

**MÉTODOS PARTICIONADOS  
E  
MÉTODOS IMPLÍCITOS-EXPLÍCITOS  
PARA  
EQUAÇÕES DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO-REACÇÃO**

GONÇALO NUNO TRAVASSOS BORGES ALVES DA PENA

Departamento de Matemática  
Universidade de Coimbra  
2004



Dissertação submetida para satisfação parcial dos requisitos do programa de Mestrado em Matemática, área de especialização em Matemática Aplicada, do Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra



# Agradecimentos

Durante os dois anos e alguns meses em que trabalhei nesta dissertação, muitas foram as pessoas que me ajudaram e que tornaram possível a escrita deste trabalho. De todos, gostaria de agradecer a em particular aos meus pais, pelo amor incondicional que sempre me deram, ao meu orientador, Doutor José Augusto Ferreira, pelo apoio nas alturas mais desesperantes e por me ter mostrado como a Análise Numérica pode ser interessante, à Margarida, ao Paulo, à Ana, ao Jorge e a tantos outros pela paciência e, por último, ao Departamento de Matemática e ao Centro de Matemática da Universidade de Coimbra pelas condições disponibilizadas.



# Prefácio

Na química, física e biologia, entre outras, existem fenómenos que podem ser modelados com equações de convecção-difusão-reacção - CDR. Este tipo de equações permite traduzir, por exemplo, no caso de vários poluentes lançados para a atmosfera, a concentração dessas substâncias em determinado instante quando sujeitas a transporte (por exemplo, causado pelo vento), difusão e reacção (dos diversos compostos uns com os outros). Embora não seja a única aplicação deste tipo de equações, esta é talvez uma das mais importantes. Destacamos ainda modelos de propagação de epidemias [Mur92] e de digestor de papel [dig75].

Para as equações CDR já são conhecidos há muito resultados de existência e unicidade de solução, assim como de propriedades da solução dessas equações. Este tema é ainda hoje estudado por muitos matemáticos existindo algumas questões em aberto (referências).

Por outro lado, é sabido que uma expressão para a solução analítica de qualquer equação com derivadas parciais só pode ser obtida em casos muito especiais, valendo o mesmo para as equações CDR. Assim, o analista numérico encontra aqui uma fonte de problemas com características particulares que de alguma forma tem de aproveitar para desenvolver bons métodos numéricos que aproximem a solução dessas equações. Dos vários tipos de métodos utilizados para tal efeito, existem dois que se destacam: os métodos particionados e os métodos implícitos-explicitos. No entanto, e não sendo a cura de todos

os males, ambos os métodos têm os seus pontos fortes e fracos. Geralmente, um método particionado tem ordem baixa (1, no máximo 2) mas tem boas propriedades de estabilidade, enquanto que um método implícito-explícito tem geralmente ordem mais elevada (pode mesmo escolher-se um método deste tipo de qualquer ordem), mas fracas propriedades de estabilidade. Além disso, a correcção das condições de fronteira para os métodos particionados é ainda um problema em aberto que só está resolvido em casos muito particulares. Surge então a questão:

*Perante uma equação de convecção-reacção-difusão, que tipo de método numérico devemos escolher para aproximar a sua solução de modo eficiente: um método particionado ou um método implícito-explícito?*

O presente trabalho pretende de alguma forma dar uma resposta a esta questão recorrendo a um resultado do tipo "consistência+estabilidade  $\Rightarrow$  convergência". Por forma a simplificar o estudo que faremos aos dois tipos de métodos, assumimos quase sempre que as componentes convectiva e difusiva da equação são lineares. Além disso, ao longo de todo o texto, assumimos também que a solução analítica existe, é única e é suficientemente regular (ver [Pao92]).

Este trabalho é constituído por quatro capítulos que apresentaremos de seguida. O primeiro capítulo apresenta uma teoria da estabilidade/convergência para problemas (não necessariamente diferenciais) não lineares, sendo o principal objectivo estabelecer um resultado do tipo "consistência+estabilidade  $\Rightarrow$  convergência". Nos dois capítulos seguintes, são introduzidos os métodos particionados (segundo capítulo) e os métodos implícitos-explícitos (terceiro capítulo) sendo estudadas as suas propriedades de estabilidade, consistência e convergência. Por último, apresentaremos um modelo de propagação geográfico de epidemias e dois métodos, um de cada tipo estudado, para aproximar a solução do referido problema.

Por último, não podemos deixar de referir algumas questões que permanecem sem resposta e/ou que surgiram durante a escrita deste trabalho. Salientamos as seguintes:

- Que influência têm as correcções de fronteira para os métodos particionados na convergência e estabilidade dos mesmos? É possível manter a ordem global do método com correcções adequadas?
- Como escolher os coeficientes dos métodos implícitos-explícitos com mais de uma etapa por forma a obter boas propriedades de estabilidade? Será que existe alguma vantagem, para além da ordem, em considerar um método de três ou quatro etapas?
- É possível adaptar a abordagem utilizada para provar a convergência dos métodos numéricos no contexto de problemas totalmente não lineares, isto é, em que a convecção e a difusão são não lineares?
- No contexto das equações integro-diferenciais e com atraso, como tirar proveito do particionamento para desenvolver métodos numéricos para este tipo de equações?

Gonçalo Nuno Travassos Borges Alves da Pena  
Coimbra, 2004

# Conteúdo

<b>Prefácio</b>	<b>i</b>
<b>1 Teoria da Convergência - Estabilidade</b>	<b>1</b>
1.1 Preliminares . . . . .	2
Erro Global. Convergência . . . . .	3
Erro Local. Consistência . . . . .	5
1.2 Estabilidade linear . . . . .	6
1.3 Estabilidade não linear . . . . .	7
Primeira tentativa de definição . . . . .	7
Estabilidade-S . . . . .	12
Estabilidade-K . . . . .	13
Estabilidade Restrita . . . . .	18
Semi-estabilidade . . . . .	18
<b>2 Métodos particionados</b>	<b>25</b>
2.1 Os métodos particionados . . . . .	28
2.2 O erro de particionamento . . . . .	32
2.3 Estabilidade e convergência . . . . .	36
Discretização . . . . .	36
Estabilidade e estabilidade interna . . . . .	37
Erro local . . . . .	45

<b>Conteúdo</b>	<b>v</b>
Convergência . . . . .	47
<b>3 Métodos implícitos-explicitos</b>	<b>51</b>
3.1 Métodos Implícitos-Explícitos . . . . .	53
3.2 Algumas considerações sobre o erro local . . . . .	54
MIE de uma etapa . . . . .	56
MIE de duas etapas . . . . .	58
3.3 Estabilidade . . . . .	58
<b>4 Um modelo de propagação geográfica de epidemias</b>	<b>69</b>
4.1 O modelo matemático . . . . .	70
4.2 Modelos discretos . . . . .	71
Método implícito-explicito . . . . .	72
Método particionado . . . . .	74
4.3 Resultados numéricos . . . . .	77
<b>Bibliografia</b>	<b>79</b>



# 1 Teoria da Convergência - Estabilidade

Neste capítulo introdutório pretendemos apresentar alguns elementos da teoria geral da convergência de métodos numéricos para equações diferenciais - Convergência, Consistência e Estabilidade.

Os problemas de condição inicial e de fronteira que consideramos ao longo deste trabalho são, na sua maioria, não lineares. Atendendo a este facto, os conceitos da teoria de convergência para métodos numéricos são apresentados num contexto geral. A demonstração da convergência é consequência natural dos conceitos de consistência e estabilidade.

Iniciamos este capítulo apresentando na secção 2 alguns conceitos fundamentais da Teoria de Convergência. A estabilidade no caso linear é objecto de estudo na secção 3. Finalmente na secção central deste capítulo, secção 4, é feita uma digressão pelo conceito de estabilidade no caso não linear.

Observamos que, embora pretendamos estudar métodos numéricos para equações diferenciais, a teoria apresentada pode ser concretizada no contexto dos métodos numéricos utilizados, por exemplo, na resolução numérica de equações integrais ou equações integro-diferenciais.

A fim de facilitar a leitura deste capítulo, introduzimos exemplos ilustrativos dos conceitos que são objecto de estudo.

## 1.1 Preliminares

Consideremos o problema diferencial (ou integral), não necessariamente linear,

$$\phi(u) = 0$$

em que  $\phi : X \rightarrow Y$  e  $X$  e  $Y$  são espaços vectoriais. A determinação da solução analítica desta equação só é possível em casos simples e, mesmo nestes casos, tal solução é expressa frequentemente como uma série de funções ou um integral dependentes dos parâmetros. A fim de estudar as propriedades da solução  $u$  do problema anterior, é fundamental a substituição modelos contínuos por modelos discretos que permita obter uma "aproximação" para a solução contínua.

Seja  $H$  uma sucessão de números reais positivos convergente para zero. Para  $h \in H$ , consideremos a equação

$$\phi_h(U_h) = 0 \tag{1.1}$$

em que  $\phi_h : D_h \subset X_h \rightarrow Y_h$  e  $X_h, Y_h$  são espaços vectoriais normados, denominada modelo discreto/discretização. A  $U_h$  chamamos solução discreta.

Admitiremos que  $\dim X_h = \dim Y_h < \infty$ .

**Exemplo 1.** Fixemos  $\alpha$  um número real tal que  $0 \leq \alpha < 1$  e consideremos o problema diferencial

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u^2, & 0 < t \leq 1 \\ u(0) = \alpha \end{cases} \tag{1.2}$$

A solução analítica deste problema é

$$u(t) = \frac{\alpha}{1 - \alpha t}.$$

Com o objectivo de definir o modelo discreto, seja  $N \in \mathbb{N}$  e  $h = \frac{1}{N}$ . Aproximando a derivada de (1.2) com diferenças progressivas, obtemos as seguintes equações discretas

$$\begin{cases} U^0 = \alpha \\ \frac{U^{n+1} - U^n}{h} = f(U^n), \quad n = 0, \dots, N-1. \end{cases}$$

em que  $f(u) = u^2$ .

O problema anterior pode ainda ser escrito na forma  $\phi_h(U_h) = 0$  em que

$$\phi_h(U_h) = \begin{bmatrix} U^0 - \alpha \\ \frac{U^1 - U^0}{h} - f(U^0) \\ \vdots \\ \frac{U^N - U^{N-1}}{h} - f(U^{N-1}) \end{bmatrix}$$

e  $U_h = [U^0, \dots, U^N]^T$ .

Notemos que, neste contexto,  $X_h = Y_h = \mathbb{R}^{N+1}$ .

Observemos que, no caso não linear,  $\phi_h$  pode não estar definida em todo o espaço  $X_h$  (pode envolver logaritmos, raízes quadradas, etc...).

### Erro Global. Convergência

Seja  $U_h$  a aproximação discreta definida por (1.1). Uma questão que se coloca é em que medida  $U_h$  representa uma "boa aproximação" para  $u$ . Uma vez que  $U_h$  e  $u$  podem não ser comparáveis (por exemplo, relativamente a (1.2),  $u$  é definida em  $[0, 1]$  e  $U_h$  é um vector com  $N + 1$  componentes) consideremos um representante  $u_h$  de  $u$  em  $X_h$ . Em geral, e no contexto das diferenças finitas, este elemento é obtido considerando a restrição de  $u$  aos pontos da malha.

A  $e_h = u_h - U_h$  chamamos erro global em  $U_h$ .

**Definição 1.1.1.** Dizemos que a discretização (1.1) é convergente se existir  $h_0 > 0$  tal que para cada  $h \in H$  e  $h \leq h_0$ , (1.1) tem solução e

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|e_h\|_{X_h} = 0.$$

Se, para  $h \in H$  suficientemente pequeno,  $\|e_h\|_{X_h} = \mathcal{O}(h^p)$ , então diz-se que a convergência é de ordem  $p$ .

**Exemplo 2.** Retomemos o Exemplo 1. Admitamos que a função  $f$  do segundo membro da equação diferencial (1.2) é de Lipschitz (com constante de Lipschitz  $L$ ) e que  $u \in \mathcal{C}^2([0, 1])$ . Como já vimos, os espaços  $X_h$  e  $Y_h$  são  $\mathbb{R}^{N+1}$ , para cada  $h \in H$ . Nestes espaços, introduzamos a norma

$$\|V_h\|_\infty = \max_n |V^n|, \quad V_h = [V^0, V^1, \dots, V^N]^T.$$

Para representante de  $u$  em  $X_h$  consideremos o vector  $u_h$  cuja  $n$ -ésima componente é  $u(x_n)$ , com  $x_n = nh$ . Provemos agora que a discretização tem, relativamente à norma escolhida, ordem de convergência um.

Para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , desenvolvendo  $u(x_{n+1})$  em torno de  $x_n$  obtemos

$$u(x_{n+1}) = u(x_n) + hu'(x_n) + \frac{h^2}{2}u''(\xi_n). \quad (1.3)$$

para algum  $\xi_n \in (x_n, x_{n+1})$ . Por outro lado, as componentes de  $U_h$  verificam

$$U^{n+1} = U^n + hf(U^n), \quad (1.4)$$

para  $n = 0, \dots, N-1$ . Subtraindo membro a membro (1.4) a (1.3) e introduzindo  $e_h = u_h - U_h = [e^0, e^1, \dots, e^N]^T$  obtemos

$$e^{n+1} = e^n + h(f(u_h^n) - f(U^n)) + \frac{h^2}{2}u''(\xi_n).$$

Da identidade anterior e atendendo a que  $f$  é de Lipschitz resulta

$$|e^{n+1}| \leq (1 + hL)|e^n| + \frac{h^2}{2}|u''(\xi_n)|. \quad (1.5)$$

Por outro lado, se  $u \in \mathcal{C}^2([0, 1])$  existe  $M > 0$  tal que

$$|e^{n+1}| \leq (1 + hL)|e^n| + M\frac{h^2}{2}.$$

Da desigualdade anterior, concluímos que

$$|e^{n+1}| \leq (1 + hL)^{n+1}|e^0| + \frac{1 - (1 + hL)^{n+1}}{1 - (1 + hL)} \frac{M}{2}h^2,$$

ou ainda,

$$|e^{n+1}| \leq M \frac{(1+hL)^{n+1} - 1}{2L} h$$

uma vez que  $e_0 = 0$ . Como  $(1+hL)^{n+1} \leq e^L$  para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , vem finalmente

$$\|e_h\| \leq M \frac{e^L - 1}{2L} h$$

isto é,

$$\|e_h\| = \mathcal{O}(h).$$

### Erro Local. Consistência

A  $l_h := \phi_h(u_h) \in Y_h$  chamamos erro local (ou erro de truncatura) de (1.1) em  $u_h$ .

**Definição 1.1.2.** Dizemos que a discretização (1.1) é consistente (respectivamente, consistente de ordem  $p$ ) se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|l_h\|_{Y_h} = 0 \quad (\|l_h\|_{Y_h} = \mathcal{O}(h^p)).$$

**Exemplo 3.** Retomemos novamente o Exemplo 1. Com as notações introduzidas na secção anterior, se  $l_h = \phi_h(u_h)$ , então as componentes de  $l_h$  satisfazem

$$\begin{cases} l^0 = 0 \\ l^{n+1} = \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{h} - f(u_h^n), \quad n = 0, \dots, N-1. \end{cases}$$

Atendendo a (1.3), da hipótese  $u \in \mathcal{C}^2[0, 1]$  vem

$$|l^{n+1}| \leq Ch, \quad n = 0, \dots, N-1$$

onde  $C$  não depende da componente considerada nem de  $h$ . Assim, tomando o máximo de todas as componentes tem-se finalmente

$$\|l_h\|_\infty = \mathcal{O}(h).$$

## 1.2 Estabilidade linear

Até agora não foi feita nenhuma distinção sobre o carácter linear ou não linear de (1.1). Suponhamos que (1.1) é linear, isto é,

$$\phi_h(U_h) \equiv \psi_h(U_h) - f_h = 0, \quad (1.6)$$

ou  $\psi_h(U_h) = f_h$ , onde, para cada  $h \in H$ ,  $\psi_h$  é um operador linear definido de  $X_h$  em  $Y_h$  e  $f_h$  é um elemento fixo de  $Y_h$ .

O conceito intuitivo de estabilidade motiva-nos para a seguinte implicação

$$\left\| \psi(U_h - \widetilde{U}_h) \right\|_{Y_h} = \left\| \psi(U_h) - \psi(\widetilde{U}_h) \right\|_{Y_h} \approx 0 \implies \left\| U_h - \widetilde{U}_h \right\|_{X_h} \approx 0$$

isto é, pequenas perturbações nos dados do problema implicam pequenas perturbações na solução. Surge assim, de uma forma natural, a seguinte definição.

**Definição 1.2.1.** *A discretização (1.6) é estável se existirem constantes positivas  $S$  e  $h_0$  tais que, para cada  $h \in H$  com  $h \leq h_0$ , se tem*

$$\|V_h\|_{X_h} \leq S \|\psi_h(V_h)\|_{Y_h} \text{ para todo } V_h \in X_h. \quad (1.7)$$

A constante  $S$  é chamada constante de estabilidade de (1.6).

Estamos neste momento em condições de provar um resultado importante da Análise Numérica De Equações Diferenciais - o Teorema da Convergência.

**Teorema 1.2.1.** *Se a discretização (1.6) é consistente e estável (com constante de estabilidade  $S$ ), então (1.6) admite, para  $h$  suficientemente pequeno, uma solução  $U_h$  única que verifica  $\|e_h\| \leq S \|l_h\|$ . Se a ordem de consistência é  $p$ , então a ordem de convergência é pelo menos  $p$ .*

*Demonstração.* Notemos que para  $h$  suficientemente pequeno, a desigualdade (1.7) implica a invertibilidade do operador  $\psi_h$  e portanto, a existência e unicidade de solução do problema (1.6). Por outro lado,

$$\|u_h - U_h\| \leq S \|\psi_h(u_h - U_h)\| = S \|\phi_h(u_h) - \phi_h(U_h)\| \quad (1.8)$$

donde

$$\|e_h\| = \|u_h - U_h\| \leq S \|\psi_h(u_h - U_h)\| = S \|\phi_h(u_h)\| = S \|l_h\| \quad (1.9)$$

**q.e.d.**

Assim, o conceito de estabilidade permite-nos concluir dois resultados importantes:

[C1] Consistência + Estabilidade  $\Rightarrow$  Convergência;

[C2] Para  $h$  suficientemente pequeno, o problema (1.6) tem uma única solução.

### 1.3 Estabilidade não linear

#### Primeira tentativa de definição

Nesta secção pretendemos estudar de modo natural o conceito de estabilidade para  $\phi_h$  quando este é não linear. Esta extensão deve ser considerada de modo a que [C1] e [C2] sejam verificados.

Seja  $D_h$  o domínio de  $\phi_h$  em  $X_h$ . Atendendo às desigualdades (1.8) e (1.9) e admitindo que, para  $h$  suficientemente pequeno,  $U_h$  existe, concluimos que consistência implica convergência desde que seja válida, para  $h$  suficientemente pequeno, a desigualdade

$$\|V_h - W_h\|_{X_h} \leq S \|\phi_h(V_h) - \phi_h(W_h)\|_{Y_h} \quad (1.10)$$

onde  $V_h, W_h \in D_h$  e  $S$  independente de  $h$ ,  $V_h$  e  $W_h$ .

A desigualdade anterior permite introduzir o seguinte conceito de estabilidade (ver [LMSS87]).

**Definição 1.3.1.** *A discretização (1.1) diz-se estável- $N$  se existirem constantes positivas  $S$  (constante de estabilidade) e  $h_0$  tais que, para cada  $h \in H$  e  $h \leq h_0$ , a desigualdade (1.10) é válida, quaisquer que sejam  $V_h, W_h \in D_h$ .*

No caso não linear, a existência de solução do problema não é consequência imediata da estabilidade da discretização. No entanto, impondo certas restrições a  $\phi_h$ , é possível provar que (1.1) tem solução em  $D_h$ . O resultado seguinte é fundamental para garantir a invertibilidade de  $\phi_h$ :

**Lema 1.3.1.** *Sejam  $X$  e  $Y$  espaços normados com a mesma dimensão finita,  $\phi : D \subset X \longrightarrow Y$  uma aplicação e  $u \in D$ . Admitamos que*

[L1] *existe  $R > 0$  tal que  ${}^1B(u, R) \subset D$ ;*

[L2]  *$\phi$  é contínua em  $B(u, R)$ ;*

[L3] *existem  $S > 0$  e  $r, 0 < r \leq \infty$  tais que se  $v, w \in B(u, R)$  e*

$$\|\phi(v) - \phi(u)\| \leq r \quad , \quad \|\phi(w) - \phi(u)\| \leq r,$$

*então*

$$\|v - w\| \leq S \|\phi(v) - \phi(w)\|.$$

*Então  $\phi$  admite inversa  $\phi^{-1} : B(\phi(u), r_0) \longrightarrow B(u, R)$ , com  $r_0 = \min(R/S, r)$ , e  $\phi^{-1}$  é de Lipschitz com constante de Lipschitz  $S$ .*

*Demonstração.* Caso  $r < \infty$ .

Começemos por notar que a aplicação

$$\phi : B(u, R) \cap \phi^{-1}(B(\phi(u), r)) \longrightarrow \phi(B(u, R)) \cap B(\phi(u), r)$$

está bem definida. Mais ainda, esta restrição de  $\phi$  é bijectiva sendo a sobrejectividade consequência da definição e a injectividade consequência de [L3]. Notemos também que no domínio de definição considerado,  $\phi^{-1}$  é de Lipschitz, com constante de Lipschitz  $S$ .

Se provarmos que

$$B_{r_0} := B(\phi(u), r_0) \subset \phi(B(u, R))$$

---

<sup>1</sup>Notação:  $B(u, R)$  é a bola aberta centrada em  $u$  e raio  $R$

então concluímos a demonstração. Suponhamos então que existe  $\delta_0 \in B_{r_0}$  tal que  $\delta_0 \notin \phi(B(u, R))$ . Para  $\lambda \in [0, 1]$ , sejam  $\delta(\lambda) := (1 - \lambda)\phi(u) + \lambda\delta_0$  e  $B' := \{\lambda' : \delta(\lambda) \in \phi(B(u, R)), \lambda \in [0, \lambda']\}$  e

$$\bar{\lambda} = \begin{cases} \sup B', & B' \neq \emptyset \\ 0, & B' = \emptyset. \end{cases}$$

Mostremos agora que  $\bar{\lambda} \leq 1$  origina uma contradição que torna a hipótese  $\delta_0 \notin \phi(B(u, R))$  um absurdo. Começemos por observar que  $\delta(\bar{\lambda}) \in \phi(B(u, R))$ . Seja  $\bar{\delta} = \delta(\bar{\lambda})$ . Ora, se  $\bar{\lambda} = 0$ , então  $\bar{\delta}(0) = \phi(u) \in \phi(B(u, R))$ . Por outro lado, como  $0 < \bar{\lambda} \leq 1$ , seja  $\varepsilon > 0$  tal que  $\bar{\lambda} - \varepsilon \in (0, 1]$  e

$$\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon) \in \phi(B(u, R)) \cap B(\phi(u), r).$$

Assim,  $\phi^{-1}(\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon))$  existe e é um elemento de  $B(u, R)$ . De [L3] concluímos que a sucessão  $\{\phi^{-1}(\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon_n))\}_{n \in \mathbb{N}}$  é de Cauchy (logo convergente), desde que  $\{\varepsilon_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  seja tal que  $\varepsilon_n > 0$  e  $\lim_n \varepsilon_n = 0$ . Seja  $\alpha := \lim_n \phi^{-1}(\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon_n))$ . Da definição de  $\delta$  e de [L3] temos sucessivamente

$$\begin{aligned} \|\phi^{-1}(\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon)) - u\| &\leq S \|\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon) - \phi(u)\| \\ &= S(\bar{\lambda} - \varepsilon) \|\phi(u) - \delta_0\| \\ &< S(\bar{\lambda} - \varepsilon) r_0 \\ &\leq R(\bar{\lambda} - \varepsilon) \end{aligned}$$

e portanto, tomando  $\varepsilon$  a tender para zero, concluímos que  $\|\alpha - u\| < R$ , isto é,  $\alpha \in B(u, R)$ . Mais ainda,

$$\begin{aligned} \phi(\alpha) &= \phi\left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \phi^{-1}(\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon))\right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \phi(\phi^{-1}(\delta(\bar{\lambda} - \varepsilon))) \\ &= \delta(\bar{\lambda}) \\ &= \bar{\delta}. \end{aligned}$$

Assim,  $\bar{\delta} \in \phi(B(u, R)) \cap B(\phi(u), r)$ . Podemos agora escolher uma bola fechada  $\bar{B}$  centrada em  $\alpha$  tal que  $\bar{B} \subset B(u, R)$  e  $\phi(\bar{B}) \subset B(\phi(u), r)$ . Notemos que

nestas condições,  $\phi(\bar{B})$  e  $\bar{B}$  são homeomorfos e portanto  $\phi(\bar{B})$  contém uma vizinhança aberta de  $\bar{\delta}$ , o que é absurdo.

O caso  $r = \infty$  segue uma demonstração semelhante, tomando  $r = \frac{R}{S}$ .

**q.e.d.**

Conjugando o conceito de estabilidade-N e as hipóteses [L1] e [L2], concluímos [C1] e [C2], como é estabelecido no seguinte resultado:

**Teorema 1.3.2.** *Seja (1.1) uma discretização consistente e estável-N. Se existir uma constante  $R > 0$ , independente de  $h$ , tal que, para cada  $h \in H$ ,  $\phi_h$  é contínua em  $B(u_h, R) \subset D_h$ , então, para  $h$  suficientemente pequeno, (1.1) tem solução  $U_h$  em  $B(u_h, R)$ , única em  $D_h$ , e*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u_h - U_h\| = 0.$$

Além disso,  $\|u_h - U_h\| \leq S \|\phi_h(u_h)\|$ .

*Demonstração.* Aplicando o Lema 1.3.1 a  $\phi_h$  com  $r = \infty$  e  $u = u_h$ , concluímos que  $\phi_h$  tem inversa definida de  $B(\phi_h(u_h), R/S)$  em  $B(u_h, R)$ . Como (1.1) é consistente, para  $h$  suficientemente pequeno,  $\|\phi_h(u_h)\| < R/S$  e portanto  $0 \in B(\phi_h(u_h), R/S)$ . Deste modo, (1.1) tem solução  $U_h := \phi_h^{-1}(0)$ .

A unicidade de solução em  $D_h$  é consequência da desigualdade de estabilidade-N. A demonstração da relação entre o erro local e o erro global segue os passos da demonstração do Teorema 1.2.1.

**q.e.d.**

Notemos que o conceito de estabilidade-N é demasiado restritivo pois não permite concluir a convergência de alguns métodos.

**Exemplo 4.** *Consideremos novamente a equação diferencial do Exemplo 1 e a respectiva discretização apresentada. Escolhamos  $u_h$  como sendo a restrição de  $u$  nos pontos da malha subjacente e definamos as seguintes normas em  $X_h$  e  $Y_h$*

$$\|V_h\| = \max_n |V^n|, \quad V_h = [V^0, \dots, V^N]^T \in X_h$$

$$\|F_h\| = |F^0| + \sum_{n=1}^N h |F^n|, \quad F_h = [F^0, \dots, F^N]^T \in Y_h$$

*Provemos que a discretização (1.2) não é estável-N.*

*Seja  $V_h \in X_h$  o vector definido recursivamente por*

$$\begin{cases} V^0 = 1 \\ \frac{V^{n+1} - V^n}{h} - f(V^n) = 0, \quad n = 0, \dots, N-1. \end{cases}$$

*De [SSV86] segue-se que  $2V^N \sim \frac{1}{h \log h}$  e portanto, à medida que  $h$  tende para zero,  $\|u_h - V_h\|$  não é limitada. Por outro lado, como as componentes de  $V_h$  satisfazem a definição anterior, temos que  $\|\phi_h(V_h)\| = 1 - \alpha$ . Atendendo a que a discretização é consistente com o problema diferencial, a desigualdade (1.10) não pode ocorrer com  $S$  independente de  $h$ , e portanto a discretização não é estável-N.*

Notemos que a definição de estabilidade-N exige que (1.10) seja válida para quaisquer elementos  $V_h, W_h$  em  $X_h$  pelo que podemos estar a comparar elementos que não são relevantes para o estudo da estabilidade da discretização, como mostra o exemplo anterior.

Parece-nos então natural comparar apenas elementos de  $X_h$  próximos de  $u_h$  ou que  $\|\phi_h(u_h)\|$  não seja "muito grande". Estas considerações levam-nos ao conceito de limiar de estabilidade que apresentamos na secção seguinte.

---

<sup>2</sup>  $\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{V^N}{\frac{1}{h \log h}} = 1$

### Estabilidade-S

A definição seguinte foi proposta por Stetter [Ste73]:

**Definição 1.3.2.** *A discretização (1.1) diz-se estável-S se existirem constantes positivas  $S$ ,  $h_0$  e  $r \in ]0, +\infty]$  - limiar de estabilidade - tais que a desigualdade (1.10) se verifica para cada  $h \in H$ ,  $h \leq h_0$  e para  $V_h, W_h$  em  $D_h$  tais que*

$$\|\phi_h(V_h) - \phi_h(u_h)\| < r \quad , \quad \|\phi_h(W_h) - \phi_h(u_h)\| < r. \quad (1.11)$$

#### Observações:

1. Se (1.1) é estável-S com limiar  $r < \infty$  e  $\phi_h$  é linear então (1.1) ainda é estável-S com limiar  $r = \infty$ . Neste contexto, esta definição de estabilidade reduz-se à definição de estabilidade no caso linear.
2. Esta definição é menos exigente que a definição de estabilidade-N. Note-se que apenas verificamos se a condição de estabilidade (1.10) é válida para os vectores que satisfaçam (1.11).

No contexto desta nova definição e do Exemplo 4, se  $r < 1 - \alpha$  então não poderíamos averiguar se a desigualdade de estabilidade é válida para  $V_h$  uma vez que  $\|\phi_h(V_h)\| = 1 - \alpha$ .

Embora seja um conceito que é um enfraquecimento do conceito de estabilidade-N, para discretizações estáveis-S e consistentes vale um resultado de existência, unicidade e convergência análogo ao Teorema 1.3.2 que estabelecemos seguidamente. Não apresentamos a sua demonstração pois é análoga à prova do Teorema 1.3.2.

**Teorema 1.3.3.** *Seja (1.1) uma discretização consistente e estável-S. Se existir uma constante  $R > 0$ , independente de  $h$ , tal que, para cada  $h \in H$ ,  $\phi_h$  é contínua em  $B(u_h, R) \subset D_h$ , então, para  $h$  suficientemente pequeno, (1.1) tem*

solução  $U_h$  em  $B(u_h, R)$ , única em  $D_h$ , e

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u_h - U_h\| = 0.$$

Além disso,  $\|u_h - U_h\| \leq S \|\phi_h(u_h)\|$ .

### Estabilidade-K

H. Keller em [Kel75] propõe um conceito alternativo ao conceito de estabilidade-S em que na desigualdade de estabilidade são apenas envolvidos elementos de  $D_h$  pertencentes a uma bola centrada em  $u_h$  e não em elementos de  $D_h$  cujas imagens por  $\phi_h$  estão numa bola centrada em  $\phi_h(u_h)$ .

**Definição 1.3.3.** *A discretização (1.1) diz-se estável-K se existirem constantes positivas  $S$ ,  $h_0$  e  $R \in ]0, +\infty]$  - limiar de estabilidade - tais que, para cada  $h \in H$ ,  $h \leq h_0$ ,  $B(u_h, R) \subset D_h$  e, para  $V_h, W_h$  em  $B(u_h, R)$ , vale a desigualdade (1.10).*

Notemos que à semelhança do conceito de estabilidade-S, recuperamos a definição usual de estabilidade quando o operador  $\phi_h$  é linear.

No contexto da definição anterior vale o seguinte resultado cuja demonstração é análoga à do Teorema 1.3.2.

**Teorema 1.3.4.** *Seja (1.1) uma discretização consistente e estável-K. Se existir uma constante  $R > 0$ , independente de  $h$ , tal que, para cada  $h \in H$ ,  $\phi_h$  é contínua em  $B(u_h, R) \subset D_h$ , então, para  $h$  suficientemente pequeno, (1.1) tem solução única  $U_h$  em  $B(u_h, R)$  e*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u_h - U_h\| = 0.$$

Além disso,  $\|u_h - U_h\| \leq S \|\phi_h(u_h)\|$ .

**Observações:**

1. Comparando os Teoremas 1.3.3 e 1.3.4, verificamos que as conclusões são as mesmas excepto no conjunto onde é garantida a existência de solução. A definição de estabilidade-S garante unicidade em todo o domínio  $D_h$  enquanto que a definição de estabilidade-K apenas garante em  $B(u_h, R)$ .
2. Em [Kel75], Keller segue uma abordagem alternativa a esta e recorre à linearização de  $\phi_h$  em torno de  $u_h$  para provar a existência e unicidade de solução.

**Exemplo 5.** Consideremos novamente o problema introduzido no Exemplo 1.

Seja  $R > 0$  e

$$M = \bigcup_{t \in [0,1]} [u(t) - R, u(t) + R].$$

Atendendo à definição de  $f$  existe  $L = L(R) > 0$  tal que

$$|f(v) - f(w)| \leq L |v - w| \quad \text{para } v, w \in M. \quad (1.12)$$

Com o objectivo de estudar a estabilidade da discretização, consideremos as normas introduzidas no Exemplo 4 e vectores  $V_h$  e  $W_h$  de  $\mathbb{R}^{N+1}$  tais que

$$\|W_h - u_h\| < R, \quad \|V_h - u_h\| < R \quad (1.13)$$

e as normas definidas no Exemplo 4.

Sejam  $F_h = \phi_h(V_h)$  e  $G_h = \phi_h(W_h)$  tais que

$$F^0 = V^0 - \alpha, \quad F^{n+1} = \frac{V^{n+1} - V^n}{h} - f(V^n), \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (1.14)$$

$$G^0 = W^0 - \alpha, \quad G^{n+1} = \frac{W^{n+1} - W^n}{h} - f(W^n), \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (1.15)$$

Subtraindo membro a membro (1.14) a (1.15), obtemos, para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ ,

$$V^{n+1} - W^{n+1} = V^n - W^n + h(f(V^n) - f(W^n)) + h(F^{n+1} - G^{n+1}).$$

De (1.13) concluímos que  $V^n$  e  $W^n$  estão em  $M$ , para  $n = 0, 1, \dots, N$  e portanto, para estes valores, é válida a desigualdade (1.12). Logo

$$\begin{aligned} |V^{n+1} - W^{n+1}| &\leq (1 + hL) |V^n - W^n| + h |F^{n+1} - G^{n+1}| \\ &\vdots \\ &\leq (1 + hL)^{n+1} |V^0 - W^0| + h \sum_{i=1}^{n+1} (1 + hL)^{n-i+1} |F^i - G^i| \end{aligned}$$

para  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ .

Atendendo a que, para  $i \leq N$ ,  $(1 + hL)^i \leq e^L$ , tem-se finalmente

$$\max_n |V^n - W^n| \leq e^L \left( |V^0 - W^0| + h \sum_{i=1}^N |F^i - G^i| \right),$$

isto é,

$$\|V_h - W_h\|_{X_h} \leq e^L \|\phi_h(V_h) - \phi_h(W_h)\|_{Y_h}.$$

Pelo Teorema 1.3.4, concluímos que a discretização é convergente e tem pelo menos ordem de convergência um.

Embora adequadas para problemas diferenciais ordinários, as definições apresentadas são demasiado restritivas para problemas envolvendo derivadas parciais. Esta observação é justificada pelo exemplo seguinte.

**Exemplo 6.** Consideremos uma equação de difusão-reacção

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + f(u) & , x \in (0, 1), t \in (0, T) \\ u(0, t) = u(1, t) = 0 & , t \geq 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) & , x \in [0, 1] \end{cases}$$

onde  $f \in \mathcal{C}(\mathbb{R})$  mas não é globalmente de Lipschitz e  $u_0(0) = u_0(1) = 0$ . Seja  $M$  um inteiro positivo,  $\Delta x = 1/M$  e  $\{x_i, i = 0, \dots, M\}$  a malha definida por  $x_i = i\Delta x$ . Consideremos uma constante positiva  $c$  e sejam  $h = c\Delta x^2$  e  $t_n = nh$ ,  $n = 0, \dots, N$ , onde  $N = \frac{T}{h}$  é inteiro positivo. Discretizando  $u_t$

com diferenças progressivas e  $u_{xx}$  com diferenças centradas de segunda ordem, obtemos o seguinte modelo discreto

$$\begin{cases} U_j^0 = u_0(x_j), j = 0, \dots, M \\ U_0^n = U_M^n = 0, n = 0, \dots, N \\ \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{h} = \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2} + f(U_j^n), \end{cases}$$

para  $n = 0, \dots, N - 1$ ,  $j = 1, \dots, M - 1$ . Se  $U^n = [U_1^n, \dots, U_{M-1}^n]^T$  então o modelo anterior pode escrever-se na forma

$$\begin{cases} U^0 - [u_0(x_j)]_{j=1, \dots, M-1} = 0 \\ \frac{U^{n+1} - U^n}{h} - D_2 U^n - F(U^n) = 0, n = 0, \dots, N - 1, \end{cases} \quad (1.16)$$

onde, para cada  $n \geq 1$ ,  $F(U^n)$  é o vector de componentes  $F(U_j^n)$ . Seja  $X_h = Y_h$  o espaço das matrizes  $(M - 1) \times (N + 1)$  onde consideramos as normas

$$\|V_h\|_{X_h} = \max_n \|V^n\|_2, \quad V_h = [V^0 | V^1 | \dots | V^N], \quad (1.17)$$

$$\|F_h\|_{Y_h} = \|F^0\|_2 + h \sum_{n=1}^N \|F^n\|_2, \quad F_h = [F^0 | F^1 | \dots | F^N]. \quad (1.18)$$

Se  $u_{tt}$  e  $u_{xxx}$  são limitadas então a ordem de consistência é dois.

Estudemos agora a estabilidade de (1.16). Sejam  $V_h$  e  $W_h$  dois elementos em  $X_h$  e  $F_h = \phi_h(V_h)$  e  $G_h = \phi_h(W_h)$ . Note-se que as componentes de  $\phi_h(V_h)$  são definidas por (1.16) com  $U^n$  substituído por  $V^n$ . Assim, de acordo com (1.17) e (1.18) temos

$$F^{n+1} = \frac{V^{n+1} - V^n}{h} - D_2 V^n - F(V^n)$$

$$G^{n+1} = \frac{W^{n+1} - W^n}{h} - D_2 W^n - F(W^n).$$

Tomando  $e^n = V^n - W^n$  vem

$$e^{n+1} = h(F^{n+1} - G^{n+1}) + (I + cD_2)e^n + h(F(V^n) - F(W^n)).$$

Portanto

$$\|e^{n+1}\|_2 \leq h \|F^{n+1} - G^{n+1}\|_2 + \|I + hD_2\|_2 \|e^n\|_2 + h \|F(V^n) - F(W^n)\|_2$$

e, atendendo a que para  $c \leq 1/2$ ,  $\|I + hD_2\|_2 \leq 1$ , obtemos ainda

$$\|e^{n+1}\|_2 \leq h \|F^{n+1} - G^{n+1}\|_2 + \|e^n\|_2 + h \|F(V^n) - F(W^n)\|_2.$$

Se  $F$  verificasse uma desigualdade do tipo Lipschitz então procedendo como no Exemplo 5 obteríamos

$$\|V_h - W_h\|_{X_h} \leq e^L \|F_h - G_h\|_{Y_h}.$$

Notemos contudo que tal pode não ser possível com a definição de estabilidade de Keller. De facto, se existir  $R > 0$  tal que para  $h$  suficientemente pequeno e  $V_h, W_h \in B(u_h, R)$  fosse válida uma desigualdade do tipo Lipschitz e  $\|V_h - u_h\| < R$ , os valores  $V_j^n$  e  $W_j^n$  podiam crescer na ordem de  $h^{-\frac{1}{2}}$  e não era possível majorar  $f(V_j^n) - f(W_j^n)$  uma vez que a função  $f$  não é globalmente de Lipschitz.

Um modo de contornar a dificuldade anterior é considerar limiares de estabilidade dependentes de  $h$ . De facto se os limiares fossem da forma  $rh^{\frac{1}{2}}$ , então, para  $V_h$  e  $W_h$  tais que

$$\|V_h - u_h\| \leq rh^{\frac{1}{2}}, \quad \|W_h - u_h\| \leq rh^{\frac{1}{2}}$$

vinha

$$\|F(V^n) - F(W^n)\|_2 \leq L \|V^n - W^n\|_2$$

e a discretização (1.16) seria, neste novo contexto, estável para  $c \leq 1/2$ .

Torna-se assim necessária uma nova definição de estabilidade que à semelhança das anteriores permita concluir [C1] e [C2] e que considere limiares de estabilidade dependentes de  $h$ .

### Estabilidade Restrita

Introduzimos nesta secção uma extensão à definição de estabilidade-K de Keller, com limiares de estabilidade dependentes de  $h$  (ver [LM85]).

**Definição 1.3.4.** *Sejam  $h \in H$  e  $R_h \in ]0, +\infty]$ . Diz-se que a discretização (1.1) é estável - relativamente aos limiares  $R_h$  - se existirem constantes positivas  $h_0$  e  $S$  tais que, para  $h \in H, h \leq h_0$ ,  $B(u_h, R_h) \subset D_h$  e, para  $V_h, W_h \in B(u_h, R_h)$ , é válida a desigualdade (1.10).*

Note-se que se os limiares não dependem de  $h$ , então a definição de estabilidade-K é recuperada. No contexto da estabilidade restrita, vale um resultado de convergência análogo aos resultados de convergência anteriormente estabelecidos para os conceitos de estabilidade já estudados.

**Teorema 1.3.5.** *Se a discretização (1.1) é consistente e estável com limiares  $R_h$ ,  $\phi_h$  é contínua em  $B(u_h, R_h)$  e*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\|\phi_h(u_h)\|}{R_h} = 0,$$

*então, para  $h$  suficientemente pequeno, (1.1) tem solução única  $U_h$  em  $B(u_h, R_h)$  e*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u_h - U_h\| = 0.$$

*Além disso,  $\|u_h - U_h\| \leq S \|\phi_h(u_h)\|$ .*

Assim, a discretização considerada no exemplo anterior pode provar-se agora convergente com o Teorema 1.3.5.

### Semi-estabilidade

Até agora, introduzimos apenas conceitos alternativos de estabilidade que permitissem concluir [C1] e [C2] e que não fossem demasiado restritivos no sentido de classificarem como instáveis algumas discretizações úteis na prática. No entanto, se repararmos, a prova de [C1] apenas exige que a condição

de estabilidade seja válida para  $u_h$  (representante de  $u$  em  $X_h$ ) e  $U_h$  (solução numérica). Podemos então definir um novo conceito de estabilidade que tenha em conta este facto. Introduzimos assim o conceito de semi-estabilidade (ver [LMSS88]).

**Definição 1.3.5.** *A discretização (1.1) é dita semi-estável se existir  $h_0 > 0$  tal que, para  $h \in H$  e  $h \leq h_0$ , existe  $R_h \in ]0, +\infty[$  - limiares de estabilidade - e  $S > 0$  tais que,  $B(u_h, R_h) \subset D_h$  e, para cada  $V_h \in B(u_h, R_h)$ ,*

$$\|u_h - V_h\| \leq S \|\phi_h(u_h) - \phi_h(V_h)\|. \quad (1.19)$$

No contexto da definição anterior vale o seguinte resultado:

**Teorema 1.3.6.** *Admitamos que (1.1) é consistente e semi-estável com limiares de estabilidade  $R_h$ . Se, para  $h$  suficientemente pequeno, (1.1) tem uma única solução  $U_h$  tal que  $\|u_h - U_h\| < R_h$ , então*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u_h - U_h\| = 0.$$

*Além disso,  $\|u_h - U_h\| \leq S \|\phi_h(u_h)\|$ .*

*Demonstração.* Seja  $e_h = u_h - U_h$ . Por hipótese temos que  $\|u_h - U_h\| < R_h$  e portanto a desigualdade (1.19) é válida para  $U_h$ . Assim tem-se que

$$\|e_h\| = \|u_h - U_h\| \leq S \|\phi_h(u_h) - \phi_h(U_h)\|$$

e atendendo ao facto de  $\|\phi_h(U_h)\| = 0$ , conclui-se finalmente

$$\|e_h\| \leq S \|l_h\|.$$

**q.e.d.**

A noção de semi-estabilidade juntamente com consistência, ao contrário das outras definições de estabilidade apresentadas, não permite, em geral concluir a existência da solução de (1.1). No entanto, impondo condições de regularidade a  $\phi_h$  podemos estabelecer resultados de existência.

Começemos por notar que, num número considerável de aplicações,  $\phi_h$  tem derivada à Frechet em  $u_h$ ,  $\phi'_h(u_h)$ . Mais ainda, se existir  $U_h$ , solução de (1.1), e estiver suficientemente próximo de  $u_h$  então

$$0 = \phi_h(U_h) \approx \phi_h(u_h) + \phi'_h(u_h)(U_h - u_h). \quad (1.20)$$

Atendendo a (1.20), consideremos o problema linear

$$\Phi_h(U_h) := \phi_h(u_h) - \phi'_h(u_h)(u_h) + \phi'_h(u_h)(U_h) = 0. \quad (1.21)$$

A discretização (1.21) é, de acordo com (1.7), estável se

[EL] Existem constantes positivas  $h_0$  e  $L$  tais que, para  $h \in H$  com  $h \leq h_0$ , existe  $\phi'_h(u_h)^{-1}$  e  $\|\phi'_h(u_h)^{-1}\| \leq L$ .

O resultado seguinte mostra a relação entre a semi-estabilidade de (1.1) e a estabilidade de (1.21).

**Teorema 1.3.7.** *Admitamos que, para  $h \in H$  com  $h$  suficientemente pequeno,  $\phi_h$  tem derivada à Frechet em  $u_h$ . Então, são equivalentes as afirmações*

1. (1.1) é semi-estável.
2. A discretização (1.21) é estável.

*Demonstração.* Suponhamos que (1.1) é semi-estável. Então, para  $h$  suficientemente pequeno, consideremos  $v_h \in B(0, R_h)$  tal que

$$g_h(v_h) = \phi_h(u_h + v_h) - \phi_h(u_h) - \phi'_h(u_h)v_h$$

verifica  $\|g_h(x_h)\| = o(\|x_h\|)$ .

Seja  $\delta > 0$ . Então, existe  $\widehat{R}_h(\delta) \leq R_h$  tal que, se  $\|x_h\| < \widehat{R}_h(\delta)$ , então  $\|g_h(x_h)\| < \frac{\delta}{S(S+\delta)} \|x_h\|$ .

Da desigualdade anterior e atendendo à semi-estabilidade, tem-se sucessivamente

$$\begin{aligned}
\|\phi'_h(u_h)x_h\| &= \|\phi_h(u_h + x_h) - \phi_h(u_h) - g_h(x_h)\| \\
&\geq \|\phi_h(u_h + x_h) - \phi_h(u_h)\| - \|g_h(x_h)\| \\
&\geq S^{-1}\|x_h\| - \|g_h(x_h)\| \\
&\geq S^{-1}\left(1 - \frac{\delta}{S + \delta}\right)\|x_h\| \\
&= \frac{1}{S + \delta}\|x_h\|.
\end{aligned}$$

Logo existe  $[\phi'_h(u_h)]^{-1}$  e  $\|\phi'_h(u_h)^{-1}\| \leq S + \delta$ .

Finalmente, atendendo à arbitrariedade de  $\delta > 0$ , tem-se

$$\|\phi'_h(u_h)^{-1}\| \leq S.$$

Reciprocamente, suponhamos que [EL] é válida. Novamente, para  $h$  suficientemente pequeno e  $v_h \in D_h$  tem-se

$$\begin{aligned}
\|\phi_h(v_h) - \phi_h(u_h)\| &= \|\phi'_h(u_h)(v_h - u_h) + g_h(v_h - u_h)\| \\
&\geq \|\phi'_h(u_h)(v_h - u_h)\| - \|g_h(v_h - u_h)\| \\
&\geq L^{-1}\|v_h - u_h\| - \|g_h(v_h - u_h)\|.
\end{aligned}$$

Seja  $\delta > 0$ . Atendendo a que

$$\lim_{\|x_h\| \rightarrow 0} \|g_h(x_h)\| = 0,$$

existe  $R'_h(\delta)$  tal que, se  $\|v_h - u_h\| < R'_h(\delta)$ , então  $g_h(v_h - u_h)$  está bem definida e

$$\|g_h(v_h - u_h)\| \leq \frac{\delta}{L(L + \delta)}.$$

Assim,

$$-\|g_h(v_h - u_h)\| \geq -\frac{\delta}{L(L + \delta)}\|v_h - u_h\|$$

e portanto

$$\|v_h - u_h\| \leq (L + \delta)\|\phi_h(v_h) - \phi_h(u_h)\|.$$

**q.e.d.**

Observamos que o resultado anterior permite estudar a semi-estabilidade da discretização não linear utilizando a estabilidade da sua linearização.

No teorema seguinte é estabelecida uma condição suficiente para a estabilidade de (1.1).

**Teorema 1.3.8.** *Suponhamos que*

[CE1] *para*  $h \in H$  *suficientemente pequeno,*  $\phi_h$  *tem derivada à Fréchet em*  $v_h \in B(u_h, R_h)$ ,

[CE2] *é válida a condição* [EL],

[CE3] *existe uma constante*  $Q \in [0, 1)$  *tal que, para*  $h \in H$  *suficientemente pequeno e*  $v_h \in B(u_h, R_h)$ , *é válida a desigualdade*

$$\|\phi'_h(v_h) - \phi'_h(u_h)\| \leq \frac{Q}{L}. \quad (1.22)$$

Então (1.1) é estável com limiares de estabilidade  $R_h$  e constante de estabilidade  $\frac{L}{1-Q}$ .

*Demonstração.* Seja  $h$  suficientemente pequeno e  $v_h, w_h \in B(u_h, R_h)$ . Consideremos  $A_h : [0, 1] \rightarrow Y_h$  definida por

$$A_h(t) = (1-t)v_h + tw_h - \phi'_h(u_h)^{-1} [\phi_h((1-t)v_h + tw_h) - \phi_h(u_h)].$$

Notemos que esta aplicação é diferenciável e que

$$\begin{aligned} A'_h(t) &= w_h - v_h - \phi'_h(u_h)^{-1} [\phi'_h((1-t)v_h + tw_h)(w_h - v_h)] \\ &= \phi'_h(u_h)^{-1} [\phi'_h(u_h) - \phi'_h((1-t)v_h + tw_h)] (w_h - v_h). \end{aligned}$$

Assim, de (1.22) e [EL] obtemos sucessivamente

$$\begin{aligned} \|A'_h(t)\| &\leq \|\phi'_h(u_h)^{-1}\| \|\phi'_h(u_h) - \phi'_h((1-t)v_h + tw_h)\| \|w_h - v_h\| \\ &\leq L \frac{Q}{L} \|w_h - v_h\| \\ &\leq Q \|w_h - v_h\|. \end{aligned}$$

Da desigualdade anterior vem finalmente

$$\|A_h(1) - A_h(0)\| \leq \|A'_h(\xi)\| \leq Q \|w_h - v_h\|. \quad (1.23)$$

Notemos ainda que se tem

$$\begin{aligned} \|A_h(1) - A_h(0)\| &= \|(w_h - v_h) - \phi'_h(u_h)^{-1} [\phi_h(w_h) - \phi_h(v_h)]\| \\ &\geq \|w_h - v_h\| - L \|\phi_h(w_h) - \phi_h(v_h)\|. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Conjugando (1.23) e (1.24) concluímos

$$\|w_h - v_h\| \leq \frac{L}{1-Q} \|\phi_h(w_h) - \phi_h(v_h)\|.$$

**q.e.d.**

Se a derivada à Fréchet de  $\phi_h$  é de Lipschitz ou contínua então, o resultado anterior permite concluir a equivalência entre semi-estabilidade e estabilidade restrita.

**Corolário 1.3.9.** *Suponhamos que são válidas [CE1] e [CE2] e, para  $h \in H$  suficientemente pequeno,  $\phi_h$  tem derivada à Fréchet de Lipschitz em  $u_h$ . Então existe  $S > 0$  tal que (1.1) é estável com constante de estabilidade  $S$  e limiares  $\min \{R_h, (L^{-1} - S^{-1})C_h^{-1}\}$ .*

*Demonstração.* Note-se que necessitamos apenas de provar [CE3].

Seja  $S > L$  e  $v_h$  tal que  $\|v_h - u_h\| \leq \min \left\{ R_h, \left( \frac{1}{L} - \frac{1}{S} \right) \frac{1}{C_h} \right\}$ . Então vem sucessivamente

$$\begin{aligned} \|\phi'_h(v_h) - \phi'_h(u_h)\| &\leq C_h \|v_h - u_h\| \\ &\leq C_h \min \left\{ R_h, \left( \frac{1}{L} - \frac{1}{S} \right) \frac{1}{C_h} \right\} \\ &\leq C_h \left( \frac{1}{L} - \frac{1}{S} \right) \frac{1}{C_h} \\ &\leq \frac{S-L}{SL}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Logo  $Q = \frac{S-L}{S} \in [0, 1)$ .

**q.e.d.**

**Corolário 1.3.10.** *Se são válidas [CE1] e [CE2] e para  $h \in H$  suficientemente pequeno,  $\phi_h$  tem derivada à Fréchet contínua em  $u_h$ , então (1.1) é estável se e só se é semi-estável.*

*Demonstração.* Basta notar que a condição (1.22) é válida se  $\phi'_h(\cdot)$  for contínua em  $u_h$ .

**q.e.d.**

## 2 Métodos particionados

Consideremos o problema diferencial

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = u_{xx} + u_{yy} - 100u^2 & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ u = 0 & \text{em } \partial\Omega \times [0, T] \\ u = u_0 & \text{em } \Omega \times \{0\} \end{cases} \quad (2.1)$$

em que  $\Omega = (0, 1)^2$ .

O problema de difusão-reacção (2.1) apresenta um termo reactivo "stiff" e portanto na sua resolução numérica deve ser utilizado um método implícito. Assim, uma discretização possível para este problema obtém-se aproximando as derivadas espaciais com diferenças centradas de segunda ordem e tratando o termo reactivo de modo usual.

Sejam  $N$  e  $M$  inteiros positivos e  $\Delta x := 1/N$  e  $\Delta y := 1/M$ . Consideremos a malha

$$\Delta = \{(x_i, y_j), x_i = i\Delta x, y_j = j\Delta y, i = 0, 1, \dots, N, j = 1, 2, \dots, M\}$$

Seja  $h > 0$  tal que  $Kh = T$ , para algum  $K$  inteiro positivo e consideremos  $t_n = nh$ ,  $n = 0, 1, \dots, K$ . Uma discretização possível para aproximar a solução de (2.1) é

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{h} = \frac{U_{i+1,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{U_{i,j+1}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} + f(U_{i,j}^{n+1}), \quad (2.2)$$

para  $i = 1, \dots, N - 1$  e  $j = 1, \dots, M - 1$ .

Se  $U^n$  for o vector com componentes

$$[U_{1,1}^n, U_{2,1}^n, \dots, U_{N-1,1}^n, U_{1,2}^n, U_{2,2}^n, \dots, U_{N-1,2}^n, \dots, U_{1,M-1}^n, \dots, U_{N-1,M-1}^n]^T \quad (2.3)$$

então o sistema (2.2) pode reescrever-se na forma

$$(I - hA)U^{n+1} = U^n + hF(U^{n+1})$$

onde  $F(U^{n+1})$  é um vector de componentes  $f(u_{i,j}^{n+1})$  (ordenadas como em (2.3)) e  $A$  é uma matriz tridiagonal por blocos da forma

$$\begin{bmatrix} B & \nu I & & & \\ \nu I & B & \nu I & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \nu I & B & \nu I \\ & & & & \nu I & B \end{bmatrix}$$

onde  $I$  representa a matriz identidade  $I_{N-1, N-1}$  e  $B$  é a matriz tridiagonal

$$\begin{bmatrix} -2(\nu + \mu) & & \mu & & & & \\ & \mu & -2(\nu + \mu) & \mu & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \mu & -2(\nu + \mu) & \mu & \\ & & & & \mu & -2(\nu + \mu) & \end{bmatrix}$$

com  $\mu = \frac{1}{\Delta x^2}$  e  $\nu = \frac{1}{\Delta y^2}$ .

Assim, a determinação de  $U^{n+1}$  envolve a resolução de um sistema de  $(N - 1) \times (M - 1)$  equações não lineares, o que computacionalmente não é muito apelativo se considerarmos uma malha densa (com um número elevado de nodos).

Uma forma de contornar o esforço computacional referido é fazer particionamento nas componentes da equação, isto é, aproximar cada uma das

componentes em separado e emparelhar de forma conveniente as soluções numéricas respeitantes às várias componentes. Esta abordagem é particularmente apelativa pois permite simplificar substancialmente a resolução do problema. O modo de proceder anterior é característico dos Métodos das Direcções Alternadas - MDA - que surgiram naturalmente da tentativa de reduzir o esforço computacional na resolução dum problema envolvendo EDPs com um método numérico clássico (por exemplo do tipo considerado).

Os primeiros MDA surgiram nos anos 50 e 70 e foram introduzidos por Peaceman e Rachford [RP55] e Rachford e Douglas [RD56]. Estes métodos pertencem a uma classe que designamos por Métodos Particionados - MP - que são o objecto de estudo deste capítulo. Nos anos 50, surgiram ainda outro tipo de métodos particionados: os métodos localmente unidimensionais - MLU. Alguns exemplos de MLU podem ser encontrados em [Mar90]. A utilização da ideia subjacente aos métodos MDA e MLU - redução do esforço computacional por partição em problemas unidimensionais - levou alguns autores a efectuar partições do problema inicial em subproblemas através da partição da equação diferencial. Esta partição tem em atenção, como é óbvio, as propriedades específicas de cada termo. Deste modo, o problema diferencial inicial é substituído por uma sequência de problemas diferenciais interligados por condições iniciais adequadas. Para cada subproblema é considerado um método numérico estando a escolha deste dependente das propriedades específicas da equação em questão. Assim, obtemos uma sequência de métodos numéricos que, tal como a sequência de subproblemas, estão ligados por condições iniciais adequadas. O método numérico obtido deste modo pertence também à classe dos métodos particionados.

Começamos por apresentar duas formas de construir métodos particionados na primeira secção. Na segunda secção analisamos o erro induzido pelo particionamento associado aos MP. Por último, na terceira secção, as propriedades de convergência e estabilidade são analisadas para uma família de métodos.

## 2.1 Os métodos particionados

Seja  $\Omega$  um domínio de  $\mathbb{R}^N$  de fronteira  $\partial\Omega$ . Consideremos o problema de condições inicial e de fronteira

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = F_1(u, x) + F_2(u, x) + F_3(u, x) & , x \in \Omega, t \in (0, T) \\ u(x, t) = 0 & , x \in \partial\Omega, t \in [0, T] \\ u(x, 0) = u_0(x) & , x \in \bar{\Omega} \end{cases} \quad (2.4)$$

em que  $F_1, F_2$  e  $F_3$  são operadores que verificam

$$\sum_{i=1}^3 F_i(u, x) = \nabla(\alpha u) + \nabla \cdot (\beta \nabla u) + f(u, x). \quad (2.5)$$

Supomos que  $\alpha$  e  $\beta$  são funções suficientemente regulares e  $f \in C^1(\mathbb{R})$ .

Em  $[0, T]$  consideremos a partição  $t_j = jh$ ,  $j = 0, 1, \dots, M$ ,  $Mh = T$  e seja  $[t_n, t_{n+1}]$  um intervalo arbitrário. Consideremos o problema (2.4) em  $[t_n, t_{n+1}]$  substituído, por exemplo, pela sequência de problemas

$$\begin{cases} \frac{\partial v^1}{\partial t} = \nabla(\alpha v^1), x \in \Omega, t \in (t_n, t_{n+1}) \\ v^1(x, t) = 0, x \in \partial\Omega, t \in [t_n, t_{n+1}] \\ v^1(t_n) = u(t_n), x \in \bar{\Omega}, \end{cases} \quad (2.6)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial v^2}{\partial t} = \nabla \cdot (\beta \nabla v^2), x \in \Omega, t \in (t_n, t_{n+1}) \\ v^2(x, t) = 0, x \in \partial\Omega, t \in [t_n, t_{n+1}] \\ v^2(t_n) = v^1(t_{n+1}), x \in \bar{\Omega}, \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial v^3}{\partial t} = f(v^3, x), x \in \Omega, t \in (t_n, t_{n+1}) \\ v^3(x, t) = 0, x \in \partial\Omega, t \in [t_n, t_{n+1}] \\ v^3(t_n) = v^2(t_{n+1}), x \in \bar{\Omega}. \end{cases} \quad (2.8)$$

A solução  $v^3(t_{n+1})$  obtida pela resolução dos problemas (2.6)-(2.8) é uma aproximação para  $u(t_{n+1})$ .

Se denotarmos por  $S_{i,h}$  o operador tal que  $S_{i,h}(v^i(t_n)) = v^i(t_{n+1})$  então

$$u(t_{n+1}) \approx S_{3,h} \circ S_{2,h} \circ S_{1,h}(u(t_n)). \quad (2.9)$$

Um método particionado é obtido considerando um método numérico para cada um dos problemas anteriores ((2.6)-(2.8)).

Dado o problema (2.4) existem várias formas de construir métodos particionados, das quais podemos destacar duas: fazer particionamento nas componentes da equação com derivadas parciais e obter problemas diferenciais do tipo do anterior ou efectuar uma discretização das derivadas relativamente ao espaço seguida de uma partição do sistema diferencial ordinário obtido.

Consideremos novamente (2.4) mas com  $\Omega \subset \mathbb{R}$ . Em  $\Omega$  consideremos uma malha  $\{x_i = i\Delta x, i = 0, 1, \dots, N\}$ . Tomando  $x = x_i$  na equação diferencial e aproximando as derivadas parciais  $\frac{\partial u}{\partial x}$  e  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  utilizando operadores de diferenças, obtemos um sistema diferencial ordinário para a determinação de  $U(t) = (U_1(t), \dots, U_N(t))^T$  que pode ser representado por

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt} = F_{1,\Delta x}(U) + F_{2,\Delta x}(U) + F_{3,\Delta x}(U), \text{ em } (0, T] \\ U(0) = U^0 \end{cases}$$

onde  $F_{i,\Delta x}(U)$  é uma discretização do vector de componentes  $F_i(u)$  e  $U^0 = [u(x_i, 0)]^T = \bar{u}(0)$ .

Sejam  $V^i, i = 1, 2, 3$  as soluções dos seguintes problemas diferenciais

$$\begin{cases} \frac{dV^1}{dt} = F_{1,\Delta x}(V^1), t \in [t_n, t_{n+1}] \\ V^1(t_n) = U^n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{dV^2}{dt} = F_{2,\Delta x}(V^2), t \in [t_n, t_{n+1}] \\ V^2(t_n) = V^1(t_{n+1}), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{dV^3}{dt} = F_{3,\Delta x}(V^3), & t \in [t_n, t_{n+1}] \\ V^3(t_n) = V^2(t_{n+1}). \end{cases}$$

Utilizando um método numérico para cada um dos problemas diferenciais ordinários anteriores obtemos um método numérico particionado. A título ilustrativo, consideremos o método de Euler explícito em cada um dos subproblemas. Obtemos então o método particionado

$$\begin{cases} \tilde{V}^1 = \tilde{V}^0 + hF_{1,\Delta x}(\tilde{V}^0) & , \tilde{V}^0 = U^n \\ \tilde{V}^2 = \tilde{V}^1 + hF_{2,\Delta x}(\tilde{V}^1) & , \tilde{V}^2 = \tilde{V}^1 \\ \tilde{V}^3 = \tilde{V}^2 + hF_{3,\Delta x}(\tilde{V}^2) & , \tilde{V}^3 = \tilde{V}^2, \end{cases} \quad (2.10)$$

em que  $U(t_{n+1}) \approx \tilde{V}^3$ . Logo  $u(x_i, t_{n+1}) \approx U_i(t_{n+1}) \approx \tilde{V}_i^3$ .

Na literatura têm surgido vários tipos de partições sendo a partição introduzida por Strang em [Str68] uma das mais referidas. Strang particionou o problema inicial em vários problemas integrando cada um em  $[t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$ . Em seguida, em  $[t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}]$ , fez a mesma integração mas por ordem inversa.

Apresentamos seguidamente uma partição de Strang possível

$$\begin{cases} v^0 = u(t_n) \\ v_i^i = F_i(v^i), & v^i(t_n) = v^{i-1}(t_{n+\frac{1}{2}}), \quad i = 1, 2, 3 \\ v_i^{3+i} = F_{3-i+1}(v^{3+i}), & v^{3+i}(t_{n+\frac{1}{2}}) = v^{3+i-1}(t_{n+1}), \quad i = 1, 2, 3 \\ \tilde{u}(t_{n+1}) = v^6(t_{n+1}) \end{cases} \quad (2.11)$$

que ilustramos na figura 2.1. Com a notação anteriormente introduzida,

$$u(t_{n+1}) \approx \tilde{u}(t_{n+1}) = S_{1, \frac{h}{2}} \circ S_{2, \frac{h}{2}} \circ S_{3, \frac{h}{2}} \circ S_{3, \frac{h}{2}} \circ S_{2, \frac{h}{2}} \circ S_{1, \frac{h}{2}}(u(t_n)). \quad (2.12)$$

Considerando o particionamento de Strang e o método de Euler explícito obtemos o seguinte método particionado

$$\begin{cases} V^0 = U^n \\ V^i = V^{i-1} + \frac{h}{2}F_{i,\Delta x}(V^{i-1}), & i = 1, 2, 3 \\ V^{3+i} = V^{3+i-1} + \frac{h}{2}F_{3-i+1,\Delta x}(V^{3+i-1}), & i = 1, 2, 3 \\ U^{n+1} = V^6, \end{cases} \quad (2.13)$$

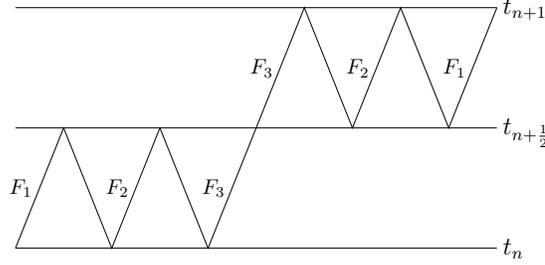


Figura 2.1: Esquema do método particionado

onde  $F_{i,\Delta x}$  é um operador tal que

$$F_{i,\Delta x}([u(x_j, t_n)]_j) \approx [F_i(u)(x_j, t_n)]_j \quad (2.14)$$

e  $\tilde{u}^n$  é a restrição de  $u(t_n)$  aos pontos da malha considerada.

Se  $\tilde{S}_{i,h} = I + hF_{i,\Delta x}$  então,

$$[u(x_j, t_{n+1})]_j \approx U^{n+1} = \tilde{S}_{1,\frac{h}{2}} \circ \tilde{S}_{2,\frac{h}{2}} \circ \tilde{S}_{3,\frac{h}{2}} \circ \tilde{S}_{3,\frac{h}{2}} \circ \tilde{S}_{2,\frac{h}{2}} \circ \tilde{S}_{1,\frac{h}{2}} (U^n). \quad (2.15)$$

**Exemplo 7.** Consideremos o problema diferencial (2.4) com  $\Omega = (0, 1)$ ,  $T = 0.1$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 2$  e  $f(u) = -ku$ . Fazendo  $F_{3,\Delta x} = 0$ ,  $F_{2,\Delta x} = -kI$  e  $F_{1,\Delta x} = 2D_2$  em (2.13) obtemos o método particionado

$$\begin{cases} V^0 = U^n \\ V^1 = V^0 + hD_2V^0 \\ V^2 = (1 - 5h)V^1 \\ V^3 = \frac{1}{1+5h}V^2 \\ V^4 = (I - hD_2)^{-1}V^3 \\ U^{n+1} = V^4 \end{cases} \quad (2.16)$$

Por outro lado, fazendo as mesmas substituições em (2.10) vem

$$\begin{cases} V^0 = U^n \\ V^1 = V^0 + 2hD_2V^0 \\ V^2 = (1 - 10h)V^1 \\ U^{n+1} = V^2 \end{cases} \quad (2.17)$$

Apresentamos nas figuras 2.2 e 2.3 as soluções numéricas associadas aos métodos (2.17) e (2.16), respectivamente, para a condição inicial

$$u_0(x) = x(x - 1)$$

e para  $h = 0.005$  e  $\Delta x = 0.1$ .

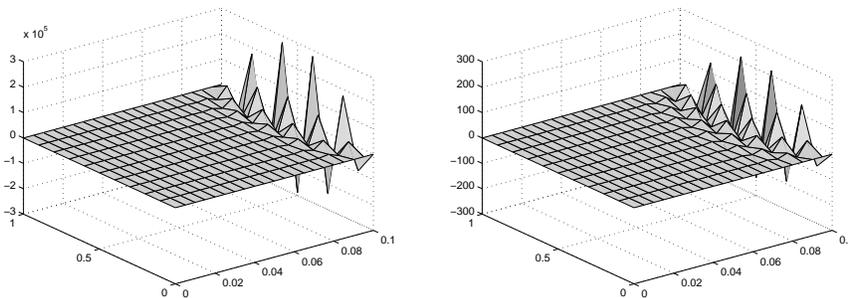


Figura 2.2: Soluções obtidas para  $k = 0$  e  $k = 60$ , respectivamente.

## 2.2 O erro de particionamento

Seja  $u(t_{n+1})$  a solução do problema diferencial (2.4) e  $v^{n+1}$  a solução obtida pelo MP do tipo do método numérico anterior. O erro da aproximação obtido é

$$e^{n+1} = u(t_{n+1}) - v^{n+1}.$$

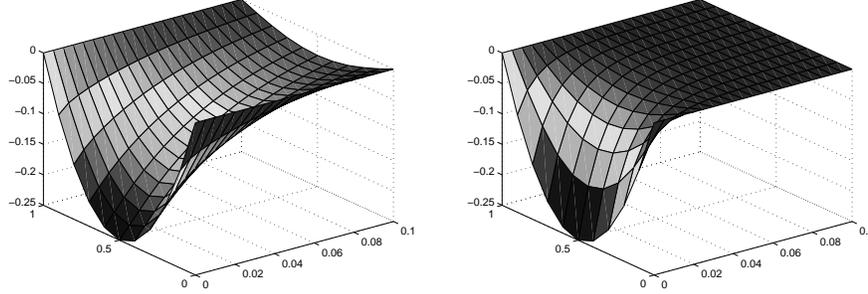


Figura 2.3: Soluções obtidas para  $k = 0$  e  $k = 60$ , respectivamente.

Seja  $v(t_{n+1})$  a solução da seqüência de problemas do tipo (2.11). Então

$$e^{n+1} = u(t_{n+1}) - v(t_{n+1}) + v(t_{n+1}) - v^{n+1}.$$

A

$$E_P^{n+1} = u(t_{n+1}) - v(t_{n+1})$$

chamamos erro de particionamento em  $t_{n+1}$  e, atendendo à sua forma, é manifesto que é uma contribuição significativa para o erro  $e^{n+1}$ . Nesta secção pretendemos estudar o erro de particionamento  $E_P^{n+1}$ .

Uma estimativa para o erro de particionamento é obtida seguidamente, em alguns casos, utilizando o desenvolvimento em Taylor. Consideremos o problema (2.4) com  $\Omega \subset \mathbb{R}$ ,  $F_3(u) = 0$  e o particionamento

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^1}{\partial t} &= F_1(v^1, x), \quad t \in (t_n, t_{n+1}), \quad v^1(t_n) = u(t_n) \\ \frac{\partial v^2}{\partial t} &= F_2(v^2, x), \quad t \in (t_n, t_{n+1}), \quad v^2(t_n) = v^1(t_{n+1}). \end{aligned} \quad (2.18)$$

**Proposição 2.2.1.** *No contexto anterior,*

1. se  $F_1 = (\alpha u)_x + (\beta u_x)_x$  e  $F_2 = f(u, x)$ , então

$$E_P^{n+1} = \frac{h^2}{2} ((f_u F_1)(u, x) - F_1(f, x)) + \mathcal{O}(h^3); \quad (2.19)$$

2. se  $F_2 = (\alpha u)_x + (\beta u_x)_x$  e  $F_1 = f(u, x)$ , então

$$E_P^{n+1} = -\frac{h^2}{2} ((f_u F_2)(u, x) - F_2(f, x)) + \mathcal{O}(h^3); \quad (2.20)$$

3. se  $F_1 + F_2 = (\alpha u)_x + (\beta u_x)_x$ , então

$$E_P^{n+1} = \frac{h^2}{2} (F_1(F_2(u, x), x) - F_2(F_1(u, x), x)) + \mathcal{O}(h^3).$$

*Demonstração.* Suponhamos satisfeitas as hipóteses do ponto 1. e demonstremos que o erro de particionamento é dado pela expressão indicada.

Para  $v^2(t_{n+1})$  vale a seguinte representação

$$v^2(t_{n+1}) = \left[ v + hf(v, x) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial f}{\partial u}(v, x) f(v, x) + \mathcal{O}(h^3) \right]_{v=v^2(t_n)}$$

e, atendendo a que  $v^2(t_n) = v^1(t_{n+1})$ , obtemos

$$v^2(t_{n+1}) = \left[ v + hf(v, x) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial f}{\partial u}(v, x) f(v, x) + \mathcal{O}(h^3) \right]_{v=v^1(t_{n+1})}. \quad (2.21)$$

Por outro lado, para  $v = v^1(t_{n+1})$ , tem-se

$$v^1(t_{n+1}) = \left[ w + hF_1(w, x) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} (F_1(v^1, x)) \right]_{w=v^1(t_n)}. \quad (2.22)$$

Mas, atendendo à definição de  $F_1$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} (F_1(v^1, x)) = F_1(v_t^1, x),$$

e portanto (2.22) toma a forma equivalente

$$v^1(t_{n+1}) = \left[ w + hF_1(w, x) + \frac{h^2}{2} F_1(v_t^1, x) \right]_{w=v^1(t_n)}. \quad (2.23)$$

De modo análogo, tem-se

$$f(v^1(t_{n+1}), x) = [f(v, x) + hf_u(v, x)F_1(v, x) + \mathcal{O}(h^2)]_{v=v^1(x, t_n)} \quad (2.24)$$

e

$$(f_u f)(v^1(t_{n+1}), x) = (f_u f)(v^1(t_n), x) + \mathcal{O}(h). \quad (2.25)$$

Conjugando (2.21), (2.23), (2.24) e (2.25) tem-se

$$\begin{aligned} v^2(t_{n+1}) &= v + h(F_1 + f)(v, x) + \\ &+ \frac{h^2}{2} [(f_u f + 2f_u F_1)(v, x) + F_1(F_1(v, x), x)] + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Finalmente, atendendo a que a solução de (2.4) verifica

$$\begin{aligned} u(t_{n+1}) &= u + h(F_1 + f)(u, x) + \frac{h^2}{2} (F_1(F_1(u, x), x)) + \\ &+ \frac{h^2}{2} (F_1(f, x) + (f_u F_1 + f_u f)(u, x)) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \Bigg]_{u=u(x, t_n)}$$

de (2.26), concluimos o pretendido.

**q.e.d.**

Nas condições da Proposição 2.2.1, o erro de particionamento associado é de primeira ordem. No entanto, em certos casos, é possível estabelecer que o erro anterior é de segunda ordem.

**Corolário 2.2.2.** *Seja  $E_P^{n+1}$  o erro de particionamento associado a (2.18).*

1. *Se  $F_1 + F_2 = (\alpha u)_x + f(u, x)$  e  $\alpha$  e  $f$  são independentes de  $x$ , então  $E_P^{n+1} = \mathcal{O}(h^2)$ .*
2. *Se  $F_1 + F_2 = (\beta u_x)_x + f(u, x)$  e  $f$  é linear em  $u$  e independente de  $x$ , então  $E_P^{n+1} = \mathcal{O}(h^2)$ .*

*Demonstração.*

1. Atendendo a (2.19) e (2.20), o resultado fica provado se, com  $F_1(u, x) = \alpha u_x$  e  $F_2(u, x) = f(u)$ , provármos que

$$((f_u F_1)(u, x) - F_1(f(u, x), x))_{u=u(x, t_n)} = 0.$$

Ora,

$$\begin{aligned}
 (f_u F_1)(u, x) - F_1(f(u, x), x) &= f'(u)(\alpha u_x) - \alpha(f(u))' \\
 &= \alpha f'(u)u_x - \alpha f'(u)u_x \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

2. A demonstração segue os passos da anterior.

**q.e.d.**

Formas alternativas de obter expressões para o erro de particionamento podem ser encontradas em [LV99] e em [AFdO<sup>+</sup>04].

### 2.3 Estabilidade e convergência

O objectivo desta secção é o estudo das propriedades de estabilidade de métodos particionados e do erro  $u(t_{n+1}) - v^{n+1}$  em que  $u(t_{n+1})$  é a solução de (2.4) e  $v^{n+1}$  é a solução obtida por um método numérico do tipo MP. O estudo das propriedades anteriores depende substancialmente do tipo de método que estamos a considerar (implícito/explicito) e do tipo de problema (linear/não linear).

Com o objectivo de exemplificar o estudo das propriedades mencionadas, consideremos uma família de métodos introduzida por Hundsdorfer em [Hun98b]. Os procedimentos utilizados podem facilmente ser adaptados a outros métodos particionados.

#### Discretização

Consideremos o particionamento (2.11), com  $F_i$ ,  $i = 1, \dots, s$ ,  $s \in \{1, 2, 3\}$  lineares. Os MP apresentados por Hundsdorfer são obtidos aproximando as primeiras três etapas de (2.11) com o método de Euler explícito e as três últimas com o método de Euler implícito. As derivadas parciais presentes em

$F_i(u)$  são discretizadas de modo a ser válida a seguinte igualdade

$$F_j(u)(x_i, t_n) = [F_{j,\Delta x}([u(x_i, t_n)])]_i + \mathcal{O}(\Delta x^{q_j}).$$

No contexto anterior, o método pode escrever-se na forma

$$\begin{cases} V^0 = U^n \\ V^i = V^{i-1} + \frac{h}{2} F_{i,\Delta x}(V^{i-1}), \quad i = 1, 2, \dots, s \\ V^{s+i} = V^{s+i-1} + \frac{h}{2} F_{s-i+1,\Delta x}(V^{s+i}), \quad i = 1, 2, \dots, s \\ U^{n+1} = V^{2s}. \end{cases} \quad (2.27)$$

Notemos que o método introduzido é, de certa forma, uma generalização do método dos trapézios, pois, no caso de existir apenas uma componente, o método anterior reduz-se ao método referido. Atendendo a este facto, o método anterior é chamado Método Particionado Trapezoidal. O estudo que apresentamos pode ser facilmente generalizado para  $s \in \mathbb{N}$ .

Consideramos seguidamente o estudo do caso linear. Na hipótese anterior,  $F_{i,\Delta x}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , são representados por matrizes e substituindo  $V^{i-1}$  na expressão de  $V^i$ , para  $i = 1, \dots, 2s$ , obtemos facilmente

$$U^{n+1} = Q_1^{-1} Q_2^{-1} \dots Q_s^{-1} P_s \dots P_2 P_1 U^n, \quad (2.28)$$

onde

$$Q_i = I - \frac{h}{2} F_{i,\Delta x} \quad \text{e} \quad P_i = I + \frac{h}{2} F_{i,\Delta x},$$

para  $i = 1, \dots, s$ .

O MP (2.27) é equivalente a

$$\begin{cases} U^{n+1} = Q_1^{-1} Q_2^{-1} \dots Q_s^{-1} P_s \dots P_2 P_1 U^n, \quad n = 0, 1, \dots \\ U^0 = \bar{u}(0). \end{cases} \quad (2.29)$$

### Estabilidade e estabilidade interna

Estudemos a estabilidade do método (2.27). Consideremos perturbações  $\rho^1, \rho^2, \dots, \rho^{2s}$  nas etapas de (2.27) e sejam  $\tilde{V}^1, \dots, \tilde{V}^{2s}$  as soluções correspon-

dentos

$$\begin{cases} \tilde{V}^0 = \tilde{U}^n \\ \tilde{V}^i = \tilde{V}^{i-1} + \frac{h}{2} F_{i,\Delta x} \tilde{V}^{i-1} + \rho^i, & i = 1, 2, \dots, s \\ \tilde{V}^{s+i} = \tilde{V}^{s+i-1} + \frac{h}{2} F_{s+1-i,\Delta x} \tilde{V}^{s+i-1} + \rho^{s+i}, & i = 1, 2, \dots, s \\ \tilde{U}^{n+1} = \tilde{V}^{2s}. \end{cases} \quad (2.30)$$

Pretendemos estimar  $e^n = \tilde{U}^n - U^n$ . Subtraindo  $\tilde{V}^i$  a  $V^i$  obtemos facilmente

$$e^{n+1} = Re^n + d^n, \quad (2.31)$$

onde

$$R = Q_1^{-1} Q_2^{-1} \dots Q_s^{-1} P_s \dots P_2 P_1$$

e

$$\begin{aligned} d^n &= Q_1^{-1} \dots Q_s^{-1} (P_s \dots P_2 \rho^1 + P_s \dots P_3 \rho^2 + \dots + P_s \rho^{s-1} + \rho^s) + \\ &+ Q_1^{-1} \dots Q_s^{-1} \rho^{s+1} + Q_1^{-1} \dots Q_{s-1}^{-1} \rho^{s+2} + \dots Q_1^{-1} \rho^{2s}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Notemos que se, para alguma norma, se tiver  $\|R\| \leq 1$  então o método é estável no sentido usual.

De facto, com uma escolha conveniente de normas nos espaços  $X_h = Y_h = \mathbb{R}^N$  associados ao problema provemos a estabilidade da discretização. Começemos por notar que o problema se pode escrever na forma

$$\phi_h(U_h) = 0 \quad (2.33)$$

onde, se  $F_h = \phi_h(U_h)$ , então

$$\begin{cases} F^0 = U^0 - \bar{u}(0) \\ F^n = \frac{U^n - RU^{n-1}}{h}, n = 1, 2, \dots, N. \end{cases} \quad (2.34)$$

Sejam  $U_h$  e  $V_h$  dois elementos de  $X_h$  cujas componentes satisfazem (2.29) e  $F_h$  e  $G_h$  definidos por

$$F^{n+1} = \frac{U^{n+1} - RU^n}{h}, \quad G^{n+1} = \frac{V^{n+1} - RV^n}{h}.$$

Assim, as componentes de  $e_h$  verificam

$$e^{n+1} = h(F^{n+1} - G^{n+1}) + Re^n$$

donde concluimos

$$e^{n+1} = h [F^n - G^n + R(F^{n-1} - G^{n-1}) + \dots + R^{N-1}(F^1 - G^1)] + R^N(F^0 - G^0)$$

e portanto

$$\|e^{n+1}\|_\infty \leq h \sum_{i=1}^n \|F^i - G^i\|_\infty + \|F^0 - G^0\|_\infty.$$

Considerando as normas do Exemplo 6 obtemos finalmente

$$\|U_h - V_h\|_{X_h} \leq \|\phi_h(U_h) - \phi_h(V_h)\|_{Y_h},$$

isto é, a discretização (2.27) é estável-N.

No entanto, tal não é suficiente para garantir que na prática um método particionado seja "estável", pelo menos, no sentido referido no capítulo 1.

**Exemplo 8.** Consideremos o problema (2.11) particionado do modo seguinte

$$\begin{cases} V^0 = U^n \\ V^i = V^{i-1} + \frac{h}{2} F_{i,\Delta x} V^i, i = 1, \dots, s \\ V^{s+i} = V^{s+i-1} + \frac{h}{2} F_{s-i+1,\Delta x} V^{s+i-1}, i = 1, \dots, s \\ U^{n+1} = V^{2s} \end{cases} \quad (2.35)$$

usualmente chamado *particionamento do ponto médio*.

Procedendo como anteriormente aquando do estudo do *particionamento trapezoidal*, estabelecemos

$$U^{n+1} = S U^n \quad (2.36)$$

onde

$$S = Q_1^{-1} Q_2^{-1} \dots Q_s^{-1} P_s \dots P_2 P_1. \quad (2.37)$$

Notemos que se os operadores  $F_{i,\Delta x}$  comutarem, então as matrizes  $S$ , associada ao método anterior, e  $R$ , associada ao método (2.29), são iguais. No entanto, os métodos apresentam comportamentos substancialmente diferentes.

De facto, consideremos o problema de difusão-reacção

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 5u & , \text{ em } (0, 1) \times (0, 0.5) \\ u(0, t) = u(1, t) = 0 & , t \in [0, 0.5] \\ u(x, 0) = x(x - 1) & , x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (2.38)$$

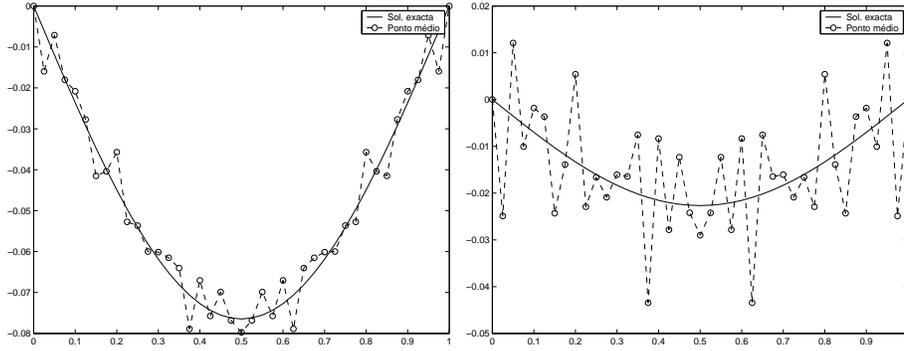


Figura 2.4: Soluções nos instantes  $t = 0.25$  e  $t = 0.5$ , respectivamente, com  $\Delta x = h = 1/40$ .

Apresentamos de seguida os erros das aproximações obtidas pelos métodos (2.29) e (2.35) na norma  $L_2$  discreta associada,  $\|x\|_{2,\Delta x} = (\Delta x \sum x^T x)^{\frac{1}{2}}$ , para  $t = 0.5$  com  $\Delta x = 1/40$ .

$h$	0.1	0.05	0.025	0.0125
Trapezoidal	$1.43 \times 10^{-2}$	$2.54 \times 10^{-3}$	$5.11 \times 10^{-4}$	$1.31 \times 10^{-4}$
Ponto médio	$2.23 \times 10^{-2}$	$1.59 \times 10^{-2}$	$1.11 \times 10^{-2}$	$2.81 \times 10^{-3}$

Os erros anteriores foram considerados em função de uma solução de referência obtida com o método de diferenças finitas

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{h} = \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2} + 5U_j^n$$

com uma malha de espaçamentos  $h = 10^{-5}$  e  $\Delta x = 1/40$ .

Como ambos os métodos têm a mesma matriz associada, a diferença de comportamento só pode ter origem no erro residual associado a cada uma das etapas.

Analisemos seguidamente a influência de perturbações das etapas no resultado final.

Consideremos as perturbações internas  $\rho^1, \dots, \rho^{2s}$  e o método (2.35). Neste caso temos

$$\begin{aligned} d^n &= P_1 \dots P_s (Q_s^{-1} \dots Q_1^{-1} \rho^1 + Q_s^{-1} \dots Q_2^{-1} \rho^2 + \dots + Q_s^{-1}) + \\ &+ P_1 \dots P_{s-1} \rho^{s+1} + P_1 \dots P_{s-2} \rho^{s+2} \dots + P_1 \rho^{2s-1} + \rho^{2s}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Notemos que ao contrário do método (2.29) em que  $d^n$  é definido por (2.32), a norma dos operadores  $P_1 \dots P_i, i = 1, 2, \dots, s-1$ , associados às perturbações  $\rho^{s+1}, \dots, \rho^{2s-1}$  pode não ser limitada à medida que  $h$  e  $\Delta x$  tendem para zero. Nessa situação, são introduzidos erros em cada iteração que acabam por tornar o método instável.

Um modo de contornar a influência das perturbações internas é exigir que pequenas perturbações nas etapas do método originem pequenas perturbações em  $d^n$  e portanto na aproximação  $U^{n+1}$ .

Surge deste modo o conceito de estabilidade interna.

**Definição 2.3.1.** *O método (2.27) diz-se internamente estável se existirem constantes positivas  $C_1, C_2, \dots, C_{2s}$  não dependentes de  $h, \Delta x$  ou  $n$  tais que*

$$\|d^n\| \leq C_1 \|\rho^1\| + C_2 \|\rho^2\| + \dots + C_{2s} \|\rho^{2s}\|.$$

Apresentamos de seguida alguns resultados de estabilidade/estabilidade interna. Seja  $M$  a dimensão das matrizes  $F_{i,\Delta x}$ .

**Teorema 2.3.1.** *Consideremos a norma  $L_2$  discreta em  $\mathbb{R}^M$ . Se os operadores  $F_{i,\Delta x}, i = 1, 2, \dots, s$ , comutam e verificam*

$$x^T F_{i,\Delta x} x \leq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^M, \quad (2.40)$$

*então o método (2.27) é estável e internamente estável.*

*Demonstração.* Começemos por notar que a comutatividade das matrizes  $F_{i,\Delta x}$ ,  $i = 1, \dots, s$ , implica a comutatividade de  $P_i$  com  $Q_j^{-1}$  e portanto

$$R = Q_1^{-1} P_1 Q_2^{-1} P_2 \dots Q_s^{-1} P_s. \quad (2.41)$$

Por outro lado, notemos que para provar a estabilidade/estabilidade interna da discretização é suficiente estabelecer

$$\left\| (I - hF_{i,\Delta x})^{-1} \right\| \leq 1 \quad \text{e} \quad \left\| (I - hF_{i,\Delta x})^{-1} (I + hF_{i,\Delta x}) \right\| \leq 1$$

isto é,

$$\|Q_i^{-1}\| \leq 1 \quad \text{e} \quad \|Q_i^{-1} P_i\| \leq 1. \quad (2.42)$$

De facto, usando (2.41) e (2.42) vem facilmente

$$\|R\| \leq 1 \quad \text{e} \quad \|d^n\| \leq \|\rho^1\| + \|\rho^2\| + \dots + \|\rho^s\|$$

ou seja, o método é estável e internamente estável.

Provemos então (2.42). Começemos por provar que se  $F_{i,\Delta x}$  verifica (2.40), então, para  $h > 0$ , tem-se

$$\left\| (I - hF_{i,\Delta x})^{-1} x \right\| \leq \|x\| \quad (2.43)$$

Seja  $x \in \mathbb{R}^M$ . Com  $x$  na forma  $x = (I - hF_{i,\Delta x}) y$ , obtemos

$$\left\| (I - hF_{i,\Delta x})^{-1} x \right\| = \left\| (I - hF_{i,\Delta x})^{-1} (I - hF_{i,\Delta x}) y \right\| = \|y\|. \quad (2.44)$$

Assim, utilizando a representação anterior deduzimos sucessivamente

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \|x\|^2 &= x^T x \\ &= [(I - hF_{i,\Delta x}) y]^T [(I - hF_{i,\Delta x}) y] \\ &= y^T y - hy^T F_{i,\Delta x}^T y - hy^T F_{i,\Delta x} y + h^2 y^T F_{i,\Delta x}^T F_{i,\Delta x} y. \end{aligned} \quad (2.45)$$

em que, atendendo à condição (2.40), se tem

$$-hy^T F_{i,\Delta x}^T y \geq 0 \quad \text{e} \quad -hy^T F_{i,\Delta x} y \geq 0. \quad (2.46)$$

De (2.45), (2.46) e

$$y^T F_{i,\Delta x}^T F_{i,\Delta x} y = \frac{1}{\Delta x} \|F_{i,\Delta x} y\|^2 \geq 0. \quad (2.47)$$

vem

$$\frac{1}{\Delta x} \|x\|^2 \geq y^T y = \frac{1}{\Delta x} \|y\|^2. \quad (2.48)$$

Finalmente, de (2.44) e (2.48) concluímos (2.43).

A primeira desigualdade de (2.42) é agora consequência de (2.43) e da relação entre a norma  $L_2$  discreta e o raio espectral de uma matriz.

Para provar a segunda desigualdade de (2.42), procedemos de modo análogo. Consideremos  $x = (I - hF_{i,\Delta x}) y$ . Tem-se

$$\left\| (I - hF_{i,\Delta x})^{-1} (I + hF_{i,\Delta x}) x \right\| = \|(I + hF_{i,\Delta x}) y\|. \quad (2.49)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} x^T x &= y^T (I - hF_{i,\Delta x})^T (I - hF_{i,\Delta x}) y \\ &= y^T y - hy^T F_{i,\Delta x} - hy^T F_{i,\Delta x}^T y + h^2 y^T F_{i,\Delta x}^T F_{i,\Delta x} y, \end{aligned}$$

e, atendendo a que

$$-hy^T F_{i,\Delta x} \geq 0 \quad \text{e} \quad -\Delta t y^T F_{i,\Delta x}^T y \geq 0$$

vem

$$\frac{1}{\Delta x} x^T x \geq y^T y + hy^T F_{i,\Delta x} y + hy^T F_{i,\Delta x}^T y + h^2 y^T F_{i,\Delta x}^T F_{i,\Delta x} y$$

isto é,

$$\|(I + hF_{i,\Delta x}) y\| \leq \|x\|. \quad (2.50)$$

De (2.49) e (2.50) concluímos a segunda desigualdade de (2.42).

**q.e.d.**

O teorema anterior é frequentemente utilizado no estabelecimento da estabilidade e estabilidade interna de MP em que o particionamento do problema diferencial é efectuado por forma a substituir o problema inicial por subproblemas em que a variável espacial pertence a  $\mathbb{R}$ . No entanto, para problemas

unidimensionais e atendendo a que as matrizes  $F_{i,\Delta x}$  associadas às discretizações mais usuais de  $u_x$  (diferenças progressivas, regressivas e centradas) e  $u_{xx}$  (diferenças centradas) não comutam (caso em que  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes), não é de qualquer utilidade.

Sejam  $A_C^1$ ,  $A_C^2$  e  $A_C^3$  as matrizes associadas aos operadores de diferenças progressivas, regressivas e centradas para a componente convectiva, respectivamente, e  $A_D$  a matriz associada ao operador de diferenças centradas para a componente difusiva, a menos de uma constante que depende apenas dos parâmetros de espaçamento.

Se  $A_C^1, A_C^2, A_C^3, A_D \in \mathbb{R}^{N \times N}$ , sejam  $I_N$  a matriz identidade de ordem  $N$  e  $I_{+1}, I_{-1}$  matrizes de ordem  $N$  definidas por

$$I_{+1} = \begin{bmatrix} 0_{N-1} & I_{N-1} \\ 0 & 0_{N-1}^T \end{bmatrix}$$

$$I_{-1} = I_{+1}^T.$$

Então

$$A_C^1 = -I + I_{+1},$$

$$A_C^2 = I - I_{-1},$$

$$A_C^3 = I_{+1} - I_{-1},$$

$$A_D = -2I + I_{+1} + I_{-1}.$$

**Proposição 2.3.2.**  $A_C^i$  não comuta com  $A_D$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

*Demonstração.* Começemos por notar que qualquer uma das matrizes  $A_C^i$  se escreve na forma  $\Lambda = \alpha I + \beta I_{+1} + \gamma I_{-1}$ . Atendendo a que

$$\begin{aligned} [\Lambda, A_D] &= \Lambda A_D - A_D \Lambda \\ &= \beta I_{+1} I_{-1} + \gamma I_{-1} I_{+1} - (\gamma I_{+1} I_{-1} + \beta I_{-1} I_{+1}) \\ &= (\beta - \gamma) [I_{+1}, I_{-1}], \end{aligned}$$

concluimos que  $A_D$  comuta com  $\Lambda$  se e só se  $\beta = \gamma$  ou  $I_{+1}$  comuta com  $I_{-1}$ .

O resultado fica provado se provarmos que  $[I_{+1}, I_{-1}] \neq 0$  pois para qualquer  $A_C^i$  não se tem  $\beta = \gamma$ .

Notemos que

$$I_{+1}I_{-1} = \begin{bmatrix} I_{N-1} & 0_{N-1} \\ 0_{N-1}^T & 0 \end{bmatrix}$$

e

$$I_{-1}I_{+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & I_{N-1} \end{bmatrix}$$

e portanto  $[I_{+1}, I_{-1}] \neq 0$ . Logo, as matrizes  $A_C^i$ ,  $i = 1, 2, 3$  não comutam com  $A_D$ .

**q.e.d.**

Uma consequência imediata dos resultados anteriores é a necessidade de estabelecer condições suficientes para a estabilidade e estabilidade interna em que seja contornada a propriedade da permutabilidade das matrizes envolvidas. Neste contexto é válido o seguinte resultado.

**Proposição 2.3.3.** *Se as matrizes  $Q_i, P_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, s$  verificarem*

$$\|Q_i^{-1}\| \leq 1 \text{ e } \|Q_i^{-1}\| \|P_i\| \leq 1, \quad (2.51)$$

*então o método (2.27) é estável e internamente estável.*

*Demonstração.* Para estabelecer o resultado basta notar que (2.51) implica (2.42).

**q.e.d.**

### Erro local

Tendo estabelecido condições suficientes para a estabilidade do método (2.27), o estudo do erro de discretização local é suficiente provar a convergência de (2.27). Uma forma de obter expressões simples para o erro de discretização local é utilizar o problema perturbado (2.30) com uma escolha conveniente dos vectores  $\rho^i$ ,  $i = 1, 2, \dots, 2s$ .

Consideremos  $\tilde{U}^n = u(t_n)$ ,  $\bar{u}(t) = [u(x_i, t)]_i$  e

$$\begin{aligned}\rho^i &= -\frac{h}{2}F_{i,\Delta x}(\bar{u}(t_n)), \quad i = 1, 2, \dots, s \\ \rho^{s+1} &= \bar{u}(t_{n+1}) - \bar{u}(t_n) - \frac{h}{2}F_{s,\Delta x}(\bar{u}(t_{n+1})), \\ \rho^{s+i} &= -\frac{h}{2}F_{s+1-i,\Delta x}(\bar{u}(t_{n+1})), \quad i = 2, \dots, s\end{aligned}$$

e seja  $\varphi_j(t) = F_{j,\Delta x}(\bar{u}(t))$ . Para  $s = 3$ , obtemos a seguinte expressão para  $d^n$

$$\begin{aligned}d^n &= Q_1^{-1}Q_2^{-1}Q_3^{-1} \left[ -\frac{h}{2}P_3P_2\varphi_1(t_n) - \frac{h}{2}P_3\varphi_2(t_n) - \frac{h}{2}\varphi_3(t_n) + \bar{u}(t_{n+1}) - \right. \\ &\quad \left. - \bar{u}(t_n) - \frac{h}{2}\varphi_3(t_{n+1}) - \frac{h}{2}Q_3\varphi_2(t_{n+1}) - Q_3Q_2\frac{h}{2}\varphi_1(t_{n+1}) \right].\end{aligned}$$

Notemos que, atendendo à definição de  $\tilde{U}^n$  e  $\rho^i$ ,  $h^{-1}d^n$  é exactamente o erro local e  $e^n$  o erro global na etapa  $n$ .

Atendendo à igualdade

$$\bar{u}(t_{n+1}) - \bar{u}(t_n) = \frac{h}{2}(F_{\Delta x}(\bar{u}(t_n)) + F_{\Delta x}(\bar{u}(t_{n+1}))) + \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(h^3)$$

conclui-se a seguinte representação para  $d^n$

$$\begin{aligned}d^n &= Q_1^{-1}Q_2^{-1}Q_3^{-1} \left( \frac{h^3}{4}F_{3,\Delta x}F_{2,\Delta x}\varphi_1(t_{n+1/2}) + \frac{h^3}{4}(F_{3,\Delta x} + F_{2,\Delta x})\varphi_1'(t_{n+1/2}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{h^3}{4}F_{3,\Delta x}\varphi_2'(t_{n+1/2}) \right) + \mathcal{O}(h^3) + h\mathcal{O}(\Delta x^p).\end{aligned}$$

A expressão do erro de discretização local para  $s = 2$  obtém-se facilmente fazendo  $F_{3,\Delta x} = 0$ , tendo-se

$$d^n = Q_1^{-1}Q_2^{-1} \left( \frac{h^3}{4}F_{2,\Delta x}\varphi_1'(t_{n+1/2}) \right) + \mathcal{O}(h^3) + h\mathcal{O}(\Delta x^q) \quad (2.52)$$

Além disso, notemos que se os operadores  $F_{1,\Delta x}$  e  $F_{2,\Delta x}$  verificarem

$$F_{2,\Delta x}F_{1,\Delta x} = \mathcal{O}(1)$$

então  $d^n = \mathcal{O}(h^3) + h\mathcal{O}(\Delta x^p)$ , desde que  $\|Q_1^{-1}Q_2^{-1}\| \leq 1$  seja inferior a um.

O estudo da convergência dos MP, em particular, e dos Métodos de Diferenças Finitas, em geral, baseado na implicação

consistência + estabilidade  $\Rightarrow$  convergência

pode esconder as propriedades reais de convergência dos métodos. De facto, por exemplo, no contexto dos Métodos de Diferenças Finitas com malhas não uniformes, o facto do método ser inconsistente não implica que não tenhamos convergência. Hundsdorfer observou em [Hun92] que por vezes o erro global pode ter ordem superior ao erro local. Atendendo à observação anterior, apresentamos seguidamente uma abordagem alternativa para o estudo da convergência destes métodos.

### Convergência

Os resultados de convergência do método (2.27) que apresentamos de seguida têm por hipótese a sua estabilidade. A convergência é, como veremos, consequência de algumas estimativas para o erro local e do resultado seguinte.

**Lema 2.3.4.** *Suponhamos que existem  $\xi_n$  e  $\eta_n$  tais que*

$$d^n = (R - I)\xi_n + \eta_n. \quad (2.53)$$

*Se  $\xi_n$  e  $\eta_n$  verificarem*

$$\begin{aligned} \|\xi_n\| &\leq C'h^q, \\ \|\xi_n - \xi_{n-1}\| &\leq C'h^{q+1}, \\ \|\eta_n\| &\leq C'h^{q+1} + D'h\Delta x^p, \end{aligned} \quad (2.54)$$

*então existe  $C$  que depende apenas de  $C'$  e  $T$  tal que  $\|e^n\| \leq Ch^q + D'\Delta x^p$ .*

*Demonstração.* Expandindo o erro global  $e^n$  segundo a relação de recorrência (2.31), obtemos

$$e^n = d^{n-1} + Rd^{n-2} + \cdots + R^{n-1}d^0,$$

e atendendo a (2.53), vem ainda

$$e^n = \xi_{n-1} + R(\xi_{n-1} - \xi_{n-2}) + \cdots + R^{n-1}(\xi_1 - \xi_0) + R^n\xi_0 + \eta_{n-1} + R\eta_{n-2} + \cdots + R^{n-1}\eta_0.$$

Logo, de (2.54), segue-se facilmente

$$\begin{aligned}\|e^n\| &\leq 2C'h^q + C'(n-1)h^{q+1} + C'nh^{q+1} + D'nh\Delta x^p \\ &\leq 2C'h^q + 2C'nh^{q+1} + D'nh\Delta x^p.\end{aligned}$$

Finalmente

$$\|e^n\| \leq 2C'(1+T)h^q + D'\Delta x^p$$

pois  $hn \leq T$ .

**q.e.d.**

**Teorema 2.3.5.** *Sejam  $F_{\Delta x} = F_{1,\Delta x} + F_{2,\Delta x} + \dots + F_{s,\Delta x}$ ,  $s = 2$  e*

$$F_{\Delta x}^{-1}F_{2,\Delta x}\varphi_1^{(k)}(t) = \mathcal{O}(1)$$

para  $k = 1, 2$  e  $t \in [0, T]$ . Então  $\|e^n\| = \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$ .

*Demonstração.* Atendendo a que

$$R - I = hQ_1^{-1}Q_2^{-1}F_{\Delta x}$$

tem-se

$$(R - I)F_{\Delta x}^{-1} = hQ_1^{-1}Q_2^{-1}.$$

Conjugando a igualdade anterior com (2.52), obtemos

$$d^n = (R - I)F_{\Delta x}^{-1}F_{2,\Delta x}\frac{h^2}{4}\varphi_1'(t_{n+1/2}) + \mathcal{O}(h^3) + h\mathcal{O}(\Delta x^p) \quad (2.55)$$

Assim, com  $\xi_n = \frac{h^2}{4}F_{\Delta x}^{-1}F_{2,\Delta x}\varphi_1'(t_{n+1/2})$  e  $\eta_n = \mathcal{O}(h^3) + h\mathcal{O}(\Delta x^p)$  concluímos a estimativa.

**q.e.d.**

**Exemplo 9.** *Consideremos a equação de convecção-difusão*

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -\alpha \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & \text{em } (0, 10) \times (0, T) \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{em } [0, 10] \\ u(0, t) = u(1, t) = 0, & \text{em } [0, T] \end{cases}$$





## 3 Métodos implícitos-explicitos

Consideremos a equação de difusão-reacção

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 100u, & x \in (0, 1), t \in (0, 1) \\ u(0, t) = u(1, t), & t \in [0, 1] \\ u(x, 0) = x(x - 1), & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (3.1)$$

Atendendo a que a reacção é "stiff" na resolução numérica do problema (3.1) devemos considerar um método implícito. Se, por exemplo, se utilizarmos um MP podemos integrar numericamente de modo implícito apenas o sub-problema envolvendo a reacção. O método (3.2) é estabelecido a partir da observação anterior.

$$\begin{cases} V^0 = U^n \\ V^1 = (I + hD_2) V^0 \\ V^2 = V^1 - 100hV^2 \\ U^{n+1} = V^2 \end{cases} \quad (3.2)$$

Este método é reescrito na forma equivalente

$$(1 + 100h)U^{n+1} = (I + hD_2)U^n. \quad (3.3)$$

Uma outra forma de discretizar a componente reactiva em  $t_n$  é considerar essa componente metade de forma explícita e metade de forma implícita, isto é, considerar um método obtido discretizando a componente reactiva de modo

a ter informação de dois níveis:  $t_n$  e  $t_{n+1}$ . O método (3.4) é obtido segundo a última observação.

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{h} = D_2 U^n - 100 \frac{U^n + U^{n+1}}{2}. \quad (3.4)$$

Apresentamos de seguida os erros das aproximações obtidas pelos métodos anteriores relativamente à norma  $\|\cdot\|_\infty$  para  $t = 1$  e  $\Delta x = 0.1$ .

$h$	1/20	1/40	1/80
Método (3.2)	$4.11 \times 10^{-7}$	$3.36 \times 10^{-11}$	$3.44 \times 10^{-14}$
Método (3.4)	$2.59 \times 10^{-1}$	$3.37 \times 10^{-9}$	$1.879 \times 10^{-21}$

Os resultados obtidos revelam que o método (3.4) é uma boa alternativa ao método (3.2).

A partição da componente reactiva e a integração implícita e explícita desta componente motiva-nos para o estudo dum novo tipo de métodos, chamados Métodos Implícitos-Explícitos (MIE).

Consideremos uma equação de convecção-difusão-reacção escrita na forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F_1(u) + F_2(u).$$

Tipicamente as equações CDR têm componentes que podem ser integradas explicitamente e outras que devem ser integradas implicitamente. Por exemplo, se  $F_1$  for não linear e  $F_2$  for linear, como em (2.1), podemos pensar integrar  $F_1$  explicitamente e  $F_2$  implicitamente por facilidade de implementação e esforço computacional. Assim, as componentes a integrar implicitamente e explicitamente devem ser escolhidas de acordo com as características das diversas componentes presentes na equação diferencial. No nosso contexto, as componentes que geralmente introduzem "stiffness" no método numérico são a reacção e a difusão. Deste modo, estas componentes devem ser integradas implicitamente podendo a convecção ser integrada explicitamente.

No presente trabalho introduzimos uma classe de métodos MIE de diferenças finitas baseada nos métodos de passo múltiplo tão conhecidos das equações

diferenciais ordinárias. Em [ARW95] está feito um estudo bastante detalhado deste tipo de métodos para sistemas diferenciais ordinários obtidos pelo método das linhas para equações de convecção-difusão. Como veremos, a consistência dos métodos MIE é fácil de estabelecer sendo possível construir um método deste tipo de qualquer ordem. No entanto, o estudo da estabilidade dos métodos MIE é um pouco mais delicada do que o correspondente estudo dos MP em que a estabilidade é consequência dos métodos envolvidos no MP.

Assim, começamos por introduzir, na secção 3.1, a equação geral de um MIE de  $n$  etapas (isto é, envolvendo  $n$  níveis,  $t_{n+1}, t_n, \dots, t_{n-s+2}$ ), seguido do estudo do erro local associado. Na secção 3.3, analisamos a estabilidade de métodos de uma etapa e duas etapas para (2.4) no caso em que a reacção é linear e não linear (só para uma etapa) e o problema é unidimensional.

Observamos que a norma envolvida nos resultados de consistência, estabilidade e convergência estabelecidos neste capítulo é a norma  $\|\cdot\|_\infty$ . Além disso, consideraremos apenas (2.4) com  $\Omega = (0, 1)$ .

### 3.1 Métodos Implícitos-Explícitos

Consideremos novamente o problema diferencial (2.4). Sejam  $F_0$  e  $F_1$  operadores tais que  $F_0(u) + F_1(u) = (\alpha u)_x + (\beta u_x)_x + f(u)$ .

Um método implícito-explícito de diferenças finitas para a equação anterior consiste, por exemplo, num método que integra explicitamente  $F_0$  e implicitamente  $F_1$ , como na secção anterior.

Seja

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N+1} < x_N = 1$$

uma malha uniforme com parâmetro  $\Delta x$ ,  $h > 0$  e  $t_n = nh$ .

Associada à malha, suponhamos a existência de operadores  $F_{0,\Delta x}$  e  $F_{1,\Delta x}$  tais que

$$[F_j(u)(x_i, t_n)]_i = F_{i,\Delta x}([u(x_i, t_n)]_i) + \mathcal{O}(\Delta x^{p_j}) \quad (3.5)$$

para algum  $p_j$ ,  $j = 1, 2$ . Seja  $p = \min\{p_1, p_2\}$ .

Um método de passo múltiplo implícito-explicito com  $s$  etapas para (2.4) é um método da forma

$$U^{n+1} + \sum_{j=0}^{s-1} a_j U^{n-j} = h \sum_{j=0}^{s-1} b_j F_{0,\Delta x}(U^{n-j}) + h \sum_{j=-1}^{s-1} c_j F_{1,\Delta x}(U^{n-j}) \quad (3.6)$$

com  $c_{-1} \neq 0$  e onde a componente  $i$  do vector  $U^n$  é uma aproximação a  $u(x_i, t_n)$ .

Embora a designação de métodos MIE se aplique a uma classe mais vasta de método do que a aqui considerada, vamos adoptar essa designação para os métodos de passo múltiplo implícitos-explicitos que estudamos.

### 3.2 Algumas considerações sobre o erro local

Atendendo à forma simples do método (3.6), é fácil obter expressões para o erro local, desde que a solução de (2.4) seja suficientemente regular. Tendo em conta as propriedades dos operadores de convecção, reacção e difusão, consideramos

$$F_0(u) = (\alpha u)_x + \mu f(u) \quad \text{e} \quad F_1(u) = (\beta u_x)_x + (1 - \mu)f(u)$$

onde  $\mu$  é um parâmetro. Se a reacção for "stiff" então tomamos  $\mu = 0$ ; caso contrário,  $\mu \in (0, 1]$ .

Comecemos por estudar a ordem de consistência de (3.6).

**Proposição 3.2.1.** *Se*

$$\begin{aligned} 1 + \sum_{j=0}^{s-1} a_j &= 0 \\ 1 - \sum_{j=0}^{s-1} j a_j &= \sum_{j=0}^{s-1} b_j = \sum_{j=-1}^{s-1} c_j \\ \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^{s-1} \frac{j^2}{2} a_j &= - \sum_{j=1}^{s-1} j b_j = c_{-1} - \sum_{j=1}^{s-1} j c_j \\ &\vdots \\ \frac{1}{p!} + \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(-j)^p}{p!} a_j &= \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(-j)^{p-1}}{(p-1)!} b_j = \frac{c_{-1}}{(p-1)!} + \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(-j)^{p-1}}{(p-1)!} c_j \end{aligned} \quad (3.7)$$

então,  $\|l^h\| = \mathcal{O}(h^q) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$ .

*Demonstração.* Fixemos  $i \in \{1, 2, \dots, N-1\}$ . Se  $U_i^n$  representa a  $i$ -ésima componente de  $U^n$ , então (3.6) pode escrever-se na forma equivalente

$$U_i^{n+1} + \sum_{j=0}^{s-1} a_j U_i^{n-j} = h \sum_{j=0}^{s-1} b_j [F_{0,\Delta x}(U^{n-j})]_i + h \sum_{j=-1}^{s-1} c_j [F_{1,\Delta x}(U^{n-j})]_i.$$

Substituindo  $U_i^n$  por  $u_i^n = u(x_i, t_n)$ , em que  $u$  é a solução exacta do problema diferencial, e atendendo a que

$$[F_{j,\Delta x}(u_i^n)]_i = F_j(u)(x_i, t_n) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$$

para  $j = 1, 2$ , vem

$$u_i^{n+1} + \sum_{j=0}^{s-1} a_j u_i^{n-j} = h \sum_{j=0}^{s-1} b_j F_0(u)(x_i, t_{n-j}) + h \sum_{j=-1}^{s-1} c_j F_1(u)(x_i, t_{n-j}). \quad (3.8)$$

Desenvolvendo  $u_i^{n-j}$ ,  $F_0(u)(x_i, t_{n-j})$  e  $F_1(u)(x_i, t_{n-j})$  em torno de  $t_n$  até à ordem  $p$  obtemos

$$u_i^{n-j} = \sum_{k=0}^p \frac{(-jh)^k}{k!} \frac{\partial^k u}{\partial t^k}(x_i, t_n) + \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad (3.9)$$

$$F_0(u)(x_i, t_{n-j}) = \sum_{k=0}^p \frac{(-jh)^k}{k!} \frac{\partial^k F_0(u)}{\partial t^k}(x_i, t_n) + \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad (3.10)$$

$$F_1(u)(x_i, t_{n-j}) = \sum_{k=0}^p \frac{(-jh)^k}{k!} \frac{\partial^k F_1(u)}{\partial t^k}(x_i, t_n) + \mathcal{O}(h^{p+1}). \quad (3.11)$$

Substituindo (3.9), (3.10) e (3.11) em (3.8) segue-se

$$\begin{aligned} & \sum_{j=-1}^{s-1} a_j \sum_{k=0}^p \frac{(-jh)^k}{k!} \frac{\partial^k u}{\partial t^k}(x_i, t_n) - \sum_{j=0}^{s-1} b_j \sum_{k=0}^p \frac{(-jh)^{k+1}}{k!} \frac{\partial^k F_0(u)}{\partial t^k}(x_i, t_n) - \\ & - \sum_{j=-1}^{s-1} c_j \sum_{k=0}^p \frac{(-jh)^{k+1}}{k!} \frac{\partial^k F_1(u)}{\partial t^k}(x_i, t_n) = \mathcal{O}(h^{p+2}) + h\mathcal{O}(\Delta x^p), \end{aligned}$$

com  $a_{-1} = 1$ .

Reescrevendo o primeiro membro da igualdade anterior como um polinómio em  $h$  obtemos

$$\begin{aligned} & \left[ \sum_{j=-1}^{s-1} a_j \right] u_i^n + \left[ - \sum_{j=-1}^{s-1} j a_j \frac{\partial u}{\partial t} - \sum_{j=0}^{s-1} b_j F_0 - \sum_{j=-1}^{s-1} c_j F_1 \right] h + \\ & \left[ \sum_{j=-1}^{s-1} \frac{j^2 a_j}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \sum_{j=0}^{s-1} j b_j \frac{\partial F_0}{\partial t} + \sum_{j=-1}^{s-1} j c_j \frac{\partial F_1}{\partial t} \right] h^2 + \dots + \\ & \left[ \sum_{j=-1}^{s-1} \frac{(-j)^p a_j}{p!} \frac{\partial^p u}{\partial t^p} - \sum_{j=0}^{s-1} \frac{(-j)^{p-1} b_j}{(p-1)!} \frac{\partial^{p-1} F_0}{\partial t^{p-1}} - \sum_{j=-1}^{s-1} \frac{(-j)^{p-1} c_j}{(p-1)!} \frac{\partial^{p-1} F_1}{\partial t^{p-1}} \right] h^p + \\ & + \mathcal{O}(h^{p+1}) + h\mathcal{O}(\Delta x^q) \end{aligned} \tag{3.12}$$

Atendendo a que

$$\frac{\partial^k u}{\partial t^k} = \frac{\partial^{k-1} F_0}{\partial t^{k-1}} + \frac{\partial^{k-1} F_1}{\partial t^{k-1}}, \quad k = 1, 2, \dots, p$$

e a (3.7) concluímos o pretendido.

**q.e.d.**

**Corolário 3.2.2.** *Qualquer que seja  $s \in \mathbb{N}$ , existe um MIE de  $s$  etapas com erro local  $\mathcal{O}(h^s) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$ .*

*Demonstração.* A demonstração deste resultado, que não faremos, baseia-se na prova de que o sistema de equações (3.12) tem sempre solução (ver [ARW95]).

Estudemos agora com mais detalhe o erro local de métodos com uma e duas etapas.

### MIE de uma etapa

Como vimos na secção anterior, um método de uma etapa com erro local  $\mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$  deve verificar

$$a_0 + 1 = 0, \quad 1 - b_0 = 0 \quad \text{e} \quad 1 - c_0 - c_{-1} = 0$$

isto é, é um método pertencente à classe de métodos

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{h} = F_{0,\Delta x}(U^n) + \gamma F_{1,\Delta x}(U^n) + (1 - \gamma)F_{1,\Delta x}(U^{n+1}) \quad (3.13)$$

em que  $\gamma$  é um parâmetro.

Vejam agora qual a expressão do termo principal do erro local associado ao método (3.13).

**Proposição 3.2.3.** *O erro local associado a (3.13) é da forma*

$$E_T h + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$$

onde

$$\begin{aligned} E_T = & (2\gamma - 1)\beta f_{uu} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + [\alpha' + (2\gamma - 1)f_u] f + \gamma_0 u + \gamma_1 \frac{\partial u}{\partial x} + \\ & + \gamma_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2\beta[\gamma\alpha + 2(2\gamma - 1)\beta'] \frac{\partial u^3}{\partial x^3} + [(2\gamma - 1)\beta^2] \frac{\partial u^4}{\partial x^4} + \\ & + [\alpha + (2\gamma - 1)\beta'] f_x + (2\gamma - 1)\beta f_{xx} \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde  $\gamma_0$ ,  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  são funções que dependem das derivadas de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $f$  e  $\mu$ .

*Demonstração.* É suficiente introduzir a solução exacta de (2.4) em (3.13), desenvolver em série de Taylor e usar a definição de  $F_0$  e  $F_1$ .

**q.e.d.**

**Corolário 3.2.4.** *Nas condições da proposição anterior, o erro local associado a (3.13) é  $\mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$ , desde que  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = \frac{1}{2}$  e se verifique uma das seguintes condições:*

1.  $\mu = 0$ ,
2.  $f$  é linear em  $u$ .

**Observação:** Da expressão (3.14), decorre facilmente que nos casos não contemplados no corolário anterior, o erro local é apenas  $\mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\Delta x^p)$ .

### MIE de duas etapas

Procedendo como no caso anterior, analisemos métodos de duas etapas para os quais

$$\begin{aligned} 1 + a_0 + a_1 &= 0, \\ 1 - a_1 &= b_0 + b_1 = c_{-1} + c_0 + c_1, \\ 1 + a_1 &= -2b_1 = 2(c_{-1} - c_1). \end{aligned}$$

Sejam  $\gamma$  e  $\delta$  tais que

$$a_0 = -\frac{2\gamma}{\gamma + \frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad c_{-1} = \frac{c}{2}.$$

Reparametrizando os coeficientes, o método pode escrever-se na forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \left[ \left( \gamma + \frac{1}{2} \right) U^{n+1} - 2\gamma U^n + \left( \gamma - \frac{1}{2} \right) U^{n-1} \right] &= (1 + \gamma)F_{0,\Delta x}(U^n) + \\ -\gamma F_{0,\Delta x}(U^{n-1}) + \left( \gamma + \frac{c}{2} \right) F_{1,\Delta x}(U^{n+1}) &+ (1 - \gamma - c)F_{1,\Delta x}(U^n) + \frac{c}{2}F_{1,\Delta x}(U^{n-1}) \end{aligned} \quad (3.15)$$

### 3.3 Estabilidade

No que se segue analisamos a estabilidade de um MIE pertencente à classe (3.13).

Consideremos a partição  $F_0(u) = \alpha u_x$  e  $F_1(u) = \beta u_{xx} - ku$ , com  $\alpha < 0$  e  $\beta$  e  $k$  constantes reais positivas. Sejam  $F_{0,\Delta x}$  e  $F_{1,\Delta x}$  definidos por

$$F_{0,\Delta x} = \frac{\alpha}{\Delta x} \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ -1 & 1 & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & 1 & \\ & & & & -1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$F_{1,\Delta x} = \frac{\beta}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} - kI.$$

Notemos-se que os operadores associados às matrizes anteriores verificam (3.5). Consideremos a classe de métodos (3.13), reescrita na forma

$$[I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}]U^{n+1} = (I + hF_{0,\Delta x} + \gamma hF_{1,\Delta x})U^n$$

e  $\gamma$  tal que  $0 \leq \gamma \leq 1$ . Tomando os vectores

$$F^{n+1} = \frac{U^{n+1} - U^n}{h} - F_{0,\Delta x}(U^n) - \gamma F_{1,\Delta x}(U^n) - (1 - \gamma)F_{1,\Delta x}(U^{n+1}),$$

$$G^{n+1} = \frac{V^{n+1} - V^n}{h} - F_{0,\Delta x}(V^n) - \gamma F_{1,\Delta x}(V^n) - (1 - \gamma)F_{1,\Delta x}(V^{n+1}),$$

é fácil estabelecer

$$[I - h(1 - \gamma)(D_2 - kI)]e^{n+1} = h(F^{n+1} - G^{n+1}) + [I + hF_{0,\Delta x} + h\gamma(D_2 - kI)]e^n \quad (3.16)$$

com  $e^n = U^n - V^n$ .

Neste contexto, vale o seguinte resultado

**Proposição 3.3.1.** *Se*

1.  $I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}$  é invertível,
2.  $\| [I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}]^{-1} \|_{\infty} \leq 1$ ,
3.  $\| [I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}]^{-1} (I + hF_{0,\Delta x} + \gamma hF_{1,\Delta x}) \|_{\infty} \leq 1$ ,

então a discretização (3.13) é estável- $N$  relativamente às normas (1.17) e (1.18) substituindo  $\|\cdot\|_2$  por  $\|\cdot\|_{\infty}$ .

*Demonstração.* Introduzindo em (3.16) as matrizes

$$A = [I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}]^{-1}$$

e

$$B = (I + hF_{0,\Delta x} + \gamma\beta hD_2)$$

obtemos

$$e^{n+1} = hA(F^{n+1} - G^{n+1}) + AB e^n - kh\gamma A e^n \quad (3.17)$$

a partir da qual vem

$$\|e^{n+1}\| \leq h \|F^{n+1} - G^{n+1}\| + (1 + k\gamma h) \|e^n\|.$$

Procedendo como quando da estabilidade de (1.16), concluímos o pretendido com constante de estabilidade  $e^{k\gamma}$ .

**q.e.d.**

Tendo em conta a definição de  $F_{1,\Delta x}$  e  $F_{0,\Delta x}$  e impondo condições de estabilidade a  $h$ ,  $\Delta x$  e  $\gamma$ , estabelecemos seguidamente condições que permitem concluir a veracidade das hipóteses da proposição 3.3.1. Com o objectivo anterior, introduzimos conceitos e proposições auxiliares que têm um papel de relevo no que se segue.

**Definição 3.3.1.** Uma matriz  $A = [a_{ij}]$  diz-se *estritamente diagonal dominante* se

$$\sum_{i \neq j} |a_{ij}| < |a_{ii}|$$

para todo o  $i$ .

**Definição 3.3.2.** Diz-se que  $A = [a_{ij}]$  é uma matriz  $M$  se

1.  $a_{ii} > 0, \forall i, \quad a_{ij} \leq 0, \forall i \neq j$
2.  $A$  é não singular e  $A^{-1}$  tem entradas não negativas.

A relação entre matriz estritamente diagonal dominante e matriz  $M$  é estabelecida no seguinte resultado, cuja demonstração pode ser encontrada em [Hac92].

**Proposição 3.3.2.** *Se  $A = [a_{ij}]$  é tal que  $a_{ii} > 0, \forall i, \quad a_{ij} \leq 0, \forall i \neq j$  e é estritamente diagonal dominante, então  $A$  é matriz  $M$ .*

O resultado seguinte, cuja prova pode também ser vista em [Hac92], permite determinar uma estimativa para  $\|A^{-1}\|_{\infty}$  quando  $A$  é matriz  $M$ . Para facilidade de escrita, introduzimos a notação  $A \geq B$  para matrizes  $A = [a_{ij}]$  e  $B = [b_{ij}]$  que verifiquem

$$a_{ij} \geq b_{ij}, \forall i, j.$$

**Proposição 3.3.3.** *Seja  $A$  uma matriz  $M$  e  $w$  um vector tal que*

$$Aw \geq \mathbf{1},$$

onde  $\mathbf{1}$  é um vector com todas as componentes iguais a 1. Então

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \|w\|_{\infty}.$$

Provemos então 1, 2 e 3.

**Proposição 3.3.4.**  *$I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}$  é uma matriz  $M$ .*

*Demonstração.* Começemos por provar que  $A = I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}$  é estritamente diagonal dominante. Se

$$\left| \frac{(1 - \gamma)h\beta}{\Delta x^2} \right| < \left| 1 - \frac{(1 - \gamma)h\beta}{\Delta x^2}(-2) + k(1 - \gamma)h \right|$$

e

$$2 \left| \frac{(1 - \gamma)h\beta}{\Delta x^2} \right| < \left| 1 - \frac{(1 - \gamma)h\beta}{\Delta x^2}(-2) + k(1 - \gamma)h \right|$$

então  $A$  é estritamente diagonal dominante.

Atendendo a que  $1 - \gamma \geq 0$ , segue-se que as desigualdades anteriores são sempre verdadeiras e portanto conclui-se o pretendido.

Por outro lado, de  $1 - \gamma \geq 0$  vem que as componentes diagonais de  $A$

$$1 + 2\frac{(1-\gamma)h\beta}{\Delta x^2} + k(1-\gamma)h$$

são positivas. Pelo mesmo argumento, é fácil de ver que as componentes não diagonais de  $A$  são não positivas. Logo, pela Proposição 3.3.2,  $A$  é matriz  $M$ .

**q.e.d.**

Pela proposição anterior  $I - (1-\gamma)F_{1,\Delta x}$  é matriz  $M$  e portanto é invertível.

Por outro lado, a Proposição 3.3.3 permite determinar um majorante para  $\| [I - (1-\gamma)F_{1,\Delta x}]^{-1} \|_\infty$ :

**Proposição 3.3.5.** *Nas condições anteriores, tem-se*

$$\| [I - (1-\gamma)hF_{1,\Delta x}]^{-1} \|_\infty \leq \frac{1}{1 + (1-\gamma)hk}$$

*Demonstração.* Seja  $A = I - (1-\gamma)F_{1,\Delta x}$  e  $w$  o vector definido por

$$w = \delta \mathbf{1}$$

onde  $\delta$  é um número real.

Então,

$$Aw = \delta A\mathbf{1} = \delta \begin{bmatrix} 1 + \frac{(1-\gamma)h\beta}{\Delta x^2} + k(1-\gamma)h \\ 1 + k(1-\gamma)h \\ \vdots \\ 1 + k(1-\gamma)h \\ 1 + \frac{(1-\gamma)h\beta}{\Delta x^2} + k(1-\gamma)h \end{bmatrix}.$$

Atendendo a que

$$1 + \frac{(1-\gamma)h\beta}{\Delta x^2} + k(1-\gamma)h \geq 1 + k(1-\gamma)h$$

o resultado fica provado tomando

$$\delta = \frac{1}{1 + (1-\gamma)hk}.$$

**q.e.d.**

Atendendo a que  $\gamma \in [0, 1]$ , vem de imediato que

$$\left\| [I - (1 - \gamma)F_{1, \Delta x}]^{-1} \right\|_{\infty} \leq 1.$$

Com o objectivo de concluir que

$$\left\| [I - (1 - \gamma)hF_{1, \Delta x}]^{-1} (I + hF_{0, \Delta x} + \gamma h\beta D_2) \right\|_{\infty} \leq 1$$

determinemos condições sobre  $\gamma$ ,  $h$  e  $\Delta x$  que garantam que

$$\|I + hF_{0, \Delta x} + \gamma h\beta D_2\|_{\infty} \leq 1 + (1 - \gamma)kh \quad (3.18)$$

para concluirmos 3.

**Proposição 3.3.6.** *Se  $\gamma$ ,  $h$  e  $\Delta x$  forem escolhidos tais que*

$$-2 \min \left\{ 1 - \alpha \frac{h}{\Delta x} - 2\gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2}, 1 - \beta\gamma \frac{h}{\Delta x^2} \right\} \leq (1 - \gamma)kh \quad (3.19)$$

então

$$\left\| [I - (1 - \gamma)hF_{1, \Delta x}]^{-1} (I + hF_{0, \Delta x} + \gamma h\beta D_2) \right\|_{\infty} \leq 1.$$

*Demonstração.* Começemos por notar que

$$\|B\|_{\infty} = \left| 1 - \alpha \frac{h}{\Delta x} - 2\gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} \right| + \gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} + \left| \gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} + \alpha \frac{h}{\Delta x} \right|.$$

donde tiramos que (3.18) é válida se e só se

$$\left| 1 - \alpha \frac{h}{\Delta x} - 2\gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} \right| + \gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} + \left| \gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} + \alpha \frac{h}{\Delta x} \right| \leq 1 + (1 - \gamma)kh.$$

Por outro lado, a desigualdade anterior verifica-se se forem válidas as desigualdades

$$(1 - \gamma)kh \geq 0$$

$$-\alpha \frac{h}{\Delta x} - \gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} \leq \frac{k(1 - \gamma)h}{2} \quad (3.20)$$

$$-2 \left( 1 - \alpha \frac{h}{\Delta x} - 2\gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} \right) \leq (1 - \gamma)kh$$

$$-2 \left( 1 - \gamma\beta \frac{h}{\Delta x^2} \right) \leq (1 - \gamma)kh.$$

Atendendo à definição de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $k$ , é fácil de verificar que (3.20) implica (3.19).

**q.e.d.**

Notemos que os resultados obtidos podem ser facilmente estendidos quando a reacção é da forma  $f(u)$ , com  $f \in \text{mathcal{C}}^1(\mathbb{R})$ . Consideremos novamente os vectores  $F^{n+1}$  e  $G^{n+1}$  definidos por

$$F^{n+1} = \frac{U^{n+1} - U^n}{h} - F_{0,\Delta x}(U^n) - \gamma F_{1,\Delta x}U^n - (1 - \gamma)F_{1,\Delta x}U^{n+1}$$

e

$$G^{n+1} = \frac{V^{n+1} - V^n}{h} - F_{0,\Delta x}(V^n) - \gamma F_{1,\Delta x}V^n - (1 - \gamma)F_{1,\Delta x}V^{n+1}.$$

É fácil estabelecer que se  $e^n = U^n - V^n$  e

$$F(U^n) = [f(U_1^n), f(U_2^n), \dots, f(U_{N-1}^n)]^T,$$

então

$$\begin{aligned} [I - h(1 - \gamma)D_2] e^{n+1} - h(1 - \gamma) [F(U^{n+1}) - F(V^{n+1})] = \\ = h (F^{n+1} - G^{n+1}) + [I + h\beta\gamma D_2 + hF_{0,\Delta x}] e^n + h\gamma [F(U^n) - F(V^n)]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Pelo teorema do valor médio, existe  $\xi_i^n \in (U_i^n, V_i^n)$  tal que

$$F(U^n) - F(V^n) = D(\xi^n)e^n$$

onde  $D(\xi^n)$  é uma matriz diagonal com entradas diagonais iguais a  $f'(\xi_i^n)$ .

Assim, (3.21) é equivalente a

$$\begin{aligned} [I - h(1 - \gamma)(D_2 + D(\xi^{n+1}))] e^{n+1} = h (F^{n+1} - G^{n+1}) + \\ + [I + h\gamma(D_2 + D(\xi^n)) + hF_{0,\Delta x}] e^n. \end{aligned} \quad (3.22)$$

**Proposição 3.3.7.** *Sejam  $R > 0$  e  $M = [\inf u - R, \sup u + R]$ . Se*

$$\sup_{x \in M} f'(x) < \frac{1}{h(1 - \gamma)}$$

então,  $[I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}]^{-1}$  existe e

$$\left\| [I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}]^{-1} \right\|_{\infty} \leq \max_{x \in M} \frac{1}{1 - h(1 - \gamma)f'(x)}$$

*Demonstração.* Começemos por notar que se

$$1 - h(1 - \gamma)f'(x) > 0, \forall x \in M$$

então  $A = I - (1 - \gamma)hF_{1,\Delta x}$  é estritamente diagonal dominante e tem componentes diagonais positivas. Atendendo à Proposição 3.3.2 vem que  $A$  é matriz  $M$ . Tomando

$$\delta = \max_{x \in M} \frac{1}{1 - h(1 - \gamma)f'(x)}$$

a Proposição 3.3.3 e o raciocínio usado na demonstração da Proposição 3.3.5 permite concluir o pretendido.

**q.e.d.**

Se admitirmos que

$$\|u_h - U_h\| \leq R \quad \text{e} \quad \|u_h - V_h\| \leq R$$

então a regularidade de  $f$  implica que existe uma constante  $L$  tal que

$$\|D(\xi^n)\|_\infty \leq L$$

e portanto obtemos

$$\|e^{n+1}\| \leq \|A^{-1}\| (\|I + h\gamma\beta D_2 + hF_{0,\Delta x}\| + h\gamma L) \|e^n\| + h \|A^{-1}\| \|F^{n+1} - G^{n+1}\|$$

**Proposição 3.3.8.** *Se*

1.  $f'(x) \leq 0, \forall x \in M,$
2.  $-2 \min \left\{ 1 - \alpha \frac{h}{\Delta x} - 2\beta\gamma \frac{h}{\Delta x^2}, 1 - \beta\gamma \frac{h}{\Delta x^2} \right\} \leq (1 - \gamma)h \max_{x \in M} f'(x)$

*então*

$$\|A^{-1}\| \|I + h\gamma\beta D_2 + hF_{0,\Delta x}\| \leq 1.$$

*Demonstração.* Começemos por notar que se 1. se verificar então estamos nas condições da Proposição 3.3.7. Por outro lado, 1. implica que  $\|A^{-1}\| \leq 1$ . Por outro lado, atendendo a que

$$\max_{x \in M} \frac{1}{1 - h(1 - \gamma)f'(x)} = \frac{1}{\min_{x \in M} \{1 - h(1 - \gamma)f'(x)\}}$$

segue-se que o resultado é válido se

$$\|I + h\gamma\beta D_2 + hF_{0,\Delta x}\| \leq 1 - h(1 - \gamma) \max_{x \in M} f'(x).$$

Repetindo os argumentos utilizados no caso linear, concluímos o pretendido.

**q.e.d.**

Para finalizar este capítulo, analisemos a estabilidade para um método de duas etapas da forma (3.15).

Consideremos  $F_h = [F^0 | F^1 | \dots | F^N]^T$  em que

$$\begin{aligned} F^0 &= U^0 - u^0 \\ F^1 &= U^1 - u^1 \\ F^{n+1} &= \frac{(\gamma + \frac{1}{2})U^{n+1} - 2\gamma U^n + (\gamma - \frac{1}{2})U^{n-1}}{h} + \\ &\quad + (1 + \gamma)F_{0,\Delta x}(U^n) - \gamma F_{0,\Delta x}(U^{n-1}) + (\gamma + \frac{c}{2})F_{1,\Delta x}(U^{n+1}) + \\ &\quad + (1 - \gamma - c)F_{1,\Delta x}(U^n) + \frac{c}{2}F_{1,\Delta x}(U^{n-1}) \end{aligned}$$

onde  $u^0$  e  $u^1$  são vectores contendo os valores de  $u$  nos níveis  $t_0$  e  $t_1$ . Seja  $G_h$  definido de forma análoga. Subtraindo  $F^{n+1}$  a  $G^{n+1}$ , para  $n = 1, 2, \dots, N - 1$ , e tomando  $e_h = U_h - V_h$  obtemos

$$\begin{aligned} h(F^{n+1} - G^{n+1}) &= \left[ \left( \gamma + \frac{1}{2} \right) I - h \left( \gamma + \frac{c}{2} \right) F_{1,\Delta x} \right] U^{n+1} \\ &\quad - [2\gamma I + h(1 + \gamma)F_{0,\Delta x} + h(1 - \gamma - c)F_{1,\Delta x}] U^n \quad (3.23) \\ &\quad - \left[ - \left( \gamma - \frac{1}{2} \right) I - h\gamma F_{0,\Delta x} + \frac{c}{2} F_{1,\Delta x} \right] U^{n-1}. \end{aligned}$$

Sejam

$$\begin{aligned} A &= \left( \gamma + \frac{1}{2} \right) I - h \left( \gamma + \frac{c}{2} \right) F_{1,\Delta x} \\ B &= 2\gamma I + h(1 + \gamma)F_{0,\Delta x} + h(1 - \gamma - c)F_{1,\Delta x} \\ C &= - \left( \gamma - \frac{1}{2} \right) I - h\gamma F_{0,\Delta x} + \frac{c}{2} F_{1,\Delta x}. \end{aligned}$$

Então, (3.23) é equivalente a

$$Ae^{n+1} = h(F^{n+1} - G^{n+1}) + Be^n + Ce^{n-1}.$$

Tomando  $\tilde{e}^n = e^{n-1}$ , a equação anterior pode escrever-se na forma

$$\begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{n+1} \\ \tilde{e}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B & C \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^n \\ \tilde{e}^n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} h(F^{n+1} - G^{n+1}) \\ 0 \end{bmatrix}$$

ou ainda,

$$\begin{bmatrix} e^{n+1} \\ \tilde{e}^{n+1} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} A^{-1}B & A^{-1}C \\ I & 0 \end{bmatrix}}_{\Phi} \underbrace{\begin{bmatrix} e^n \\ \tilde{e}^n \end{bmatrix}}_{E^n} + \underbrace{\begin{bmatrix} h(F^{n+1} - G^{n+1}) \\ 0 \end{bmatrix}}_{K^{n+1}}.$$

Tendo em conta o que já foi dito para equações deste tipo, é fácil estabelecer que se  $\|\Phi\|, \|A^{-1}\| \leq 1$  então

$$\|E^{n+1}\| \leq \sum_{i=2}^{n+1} \|K^i\| + \|E^1\|.$$

Por outro lado, tendo em conta a definição de  $E^n$  e  $K^n$  tem-se

$$\|e^{n+1}\| \leq h \sum_{i=2}^{n+1} \|F^i - G^i\| + \|e^1\| + \|e^0\|.$$

Considerando em  $X_h$  a norma usual e em  $Y_h$  a norma

$$\|F_h\|_{Y_h} = h \sum_{i=2}^N \|F^i\| + \|F^1\| + \|F^0\|$$

conclui-se que

$$\|e_h\|_{X_h} \leq \|\phi_h(U_h) - \phi_h(V_h)\|,$$

isto é, a discretização é estável-N.

Procedendo de modo análogo ao caso de métodos com uma etapa, pode provar-se que

**Proposição 3.3.9.** *Se  $\gamma, c \geq 0$  e  $\gamma + c \leq 1$  então  $A$  é uma matriz  $M$  e*

$$\|A^{-1}\| \leq \frac{1}{\gamma + \frac{1}{2} + kh(\gamma + \frac{c}{2})} \leq \frac{1}{\gamma + \frac{1}{2}}.$$

Por outro lado, atendendo à estrutura da matriz  $\Phi$ , tem-se que

$$\|\Phi\| \leq \max \{ \|A^{-1}\| \|B|C\|, 1 \}$$

onde  $B|C$  representa a matriz que se obtém concatenando as matrizes  $B$  e  $C$ . Portanto, a discretização (3.15) é estável no sentido já referido se

$$\|A^{-1}\| \|B|C\| \leq 1.$$

Procedendo como no caso para uma etapa, é possível estabelecer resultados análogos à Proposição 3.3.6.

Notemos que a técnica exposta permite também analisar a estabilidade de métodos MIE com mais de duas etapas.

## 4 Um modelo de propagação geográfica de epidemias

A modelação matemática da propagação de uma epidemia numa comunidade é um tema actual pois o entendimento do fenómeno, e fundamentalmente, a sua previsão e controlo, são questões relevantes para a economia e saúde mundial.

Os modelos matemáticos que surgem na literatura são, na sua maioria, caracterizados por equações diferenciais ordinárias. Destes, salientamos os modelos SI e SIR. O primeiro modela a interacção entre indivíduos infectados e indivíduos susceptíveis de contrair a doença e o segundo modela a interacção entre os tipos referidos e os indivíduos que são imunes. No entanto, pela sua natureza própria, estes modelos não têm em conta o espaço em que a população evolui. Assim, e atendendo à cada vez maior mobilidade de indivíduos nas comunidades, os modelos anteriores têm sido alterados para equações com derivadas parciais por forma a que tenham em consideração este facto.

Neste capítulo apresentamos um destes últimos modelos que envolve apenas dois tipos de indivíduos: os susceptíveis de contrair a doença e os já infectados. Na secção 1, apresentamos o modelo matemático que pretendemos estudar. Na secção 2 são apresentados dois métodos numéricos - um particionado e um implícito-explicito - e são estudadas as suas propriedades de estabilidade e convergência. Na última secção são apresentados alguns resul-

tados numéricos.

#### 4.1 O modelo matemático

Consideremos uma população distribuída por uma região  $\Omega$  na qual existem dois tipos de indivíduos: indivíduos infectados por uma doença e indivíduos susceptíveis de contrair essa doença. Denotemos por  $S(x, t)$  e  $I(x, t)$ , respectivamente, os indivíduos susceptíveis e infectados em cada  $x \in \Omega$  e em cada instante  $t$ . Admitimos que

- a transição de susceptíveis para infectados é proporcional a  $rSI$ , onde  $r$  é um parâmetro constante;
- os infectados têm uma taxa de mortalidade induzida pela doença  $aI$ ;
- a dispersão espacial de  $S$  e  $I$  é modelada por difusão (com o mesmo coeficiente  $D$ ).

Atendendo às hipóteses anteriores, as variáveis  $S$  e  $I$  relacionam-se de acordo com o seguinte sistema de EDPs

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = -rIS + D\nabla^2 S \\ \frac{\partial I}{\partial t} = rIS - aI + D\nabla^2 I \end{cases} \quad (4.1)$$

Neste modelo, o parâmetro  $r$  é uma medida da eficiência da transmissão da doença,  $1/a$  é a esperança de vida de um indivíduo infectado pela doença e  $D$  é o coeficiente de difusão associado ao problema.

Suponhamos que  $\Omega \subset \mathbb{R}$ . Considerando em (4.1) a mudança de variável

$$\begin{aligned} I^* &= \frac{I}{S_0}, & S^* &= \frac{S}{S_0}, & x^* &= \sqrt{\frac{rS_0}{D}}x, \\ t^* &= rS_0t, & \lambda &= \frac{a}{rS_0} \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde  $S_0$  é o número de indivíduos da população, obtemos o sistema equivalente

$$\begin{cases} \frac{\partial S^*}{\partial t^*} = -I^* S^* + \nabla^2 S^* \\ \frac{\partial I^*}{\partial t^*} = I^* S^* - \lambda I^* + \nabla^2 I^* \end{cases}. \quad (4.3)$$

No que se segue omitimos os asteriscos para facilitar a notação. Consideramos um domínio suficientemente grande,  $[a, b]$ , que contenha a população e que permita considerar condições de fronteira homogêneas. Mais ainda, supomos conhecida a distribuição em  $\Omega$  dos indivíduos infectados e susceptíveis no instante  $t = 0$ . Assim, o problema a estudar é

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} = -IS + \nabla^2 S, & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ \frac{\partial I}{\partial t} = IS - \lambda I + \nabla^2 I, & \text{em } \Omega \times (0, T) \\ S(x, 0) = S_0(x), & \text{em } \Omega \times \{0\} \\ I(x, 0) = I_0(x), & \text{em } \Omega \times \{0\} \\ S(a, t) = S(b, t) = I(a, t) = I(b, t) = 0, & \text{em } [0, T] \end{cases}$$

## 4.2 Modelos discretos

Atendendo aos dois capítulos anteriores, podemos considerar na determinação de uma aproximação para  $S$  e  $I$  dois tipos de métodos: métodos particionados ou métodos implícitos-explicitos. Apresentamos seguidamente o estudo de métodos pertencentes às duas classes referidas, no contexto de (4.3). Para o efeito introduzimos em  $[a, b]$  e  $[0, T]$  duas malhas  $\{x_i\}$  e  $\{t_j\}$  definidas por

$$\begin{aligned} x_i &= a + i\Delta x, \quad i = 0, 1, \dots, N \\ t_j &= jh, \quad j = 0, 1, \dots, K \end{aligned}$$

onde  $h$  e  $\Delta x$  são tais que  $a + N\Delta x = b$  e  $hK = T$ . Seja

$$U^j = [S_1^j, S_2^j, \dots, S_{N-1}^j, I_1^j, I_2^j, \dots, I_{N-1}^j]^T$$

em que  $S_i^j$  e  $I_i^j$  denotam aproximações para  $S(x_i, t_j)$  e  $I(x_i, t_j)$ , respectivamente.

### Método implícito-explicito

Começemos por notar que um método numérico que aproxime a solução de (4.3) pode integrar explicitamente a parte não linear da reacção e integrar implicitamente o restante.

Consideremos o método implícito-explicito da classe de métodos (3.15) com  $\gamma = 0$  e  $c = 1$

$$\frac{1}{2h} (U^{n+1} - U^{n-1}) = F_{0,\Delta x}(U^n) + \frac{1}{2}F_{1,\Delta x}(U^{n+1}) + \frac{1}{2}F_{1,\Delta x}(U^{n-1}) \quad (4.4)$$

com  $F_{0,\Delta x}$  e  $F_{1,\Delta x}$  definidos por

$$F_{1,\Delta x} \equiv \left[ \begin{array}{c|c} D_2 & 0 \\ \hline 0 & -\lambda I + D_2 \end{array} \right] \quad (4.5)$$

$$F_{0,\Delta x}(U^n) = \left[ \begin{array}{c} -U_1^n U_N^n \\ \vdots \\ -U_{N-1}^n U_{2(N-1)}^n \\ U_1^n U_N^n \\ \vdots \\ U_{N-1}^n U_{2(N-1)}^n \end{array} \right] \quad (4.6)$$

É fácil estabelecer que (4.4) tem ordem de consistência dois desde  $h = C\Delta x$ , para alguma constante positiva  $C$ . Estudemos a estabilidade de (4.4).

Tomando  $\tilde{U}^{n+1} = (I + hF_{1,\Delta x})U^n$ , (4.4) é equivalente a

$$\begin{cases} (I - hF_{1,\Delta x})U^{n+1} = \tilde{U}^n + 2hF_{0,\Delta x}(U^n) \\ \tilde{U}^{n+1} = (I + hF_{1,\Delta x})U^n \end{cases} \quad (4.7)$$

Atendendo a que a reacção é caracterizada por uma função em  $C^\infty(\mathbb{R}^2)$ , é fácil estabelecer que se

$$\max \left\{ \|I + hF_{1,\Delta x}\|, \|(I - hF_{1,\Delta x})^{-1}\|_\infty \right\} \leq 1 \quad (4.8)$$

então o método (4.4) é estável-K.

Logo, e atendendo à definição de  $F_{1,\Delta x}$ , se  $\|I + hF_{1,\Delta x}\|_\infty \leq 1$  então o método (4.4) é estável-K. Mais ainda, se

$$h \leq \frac{2}{\lambda + \frac{4}{\Delta x^2}} \quad (4.9)$$

então  $\|I + hF_{1,\Delta x}\|_\infty \leq 1$ .

**Exemplo 10.** Sejam  $\Omega = [0, 10]$ ,  $T = 9$ ,  $a = 0.02$ ,  $r = 2.0854 \times 10^{-5}$  e  $D = 0.1$ . A figura 4.1 apresenta a evolução temporal do número de infectados para os dados iniciais

$$S_0(x) = 160e^{-10(x-5)^2} + 30e^{-2(x-4)^2} + 20e^{-40(x-6)^2} \quad (4.10)$$

$$I_0(x) = 5e^{-5(x-6)^2}, \quad (4.11)$$

e  $\Delta x = 0.025$ . Notemos que para este valor de  $\Delta x$ , a condição de estabilidade determina que para valores de  $h \leq 3.121 \times 10^{-4}$  o método é estável.

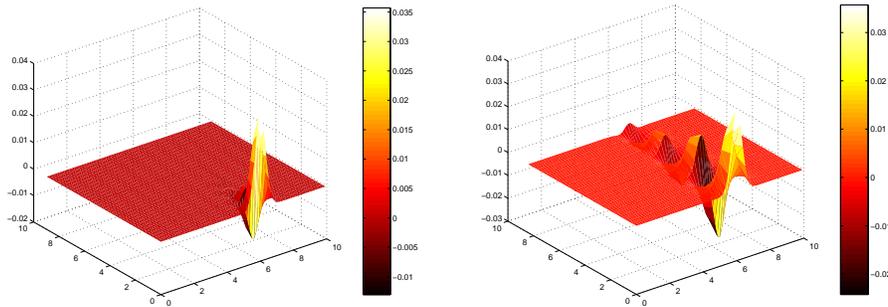


Figura 4.1: Soluções obtidas com  $h = 8 \times 10^{-4}$  e  $h = 2 \times 10^{-3}$ , respectivamente.

No entanto, a condição de estabilidade (4.9) pode tornar-se demasiado severa se o parâmetro  $\lambda$  for muito grande e/ou  $\Delta x$  for muito pequeno.

Atendendo à conclusão anterior, consideremos agora na determinação de uma aproximação para a solução de (4.3) um método baseado num particionamento do tipo (2.18).

### Método particionado

Particionando o problema (4.3) em dois subproblemas

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S_1}{\partial t} = -I_1 S_1, \quad x \in \Omega, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \\ \frac{\partial I_1}{\partial t} = I_1 S_1 - \lambda I_1, \quad x \in \Omega, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \\ I_1(t_n) = I(t_n), \quad S_1(t_n) = S(t_n) \\ I_1(x, t) = S_1(x, t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \end{array} \right. \quad (4.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2}, \quad x \in \Omega, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \\ \frac{\partial I_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 I_2}{\partial x^2}, \quad x \in \Omega, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \\ I_2(t_n) = I_1(t_{n+1}), \quad S_2(t_n) = S_1(t_{n+1}) \\ I_2(x, t) = S_2(x, t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \end{array} \right. \quad (4.13)$$

Sejam  $\tilde{S}_{1,j}^{n+1}$  e  $\tilde{I}_{1,j}^{n+1}$  aproximações para  $S(x_j, t_{n+1})$  e  $I(x_j, t_n)$ , respectivamente, definidas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\tilde{S}_{1,j}^{n+1} - \tilde{S}_{1,j}^n}{h} = -\tilde{I}_{1,j}^n \tilde{S}_{1,j}^n, \quad \tilde{S}_1^n = \tilde{S}^n \\ \frac{\tilde{I}_{1,j}^{n+1} - \tilde{I}_{1,j}^n}{h} = \tilde{I}_{1,j}^n \tilde{S}_{1,j}^n - \lambda \tilde{I}_{1,j}^{n+1}, \quad \tilde{I}_1^n = \tilde{I}^n \end{array} \right. \quad (4.14)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\tilde{S}_{2,j}^{n+1} - \tilde{S}_{2,j}^n}{h} = \frac{\tilde{S}_{2,j+1}^{n+1} - 2\tilde{S}_{2,j}^{n+1} + \tilde{S}_{2,j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}, \quad \tilde{S}_2^n = \tilde{S}_1^{n+1} \\ \frac{\tilde{I}_{2,j}^{n+1} - \tilde{I}_{2,j}^n}{h} = \frac{\tilde{I}_{2,j+1}^{n+1} - 2\tilde{I}_{2,j}^{n+1} + \tilde{I}_{2,j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}, \quad \tilde{I}_2^n = \tilde{I}_1^{n+1} \end{array} \right. \quad (4.15)$$

para  $j = 1, 2, \dots, N-1$ .

Sejam  $\tilde{S}_i^n = [\tilde{S}_{i,j}^n]^T$  e  $\tilde{I}_i^n = [\tilde{I}_{i,j}^n]^T$ . Então, (4.16) e (4.17) podem escrever-se na forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\tilde{S}_1^{n+1} - \tilde{S}_1^n}{h} = -\tilde{I}_1^n \cdot \tilde{S}_1^n, \quad \tilde{S}_1^n = \tilde{S}^n \\ \frac{\tilde{I}_1^{n+1} - \tilde{I}_1^n}{h} = \tilde{I}_1^n \cdot \tilde{S}_1^n - \lambda \tilde{I}_1^{n+1}, \quad \tilde{I}_1^n = \tilde{I}^n \end{array} \right. \quad (4.16)$$

e

$$\begin{cases} \frac{\tilde{S}_2^{n+1} - \tilde{S}_2^n}{h} = D_2 \tilde{S}_2^{n+1}, & \tilde{S}_2^n = \tilde{S}_1^{n+1} \\ \frac{\tilde{I}_2^{n+1} - \tilde{I}_2^n}{h} = D_2 \tilde{I}_2^{n+1}, & \tilde{I}_2^n = \tilde{I}_1^{n+1} \end{cases} \quad (4.17)$$

onde  $\tilde{I}_1^n \cdot \tilde{S}_1^n$  deve ser interpretado componente a componente. Observemos que (4.16) e (4.17) são equivalentes a

$$U^{n+1} = AU^n + hAF(U^n), \quad (4.18)$$

onde

$$A = \left[ \begin{array}{c|c} (I - hD_2)^{-1} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \frac{1}{1+h\lambda}(I - hD_2)^{-1} \end{array} \right]. \quad (4.19)$$

Finalmente, notemos que (4.18) pode ainda ser escrito na forma  $\phi_h(U_h) = 0$  com

$$\phi_h(U_h) = \left[ \begin{array}{c} U^0 - u^0 \\ \frac{U^{n+1} - AU^n - hAF(U^n)}{h} \end{array} \right] \quad (4.20)$$

onde  $u^0$  se obtém de modo usual a partir das condições iniciais para  $S$  e  $I$ .

Uma estimativa para  $\|A\|$  em que  $A$  é definida por (4.19) é estabelecida no lema seguinte.

**Lema 4.2.1.**  $\|A\|_\infty \leq 1$ .

*Demonstração.* Começemos por notar que

$$\|A\|_\infty = \max \left\{ \|(I - hD_2)^{-1}\|_\infty, \frac{1}{1 + \lambda h} \|(I - hD_2)^{-1}\|_\infty \right\}.$$

Atendendo a que  $\lambda > 0$ , vem

$$\|A\| \leq \|(I - hD_2)^{-1}\|.$$

Finalmente, tomando na Proposição 3.3.5  $\gamma = 0$  e  $k = 0$ , concluímos o pretendido.

**q.e.d.**

Assim, a estabilidade e a estabilidade interna é consequência do lema anterior.

**Proposição 4.2.2.** *O método (4.18) é estável-K e internamente estável.*

*Demonstração.* Começemos por mostrar que (4.18) é internamente estável. Consideremos perturbações  $\rho_i$ ,  $i = 1, 2$  nas etapas de (4.18) e seja  $\hat{U}^n$  a correspondente solução perturbada. Seja  $e^n = U^n - \hat{U}^n$ . Vale a seguinte representação

$$e^{n+1} = A \left[ I + hJ_F(\theta U^n + (1 - \theta)\hat{U}^n) \right] e^n + AM\rho_1 + A\rho_2, \quad (4.21)$$

para algum  $\theta \in (0, 1)$ , e

$$M = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+h\lambda}I \end{bmatrix}, \quad (4.22)$$

com  $J_F$  a matriz jacobiana associada a  $F$ .

Atendendo ao lema anterior e a  $d_n = AM\rho_1 + A\rho_2$ , tem-se

$$\|d_n\| = \|AM\rho_1 + A\rho_2\| \leq \|\rho_1\| + \|\rho_2\|. \quad (4.23)$$

Portanto (4.18) é internamente estável.

Provemos agora que (4.18) é estável-K. Sejam  $F^{n+1}$  e  $G^{n+1}$  definidos por

$$F^{n+1} = \frac{U^{n+1} - AU^n - hAF(U^n)}{h}, \quad (4.24)$$

$$G^{n+1} = \frac{V^{n+1} - AV^n - hAF(V^n)}{h}, \quad (4.25)$$

e

$$e^n = U^n - V^n. \quad (4.26)$$

Procedendo como no Exemplo (6), temos

$$\|e^{n+1}\| \leq h \|F^{n+1} - G^{n+1}\| + \|A\| \|e^n\| + h \|A\| L \|e^n\|. \quad (4.27)$$

Logo, atendendo a que  $\|A\| \leq 1$ , concluímos de imediato a estabilidade pretendida.

**q.e.d.**

Relativamente à consistência de (4.18) vale o seguinte resultado.

**Proposição 4.2.3.** *Se  $S$  e  $I$  forem suficientemente regulares e  $h = C\Delta x^2$ , para alguma constante positiva  $C$ , então (4.18) é consistente com ordem de consistência igual a um.*

As propriedades dos métodos (4.4) e (4.18) são apresentadas na seguinte tabela

<b>Método (4.4)</b>	<b>Método (4.18)</b>
Condição de estabilidade $h \leq \frac{2}{\lambda + \frac{4}{\Delta x^2}}$	Incondicionalmente estável
Se $h = C\Delta x$ então o método é consistente com ordem de consistência igual a dois	Se $h = C\Delta x^2$ então o método é consistente com ordem de consistência igual a um

É manifesto que a escolha por um dos dois métodos resulta do compromisso entre a estabilidade e a consistência.

### 4.3 Resultados numéricos

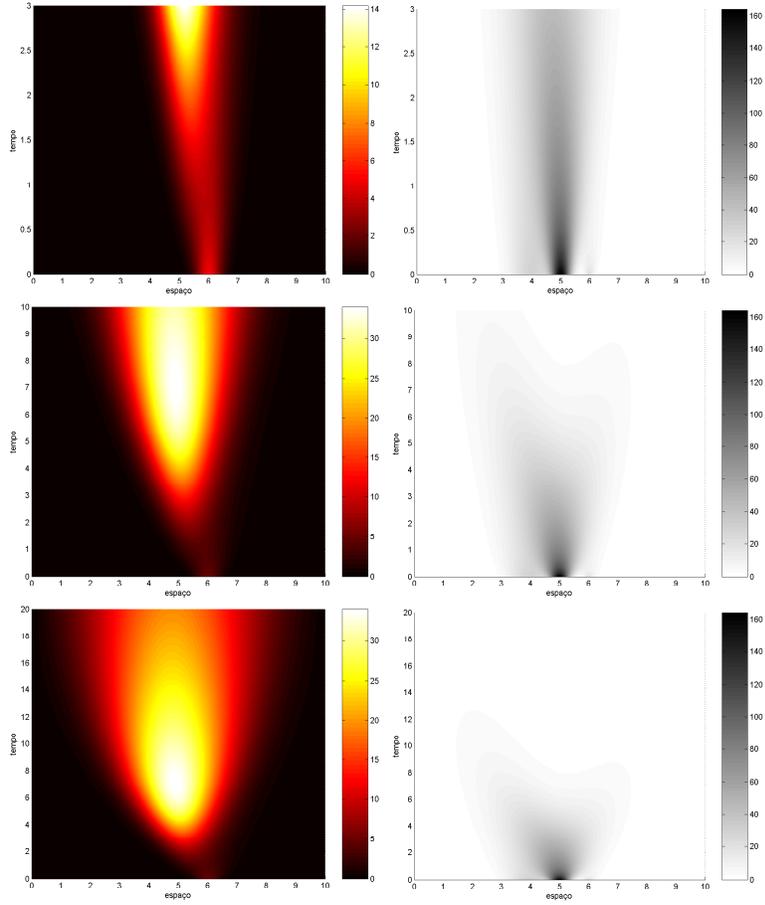
Os resultados numéricos que seguidamente apresentamos foram obtidos utilizando o método (4.18).

Sejam  $\Omega = [0, 10]$ ,  $a = 0.02$ ,  $r = 2.0854 \times 10^{-2}$  e  $D = 0.1$ . As figuras seguintes apresentam a evolução temporal do número de infectados e susceptíveis, respectivamente, para os dados iniciais

$$S_0(x) = 160e^{-10(x-5)^2} + 30e^{-2(x-4)^2} + 20e^{-40(x-6)^2} \quad (4.28)$$

$$I_0(x) = 5e^{-5(x-6)^2} \quad (4.29)$$

e  $h = 0.05$  e  $\Delta x = 0.025$ .



# Bibliografia

- [AFdO<sup>+</sup>04] A. Araujo, J. A. Ferreira, P. de Oliveira, F. Patrício, and P. Rosa, *The use of splitting methods in the numerical simulation of reacting flows*, *Comput. Visual Sci.* **6** (2004), 59–66.
- [ARW95] U. M. Ascher, S. J. Ruuth, and B. T. R. Wetton, *Implicit-explicit methods for the time dependent partial differential equations*, *SIAM J. Numer. Anal.* **32** (1995), no. 3, 797–823.
- [autno] autor, *Existencia e unicidade*, jornal (ano), no. numero, paginas.
- [dig75] digestor, *Approximation methods for nonlinear problems with application to two-point boundary value problems*, *Mathematics of Computation* (1975), 464–474.
- [Hac92] W. Hackbusch, *Elliptic differential equations, theory and numerical treatment*, Springer Series in Computational Mathematics, vol. 18, Springer-Verlag, 1992.
- [Hun92] W. H. Hundsdorfer, *Unconditional convergence of some Crank-Nicolson methods for initial-boundary problems*, *Mathematics of Computation* (1992), no. 58, 35–53.
- [Hun98a] ———, *A note on stability of the Douglas splitting method*, *Mathematics of Computation* (1998), no. 67, 183–190.

- [Hun98b] ———, *Trapezoidal and midpoint splittings for initial-boundary value problems*, *Mathematics of Computation* (1998), no. 67, 1047–1062.
- [Hun03] ———, *Splitting techniques for advection-diffusion-reaction equations*, *Proceedings of the Workshop Modelling and Simulation in Chemical Engineering (Coimbra)* (A. E. Rodrigues, P. de Oliveira, J. A. Castro, J. A. Ferreira, M. C. Coimbra, ed.), June 30 - July 4 2003.
- [Kel75] H. B. Keller, *Approximation methods for nonlinear problems with application to two-point boundary value problems*, *Mathematics of Computation* (1975), 464–474.
- [Lev86] Randall J. Leveque, *Intermediate boundary conditions for time-split methods applied to hyperbolic partial differential equations*, *Mathematics of Computation* **47** (1986), no. 175, 37–54.
- [Lig91] Will Light, *Advances in numerical analysis*, *Nonlinear Partial Differential Equations and Dynamical Systems*, vol. 1, ch. Two Topics in Nonlinear Stability, Clarendon Press, 1991.
- [LM85] J. C. López-Marcos, *Estabilidad de discretizaciones no lineales*, Ph.D. thesis, Universidad de Valladolid, 1985.
- [LMSS] J. C. López-Marcos and J. M. Sanz-Serna, *Stability and convergence in numerical analysis II: The definition of stability in nonlinear problems*, unpublished manuscript.
- [LMSS87] ———, *A definition of stability for nonlinear problems*, *Numerical treatment of differential equations* (K. Strehmel, ed.), *Proceedings of the forth seminar "NUMDIFF-4" held in Halle, 1987*, Leipzig: Teubner-Texte zur Mathematik, 1988, pp. 216–226.

- [LMSS88] ———, *Stability and convergence in numerical analysis III: Linear investigation of nonlinear stability*, *Journal of Numerical Analysis* **8** (1988), 71–84.
- [LV99] D. Lanser and J. G. Verwer, *Analysis of operator splitting for advection-diffusion-reaction problems from air pollution modelling*, *J. Comput. Appl. Math.* **111** (1999), no. 1-2, 201–216.
- [Mar81] G. I. Marchuk, *Methods of numerical mathematics*, Applications of Mathematics, 1981.
- [Mar90] ———, *Handbook of numerical analysis*, ch. Splitting and Alternating Direction Methods, pp. 197–462, North-Holland, 1990.
- [MG80] A. R. Mitchell and D. F. Griffiths, *The finite difference method in partial differential equations*, Wiley, New York, 1980.
- [Mur92] Murray, *problemas de biologia*, Springer Series in Computational Mathematics, vol. 18, Springer-Verlag, 1992.
- [Pao92] C. V. Pao, *Non linear parabolic and elliptic equations*, Plenum Press, 1992.
- [RD56] H. Rachford and J. Douglas, *On the numerical solution of the heat conduction problems in two and three space dimensions*, *Trans. Amer. Math. Soc.* **82** (1956), no. 2.
- [RP55] H. Rachford and D. Peaceman, *The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations*, *SIAM J.* **3** (1955), no. 1.
- [SSV86] J. M. Sanz-Serna and J. G. Verwer, *A study of the recursion  $y_{n+1} = y_n + y_n^m$* , *J. Math. Anal. Appl.* **116** (1986), 456–464.
- [SSVno] ———, *Metodo das linhas*, jornal (ano), no. numero, paginas.

- [Ste73] H. J. Stetter, *Analysis of discretization methods for ordinary differential equations*, Springer, Berlin, 1973.
- [Str68] G. Strang, *On the construction and comparison of difference schemes*, SIAM J. Numer. Anal. (1968), no. 5, 506–517.