0) = 0$ e $u_t(x, 0) = \omega [\cos(\lambda x) - x^2]$ e o termo fonte

$$f(x, t) = \sin(\omega t) [\cos(\lambda x) (c^2\lambda^2 - \omega^2) + \omega^2(x^2 - t) + 2c^2] + 2\omega \cos(\omega t). \quad (30)$$

Neste problema, denotamos por D'Alembert₂ o esquema formado pelas equações (6), (11)-(14) e (20) com termo fonte $\Delta t^2 f_i^j$ e por D'Alembert₂₊, aquele formado pelas equações (6), (11)-(14) e (25). As formulações DF_{C₂} e DF_{C₂₊} utilizam as Eq. (20) e Eq. (25), respectivamente, ambas combinadas com esquemas de segunda ordem para aproximar a velocidade inicial $u_t(x, 0)$ e as derivadas em $x = a$ e $x = b$. As aproximações de primeira ordem nos contornos (regressiva a esquerda e progressiva a direita: DF_{RP₁}) forneceram resultados consideravelmente inferiores em relação às diferenças de segunda ordem e ao método proposto, conforme demonstram os gráficos dos erros calculados ao longo do tempo localizado na Fig. 4, razão pela qual não serão apresentados seus resultados relacionados.

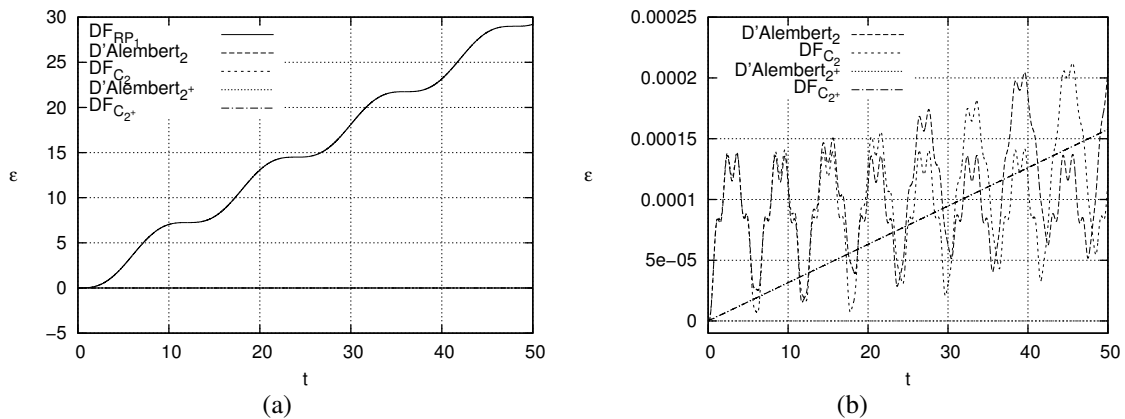


Figura 4: (a) Erro absoluto ε para os esquemas DF_{RP₁}, D'Alembert₂, D'Alembert₂₊, DF_{C₂} e DF_{C₂₊}, com incremento $\Delta x = L/80$, calculados na norma L^2 ; (b) Ampliação da Fig. 4(a).

A Tabela 1 mostra a ordem de acurácia da solução calculada no tempo $t = 50$ s. A Fig. 5 apresenta os gráficos em escala log-log do erro absoluto ε versus o incremento Δx , constantes na referida Tabela.

Observamos dos resultados da Tabela 1 e das Fig. 5(a) e Fig. 5(b) que: (i) as formulações de segunda ordem apresentam mesma taxa de convergência; (ii) as equações propostas neste

Tabela 1: Comparação da ordem de acurácia das soluções na norma L^2 no tempo $t = 50s$.

Δx	D'Alembert ₂		DF _{C₂}		D'Alembert ₂₊		DF _{C₂₊}	
	Erro	Ordem	Erro	Ordem	Erro	Ordem	Erro	Ordem
$L/10$	1,18E-02		8,06E-03		2,08E-05		1,06E-02	
$L/20$	3,16E-03	1,90E+00	1,92E-03	2,07E+00	1,40E-06	3,89E+00	2,57E-03	2,04E+00
$L/40$	8,16E-04	1,96E+00	4,69E-04	2,03E+00	9,02E-08	3,95E+00	6,35E-04	2,02E+00
$L/80$	2,07E-04	1,98E+00	1,16E-04	2,02E+00	5,72E-09	3,98E+00	1,58E-04	2,01E+00
$L/160$	5,21E-05	1,99E+00	2,88E-05	2,01E+00	4,81E-10	3,57E+00	3,93E-05	2,00E+00

trabalho, para inclusão de condições iniciais e de contorno, não prejudicam a ordem do esquema dominante, pois o esquema D'Alembert₂₊ é de quarta ordem e fornece solução também de ordem quatro², enquanto que a formulação DF_{C₂₊} também é de quarta ordem, mas sua solução numérica apresenta ordem de acurácia 2.

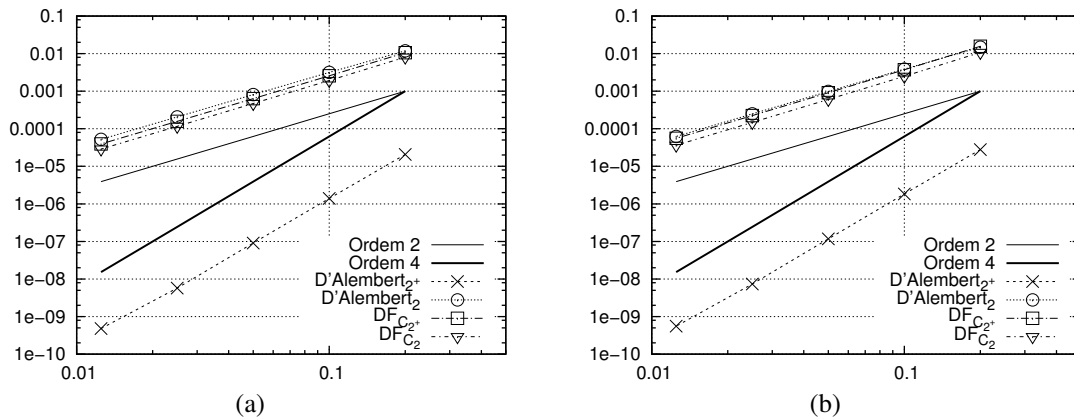


Figura 5: Gráficos em escala log-log dos erros no tempo $t = 50s$ versus incremento espacial Δx para os esquemas D'Alembert₂, D'Alembert₂₊, DF_{C₂} e DF_{C₂₊} aplicados no problema de onda governado pela Eq. (1): (a) Norma L^2 , (b) Norma L^1 .

6 CONCLUSÕES

Este artigo apresenta a concepção de uma nova forma de se incluir condições de contorno naturais e condições iniciais em esquemas explícitos de diferenças finitas, desenvolvida para equações hiperbólicas unidimensionais, lineares e de segunda ordem temporal. A apresentação foi realizada tendo por base a equação da onda (1). A construção das estratégias propostas foram motivadas pelo fato de que o esquema (2) possui erro de truncamento localmente nulo, quando especificamos $|c\Delta t/\Delta x| = 1$. Além disso, a malha espaço-tempo obtida com essa razão, possui a propriedade de que seus pontos estão localizados na intersecção das curvas características da equação diferencial (1). Essa estrutura particular foi determinante na escolha da fórmula de D'Alembert para o passo inicial, na dedução das equações que compõem os tratamentos nos

²Note que observação análoga pode ser feita para D'Alembert₂.

contornos, bem como no estabelecimento da ordem do esquema junto à Eq. (25), uma vez que a ordem 4 foi alcançada somente por conta desta escolha de incrementos.

Os exemplos numéricos apresentados mostraram que o método proposto é efetivo em acurácia quando comparado às estratégias tradicionais, sobretudo no que concerne à malhas menos refinadas.

Importante notar, finalmente, que os esquemas utilizados suportam a relação incremental $c\Delta t = \Delta x$, no sentido de que esta razão está dentro de seus limites de estabilidade. Em outras palavras, não é possível utilizar a presente estratégia em formulações cujas condições de estabilidade não abrangem esta razão. É o que ocorre, por exemplo, com a discretização de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^4)$

$$\frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{\Delta t^2} = c^2 \left(\frac{-u_{i+2}^j + 16u_{i+1}^j - 30u_i^j + 16u_{i-1}^j - u_{i-2}^j}{12\Delta x^2} \right) + f_i^j, \quad (31)$$

para $2 \leq i \leq n - 2$, $j \geq 1$, cuja condição de estabilidade é $c \frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{\sqrt{3}}{2}$ (Strikwerda, 1947, p. 196). Neste caso, pode-se utilizar algum dos métodos tradicionais de inclusão de condições iniciais e de contorno.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES pelo apoio financeiro, ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE - UFPR) e ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Catarinense, Campus Araquari, pelo apoio à pesquisa.

REFERÊNCIAS

- Agut, C., Diaz, J., & Ezziani, A., 2010. High-Order Discretizations for The Wave Equation Based on the Modified Equation Technique. *10ème Congrès Français d'Acoustique (CFA)*, Lyon.
- Figueiredo, D. G., 2012. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais*. IMPA.
- Iserles, A., 1996. *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge University Press.
- Leveque, R. J., 2004. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press.
- Strang, G., 1986. *Introduction to Applied Mathematics*. Wellesley-Cambridge Press.
- Strikwerda, J. C., 1947. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Siam.
- Villatoro, F. R., & Ramos, J. I., 1999. On the Method of Modified Equations. I: Asymptotic Analysis of the Euler Forward Difference Method. *Applied Mathematics and Computation*, v. 103, pp. 111-139.
- Warming, R. F., & Hyett, B. J., 1974. The Modified Equation Approach to the Stability and Accuracy Analysis of Finite-Difference Methods. *Journal of Computational Physics*, v. 14, pp. 159-179.