

Misael Miléo da Silva

**Diferenças Finitas não-usual
aplicado ao modelo de Maxwell-Cattaneo
em malhas deslocadas**

Brasil

2016, v-1

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFPA

Silva, Misael Miléo da, 1989-

Diferenças finitas não-usual aplicado ao modelo de
Maxwell-Cattaneo em malhas deslocadas / Misael Miléo da
Silva. - 2016.

Orientador: Dilberto da Silva Almeida
Júnior.

Dissertação (Mestrado) - Universidade
Federal do Pará, Instituto de Ciências Exatas e
Naturais, Programa de Pós-Graduação em
Matemática e Estatística, Belém, 2016.

1. Diferenças finitas. 2. Nonstandard
scheme. 3. Equação de Maxwell Cattaneo. 4. Malha
deslocada. 5. Coeficiente dependente do tempo.

I. Título.

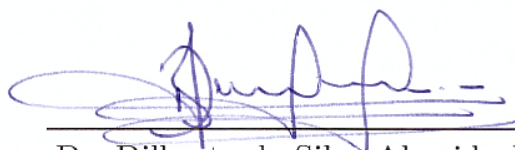
CDD 22. ed. 515.62

Misael Miléo da Silva

**Diferenças Finitas não-usual
aplicado ao modelo de Maxwell-Cattaneo
em malhas deslocadas**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística da Universidade Federal do Pará como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática.

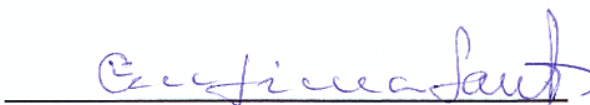
Trabalho aprovado. Brasil, 15 de Junho de 2016:



Dr. Dilberto da Silva Almeida Júnior
(Orientador)



Dr. Valcir João da Cunha Farias
(PPGME)



Dr. Mauro de Lima Santos
(PDM)



Dr. Anderson David de Souza
Campelo
(PPGME)

Brasil
2016, v-1

Agradecimentos

Agradeço especialmente ao Espírito pessoal perfeitamente bom que com amor criou, sustenta e dirige todas as coisas. O "Eu sou" o qual os homens chamam de Deus, porque deu ao homem uma tão bela ciência como a matemática e deu-me a oportunidade e meios de aprender um pouquinho dela. Agradeço a minha mãe Iracema de Nazaré Miléo que ficou ao meu lado quando decidi estudar matemática. Agradeço a toda equipe de pesquisa numérica 2014-2016 pelo apoio e parceria. Em especial agradeço a meus amigos; Clayson Malcher, Marcos Lima, José Solon, Sancho Chaiuca, Leonardo Rogério, Mauricio Vinhote, Luiz Gutemberg, Bráulio Maia e Márcio Almeida. As princesas; Marly Anjos, Helen Criss, Jocyane Fonseca e Ana Lídia que tornaram meus dias de estudo mais alegres na universidade. Agradeço a Carmen Lúcia Brito Souza de Almeida e toda equipe técnica e de suporte de pesquisa numérica. Ao corpo docente do PPGME em especial ao Dr. João Rodrigues dos Santos Júnior, que pacientemente ensinou-me cálculo avançado, Dr. Valcir João da Cunha Farias, que apresentou-me ao fantástico mundo da computação numérica e a meu orientador Dr. Dilberto da Silva Almeida Júnior por sempre entregar-me artigos e livros divertidos de se trabalhar.

E por fim, sou grato a Capes pelo apoio financeiro nestes dois anos de curso, Assim como a todos que ajudaram-me até aqui.

*“Não vos amoldeis às estruturas deste mundo,
mas transformai-vos pela renovação do vosso entendimento,
a fim de distinguir qual é a vontade de Deus:
o que é bom, o que Lhe é agradável, o que é perfeito.
(Bíblia Sagrada, Romanos 12, 2)*

Resumo

Uma propriedade física importante da equação do calor é a positividade das soluções, isto é, para dados iniciais positivos a solução geral deve ser positiva. Porém, a hipótese de Fourier para condução do calor permite velocidade infinita de propagação de sinais, este fenômeno é conhecido como paradoxo de Fourier. Para corrigir esta condição não-física, muitas alterações foram propostas dentre elas destacamos a hipótese de Maxwell-Cattaneo. Contudo, a equação de Maxwell-Cattaneo quando discretizada por esquemas usuais em diferenças finitas pode gerar soluções negativas. Neste trabalho, preservamos a positividade das soluções bem como propriedades qualitativas da energia da equação de Maxwell-Cattaneo com coeficiente de difusão dependente do tempo usando métodos Nonstandard em diferenças finitas em malhas deslocadas.

Palavras-chave: Maxwell-Cattaneo. Nonstandard. Positividade. coeficiente dependente do tempo. Malha Deslocada.

Abstract

An important physical property of the heat equation is positivity solutions, i.e., for positive initial data the overall solution must be positive. However, the Fourier hypothesis for heat conduction allows infinite propagation speed of the signals, this phenomenon is known as Fourier paradox. To correct this non-physical condition, many changes have been proposed among which we highlight the case of Maxwell-Cattaneo. However, the Maxwell-Cattaneo equation when discretized by usual finite difference schemes can generate negative solutions.

In this work, we preserve the positivity of the solutions as well as qualitative properties of energy Maxwell-Cattaneo equation with diffusion coefficient time dependent using Nonstandard schemes in finite differences in Staggered grid.

Keywords: Maxwell-Cattaneo. Nonstandard. Positive. diffusion coefficient time dependent. Staggered grid.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Idéias e métodos	11
1.2	A importância do coeficiente dependente do tempo	11
1.3	A importância da malha deslocada	12
1.4	Transferência de Calor	12
1.5	Método Não-usual em diferenças finitas	13
1.5.1	Exemplo 1. A nonstandard scheme for Heat Equation	14
1.5.2	Exemplo 2. A nonstandard scheme for Fisher Equation	14
1.6	Escopo de cada capítulo	15
1.7	Tabela de esquemas numéricos	17
2	DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO	18
2.1	Construção do modelo de Maxwell-Cattaneo a partir do modelo de Fourier	18
2.1.1	A Segunda Lei da Termodinâmica	20
2.2	Solução Analítica do modelo de Maxwell-Cattaneo	21
3	DIFERENÇAS FINITAS NÃO USUAL EM MALHA COMUM	24
3.1	Esquema usual	24
3.2	Esquema Nonstandard	27
3.2.1	Uma equivalência importante	31
4	DIFERENÇAS FINITAS NÃO-USUAL EM MALHA DESLOCADA	33
4.1	Esquema usual	33
4.1.1	Esquema NSFD1 modificado	34
4.1.2	Estabilidade do esquema NSFD1 modificado	35
4.2	Comparação de simulações	39
5	PROPRIEDADES DA ENERGIA	41
5.1	Energia dos sistemas de evolução	41
5.2	Decaimento exponencial das soluções	42
5.3	Energia numérica do esquema de Diferença Finita usual	45
5.3.1	Energia numérica do esquema NSFD-1M	47
5.4	Decaimento exponencial Numérico	49
5.4.1	Conclusões sobre os NSFD's a partir das Energias numéricas	52
5.5	Uma forma equivalente-esquema NSTD-3	53

5.5.1	Super-convergência da forma equivalente NSFD-3	53
5.5.1.1	Taxas de Erro	54
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	59
6.1	Resultados	59
6.2	Esquema Mugen	59
6.2.1	Positividade	60
6.2.2	Descrição do método	61
	APÊNDICE A – OBJETIVIDADE	63
	APÊNDICE B – FUNÇÕES DE AIRY	65
B.1	Definições	65
B.2	Algumas propriedades elementares	65
B.2.1	Wronskians da função de Airy homogênea	65
B.2.2	Alguns valores particulares	66
B.2.3	Algumas relações entre Funções de Airy	66
B.3	Série Assintótica	67
B.3.1	Expansão de A_i próximo da origem	67
	REFERÊNCIAS	68

1 Introdução

Neste capítulo abordamos brevemente os objetivos e resultados do trabalho, na motivação mostramos alguns usos dos esquemas NSFD (Nonstandard Scheme Finite Difference). Fazemos isso por meio de exemplos; um caso de convergência da equação do calor e uma situação peculiar para uma equação de reação-difusão não-linear conhecida como Equação de Fisher.

1.1 Idéias e métodos

Esquemas em diferenças finitas denominados não usuais (Nonstandard Finite Difference Methods- NSFD) são construídos para compensar uma determinada deficiência dos esquemas usuais em diferenças finitas. Atribuídos inicialmente a Ronald E. Mickens em 1994 publicado em (Mickens [1]). Aplicaremos métodos Nonstandard na formulação de Maxwell-Cattaneo da equação do calor para, principalmente, recuperar a positividade das soluções perdida nos esquemas usuais de discretização. Neste trabalho abordamos a equação de Maxwell-Cattaneo em malha deslocada e com coeficiente de difusão dependente do tempo. Usaremos métodos multiplicativos para obtenção de energia das equações, além de técnica matricial e espectral para garantir estabilidade do método. Para as simulações numéricas adotamos o software Matlab.

1.2 A importância do coeficiente dependente do tempo

Um coeficiente dependente do tempo pode representar uma variação de densidade do material condutor ao passar do tempo, seja por deterioração devida a atrito, compensação de fatores externos ou outras razões, pode representar ainda outros fatores. A equação de difusão com coeficiente dependente do tempo aparece na literatura em muitas aplicações por exemplo, em microondas (Huang, Lin e Yang [2]), (Pojar [3]), simulations of flows (Chua e Dew [4]), (Crank [5]), problemas de economia (McCartin e Labadie [6]), (Wilmot, Howison e Dewynne [7]) entre outros. Porém não existem muitos trabalhos que analisem a estabilidade de métodos numéricos para a equação de difusão com coeficiente dependente do tempo. Em particular, (Tadjeran [8]) usa coeficiente de difusão dependente do tempo quando analisa a estabilidade do método de Crank-Nicolson, mas este não leva em conta as condições de fronteira ao utilizar o método de Von Neumann para concluir sobre a estabilidade. Neste trabalho em que usamos malha deslocada estas condições de fronteira são importantíssimas, como explica (Oishi et al. [9]) e o coeficiente de difusão (constante

ou variável) influencia as condições de fronteira, como pode ser encontrado em (Sousa [10]), (Sucec [11]),(Trefethen e Embree [12]).

1.3 A importância da malha deslocada

A malha deslocada (*staggered grid*), introduzida inicialmente por Harlow e Welch (Harlow e Welch [13]), é muito utilizada no contexto dos método MAC pois possui algumas propriedades atrativas; é conhecida por garantir localmente a conservação de massa, movimento, energia cinética e vorticidade (Perot e Nallapati[14]); é computacionalmente simples (em uma dimensão se comparada a um modelo preditor corretor por exemplo) é propícia ao uso de método de projeção no cálculo da pressão; e satisfaz a restrição de incompressibilidade (Perot e Nallapati[14]).

Estes usos estão, em sua maioria, em modelos de duas e três dimensões. De fato não é comum usar uma malha deslocada para diferenças finitas em uma dimensão. Contudo, quando resolvemos a equação de Navier stokes por diferenças finitas usa-se a malha deslocada para evitar oscilações (Oishi et al. [9]). A simplificação natural da malha deslocada usada em Navier Stokes para uma dimensão é a que aplicaremos neste trabalho, isto é , $x_i = (i - 1/2)\Delta x$. Assim, além de ampliar as aplicações físicas do modelo que será trabalhado o uso da malha deslocada permite que a formulação do método de Maxwell-Cattaneo na equação do calor ser usada para construção de sub-rotinas na implementação numérica de Navier stokes.

1.4 Transferência de Calor

O transporte de calor por Condução ocorre tanto por causa da troca de energia de uma molécula para outra, sem o próprio movimento das moléculas, quanto pelo movimento dos elétrons livres caso estejam presentes. Portanto, esta forma de transferência de calor depende fortemente das propriedades do meio, sólido, líquido ou gasoso, se existir uma diferença de temperatura. Ao deslocar-se moléculas se movem de uma região quente para uma fria e levam energia com elas o movimento das moléculas é mais enfatizado na convecção que na condução.

Trataremos da transferência de calor por condução em uma secção transversal de uma barra fina em condições ideais, Homogênea e Isotrópica lateralmente isolada do meio. A propagação do calor na direção orientada pelo eixo Cartesiano " Ox " pode então ser visto como um fluxo de transferência de comportamento aceitável como condução na forma "onda de calor". Para quantificar a energia transferida por unidade de tempo em uma equação de taxa na transferência por Condução, como a lei de Fourier que será vista, é necessário a condutividade termal do material, a tabela a seguir ilustra os valores de

condutividade termal de alguns materiais.

Tabela 1: Valores da condutividade termica em W/m a 20°

Material	Condutividade termal
Alumínio puro	200
Ferro Puro	73
Liga de alumínio(4, 5%Cr)	168
Inox	16
água	0,6
madeira	0,2

Quando abordarmos a formulação do modelo de Maxwell-Cattaneo, no capítulo seguinte, ficará claro que a interpretação da transferência de calor apresentada sofre ajustes teóricos severos.

Cabe ainda mencionar que mudanças extremas no comportamento da transferência de calor ocorrem em temperaturas próximas do zero absoluto e em materiais como Hélio II, Li e alguns sólidos dielétricos como o Bi e NaF, onde a transferência de calor pode ser analisada no contexto da mecânica quântica, esta abordagem, no entanto, não será feita neste trabalho.

1.5 Método Não-usual em diferenças finitas

O Método Não-usual em diferenças finitas, Nonstandard Finite Difference (NSFD), tem sido usado para melhorar taxas de convergência (Sweilam e Assiri[15]), recuperar propriedades qualitativas(Sousa[16]), eliminar oscilações em modelos não lineares (Mickens[17]), conseguir estabilidade ou consistência dentre outros propósitos(Marcías-Dias e J.Ruiz-Ramirez[18]). Iniciado por Ronald Mickens e amplamente usado nas últimas décadas não temos uma definição formal para o método Não-usual em diferenças finitas pois este método consiste em modificar algum método em Diferenças finitas(tido como usual) de forma a compensar alguma deficiência do método usual ou conseguir algum tipo de melhoria(quantitativa ou qualitativa) sobre este. A forma como a modificação será feita dependerá do problema. O nome original em inglês Nonstandard, que pode ser entendido como não-usual, sugere que este método foge do que é tradicionalmente feito (em diferenças finitas). Desde que matematicamente bem alicerçado qualquer modificação no modelo usual de forma a obter o resultado desejado pode ser vista como um método Nonstandard. O autor que escreve este texto gosta de pensar em Nonstandard como "use sua imaginação para dar um "aprimoramento" na solução do problema".

Para maior clareza motivaremos este trabalho com duas aplicações. O primeiro exemplo foi adaptado de (Khalsaraei e Khodadosti[19]) e o segundo exemplo retirado do

trabalho de Mickens (Mickens[20]). Doravante nos referiremos ao Método Não-usual em diferenças finitas por NSFD.

1.5.1 Exemplo 1. A nonstandard scheme for Heat Equation

Neste exemplo será usado um modelo Nonstandard para melhorar o erro Absoluto da solução numérica de Euler Explícito. Consideremos o sistema

$$u_t - u_{xx} = 0, \quad (x, t) \in (0, 1) \times (0, \infty), \quad (1.1)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t > 0, \quad (1.2)$$

$$u(x, 0) = \sin(\pi x), \quad x \in [0, 1]. \quad (1.3)$$

Cuja solução analítica é dada por

$$u(x, t) = e^{-\pi^2 t} \sin(\pi x). \quad (1.4)$$

Reescrevemos a usual discretização de (1.1) em Euler explícito como

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\varphi(\Delta t)} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (1.5)$$

onde u_j^n representa o valor da solução u no ponto $(j\Delta x, n\Delta t)$ da malha computacional, com Δx e Δt os passos espacial e temporal respectivamente e a função φ satisfaz a seguinte regra

$$\varphi(\Delta t) = \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad \text{com } 0 < \Delta t \rightarrow 0. \quad (1.6)$$

Se $\varphi = \Delta t$ então temos o usual método de Euler explícito, porém, se escolhermos $\varphi(\Delta t) = 1 - \exp(-\Delta t)$ que cumpre (1.6) então temos um método Nonstandard que tem uma performance melhor que o usual Euler Explícito no que tange o erro absoluto como pode ser verificado na tabela a seguir.

1.5.2 Exemplo 2. A nonstandard scheme for Fisher Equation

Agora usaremos um modelo Nonstandard para retirar oscilações da solução do método numérico usual explícito para Equação de Fisher.

segundo Fisher (Fisher[21]) a equação de Fisher dada por:

$$u_t - u_{xx} - \lambda u(1 - u) = 0, \quad \lambda > 0, \quad (1.7)$$

descreve, originalmente, a propagação de um vírus mutante em um meio infinitamente longo. (1.7) é usualmente discretizada por

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + \lambda u_j^n(1 - u_j^n). \quad (1.8)$$

Tabela 2: Erro Absoluto para os Esquemas de Euler explícito e NSFD com $\Delta x = 0.1$ e $\Delta t = 0.0025$.

t	x	Erro Euler E.	Erro NSFD
0.0025	0.1	3.00000e-005	2.09999e-005
0.0050	0.1	5.89999e-005	4.09999e-005
0.0075	0.1	8.79999e-005	6.09999e-005
0.0100	0.1	1.12999e-004	7.80000e-005
0.0125	0.1	1.30000e-004	9.59999e-005
0.0150	0.1	1.63000e-004	1.13000e-005
0.0175	0.1	1.85999e-004	1.28999e-004
0.0200	0.1	2.07000e-004	1.43000e-004
0.0225	0.1	2.27000e-004	1.58000e-004
0.0250	0.1	2.45999e-004	1.70000e-004

Ou explicitamente

$$u_j^{n+1} = \left(1 + \lambda\Delta t - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) u_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + \lambda\Delta t(u_j^n)^2, \quad (1.9)$$

assim o esquema (1.9) acima não informa a restrição do parâmetro Δt uma vez que se tenha Δx . Mickens em (Mickens[20]) denomina Nonstandard o esquema resultante da substituição do termo $(u_j^n)^2$ em (1.9) por

$$(u_j^n)^2 \rightarrow \frac{u_{j+1}^n + u_j^n + u_{j-1}^n}{3} u_j^{n+1}, \quad (1.10)$$

isto é,

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + \lambda u_j^n - \lambda \frac{u_{j+1}^n + u_j^n + u_{j-1}^n}{3} u_j^{n+1}. \quad (1.11)$$

Com isto ele pode mostra que $0 < 1 + \lambda\Delta t - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < 1$, portanto (1.11) pertence a classe de esquemas explícitos que preserva a positividade para equação de Fisher. Além disso o Esquema (1.11) elimina oscilações do esquema usual Como mostrou (Anguelov, Kama e Lubuma[22]). A seguir mostraremos a simulação do esquema usual (1.9) e o esquema NSFD (1.11). O gráfico permite visualizar o efeito corretor do método Nonstandard em especial na borda final do intervalo.

1.6 Escopo de cada capítulo

No Capítulo 2, tratamos dos aspectos da modelagem da Lei de Fourier, de seu respectivo Paradoxo Físico e da hipótese de Maxwell-Cattaneo abordadas nos trabalhos de Mickens e Jordan (Mickens e Jordan [23]) e (Mickens [20]). Além de uma importante condição para obediência da segunda lei da termodinâmica. No capítulo 3, apresentamos em malha regular os esquemas usual e do tipo NSFD, os utilizados por Mickens e Jordan

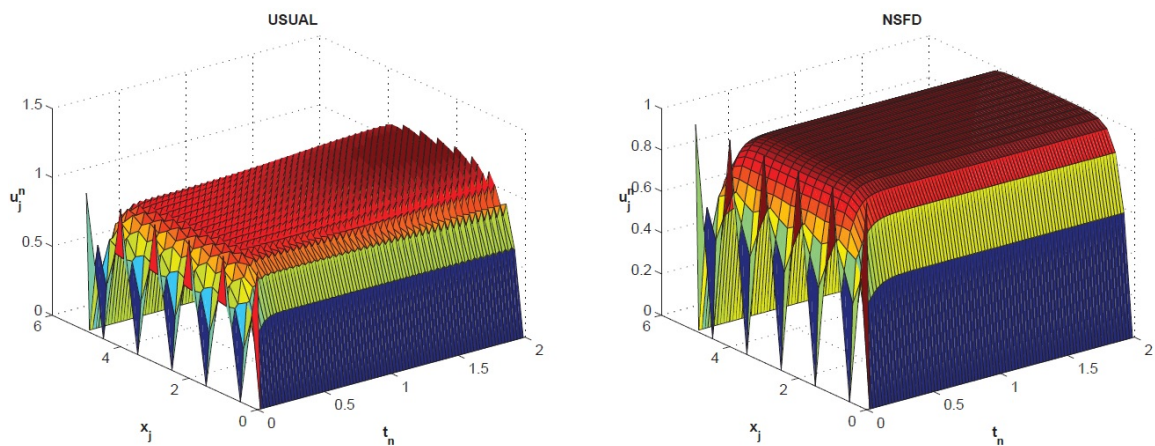


Figura 1: Condição inicial $u(x, 0) = \cos^2(\pi x)$.

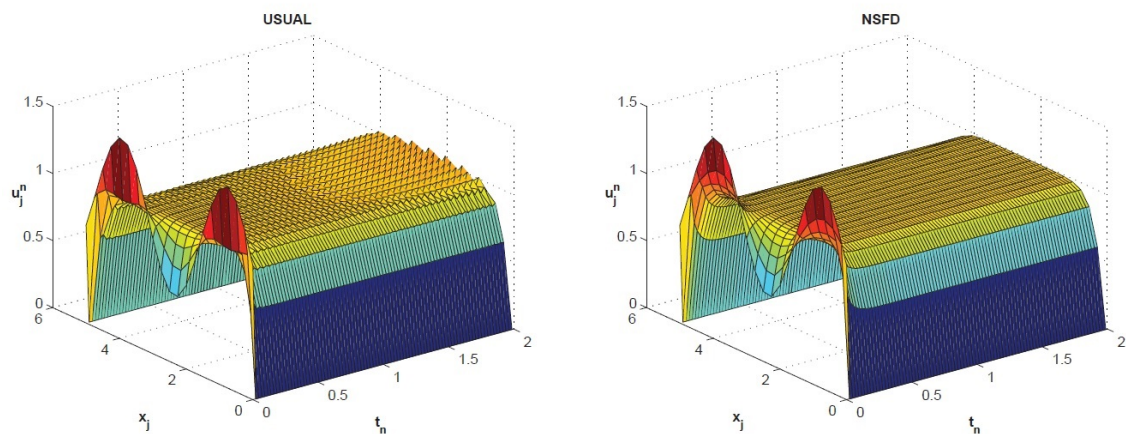


Figura 2: Foi usada a condição inicial $u(x, 0) = 0.5 + 0.5 \sin(2x)$ e $\lambda = 25$. Notemos a eficiência do NSFD na eliminação das oscilações presentes na solução limite $u \rightarrow 1$.

em seus artigos citados e nosso modelo modificado com coeficiente de difusão dependente do tempo, reproduzimos os resultados numéricos que mostram a positividade obtida no esquema NSFD e ainda mostramos por meio dos esquemas NSFD, usando simples procedimentos algébricos, quais as equações que realmente são discretizadas ao nível do contínuo. No capítulo 4, analogamente ao que foi feito no Capítulo 3 mostramos que podemos construir um esquema NSFD estável que preserva a positividade das soluções, agora em malha deslocada, sendo este o principal resultado de nosso trabalho. No Capítulo 5 abordamos os aspectos numéricos teóricos e computacionais das energias numéricas associadas aos esquemas NSFD como por exemplo o decaimento exponencial da energia das soluções. No Capítulo 6, finalizamos nosso trabalho com as conclusões e trabalhos futuros apresentando um esquema híbrido do NSFD com o Usual de diferenças finitas tipo Hopscotch e Redes Neurais Artificiais.

1.7 Tabela de esquemas numéricos

Neste trabalho usaremos diversos esquemas numéricos, para fins didáticos, a tabela a seguir esclarece a nomenclatura que adotaremos para eles.

Tabela 3: Esquemas numéricos em ordem de apresentação no trabalho.

Nome do Esquema	Algoritmo	
Usual	$u_j^{n+1} = \frac{\Delta t R(u_j^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \tau_0(2u_j^n - u_j^{n-1}) + (\Delta t/2)u_j^{n+1}}{\tau_0 + \Delta t/2}$	$R = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
NSFD-1	$u_j^{n+1} = \frac{1}{4}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + \frac{1}{2}u_j^n$	$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{4}$
NSFD-2	$u_j^{n+1} = \frac{u_j^{n-1} + (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)}{3}$	$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{4}$
Regular-1M	$u_j^{n+1} = \frac{\Delta t R(u_j^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \tau_0(2u_j^n - u_j^{n-1}) + (\Delta t/2)u_j^{n+1}}{\tau_0 + \Delta t/2}$	$R = d(t_n) \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
NSFD-1M	$u_j^{n+1} = (1 - 2\sigma^n)u_j^n + \sigma^n(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)$	$\sigma^n \in [\frac{1}{6}, \frac{1}{2}]$

Os métodos Usual e NSFD-1 são para malha comum e podem ser encontrados em (Mickens e Jordan [23]), o método NSFD-2 pode ser encontrado em (Mickens e Jordan [24]) é também para malha comum. Os métodos modificados Regular-1M e NSFD-1M foram construídos para malhas comum e deslocada. Além desses, apresentamos no último capítulo (nas perspectivas futuras da conclusão) os métodos Hopscotch modificado e Mugen ambos par malha deslocada, estes não são mostrados na tabela por não visarem contribuição direta no trabalho.

2 Dedução da equação de Maxwell-Cattaneo

Nesta secção trataremos o modelo matemático de transferência de calor proposto por Maxwell-Cattaneo, adicionado o coeficiente de difusão dependente do tempo sua consequente alteração da forma matemática de uma EDP parabólica (Da usual equação do calor) para uma EDP Hiperbólica (Equação da Onda com damping).

2.1 Construção do modelo de Maxwell-Cattaneo a partir do modelo de Fourier

Segundo a lei de Fourier, a condução de calor em um corpo homogêneo e isotrópico é descrita pela relação de fluxo dada por

$$q(\chi, \tau) = -k\nabla T(\chi, \tau), \quad (2.1)$$

em que q , $k(> 0)$ e T são respectivamente o vetor fluxo de calor, a condutividade termal e a temperatura absoluta, χ é o vetor posição e τ denota o tempo. Se a temperatura absoluta varia com o tempo então k é da forma $k(\tau) = d(\tau)k_1$ onde $d(\tau)$ é a função que descreve esta variação e k_1 uma constante. Consideramos agora a lei de balanço de energia dada por

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial \tau} + \nabla \cdot q = 0, \quad (2.2)$$

em que ρ é a massa específica e c_p o calor específico. De (2.2) e (2.1) obtemos a chamada equação do calor ou equação de difusão dada por

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} - k(\tau)\Delta T = 0, \quad \text{com } k(\tau) = d(\tau)k_1/(\rho c_p). \quad (2.3)$$

A lei de Fourier prevê que os sinais térmicos se propagam com velocidade infinita (ver [Mickens e Jordan \[23\]](#)) o que na prática não acontece, configurando o chamado “Paradoxo da lei de Fourier”. Para corrigir esta propriedade irrealista uma proposta é a modificação da lei de Fourier chamada lei de Maxwell-Cattaneo ([C.Cattaneo \[25\]](#))

Consideremos um tempo de relaxamento térmico suficientemente pequeno λ_0 , positivo de forma que

$$q(\chi, \tau + \lambda_0) = -k(\tau)\Delta T, \quad (2.4)$$

e expandimos em série de Taylor a função $q(\chi, \tau + \lambda_0)$ em torno de λ_0

$$q(\chi, \tau + \lambda_0) = q(\chi, \tau) + q'(\chi, \tau)\lambda_0 + \frac{q''(\chi, \tau)\lambda_0^2}{2!} = -k(\tau)\Delta T. \quad (2.5)$$

Considerando os dois primeiros termos da expansão acima, chegamos ao que é definido como hipótese de Maxwell-Cattaneo

$$(1 + \lambda_0 \frac{\partial}{\partial \tau})q = -k(\tau)\nabla T. \quad (2.6)$$

Aplicando o vetor gradiente em ambos os lados obtemos

$$\Delta q + \lambda_0 \frac{\partial \Delta q}{\partial \tau} = -k(\tau)\Delta T. \quad (2.7)$$

Agora considerando a lei de balanço de energia (2.2) podemos reescrever (2.7) como

$$-\rho c_p \frac{\partial T}{\partial \tau} + \lambda_0 \frac{\partial}{\partial \tau}(-\rho c_p \frac{\partial T}{\partial \tau}) = -k(\tau)\Delta T. \quad (2.8)$$

Isolando os termos no primeiro membro da igualdade e dividindo por ρc_p obtemos

$$T_\tau + \lambda_0 T_{\tau\tau} - k\Delta T = 0, \quad k = d(\tau)k_1/(\rho c_p). \quad (2.9)$$

Imporemos que o coeficiente de difusão dependente do tempo $d(\tau) > 0$ é uma função $d : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ contínua.

Olhando para equação (2.9) notamos que foi obtida uma EDP hiperbólica de modo que a condução de calor através de ondas térmicas tem velocidade finita $c(\tau) = \sqrt{\frac{k(\tau)}{\lambda_0}}$ chamada de “segundo som”. Isso corrige o “Paradoxo da lei de Fourier” a qual prevê velocidade infinita de propagação de sinais para alguns materiais (Straughan [26]). A equação (2.9) representa a propagação de ondas de calor e, portanto, suas soluções devem ser positivas e limitadas para dados iniciais positivos e limitados. Nessa direção, qualquer metodologia numérica aplicada a tal equação deve necessariamente gerar soluções numéricas que sejam positivas.

Reescrevendo (2.9) para exibir o coeficiente $d(\tau)$ obtemos

$$T_\tau + \lambda_0 T_{\tau\tau} - d(\tau)k\Delta^2 T = 0, \quad k = k_1/(\rho c_p), \quad (2.10)$$

a qual denominaremos simplesmente por Formulação modificada.

Além disso, cabe mencionar que a formulação unidimensional (2.10), com os coeficientes adequados, descreve uma diversificada variedade de sistemas físicos. Por exemplo: Propagação de sinais de tensão elétrica, propagação de ondas acústicas em meios

porosos de Darcy -type e movimento de cadeias de DNA. (ver (Mickens e Jordan[23]) e as referências nele contidas). O valor de λ_0 foi determinado experimentalmente para alguns materiais. Embora o valor λ_0 seja pequeno para a maioria deles (cerca de $10^{-12}s$) existem materiais com constante de relaxamento térmico alta como $NaHCO_3$, 29 segundos, areia, 21 segundos e tecido biológico, de 1 a 100 segundos.

2.1.1 A Segunda Lei da Termodinâmica

A Lei de Maxwell-Cattaneo apresenta duas incoerências principais a primeira é que ela viola o princípio físico da objetividade e a segunda é que em algumas situações ela pode ferir a Segunda Lei da Termodinâmica. Por esta razão dedicamos esta secção a restringir nossa formulação de Maxwell-Cattaneo com o objetivo de ambas as incoerências serem sanadas.

A Lei de Maxwell-Cattaneo viola o princípio físico da objetividade, fato já bem conhecido da literatura (ver Rubin[27]), para que esta violação não ocorra é necessário que a Lei seja aplicada apenas para o conceito de pequenas transformações que se traduz na forma

$$q + \alpha \dot{q} = -k \nabla T, \quad (2.11)$$

como fizemos em (2.6). Porém, recentemente descobriu-se que em certas situações a Lei de Maxwell-Cattaneo também fere a segunda Lei da Termodinâmica. Para analisar este problema iniciamos por definir a segunda Lei da Termodinâmica

Fisicamente consideraremos como um sistema a parte arbitrária P de um corpo B , que ocupa uma região $P(t) \subset R$ em cada instante do tempo t . Seja H a variação de entropia devido a mecanismos de dissipação interna e D a taxa de dissipação de energia por unidade de volume, então a segunda lei da termodinâmica pode ser expressa como

$$H(P(t)) > 0 \quad \forall t \Rightarrow D \geq 0 \quad \forall t. \quad (2.12)$$

Para obter uma forma local (Dias[28]) mostra que a Segunda Lei da termo dinâmica implica em

$$d_2 = -\frac{1}{T} q \cdot \nabla T \geq 0. \quad (2.13)$$

Onde d_2 é conhecida como dissipação térmica.

Notamos que quando a Segunda lei da Termodinâmica é aplicada em termos da dissipação térmica para a nossa Formulação de Maxwell-Cattaneo em (2.6) temos que (2.13) resulta em

$$q \cdot \left(\frac{q + \lambda_0 \dot{q}}{k(\tau)} \right) \geq 0. \quad (2.14)$$

Assim é suficiente que o ângulo entre os vetores q e $(q + \tau \dot{q})$ seja menor que o ângulo reto para que a segunda lei da termodinâmica seja respeitada.

2.2 Solução Analítica do modelo de Maxwell-Cattaneo

Nesta seção exibiremos as soluções analíticas da formulação de Maxwell-Cattaneo com o objetivo de usa-las para fim de comparação com as soluções numéricas que serão obtidas.

Assumindo que a condução de calor é governada pela lei de Maxwell-Cattaneo, o modelo matemático do sistema físico é dado por

$$T_\tau + \lambda_0 T_{\tau\tau} - d(\tau)kT_{\chi\chi} = 0, \quad (\chi, \tau) \in (0, l) \times (0, \infty), \quad (2.15)$$

$$T(0, \tau) = T(l, \tau) = 0, \quad \tau > 0, \quad (2.16)$$

$$T(\chi, 0) = T_0 \sin(\pi\chi/l) : T_\tau(\chi, 0) = 0, \quad \chi \in (0, l). \quad (2.17)$$

Adimensionando o problema (2.15)-(2.17) definimos as variáveis

$$u = T/T_0, \quad x = \chi/l, \quad t = \tau(\kappa/l^2). \quad (2.18)$$

Usando a regra da cadeia temos

$$T_\tau = \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \tau} \implies T_\tau = u_t \frac{\kappa}{l^2}, \quad (2.19)$$

e conseqüentemente,

$$T_{\tau\tau} = \frac{\partial u_t}{\partial t} \frac{\kappa}{l^2} \frac{\partial t}{\partial \tau} \implies T_{\tau\tau} = u_{tt} \frac{\kappa^2}{l^4}. \quad (2.20)$$

Analogamente

$$T_\chi = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \chi} \implies T_\chi = u_x \frac{1}{l}, \quad (2.21)$$

e também

$$T_{\chi\chi} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{1}{l} \frac{\partial x}{\partial \chi} \implies T_{\chi\chi} = u_{xx} \frac{1}{l^2}. \quad (2.22)$$

Portanto, substituindo (2.19) - (2.22) em (2.15), obtemos

$$\lambda_0 u_{tt} \frac{\kappa^2}{l^4} - d(t)u_{xx} \frac{\kappa}{l^2} + u_t \frac{\kappa}{l^2} = 0. \quad (2.23)$$

e dividindo a última equação por $\frac{\kappa}{l^2}$:

$$\lambda_0 u_{tt} \frac{\kappa}{l^2} - d(t)u_{xx} + u_t = 0. \quad (2.24)$$

Tomando $\tau_0 = \lambda_0 \frac{\kappa}{l^2}$ chegamos ao sistema hiperbólico dado por

$$\tau_0 u_{tt} + u_t - d(t)u_{xx} = 0, \quad (x, t) \in (0, l), \times (0, \infty), d(t) > 0, \quad (2.25)$$

$$u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2.26)$$

$$u(x, 0) = \sin(\pi x) : u_t(x, 0) = 0, \quad x \in (0, l), \quad (2.27)$$

O qual chamaremos de Modelo modificado. Se $d(t) = 1 \forall t$ então recuperamos o modelo original de Mickens e Jordan ([Mickens e Jordan \[23\]](#))

$$\tau_0 u_{tt} + u_t - u_{xx} = 0, \quad (x, t) \in (0, l) \times (0, \infty), \quad (2.28)$$

$$u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2.29)$$

$$u(x, 0) = \sin(\pi x) : u_t(x, 0) = 0, \quad x \in (0, l). \quad (2.30)$$

Usando o método de separação de variáveis (veja [Figueredo\[29\]](#)), obtemos a seguinte solução para o problema (2.28) -(2.30):

$$u(x, t) = e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \sin(\pi x) \begin{cases} \cos(\omega t) + \frac{\sinh(\omega t)}{\sqrt{\Delta}}; & \tau_0 < \tau_c, \\ 1 + \frac{t}{2\tau_0}; & \tau_0 = \tau_c, \\ \cosh(\omega t) + \frac{\sinh(\omega t)}{\sqrt{|\Delta|}}; & \tau_0 > \tau_c, \end{cases} \quad (2.31)$$

onde $\omega = (2\tau_0)^{-1} \sqrt{|\Delta|}$, $\Delta = 1 - 4\pi^2\tau_0$ e $\tau_c = (2\pi)^{-2}$. Veja o trabalho de ([Mickens e Jordan\[23\]](#)).

Para nosso Modelo modificado (2.25)-(2.27) a solução analítica, assumida a forma na forma $u(x, t) = X(x)T(t)$, aproximada por série de potências para $d(t) = b - t$, $b \in \mathbb{N}$ é dada por

$$u(x, t) = \frac{e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \sqrt{2} \sin(\pi x)}{\frac{-Bi(\alpha) - 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Bi'(\alpha) Ai(\alpha)}}{Ai(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Ai'(\alpha)}} + Bi(\alpha)} \left[\frac{-Bi(\alpha) - 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Bi'(\alpha) Ai(\beta)}}{Ai(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Ai'(\alpha)}} + Bi(\beta) \right] \quad (2.32)$$

onde

$$\alpha = \left(\frac{\sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} (-1/4 + \pi^2 \tau_0 b)}}{\pi^{4/3} \tau_0} \right), \quad \beta = \left(\frac{\sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} (-1/4 + (b-t) \pi^2 \tau_0)}}{\pi^{4/3} \tau_0} \right) \text{ e } Ai \text{ e } Bi \text{ são as Funções}$$

de Airy e Ai' , Bi' suas respectivas derivadas.

Nota-se que existe uma parte imaginária na solução, assim vemos que a introdução de um coeficiente dependente do tempo no problema é um complicador que afeta diretamente o comportamento da solução e seu cálculo numérico.

Destacamos algumas características a respeito da equação de Maxwell- Cattaneo

- A equação é Hiperbólica;
- Representa ondas de calor com velocidade finita de propagação. Portanto corrige o Paradoxo de Fourier;
- Como trata-se de ondas de calor qualquer esquema numérico deve preservar a propriedade da Positividade. Ou seja, dados iniciais positivos devem gerar soluções positivas.

$$T(x, 0) > 0 \Rightarrow T(x, t) > 0, \forall x, \forall t.$$

A escolha $d(t) = b - t$ foi feita para simplificar as contas. Porém desde que $d(t) > 0$ seja contínua, respeite a condição de estabilidade numérica (que será vista adiante) e tenha regularidade outras escolhas podem ser feitas.

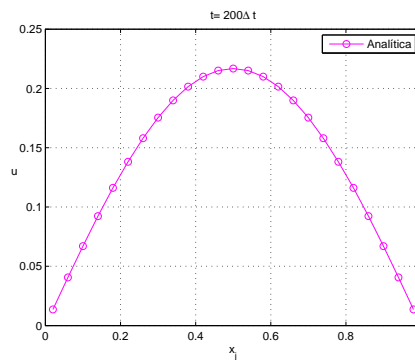


Figura 3: Solução Analítica usando condição inicial $u(x, 0) = \sin(\pi x)$, $\Delta t = 0.04$, $t = 150\Delta t$, $\Delta x = 0.004 d(t) = 2 - t$, $\tau_0 = \tau_c$. Note que a solução é positiva.

3 Diferenças finitas não usual em malha comum

3.1 Esquema usual

Neste capítulo mostraremos que a discretização usual em diferenças finitas, na malha comum, para o modelo modificado (2.25)-(2.27) pode produzir soluções negativas, mas o método Nonstandard modificado (que será visto na secção seguinte) recupera a positividade das soluções. Iniciamos exibindo a malha comum e enfatizando os operadores de diferença usuais para então descrever o método usual e seu comportamento.

A discretização usual do domínio $[0, L] \times]0, \infty[$ em malha numérica é descrita abaixo.

Seja $J \geq 1$ um número inteiro dado, definimos a malha com espaçamento constante Δx na discretização da variável espacial x pondo $\Delta x = \frac{L}{J}$ cujos pontos são dados por $x_j = j\Delta x$, $j = 0, 1, \dots, J$ e na variável tempo, analogamente, $t_n = n\Delta t$, $j = 0, 1, 2, \dots$ onde Δt é o passo associado à variável tempo e $n \geq 0$ um inteiro.

Denotaremos por u_j^n o valor da aproximação da solução no nível de tempo t_n e na posição x_j , isto é

$$u_j^n \cong u(x_j, t_n),$$

em que $u(x, t)$ é a solução exata.

Consideramos também os seguintes operadores de diferenças finitas (usuais) no espaço e no tempo

Esquema de Euler avançado (Primeira ordem):

$$\partial_x u_j^n := \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}, \quad \partial_t u_j^n := \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Esquema de Euler atrasado (Primeira ordem):

$$\bar{\partial}_x u_j^n := \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}, \quad \bar{\partial}_t u_j^n := \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t}.$$

Diferença central (Primeira ordem):

$$\frac{\partial_x + \bar{\partial}_x}{2} u_j^n := \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}, \quad \frac{\partial_t + \bar{\partial}_t}{2} u_j^n := \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{\Delta t}.$$

Esquema de diferença centrada (segunda ordem):

$$\bar{\partial}_x \partial_x u_j^n := \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}, \quad \bar{\partial}_t \partial_t u_j^n := \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\Delta t^2}.$$

Como é bem conhecido da literatura a definição desses operadores é proveniente do desenvolvimento em série de Taylor desde que admitida a possibilidade desse desenvolvimento.

Para o cálculo numérico do esquema usual usamos os esquemas de diferenças finitas centrados em todos os termos para aproximar a equação (2.25), que já discretizada é:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \tau_0 \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta t)^2} = d(t_n) \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}, \quad (3.1)$$

onde $d(t_n)$ corresponde ao valor de $d(t)$ calculado em t_n .

Explicitando u_j^{n+1} obtemos a relação de recursão:

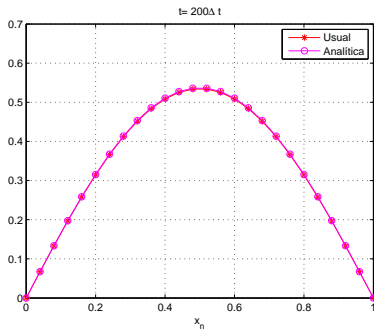
$$u_j^{n+1} = \frac{\Delta t R (u_j^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \tau_0 (2u_j^n - u_j^{n-1}) + (\Delta t/2) u_j^{n+1}}{\tau_0 + \Delta t/2}, \quad (3.2)$$

onde $R = d(t_n) \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$. Para o valor inicial temos

$$u_j^1 \approx u_j^0 - \frac{(\pi \Delta t)^2}{2\tau_0} \sin(\pi j(\Delta x)); \quad j = 1, \dots, J-1. \quad (3.3)$$

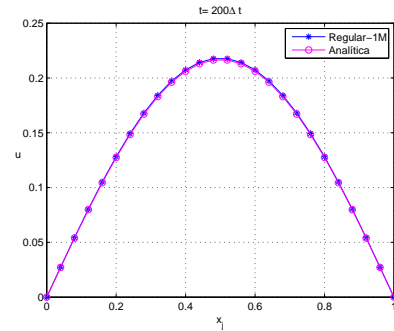
A este modelo usual (3.2) denominaremos de Regular-1M. Comparamos o modelo usual em malha regular com $d(t) = 1$, $\forall t$ usado em (Mickens e Jordan[23]) com o modelo Regular-1M (para $d(t) = b - t$) e com suas respectivas soluções analíticas para observar o comportamento desses modelos em relação a suas soluções. Para as simulações seguintes usamos $\tau_c = (2\pi)^{-2}$ e tomamos t na forma $t = K\Delta t$, com $\Delta t = 0.0004$ e $\Delta x = 0.04$.

Figura 4: $\tau_0 = \tau_c$



Este é equivalente ao esquema usual usado por Mickens em (Mickens e Jordan[23]). Para $t = 200\Delta t$ ele apresenta uma excelente convergência com a solução exata. Note que esta é positiva.

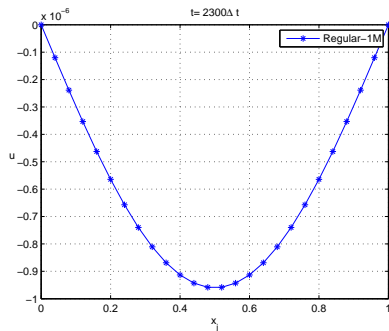
Figura 5: $\tau_0 = \tau_c, d(t) = (2 - t)$



Este é o esquema Regular-1M. Note que o comportamento é similar ao usual a menos de uma escala proveniente do coeficiente dependente do tempo.

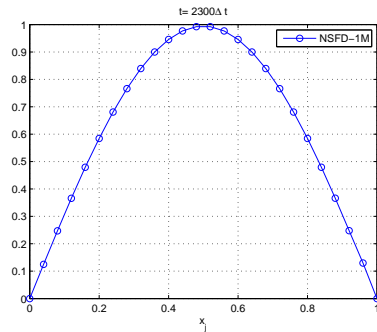
Num primeiro momento pode-se pensar que de fato a discretização usual representa bem a solução do problema. Porém basta aumentar um pouco o valor de K para verificar que esta solução não preserva a positividade. Na imagem seguinte comparamos com o método NSFD-1M que será abordado no capítulo seguinte.

Figura 6: $\tau_0 = \tau_c, d(t) = (2 - t)$



Esquema Regular-1M. Para $K = 2300$ ele já não manteve a positividade das soluções.

Figura 7: $\tau_0 = \tau_c, d(t) = (2 - t)$



Esquema Nonstandard-1M Aplicadas as mesmas condições vemos que este esquema preserva a positividade.

O modelo numérico Regular-1M apresenta muitas características matemáticas boas como possuir convergência da ordem $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ e energia associada com comportamento compatível com a energia da solução analítica do sistema.(como veremos em capítulos seguintes) porém fisicamente a positividade é uma propriedade qualitativa que o esquema usual-1M não assegura.

3.2 Esquema Nonstandard

O precursor do esquema Nonstandard construído em (Mickens e Jordan[23]) é dado por:

$$(1 - 2\epsilon) \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + 2\epsilon \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \tau_0 \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{(\Delta t)^2} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (3.4)$$

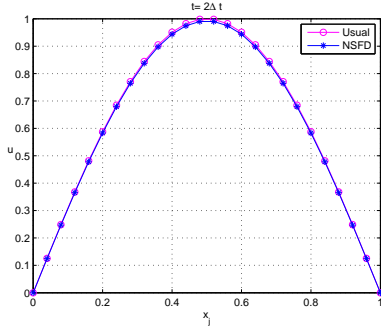
Assim vemos que para $\epsilon = 1/2$ este resulta no esquema usual (3.2) com $R = \Delta t / \Delta x^2$ e se $\epsilon = \tau_0 / \Delta t$, resulta em:

$$u_j^{n+1} = (1 - 2\sigma)u_j^n + \sigma(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (3.5)$$

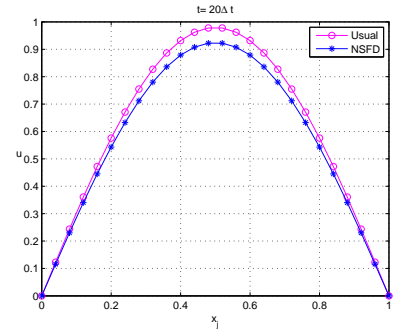
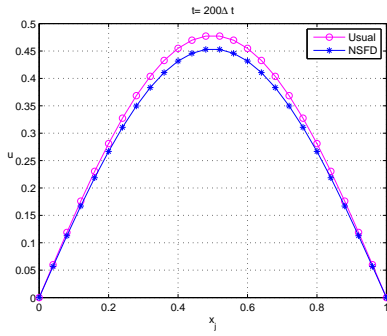
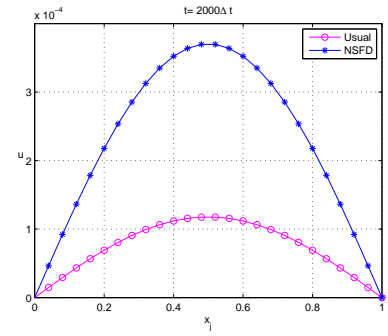
com $\sigma = \Delta t / (\Delta x)^2$, estável se $\sigma \leq 1/2$. Em particular para $\sigma = 1/4$ Obtemos o esquema NSFD-1 de (Mickens e Jordan[23]) dado por

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{4}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + \frac{1}{2}u_j^n. \quad (3.6)$$

Abaixo reproduzimos a implementação do esquema NSFD-1 (3.6) e usual (3.2) com $R = 1/4$, encontrados no artigo (Mickens e Jordan[23]).

Figura 8: $t = 2(\Delta t)$


Esquema

 Figura 9: $t = 20(\Delta t)$

 Figura 10: $t = 200(\Delta t)$

 Figura 11: $t = 2000(\Delta t)$


Usamos $t = K\Delta t$, $\tau_0 = \tau_c/2$, $\tau_c = 2\pi(-2)$, $\Delta t = 0.0004$, $\Delta x = 0.04$. Veja que o esquema NSFD começa decaindo mais rápido que o esquema usual mas logo depois apresenta um decaimento mais lento.

Um segundo Esquema Nonstandard abordado por Mickens em (Mickens e Jordan[24]) denominado de NSFD -2 é exposto a seguir: A partir das seguintes aproximações

A primeira derivada no tempo

$$u_t(x_j, t_n) \approx (1 - \epsilon) \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \epsilon \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t}. \quad (3.7)$$

A segunda derivada no espaço

$$u_{xx}(x_j, t_n) \approx \frac{u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}, \quad (3.8)$$

e a segunda derivada no tempo

$$u_{tt}(x_j, t_n) \approx \frac{u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n}{\Delta t^2}. \quad (3.9)$$

Assim obtemos a partir da Formulação de Maxwell-Cattaneo que

$$(1 - \epsilon) \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \epsilon \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \tau_0 \frac{u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n}{\Delta t^2} \quad (3.10)$$

$$= (1 - \epsilon) \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \epsilon \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t}, \quad (3.11)$$

tomamos $R = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, $\beta = \Delta t/\tau_0$ e reorganizamos (3.11) como

$$u_j^{n+1} = (1 - \alpha/2 + R + \beta^{-1}) u_j^{n-1} + u_j^n (\alpha/2 - R - \beta^{-1}) + R(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (3.12)$$

De acordo com (Mickens e Jordan[24]) com o intuito de garantir a positividade forcaremos o coeficiente de u_j^{n-1} a se igualar a R , o que determina α em função de R e β . Isto é,

$$\alpha = 2(2R + \beta^{-1})$$

Substituindo α em (3.12) chegamos a seguinte equação de cálculo computacional

$$u_j^{n+1} = \frac{Ru_j^{n-1} + (1 - 4R)u_j^n + R(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)}{1 - R} \quad (3.13)$$

Assim, como no NSDF-1, fixamos $R = \frac{1}{4}$, e portanto, a equação (3.13) se reduz ao que Mickens e Jordan (Mickens e Jordan[24]) chamam de "Nonstandard Finite Difference Scheme " Que denominaremos NSDF-2, dado por

$$u_j^{n+1} = \frac{u_j^{n-1} + (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)}{3} \quad (3.14)$$

Assim como no esquema usual o valor de u_j^{n+1} depende diretamente do valor de u_j^{n-1} para calcular o valor de u_j^{n-1} usaremos novamente a aproximação dada por

$$u_j^1 \approx u_j^0 - \frac{\pi^2 \beta (\Delta t)}{2} \sin(\pi j \Delta x), \quad j = 1, 2, \dots, J - 1 \quad (3.15)$$

Uma característica importante é que o esquema *NSDF2* além de depender diretamente de u_j^{n-1} também está em função de τ_0 , pois $\beta = \Delta t/\tau_0$ o que não ocorria no Nonstandard-1.

Verificaremos agora que este método é uma aproximação para uma equação de ondas. Para verificar este fato procederemos da seguinte forma:

Tomamos R da forma $R = \frac{1}{p}$, $p \geq 4$ e substituímos em (3.13) obtendo

$$u_j^{n+1} = \frac{\frac{1}{p}u_j^{n-1} + (1 - \frac{4}{p})u_j^n + \frac{1}{p}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)}{1 - \frac{1}{p}}, \quad (3.16)$$

$$(1-p)u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + (p-4)u_j^n, \quad (3.17)$$

ao somarmos $-2u_j^n$ em ambos os lados da igualdade e somar e subtrair u_j^{n-1} no lado esquerdo podemos manipular a equação resultante de forma a obter

$$(u_j^{n-1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}) + 2(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) + (p-4)(u_j^{n+1} - u_j^n) = u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n, \quad (3.18)$$

equivalente a

$$\Delta t^2 \frac{u_j^{n-1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\Delta t^2} + 4\Delta t \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + (p-4)\Delta t \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \Delta x^2 \frac{u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n}{\Delta x^2}, \quad (3.19)$$

Considerando as aproximações de derivada $u_t(x_j, t_n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$ e $u_{xx}(x_j, t_n) \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$ podemos reescrever (3.19) e obtemos

$$\Delta t^2 u_{tt} + p\Delta t u_t = \Delta x^2 u_{xx}. \quad (3.20)$$

se $p = 4$, a forma de (3.20) é consistente com a equação de onda em (Mickens e Jordan [23]).

Trabalharemos agora o modelo (3.5). (Sousa[16]) mostra que este esquema tem consistência expressa por

$$(1 - 2\epsilon)\partial_t u(x_j, t_n) + 2\epsilon\partial_t u(x_j, t_n) + \tau_0\bar{\partial}_t\partial_t u(x_j, t_n) - \bar{\partial}_x\partial_x u(x_j, t_n) = (\Delta t, \Delta x^2). \quad (3.21)$$

Para nossos propósitos a equação (3.5) torna-se

$$u_j^{n+1} = (1 - 2\sigma^n)u_j^n + \sigma^n(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad (3.22)$$

onde

$$\sigma^n = \frac{d(t_n)\Delta t}{\Delta x^2}$$

. Baseado no trabalho de (Sousa[16]) temos que este método é consistente. A condição de estabilidade é

$$\sigma \leq \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2d(t_n)} \quad (3.23)$$

Como σ^n está variando com o tempo não é possível fazer $\sigma^n = \frac{1}{4}$ para obter o esquema NSFD-1. Porém através de testes computacionais verificamos que

$$\frac{1}{6} \leq \sigma^n \leq \frac{1}{2}, \quad (3.24)$$

mantém as características qualitativas do método NSFD-1 este intervalo de limitação garante-nos a estabilidade do método. Assim podemos escolher a função $d(t)$ de forma a manter a estabilidade na faixa de tempo a ser calculada. Ao esquema (3.22) em que σ^n satisfaz a condição (3.24) denominaremos método NSFD-1M.

3.2.1 Uma equivalência importante

Tomando o esquema

$$u_j^{n+1} = d^n R(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + u_j^n(1 - 2d^n R), \quad (3.25)$$

onde $R = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$. Escolhemos R da forma $R = \frac{1}{p}$ com $4 \leq p \leq 6$ então

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - u_j^n &= \frac{d^n}{p}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - 2\frac{d^n}{p}u_j^n, \\ p(u_j^{n+1} - u_j^n) &= d^n(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n), \\ p\Delta t \left(\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \right) &= d^n \Delta x^2 \left(\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Assumindo que $u_t(x_j, t_n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$ e $u_{xx}(x_j, t_n) \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$ podemos escrever (3.26) como

$$(p\Delta t)u_t(x_j, t_n) - (\Delta x^2 d(t))u_{xx}(x_j, t_n) = 0, \quad (3.27)$$

(3.27) é a equação do calor ligeiramente perturbada. Para $p = 4$ e $d(t) = 1 \forall t$ recuperamos a equação que realmente é discretizada no esquema *NSFD-1* de (Mickens e Jordan[23]), isto é,

$$(4\Delta t)u_t - (\Delta x^2)u_{xx} = 0. \quad (3.28)$$

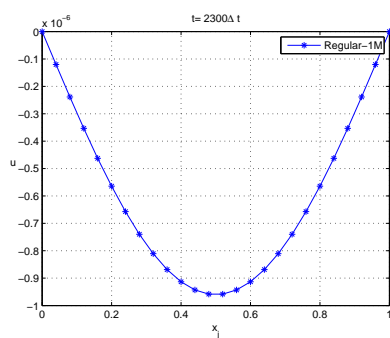
Note que o método NSFD-1M descreve a equação do calor perturbada. Esta pequena perturbação advinda do tamanho dos passos Δt , Δx e de p é a responsável pela "amenização" do problema de velocidade de propagação infinita, pois foi alteração resultante mediante as hipóteses impostas sobre o desenvolvimento do modelo de Maxwell-Cattaneo. Destacamos algumas conclusões a respeito do Esquema NSFD-1M (3.22)

- i) O esquema preserva a positividade de soluções numéricas para a equação de Maxwell-Cattaneo, em contraposição ao esquema usual;
- ii) O esquema envolve dois níveis de tempo t^n , t^{n+1} ao invés de três níveis de tempo como é de se esperar de esquemas numéricos hiperbólicos;
- iii) O esquema independe de τ_0 .

No geral o Esquema NSFD-1M produz soluções com propriedades qualitativamente corretas. Em particular elas decrescem monotonicamente para zero quando o tempo aumenta.

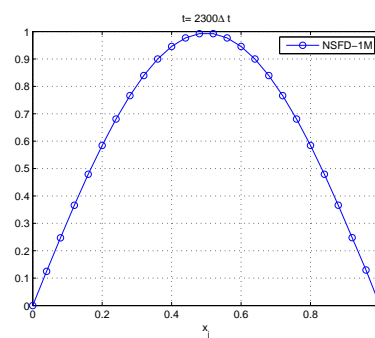
As figuras seguintes mostram simulações numéricas comprovando a afirmação (i) comparada com o esquema Regular-1M. Maiores detalhes serão discutidos na seção de Comparação de Simulações.

Figura 12: Regular Modificado



$$\tau_0 = \tau_c$$

Figura 13: NSFD-1 Modificado



$$\tau_0 = \tau_c$$

4 Diferenças finitas não-usual em malha deslocada

4.1 Esquema usual

Neste capítulo realizamos a proposta do trabalho, isto é, conseguir um esquema numérico em diferenças finitas para equação da onda com damping representante do propagação do calor e com coeficiente de difusão dependente do tempo, esquema este que preserve a positividade das soluções, mesmo em malha deslocada. A importância da malha deslocada foi enfatizada na introdução do trabalho, entretanto destacamos agora que o resultado de (Oishi et al.[9]) em mostrar que o esquema de Crank-Nicolson, conhecido por ser incondicionalmente estável, pode tornar-se condicionalmente estável se em malha deslocada e sua restrição é $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < 2$. Portanto precisamos ter cuidado especial com a estabilidade ao trabalhar na malha deslocada. Para tal, usaremos o método utilizado por Oishi em (Oishi et al.[9]) adaptado a seguir:

Discretizamos o intervalo $[0, 1]$ por um conjunto de pontos igualmente espaçados $x_i = (i - 0.5)\delta x$ para $i = 0, 1, \dots, m, m + 1$ com $\delta x = \frac{1}{m}$ e aproximamos a EDP nos pontos internos x_1, x_2, \dots, x_m por um método numérico. Os pontos x_0 e x_{m+1} não coincidem com os extremos do intervalo $[0, 1]$ assim precisamos fazer uma interpolação para encontrar os valores de x_0 e x_{m+1} a serem usados no método numérico escolhido.

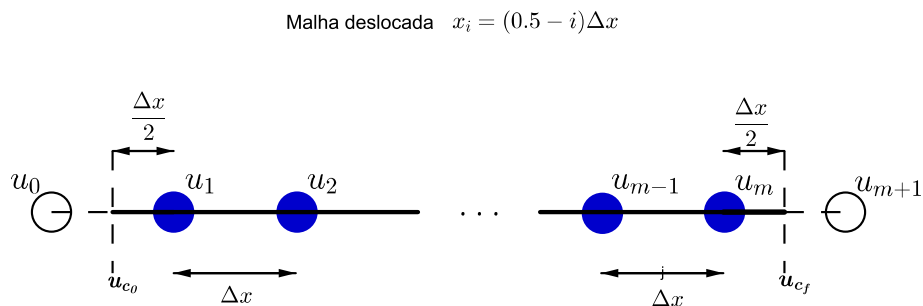


Figura 14: $u(0, t) = u_{c_0}$, $u(1, t) = u_{c_f}$. Em particular tomamos $u_{c_0} = u_{c_f} = 0$.

O polinômio interpolador, de grau um, nos pontos (x_0, u_0^l) e (x_1, u_1^l) no nível genérico de tempo l é dado por

$$P_1(x) = \frac{1}{\delta x}((x - x_0)u_1^l - (x - x_1)u_0^l). \quad (4.1)$$

Usando a condição de contorno $u(0, t) = 0$, temos que

$$P_1(0) = 0 = \frac{1}{\delta x} \left(\frac{\delta x}{2} (u_1^l + u_0^l) \right) = \frac{1}{2} (u_0^l + u_1^l) \quad (4.2)$$

Analogamente a interpolação no ponto final $x = 1$ determina a equação

$$\frac{1}{2} (u_{m+1}^l + u_m^l) \quad (4.3)$$

Deste modo as equações para os valores desconhecidos u_0^l e u_1^l tornam-se

$$u_0^l = -u_1^l \text{ e } u_{m+1}^l = -u_m^l \quad (4.4)$$

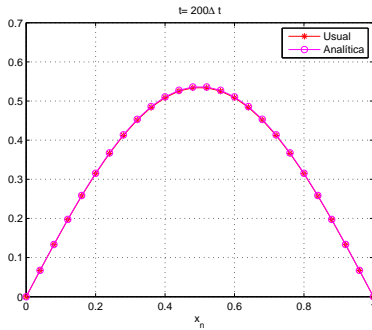
A forma do modelo discreto Regular -1M, já foi obtida anteriormente

$$u_j^{n+1} = \frac{\Delta t R (u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \tau_0 (2u_j^n - u_{j-1}^n) + (\Delta t/2) u_j^{n+1}}{\tau_0 + \Delta t/2}, \quad (4.5)$$

com $R = d(t_n) \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$.

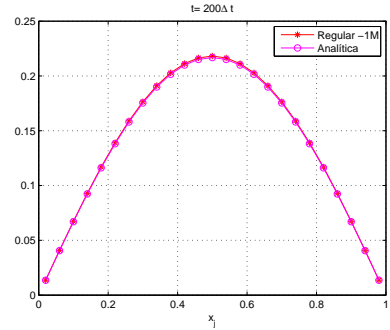
Usaremos as condições de fronteira $u_0^n = -u_1^n$, $u_{m+1}^n = -u_m^n$ e a solução exata para substituição na primeira faixa u_j^1 . A figura seguinte mostra uma simulação do método para os mesmos dados usados na malha regular.

Figura 15: malha regular



$$\tau_0 = \tau_c$$

Figura 16: malha deslocada



$$\tau_0 = \tau_c, \quad d(t) = (2 - t)$$

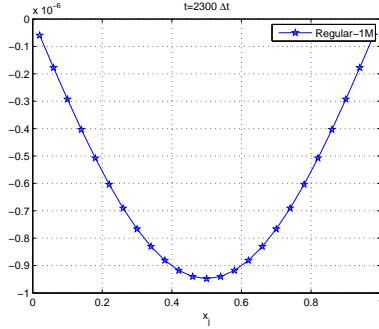
Como visto anteriormente basta aumentar um pouco o valor de K para verificar que esta solução não preserva a positividade. Na imagem abaixo comparamos com o método NSFD-1M em malha deslocada que será abordado no capítulo seguinte.

4.1.1 Esquema NSFD1 modificado

Para nosso modelo modificado, como visto anteriormente em (3.22), a equação é

$$u_j^{n+1} = (1 - 2\sigma^n) u_j^n + \sigma^n (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad (4.6)$$

Figura 17: Regular Modificado



$$\tau_0 = \tau_c \text{ e } d(t) = (2 - t)$$

onde

$$\sigma^n = \frac{d(t_n)\Delta t}{\Delta x^2}.$$

Baseado no trabalho de (Sousa[16]) temos que este método é consistente. Porém a estabilidade não está garantida uma vez que o método de Von Neumann usado para provar a estabilidade não leva em consideração as condições de contorno, que mesmo sendo de Dirichlet se alteram por trabalharmos em uma malha deslocada. Na próxima seção veremos este fato e analisaremos a estabilidade do método modificado (4.6).

4.1.2 Estabilidade do esquema NSFD1 modificado

Para analisar a estabilidade de (4.6) devido a malha deslocada e ao coeficiente dependente do tempo utilizaremos o método espectral com auxílio do seguinte teorema(excepcional) devido a Yueh (Yueh[30])

Teorema 4.1 *Seja a matriz tridiagonal da seguinte forma*

$$P = \begin{bmatrix} -\alpha + b & c & 0 & \cdots & 0 \\ a & b & c & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & a & b & c \\ 0 & \cdots & 0 & a & -\beta + b \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Então os autovalores λ_i^P de P são dados por

$$\lambda_i^P = \begin{cases} b + 2\sqrt{ac} \cos\left(\frac{i\pi}{m+1}\right), & i = 1, \dots, m \text{ se } \alpha = \beta = 0, \\ b + 2\sqrt{ac} \cos\left(\frac{i\pi}{m}\right), & i = 1, \dots, m \text{ se } \alpha = \beta = \sqrt{ac} \neq 0, \\ b + 2\sqrt{ac} \cos\left(\frac{(i-1)\pi}{m}\right), & i = 1, \dots, m \text{ se } \alpha = \beta = -\sqrt{ac} \neq 0. \end{cases} \quad (4.8)$$

Agora, em modo matricial, consideramos a seguinte forma geral de um sistema linear de EDO's; $A(\sigma^n)u^{n+1} = B(\sigma^n)u^n$, e reescrevemos o sistema como $u^{n+1} = M(\sigma^n)u^n$ com a Matriz de iteração $M(\sigma^n) = A^{-1}(\sigma^n)B(\sigma^n)$. Adotamos a seguinte definição de estabilidade:

Para um esquema ser estável uma pequena perturbação nos dados iniciais não deve ser amplificada ao longo do processo, isto é, seja $\bar{u}^0 = u^0 + \epsilon$ então

$$\begin{aligned}\bar{u}^1 &= M(\sigma^1)(u^0 + \epsilon) = u^1 + M(\sigma^1)\epsilon \\ \bar{u}^2 &= M(\sigma^2)(u^1 + M(\sigma^1)\epsilon) = u^2 + M(\sigma^2)M(\sigma^1)\epsilon \\ &\vdots \\ \bar{u}^{n+1} &= u^{n+1} + M(\sigma^n)M(\sigma^{n-1})\dots M(\sigma^2)M(\sigma^1)\epsilon.\end{aligned}$$

Note que para $\bar{u}^{n+1} \approx u^{n+1}$ devemos ter $\lim_{n \rightarrow \infty} M(\sigma^n)M(\sigma^{n-1})\dots M(\sigma^2)M(\sigma^1)\epsilon = 0$. Assim definimos

Definição 4.1 *Um esquema é estável se*

$$M(\sigma^n)M(\sigma^{n-1})\dots M(\sigma^2)M(\sigma^1) \rightarrow 0 \text{ quando } n \rightarrow \infty$$

Agora usamos as condições de contorno

$$u_0^n = -u_1^n \text{ e } u_{m+1}^n = -u_m^n \quad (4.9)$$

na construção da forma matricial para o esquema (4.6), resultando no esquema

$$B(\sigma^n) = I + \sigma^n \bar{B} \quad (4.10)$$

onde

$$\bar{B} = \begin{bmatrix} -3 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -3 \end{bmatrix}_{m \times m} \quad (4.11)$$

Assim temos que $M(\sigma^n) = B(\sigma^n)$.

Teorema 4.2 *Seja $0 < \sigma^j < \frac{1}{2}$ para todo j . Então*

$$M(\sigma^n)M(\sigma^{n-1})\dots M(\sigma^2)M(\sigma^1) \rightarrow 0,$$

quando $n \rightarrow +\infty$.

Demonstração 4.1 *Seja $\epsilon > 0$ escolhido tal que $\epsilon \leq \sigma^j \leq \frac{1}{2} - \epsilon$ para todo j .*

Pelo fato de que $M(\sigma^j) = I + \sigma^j \bar{B}$, para um índice genérico j , e que \bar{B} é simétrica assim assim podemos definir

$$\prod_{j=1}^n M(\sigma^j) = \prod Q (I + \sigma^j D) Q^T = Q \left[\prod_{j=1}^n (I + \sigma^j D) \right] Q^T. \quad (4.12)$$

Os auto valores de M são dados por

$$\lambda_i^M = \prod_{j=1}^n (1 + \sigma^j \lambda_i^{\bar{B}}) = \prod_{j=1}^n (1 - 4\sigma^j \sin^2(\frac{i\pi}{2m})), \quad i = 1, \dots, m, \quad (4.13)$$

e desde que M é simétrica.

$$\|M\|_2 = \max_{i=1,2,\dots,m} \prod_{j=1}^n \left| 1 - 4\sigma^j \sin^2(\frac{i\pi}{2m}) \right|. \quad (4.14)$$

Para limitar este produto usamos o desigualdade $\frac{2x}{\pi} \leq \sin x \leq \min(x, 1)$ para $0 \leq x \leq \frac{\pi}{2}$. Note que $i = m$ e assim $\sin(\frac{i\pi}{2m}) = 1$. Enquanto $1 \leq i \leq m - 1$ pegamos $\frac{1}{m} \leq \frac{i}{m} \leq \sin(\frac{i\pi}{2m}) < 1$. então para todo j e $1 \leq i \leq m$,

$$\begin{aligned} \left| 1 - 4\sigma^j \sin^2(\frac{i\pi}{2m}) \right| &\leq \max \left(\left| 1 - 4\sigma^j/m \right|, \left| 1 - 4\sigma^j \right| \right), \\ \left| 1 - 4\sigma^j \sin^2(\frac{i\pi}{2m}) \right| &\leq \max \left(\left| 1 - 4\epsilon/m \right|, \left| 1 - 4\left(\frac{1}{2} - \epsilon\right) \right| \right), \\ \left| 1 - 4\sigma^j \sin^2(\frac{i\pi}{2m}) \right| &= \left| 1 - 4\epsilon/m \right|. \end{aligned}$$

Disto, obtemos

$$\|M\|_2 \leq |1 - 4\epsilon/m|^n \rightarrow 0, \quad (4.15)$$

quando $n \rightarrow \infty$.

Concluimos que o método aplicado ao nosso problema é estável se

$$0 \leq \sigma^j \leq \frac{1}{2}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (4.16)$$

A forma discreta da condição de positividade é

$$u_m^k \geq 0 \Rightarrow u_m^{k+1} \geq 0 \quad \forall k. \quad (4.17)$$

Para k fixado e todos os valores relevantes de m da equação (4.17) é evidente que se $1 - 2R \geq 0$ a condição de positividade é sempre satisfeita em (4.6) e por esta condição podemos colocar a seguinte limitação para o tamanho do passo de tempo

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2}.$$

Notemos que esta limitação em Δt é idêntica ao critério usual de estabilidade da equação do calor com coeficiente de difusão constante.

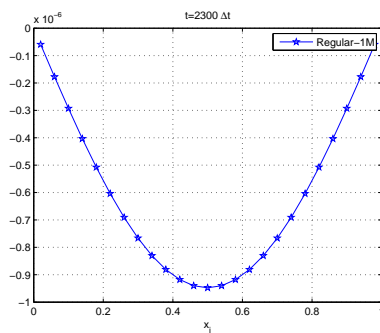
Destacamos agora algumas conclusões mantidas a respeito do Esquema NSFD-1M (4.6) em malha deslocada:

- i) O esquema preserva a positividade de soluções numéricas para a equação de Maxwell-Cattaneo;
- ii) O esquema envolve dois níveis de tempo t^n, t^{n+1} ao invés de três níveis de tempo como é de se esperar de esquemas numéricos hiperbólicos;
- iii) O esquema independe de τ_0 .

No geral, o esquema NSFD-1M produz soluções com propriedades qualitativamente corretas. Em particular elas decrescem monotonicamente para zero quando o tempo aumenta.

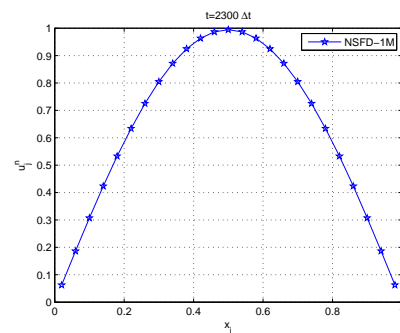
As figuras seguintes mostram simulações numéricas do esquema regular e Nonstandard comprovando a afirmação (i). Maiores detalhes serão discutidos na seção seguinte.

Figura 19: Malha Deslocada



$$\tau_0 = \tau_c \text{ e } d(t) = (2 - t)$$

Figura 20: Malha Deslocada



$$\tau_0 = \tau_c \text{ e } d(t) = (2 - t)$$

4.2 Comparação de simulações

Nesta secção reproduziremos, através de simulações em Matlab, os métodos tratados com coeficiente dependente do tempo e comparamos o método usual com o método Nonstandard variando o valor de τ_0 na malha deslocada para diferentes faixas de tempo.

Figura 21: $\tau_0 = \tau_c/2$

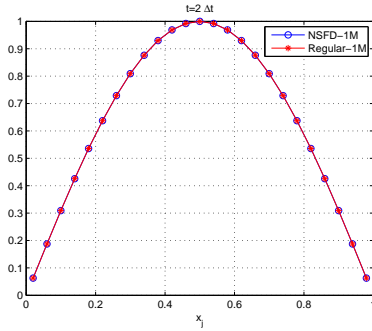


Figura 22: $\tau_0 = \tau_c/2$

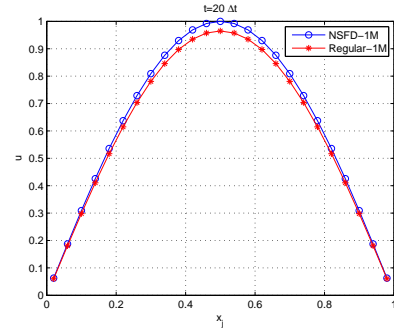


Figura 23: $t = K\Delta t$; $K = \{2, 20\}$, $\Delta t = 0.0004$, $\Delta x = 0.04$, $d(t) = (2 - t)$

Na figura acima percebemos que os dois esquemas não possuem diferenças gráficas consideráveis em relação a convergência num primeiro momento. Na malha deslocada com

Figura 24: $\tau_0 = \tau_c/2$

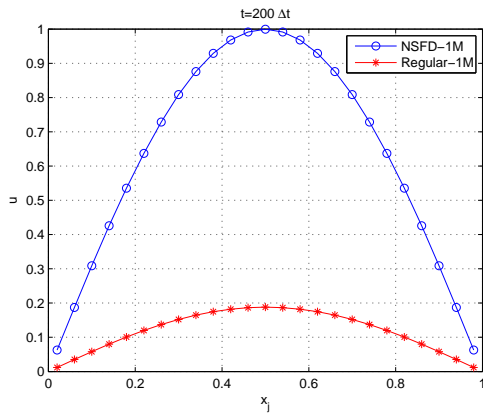


Figura 25: $\tau_0 = \tau_c/2$

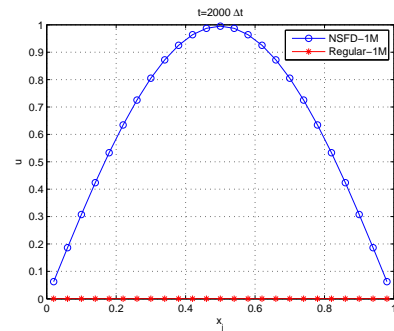


Figura 26: $t = K\Delta t$; $K = \{200, 2000\}$, $\Delta t = 0.0004$, $\Delta x = 0.04$, $d(t) = (2 - t)$

coeficiente de difusão dependente do tempo o método Regular -1M decresce para zero mais rápido que o NSFD-1M.

Agora mudamos o valor de τ_0 para $\tau_0 = \tau_c$

Veja que tomando $\tau_0 = \tau_c/2$ o que acelerou os efeitos em relação as simulações feitas com $\tau_0 = \tau_c$.

Figura 27: $\tau_0 = \tau_c$

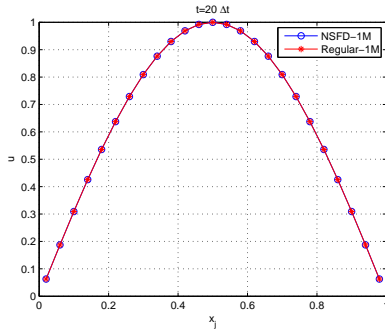


Figura 28: $\tau_0 = \tau_c$

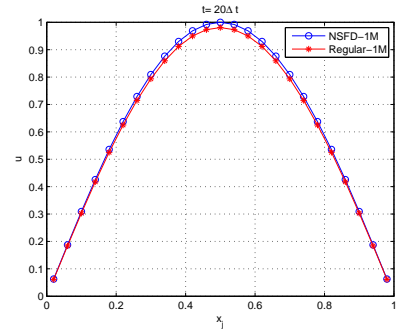


Figura 29: $t = K\Delta t$; $K = \{2, 20\}$, $\Delta t = 0.0004$, $\Delta x = 0.04$, $d(t) = (2 - t)$

Figura 30: $\tau_0 = \tau_c$

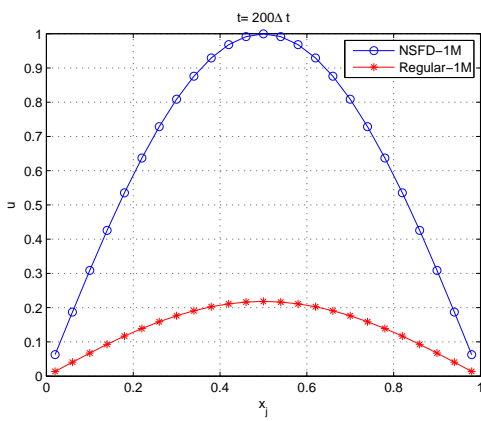


Figura 31: $\tau_0 = \tau_c$

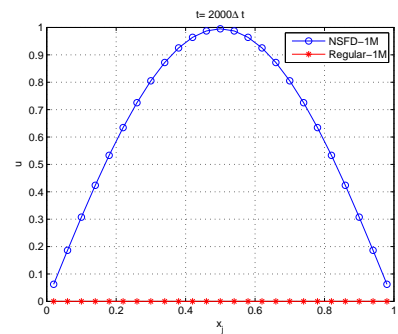


Figura 32: $t = K\Delta t$; $K = \{200, 2000\}$, $\Delta t = 0.0004$, $\Delta x = 0.04$, $d(t) = (2 - t)$

5 Propriedades da energia

5.1 Energia dos sistemas de evolução

Sistemas de evolução possuem um importante funcional não-linear dependente do tempo o qual é conhecido como energia. Assim energias de sistemas de evolução são importantes pois nos fornecem informação a respeito da natureza das soluções do próprio sistema mesmo que a solução em si nem seja conhecida, além disso energia é um recurso muito útil em análise não linear. Neste capítulo trataremos da energia e de seus comportamentos no contínuo e no discreto para formulação de Maxwell-Cattaneo e em suas discretizações dos modelos usual e Nonstandard.

É bem conhecido que a energia das soluções do sistema de equações de ondas é dada por:

$$E(t) := \frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^1 u_x^2 dx, \quad (5.1)$$

correspondente a soma das energias potencial e cinética respectivamente. Para equação com coeficiente de difusão dependente do tempo definimos

$$E(t) := \frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx + \frac{d(t)}{2} \int_0^1 u_x^2 dx. \quad (5.2)$$

Agora retomamos o modelo modificado:

Seja $d(t) > 0 \forall t > 0$, uma função do tempo contínua, decrescente e limitada inferiormente.

$$u_t + \tau_0 u_{tt} - d(t) u_{xx} = 0 \quad (5.3)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad t > 0 \quad (5.4)$$

$$u_t(x, 0) = 0, \quad x \in (0, 1) \quad (5.5)$$

A seguir mostraremos que a energia é dissipada com o passar do tempo.

Proposição 5.1 *O funcional energia $E(t)$ do sistema (5.3)-(5.5) satisfaz*

$$E(t) \leq E(0), \quad \forall t \geq 0.$$

Demonstração 5.1 *Multiplicamos a equação (5.3) por u_t e integramos em $\Omega = (0, 1)$. Segue que*

$$\int_0^1 u_t u_t dx + \tau_0 \int_0^1 u_{tt} u_t dx - d(t) \int_0^1 u_{xx} u_t dx = 0.$$

Aplicamos integração por partes na última parcela e obtemos

$$\int_0^1 u_t u_t dx + \tau_0 \int_0^1 u_{tt} u_t dx - d(t) u_x u_t \Big|_0^1 + d(t) \int_0^1 u_{xt} u_x dx = 0. \quad (5.6)$$

Pela regra da cadeia temos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial u_t^2}{\partial t} &= u_t u_{tt}, \\ \frac{1}{2} \frac{\partial u_x^2}{\partial t} &= u_x u_{xt}, \end{aligned}$$

substituindo (5.7) e (5.7) em (5.6) obtemos

$$\int_0^1 u_t^2 dx + \tau_0 \int_0^1 \frac{\partial u_t^2}{\partial t} dx - d(t) u_x u_t \Big|_0^1 + d(t) \int_0^1 \frac{\partial u_x^2}{\partial t} dx = 0. \quad (5.7)$$

Utilizando as condições de contorno (5.4) vem que

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{2} \left[\tau_0 \int_0^1 u_t^2 dx + d(t) \int_0^1 u_x^2 dx \right] = - \int_0^1 u_t^2 dx. \quad (5.8)$$

Assim

$$\frac{d}{dt} E(t) = - \int_0^1 u_t^2 dx, \quad d(t) \geq 0.$$

Como a derivada é sempre negativa isto mostra que $E(t)$ é decrescente e portanto concluímos a respeito da dissipação de energia como dado abaixo.

$$E(t) \leq E(0), \quad \forall t \geq 0.$$

5.2 Decaimento exponencial das soluções

Nesta secção mostraremos o decaimento exponencial das energias dos sistemas de Maxwell-Cattaneo sem o coeficiente dependente do tempo de (Mickens e Jordan[23]) e do modelo modificado (5.3)-(5.5), usando diretamente as soluções dos respectivos problemas.

A priori faremos o cálculo da energia para solução analítica. Para maior comodidade do leitor repetimos as formulas de energia (5.1) e (5.2) respectivamente:

A energia do modelo de Maxwell-Cattaneo

$$E(t) := \frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^1 u_x^2 dx, \quad (5.9)$$

e a do modelo modificado (5.3)-(5.5)

$$E_N(t) := \frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx + \frac{d(t)}{2} \int_0^1 u_x^2 dx, \quad (5.10)$$

As soluções em ambos os modelos são da forma $u(x, t) = \sin(\pi x)T(t)$. Derivando $u(x, t)$ em relação a variável t temos o seguinte

$$u_t = \sin(\pi x)T'(t). \quad (5.11)$$

Agora substituindo (5.11) em $\frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx$ obtemos

$$\frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx = \frac{\tau_0}{2} T'(t)^2 \int_0^1 \sin^2(\pi x) dx \Rightarrow \frac{\tau_0}{2} \int_0^1 u_t^2 dx = \frac{\tau_0}{4} T'(t)^2, \quad (5.12)$$

Por outro lado, derivando $u(x, t)$ em relação a variável x temos o seguinte:

$$u_x = \pi \cos(\pi x)T(t). \quad (5.13)$$

Daí

$$\frac{1}{2} \int_0^1 u_x^2 dx = \frac{1}{2} T(t)^2 \pi^2 \int_0^1 \cos^2(\pi x) dx \Rightarrow \frac{1}{2} \int_0^1 u_x^2 dx = \frac{1}{4} \pi^2 T(t)^2, \quad (5.14)$$

substituindo (5.12) e (5.14) em (5.2) Obtemos a energia da solução:

$$E(t) = \frac{\tau_0}{4} T'(t)^2 + \frac{d(t)}{4} \pi^2 T(t)^2. \quad (5.15)$$

Para o modelo modificado (5.3)-(5.5) temos que $T(t)$ e a derivada da parte dependente do tempo $T'(t)$ são dadas respectivamente por

$$T(t) = \frac{e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \sqrt{2}}{\frac{-Bi(\alpha) - 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Bi'(\alpha) Ai(\alpha)}}{Ai(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Ai'(\alpha)}} + Bi(\alpha)} \left(\frac{-Bi(\alpha) - 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Bi'(\alpha) Ai(\beta)}}{Ai(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0} Ai'(\alpha)}} + Bi(\beta) \right) \quad (5.16)$$

e

$$T'(t) = e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \left(\frac{\left(Bi(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0}} Bi'(\alpha) \right) Ai(\beta)}{2\tau_0 Ai(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0}} Ai'(\alpha)} + \right. \quad (5.17)$$

$$\left. + \frac{Bi(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0}} Bi'(\alpha) Ai'(\beta)}{Ai(\alpha) + 2\pi^{2/3} \sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0}} Ai'(\alpha)} + \frac{Bi(\beta)}{2\tau_0} - Bi'(\beta) \right) \quad (5.18)$$

com

$$\alpha = \left(\frac{\sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0}} (-1/4 + \pi^2 \tau_0 b)}{\pi^{4/3} \tau_0} \right) \text{ e } \beta = \left(\frac{\sqrt[3]{-\frac{1}{\tau_0}} (-1/4 + (b-t) \pi^2 \tau_0)}{\pi^{4/3} \tau_0} \right).$$

Veja que tanto $T(t)$ quanto $T'(t)$ são funções de $e^{-\frac{t}{2\tau_0}}$, daí podemos, sem perda de generalidade, concluir sobre o decaimento exponencial da solução.

Para a solução do sistema de Maxwell-Cattaneo baseado em (Sousa[16]) as energias são

- Primeiro caso $\tau_0 < \tau_c$;

Neste caso temos que

$$E(t) = \frac{\tau_0}{4} A(t)^2 + \frac{1}{4} \pi^2 B(t)^2 \quad (5.19)$$

onde

$$A(t) := -\frac{1}{2\tau_0} e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \left(\cosh(\omega t) + \frac{\sinh(\omega t)}{\sqrt{\Delta}} \right) + e^{-\frac{t}{\tau_0}} \left(\omega \sinh(\omega t) + \omega \cosh(\omega t) / \sqrt{\Delta} \right)$$

$$B(t) := e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \left(\cosh(\omega t) + \frac{\sinh(\omega t)}{\sqrt{\Delta}} \right)$$

- segundo caso $\tau_0 > \tau_c$; Obtemos

$$E(t) = \frac{\tau_0}{4} C(t)^2 + \frac{1}{4} \pi^2 D(t)^2, \quad (5.20)$$

onde

$$C(t) := -\frac{1}{2\tau_0} e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \left(\cosh(\omega t) + \frac{\sinh(\omega t)}{\sqrt{|\Delta|}} \right) + e^{-\frac{t}{\tau_0}} \left(\omega \sinh(\omega t) + \omega \cosh(\omega t) / \sqrt{|\Delta|} \right) \quad (5.21)$$

$$D(t) := e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \left(\cosh(\omega t) + \frac{\sinh(\omega t)}{\sqrt{|\Delta|}} \right) \quad (5.22)$$

- Caso $\tau_0 = \tau_c$.

e para este caso, temos a seguinte equação

$$E(t) = \frac{1}{4} e^{-\frac{t}{2\tau_0}} \left[\pi^2 \left(1 + \frac{t}{2\tau_0} \right)^2 + \frac{t^4}{8\tau_0^3} \right]. \quad (5.23)$$

As quatro energias $E(t)$ apresentadas acima decrescem exponencialmente para todo $t > 0$.

5.3 Energia numérica do esquema de Diferença Finita usual

Tomando como base a energia da solução analítica definimos a energia do esquema usual como:

$$E_U^n := \frac{\Delta x}{2} \sum_{j=0}^J \left[\tau_0 \left(\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \right)^2 + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}}{\Delta x} \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} \right]. \quad (5.24)$$

Proposição 5.2 Para todos Δt e Δx a energia E_s é tal que

$$E_s^n \leq E_s^0, \quad \forall n > 0. \quad (5.25)$$

Demonstração 5.2 De fato, o esquema regular é dado por

$$\tau_0 \left[\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{(\Delta t)^2} \right] + \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} = d(t_n) \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}, \quad (5.26)$$

multiplicamos (5.26) por $(u_j^{n+1} - u_j^{n-1})$ e somamos para $j = 1, \dots, J$. Segue que

$$\frac{\tau_0}{(\Delta t)^2} \sum_{j=1}^J (u_j^{n+1} - u_j^n)^2 - \frac{\tau_0}{(\Delta t)^2} \sum_{j=1}^J (u_j^n - u_j^{n-1})^2 + \sum_{j=1}^J \frac{(u_j^{n+1} - u_j^{n-1})^2}{2\Delta t} \quad (5.27)$$

$$= d(t_n) \sum_{j=1}^J \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} (u_j^{n+1} - u_j^{n-1}). \quad (5.28)$$

Observando apenas a parcela dada por (5.28) procedemos com a seguinte distribuição:

$$\frac{d(t_n)}{\Delta x^2} \sum_{j=1}^J [(u_{j-1}^n - u_j^n) + (u_{j-1}^n - u_j^n)] [-(u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}) + (u_{j+1}^{n-1} - u_j^{n-1}) + (u_{j+1}^{n+1} - u_{j+1}^{n-1})]. \quad (5.29)$$

Fazendo a distribuição no produto acima e substituindo em (5.27)-(5.28), obtemos

$$\sum_{j=1}^J \tau_0 \left(\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \right)^2 + d(t_n) \sum_{j=1}^J \frac{(u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}) (u_{j+1}^n - u_j^n)}{\Delta x} - \sum_{j=1}^J \tau_0 \left(\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} \right)^2 \quad (5.30)$$

$$+ d(t_n) \sum_{j=1}^J \frac{(u_{j+1}^{n-1} - u_j^{n-1}) (u_{j+1}^n - u_j^n)}{\Delta x} + \frac{d(t_n)S}{\Delta x^2} \leq 0, \quad (5.31)$$

onde

$$S = \sum_{j=1}^J [u_j^n u_j^{n+1} - u_j^n u_j^{n-1} + u_j^{n-1} u_{j-1}^n - u_j^{n+1} u_{j-1}^n - u_{j+1}^{n+1} u_{j+1}^n + u_{j+1}^{n+1} u_j^n + u_{j+1}^n u_{j+1}^{n-1} - u_{j+1}^{n-1} u_j^n]. \quad (5.32)$$

Usando a identidade dada por

$$d(t_n) \sum_{j=1}^J u_{j+1}^{n+1} u_{j+1}^n = d(t_n) \sum_{j=1}^J (u_j^{n+1} u_j^n) + u_{j+1}^{n+1} u_{j+1}^n - u_1^{n+1} u_1^n, \quad (5.33)$$

e considerando as condições de contorno $u_0^n = -u_1^n$, $u_{m+1}^n = -u_m^n$, $\forall n = 0, 1, \dots, N, N+1$, podemos reescrever S como

$$S = u_1^{n+1} u_1^n - u_1^n u_1^{n-1} = (u_1^{n+1} - u_0^{n+1})(u_1^n - u_0^n) - (u_1^n - u_0^n)(u_1^{n-1} u_0^{n-1}). \quad (5.34)$$

Substituindo S em (5.31), obtemos o resultado

$$E_s^n - E_s^{n-1} \leq 0 \Rightarrow E_s^n \leq E_s^0, \forall n \geq 0. \quad (5.35)$$

5.3.1 Energia numérica do esquema NSFD-1M

Verificamos que o esquema NSFD-1M é uma aproximação para a equação

$$(p\Delta t)u_t - (\Delta x^2 d(t))u_{xx} = 0. \quad (5.36)$$

Definimos a energia a nível contínuo como

$$E_N(t) = \frac{p}{2}\Delta t \int_0^1 u^2(x, t) dx. \quad (5.37)$$

Mostraremos agora que esta energia é decrescente.

Proposição 5.3 *O funcional Energia (5.37) satisfaz*

$$E_N(t) \leq E_N(0), \quad \forall t \geq 0.$$

Demonstração 5.3 *Multiplicamos (5.36) por $u(x, t)$ e integramos no intervalo $[0, 1]$*

$$p\Delta t \int_0^1 u_t u dx = \Delta x^2 d(t) \int_0^1 u_{xx} u dx. \quad (5.38)$$

Usando o fato de que $u_t u = \frac{1}{2} \frac{du^2}{dt}$ e integração por partes no lado direito da igualdade obtemos

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{p}{2} \Delta t \int_0^1 u^2(x, t) dx \right) = -\Delta x^2 d(t) \int_0^1 u_x^2(x, t) dx, \quad (5.39)$$

assim concluímos que

$$E_N(t) \leq E_N(0), \quad \forall t \geq 0. \quad \blacksquare$$

Definimos agora a energia numérica do esquema (5.36) como

$$E_N^n(t) := \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^n)^2, \quad (5.40)$$

e estabelecemos o seguinte resultado:

Proposição 5.4 *Para todos Δt e Δx a energia E_N^n é decrescente, isto é,*

$$E_N^{n+1} \leq E_N^n \quad \forall n > 0.$$

Demonstração 5.4 *inicialmente tomemos*

$$E_N^{n+1} - E_N^n = \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J \left[(u_j^{n+1})^2 - (u_j^n)^2 \right]. \quad (5.41)$$

então

$$E_N^{n+1} - E_N^n = \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J [(u_j^{n+1} + u_j^n)(u_j^{n+1} - u_j^n)], \quad (5.42)$$

$$E_N^{n+1} - E_N^n = \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J \left[(u_j^{n+1} + u_j^n)(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \frac{1}{p} \right], \quad (5.43)$$

$$E_N^{n+1} - E_N^n = \frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J \left[u_j^n (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) + u_j^{n+1} (u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) - 2u_j^{n+1} u_j^n \right]. \quad (5.44)$$

Simplificaremos cada parcela da soma. Considerando as condições de contorno temos a seguinte igualdade para a primeira parcela.

$$\frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J u_j^n (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) = -\frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_{j+1}^n - u_j^n)^2. \quad (5.45)$$

Por outro lado considerando a desigualdade $ab \leq \frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2}$ obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J u_j^{n+1} (u_{j-1}^n + u_{j+1}^n) &\leq \frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^{n+1})^2 + (u_{j-1}^n + u_{j+1}^n)^2 \\ &\leq \frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^{n+1})^2 + (u_j^n)^2. \end{aligned}$$

Para a última parcela consideremos novamente (5.36) de onde obtemos o seguinte resultado

$$\begin{aligned} \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J u_j^{n+1} u_j^n &= \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J u_j^n (u_{j+1}^n - u_j^n + u_{j-1}^n) \frac{1}{4} + (u_j^n)^2 \\ &= -\Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_{j+1}^n - u_j^n)^2 \frac{1}{4} + \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^n)^2. \end{aligned}$$

Portanto usando as simplificações anteriores, segue que

$$\begin{aligned} E^{n+1} - E^n &\leq -\frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_{j+1}^n - u_j^n)^2 + \frac{1}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^{n+1})^2 + (u_j^n)^2 \\ &\quad + \frac{1}{4} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_{j+1}^n - u_j^n)^2 - d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^n)^2. \end{aligned}$$

Pela definição de energia do método NSFD -1M, temos

$$E^{n+1} - E^n \leq -\frac{1}{4}d(t_n)\Delta t\Delta x \sum_{j=0}^J (u_{j+1}^n - u_j^n)^2 + \frac{1}{4}E^{n+1} - \frac{1}{4}E^n, \quad (5.46)$$

e portanto

$$\left(1 - \frac{1}{4}\right)E^{n+1} \leq \left(1 - \frac{1}{4}\right)E^n \Rightarrow E^{n+1} \leq E^n, \quad \forall n \geq 0. \quad (5.47)$$

5.4 Decaimento exponencial Numérico

Retomamos que o esquema NSFT-1M é equivalente ao esquema

$$p\Delta t \left(\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \right) = d(t)\Delta x^2 \left(\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right). \quad (5.48)$$

Para mostrar o decaimento exponencial faremos uso da seguinte proposição:

Proposição 5.5 A expressão

$$u_j^n = T_n X_j = \prod_{n=0}^N [1 - \mu d(t_n)] \sin(k\pi x_j) \quad (5.49)$$

é uma família de soluções para a equação (5.48) em que $\mu_k = \sin^2\left(k\pi \frac{\Delta x}{2}\right)$, $k = 1, \dots, J$.

Demonstração 5.5 Supomos que a dependência do espaço tempo possa ser separada da seguinte forma

$$u_j^n = X_j T_n. \quad (5.50)$$

Então substituindo (5.50) em (5.48) obtemos

$$p\Delta t \left(\frac{X_j T_{n+1} - X_j T_n}{\Delta t} \right) = d(t_n)\Delta x^2 \left(\frac{X_{j+1} T_n - 2X_j T_n + X_{j-1} T_n}{\Delta x^2} \right). \quad (5.51)$$

Como desejamos soluções não nulas podemos supor $X_j T_n \neq 0$. Assim

$$\frac{T_{n+1} - T_n}{d(t_n)T_n} = \Delta x^2 \frac{X_{j+1} T_n - 2X_j T_n + X_{j-1} T_n}{p\Delta x^2 X_j}, \quad (5.52)$$

supomos que ambas as equações são iguais a uma constante comum $-\mu$ e temos as seguintes equações desacopladas

$$\Delta x^2 \frac{X_{j-1}T^n - 2X_jT^n + X_{j+1}T^n}{p\Delta x^2 X_j} = -\mu, \quad (5.53)$$

$$\frac{T_{n+1} - T_n}{T_n d(t_n)} = -\mu. \quad (5.54)$$

Consequentemente

$$\frac{X_{j-1}T^n - 2X_jT^n + X_{j+1}T^n}{\Delta x^2} = -\frac{p\mu}{\Delta x^2} X_j \quad (5.55)$$

$$T_{n+1} - T_n = -\mu d(t_n) T_n. \quad (5.56)$$

Notemos que

$$T_{n+1} = (1 - \mu d(t_n)) T_n. \quad (5.57)$$

e assumindo $T_0 = 1$ verifica-se (ver [Figueredo\[29\]](#)) que

$$T_n = \prod_{n=0}^N [1 - \mu d(t_n)]. \quad (5.58)$$

Além disso, temos que

$$\frac{X_{j-1}T^n - 2X_jT^n + X_{j+1}T^n}{\Delta x^2} = -\lambda X_j, \quad \lambda = \frac{p\mu}{\Delta x^2} X_j. \quad (5.59)$$

De acordo com ([Tveito e Winther\[31\]](#)), os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são da forma

$$\lambda_k = \frac{p}{\Delta x^2} \sin^2 \left(k\pi \frac{\Delta x}{2} \right), \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (5.60)$$

e seus correspondentes autovetores (autofunções) $X_k = (X_{k,1}, X_{k,2}, \dots, X_{k,n}) \in \mathbb{R}^n$, tem componentes dadas por

$$X_{k,j} = \sin(k\pi x_j), \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (5.61)$$

Portanto

$$u_j^n = T_n X_j = \prod_{n=0}^N [1 - \mu d(t_n)] \sin(k\pi x_j)$$

é uma família de soluções para (5.48) onde

$$\mu_k = \sin^2 \left(k\pi \frac{\Delta x}{2} \right), \quad k = 1, \dots, J. \quad (5.62)$$

Teorema 5.1 Se $u_j^n = T_n X_j = \prod_{n=0}^N [1 - \mu d(t_n)] \sin(k\pi x_j)$ é solução do NSFD1 e E_N^n sua respectiva energia, então E_N^n é exponencialmente estável.

Demonstração 5.6 De fato, temos

$$E_N^n = \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J (u_j^n)^2 = \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \sum_{j=0}^J \prod_{n=0}^N [1 - \mu_k d(t_n)]^2 \sin^2(k\pi x_j), \quad (5.63)$$

$$E_N^n = \frac{p}{2} d(t_n) \Delta t \Delta x \prod_{n=0}^N [1 - \mu_k d(t_n)]^2 \sum_{j=0}^J \sin^2(k\pi x_j), \quad \mu_k = \sin^2\left(k\pi \frac{\Delta x}{2}\right). \quad (5.64)$$

Tomando $n = 0$ na equação acima resulta em

$$E_N^0 = \frac{p}{2} d(t_0) \Delta t \Delta x [1 - \mu_k d(t_0)]^2 \sum_{j=0}^J \sin^2(k\pi x_j), \quad \mu_k = \sin^2\left(k\pi \frac{\Delta x}{2}\right), \quad (5.65)$$

e conseqüentemente

$$E_N^n = E_N^0 \prod_{n=0}^N [1 - \mu_k d(t_n)]^2. \quad (5.66)$$

Observemos ainda que como $\mu_k = \sin^2\left(k\pi \frac{\Delta x}{2}\right)$, então $\mu_1 \leq \mu_n \forall n = 1, 2, \dots, k$.

$$E_N^n \leq E_N^0 [1 - \mu_k \min d(t_n)]^{2n} \leq E_N^0 [1 - \mu_1 \min d(t_n)]^{2n} \leq E_N^0 [1 - \mu_1]^{2n}.$$

Tomando a aproximação $1 - \mu_1 \approx e^{-\mu_1}$ concluímos

$$E^n \leq E^0 e^{-2n\mu_1}. \quad (5.67)$$

5.4.1 Conclusões sobre os NSFD's a partir das Energias numéricas

Nesta secção faremos uma análise a respeito dos métodos de diferenças finitas Nons-standard a partir dos gráficos das energias numéricas. Para obter uma melhor comparação fizemos uma normalização com os valores das energias da seguinte forma

$$E^n := E^n / E^0 \quad \forall n \geq 0; \quad (5.68)$$

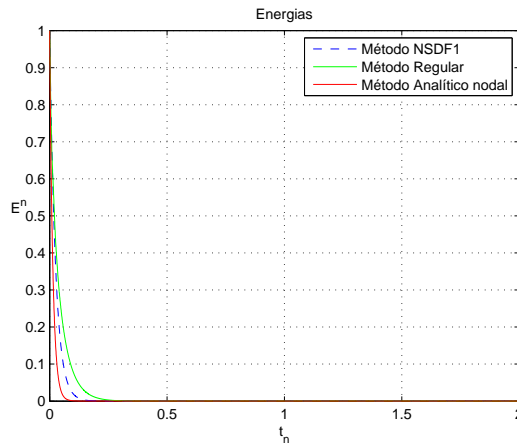


Figura 33: Comparação entre as energias $\Delta t = 0.0004$; $\Delta x = 0.04$; $\tau_0 = \tau_c/2$

Em um determinado ponto a energia do Método NSFD-1M passa a decair mais lento assim como ocorre no caso para coeficiente de difusão constante em malha regular. Para $d(t) = 2 - t$ isto acontece perto de $K = 1418$

A tabela mostra os valores das energias nos pontos onde há inversão do comportamento das energias. Primeiro nos métodos anteriores usados por Mickens e Jordan em malha comum com coeficiente de difusão constante e depois para o modelo modificado em malha deslocada com coeficiente de difusão $d(t) = 2 - t$.

Energia / $t = K\Delta t$	$K = 397$	$K = 398$	$K = 399$	$K = 400$	$K = 401$
M. Anteriores					
Analítica	0.0438	0.0434	0.0430	0.0426	0.0422
Usual	0.0438	0.0434	0.0430	0.0426	0.0422
NSFD-1	0.0438	0.0434	0.0431	0.0427	0.0424
M. Modificado					
Energia / $t = K\Delta t$	$K = 1415$	$K = 1416$	$K = 1417$	$K = 1418$	$K = 1419$
Analítica -M	3,2109e-09	3,1853e-09	3,1600e-09	3,1348e-09	3,1099e-09
Regular -M	1,0624e-12	1,0461e-12	1,0302e-12	1,0144e-12	9,9898e-13
NSFD-1M	3,2426e-09	3,2051e-09	3,1681e-09	3,1315e-09	3,0953e-09

A mesma conclusão é confirmada quando modificamos o valor de τ_0 para $\tau_0 = \tau_c$.

5.5 Uma forma equivalente-esquema NSTD-3

Ainda na malha de espaçamento regular, usada nos trabalhos de Mikens e Jordan, retomamos a equação (3.25), isto é,

$$u_j^{n+1} = d(t)R(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + u_j^n(1 - 2d(t)R), \quad (5.69)$$

onde $R = \Delta t / \Delta x^2$ e o erro de truncamento é da ordem $[\Delta t + (\Delta x)^2]$. A forma discreta da condição de positividade é

$$u_m^k \geq 0 \Rightarrow u_m^{k+1} \geq 0 \quad \forall k. \quad (5.70)$$

Para k fixado e todos os valores relevantes de m da equação (5.70) é evidente que se $1 - 2R \geq 0$ a condição de positividade é sempre satisfeita e por esta condição podemos colocar a seguinte limitação para o tamanho do passo de tempo

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2}.$$

Notemos que esta limitação em Δt é idêntica ao critério usual de estabilidade da equação do calor com coeficiente de difusão constante. Agora tomamos $R = 1/6$, $d(t) = 1 \quad \forall t > 0$ e assim

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{6}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + \frac{2}{3}u_j^n. \quad (5.71)$$

Que denominaremos NSTD-3 e como $\frac{1}{6} < \frac{1}{2}$ preservamos a estabilidade do método. Pelos procedimentos feitos para o esquema NSFD-1, vemos que, ele é equivalente a $p = 6$ em

$$(p\Delta t)u_t - (\Delta x^2)u_{xx} = 0. \quad (5.72)$$

Além das propriedades do esquema NSFD-1. O esquema NSFD-3 apresenta uma aproximação numérica com erro e taxa de convergência melhores.

5.5.1 Super-convergência da forma equivalente NSFD-3

Usaremos o seguinte fato

$$u_{tt} = \left(\frac{\Delta x^2}{p\Delta t}\right)^2 u_{xxxx}. \quad (5.73)$$

Pois, da equivalência (5.72) temos que

$$u_t = cu_{xx}, \quad \text{onde } c = \frac{\Delta x^2}{p\Delta t}. \quad (5.74)$$

Derivando (5.74) em relação a t obtemos

$$u_{tt} = cu_{xxt}$$

Derivando (5.74) duas vezes em relação a x e usando o fato de que as derivadas mistas são iguais obtemos o resultado (5.73).

5.5.1.1 Taxas de Erro

A questão sobre convergência trata o quanto está próxima a solução numérica da solução exata, medindo esta proximidade em uma determinada norma (frequentemente a norma do máximo). Sendo convergente a aproximação é interessante obtermos a taxa dessa convergência. Mostraremos que satisfeita a condição de estabilidade o método NSFD-3 possui taxa de convergência $\mathcal{O}\Delta x^2$, mas pode alcançar a $\mathcal{O}\Delta x^4$.

Teorema 5.2 Se $u(x, t) \in C^{4,2}$ é a solução exata de (5.72) fronteira Dirichlet, com $u(x, 0) = f(x)$, $x \in (0, L)$ e $0 < R \leq \frac{1}{2}$ então

$$|u(x_j, t_n) - u_j^t|_\infty \leq t_n e^{-ct_n} \left[\left| \frac{\Delta t}{2} c^2 - c \frac{\Delta x^2}{12} \right| + \left(\frac{\Delta t^2}{6} + 2c \frac{\Delta x^4}{6!} \right) \right]. \quad (5.75)$$

em que u_j^n é a solução do modelo numérico e $c = \frac{\Delta x^2}{p\Delta t}$.

Prova:

Definimos o erro pontual da discretização por

$$e_j^n := u(x_j, t_n) - u_j^n, \quad (5.76)$$

e o erro medido no instante n por

$$|e^n|_\infty = \max_{0 \leq j \leq J} |e_j^n|, \quad (5.77)$$

subtraindo $\partial_t u_j^n - c \bar{\partial}_x \partial_x u_j^n = 0$ de

$$u_j^{n+1} = (1 + 2R)u_j^n - R(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad (5.78)$$

onde $R = c \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$. Temos

$$e_j^{n+1} = (1 + 2R)e_j^n + R(e_{j+1}^n + e_{j-1}^n) - \Delta t \tau. \quad (5.79)$$

Tomando a norma $|\cdot|_\infty$ nesse último, admitindo que $1 - 2R \geq 0$, temos

$$|e_j^{n+1}|_\infty \leq (1 + 2R)|e^n|_\infty + R(|e_{j+1}^n|_\infty + |e_{j-1}^n|_\infty) + |-\Delta t|\tau, \quad (5.80)$$

$$|e^{n+1}|_\infty \leq |e_j^n|_\infty + 2R|e_j^n|_\infty + 2R|e_j^n|_\infty + \Delta t|\tau|, \quad (5.81)$$

$$|e^{n+1}|_\infty \leq |e^n|_\infty + \Delta t|\tau|, \quad (5.82)$$

recursivamente para $n, n-1, \dots, 1, 0$, considerando $|e_j^0|_\infty = 0$ temos:

$$|e^n|_\infty \leq n\Delta t|\tau_n|_\infty, \quad (5.83)$$

e como $t_n = n\Delta t$ temos

$$|e^n|_\infty \leq t_n|\tau_n|_\infty. \quad (5.84)$$

Sendo $\tau = O(\Delta t, \Delta x^2)$ e $\Delta t = O(\Delta x^2)$, temos uma primeira estimativa de erro na ordem de Δx^2 .

Iniciamos primeiramente por explicitar o erro de truncamento na expansão em série de Taylor aplicada a solução $u(x_j, t_n)$ do problema. Assim, teremos:

$$\frac{u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n)}{\Delta t} = \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + (\tau_j^n)_1, \quad (5.85)$$

e

$$\frac{u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n))}{\Delta x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + (\tau_j^n)_2 \quad (5.86)$$

com

$$(\tau_j^n)_1 = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t_n) + \frac{\Delta t^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j, \xi_n), \quad \xi_n \in [t_n, t_n + \Delta t] \quad (5.87)$$

tal que

$$(\tau_j^n)_2 = \frac{\Delta x^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) + \frac{\Delta x^4}{6!} \left[\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\eta_j^1, t_n) + \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\eta_j^2, t_n) \right], \quad \eta_j^1, \eta_j^2 \in [x_j - \Delta x, x_j + \Delta x] \quad (5.88)$$

correspondentes aos erros de truncamento. Desse modo, a solução exata $u(x_j, t_n)$ da equação do calor, satisfaz a seguinte equação:

$$\frac{u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n)}{\Delta t} - c \frac{u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n)}{\Delta x^2} \quad (5.89)$$

$$= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) - c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \tau_j^n = \tau_j^n, \quad (5.90)$$

com τ_j^n expresso por

$$\tau_j^n = (\tau_j^n)_1 - (\tau_j^n)_2 = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t_n) - 2c \frac{\Delta x^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) + O(\Delta t^2, \Delta x^4) \quad (5.91)$$

sendo

$$O(\Delta t^2, \Delta x^4) = \frac{\Delta t^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j, \xi_n) - c \frac{\Delta x^4}{6!} \left[\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\eta_j^1, t_n) + \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\eta_j^2, t_n) \right]. \quad (5.92)$$

Por outro lado como $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$, segue que:

$$\tau_j^n = \left(\frac{c^2 \Delta t}{2} - c \frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) + O(\Delta t^2, \Delta x^4). \quad (5.93)$$

Portanto a expressão acima é representante do erro de truncamento para a aproximação desenvolvida por série de Taylor da nossa equação. Para o erro e_j^n , temos:

$$\frac{e_j^{n+1} - e_j^n}{\Delta t} - c \frac{e_j^{n+1} - 2e_j^n + e_{j-1}^n}{\Delta x^2} = \tau_j^n, \quad (5.94)$$

ou

$$e_j^{n+1} = (1 - 2R)e_j^n + R(e_{j+1}^n + e_{j-1}^n) + \Delta t \tau_j^n. \quad (5.95)$$

Admitindo que $R = c \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$ e considerando o erro medido na norma do máximo segue que

$$|e^{n+1}|_\infty \leq |e^n|_\infty + \Delta t |\tau^n|_\infty. \quad (5.96)$$

Pela recursividade resulta que:

$$|e^n|_\infty \leq t_n |\tau^n|_\infty. \quad (5.97)$$

Resta-nos determinar uma estimativa para $|\tau^n|_\infty$. Sendo

$$u(x, t) = e^{-(\frac{n\pi}{L})^2 t_n} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right). \quad (5.98)$$

A solução analítica do problema equivalente, fazendo $L = \pi$ e tomando $n = 1$ podemos estimar

$$\max \left| \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right| \leq e^{-ct_n}. \quad (5.99)$$

Por outro lado

$$\left| O(\Delta t^2, \Delta x^4) \right|_{\infty} = \max \left| \frac{\Delta t^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j, \xi_n) - c \frac{\Delta x^4}{6!} \left[\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\eta_j^1, t_n) + \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\eta_j^2, t_n) \right] \right|_{\infty} \leq \left[\frac{\Delta t^2}{6} + \frac{\Delta x^4}{360} \right] e^{-t_n}. \quad (5.100)$$

Portanto construímos a seguinte estimativa

$$|e^n|_{\infty} \leq t_n e^{-ct_n} \left[\left| \frac{c^2 \Delta t}{2} - c \frac{\Delta x^2}{12} \right| + \left(\frac{\Delta t^2}{6} + 2c \frac{\Delta x^4}{6!} \right) \right], \quad (5.101)$$

substituindo $c = \frac{\Delta x^2}{p \Delta t}$ obtemos

$$|e^n|_{\infty} \leq t_n e^{-\frac{\Delta x^2}{p \Delta t} t_n} \left[\left| \left(\frac{1}{2p} - \frac{1}{12} \right) \frac{\Delta x^2 \Delta x^2}{p \Delta t} \right| + \left(\frac{\Delta t^2}{6} + 2 \frac{\Delta x^2}{p \Delta t} \frac{\Delta x^4}{6!} \right) \right]. \quad (5.102)$$

Calculamos a solução aproximada u_j^n para sequencia de malhas $\Delta x = \frac{L}{J}$ com $J = 4, 8, 16, 32$ escolhendo $\Delta t = \frac{\Delta x^2}{p}$ com $p > 2$ inteiro. para $p = 6$ temos o esquema NSDF-3 e uma convergência de ordem quarta a qual denominamos de super convergência.

De fato, com base na estimativa (5.102) obedecendo a condição de estabilidade $R \leq \frac{1}{2}$ a aproximação de erro $|e^n|_{\infty}$ é calculada no instante de tempo $t = 0.82247$. Para $p = 6$ a escolha $\Delta t = \frac{\Delta x^2}{6}$ fornece

$$\left| \left(\frac{1}{2p} - \frac{1}{12} \right) \frac{\Delta x^2 \Delta x^2}{p \Delta t} \right| = 0$$

Portanto obtemos uma nova estimativa a qual é expressa por

$$|e^n|_{\infty} \leq t_n e^{-ct_n} \left(\frac{\Delta t^2}{6} + 2 \frac{\Delta x^4}{6!} \right). \quad (5.103)$$

Ou seja o erro de aproximação é da ordem $\mathcal{O} \Delta x^4$. A tabela a seguir bem como o ajuste dos valores $-\log(\Delta x)$ e $\log |e^n|_{\infty}$ comprovam esta análise.

O ajuste dos valores que temos abordado comprovam a ordem da super convergência.

$$\log |e^n|_{\infty} = -3.1507 - 4.0328 \log(\Delta x)$$

Para fortalecer o entendimento ilustramos com o plot linear da convergência.

Tabela 4: Super convergência do esquema NSDF-3 em malha regular

Δx	Δt	$ e^n $	$-\log(\Delta x)$	$\log e^n $
7.8540e-001	1.0281e-001	2.6906e-004	1.0491e-001	-3.5702e+000
3.9270e-001	2.5702e-002	1.6118e-005	4.0594e-001	-4.7927e+000
1.9635e-001	6.4255e-003	9.9384e-007	7.0697e-001	-6.0027e+000
9.8175e-002	1.6064e-003	6.1169e-008	1.0080e+000	-7.2135e+000

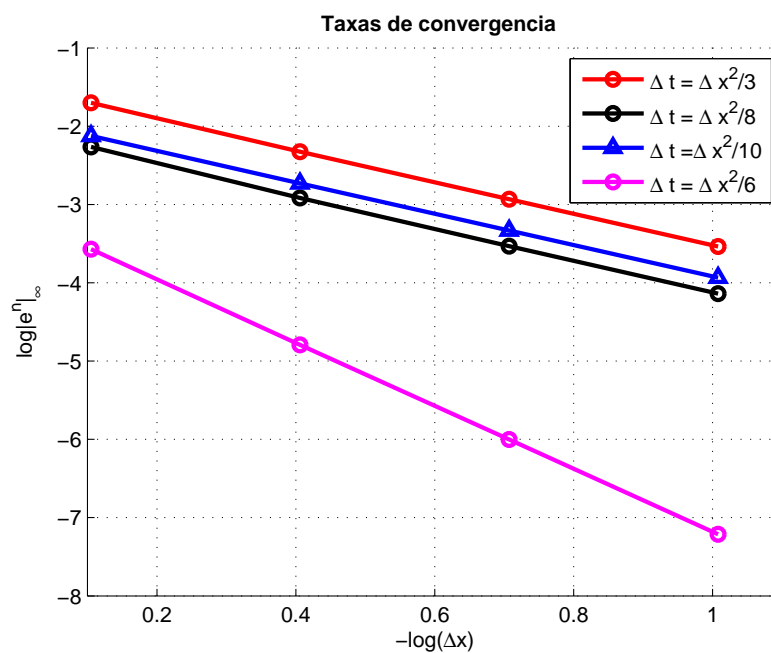


Figura 34: super convergência

6 Conclusões e perspectivas futuras

6.1 Resultados

Assim como acontece na malha regular com coeficiente de difusão constante, construímos um esquema Nonstandard que preserva a positividade das soluções numéricas e apresenta propriedades qualitativas melhores em relação a modelagem da equação do calor para equação modificada em malha deslocada com coeficiente de difusão dependente do tempo. Criamos um paralelo entre os trabalhos anteriores que tratam da positividade das soluções na abordagem numérica do modelo de Maxwell-Cattaneo e nossa modelagem modificada, comparamos o comportamento das energias do método Nonstandard em Diferenças finitas (não somente ele) e os decaimentos dessas energias tanto no Contínuo quanto no Discreto.

6.2 Esquema Mugen

Notamos que para valores altos de K o esquema NSFD-1M mantém a positividade das soluções, mas ao preço de afastar-se da solução exata, seria bom obter um método que preservasse as características qualitativas e tivesse a mesma, ou melhor precisão que o método regular. Isso induz a pensar que uma junção dos dois esquemas poderia gerar o método desejado. O que de fato ocorre.

Apresentamos um método híbrido, composto pela fusão do método Hopscotch modificado com o método Theta onde o valor de theta é dado por uma rede Neural treinada para otimizar a escolha inicial. Chamaremos este híbrido de Método Mugen. A seguir descrevemos tal método.

Modificamos o método Hopscotch fazendo as duas primeiras faixas ímpares de tempo serem calculadas pelo método NSFD-1M e as demais pelo método Regular. Percebemos que a solução desta modificação apresentou uma melhora significativa na precisão do esquema e o gráfico aproxima a solução analítica por cima. Como esquema regular, aproxima a solução por baixo ponderamos que uma pequena parcela do método regular na solução otimizaria os resultados, para tal, escolhemos uma combinação convexa do Hopscotch modificado com o esquema regular, visto que o problema é linear. Infelizmente para valores baixos de K esta combinação prejudica a precisão sendo necessário alterar o peso de theta para corrigir (compensar) as alterações, mas ao treinar uma rede Neural para obter os valores mais adequados de theta para altas variações de K no método exposto obtivemos uma excelente aproximação.

Figura 35: $\tau_0 = \tau_c/2$

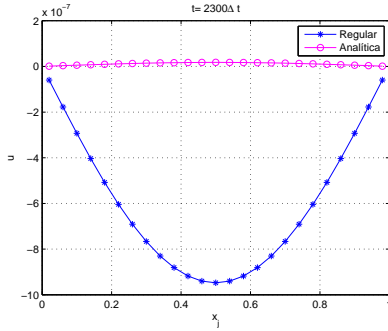


Figura 36: $\tau_0 = \tau_c/2$

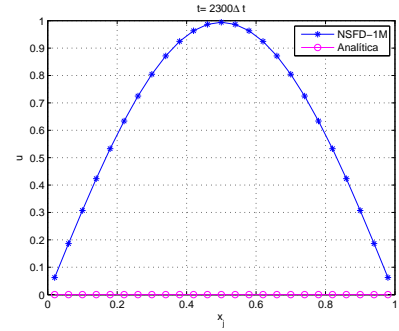


Figura 37: Comparação dos esquemas NSFD-1M e Regular-1M com a solução analítica em $t = 2300\Delta t$

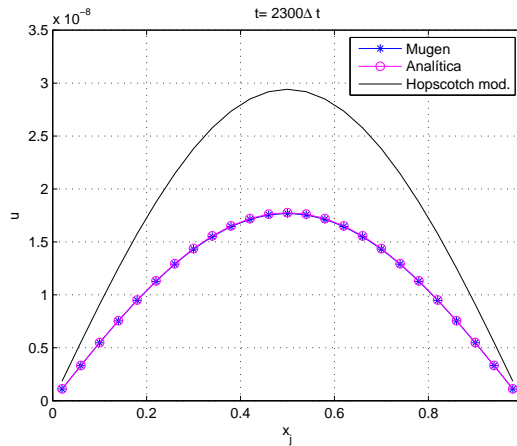


Figura 38: Esquema mugen para malha deslocada

6.2.1 Positividade

Sabemos que os métodos explícitos são no geral condicionalmente estáveis, para o método de Euler explícito a condição de estabilidade garante a positividade das soluções para dados iniciais positivos, esta restrição é imposta sobre σ então se quisermos obter uma condição de positividade para discretização da equação da onda amortecida podemos propor este caminho inverso; obter σ e então impor restrições aos coeficientes para que o método seja explícito e poder obter uma condição, como temos discretização de segunda ordem para variável tempo o segundo passo é eliminar os termos u_j^{n-1} para evitar o surgimento de um sistema linear obrigatório para solução. Isto é,

sejam $\alpha + \beta = 1$ (pois precisamos da discretização centrada para obter um simétrico do termo u_j^{n-1})

$$\alpha \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \beta \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \tau_0 \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{(\Delta t)^2} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (6.1)$$

Multiplicamos por Δt para obter $\sigma = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ no lado direito.

$$\alpha(u_j^{n+1} - u_j^n) + \frac{\beta}{2}(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) + \frac{\tau_0}{\Delta t}(u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}) = \sigma(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (6.2)$$

escrevemos $\gamma = \frac{\tau_0}{\Delta t}$ e $\beta = 2k$ para eliminar os denominadores. Mas $\alpha + \beta = 1$ então $\alpha = 1 - 2k$. Agrupando os termos com u_j^{n-1} e igualando a zero para elimina-los obtemos

$$u_j^{n-1}(\gamma - k) = 0$$

. Isto é, desde que $u_j^{n-1} \neq 0$, $k = \frac{\tau_0}{\Delta t}$

Os termos restantes resultam no método explícito cuja condição de estabilidade é conhecida $\sigma \leq \frac{1}{2}$.

6.2.2 Descrição do método

Descrevemos a seguir o método Mugen, assumimos que o leitor tenha conhecimento de Redes Neurais Artificiais (Haykin[32]), (E.Rumerlhart e Williams[33]) e Quadratura de Gaus (Burden e Faires[34]).

Seja $\sigma^n = \frac{d(t_n)\Delta t}{\Delta x^2}$. Para n fixado usamos o NSFD-1M (4.6)

$$u_j^{n+1} = (1 - 2\sigma^n)u_j^n + \sigma^n(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (6.3)$$

para todo j tal que $n + j + 1$ é ímpar, em seguida o Regular modificado,

$$u_j^{n+1} = \frac{\Delta t R(u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \tau_0(2u_j^n - u_j^{n-1}) + (\Delta t/2)u_j^{n+1}}{\tau_0 + \Delta t/2} \quad (6.4)$$

para todo j tal que $j + n + 1$ é par.

Considerando que a faixa de tempo $n = 0$ é dado pela condição inicial,

$$u(x_j, 0) = \sin(\pi x_j)$$

As Faixas $n = 1, 2, 3$ são calculadas como descrito acima.

Feito isto, é usado nas demais faixas o método regular (6.4). Este método chamaremos Hopscotch modificado que tem solução $uv(x_j, t_n)$. Obtida a solução uv aplicamos o método Theta no esquema Regular modificado e no Hopscotch modificado obtendo a solução $vv(x_j, t_n)$, isto é,

$$vv = \theta uv + (1 - \theta)u \quad (6.5)$$

Depois encontramos computacionalmente p valores de theta para os quais o erro de uv é menor com relação a solução analítica, em diferentes p faixas de tempo. Por exemplo,

para figura acima encontramos quatro valores de θ , um em cada faixa; $200\Delta t$, $1000\Delta t$, $2000\Delta t$ e $2300\Delta t$.

Em seguida treinamos uma rede neural de um kernel linear e um kernel de Gaus na camada escondida com perceptrons, usando como entradas os valores das faixas de tempo escolhidas e como saída os valores de θ nestas faixas. Constituindo assim uma rede de p entradas por p saídas. usamos 1500 épocas no treinamento da rede (menos de um segundos em um computador core i5) e parte do aprendizado por Back-propagation. Após treinada a rede mantemos $p - 1$ entradas, a entrada restante será o tempo desejado para o cálculo de vv . obtendo como saída o θ_0 próximo do ótimo para esta faixa.

Finalmente vv calculada usando θ_0 é o que denominamos método Mugen. Segue em anexo um código em matlab para o método.

A escolha da configuração da rede se baseia na quadratura de Gaus; como a equação discretizada é linear, positiva e periódica podemos criar uma reta que passe pela crista da onda em cada faixa de tempo, um ponto de aproximação de crista no tempo desejado pode então ser "puxado" para a reta desde que o perceptron "entenda" que θ é o parâmetro da combinação convexa.

O esquema seguinte mostra a RNA.

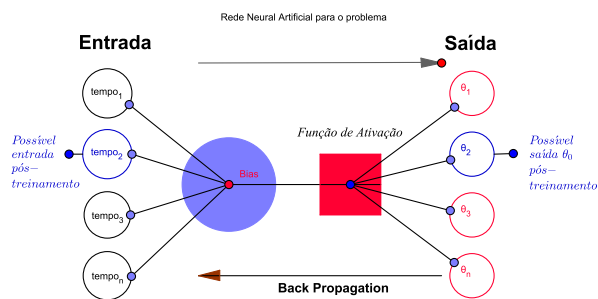


Figura 39: Esquema mugen para malha deslocada

APÊNDICE A – Objetividade

A objetividade é o estudo do comportamento ou da dependência de determinada entidade física em relação a diferentes observadores.

O vetor posição pode ser enxergado por diferentes observadores de tal forma que obedeça:

$$x^*(t) = Q(t)x(t) + c(t). \quad (\text{A.1})$$

Onde $Q(t)$ é um tensor ortogonal e é o responsável pela contabilização da rotação do observador e o vetor $c(t)$ é o responsável pela translação. Isso implica que:

$$\alpha^* = \alpha, \quad (\text{A.2})$$

$$v^* = Qv, \quad (\text{A.3})$$

$$T^* = QTQ^T. \quad (\text{A.4})$$

Isso ocorre se α, v e T , respectivamente, escalar, vetor e tensor de segunda ordem são entidades objetivas. O gradiente de velocidade não é objetivo:

$$v^* = \dot{Q}(t)x(t) + Q(t)v(t) + \dot{c}(t), \quad (\text{A.5})$$

$$L^* = \frac{\partial v^*}{\partial x^*} = \dot{Q}(t)Q^T(t) + Q(t)LQ^T(t) \quad (\text{A.6})$$

Aparece o termo $\dot{Q}(t)Q^T(t)$ "atrapalhando" a objetividade. O tensor taxa de deformação é objetivo:

$$D^* = \frac{1}{2}(L^* + L^{*T}) = \dot{Q}(t)Q^T(t) + Q(t)DQ^T(t) \quad (\text{A.7})$$

Mas o tensor taxa de deformação não:

$$W^* = \frac{1}{2}(L^* - L^{*T}) = \dot{Q}(t)Q^T(t) + Q(t)WQ^T(t) \quad (\text{A.8})$$

A derivada material é um operador não objetivo, ou seja, se aplicarmos este operador em uma entidade objetiva o resultado é uma entidade não objetiva. Existem derivadas que são objetivas e estas são como por exemplo:

- *A derivada convectada covariante*

$$A^\Delta = \dot{A}(t) + AL + L^T A; \quad (\text{A.9})$$

- *A derivada convectada contravariante*

$$A^\Delta = \dot{A}(t) - LA - AL^T; \quad (\text{A.10})$$

- *A derivada convectada corotacional ou derivada de Jaumman*

$$A^\Delta = \dot{A}(t) - LA - AL^T; \quad (\text{A.11})$$

APÊNDICE B – Funções de Airy

B.1 Definições

Consideremos a seguinte equação diferencial homogênea de segunda ordem chamada equação de Airy

$$y'' - xy = 0 \quad (\text{B.1})$$

resolver esta equação pelo método de Laplace induz-nos a seguinte definição

Definição B.1 Definimos a Função de Airy Ai por

$$Ai(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{xz - z^3/3} dz \quad (\text{B.2})$$

onde z é complexo.

Se $1, j$ e j^2 são raízes cúbicas tais que $j = 2e^{i\pi/3}$. As funções $Ai(x)$, $Ai(jx)$ e $Ai(j^2x)$ são, duas a duas, linearmente independentes e satisfazem a relação

$$Ai(x) + jAi(jx) + j^2Ai(j^2x) = 0. \quad (\text{B.3})$$

Assim definimos:

Definição B.2 Definimos a Função de Airy Bi por

$$Bi(x) = ij^2Ai(j^2x) - ijAi(jx) \quad (\text{B.4})$$

De forma similar a (B.3) temos também a seguinte relação

$$Bi(x) + jBi(jx) + j^2Bi(j^2x) = 0. \quad (\text{B.5})$$

Assim Ai e Bi são soluções linearmente independentes da equação de Airy.

B.2 Algumas propriedades elementares

B.2.1 Wronskians da função de Airy homogênea

O Wronskian $W\{f, g\}$ de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido por

$$W(f, g) = f(x) \frac{dg(x)}{dx} - \frac{df(x)}{dx} g(x). \quad (\text{B.6})$$

Para as Funções de Airy Ai e Bi temos os seguintes Wronskians retirados de (Abramowitz e Stegun[35]):

- $W\{Ai(x), Bi(x)\} = \frac{1}{\pi};$
- $W\{Ai(x), Ai(xe^{i2\pi/3})\} = \frac{e^{-i\pi/6}}{2\pi};$
- $W\{Ai(x), Ai(xe^{-i2\pi/3})\} = \frac{e^{i\pi/6}}{2\pi};$
- $W\{Ai(xe^{i2\pi/3}), Ai(xe^{-i2\pi/3})\} = \frac{i}{2\pi}.$

B.2.2 Alguns valores particulares

Os valores na origem das Funções de Airy homogêneas são

$$Ai(0) = \frac{Bi(0)}{\sqrt{3}} = \frac{1}{3^{2/3}\Gamma(\frac{2}{3})} = 0.355\ 028\ 053\ 887\ 817\ 239 \quad (B.7)$$

$$Ai'(0) = \frac{Bi'(0)}{\sqrt{3}} = \frac{1}{3^{1/3}\Gamma(\frac{1}{3})} = 0.258\ 819\ 403\ 792\ 806\ 798 \quad (B.8)$$

e portanto

$$Ai(0)Ai'(0) = \frac{-1}{2\pi\sqrt{3}} \quad (B.9)$$

De forma mais geral temos os resultados para derivadas de ordens mais altas, devidos a (Crandal [36]).

$$Ai^{(n)}(0) = (-1)^n C_n \sin(\pi(n+1)/3), \quad (B.10)$$

e

$$Bi^{(n)}(0) = C_n(1 + \sin(\pi(4n+1)/6)), \quad (B.11)$$

onde c_n é dado por

$$c_n = \frac{1}{\pi} 3^{(n-2)/3} \Gamma(n+1/3), \quad (B.12)$$

B.2.3 Algumas relações entre Funções de Airy

As relações seguintes deduzidas a partir de (B.3), (B.4) e (B.5) são devidas a (Miller[37]) e (Abramowitz e Stegun[35])

- $Ai(xe^{\pm 2i\pi/3}) = \frac{e^{\pm i\pi/3}}{2} [Ai(x) \mp iBi(x)];$
- $Ai'(xe^{\pm 2i\pi/3}) = \frac{e^{\mp i\pi/3}}{2} [Ai'(x) \mp iBi'(x)];$
- $Bi(x) = e^{i\pi/6} Ai(xe^{i2\pi/3}) + e^{-i\pi/6} Ai(xe^{-i2\pi/3});$
- $Bi'(x) = e^{i5\pi/6} Ai'(xe^{i2\pi/3}) + e^{-i5\pi/6} Ai'(xe^{-i2\pi/3}).$

B.3 Série Assintótica

B.3.1 Expansão de Ai próximo da origem

De (Copson[38]) Podemos retirar que a expansão de Ai próximo a origem $x = 0$ é

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi 3^{2/3}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{3}\right)}{n!} \sin\left[\frac{2}{3}(n+1)\pi\right] \left(3^{1/3}x\right)^n \quad (\text{B.13})$$

As séries de $Ai(x)$ e $Bi(x)$ são definidas (Miller[37]) e (Abramowitz e Stegun[35]) pela seguinte regra da cadeia

$$Ai(x) = c_1 f(x) - c_2 g(x) \quad (\text{B.14})$$

$$Bi(x) = \sqrt{3}[c_1 f(x) + c_2 g(x)], \quad (\text{B.15})$$

com $c_1 = Ai(0)$ e $c_2 = Ai'(0)$ e as séries

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} 3^k \left(\frac{1}{3}\right)_k \frac{x^{3k}}{(3k)!} = 1 + \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1.4}{6!}x^6 + \frac{1.4.7}{9!}x^9 + \dots \quad (\text{B.16})$$

$$g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} 3^k \left(\frac{2}{3}\right)_k \frac{x^{3k+1}}{(3k+1)!} = x + \frac{2}{4!}x^4 + \frac{2.5}{7!}x^7 + \frac{2.5.8}{10!}x^{10} + \dots \quad (\text{B.17})$$

Onde a notação de Pochhammer $(a)_n$ é definida por

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1). \quad (\text{B.18})$$

diferenciando estas séries termo a termo obtemos

$$Ai'(x) = c_1 f'(x) - c_2 g'(x) \quad (\text{B.19})$$

$$Bi'(x) = \sqrt{3}[c_1 f'(x) + c_2 g'(x)], \quad (\text{B.20})$$

e as séries

$$f'(x) = \frac{x^2}{2}x^3 + \frac{1}{2.3} \frac{x^5}{5} + \frac{x^8}{2.3.5.6} \frac{x^8}{8} + \dots \quad (\text{B.21})$$

$$g'(x) = 1 + \frac{1}{1.3} \frac{x^3}{3} + \frac{1}{1.3.4.6} \frac{x^6}{6} + \frac{1}{1.3.4.6.7.9} \frac{x^9}{9} + \dots \quad (\text{B.22})$$

Adicionalmente Lembramos que a função Gamma Γ é dada por

$$\Gamma(k) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{k-1} dx, \quad k > 0. \quad (\text{B.23})$$

Maiores detalhes sobre funções de Airy podem ser encontrados em (Olver[39]) e (Chester, Friedman e F.Ursell[40]).

Referências

- 1 MICKENS, R. E. Nonstandard finite difference models of differential equations. *Vol.13. Singapore, 1994. Citado na página 11.*
- 2 HUANG, K. M.; LIN, Z.; YANG, X. Q. Numerical simulation of microwave heating on chemical reaction in dilute solution. *[S.l.], 2004. 273-289 p. Citado na página 11.*
- 3 POZAR, D. M. Microwave Engineering. *[S.l.], 2005. Citado na página 11.*
- 4 CHUA, T. S.; DEW, P. M. The design of a variable-step integrator for the simulation of gas transmission network. *[S.l.], 1984. 1797-1813 p. Citado na página 11.*
- 5 CRANK, J. The mathematics of diffusion. *[S.l.], 1975. Citado na página 11.*
- 6 MCCARTIN, B. J.; LABADIE, S. M. Accurate and efficient pricing of vanilla stock options via the Crandall-Douglas scheme. *[S.l.], 2003. 39-60 p. Citado na página 11.*
- 7 WILMOT, P.; HOWISON, S.; DEWYNNE, J. The mathematics Financial of derivatives: A student Introduction. *Cambridge, 1995. Citado na página 11.*
- 8 TADJERAN, C. Stability Analysis of the Crank- Nicolson method for variable coefficient diffusion equation. *[S.l.], 2007. 29-34 p. Citado na página 11.*
- 9 OISHI, C. M. et al. Stability analysis of Crank-Nicolson and Euler schemes for time dependent diffusion equation. *[S.l.], 2014. Citado 3 vezes nas páginas 11, 12 e 33.*
- 10 SOUSA, E. On the edge of stability analysis. *[S.l.], 2009. 1322-1336 p. Citado na página 12.*
- 11 SUCEC, J. Practical stability analysis of finite difference equations by the matrix method. *[S.l.], 1987. 679-687 p. Citado na página 12.*
- 12 TREFETHEN, L.; EMBREE, M. Spectra and Pseudospectra. *New Jersey, 2005. Citado na página 12.*
- 13 HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *New Jersey, 2012. Citado na página 12.*
- 14 PEROT, B.; NALLAPATI, R. A moving unstructured mesh method for the simulation of incompressible free surface flows. *[S.l.], 2003. Citado na página 12.*
- 15 SWEILAM, N.; ASSIRI, T. Nonstandard Crank Nicolson for Method Solving the Variable Order Fractional Cable Equation. *International, 2015. Citado na página 13.*
- 16 SOUSA, G. L. Análise Numérica em Diferenças Finitas da Equação de Maxwell Cattaneo. *Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Pará, PPGME, PA, mar. 2013. Citado 4 vezes nas páginas 13, 30, 35 e 44.*
- 17 MICKENS, R. E. Numerical Methods for Partial Differential Equations. *Georgia, 1999. Citado na página 13.*

- 18 MARÇAS-DIAS, J. E.; J.RUIZ-RAMIREZ. A non-standard symmetry-preserving method to compute bounded solutions of generalized Newell-Whitehead-Segel Equation. Mexico, 2010. Citado na página 13.
- 19 KHALSARAEI, M. M.; KHODADOSTI, F. NONSTANDARD FINITE DIFFERENCE SCHEMES FOR DIFFERENTIAL EQUATIONS. Vol. 1 no. 2. [S.l.], 2014. 47-54 p. Citado na página 13.
- 20 MICKENS, R. E. Relation between the time and space step-sizes in nonstandard finite-difference schemes for the Fisher equation, Numerical Methods for Partial Differential Equations. Vol.13. [S.l.], 1993. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 15.
- 21 FISHER, R. Ann, Eugenics 7. [S.l.], 1937. Citado na página 14.
- 22 ANGUELOV, R.; KAMA, P.; LUBUMA, J.-S. On non-standard finite difference models of reaction-diffusion equations. Vol.175. [S.l.], 2005. 11-29 p. Citado na página 15.
- 23 MICKENS, R. E.; JORDAN, P. M. A Positivity-Preserving Nonstandard Finite Difference Scheme for the Damped wave Equation. [S.l.], 2003. Citado 11 vezes nas páginas 15, 17, 18, 20, 22, 25, 26, 27, 30, 31 e 42.
- 24 MICKENS, R. E.; JORDAN, P. M. A New Positivity-preserving Nonstandard Finite Difference Scheme for the DWE. [S.l.], 2005. Citado 3 vezes nas páginas 17, 28 e 29.
- 25 C.CATTANEO. Sulla conduzione del calore. 3. ed. [S.l.]: Atti Sem, 1948. 83-101 p. Citado na página 18.
- 26 STRAUGHAN, B. Heat Waves. 1. ed. [S.l.]: Springer, 2011. Citado na página 19.
- 27 RUBIN, M. B. Hiperbolic Heat conduction and second law. [S.l.], 1992. 30:1665-1676 p. Citado na página 20.
- 28 DIAS, R. A. C. possibilidade de descrever a condução de calor hiperbólica usando a equação constitutiva de Fourier. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal Fluminense, PGMEC, RJ, jul. 2011. Citado na página 20.
- 29 FIGUEREDO, D. G. Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais. 3. ed. Rio de Janeiro: Projeto Euclides, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 50.
- 30 YUEH, W. C. Eigenvalues of several tridiagonal matrices. [S.l.], 2005. 66-74 p. Citado na página 35.
- 31 TVEITO, A.; WINTHER, R. Introduction to Partial Differential Equations: A computational Approach. 3. ed. New York: Spreinger, 2007. Citado na página 50.
- 32 HAYKIN, S. Neural Networks: A comprehensive foundation. [S.l.], 1999. Citado na página 61.
- 33 E.RUMERLHART, D.; WILLIAMS, R. J. Learning representations by back propagating error. Rio de Janeiro: Nature, 1996. Citado na página 61.
- 34 BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Análise Numérica. 8. ed. São Paulo, Brasil: Cengage Learning, 2013. Citado na página 61.

- 35 ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. Handbook of Mathematics functions. *New York, 1965. 30:1665-1676 p. Citado 3 vezes nas páginas 65, 66 e 67.*
- 36 CRANDAL, R. E. On the quantum zeta function. *Part-vol.b. Cambridge University Press, London: J.Phys. A:Math, 1996. 6795-6816 p. Citado na página 66.*
- 37 MILLER, J. C. P. The Airy Integral. *Part-vol.b. Cambridge University Press, London: Sci. Mathematical Tables, 1946. Citado 2 vezes nas páginas 66 e 67.*
- 38 COPSON, E. T. Asymptotic expansions. [S.l.], 1967. *Citado na página 67.*
- 39 OLVER, F. W. J. The asymptotic solution of linear differential equations of the second order fo larges values of a Parameter. *London, 1974. 307-327 p. Citado na página 67.*
- 40 CHESTER, C.; FRIEDMAN, B.; F.URSELL. An extension of the methodo of steepest descents. [S.l.], 1957. 599-611 p. *Citado na página 67.*