

Carla Filipa Bessa Morgado de Jesus

# Método ADI para um modelo de fusão seletiva a *laser*

Dissertação de Mestrado em Matemática, Área de Especialização em Análise Aplicada e Computação, coorientada pela Professora Doutora Ercília Sousa e pela Professora Doutora Sílvia Barbeiro e apresentada ao Departamento de Matemática da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra.

Julho de 2017



UNIVERSIDADE DE COIMBRA



# Método ADI para um modelo de fusão seletiva a laser

**Carla Filipa Bessa Morgado de Jesus**



UNIVERSIDADE DE COIMBRA

Mestrado em Matemática

Master in Mathematics

Dissertação de Mestrado | MSc Dissertation

Julho 2017



## Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todas as pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização desta dissertação.

Às minhas orientadoras, Professora Doutora Ercília Sousa e Professora Doutora Sílvia Barbeiro, o meu sincero agradecimento por todo o tempo disponibilizado, pelos conhecimentos transmitidos e pela dedicação. Pela ajuda, pelo apoio e por me incitarem a ir sempre um pouco mais além.

Ao Departamento de Matemática e a todos os professores que me acompanharam no meu percurso académico até este momento.

Às minhas colegas de curso e amigas, Carolina, Dulce, Inês e Vânia, por toda a amizade, companheirismo, compreensão e bons momentos ao longo destes cinco anos.

À minha família e, especialmente, aos meus pais por me ajudarem neste caminho a todos os níveis. Obrigada por todo o carinho e por acreditarem sempre no meu trabalho, mesmo quando o meu ânimo desvanecia.

Ao Ruben, por todos estes anos de amizade, companheirismo, paciência, carinho e incentivo.

Este trabalho foi realizado no âmbito do projeto PT2020-POCI-SII& DT 3414: additive.MILLING - Add Milling to Additive Manufacturing, cofinanciado pelo FEDER (Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional), no âmbito do programa Portugal 2020, através do COMPETE 2020 (Programa Operacional Competitividade e Internacionalização).

Cofinanciado por:



UNIÃO EUROPEIA  
Fundo Europeu  
de Desenvolvimento Regional



## Resumo

A produção de objetos metálicos em três dimensões usando fusão seletiva a *laser* tem tido importância crescente na fabricação de moldes de pequenas dimensões e geometrias complexas. Esta técnica usa informação digital para produzir um objeto tridimensional a partir da atuação de um *laser* sobre pó metálico e é caracterizada pela adição sucessiva de material camada a camada. Neste trabalho vamos formular e discutir um modelo que traduz o processo de transferência de calor bidimensional durante a fusão seletiva a *laser*.

O modelo que vamos considerar consiste num problema de valor inicial com condição de fronteira associada à equação do calor bidimensional. Como não temos acesso à solução exata de grande parte destes problemas, neste trabalho exploramos um método numérico por forma a obtermos uma solução aproximada do problema. As condições de fronteira para o problema de fusão seletiva a *laser* tomam em consideração os processos de convecção e radiação, dando origem a condições não lineares.

Nesta dissertação vamos descrever como podemos usar o método da direção implícita alternada (ADI) Peaceman-Rachford para resolver o problema sujeito a diferentes condições de fronteira: condições de Dirichlet, condições de fronteira mistas e condições não lineares. Para lidar com a não linearidade da condição de fronteira, que traduz a transferência de calor por radiação e convecção, vamos recorrer ao método iterativo de Newton. De seguida, apresentamos uma análise da convergência para alguns casos particulares. Concluimos que o método ADI com condições de fronteira de Dirichlet é de segunda ordem tanto no tempo como no espaço. Teoricamente, provamos que o método ADI com condições de fronteira mistas tem ordem de convergência pelos menos um no espaço e dois no tempo. Numericamente, verificamos que este tem convergência de segunda ordem no espaço.

Neste trabalho apresentamos também um exemplo do método ADI Peaceman-Rachford em três dimensões.





# Conteúdo

<b>Lista de Figuras</b>	<b>ix</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Equação do calor sujeita a diferentes condições de fronteira</b>	<b>5</b>
2.1 Formulação do problema bidimensional . . . . .	5
2.2 Método numérico . . . . .	6
2.2.1 Método de Crank-Nicolson . . . . .	6
2.2.2 Método ADI Peaceman - Rachford . . . . .	9
2.3 Formulação matricial . . . . .	11
2.3.1 Condições de fronteira de Dirichlet . . . . .	11
2.3.2 Condições de fronteira mistas . . . . .	13
2.3.3 Condição de fronteira não linear . . . . .	14
2.4 Influência das diferentes condições de fronteira na solução . . . . .	17
2.5 Breve abordagem do problema tridimensional . . . . .	21
<b>3 Estudo do método ADI</b>	<b>25</b>
3.1 Conceitos fundamentais . . . . .	25
3.2 Modelo com condições de Dirichlet . . . . .	27
3.2.1 Análise da convergência . . . . .	27
3.2.2 Testes numéricos . . . . .	36
3.3 Modelo com condições de fronteira mistas . . . . .	38
3.3.1 Análise da convergência . . . . .	38
3.3.2 Testes numéricos . . . . .	48
3.4 Modelo com uma condição de fronteira não linear . . . . .	48
3.4.1 Testes numéricos . . . . .	49
<b>4 Conclusão</b>	<b>51</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>53</b>



# Lista de Figuras

1.1	Esquema do processo. . . . .	2
2.1	Domínio espacial discreto, onde ■ denota os pontos usados para definir as condições de fronteira de Dirichlet e ● denota os pontos interiores. . . . .	11
2.2	Domínio espacial discreto com condições de fronteira mistas, onde ■ denota os pontos usados para definir as condições de Dirichlet, ▲ e ▲▲ denotam os pontos utilizados para definir as condições de Neumann e ● denota os pontos interiores. ▲▲ representa pontos fictícios. . . . .	13
2.3	Domínio espacial discreto com uma condição de fronteira não linear (2.32b), com as condições de Dirichlet (2.21a) e com a condição: (a) (2.33a), (b) (2.33b), (c) (2.33c). ■ denota os pontos usados para definir as condições de Dirichlet, ▲ e ▲▲ denotam os pontos utilizados para definir as condições de Neumann e Robin, ● denota os pontos utilizados para definir a condição não linear e ● denota os pontos interiores. ▲▲ representa pontos fictícios. . . . .	15
2.4	Solução do método com diferentes condições de fronteira para $t = 0,05$ : (a) (2.39a), (b) (2.39b), (c) (2.39c). . . . .	18
2.5	Solução do método com diferentes condições de fronteira $t = 0,5$ : (a) (2.39a), (b) (2.39b), (c) (2.39c). . . . .	18
2.6	Solução do método com condições de fronteira (2.39a) no plano $x = 0$ . . . . .	19
2.7	Solução do método com condições de fronteira (2.39b) no plano $x = 0$ . . . . .	19
2.8	Solução do método com condições de fronteira (2.39c) no plano $x = 0$ . . . . .	19
2.9	Solução do método para as várias abordagens em dois momentos temporais no plano $x = 0$ : (a) $t = 0,05$ , (b) $t = 0,5$ . . . . .	20
2.10	Solução do método tridimensional com condições de Dirichlet para vários instantes temporais: (a) $t = 0$ , (b) $t = 0,05$ , (c) $t = 1$ . . . . .	23



# Lista de Tabelas

3.1	Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no tempo para o caso com condições de Dirichlet. . . . .	37
3.2	Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no espaço para o caso com condições de Dirichlet. . . . .	38
3.3	Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no tempo para o caso com condições de fronteira mistas. . . . .	48
3.4	Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no espaço para o caso com condições de fronteira mistas. . . . .	49
3.5	Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no tempo para o caso com uma condição de fronteira não linear. . . . .	50
3.6	Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no espaço para o caso com uma condição de fronteira não linear. . . . .	50



# Capítulo 1

## Introdução

A impressão 3D veio revolucionar o mundo da fabricação industrial, permitindo a produção rápida e personalizada de componentes a custos relativamente reduzidos. Apesar desta técnica ser mais utilizada na produção de objetos plásticos, a impressão 3D de metais tem ganho relevância e popularidade entre as indústrias de fabricação de moldes. As vantagens deste processo são variadas, desde a liberdade do *design* e elevado grau de complexidade ao peso reduzido das peças. As principais desvantagens estão relacionadas com o limite do tamanho dos objetos, uma vez que as peças estão condicionadas pelo tamanho da estrutura que está na base, e com o acabamento superficial de fraca qualidade, que pode requerer um processo subtrativo para finalizar as peças. Existem várias tecnologias de impressão 3D de metais, sendo que aqui vamos centrar-nos apenas na fusão seletiva a *laser*, do inglês *Selective Laser Melting* (SLM).

A fusão seletiva a *laser* é um processo de fabricação aditiva através da fusão a *laser* de pós metálicos. Neste processo, um raio *laser* funde, seletivamente, partículas do pó metálico num metal sólido, por camadas. Estas camadas vão sendo sucessivamente colocadas umas por cima das outras e tratadas pelo *laser*, até se obter a peça tridimensional final. Este processo dá-se dentro de uma câmara com atmosfera controlada com um gás inerte. Por um lado, este processo requer uma grande quantidade de energia, já que tem de derreter o metal, e apenas é utilizado com aço inoxidável, aço ferramenta, alumínio e ligas de cobalto e cromo. Por outro, é dos processos que proporciona a produção de objetos com geometrias mais complexas. Sendo assim, a SLM é utilizada para criar objetos que não sejam densos, como por exemplo, peças com estruturas alveolares ou com canais de refrigeração.

A formulação mais comum do modelo matemático da evolução térmica do processo de SLM, representado na Figura 1.1, consiste num processo de transferência de calor. Consideremos a equação que descreve a condução de calor no meio [21]

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial u}{\partial z} \right) + f \quad \text{em } \Omega, \quad t > 0, \quad (1.1)$$

onde  $u$  representa a temperatura ( $K$ ),  $f$  é o termo fonte, do qual falaremos mais à frente,  $k$  denota a condutividade térmica ( $W m^{-1} K^{-1}$ ),  $c_p$  é o calor específico ( $J kg^{-1} K^{-1}$ ) e  $\rho$  é a densidade do material

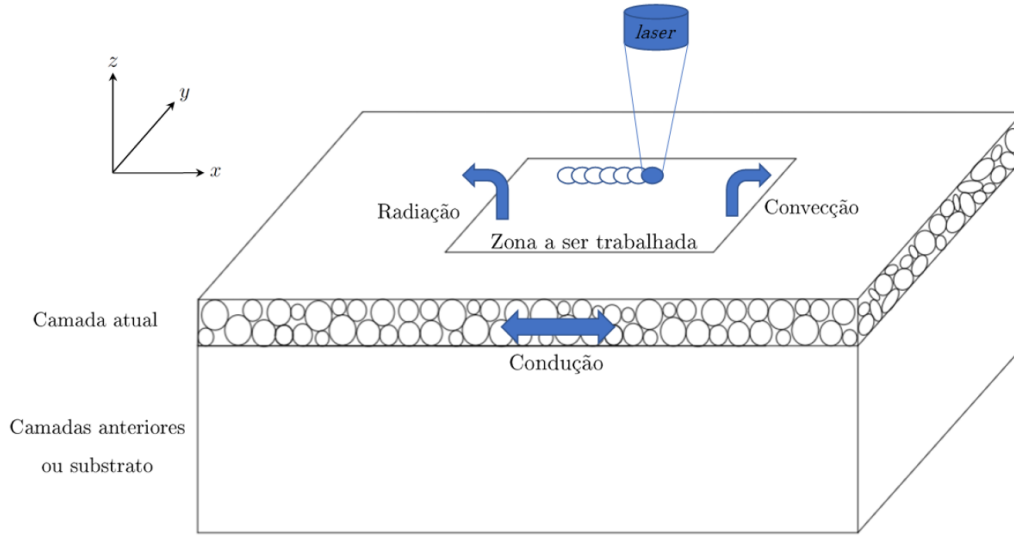


Fig. 1.1 Esquema do processo.

( $kg\ m^{-3}$ ). A densidade do material depende da porosidade,  $\phi$ , da seguinte forma

$$\rho = (1 - \phi)\rho_{denso},$$

onde  $\rho_{denso}$  é a densidade do sólido. A porosidade do metal supõe-se variável entre os valores 0,4 (pó) e 0 (sólido) [9]. Em vez da condutividade térmica, podemos considerar a condutividade térmica efetiva, se quisermos ter em conta factores como a configuração geométrica ou a condutividade térmica das partículas. A condutividade térmica efetiva,  $k_{ef}$ , é dada por [8]

$$\frac{k_{ef}}{k_f} = (1 - \sqrt{1 - \phi}) \left(1 + \frac{\phi k_r}{k_f}\right) + \sqrt{1 - \phi} \left[ \frac{2}{1 - \frac{k_f}{k_s}} \left( \frac{1}{1 - \frac{k_f}{k_s}} \ln \left( \frac{k_s}{k_f} \right) - 1 \right) + \frac{k_r}{k_f} \right],$$

onde  $k_s$  e  $k_f$  são a condutividade do sólido e do gás que envolvem as partículas, respetivamente;  $k_r$  é a condutividade térmica devido à radiação entre as partículas do pó. Por sua vez,  $k_r$  é definida por

$$k_r = 4F\sigma T_p^3 D_p,$$

com  $\sigma$  a constante de Stefan-Boltzmann ( $5,67 \times 10^{-8}\ W\ m^{-2}\ K^{-4}$ ),  $D_p$  o diâmetro médio das partículas do pó ( $m$ ),  $T_p$  a temperatura da partícula ( $K$ ) e  $F$  o fator de vista. Este fator representa a proporção de radiação transferida entre as partículas.

O domínio  $\Omega$  que vamos considerar é  $(a_1, a_2) \times (a_3, a_4) \times (a_5, a_6)$ , que simula um bloco de pó. Contudo, como vamos resolver o problema camada a camada, consideramos os subdomínios  $\Omega_i$ , onde  $i = 1, \dots, l$ , denota o número da camada. Estes subdomínios são dados por  $\Omega_i = (a_1, a_2) \times (a_3, a_4) \times (z_{i-1}, z_i)$ , onde  $z_i = z_{i-1} + \Delta z_i$ ,  $z_0 = a_5$  e  $z_l = a_6$ . Relativamente ao tempo, consideramos  $t_0^i$  e  $t_f^i$  os instantes inicial e final, respetivamente, entre os quais se modela a transferência de calor na camada  $i$ .



Falta ainda falar de  $f$ , o termo fonte, que representa o fluxo de calor proveniente do *laser*. A abordagem mais comum para a distribuição de energia do *laser* é considerar uma função Gaussiana [20], dada por

$$f(x, y, z, t) = \frac{2AP}{\pi\omega^2\delta} \exp\left(-2\frac{(x-x_0-vt)^2 + (y-y_0)^2}{\omega^2}\right) \exp\left(\frac{|z-z_i|}{\delta}\right),$$

onde  $\omega$  é o raio do feixe ( $m$ ), correspondente à distância entre o centro do feixe e o ponto no qual a irradiância do *laser* decresce para  $1/e^2$  da irradiância no ponto do centro do feixe;  $P$  é a potência do *laser* ( $W$ );  $A$  é a absorção do pó, que pode ser calculada se for conhecida a refletividade do material,  $\lambda$ , fazendo  $A = 1 - \lambda$  [9];  $\delta$  é a profundidade de penetração do raio do *laser* no pó ( $m$ );  $(x_0, y_0, z_i)$  é o ponto onde o *laser* começa a atuar, continuando depois na direção positiva do eixo dos  $x$ , com velocidade constante  $v$  ( $m s^{-1}$ ), por um período de tempo  $t$  ( $s$ ) [4]. Na literatura, geralmente é considerado um raio *laser* superficial [3, 4, 9], pelo que a expressão mais utilizada para o termo fonte é

$$f(x, y, z, t) = \frac{2AP}{\pi\omega^2} \exp\left(-2\frac{(x-x_0-vt)^2 + (y-y_0)^2}{\omega^2}\right).$$

O efeito do *laser* pode ser incluído na condição de fronteira relativa à superfície superior em vez de ser considerado como termo fonte [11].

De seguida vamos discutir as condições iniciais e as condições de fronteira do modelo. Como cada camada de pó, quando colocada, está toda à mesma temperatura,  $u_0$ , consideramos a condição inicial

$$u(x, y, z, t_0^i) = u_0, \quad (x, y, z) \in \Omega_i. \quad (1.2)$$

Para além disso, vamos considerar que os limites da área do pó que vai ser trabalhada estão suficientemente longe dos limites do domínio e da estrutura. Por isso, para as fronteiras de  $\Omega_i$  paralelas aos eixos  $Oy$  e  $Ox$  consideramos as condições de fronteira de Dirichlet,

$$\begin{aligned} u(a_1, y, z, t) = u(a_2, y, z, t) = u_0, \quad y \in (a_3, a_4), \quad z \in (z_{i-1}, z_i), \quad t \in (t_0^i, t_f^i], \\ u(x, a_3, z, t) = u(x, a_4, z, t) = u_0, \quad x \in (a_1, a_2), \quad z \in (z_{i-1}, z_i), \quad t \in (t_0^i, t_f^i]. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Caso a área a ser trabalhada fosse próxima da fronteira do domínio, teria interesse considerar condições de Robin [9, 20].

Vamos agora discutir o que acontece nas condições de fronteira na direção de  $z$ , ou seja, em  $z = z_{i-1}$  e  $z = z_i$ . Para as condições de fronteira no plano inferior, ou seja,  $z = z_{i-1}$ , existem várias abordagens na literatura. Neste trabalho vamos discutir três delas.

Em [5] considera-se, para  $(x, y) \in (a_1, a_2) \times (a_3, a_4)$  e  $t \in (t_0^i, t_f^i]$ , a condição

$$\frac{\partial u}{\partial z}(x, y, z_{i-1}, t) = 0, \quad (1.4a)$$

que significa que não há perda de calor pela parte inferior, devido a ser assumido que a camada de pó é muito espessa para que tal aconteça. Para o caso onde a condutividade do substrato é muito elevada, em [8] é sugerido considerar a condição de fronteira

$$u(x, y, z_{i-1}, t) = u_{inf}(x, y, t). \quad (1.4b)$$

A terceira abordagem [11, 20] sugere que se considere a condição

$$-k \frac{\partial u}{\partial z}(x, y, z_{i-1}, t) = h_{i-1} (u_{inf}(x, y, z_{i-1}, t_f^{i-1}) - u(x, y, z_{i-1}, t)), \quad (1.4c)$$

onde  $u_{inf}$  é a temperatura da camada anterior à superfície e  $h_{i-1}$  ( $W m^{-1} K^{-1}$ ) é o coeficiente de transferência de calor. Esta expressão é obtida à custa da relação de Newton-Richmann [6]. Neste caso a relação (1.4c) indica que o fluxo de calor através da fronteira de baixo é proporcional à diferença entre a temperatura da camada anterior e a temperatura da camada atual em  $z = z_{i-1}$ . Aqui  $h_{i-1}$  pode ser dependente das coordenadas  $x, y, z$ , já que na camada inferior podemos ter diferentes fases do metal e, conseqüentemente, diferentes coeficientes, dependendo da posição.

Vamos agora ver o que acontece no plano superior  $z = z_i$ . Na superfície de cada camada temos o gás e aqui, para além da convecção, também é considerada a radiação, pelo que para a condição de fronteira em  $z = z_i$  temos,

$$-k \frac{\partial u}{\partial z}(x, y, z_i, t) = \varepsilon \sigma (u^4(x, y, z_i, t) - u_{sup}^4(x, y, z_i, t)) + h_{sup} (u(x, y, z_i, t) - u_{sup}(x, y, z_i, t)),$$

onde  $u_{sup}$  é a temperatura do gás,  $\varepsilon$  é a emissividade do pó e  $h_{sup}$  é o coeficiente que caracteriza a transferência de calor por convecção, neste caso entre a camada e o gás. Este tipo de condição de fronteira é muito frequente quando se pretende analisar a transferência de calor simultaneamente por condução, convecção e radiação [15].

Outras questões tais como a mudança da condutividade térmica [5] ou do calor específico [3] aliadas à mudança de fase do material [7], a distorção [2] ou o movimento do metal fundido [19] não serão aqui consideradas. Para introduzir estes fatores, seria necessário considerar expressões definidas por ramos ou ainda outras equações associadas nomeadamente à mudança de fase.

De modo a estudarmos o método numérico mais adequado à resolução do problema descrito, no Capítulo 2 vamos considerar o problema de condução do calor em duas dimensões no espaço com várias condições de fronteira: primeiro consideramos condições de Dirichlet em toda a fronteira, depois consideramos condições de fronteira mistas e por fim incluímos uma condição não linear. Para resolver o problema bidimensional, consideramos o método da direção implícita alternada, do inglês *Alternating Direction Implicit* (ADI) Peaceman-Rachford. Apresentaremos de seguida a formulação matricial do método para os casos descritos anteriormente. Depois exibimos algumas simulações com o intuito de analisar o efeito que as diferentes condições fronteira têm na solução. No final deste capítulo apresentamos uma breve abordagem ao método ADI em três dimensões.

No Capítulo 3 faremos o estudo do método ADI, sujeito a condições de fronteira de Dirichlet e a condições de fronteira mistas. Em cada um dos casos, vamos começar por fazer uma análise da convergência do método e ainda apresentar alguns testes numéricos. O caso em que temos uma condição não linear será discutido essencialmente com base em resultados de testes numéricos.

## Capítulo 2

# Equação do calor sujeita a diferentes condições de fronteira

Neste capítulo, vamos discutir a equação do calor bidimensional. Consideramos vários tipos de condições de fronteira tais como condições de Dirichlet, Neumann, Robin e uma condição não linear. Começamos por descrever uma discretização com diferenças finitas baseada no método de Crank-Nicolson, passando depois ao método da direção implícita alternada.

### 2.1 Formulação do problema bidimensional

Consideremos a equação (1.1) em duas dimensões, num domínio retangular  $\Omega = (a, b) \times (c, d)$ , no intervalo de tempo  $(0, T]$  e com  $c_p$ ,  $\rho$  e  $k$  constantes, isto é,

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + k \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t) + f(x, z, t) \quad \text{em } \Omega, \quad t \in (0, T], \quad (2.1)$$

com condição inicial

$$u(x, z, 0) = u_0(x, z), \quad (x, z) \in \Omega. \quad (2.2)$$

Descrevemos em seguida as condições de fronteira. Nos planos  $x = a$  e  $x = b$  consideremos condições de Dirichlet, ou seja,

$$u(a, z, t) = g_a(z, t), \quad u(b, z, t) = g_b(z, t), \quad z \in (c, d), \quad t \in (0, T]. \quad (2.3)$$

No plano  $z = c$  vamos apresentar três abordagens diferentes, de forma análoga ao que já foi descrito na introdução para o problema tridimensional. As três abordagens dizem respeito às condições de fronteira distintas que se seguem:

$$u(x, c, t) = u_{inf}(x, t), \quad x \in (a, b) \quad t \in (0, T], \quad \text{ou} \quad (2.4a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}(x, c, t) = 0, \quad x \in (a, b) \quad t \in (0, T], \quad \text{ou} \quad (2.4b)$$

$$-k \frac{\partial u}{\partial z}(x, c, t) = h(u_{inf}(x, t) - u(x, c, t)), \quad x \in (a, b) \quad t \in (0, T]. \quad (2.4c)$$

Relembramos que (2.4a) significa que o substrato tem condutividade térmica muito elevada, a condição (2.4b) diz-nos que foi considerada uma camada muito espessa por forma a não existir perda de calor pela fronteira  $z = c$  e a condição (2.4c) indica que a perda de calor por esta parte da fronteira é proporcional à diferença de temperatura entre a camada que está a ser trabalhada e o substrato.

Em  $z = d$ , que corresponde ao plano onde incide o *laser* na camada, consideramos

$$-k \frac{\partial u}{\partial z}(x, d, t) = \varepsilon \sigma (u^4(x, d, t) - u_{sup}^4(x, d, t)) + h_{sup}(u(x, d, t) - u_{sup}(x, d, t)). \quad (2.5)$$

Note-se que esta condição de fronteira é uma condição não linear, o que dificulta a resolução do problema.

O método numérico que vamos apresentar para a resolução deste problema é um método ADI denominado método ADI Peaceman-Rachford. Começemos por considerar o problema bidimensional com  $c_p$ ,  $\rho$  e  $k$  iguais a um em (2.1). Temos assim a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t) + f(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega, \quad t \in (0, T], \quad (2.6)$$

com condição inicial (2.2) e condições de fronteira dadas por (2.3) e, por forma a incluir as três alternativas para a condição de fronteira descritas em (2.4), definamos para  $z = c$  a condição genérica

$$k_1 \frac{\partial u}{\partial z}(x, c, t) + k_2 u(x, c, t) = g_c(x, t). \quad (2.7)$$

Observe-se que quando  $(k_1, k_2) = (0, 1)$  estamos perante uma condição de Dirichlet, onde está incluída a condição (2.4a), quando  $(k_1, k_2) = (1, 0)$  e  $g_c(x, t) = 0$  estamos perante a condição de Neumann (2.4b) e quando  $(k_1, k_2) = (-1, h)$  estamos perante a condição (2.4c). Em  $z = d$ , consideramos também o caso mais geral dado por

$$k_3 \frac{\partial u}{\partial z}(x, d, t) + k_4 u(x, d, t) = g_d(x, t, u). \quad (2.8)$$

Os casos em que  $(k_3, k_4) \in \{(1, 0), (0, 1)\}$  e  $g_d$  não depende de  $u$  são análogos ao que foi visto para (2.7). Quando  $(k_3, k_4) = (-1, -h_{sup})$  e  $g_d(x, t, u) = \varepsilon \sigma (u^4(x, d, t) - u_{sup}^4(x, d, t)) - h_{sup} u_{sup}(x, d, t)$  estamos perante a condição não linear (2.5).

## 2.2 Método numérico

Nesta secção começemos por apresentar o método de Crank-Nicolson para a discretização temporal. Devido às suas limitações em termos de eficiência computacional para problemas de dimensões superiores a um, sugerimos em seguida um método ADI, obtido a partir do método de Crank-Nicolson.

### 2.2.1 Método de Crank-Nicolson

Consideremos a discretização espacial

$$x_n = a + nh_x, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad z_l = c + lh_z, \quad l = 0, 1, \dots, L,$$

onde  $h_x = (b - a)/N$  e  $h_z = (d - c)/L$  são os espaçamentos da malha relativos às variáveis  $x$  e  $z$ , respetivamente. Seja a discretização temporal definida por

$$t^m = m\Delta t, \quad m = 0, 1, \dots, M,$$

onde  $\Delta t = T/M$ .

Vamos definir o domínio discreto espacial por

$$\Omega_h = \{(x_n, z_l) : n = 1, \dots, N-1, \quad l = 1, \dots, L-1\},$$

com o conjunto dos pontos discretos na fronteira definido por

$$\begin{aligned} \partial\Omega_h = & \{(x_0, z_l) : l = 0, \dots, L\} \cup \{(x_N, z_l) : l = 0, \dots, L\} \cup \{(x_n, z_0) : n = 0, \dots, N\} \\ & \cup \{(x_n, z_L) : n = 0, \dots, N\}. \end{aligned}$$

Denotemos ainda  $\bar{\Omega}_h = \Omega_h \cup \partial\Omega_h$ .

Definamos alguns operadores diferenciais discretos que serão necessários. Denotando por  $w_{n,l}^m = w(x_n, z_l, t^m)$ , os operadores centrados de segunda ordem relativos às variáveis  $x$  e  $z$ , são respetivamente definidos por

$$\delta_x^2 w_{n,l}^m = w_{n+1,l}^m - 2w_{n,l}^m + w_{n-1,l}^m, \quad \delta_z^2 w_{n,l}^m = w_{n,l+1}^m - 2w_{n,l}^m + w_{n,l-1}^m. \quad (2.9)$$

O método de Crank-Nicolson é utilizado frequentemente para a discretização de problemas de difusão que evoluem no tempo, por ser um método incondicionalmente estável (ao contrário, por exemplo, do método de Euler explícito) e por ter convergência de segunda ordem no tempo [10]. Seja  $U_{n,l}^m$  a aproximação de  $u(x_n, z_l, t^m)$ . A discretização da equação (2.6) para  $(x_n, z_l) \in \Omega_h$  e  $m = 0, \dots, M-1$  é dada por

$$\frac{U_{n,l}^{m+1} - U_{n,l}^m}{\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} (U_{n,l}^{m+1} + U_{n,l}^m) + \frac{1}{2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} (U_{n,l}^{m+1} + U_{n,l}^m) + f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.10)$$

com  $f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = f(x_n, z_l, t^{m+\frac{1}{2}})$ , onde  $t^{m+\frac{1}{2}} = (t^{m+1} + t^m)/2$ .

Para dar uma ideia do esforço computacional exigido pelo método de Crank-Nicolson, vamos escrever o método na forma matricial. Completemos (2.6) com condição inicial e condições de Dirichlet em todo o domínio, cuja discretização é dada por

$$\begin{aligned} U_{n,l}^0 &= (u_0)_{n,l}, \quad (x_n, z_l) \in \Omega_h, \\ U_{0,l}^m &= (g_a)_l^m, \quad U_{N,l}^m = (g_b)_l^m, \quad l = 0, 1, \dots, L, \quad m = 1, \dots, M, \\ U_{n,0}^m &= (g_c)_n^m, \quad U_{n,L}^m = (g_d)_n^m, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad m = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Usando a notação  $r_x = \Delta t/h_x^2$  e  $r_z = \Delta t/h_z^2$ , o método numérico (2.10) pode ser reescrito na forma

$$\begin{aligned} (1 + r_x + r_z)U_{n,l}^{m+1} - \frac{r_x}{2}(U_{n+1,l}^{m+1} + U_{n-1,l}^{m+1}) - \frac{r_z}{2}(U_{n,l+1}^{m+1} + U_{n,l-1}^{m+1}) = \\ = (1 - r_x - r_z)U_{n,l}^m + \frac{r_x}{2}(U_{n+1,l}^m + U_{n-1,l}^m) + \frac{r_z}{2}(U_{n,l+1}^m + U_{n,l-1}^m) + \Delta t f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Para descrever o método na forma matricial, necessitamos de introduzir a seguinte notação. Sejam

$$U_{:l}^{m+1} = \begin{bmatrix} U_{1,l}^{m+1} & U_{2,l}^{m+1} & \cdots & U_{N-2,l}^{m+1} & U_{N-1,l}^{m+1} \end{bmatrix}^T$$

os  $L - 1$  vetores da solução no instante de tempo  $t^{m+1}$  que queremos determinar e

$$f_{:l}^{m+\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} f_{1,l}^{m+\frac{1}{2}} & f_{2,l}^{m+\frac{1}{2}} & \cdots & f_{N-2,l}^{m+\frac{1}{2}} & f_{N-1,l}^{m+\frac{1}{2}} \end{bmatrix}^T$$

os  $L - 1$  vetores do termo fonte no instante  $t^{m+\frac{1}{2}}$ . Sejam ainda

$$A = \begin{bmatrix} -r_x - r_z & \frac{r_x}{2} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \frac{r_x}{2} & -r_x - r_z & \frac{r_x}{2} & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{r_x}{2} & -r_x - r_z & \frac{r_x}{2} \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & \frac{r_x}{2} & -r_x - r_z \end{bmatrix}, \quad (b_x)_l^{m,m+1} = \begin{bmatrix} (g_a)_l^{m+1} + (g_a)_l^m \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (g_b)_l^{m+1} + (g_b)_l^m \end{bmatrix},$$

onde  $A$  é uma matriz de dimensão  $(N - 1) \times (N - 1)$  e  $(b_x)_l^{m,m+1}$  um vetor de dimensão  $N - 1$ . Para obtermos  $U_{n,l}^{m+1}$ , temos de resolver (2.12), que pode ser escrito na forma matricial como

$$(I - A)U_{:l}^{m+1} - \frac{r_z}{2}U_{:l+1}^{m+1} - \frac{r_z}{2}U_{:l-1}^{m+1} = (I + A)U_{:l}^m + \frac{r_z}{2}U_{:l+1}^m + \frac{r_z}{2}U_{:l-1}^m + \frac{r_x}{2}(b_x)_l^{m,m+1} + \Delta t f_{:l}^{m+\frac{1}{2}},$$

para  $l = 1, \dots, L - 1$ , com  $I$  a denotar a matriz identidade  $(N - 1) \times (N - 1)$ . Como, pelas condições de fronteira, sabemos que

$$U_{n,0}^m = (g_c)_n^m, \quad U_{n,L}^m = (g_d)_n^m, \quad n = 0, \dots, N, \quad m = 1, \dots, M,$$

definindo

$$(g_c)^{m+1} = \begin{bmatrix} (g_c)_1^{m+1} & (g_c)_2^{m+1} & \cdots & (g_c)_{N-2}^{m+1} & (g_c)_{N-1}^{m+1} \end{bmatrix}^T,$$

$$(g_d)^{m+1} = \begin{bmatrix} (g_d)_1^{m+1} & (g_d)_2^{m+1} & \cdots & (g_d)_{N-2}^{m+1} & (g_d)_{N-1}^{m+1} \end{bmatrix}^T,$$

$$U^{m+1} = \begin{bmatrix} U_{1,1}^{m+1} & U_{2,1}^{m+1} & \cdots & U_{N-1,1}^{m+1} & \cdots & U_{1,L-1}^{m+1} & U_{2,L-1}^{m+1} & \cdots & U_{N-1,L-1}^{m+1} \end{bmatrix}^T,$$

$$f^{m+\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} f_{1,1}^{m+\frac{1}{2}} & f_{2,1}^{m+\frac{1}{2}} & \cdots & f_{N-1,1}^{m+\frac{1}{2}} & \cdots & f_{1,L-1}^{m+\frac{1}{2}} & f_{2,L-1}^{m+\frac{1}{2}} & \cdots & f_{N-1,L-1}^{m+\frac{1}{2}} \end{bmatrix}^T$$

e ainda

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} A & \frac{r_z}{2}I & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \frac{r_z}{2}I & A & \frac{r_z}{2}I & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{r_z}{2}I & A & \frac{r_z}{2}I \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & \frac{r_z}{2}I & A \end{bmatrix}, \quad \mathcal{G}^{m,m+1} = \begin{bmatrix} \frac{r_z}{2}(g_c)^{m+1} + \frac{r_z}{2}(g_c)^m + \frac{r_x}{2}(b_x)_1^{m,m+1} \\ \frac{r_x}{2}(b_x)_2^{m,m+1} \\ \vdots \\ \frac{r_x}{2}(b_x)_{L-2}^{m,m+1} \\ \frac{r_z}{2}(g_d)^{m+1} + \frac{r_z}{2}(g_d)^m + \frac{r_x}{2}(b_x)_{L-1}^{m,m+1} \end{bmatrix},$$

com  $\mathbf{0}$  a matriz de dimensão  $(N-1) \times (N-1)$  cujos elementos são todos nulos, podemos escrever o método de Crank-Nicolson matricialmente na forma

$$(\mathcal{I} - \mathcal{A})U^{m+1} = (\mathcal{I} - \mathcal{A})U^m + \mathcal{G}^{m,m+1} + \Delta t f^{m+\frac{1}{2}},$$

onde  $\mathcal{I}$  denota agora a matriz identidade  $[(N-1) \times (L-1)] \times [(N-1) \times (L-1)]$ . Este método tem algumas limitações computacionais relacionadas com o número de cálculos necessários para resolver este sistema [1, 12], pelo que esta abordagem tem de ser melhorada. Para isso vamos recorrer ao método da direção implícita alternada, com o objetivo de melhorar a eficiência do método computacionalmente.

### 2.2.2 Método ADI Peaceman - Rachford

Vamos agora deduzir o método ADI Peaceman-Rachford. Neste método ADI, os cálculos são divididos em dois passos quando temos duas dimensões no espaço. Mais concretamente, vamos aplicar, alternadamente, um método implícito numa direção e um método explícito na outra direção, produzindo uma solução intermédia. Para construir o método da direção implícita alternada, vamos partir do método de Crank-Nicolson. Em primeiro lugar, reescrevamos (2.12) da seguinte forma

$$\left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^{m+1} = \left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m + \Delta t f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}. \quad (2.13)$$

Se fatorizarmos o lado esquerdo da equação (2.13) na forma

$$\left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^{m+1}$$

estamos a adicionar o termo

$$\frac{r_x r_z}{4} \delta_x^2 \delta_z^2 U_{n,l}^{m+1} = \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} U_{n,l}^{m+1}. \quad (2.14)$$

Este termo aproxima  $(\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 u_{n,l}^{m+1}) / (4h_x^2 h_z^2)$ , cujo desenvolvimento resulta em

$$\frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial x^2} \right)_{n,l}^{m+1} + \mathcal{O}(\Delta t^2 h_x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2 h_z^2).$$

Como a equação (2.13) deve ser dividida por  $\Delta t$  para estar na forma da equação (2.10), ao adicionarmos o termo (2.14) a (2.13) estamos a baixar a ordem do método de Crank-Nicolson relativamente ao tempo. De modo análogo, consideremos a fatorização para a primeira parcela do segundo membro de (2.13) dada por

$$\left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m.$$

Deste modo estamos a adicionar

$$\frac{r_x r_z}{4} \delta_x^2 \delta_z^2 U_{n,l}^m = \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} U_{n,l}^m \quad (2.15)$$

ao segundo membro de (2.13). Considerando a introdução do termo (2.14) do lado esquerdo de (2.13) e a introdução do termo (2.15) do lado direito da mesma equação, verificamos que é equivalente a somarmos, no primeiro membro de (2.13) o termo

$$\frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} (U_{n,l}^{m+1} - U_{n,l}^m). \quad (2.16)$$

Por sua vez, (2.16) aproxima  $\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 (u_{n,l}^{m+1} - u_{n,l}^m) / (4h_x^2 h_z^2)$  e fazendo a sua expansão de Taylor em torno do ponto  $(x_n, z_l, t^m)$  e dividindo por  $\Delta t$ , concluímos que

$$\frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} \frac{u_{n,l}^{m+1} - u_{n,l}^m}{\Delta t} = \frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\partial^5 u}{\partial t \partial z^2 \partial x^2} \right)_{n,l}^m + \mathcal{O}(\Delta t^2 h_x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2 h_z^2) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (2.17)$$

Como o método de Crank-Nicolson (2.10) converge com erro  $\mathcal{O}(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2)$ , se adicionarmos (2.16) ao lado esquerdo de (2.13), não alteramos a ordem do método. Consideramos, então, o método ADI

$$\left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^{m+1} = \left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m + \Delta t f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.18)$$

que é equivalente a

$$\frac{U_{n,l}^{m+1} - U_{n,l}^m}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} (U_{n,l}^{m+1} + U_{n,l}^m) - \frac{1}{2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} (U_{n,l}^{m+1} + U_{n,l}^m) + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2}{h_x^2} \frac{\delta_z^2}{h_z^2} \frac{U_{n,l}^{m+1} - U_{n,l}^m}{\Delta t} = f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}. \quad (2.19)$$

Para o método ADI Peaceman-Rachford, os dois passos mencionados no início desta secção são implementados da seguinte maneira

$$\left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right)^* U_{n,l} = \left(1 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m + \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.20a)$$

$$\left(1 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^{m+1} = \left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right)^* U_{n,l} + \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}. \quad (2.20b)$$

No primeiro passo, em que aplicamos um método implícito na direção  $x$  e explícito na direção  $z$ , precisamos de resolver  $(L-1)$  sistemas tridiagonais de dimensão  $(N-1) \times (N-1)$ , o que pode ser feito em  $\mathcal{O}(NL)$  operações [12]. O segundo passo, em que aplicamos um método implícito na direção  $z$  e um método explícito na direção  $x$ , também pode ser implementado em  $\mathcal{O}(NL)$  operações. Sendo assim, o total de operações deste método é  $\mathcal{O}(NL)$ , para cada passo temporal.

Falta apenas mostrar que (2.20) é equivalente a (2.18). Aplicando o operador  $(1 - r_x \delta_x^2 / 2)$  a (2.20b) obtemos

$$\left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^{m+1} = \left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left[ \left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right)^* U_{n,l} + \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} \right].$$

O segundo membro, pela comutatividade dos operadores, pode escrever-se na forma

$$\left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right)^* U_{n,l} + \left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}$$



que, usando (2.20a), é igual a

$$\left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m + \left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}},$$

isto é,

$$\left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m + \Delta t f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}.$$

Nas próximas secções apresentamos o problema sujeito a várias condições de fronteira, uma vez que estas afetam consideravelmente a estrutura do método.

## 2.3 Formulação matricial

Vamos apresentar a formulação matricial do método ADI sujeito a várias condições de fronteira.

### 2.3.1 Condições de fronteira de Dirichlet

Nesta secção vamos assumir condições de Dirichlet em toda a fronteira do domínio, ou seja, temos as seguintes condições

$$U_{0,l}^{m+1} = (g_a)_l^{m+1} \quad \text{e} \quad U_{N,l}^{m+1} = (g_b)_l^{m+1}, \quad l = 0, 1, \dots, L, \quad m = 1, \dots, M-1, \quad (2.21a)$$

$$U_{n,0}^{m+1} = (g_c)_n^{m+1} \quad \text{e} \quad U_{n,L}^{m+1} = (g_d)_n^{m+1}, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad m = 1, \dots, M-1, \quad (2.21b)$$

que envolve os pontos assinalados na Figura 2.1.

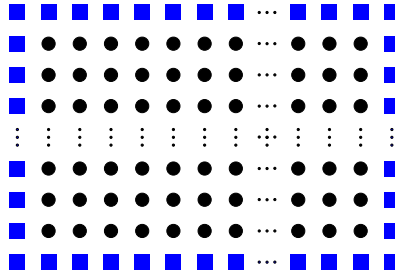


Fig. 2.1 Domínio espacial discreto, onde ■ denota os pontos usados para definir as condições de fronteira de Dirichlet e ● denota os pontos interiores.

De (2.20b) obtemos

$$U_{n,l}^{m+1} - \frac{r_z}{2} \left[ U_{n,l+1}^{m+1} - 2U_{n,l}^{m+1} + U_{n,l-1}^{m+1} \right] = U_{n,l}^* + \frac{r_x}{2} \left[ U_{n+1,l}^* - 2U_{n,l}^* + U_{n-1,l}^* \right] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.22)$$

para  $n = 1, \dots, N-1$  e  $l = 1, \dots, L-1$ . Para determinar os valores  $U_{n,l}^{m+1}$  para  $n = 1, \dots, N-1$  e  $l = 1, \dots, L-1$ , precisamos de calcular  $U_{n,l}^*$  para  $n = 0, 1, \dots, N$  e  $l = 1, \dots, L-1$ . Desenvolvendo (2.20a), temos

$$U_{n,l}^* - \frac{r_x}{2} \left[ U_{n+1,l}^* - 2U_{n,l}^* + U_{n-1,l}^* \right] = U_{n,l}^m + \frac{r_z}{2} \left[ U_{n,l+1}^m - 2U_{n,l}^m + U_{n,l-1}^m \right] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.23)$$

para  $n = 1, \dots, N-1$  e  $l = 1, \dots, L-1$ . Para  $n = 0$  e  $n = N$  vamos utilizar (2.20), reescrevendo as equações na forma equivalente

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right)^* U_{n,l} &= \left(1 + \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^m + \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \\ \left(1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2\right)^* U_{n,l} &= \left(1 - \frac{r_z}{2} \delta_z^2\right) U_{n,l}^{m+1} - \frac{\Delta t}{2} f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

e, somando, vem

$$U_{n,l}^* = \frac{1}{2} \left( U_{n,l}^m + U_{n,l}^{m+1} \right) + \frac{r_z}{4} \delta_z^2 \left( U_{n,l}^m - U_{n,l}^{m+1} \right). \quad (2.24)$$

Para  $n = 0$  temos então, para  $l = 1, \dots, L-1$

$$\begin{aligned} U_{0,l}^* &= \frac{1}{2} \left( U_{0,l}^m + U_{0,l}^{m+1} \right) + \frac{r_z}{4} \delta_z^2 \left( U_{0,l}^m - U_{0,l}^{m+1} \right) = \frac{1}{2} \left( (g_a)_l^m + (g_a)_l^{m+1} \right) + \frac{r_z}{4} \delta_z^2 \left( (g_a)_l^m - (g_a)_l^{m+1} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( (g_a)_l^m + (g_a)_l^{m+1} \right) + \frac{r_z}{4} \left( \left[ (g_a)_{l+1}^m - 2(g_a)_l^m + (g_a)_{l-1}^m \right] - \left[ (g_a)_{l+1}^{m+1} - 2(g_a)_l^{m+1} + (g_a)_{l-1}^{m+1} \right] \right). \end{aligned}$$

Denotamos por  $(\mathcal{G}_a)_l^{m,m+1}$  o lado direito da igualdade anterior. De forma análoga,

$$U_{N,l}^* = \frac{1}{2} \left( (g_b)_l^m + (g_b)_l^{m+1} \right) + \frac{r_z}{4} \left( \left[ (g_b)_{l+1}^m - 2(g_b)_l^m + (g_b)_{l-1}^m \right] - \left[ (g_b)_{l+1}^{m+1} - 2(g_b)_l^{m+1} + (g_b)_{l-1}^{m+1} \right] \right)$$

e denotamos o segundo membro da igualdade anterior por  $(\mathcal{G}_b)_l^{m,m+1}$ .

Para representar (2.23) na forma matricial, denotemos os  $L-1$  vetores relativos à solução intermédia por

$$U_{:,l}^* = \left[ U_{1,l}^* \quad U_{2,l}^* \quad \dots \quad U_{N-2,l}^* \quad U_{N-1,l}^* \right]^T.$$

Seja ainda  $A$ , a matriz tridiagonal  $(N-1) \times (N-1)$  associada ao operador  $\delta_x^2$ , e seja  $(b_x)_l^{m,m+1}$  um vetor de dimensão  $N-1$ , dados respetivamente por

$$A = \begin{bmatrix} -r_x & \frac{r_x}{2} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \frac{r_x}{2} & -r_x & \frac{r_x}{2} & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{r_x}{2} & -r_x & \frac{r_x}{2} \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & \frac{r_x}{2} & -r_x \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad (b_x)_l^{m,m+1} = \begin{bmatrix} (\mathcal{G}_a)_l^{m,m+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (\mathcal{G}_b)_l^{m,m+1} \end{bmatrix}. \quad (2.25)$$

Queremos, resolver o sistema tridiagonal  $(N-1) \times (N-1)$  dado por

$$(I - A) U_{:,l}^* = U_{:,l}^m + \frac{r_z}{2} \left[ U_{:,l+1}^m - 2U_{:,l}^m + U_{:,l-1}^m \right] + \frac{r_x}{2} (b_x)_l^{m,m+1} + \frac{\Delta t}{2} f_{:,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.26)$$

em que  $I$  é a matriz identidade  $(N-1) \times (N-1)$ .

Para representar (2.22) na forma matricial, introduzimos a seguinte notação

$$\begin{aligned} U_n^{m+1} &= \left[ U_{n,1}^{m+1} \quad U_{n,2}^{m+1} \quad \dots \quad U_{n,L-2}^{m+1} \quad U_{n,L-1}^{m+1} \right]^T, \\ f_n^{m+\frac{1}{2}} &= \left[ f_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} \quad f_{n,2}^{m+\frac{1}{2}} \quad \dots \quad f_{n,L-2}^{m+\frac{1}{2}} \quad f_{n,L-1}^{m+\frac{1}{2}} \right]^T \end{aligned}$$

e

$$\mathring{U}_n = \left[ \mathring{U}_{n,1} \quad \mathring{U}_{n,2} \quad \dots \quad \mathring{U}_{n,L-2} \quad \mathring{U}_{n,L-1} \right]^T.$$

Seja  $B$  a matriz tridiagonal  $(L-1) \times (L-1)$  associada ao operador  $\delta_z^2$  e, tendo em conta (2.21b), seja  $(b_z)_n^{m+1}$  um vetor de dimensão  $N-1$  tais que

$$B = \begin{bmatrix} -r_z & \frac{r_z}{2} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \frac{r_z}{2} & -r_z & \frac{r_z}{2} & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{r_z}{2} & -r_z & \frac{r_z}{2} \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & \frac{r_z}{2} & -r_z \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad (b_z)_n^{m+1} = \begin{bmatrix} (g_c)_n^{m+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (g_d)_n^{m+1} \end{bmatrix}. \quad (2.27)$$

Temos, portanto, de resolver o sistema tridiagonal  $(L-1) \times (L-1)$

$$(I-B)U_n^{m+1} = \mathring{U}_n + \frac{r_x}{2} \left[ \mathring{U}_{n+1} - 2\mathring{U}_n + \mathring{U}_{n-1} \right] + \frac{r_z}{2} (b_z)_n^{m+1} + \frac{\Delta t}{2} f_n^{m+\frac{1}{2}}. \quad (2.28)$$

A forma matricial do método ADI com condições de Dirichlet é assim dada por (2.25) – (2.28).

### 2.3.2 Condições de fronteira mistas

Consideremos agora que temos condições de fronteira mistas, ou seja,

$$\begin{aligned} U_{0,l}^m &= (g_a)_l^m, & U_{N,l}^m &= (g_b)_l^m, & l &= 0, 1, \dots, L, & m &= 1, \dots, M, \\ \frac{U_{n,1}^m - U_{n,-1}^m}{2h_z} &= (g_c)_n^m, & \frac{U_{n,L+1}^m - U_{n,L-1}^m}{2h_z} &= (g_d)_n^m, & n &= 0, 1, \dots, N, & m &= 0, 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (2.29a)$$

que envolve os pontos assinalados na Figura 2.2. Em (2.29a) utilizamos diferenças centradas para

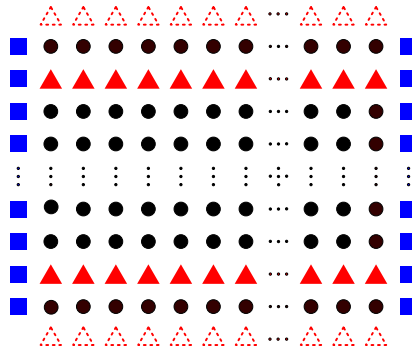


Fig. 2.2 Domínio espacial discreto com condições de fronteira mistas, onde ■ denota os pontos usados para definir as condições de Dirichlet, ▲ e △ denotam os pontos utilizados para definir as condições de Neumann e ● denota os pontos interiores. △ representa pontos fictícios.

aproximar a derivada de primeira ordem presente nas condições de Neumann. Para isso, precisamos de usar pontos fictícios, que são pontos fora do domínio, onde definimos  $U_{n,-1}^m$  e  $U_{n,L+1}^m$ , para

$n = 0, 1, \dots, N$  e  $m = 0, 1, \dots, M$ . Deste modo  $U_{n,-1}^m$  é tal que  $U_{n,-1}^m = U(x_n, c - h_z, t^m)$  e  $U_{n,L+1}^m$  é tal que  $U_{n,L+1}^m = U(x_n, d + h_z, t^m)$ .

Como não obtemos os valores da solução na fronteira diretamente das condições de Neumann, temos que calcular  $U_{n,0}^{m+1}$  e  $U_{n,L}^{m+1}$  para  $n = 0, 1, \dots, N$  a partir de (2.22). Portanto, temos de determinar cada um dos  $L + 1$  subvetores da solução intermédia. Como agora também necessitamos dos valores  $U_{n,l}^*$  em  $n = 0$  e  $n = N$  para  $l = 0$  e  $l = L$ , já não podemos utilizar (2.24). Contudo, seguindo a ideia apresentada em [17], podemos considerar

$$U_{0,l}^* = (g_a)_l^{m+\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad U_{N,l}^* = (g_b)_l^{m+\frac{1}{2}}, \quad l = 0, 1, \dots, L.$$

Vejamos ainda que, qualquer que seja  $n$ , quando calculamos  $U_{n,l}^*$  para  $l = 0$ , temos

$$U_{n,0}^* - \frac{r_x}{2} \left[ U_{n+1,0}^* - 2U_{n,0}^* + U_{n-1,0}^* \right] = U_{n,0}^m + \frac{r_z}{2} \left[ U_{n,1}^m - 2U_{n,0}^m + U_{n,-1}^m \right] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.30)$$

pelo que necessitamos de  $U_{n,-1}^m$  e, de modo análogo para  $l = L$ , necessitamos de  $U_{n,L+1}^m$ . De (2.29a) resulta que

$$\begin{aligned} U_{n,-1}^m &= U_{n,1}^m - 2h_z(g_c)_n^m, & n = 0, 1, \dots, N, & \quad m = 0, 1, \dots, M, \\ U_{n,L+1}^m &= U_{n,L-1}^m + 2h_z(g_d)_n^m, & n = 0, 1, \dots, N, & \quad m = 0, 1, \dots, M. \end{aligned}$$

Para obtermos  $U_{n,l}^{m+1}$  para  $n = 0, 1, \dots, N$  e  $l = 0, 1, \dots, L$  começamos por resolver (2.26) com  $A$  definida em (2.25), mas agora substituímos  $(b_x)_l^{m,m+1}$  por  $(b_x)^{m+\frac{1}{2}}$  dado por

$$(b_x)_l^{m+\frac{1}{2}} = \left[ (g_a)_l^{m+\frac{1}{2}} \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad (g_b)_l^{m+\frac{1}{2}} \right]^T. \quad (2.31)$$

Voltando a (2.22), para  $l = 0$  e  $l = L$  vem, respetivamente,

$$\begin{aligned} U_{n,0}^{m+1} - \frac{r_x}{2} \left[ U_{n,1}^{m+1} - 2U_{n,0}^{m+1} + U_{n,-1}^{m+1} \right] &= U_{n,0}^* + \frac{r_z}{2} \left[ U_{n+1,0}^* - 2U_{n,0}^* + U_{n-1,0}^* \right] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}, \\ U_{n,L}^{m+1} - \frac{r_x}{2} \left[ U_{n,L+1}^{m+1} - 2U_{n,L}^{m+1} + U_{n,L-1}^{m+1} \right] &= U_{n,L}^* + \frac{r_z}{2} \left[ U_{n+1,L}^* - 2U_{n,L}^* + U_{n-1,L}^* \right] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Sendo assim, para resolvermos uma sistema análogo a (2.28), definamos

$$(b_z)_n^{m+1} = \left[ -2h_z(g_c)_n^{m+1} \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 2h_z(g_d)_n^{m+1} \right]^T,$$

um vetor de dimensão  $L + 1$  e  $B$  uma matriz de dimensão  $(L + 1) \times (L + 1)$  com estrutura semelhante à presente em (2.27). Especificamente,  $B$  é uma matriz tridiagonal tal que  $B(l, l - 1) = B(l, l + 1) = r_z/2$  e  $B(l, l) = -r_z$ , à exceção das entradas  $B(1, 2)$  e  $B(L + 1, L)$  que tomam o valor  $r_z$ .

### 2.3.3 Condição de fronteira não linear

Vamos agora analisar o caso em que temos uma condição não linear. Consideramos as seguintes condições de fronteira

$$U_{0,l}^m = (g_a)_l^m, \quad U_{N,l}^m = (g_b)_l^m, \quad l = 0, 1, \dots, L, \quad m = 1, \dots, M$$

$$k_1 \frac{U_{n,1}^m - U_{n,-1}^m}{2h_z} + k_2 U_{n,0}^m = (g_c)_n^m, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad m = 0, 1, \dots, M \quad (2.32a)$$

$$-\frac{U_{n,L}^m - U_{n,L-1}^m}{h_z} = \varepsilon \sigma \left( (U_{n,L}^m)^4 - ((u_{sup})_{n,L}^m)^4 \right) + h_{sup} (U_{n,L}^m - (u_{sup})_{n,L}^m), \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad m = 1, \dots, M. \quad (2.32b)$$

Notemos que a condição de fronteira (2.32a) inclui os três casos seguintes: se  $k_1 = 0$ ,  $k_2 = 1$  e  $g_c = u_{inf}$  em (2.32a), vem

$$U_{n,0}^m = (u_{inf})_n^m; \quad (2.33a)$$

se  $k_1 = 1$ ,  $k_2 = 0$  e  $g_c = 0$  em (2.32a), temos

$$\frac{U_{n,1}^m - U_{n,-1}^m}{2h_z} = 0; \quad (2.33b)$$

e se  $k_1 = -1$ ,  $k_2 = h$  e  $g_c = u_{inf}$  em (2.32a), obtemos

$$-\frac{U_{n,1}^m - U_{n,-1}^m}{2h_z} + h U_{n,0}^m = (u_{inf})_n^m. \quad (2.33c)$$

Observemos ainda que utilizámos diferenças regressivas na aproximação (2.32b) uma vez que, caso utilizássemos diferenças centradas ficávamos com duas incógnitas,  $U_{n,L}^m$  e  $U_{n,L+1}^m$ . Sendo assim, teríamos de usar uma aproximação para  $U_{n,L+1}^m$ , por exemplo  $2U_{n,L}^m - U_{n,L-1}^m$ , que nos conduzia às diferenças regressivas. Os pontos utilizados nas diferentes aproximações estão representados na Figura 2.3.

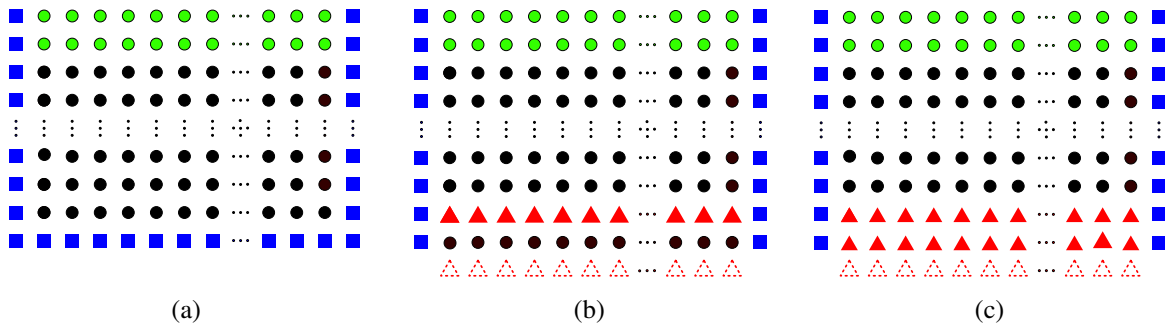


Fig. 2.3 Domínio espacial discreto com uma condição de fronteira não linear (2.32b), com as condições de Dirichlet (2.21a) e com a condição: (a) (2.33a), (b) (2.33b), (c) (2.33c). ■ denota os pontos usados para definir as condições de Dirichlet, ▲ e ⋄ denotam os pontos utilizados para definir as condições de Neumann e Robin, ● denota os pontos utilizados para definir a condição não linear e ● denota os pontos interiores. ⋄ representa pontos fictícios.

Mais uma vez, como temos as condições de Dirichlet (2.21a), temos de resolver o sistema (2.26) com  $A$  e  $(b_x)_j^{m+\frac{1}{2}}$  dados por (2.25) e (2.31), respetivamente.

Da discretização (2.32a) concluímos que, se  $k_1 \neq 0$ , então

$$U_{n,-1}^m = U_{n,1}^m + \frac{2h_z k_2}{k_1} U_{n,0}^m - \frac{2h_z}{k_1} (g_c)_n^m. \quad (2.34)$$

Sendo assim, para  $l = 0$  em (2.22), vem

$$U_{n,0}^{m+1} - \frac{r_z}{2} [U_{n,1}^{m+1} - 2U_{n,0}^{m+1} + U_{n,-1}^{m+1}] = U_{n,0}^* + \frac{r_x}{2} [U_{n+1,0}^* - 2U_{n,0}^* + U_{n-1,0}^*] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}$$

que, utilizando (2.34), é equivalente a

$$U_{n,0}^{m+1} - \frac{r_z}{2} [2U_{n,1}^{m+1} - 2(1 - \frac{h_z k_2}{k_1}) U_{n,0}^{m+1} - \frac{2h_z}{k_1} (g_c)_n^{m+1}] = U_{n,0}^* + \frac{r_x}{2} [U_{n+1,0}^* - 2U_{n,0}^* + U_{n-1,0}^*] + \frac{\Delta t}{2} f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}.$$

Sejam  $B$  a matriz tridiagonal  $L \times L$  associada ao operador  $\delta_z^2$  e  $(b_z)_n^{m+1}$  um vetor de dimensão  $L$  tais que

$$B = \begin{bmatrix} -r_z \left(1 - \frac{h_z k_2}{k_1}\right) & r_z & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \frac{r_z}{2} & -r_z & \frac{r_z}{2} & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & \frac{r_z}{2} & -r_z & \frac{r_z}{2} \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & r_z & -r_z \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad (b_z)_n^{m+1} = \begin{bmatrix} -\frac{2h_z}{k_1} (g_c)_n^{m+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ U_{n,L}^{m+1} \end{bmatrix}. \quad (2.35)$$

Temos de resolver o sistema tridiagonal  $L \times L$

$$(I - B)U_{n;}^{m+1} = U_{n;}^* + \frac{r_x}{2} [U_{n+1;}^* - 2U_{n;}^* + U_{n-1;}^*] + \frac{r_z}{2} (b_z)_n^{m+1} + \frac{\Delta t}{2} f_{n;}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (2.36)$$

que representa (2.22) na forma matricial. Para determinar  $U_{n,L}^{m+1}$ , resolvemos (2.32b) recorrendo ao método iterativo de Newton. Descrevemos em seguida todo o processo.

Considerando o vetor auxiliar  $\tilde{U}_{n;}^{m+1}$ , solução de

$$(I - B)\tilde{U}_{n;}^{m+1} = U_{n;}^* + \frac{r_x}{2} [U_{n+1;}^* - 2U_{n;}^* + U_{n-1;}^*] + \frac{\Delta t}{2} f_{n;}^{m+\frac{1}{2}},$$

temos, para  $L - 1$  em (2.36), que

$$U_{n,L-1}^{m+1} = \tilde{U}_{n,L-1}^{m+1} + (I - B)_{L-1}^{-1} \frac{r_z}{2} (b_z)_n^{m+1} = \tilde{U}_{n,L-1}^{m+1} + \frac{r_z}{2} \left( -a_1 \frac{2h_z (g_c)_n^{m+1}}{k_1} + a_2 U_{n,L}^{m+1} \right), \quad (2.37)$$

sendo  $(I - B)_{L-1}^{-1}$  a  $L$ -ésima linha da inversa de  $(I - B)$  e  $a_1$  e  $a_2$  o primeiro e o último elementos dessa mesma linha, respetivamente. Usando (2.37) em (2.32b), obtemos

$$-\frac{U_{n,L}^{m+1} - \tilde{U}_{n,L-1}^{m+1} - \frac{r_z}{2} \left( -a_1 \frac{2h_z (g_c)_n^{m+1}}{k_1} + a_2 U_{n,L}^{m+1} \right)}{h_z} = \varepsilon \sigma \left( (U_{n,L}^{m+1})^4 - ((u_{sup})_{n,L}^{m+1})^4 \right) + h_{sup} (U_{n,L}^{m+1} - (u_{sup})_{n,L}^{m+1})$$

isto é,

$$\varepsilon \sigma (U_{n,L}^{m+1})^4 + \left( h_{sup} + \frac{1}{h_z} - \frac{r_z a_2}{2h_z} \right) U_{n,L}^{m+1} - \varepsilon \sigma ((u_{sup})_{n,L}^{m+1})^4 - h_{sup} (u_{sup})_{n,L}^{m+1} - \frac{1}{h_z} \tilde{U}_{n,L-1}^{m+1} + \frac{r_z a_1 (g_c)_n^{m+1}}{k_1} = 0.$$

Usamos agora o método iterativo de Newton para determinar a solução de  $f(x) = 0$ , onde

$$f(x) = c_2 x^4 + c_1 x + c_0$$

com

$$\begin{aligned} c_2 &= \varepsilon \sigma, \\ c_1 &= h_{sup} + \frac{1}{h_z} - \frac{r_z a_2}{2h_z}, \\ c_0 &= -\varepsilon \sigma ((u_{sup})_{n,L}^{m+1})^4 - h_{sup} (u_{sup})_{n,L}^{m+1} - \frac{1}{h_z} \tilde{U}_{n,L-1}^{m+1} + \frac{r_z a_1 (g_c)_n^{m+1}}{k_1}. \end{aligned}$$

O resultado do método de Newton dá-nos uma aproximação para  $U_{n,L}^{m+1}$ . Usando a notação matricial, temos de resolver por fim

$$U_{n; }^{m+1} = \tilde{U}_{n; }^{m+1} + \left( I - B \right)^{-1} \frac{r_z}{2} (b_z)_n^{m+1}.$$

Se  $k_1 = 0$  e  $k_2 \neq 0$  em (2.32a), temos apenas de mudar (2.35). Neste caso,  $B$  será uma matriz tridiagonal semelhante à presente em (2.35), mas de dimensão  $(L-1) \times (L-1)$  e entradas  $B(1,1) = -r_z$  e  $B(1,2) = r_z/2$ . Também  $(b_z)^{m+1}$  será um vetor semelhante ao apresentado em (2.35), agora de dimensão  $L-1$  e primeira entrada simplesmente  $(g_c)^{m+1}/k_2$ . Todo o restante processo se mantém.

## 2.4 Influência das diferentes condições de fronteira na solução

Nesta secção vamos ilustrar a influência das diferentes condições de fronteira na solução da equação do calor. Para isso, consideremos a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega = (-1, 1) \times (-1, 1), \quad t \in (0, T],$$

com condição inicial dada por

$$u_0(x, z) = \frac{1}{0,2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2 + z^2}{0,2^2}\right), \quad (x, z) \in \Omega. \quad (2.38)$$

Para começar, vamos abordar três problemas diferentes, dependendo das condições de fronteira consideradas: condições de fronteira de Dirichlet, ou seja,

$$u(x, z, t) = 0, \quad \text{em } \partial\Omega \times (0, T]; \quad (2.39a)$$

condições de fronteira mistas, ou seja,

$$\begin{aligned} u(-1, z, t) = u(1, z, t) = 0, \quad z \in (-1, 1), \quad t \in (0, T], \\ \frac{\partial u}{\partial z}(x, -1, t) = \frac{\partial u}{\partial z}(x, 1, t) = 0, \quad x \in (-1, 1), \quad t \in (0, T]; \end{aligned} \quad (2.39b)$$

e o caso em que uma das condições é não linear e as restantes são de Dirichlet, isto é,

$$\begin{aligned} u(-1, z, t) = u(1, z, t) = 0, \quad z \in (-1, 1), \quad t \in (0, T], \\ u(x, -1, t) = 0, \quad -\frac{\partial u}{\partial z}(x, 1, t) = u^4(x, 1, t) - 0,5^4 + u(x, 1, t) - 0,5, \quad x \in (-1, 1), \quad t \in (0, T]. \end{aligned} \quad (2.39c)$$

As Figuras 2.4 e 2.5 representam a solução nos instantes  $t = 0,05$  e  $t = 0,5$ , respetivamente, com as condições de fronteira (2.39a) – (2.39c). Como podemos verificar, nos gráficos da Figura 2.4, que

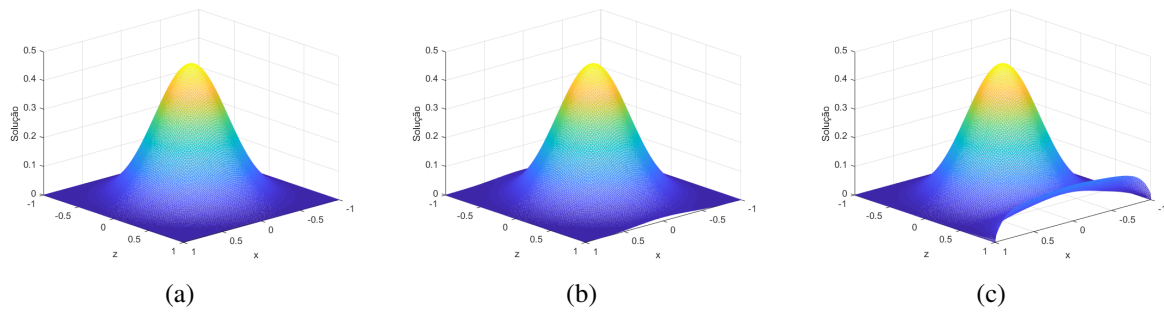


Fig. 2.4 Solução do método com diferentes condições de fronteira para  $t = 0,05$ : (a) (2.39a), (b) (2.39b), (c) (2.39c).

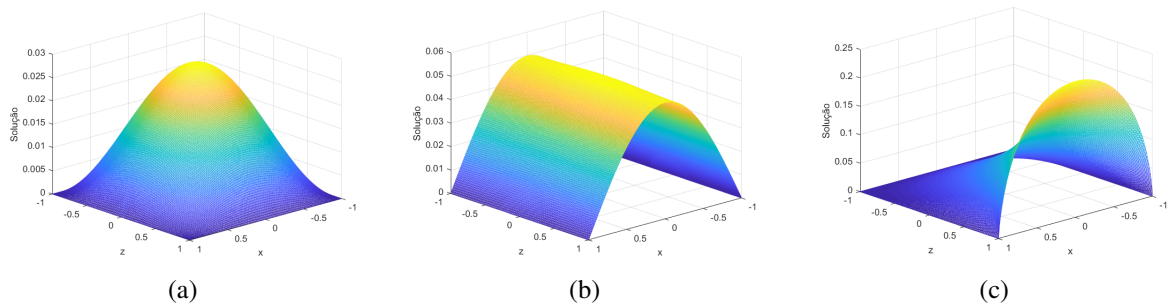


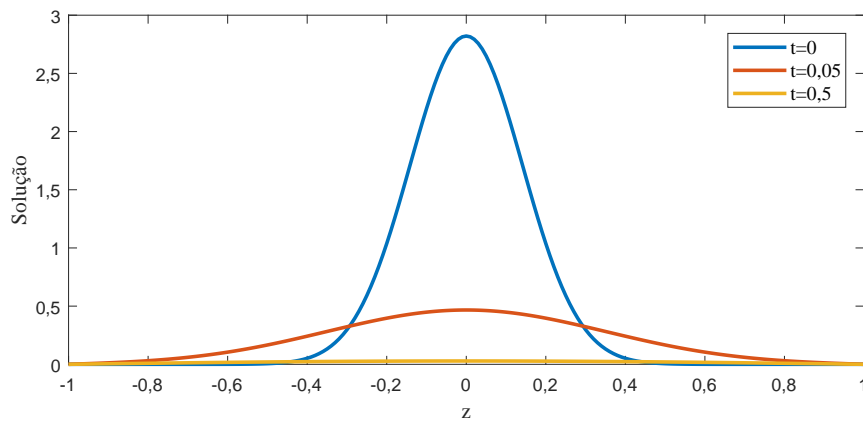
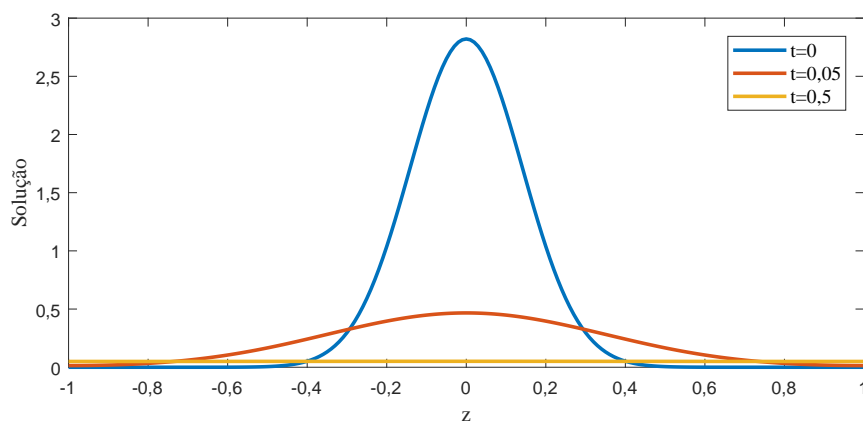
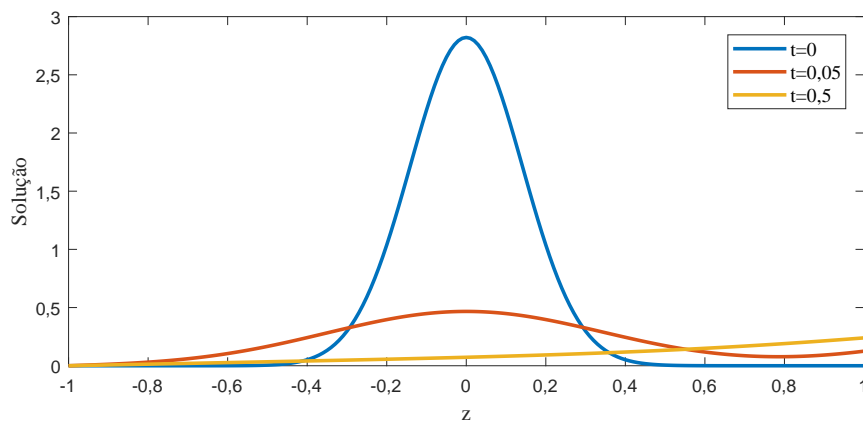
Fig. 2.5 Solução do método com diferentes condições de fronteira  $t = 0,5$ : (a) (2.39a), (b) (2.39b), (c) (2.39c).

representam a solução num instante próximo do instante inicial, a diferença é visível sobretudo perto da fronteira  $z = 1$ . Contudo, à medida que  $t$  aumenta, as soluções tornam-se muito diferentes como representado na Figura 2.5, o que ilustra o efeito que diferentes condições de fronteira têm na solução.

Nas Figuras 2.6, 2.7 e 2.8 podemos ver a evolução da solução representada no plano  $x = 0$  para diferentes instantes de tempo, para as diferentes condições de fronteira (2.39).

Vamos abordar outros três problemas, mantendo agora a condição não linear em  $z = 1$  e variando a condição de fronteira para  $z = -1$ , com base no que foi discutido na Secção 2.3.3. Consideramos,



Fig. 2.6 Solução do método com condições de fronteira (2.39a) no plano  $x = 0$ .Fig. 2.7 Solução do método com condições de fronteira (2.39b) no plano  $x = 0$ .Fig. 2.8 Solução do método com condições de fronteira (2.39c) no plano  $x = 0$ .

mais uma vez, a condição inicial (2.38) e as condições de fronteira comuns às várias abordagens, dadas por

$$\begin{aligned} u(-1, z, t) = u(1, z, t) = 0, & \quad z \in (-1, 1), \quad t \in (0, T], \\ -\frac{\partial u}{\partial z}(x, 1, t) = u^4(x, 1, t) - 0,5^4 + u(x, 1, t) - 0,5, & \quad x \in (-1, 1), \quad t \in (0, T]. \end{aligned} \quad (2.40)$$

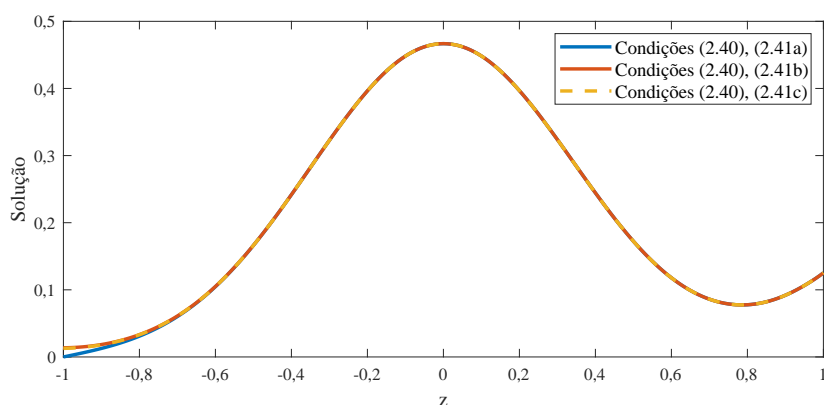
Para cada problema varia a condição de fronteira no plano  $z = -1$ , dada por uma das alternativas seguintes

$$u(x, -1, t) = 0, \quad x \in (-1, 1), \quad t \in (0, T], \quad \text{ou} \quad (2.41a)$$

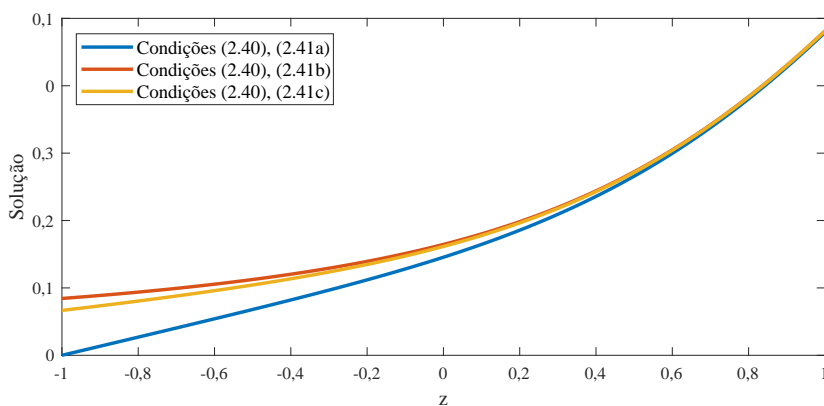
$$\frac{\partial u}{\partial z}(x, -1, t) = 0, \quad x \in (-1, 1), \quad t \in (0, T], \quad \text{ou} \quad (2.41b)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}(x, -1, t) = u(x, -1, t), \quad x \in (-1, 1), \quad t \in (0, T]. \quad (2.41c)$$

Na Figura 2.9 estão representadas as soluções resultantes destas três abordagens, no plano  $x = 0$ .



(a)



(b)

Fig. 2.9 Solução do método para as várias abordagens em dois momentos temporais no plano  $x = 0$ : (a)  $t = 0,05$ , (b)  $t = 0,5$ .

Verificam-se diferenças na solução consoante as condições de fronteira escolhidas, que se tornam mais evidentes à medida que  $t$  aumenta.

## 2.5 Breve abordagem do problema tridimensional

Vamos abordar brevemente um método ADI para resolver um problema tridimensional. Por simplicidade, iremos descrever apenas o caso do modelo com condições de fronteira de Dirichlet.

Consideremos a discretização do domínio temporal  $[0, T]$  definida por

$$t^m = m\Delta t, \quad m = 0, 1, \dots, M,$$

com  $\Delta t = T/M$  e a discretização espacial de  $\Omega = (a_1, a_2) \times (a_3, a_4) \times (a_5, a_6)$ , definida por

$$x_n = a_1 + nh_x, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad y_j = a_3 + jh_y \quad j = 0, 1, \dots, J, \quad z_l = a_5 + lh_z, \quad l = 0, 1, \dots, L,$$

onde  $h_x = (a_2 - a_1)/N$ ,  $h_y = (a_4 - a_3)/J$  e  $h_z = (a_6 - a_5)/L$  são o espaçamento da malha relativo à variável  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respetivamente.

Como vimos na secção 2.2.2, a ideia geral do método ADI é dividir um problema multidimensional em vários problemas unidimensionais, naturalmente mais simples de resolver. O método ADI Peaceman-Rachford utilizado para resolver o problema da equação do calor tridimensional é baseado no método  $\theta$  para  $\theta = 1/3$ . Este, por sua vez, é dado por

$$\frac{U_{n,j,l}^{m+1} - U_{n,j,l}^m}{\Delta t} = \frac{\delta_x^2}{h_x^2} \left( \frac{1}{3} U_{n,j,l}^{m+1} + \frac{2}{3} U_{n,j,l}^m \right) + \frac{\delta_y^2}{h_y^2} \left( \frac{1}{3} U_{n,j,l}^{m+1} + \frac{2}{3} U_{n,j,l}^m \right) + \frac{\delta_z^2}{h_z^2} \left( \frac{1}{3} U_{n,j,l}^{m+1} + \frac{2}{3} U_{n,j,l}^m \right) \quad (2.42)$$

e que é equivalente a

$$\left( 1 - \frac{r_x}{3} \delta_x^2 - \frac{r_y}{3} \delta_y^2 - \frac{r_z}{3} \delta_z^2 \right) U_{n,j,l}^{m+1} = \left( 1 + \frac{2r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{2r_y}{3} \delta_y^2 + \frac{2r_z}{3} \delta_z^2 \right) U_{n,j,l}^m, \quad (2.43)$$

com  $r_x = \Delta t/h_x^2$ ,  $r_y = \Delta t/h_y^2$  e  $r_z = \Delta t/h_z^2$ . Se considerarmos a seguinte fatorização,

$$\begin{aligned} & \left( 1 - \frac{r_x}{3} \delta_x^2 \right) \left( 1 - \frac{r_y}{3} \delta_y^2 \right) \left( 1 - \frac{r_z}{3} \delta_z^2 \right) U_{n,j,l}^{m+1} = \\ & = \left( 1 + \frac{r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{r_y}{3} \delta_y^2 \right) \left( 1 + \frac{r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{r_z}{3} \delta_z^2 \right) \left( 1 + \frac{r_y}{3} \delta_y^2 + \frac{r_z}{3} \delta_z^2 \right) U_{n,j,l}^m, \end{aligned} \quad (2.44)$$

estamos a adicionar ao segundo membro de (2.43) a seguinte expressão

$$\begin{aligned} & - \left( \frac{r_x r_y}{9} \delta_x^2 \delta_y^2 + \frac{r_x r_z}{9} \delta_x^2 \delta_z^2 + \frac{r_y r_z}{9} \delta_y^2 \delta_z^2 \right) (U_{n,j,l}^{m+1} - U_{n,j,l}^m) + \left( \frac{r_x r_x}{9} \delta_x^2 \delta_x^2 + \frac{r_y r_y}{9} \delta_y^2 \delta_y^2 + \frac{r_z r_z}{9} \delta_z^2 \delta_z^2 \right. \\ & + \frac{2r_x r_y}{9} \delta_x^2 \delta_y^2 + \frac{2r_x r_z}{9} \delta_x^2 \delta_z^2 + \frac{2r_y r_z}{9} \delta_y^2 \delta_z^2 + \frac{r_x r_x r_y}{27} \delta_x^2 \delta_x^2 \delta_y^2 + \frac{r_x r_x r_z}{27} \delta_x^2 \delta_x^2 \delta_z^2 + \frac{r_y r_y r_z}{27} \delta_y^2 \delta_y^2 \delta_z^2 \\ & \left. + \frac{r_x r_x r_z}{27} \delta_x^2 \delta_x^2 \delta_z^2 + \frac{r_x r_z r_z}{27} \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_z^2 + \frac{r_y r_z r_z}{27} \delta_y^2 \delta_z^2 \delta_z^2 + \frac{2r_y r_y r_z}{27} \delta_y^2 \delta_y^2 \delta_z^2 \right) U_{n,j,l}^m. \end{aligned} \quad (2.45)$$

De [10, 17], sabemos que o método (2.42) tem convergência de ordem um no tempo e dois no espaço. Usando a técnica que utilizada para obter (2.17) e analisando os termos em (2.45) de forma

semelhante, obtém-se que também estes têm ordem um no tempo e dois no espaço, pelo que o método ADI Peaceman-Rachford tem convergência de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço.

Os três passos do método ADI Peaceman-Rachford em três dimensões são dados por

$$\left(1 - \frac{r_x}{3} \delta_x^2\right)^* U_{n,j,l} = \left(1 + \frac{r_y}{3} \delta_y^2 + \frac{r_z}{3} \delta_z^2\right) U_{n,j,l}^m, \quad (2.46a)$$

$$\left(1 - \frac{r_y}{3} \delta_y^2\right)^{**} U_{n,j,l} = \left(1 + \frac{r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{r_z}{3} \delta_z^2\right)^* U_{n,j,l}^m, \quad (2.46b)$$

$$\left(1 - \frac{r_z}{3} \delta_z^2\right) U_{n,j,l}^{m+1} = \left(1 + \frac{r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{r_y}{3} \delta_y^2\right)^{**} U_{n,j,l}^m, \quad (2.46c)$$

com  $U^*$  e  $U^{**}$  duas soluções intermédias. É fácil provar que resolver (2.46) é equivalente a resolver (2.44), basta começar com

$$\left(1 - \frac{r_x}{3} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{r_y}{3} \delta_y^2\right) \left(1 - \frac{r_z}{3} \delta_z^2\right) U_{n,l,j}^{m+1}$$

e utilizando as igualdades presentes em (2.46), rapidamente chegamos a

$$\left(1 + \frac{r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{r_y}{3} \delta_y^2\right) \left(1 + \frac{r_x}{3} \delta_x^2 + \frac{r_z}{3} \delta_z^2\right) \left(1 + \frac{r_y}{3} \delta_y^2 + \frac{r_z}{3} \delta_z^2\right) U_{n,l,j}^m.$$

Agora vamos apresentar um exemplo simples, resultado da implementação do método (2.46) com condições de fronteira de Dirichlet. Consideremos um problema análogo ao da secção anterior, agora em três dimensões, dado pela equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,y,z,t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y,z,t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x,y,z,t), \quad (x,y,z) \in \Omega = (-1,1) \times (-1,1) \times (-1,1), \quad t \in (0,1],$$

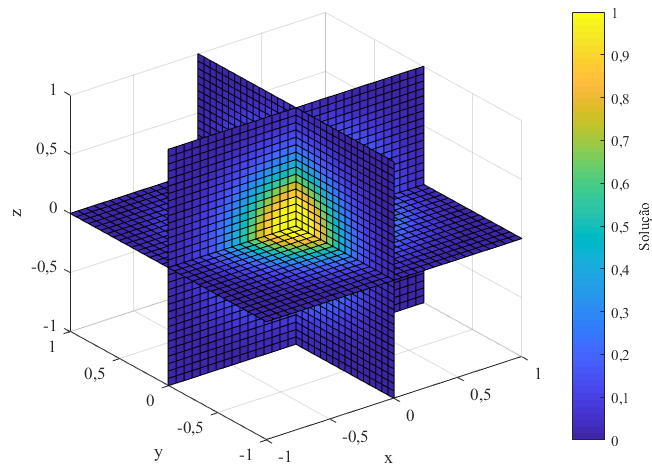
com condição inicial dada por

$$u_0(x,y,z) = \frac{1}{0,5\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{0,5^2}\right), \quad (x,y,z) \in \Omega.$$

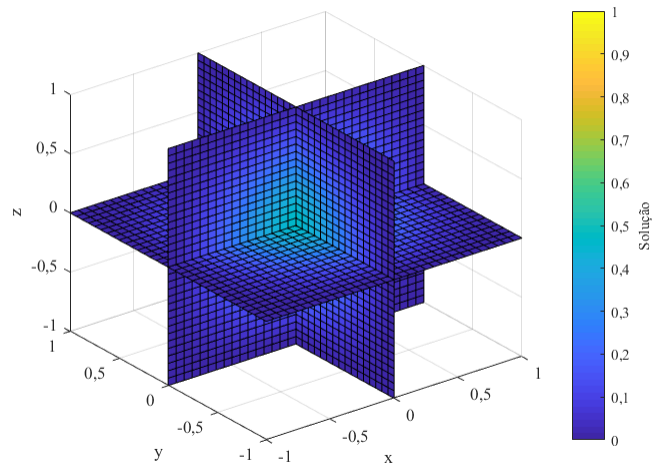
e sujeita à condição de fronteira

$$u(x,y,z,t) = 0, \quad \text{em } \partial\Omega \times (0,1].$$

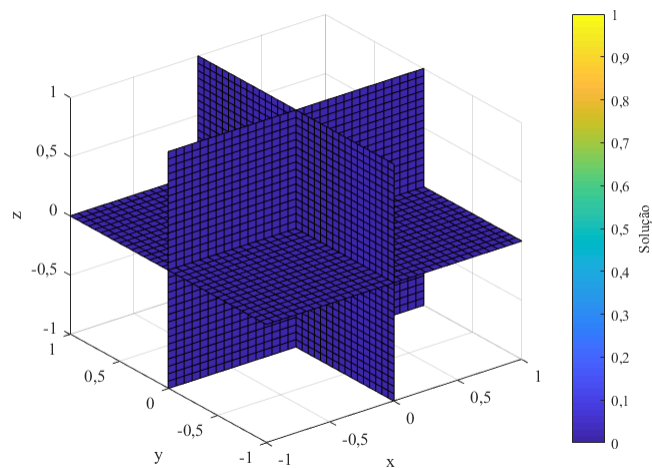
A solução do método numérico que aproxima a solução do problema anterior está representada de acordo com a escala de cores ilustrada na barra lateral da Figura 2.10, nos planos  $x = 0$ ,  $y = 0$  e  $z = 0$ . Como podemos verificar, partindo da condição inicial, em  $t = 0$ , observamos que existe dissipação de energia à medida que  $t$  aumenta.



(a)



(b)



(c)

Fig. 2.10 Solução do método tridimensional com condições de Dirichlet para vários instantes temporais: (a)  $t = 0$ , (b)  $t = 0,05$ , (c)  $t = 1$ .



## Capítulo 3

# Estudo do método ADI

Neste capítulo vamos estudar teoricamente o método ADI e apresentar alguns testes numéricos. Para provar a convergência do método com condições de Dirichlet e condições de fronteira mistas vamos supor que o problema contínuo tem solução suficientemente regular. Para a condição de fronteira não linear apresentamos apenas testes numéricos.

Segundo o teorema de equivalência de Lax, a sucessão de soluções numéricas gerada numa família de malhas por uma aproximação consistente de diferenças finitas para um problema de valor inicial bem-posto, converge para a solução do problema se e só se o método de diferenças finitas é estável [14]. Portanto, para provar a convergência do método, iremos determinar a sua consistência e analisar a estabilidade.

### 3.1 Conceitos fundamentais

Nesta secção, introduzimos algumas definições necessárias para a análise da convergência do método numérico. Começamos com a definição de método consistente.

**Definição 3.1.** *Seja  $u$  a solução do problema*

$$\begin{cases} F(u) = f, & \text{em } \Omega \times (0, T], \\ L(u) = \gamma, & \text{em } \partial\Omega \times (0, T], \end{cases}$$

em que  $F$  e  $L$  são operadores diferenciais. Sejam ainda  $F_h$  um operador de diferenças finitas que discretiza  $F$  e  $\Omega_h$  uma discretização do domínio bidimensional  $\Omega$  por uma malha uniforme. Consideremos a norma  $\|\cdot\|_h : \Omega_h \rightarrow [0, \infty)$  e  $\varphi$  a funcional definida em  $\Omega_h \times \{t^m : m = 0, 1, \dots, M\}$  tal que

$$\varphi^m = F_h(u^m) - F(u^m) \quad \text{em } \Omega_h, \quad m = 0, 1, \dots, M,$$

onde  $\varphi^m$  denota a função discreta no instante temporal  $t^m = m\Delta t$ , com  $\Delta t = T/M$ . Então,  $\varphi$  representa o erro associado à aproximação de  $F$  por  $F_h$ , que designamos por erro de truncatura. Um método diz-se consistente se, para  $m = 0, 1, \dots, M$ ,

$$\lim_{\Delta t, h_x, h_z \rightarrow 0} \|\varphi^m\|_h = 0,$$

onde  $h_x$  e  $h_z$  são o espaçamento espacial na direção  $Ox$  e  $Oz$ , respectivamente. Se um método é consistente e existe uma constante  $C$ , positiva e independente de  $h_x$ ,  $h_z$  e  $\Delta t$ , tal que

$$\|\varphi^m\|_h \leq C(\Delta t^p + h_x^{q_x} + h_z^{q_z})$$

com  $p, q_x, q_z \in \mathbb{N}$ , então diz-se que a ordem de consistência do método é  $p$  no tempo,  $q_x$  na direção espacial  $Ox$  e  $q_z$  na direção espacial  $Oz$ .

Passamos agora à definição de estabilidade.

**Definição 3.2.** Sejam  $R_h(u^m)$  e  $g_h^m$  tais que

$$R_h(u^m) = \begin{cases} F_h(u^m), & \text{em } \Omega_h, m = 1, \dots, M, \\ u^0, & \text{em } \Omega_h, m = 0, \end{cases} \quad g_h^m = \begin{cases} f^m, & \text{em } \Omega_h, m = 1, \dots, M, \\ \psi, & \text{em } \Omega_h, m = 0. \end{cases}$$

Diz-se que o método numérico

$$R_h(u^m) = g_h^m$$

é estável, se existirem constantes  $K$  e  $\beta$  tais que

$$\|u^m\|_h \leq K \exp(\beta m \Delta t) \|g_h^m\|_{G_h}, \quad m = 0, 1, \dots, M,$$

onde  $\|\cdot\|_{G_h}$  denota uma norma.

Apresentamos agora a definição de convergência.

**Definição 3.3.** Seja  $e^m$  o erro da aproximação de  $u^m$  por  $U^m$ , onde  $U^m$  é a solução obtida através do método numérico, no instante  $m\Delta t$ ,  $m = 0, 1, \dots, M$ ,

$$e^m = u^m - U^m, \quad \text{em } \Omega_h.$$

Um método diz-se convergente se

$$\lim_{\Delta t, h_x, h_z \rightarrow 0} \|e^m\|_h = 0.$$

Se um método é convergente e existe uma constante  $C$ , positiva e independente de  $h_x, h_z$  e  $\Delta t$ , tal que

$$\|e^m\|_h \leq C(\Delta t^p + h_x^{q_x} + h_z^{q_z})$$

com  $p, q_x, q_z \in \mathbb{N}$ , então diz-se que o método converge com ordem  $p$  no tempo,  $q_x$  na direção espacial  $Ox$  e  $q_z$  na direção espacial  $Oz$ .

Também se pode denotar a ordem por  $\mathcal{O}(\Delta t^p + h_x^{q_x} + h_z^{q_z})$ . Para além disto, pode ainda considerar-se que a ordem no espaço é dada por  $\min\{q_x, q_z\}$ .

Para terminar, enunciamos o teorema de Lax, que pode ser encontrado em [16].

**Teorema 3.1.** Se um método de diferenças finitas é linear (no sentido de corresponder a uma equação com derivadas parciais linear), estável e consistente com ordem de consistência  $\mathcal{O}(\Delta t^p + h_x^{q_x} + h_z^{q_z})$ , então tem convergência de ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^p + h_x^{q_x} + h_z^{q_z})$ .



## 3.2 Modelo com condições de Dirichlet

Nesta secção, vamos estudar a ordem de convergência do método ADI no caso em que temos condições de Dirichlet em toda a fronteira e apresentar alguns testes numéricos.

### 3.2.1 Análise da convergência

Começamos por definir algumas notações. Consideremos  $w$  uma função definida nos pontos da malha  $(x_n, z_l, t^m) \in \overline{\Omega}_h \times \{t^m : m = 0, 1, \dots, M\}$  e definamos os seguintes operadores discretos

$$\delta_x w_{n,l}^m = w_{n,l}^m - w_{n-1,l}^m, \quad \delta_z w_{n,l}^m = w_{n,l}^m - w_{n,l-1}^m, \quad \Delta_h w^m = \frac{\delta_x^2 w^m}{h_x^2} + \frac{\delta_z^2 w^m}{h_z^2}, \quad \delta_t w^{m+\frac{1}{2}} = w^{m+1} - w^m \quad (3.1)$$

e

$$\delta_t w^m = w^{m+\frac{1}{2}} - w^{m-1+\frac{1}{2}}, \quad \text{onde } w^{m+\frac{1}{2}} = \frac{w^{m+1} + w^m}{2}. \quad (3.2)$$

Vamos agora enunciar o Lema de Gronwall discreto [18].

**Lema 3.1.** *Suponhamos que  $\{g^m : m \geq 0\}$  e  $\{E^m : m \geq 0\}$  são sucessões não negativas e  $\phi^0 \geq 0$ . Se para  $m \geq 0$ ,*

$$E^m \leq \phi^0 + \Delta t \sum_{i=0}^{m-1} E^i + \Delta t \sum_{i=0}^{m-1} g^i,$$

então

$$E^m \leq \exp(m\Delta t) \left( \phi^0 + \Delta t \sum_{i=0}^{m-1} g^i \right).$$

Este lema e o que vamos apresentar de seguida vão ser necessários para analisar a estabilidade do método.

**Lema 3.2** ([13]). *Para sucessões temporais  $\{w^0, w^1, \dots, w^M\}$  e  $\{g^{\frac{1}{2}}, g^{\frac{3}{2}}, \dots, g^{M-\frac{1}{2}}\}$  temos, para  $\varepsilon > 0$ ,*

$$2\Delta t \sum_{i=0}^m g^{i+\frac{1}{2}} \frac{\delta_t w^{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \leq \frac{1}{\varepsilon} \left[ (w^0)^2 + \Delta t \sum_{i=1}^m (w^i)^2 + (w^{m+1})^2 \right] + \varepsilon \left[ (g^{\frac{1}{2}})^2 + \Delta t \sum_{i=1}^m \left( \frac{\delta_t g^i}{\Delta t} \right)^2 + (g^{m+\frac{1}{2}})^2 \right].$$

Definamos os produtos internos

$$(v^m, w^m)_h = \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{L-1} h_x h_z v_{n,l}^m w_{n,l}^m, \quad (v^m, w^m)_x = \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^{L-1} h_x h_z v_{n,l}^m w_{n,l}^m, \quad (v^m, w^m)_z = \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{l=1}^L h_x h_z v_{n,l}^m w_{n,l}^m,$$

cujas normas associadas são, respetivamente,

$$\|w^m\|_h = (w^m, w^m)_h^{\frac{1}{2}}, \quad \|w^m\|_x = (w^m, w^m)_x^{\frac{1}{2}}, \quad \|w^m\|_z = (w^m, w^m)_z^{\frac{1}{2}}. \quad (3.3)$$

Consideremos ainda,

$$\|w^m\|_1^2 = \left\| \frac{\delta_x w^m}{h_x} \right\|_x^2 + \left\| \frac{\delta_z w^m}{h_z} \right\|_z^2.$$

No próximo lema vamos determinar uma desigualdade que será útil para provar a estabilidade do método ADI.

**Lema 3.3.** *Seja  $w_{n,l}^m$  a solução do método ADI que envolve condições de fronteira de Dirichlet homogêneas, ou seja,*

$$\frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (x_n, z_l) \in \Omega_h, \quad m = 0, \dots, M-1, \quad (3.4a)$$

$$w_{n,l}^0 = (u_0)_{n,l}, \quad (x_n, z_l) \in \bar{\Omega}_h, \quad (3.4b)$$

$$w_{n,l}^m = 0, \quad (x_n, z_l) \in \partial\Omega_h, \quad m = 1, \dots, M. \quad (3.4c)$$

Então, para  $m = 1, \dots, M-1$ ,

$$\|\Delta_h w^{m+1}\|_h^2 \leq \exp(m\Delta t) \left( 3\|\Delta_h w^0\|_h^2 + 4\|f^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t f^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|f^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right).$$

*Demonstração.* Fazemos o produto interno de cada membro da equação (3.4a) por  $\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}} / \Delta t$ , isto é,

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h - \left( \Delta_h w^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h + \left( \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \\ & = \left( f^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h \end{aligned} \quad (3.5)$$

e analisemos o que acontece em cada termo. Para o primeiro termo, desenvolvendo o operador  $\Delta_h$  de acordo com (3.1), obtemos

$$\left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_x^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \right)_h + \left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \right)_h. \quad (3.6)$$

Para a primeira parcela do segundo membro de (3.6) temos

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_x^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \right)_h = \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{L-1} h_x h_z \frac{\delta_t w_{n+1,l}^{m+\frac{1}{2}} - 2\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \\ & = \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left( \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{\delta_t w_{n+1,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

e, fazendo uma mudança de variável no primeiro somatório em  $n$ , passando de  $n$  a  $n-1$ , obtemos de (3.7) a igualdade

$$\left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_x^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \right)_h = \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left( \sum_{n=2}^N \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \frac{\delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right).$$

De (3.4c), podemos afirmar que  $\delta_t w_{0,l}^{m+\frac{1}{2}}/\Delta t = 0$  e  $\delta_t w_{N,l}^{m+\frac{1}{2}}/\Delta t = 0$ . Portanto,

$$\begin{aligned} \left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_x^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \right)_h &= \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left( \sum_{n=1}^N \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \sum_{n=1}^N \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) = \\ &= - \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^{L-1} h_x h_z \left( \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \right)^2 = - \left\| \frac{\delta_x \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \right\|_x^2. \end{aligned}$$

Procedendo de modo análogo para a segunda parcela do segundo membro de (3.6), resulta

$$\left( \frac{\delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = - \left\| \frac{\delta_x \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \right\|_x^2 - \left\| \frac{\delta_z \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_z \Delta t} \right\|_z^2.$$

Analisemos agora o termo  $(\Delta_h w^{m+\frac{1}{2}}, \Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}/\Delta t)_h$  de (3.5). Desenvolvendo o operador  $\delta_t$  e tendo em conta a notação presente em (3.2), vem que

$$\begin{aligned} \left( \Delta_h w^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\delta_t \Delta_h w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h &= \left( \frac{\Delta_h w^{m+1} + \Delta_h w^m}{2}, \frac{\Delta_h w^{m+1} - \Delta_h w^m}{\Delta t} \right)_h \\ &= \frac{1}{2\Delta t} \left( (\Delta_h w^{m+1}, \Delta_h w^{m+1})_h - (\Delta_h w^m, \Delta_h w^m)_h \right) = \frac{\|\Delta_h w^{m+1}\|_h^2 - \|\Delta_h w^m\|_h^2}{2\Delta t}. \end{aligned}$$

A discussão do termo  $(\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}/(4h_x^2 h_z^2 \Delta t), \Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}/\Delta t)_h$  de (3.5) é semelhante à que foi feita para (3.6). Deste modo,

$$\left( \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{4 h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \left( \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{4 h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \right)_h + \left( \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{4 h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\delta_x^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \right)_h. \quad (3.8)$$

Vejamus a primeira parcela do segundo membro de (3.8),

$$\begin{aligned} \left( \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{4 h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \right)_h &= \frac{\Delta t^2}{4} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{L-1} h_x h_z \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n+1,l}^{m+\frac{1}{2}} - 2\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \\ &= \frac{\Delta t^2}{4} \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left( \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n+1,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 \Delta t} \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) \\ &= \frac{\Delta t^2}{4} \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left( \sum_{n=2}^N h_x \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} - \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right), \end{aligned}$$

onde na última passagem se fez uma mudança de variável no primeiro somatório em  $n$ , passando de  $n$  a  $n-1$ . De (3.4c), concluímos que  $\delta_z^2 \delta_t w_{0,l}^{m+\frac{1}{2}}/(h_z^2 \Delta t) = 0$  e  $\delta_z^2 \delta_t w_{N,l}^{m+\frac{1}{2}}/(h_z^2 \Delta t) = 0$ . Portanto,

$$\left( \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{4 h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\Delta t^2}{4} \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left( \sum_{n=1}^N h_x \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} - \sum_{n=1}^N h_x \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \right) \\
&= -\frac{\Delta t^2}{4} \sum_{n=1}^N \sum_{l=1}^{L-1} h_x h_z \left( \frac{\delta_z^2 \delta_t w_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_z^2 \delta_t w_{n-1,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right)^2 = -\frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_x \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right\|_x^2.
\end{aligned}$$

Procedendo de modo análogo para a segunda parcela do segundo membro de (3.8), resulta que

$$\left( \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = -\frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_x \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right\|_x^2 - \frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_x \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right\|_z^2.$$

Sendo assim, a equação (3.5) é equivalente a

$$\begin{aligned}
&\left\| \frac{\delta_x \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \right\|_x^2 + \left\| \frac{\delta_z \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_z \Delta t} \right\|_z^2 + \frac{\|\Delta_h w^{m+1}\|_h^2 - \|\Delta_h w^m\|_h^2}{2\Delta t} + \frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_x \delta_z^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right\|_x^2 \\
&+ \frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_z \delta_x^2 \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{h_z h_x^2 \Delta t} \right\|_z^2 = -\left( f^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h,
\end{aligned}$$

pelo que podemos escrever

$$\frac{\|\Delta_h w^{m+1}\|_h^2 - \|\Delta_h w^m\|_h^2}{2\Delta t} \leq -\left( f^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h.$$

Multiplicando toda a equação por  $2\Delta t$  e somando para  $m = 0, \dots, k$ , resulta

$$\|\Delta_h w^{k+1}\|_h^2 \leq \|\Delta_h w^0\|_h^2 - 2\Delta t \sum_{i=0}^k \left( f^{i+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t w^{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h. \quad (3.9)$$

Fazendo  $\varepsilon = 2$  no Lema 3.2 para (3.9), vem

$$\|\Delta_h w^{m+1}\|_h^2 \leq 3\|\Delta_h w^0\|_h^2 + \Delta t \sum_{i=1}^m \|\Delta_h w^i\|_h^2 + 4\|f^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t f^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|f^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2.$$

Pelo Lema 3.1 obtemos, finalmente,

$$\|\Delta_h w^{m+1}\|_h^2 \leq \exp(m\Delta t) \left( 3\|\Delta_h w^0\|_h^2 + 4\|f^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t f^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|f^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right).$$

□

Vejam agora como relacionar  $\|w^m\|_h$  com  $\|\Delta_h w^m\|_h$  através do lema que se segue, cuja demonstração, que omitimos, foi baseada em [10].

**Lema 3.4.** Consideremos  $\{w_{n,l}^m : n = 0, 1, \dots, N, l = 0, 1, \dots, L, m = 0, 1, \dots, M\}$  tal que  $w_{n,l}^m = 0$  em  $\partial\Omega_h$ . Então,

$$\|w^m\|_h \leq \frac{1}{2} \min \left\{ \min\{(b-a)^2, (d-c)^2\}, \frac{1}{2} \max\{(b-a)^2, (d-c)^2\} \right\} \|\Delta_h w^m\|_h.$$

Podemos agora estabelecer a seguinte desigualdade de estabilidade

$$\|w^m\|_h^2 \leq (c^*)^2 \exp(m\Delta t) \left( 3\|\Delta_h w^0\|_h^2 + 4\|f^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t f^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|f^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right), \quad (3.10)$$

com

$$c^* = \min \left\{ \min\{(b-a)^2, (d-c)^2\}, \max\{(b-a)^2, (d-c)^2\}/2 \right\} / 2. \quad (3.11)$$

Estamos agora em condições de obter uma desigualdade de estabilidade para o erro.

**Teorema 3.2** (Estabilidade [13]). *Seja  $u$  a solução exata do problema (2.2), (2.6), (2.7) e (2.8) para  $(k_1, k_2, k_3, k_4) = (0, 1, 0, 1)$  e considere-se  $g_d$  independente de  $u$ . Seja ainda  $U$  a solução obtida pelo método ADI. Então o erro da solução numérica no ponto  $(x_n, z_l)$  satisfaz o problema de equação*

$$\frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \varphi_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (x_n, z_l) \in \Omega_h, \quad m = 0, \dots, M-1, \quad (3.12)$$

onde  $\varphi$  é o erro de truncatura, com condição inicial e condições de fronteira dadas, respetivamente, por

$$e_{n,l}^0 = 0, \quad (x_n, z_l) \in \bar{\Omega}_h, \quad e_{n,l}^m = 0, \quad (x_n, z_l) \in \partial\Omega_h, \quad m = 1, \dots, M.$$

Para além disso, o erro satisfaz a seguinte desigualdade de estabilidade, para  $m = 1, \dots, M-1$ ,

$$\|e^{m+1}\|_h^2 \leq (c^*)^2 \exp(m\Delta t) \left( 4\|\varphi^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t \varphi^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right), \quad (3.13)$$

com  $c^*$  dado por (3.11).

*Demonstração.* Substituindo  $e_{n,l}^m = u_{n,l}^m - U_{n,l}^m$  no primeiro membro de (3.12), obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \\ & = \frac{\delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} - \frac{\delta_t U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \Delta_h U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}. \end{aligned}$$

De (2.19), temos que

$$\frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \frac{\delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} - f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}$$

e, de (2.6), vem

$$\frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \frac{\delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \Delta_h u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \Delta u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \quad (3.14)$$

onde  $\Delta u$  denota o Laplaciano de  $u$ . A equação (3.14) é equivalente a

$$\frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \Delta_h e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \varphi_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}.$$

Para além disto, como  $U_{n,l}^0 = u_{n,l}^0$  para  $(x_n, z_l) \in \bar{\Omega}_h$ , temos que  $e_{n,l}^0 = 0$  e como  $U_{n,l}^m = u_{n,l}^m$  em  $\partial\Omega_h$ , obtemos  $e_{n,l}^m = 0$  em  $\partial\Omega_h$ ,  $m = 1, \dots, M$ .

Sendo assim, tendo em conta a desigualdade estabelecida em (3.10), obtemos finalmente, para  $m = 1, \dots, M-1$  e  $c^*$  dado por (3.11),

$$\|e^{m+1}\|_h^2 \leq (c^*)^2 \exp(m\Delta t) \left( 4\|\varphi^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t \varphi^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right).$$

□

Depois de demonstrada a estabilidade do método, falta determinar a sua consistência de modo a obtermos o resultado de convergência. Nesse sentido, vamos analisar o erro de truncatura, recorrendo à fórmula de Taylor com resto integral. Utilizando a equação do método ADI, podemos escrever

$$\frac{\delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{\delta_z^2 u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + (\varphi)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (3.15)$$

para  $(x_n, z_l) \in \Omega_h$ .

No que se segue, para estimar o erro de truncatura  $\varphi$ , vamos usar  $u_{n,l}(t^m)$  para denotar  $u(x_n, z_l, t^m)$ , uma vez que vamos fazer desenvolvimentos de Taylor que levarão ao aparecimento de valores de  $u$  em instantes temporais que não fazem parte da discretização. Em primeiro lugar escrevemos o erro de truncatura como a seguinte soma de parcelas

$$(\varphi)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = (\varphi_t)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - (\varphi_{tx})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - (\varphi_{tz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + (\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}},$$

onde

$$\begin{aligned} (\varphi_t)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{u_{n,l}(t^{m+1}) - u_{n,l}(t^m)}{\Delta t} - \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}}), \\ (\varphi_{tx})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\delta_x^2 \left( \frac{1}{2} u_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{1}{2} u_{n,l}(t^m) \right)}{h_x^2} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}}), \\ (\varphi_{tz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\delta_z^2 \left( \frac{1}{2} u_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{1}{2} u_{n,l}(t^m) \right)}{h_z^2} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}}), \end{aligned}$$

$$(\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}.$$

Comecemos por calcular  $(\varphi_t)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}$ . Fazendo a expansão em Taylor com resto integral dos termos  $u_{n,l}(t^{m+1})$  e  $u_{n,l}(t^m)$  em torno de  $(x_n, z_l, t^{m+\frac{1}{2}})$ , obtemos

$$\begin{aligned} u_{n,l}(t^{m+1}) &= u_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^3 \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2})(1-s)^2 ds \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} u_{n,l}(t^m) &= u_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) - \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^3 \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2})(1-s)^2 ds. \end{aligned}$$

Então,

$$\frac{u_{n,l}(t^{m+1}) - u_{n,l}(t^m)}{\Delta t} = \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t^2}{16} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] (1-s)^2 ds,$$

pelo que

$$(\varphi_t)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t^2}{16} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] (1-s)^2 ds. \quad (3.16)$$

Determinemos agora  $(\varphi_{tx})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}$ . Para isso, façamos a expansão em Taylor com resto integral dos termos  $u_{n+1,l}(t^{m+1})$  e  $u_{n-1,l}(t^{m+1})$  em torno de  $(x_n, z_l, t^{m+1})$  e depois em torno de  $(x_n, z_l, t^{m+\frac{1}{2}})$ . Vem então

$$\begin{aligned} u_{n+1,l}(t^{m+1}) &= u_{n,l}(t^{m+1}) + h_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{h_x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{h_x^3}{3!} \left( \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{n,l}(t^{m+1}) \\ &\quad + \frac{h_x^4}{3!} \int_0^1 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{n+\lambda,l}(t^{m+1})(1-\lambda)^3 d\lambda \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} u_{n-1,l}(t^{m+1}) &= u_{n,l}(t^{m+1}) - h_x \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{h_x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{n,l}(t^{m+1}) - \frac{h_x^3}{3!} \left( \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{n,l}(t^{m+1}) \\ &\quad + \frac{h_x^4}{3!} \int_0^1 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{n-\lambda,l}(t^{m+1})(1-\lambda)^3 d\lambda. \end{aligned}$$

Deste modo, podemos escrever

$$\frac{\delta_x^2 u_{n,l}(t^{m+1})}{h_x^2} = \frac{u_{n+1,l}(t^{m+1}) - 2u_{n,l}(t^{m+1}) + u_{n-1,l}(t^{m+1})}{h_x^2}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+1}) + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+1}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \\
&= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2} \left[ \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^4 \partial t}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^4 \partial t}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \right] \\
&\quad + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 ds \right] (1-s) ds
\end{aligned}$$

e, de modo análogo,

$$\begin{aligned}
\frac{\delta_x^2 u_{n,l}(t^m)}{h_x^2} &= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} \left[ \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^4 \partial t}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^4 \partial t}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \right] \\
&\quad + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2} - \frac{s\Delta t}{2}}) + \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left( \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} - \frac{s\Delta t}{2}}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} - \frac{s\Delta t}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \right] (1-s) ds.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
(\varphi_x)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{h_x^2}{3!} \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \right] (1-\lambda)^3 d\lambda \\
&\quad + \frac{\Delta t^2}{8} \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) + \int_0^1 \frac{h_x^2}{3!} \left( \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2} - \frac{s\Delta t}{2}}) \right. \\
&\quad \left. + \int_0^1 \frac{h_x^2}{3!} \left( \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n+\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} - \frac{s\Delta t}{2}}) + \left(\frac{\partial^6 u}{\partial x^4 \partial t^2}\right)_{n-\lambda,l}(t^{m+\frac{1}{2} - \frac{s\Delta t}{2}}) \right) (1-\lambda)^3 d\lambda \right] (1-s) ds.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Podemos calcular  $\varphi_z$  e  $\varphi_{tz}$  de modo semelhante, pelo que resta apenas analisar  $(\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}$ . Começemos por ver que

$$\frac{u_{n,l}(t^{m+1}) - u_{n,l}(t^m)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \left( u_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{2} \int_0^1 \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2} + \frac{s\Delta t}{2}}) ds - u_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}}) \right)$$



$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t}{2} \int_0^1 \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) ds \\
& = \frac{1}{2} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] ds,
\end{aligned}$$

pele que podemos escrever

$$\begin{aligned}
(\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} & = \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2}{h_x^2 h_z^2} \left( \frac{1}{2} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] ds \right) \\
& = \frac{\Delta t^2}{8} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2}{h_x^2 h_z^2} \left( \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] ds \right).
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Concluimos deste modo que existe  $c_1$  uma constante positiva tal que,

$$\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h \leq c_1 (\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2), \quad m = 0, \dots, M-1.$$

Por fim, temos de averiguar como se comporta  $\delta_t \varphi_{n,l}^m / \Delta t$ . Relembremos que

$$\frac{\delta_t \varphi_{n,l}^m}{\Delta t} = \frac{\delta_t (\varphi)_{n,l}^m}{\Delta t} - \frac{\delta_t (\varphi_{tx})_{n,l}^m}{\Delta t} - \frac{\delta_t (\varphi_{tz})_{n,l}^m}{\Delta t} + \frac{\delta_t (\varphi_{txz})_{n,l}^m}{\Delta t}. \tag{3.19}$$

Ora, desenvolvendo o operador  $\delta_t$  para a primeira parcela do segundo membro de (3.19), vem

$$\frac{\delta_t (\varphi)_{n,l}^m}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \left[ (\varphi)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - (\varphi)_{n,l}^{m-\frac{1}{2}} \right].$$

De (3.16), resulta

$$\begin{aligned}
\frac{\delta_t (\varphi)_{n,l}^m}{\Delta t} & = \frac{\Delta t}{16} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] (1-s)^2 ds \\
& \quad - \frac{\Delta t}{16} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m-\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m-\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] (1-s)^2 ds
\end{aligned}$$

e, rearranjando os termos, temos

$$\begin{aligned}
\frac{\delta_t (\varphi)_{n,l}^m}{\Delta t} & = \frac{\Delta t}{16} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) - \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m-\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) \right] (1-s)^2 ds \\
& \quad + \frac{\Delta t}{16} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) - \left( \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)_{n,l} (t^{m-\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] (1-s)^2 ds.
\end{aligned}$$

Obtemos assim,

$$\frac{\delta_t (\varphi)_{n,l}^m}{\Delta t} = \frac{\Delta t^2}{16} \int_0^1 \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \right)_{n,l} (t^{m-\frac{1}{2}} + (\mu + \frac{s}{2})\Delta t) + \left( \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \right)_{n,l} (t^{m-\frac{1}{2}} + (\mu - \frac{s}{2})\Delta t) \right] (1-s)^2 d\mu ds,$$

pelo que

$$\left\| \frac{\delta_t(\varphi_t)^m}{\Delta t} \right\|_h \leq c\Delta t^2, \quad m = 1, \dots, M-1. \quad (3.20)$$

Para  $m = 1, \dots, M-1$ , podemos concluir da mesma forma que

$$\left\| \frac{\delta_t(\varphi_{tx})^m}{\Delta t} \right\|_h \leq c(h_x^2 + \Delta t^2), \quad \left\| \frac{\delta_t(\varphi_{tz})^m}{\Delta t} \right\|_h \leq c(h_z^2 + \Delta t^2), \quad \left\| \frac{\delta_t(\varphi_{txz})^m}{\Delta t} \right\|_h \leq c\Delta t^2,$$

onde  $c$  denota uma constante positiva que pode ser diferente para cada caso, pelo que

$$\left\| \frac{\delta_t \varphi^m}{\Delta t} \right\|_h \leq c_2(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2), \quad c_2 > 0.$$

Deste modo, temos

$$\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h \leq c_1(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2), \quad \left\| \frac{\delta_t \varphi^m}{\Delta t} \right\|_h \leq c_2(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2), \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}^+,$$

para  $m = 1, \dots, M-1$ , e obtemos, por fim,

$$\|e^{m+1}\|_h \leq \mathcal{O}(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2), \quad m = 1, \dots, M-1.$$

Temos o seguinte teorema de convergência.

**Teorema 3.3** (Convergência). *Seja  $u \in C^{(4,4)}(\overline{\Omega} \times [0, T])$  a solução do problema (2.2), (2.3), (2.6), (2.7), (2.8) com  $(k_1, k_2, k_3, k_4) = (0, 1, 0, 1)$  e  $g_d$  independente de  $u$ , isto é, com condições de fronteira de Dirichlet. Seja  $U_{n,l}^m$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$ ,  $l = 0, 1, \dots, L$ ,  $m = 0, 1, \dots, M$  a solução do método numérico ADI. Então, este método converge com ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z^2)$ .*

### 3.2.2 Testes numéricos

Vamos ilustrar o resultado de convergência obtido na secção anterior com alguns exemplos numéricos. Consideremos a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t) + f(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega = (0, 25, 1) \times (0, 5, 1, 75), \quad t \in (0, 1],$$

com  $f$  definida por

$$f(x, z, t) = \exp(-t) \sin(\pi x) \sin(\pi z) (2\pi - 1), \quad (3.21)$$

condição inicial

$$u(x, z, 0) = \sin(\pi x) \sin(\pi z) \quad (3.22)$$

e condições de fronteira

$$u(0, 25, z, t) = \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-t) \sin(\pi z), \quad u(1, z, t) = 0,$$

$$u(x, 0, 5, t) = \exp(-t) \sin(\pi z), \quad u(x, 1, 75, t) = -\frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-t) \sin(\pi z).$$

A solução exata deste problema é

$$u(x, z, t) = \exp(-t) \sin(\pi x) \sin(\pi z). \quad (3.24)$$

De modo a determinar a ordem de convergência numericamente, consideremos  $h_x = h_z$ . Determinemos uma aproximação à ordem de convergência no espaço da forma seguinte. Suponhamos, para um espaçamento suficientemente pequeno, que

$$\|u^M - U^M\|_{h_1} = \|e^M\|_{h_1} \approx ch_1^p \quad \text{e} \quad \|u^M - U^M\|_{h_2} = \|e^M\|_{h_2} \approx ch_2^p,$$

onde  $\|e^M\|_{h_i}$  é a norma do erro obtida com uma malha de espaçamento  $h_i$ ,  $i \in \{1, 2\}$  em ambas as direções. Então,

$$\frac{\|e^M\|_{h_1}}{\|e^M\|_{h_2}} \approx \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p,$$

pelo que

$$p \approx \frac{\log\left(\frac{\|e^M\|_{h_1}}{\|e^M\|_{h_2}}\right)}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)}.$$

Para obter uma estimativa da ordem de convergência no tempo, procede-se de forma semelhante.

Tabela 3.1 Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no tempo para o caso com condições de Dirichlet.

$\Delta t$	$\ u^M - U^M\ _h$	ordem de convergência
0,0625	$3,03299 \times 10^{-4}$	2,00
0,03125	$7,58499 \times 10^{-5}$	2,00
0,015625	$1,89646 \times 10^{-5}$	2,00
0,0078125	$4,74202 \times 10^{-6}$	2,00
0,00390625	$1,18630 \times 10^{-6}$	2,00
0,001953125	$2,97361 \times 10^{-7}$	

Na Tabela 3.1 determinamos a ordem de convergência no tempo, mantendo constante  $h_x = h_z = 0,001$  e fazendo variar  $\Delta t$ , que começa em 0,0625 e passa sucessivamente a metade. Na Tabela 3.2 determinamos a ordem de convergência no espaço, fixando  $\Delta t = 0,001$  e variando o passo no espaço, começando em 0,0625 e dividindo por dois sucessivamente. A norma considerada foi a norma  $-h$

Tabela 3.2 Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no espaço para o caso com condições de Dirichlet.

$h_x = h_z$	$\ u^M - U^M\ _h$	ordem de convergência
0,0625	$4,13370 \times 10^{-4}$	2,01
0,03125	$1,02744 \times 10^{-4}$	2,00
0,015625	$2,57037 \times 10^{-5}$	1,99
0,0078125	$6,48164 \times 10^{-6}$	1,95
0,00390625	$1,67851 \times 10^{-6}$	1,81
0,001953125	$4,77874 \times 10^{-7}$	

definida em (3.3). Numericamente, obtém-se convergência de segunda ordem tanto no espaço como no tempo, como esperado pelo estudo teórico do método feito na secção anterior.

### 3.3 Modelo com condições de fronteira mistas

Nesta secção vamos estudar a convergência do método ADI no caso em que temos condições de fronteira mistas e apresentar testes numéricos. A abordagem é um pouco diferente da que foi feita para as condições de fronteira de Dirichlet, sendo que o resultado relativo às condições mistas que aqui vamos demonstrar não foi encontrado na literatura.

#### 3.3.1 Análise da convergência

Relembremos o problema que estamos a estudar. Queremos determinar uma aproximação da solução do problema de equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t) + f(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega = (a, b) \times (c, d), \quad t \in (0, T], \quad (3.25)$$

com condição inicial

$$u(x, z, 0) = u_0(x, z), \quad (x, z) \in \Omega, \quad t \in (0, T], \quad (3.26)$$

e condições de fronteira

$$u(a, x, t) = g_a(z, t), \quad u(b, x, t) = g_b(z, t) \quad (3.27a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}(x, c, t) = g_c(x, t), \quad \frac{\partial u}{\partial z}(x, d, t) = g_d(x, t). \quad (3.27b)$$

Utilizando a notação (3.2) em (2.19), o método ADI pode ser escrito na forma

$$\frac{\delta_t U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{\delta_z^2 U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t U_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = f_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (x_n, z_l) \in \Omega_h, \quad m = 0, 1, \dots, M-1. \quad (3.28)$$

Além disso, consideremos a discretização da condição inicial (3.26) e as discretizações das condições de fronteira (3.27a) e (3.27b) dadas, respetivamente, por

$$U_{n,l}^0 = (u_0)_{n,l}, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad l = 0, 1, \dots, L \quad (3.29a)$$

$$U_{0,l}^m = (g_a)_l^m, \quad U_{N,0}^m = (g_b)_l^m, \quad l = 0, 1, \dots, L, \quad m = 1, \dots, M, \quad (3.29b)$$

$$\frac{U_{n,1}^m - U_{n,-1}^m}{2h_z} = (g_c)_n^m, \quad \frac{U_{n,L+1}^m - U_{n,L-1}^m}{2h_z} = (g_d)_n^m, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad m = 0, 1, \dots, M. \quad (3.29c)$$

No lema seguinte vamos reformular o problema para o erro, onde iremos substituir a solução nos pontos fictícios que aparecem na equação principal, pelos seus valores fornecidos pelas equações válidas na fronteira. Para isso consideremos a seguinte notação

$$\frac{\delta_{z_+}^b e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} = 2 \frac{e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} \quad \text{e} \quad \frac{\delta_{z_-}^b e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} = 2 \frac{e_{n,L-1}^{m+\frac{1}{2}} - e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2}. \quad (3.30)$$

**Lema 3.5.** *Seja  $u$  a solução do problema (3.25) – (3.27) e seja  $U$  a solução de (3.28) – (3.29). Consideremos o erro  $e_{n,l}^m$  tal que  $e_{n,l}^m = u_{n,l}^m - U_{n,l}^m$ . Temos que*

$$\frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{\bar{\delta}_z^2 e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = (\varphi)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}, \quad (3.31)$$

para  $n = 1, \dots, N-1$ ,  $l = 0, \dots, L$  e  $m = 0, \dots, M-1$ , onde  $\varphi$  representa o erro de truncatura e

$$\bar{\delta}_z^2 e_{n,l} = \begin{cases} \delta_z^2 e_{n,l}, & l = 1, \dots, L-1, \\ \delta_{z_+}^b e_{n,0}, & l = 0, \\ \delta_{z_-}^b e_{n,L}, & l = L. \end{cases} \quad (3.32)$$

*Demonstração.* Vamos substituir as discretizações das fronteira (3.29c) na equação do método. Fazendo  $l = 0$  em (3.28), temos

$$\frac{\delta_t U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - 2U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} + U_{n,-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_t (U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - 2U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} + U_{n,-1}^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}.$$

Substituindo o ponto fictício utilizando a condição de fronteira (3.29c), obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{\delta_t U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{2U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - 2U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - 2h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_t (2U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - 2U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - 2h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \\ & = f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Deste modo, podemos dizer que a solução exata do problema verifica a seguinte equação, para  $l = 0$ ,

$$\begin{aligned} & \frac{\delta_t u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - 2 \frac{u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\delta_x^2 \delta_t (u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \\ & = \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} + (\varphi)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

onde  $\varphi$  denota o erro de truncatura. Utilizando a equação (3.25), vem que

$$\begin{aligned} & \frac{\delta_t u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - 2 \frac{u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\delta_x^2 \delta_t (u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = \\ & = f_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} + (\varphi)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Recorrendo a (3.33), a equação anterior é equivalente a

$$\begin{aligned} & \frac{\delta_t u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - 2 \frac{u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\delta_x^2 \delta_t (u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = (\varphi)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} \\ & + \frac{\delta_t U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - 2 \frac{U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\delta_x^2 \delta_t (U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - h_z (g_c)_n^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}. \end{aligned}$$

Passando os termos dependentes de  $U$  para o primeiro membro, vem

$$\begin{aligned} & \frac{\delta_t (u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}})}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 (u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2} - 2 \frac{(u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}}) - (u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}})}{h_z^2} \\ & + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\delta_x^2 \delta_t [(u_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,1}^{m+\frac{1}{2}}) - (u_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} - U_{n,0}^{m+\frac{1}{2}})]}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = (\varphi)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Recordando que o erro  $e_{n,l}^m$  é tal que  $e_{n,l}^m = u_{n,l}^m - U_{n,l}^m$ , temos

$$\frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - 2 \frac{e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\delta_x^2 \delta_t (e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}})}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = (\varphi)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}},$$

que, usando (3.30) pode ser reescrito como

$$\frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{\delta_{z+}^b e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_{z+}^b \delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = (\varphi)_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}.$$

Procedendo de modo análogo para  $l = L$ , obtemos

$$\frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{\delta_{z-}^b e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \delta_{z-}^b \delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t} = (\varphi)_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}.$$

Para  $l = 1, \dots, L-1$ , a equação (3.29) não envolve pontos fictícios pelo que temos (3.31).

□

Para estudar a estabilidade do método, precisamos de definir um produto interno que inclua os pontos da fronteira na direção do eixo  $Oz$ . Definamos assim os seguintes produtos internos

$$\begin{aligned} (v^m, w^m)_h &= \sum_{n=1}^{N-1} h_x \left( \frac{h_z}{2} v_{n,0}^m w_{n,0}^m + \sum_{l=1}^{L-1} h_z v_{n,l}^m w_{n,l}^m + \frac{h_z}{2} v_{n,L}^m w_{n,L}^m \right), \\ (v^m, w^m]_x &= \sum_{n=1}^N h_x \left( \frac{h_z}{2} v_{n,0}^m w_{n,0}^m + \sum_{l=1}^{L-1} h_z v_{n,l}^m w_{n,l}^m + \frac{h_z}{2} v_{n,L}^m w_{n,L}^m \right), \\ (v^m, w^m]_z &= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{l=1}^L h_x h_z v_{n,l}^m w_{n,l}^m. \end{aligned}$$

As normas associadas são dadas por

$$\|w^m\|_h = (w^m, w^m)_h^{\frac{1}{2}}, \quad \|w^m\|_x = (w^m, w^m]_x^{\frac{1}{2}}, \quad \|w^m\|_z = (w^m, w^m]_z^{\frac{1}{2}} \quad (3.34)$$

respetivamente. Definamos ainda

$$\|w^m\|_1^2 = \left\| \frac{\delta_x w^m}{h_x} \right\|_x^2 + \left\| \frac{\delta_z w^m}{h_z} \right\|_z^2.$$

**Lema 3.6.** *Sejam  $u$  a solução do problema (3.25) – (3.27) e  $U$  a solução numérica de (3.28) – (3.29). Seja ainda o erro  $e_{n,l}^m$  tal que  $e_{n,l}^m = u_{n,l}^m - U_{n,l}^m$ . Considerando (3.30), temos a seguinte desigualdade*

$$\|\Delta_h e^{m+1}\|_h^2 \leq \exp(m\Delta t) \left( 3\|\Delta_h e^0\|_h^2 + 4\|\varphi^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t \varphi^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right), \quad (3.35)$$

para  $m = 1, \dots, M-1$ .

*Demonstração.* Fazemos o produto interno entre  $\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}} / \Delta t$  e os dois membros de (3.31), ou seja,

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h - \left( \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h + \left( \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_x^2 h_z^2 \Delta t}, \frac{\Delta_h \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \\ & = \left( f^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\Delta_h \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Comecemos por examinar a primeira parcela do membro à esquerda da equação (3.36). Temos

$$\left( \frac{\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \left( \frac{\delta_t \delta_x^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_x^2}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h + \left( \frac{\delta_t \bar{\delta}_z^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_z^2}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h. \quad (3.37)$$

A primeira parcela do segundo membro de (3.37) já foi estudada na secção 3.2.1, onde se obteve

$$\left( \frac{\delta_t \delta_x^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_x^2}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = - \left\| \frac{\delta_x \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \right\|_x^2. \quad (3.38)$$

Para a segunda parcela de (3.37), tendo em conta (3.30), vem

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\delta_t \bar{\delta}_z^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_z^2}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \\
& = \sum_{n=1}^{N-1} h_x \left( \frac{h_z \delta_{z+}^b \delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \sum_{l=1}^{L-1} h_z \frac{\delta_z^2 \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \frac{h_z \delta_{z-}^b \delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{2 h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) \\
& = \sum_{n=1}^{N-1} h_x \left( h_z \frac{\delta_t e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} \frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \sum_{l=1}^{L-1} h_z \frac{\delta_t e_{n,l+1}^{m+\frac{1}{2}} - 2\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + \delta_t e_{n,l-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right. \\
& \quad \left. - h_z \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,L-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) \\
& = \sum_{n=1}^{N-1} h_x \left( h_z \frac{\delta_t e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \sum_{l=1}^{L-1} h_z \frac{\delta_t e_{n,l+1}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right. \\
& \quad \left. - \sum_{l=1}^{L-1} h_z \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,l-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - h_z \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,L-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right).
\end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variável de  $l$  para  $l-1$  no primeiro somatório em  $l$ , resulta que

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\delta_t \bar{\delta}_z^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_z^2}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \\
& = \sum_{n=1}^{N-1} h_x \left( h_z \frac{\delta_t e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \sum_{l=1}^L h_z \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,l-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,l-1}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - \sum_{l=1}^L h_z \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,l-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right. \\
& \quad \left. - h_z \frac{\delta_t e_{n,1}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + h_z \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,L-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} - h_z \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}} - \delta_t e_{n,L-1}^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2 \Delta t} \frac{\delta_t e_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right).
\end{aligned}$$

Deste modo, obtemos

$$\left( \frac{\delta_t \bar{\delta}_z^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_z^2}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = - \left\| \frac{\delta_z \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_z \Delta t} \right\|_z^2. \quad (3.39)$$

De (3.38) e (3.39) concluímos que

$$\left( \frac{\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = - \left\| \frac{\delta_x \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_x \Delta t} \right\|_x^2 - \left\| \frac{\delta_z \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_z \Delta t} \right\|_z^2.$$

A discussão de  $(\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}} / \Delta t, \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}})_h$  é análoga à feita para o caso da secção 3.2.1, de onde obtemos

$$\left( \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}, \frac{\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)_h = \frac{\|\Delta_h e^{m+1}\|_h^2 - \|\Delta_h e^m\|_h^2}{2\Delta t}.$$



Falta apenas discutir o termo  $(\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}} / \Delta t, \Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}} / (4h_x^2 h_z^2 \Delta t^2))_h$  de (3.36). Sabendo que

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{4h_x^2 h_z^2 \Delta t} \right)_h = \frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\delta_t \delta_x^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_x^2} + \frac{\delta_t \bar{\delta}_z^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_z^2}, \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{4h_x^2 h_z^2 \Delta t} \right)_h \\ & = \frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\delta_t \delta_x^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_x^2} \Delta t h_z^2, \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{4h_x^2 h_z^2 \Delta t} \right)_h + \frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\delta_t \bar{\delta}_z^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_z^2}, \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{4h_x^2 h_z^2 \Delta t} \right)_h, \end{aligned} \quad (3.40)$$

desenvolvendo os operadores  $\delta_x^2$  e  $\bar{\delta}_z^2$  na primeira parcela do segundo membro de (3.40) e usando os mesmos argumentos utilizados para analisar (3.37), resulta

$$\frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\delta_t \delta_x^2 e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t h_x^2}, \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{4h_x^2 h_z^2 \Delta t} \right)_h = -\frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_x \delta_x^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right\|_z^2.$$

Procedendo de modo análogo para a outra parcela, obtemos

$$\frac{\Delta t^2}{4} \left( \frac{\delta_t \Delta_h e^{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{4h_x^2 h_z^2 \Delta t} \right)_h = -\frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_x \bar{\delta}_z^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_x h_z^2 \Delta t} \right\|_x^2 - \frac{\Delta t^2}{4} \left\| \frac{\delta_z \delta_x^2 \delta_t e^{m+\frac{1}{2}}}{h_z h_x^2 \Delta t} \right\|_z^2.$$

Vejamos agora o termo  $\|\Delta_h e^0\|_h^2$ . Ora,

$$\|\Delta_h e^0\|_h^2 = \left\| \frac{\delta_x^2 e^0}{h_x^2} + \frac{\bar{\delta}_z^2 e^0}{h_z^2} \right\|_h^2.$$

Como temos que  $U_{n,l}^0 = u_{n,l}^0$  para  $n = 0, 1, \dots, N$  e  $l = 0, 1, \dots, L$ , vem que

$$e_{n,l}^0 = 0, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad l = 0, 1, \dots, L.$$

Sendo assim,

$$\|\Delta_h e^0\|_h^2 = \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{h_z}{2} \left| \frac{\delta_x^2 e_{n,0}^0}{h_x^2} + \frac{\delta_{z_+}^2 e_{n,0}^0}{h_z^2} \right| + \sum_{n=1}^{N-1} h_x \sum_{l=1}^{L-1} h_z \left| \frac{\delta_x^2 e_{n,l}^0}{h_x^2} + \frac{\delta_z^2 e_{n,l}^0}{h_z^2} \right| + \sum_{n=1}^{N-1} h_x \frac{h_z}{2} \left| \frac{\delta_x^2 e_{n,L}^0}{h_x^2} + \frac{\delta_{z_-}^2 e_{n,L}^0}{h_z^2} \right| = 0.$$

Seguindo os mesmos passos do Lema 3.3 e tendo em conta os Lemas 3.2 e 3.1, concluímos que

$$\|\Delta_h e^{m+1}\|_h^2 \leq \exp(m\Delta t) \left( 4\|\varphi^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \frac{\delta_t \varphi^i}{\Delta t} \right\|_h^2 + 4\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right). \quad (3.41)$$

□

De modo a obtermos uma estimativa para  $\|e^m\|_h$ , vamos relacionar  $\|\Delta_h e^m\|_h$  com  $\|e^m\|_h$ , através do seguinte lema.

**Lema 3.7.** Consideremos  $\{w_{n,l}^m : n = 0, 1, \dots, N, l = 0, 1, \dots, L, m = 0, 1, \dots, M\}$  tal que, para  $m = 0, \dots, M$ ,  $w_{n,l}^m = 0$  para  $n = 0, N$  e além disso, consideremos a notação (3.30). Então,

$$\|w^m\|_h \leq \frac{(b-a)^2}{2} \|\Delta_h w^m\|_h.$$

*Demonstração.* Em primeiro lugar, provemos que  $\|w^m\|_h^2 \leq (b-a)^2 |w^m|_1^2 / 2$ . Para começar, sabemos que

$$\|w^m\|_h^2 \leq \frac{(b-a)^2}{2} \left\| \left[ \frac{\delta_x w^m}{h_x} \right] \right\|_x^2,$$

de [10], pelo que podemos escrever

$$\|w^m\|_h^2 \leq \frac{(b-a)^2}{2} \left\| \left[ \frac{\delta_x w^m}{h_x} \right] \right\|_x^2 + \frac{(b-a)^2}{2} \left\| \left[ \frac{\delta_z w^m}{h_z} \right] \right\|_z^2.$$

Provámos portanto que

$$\|w^m\|_h^2 \leq \frac{(b-a)^2}{2} |w^m|_1^2. \quad (3.42)$$

Provemos agora que  $|w^m|_1^2 \leq \|\Delta_h w^m\|_h \|w^m\|_h$ . Como temos  $w_{n,l}^m = 0$ , para  $n = 0, N, l = 0, \dots, L$  e  $m = 0, \dots, M$ , é fácil deduzir que

$$\|\delta_x w^m\|_h^2 = -(\delta_x^2 w^m, w^m)_h.$$

Por outro lado, sabendo (3.30), podemos demonstrar que

$$\|\delta_z w^m\|_h^2 = -(\delta_z^2 w^m, w^m)_h.$$

Sendo assim, utilizando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, concluímos que

$$|w^m|_1^2 \leq \|\Delta_h w^m\|_h \|w^m\|_h. \quad (3.43)$$

Finalmente, de (3.42) e (3.43), resulta

$$\|w^m\|_h \leq \frac{(b-a)^2}{2} \|\Delta_h w^m\|_h.$$

□

Vamos agora estabelecer o teorema de estabilidade para o método ADI com condições de fronteira mistas (3.28) – (3.29).

**Teorema 3.4** (Estabilidade). *Nas condições do Lema 3.6, o erro satisfaz, para  $m = 1, \dots, M-1$ ,*

$$\|e^{m+1}\|_h^2 \leq \frac{(b-a)^4}{4} \exp(m\Delta t) \left( 4\|\varphi^{\frac{1}{2}}\|_h^2 + 4\Delta t \sum_{i=1}^m \left\| \left[ \frac{\delta_t \varphi^i}{\Delta t} \right] \right\|_h^2 + 4\|\varphi^{m+\frac{1}{2}}\|_h^2 \right). \quad (3.44)$$

*Demonstração.* Partindo de (3.41) e usando o Lema 3.7, estabelecemos de imediato a desigualdade pretendida.  $\square$

Falta ainda provar a convergência do método numérico. Para isso, basta provar a sua consistência e, uma vez mais, no que se segue, vamos denotar  $u(x_n, z_l, t^m)$  por  $u_{n,l}(t^m)$ . Consideremos de novo que

$$(\varphi)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = (\varphi_t)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - (\varphi_{tx})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} - (\varphi_{tz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} + (\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}},$$

com

$$\begin{aligned} (\varphi_t)_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{u_{n,l}(t^{m+1}) - u_{n,l}(t^m)}{\Delta t} - \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}}), \\ (\varphi_{tx})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\delta_x^2 \left( \frac{1}{2} u_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{1}{2} u_{n,l}(t^m) \right)}{h_x^2} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}}), \\ (\varphi_{tz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\bar{\delta}_z^2 \left( \frac{1}{2} u_{n,l}(t^{m+1}) + \frac{1}{2} u_{n,l}(t^m) \right)}{h_z^2} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,l} (t^{m+\frac{1}{2}}), \\ (\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} &= \frac{\Delta t^2 \delta_x^2 \bar{\delta}_z^2 \delta_t u_{n,l}^{m+\frac{1}{2}}}{4 h_x^2 h_z^2 \Delta t}. \end{aligned}$$

Para  $l = 1, \dots, L-1$ , já estudámos o erro de truncatura, nomeadamente em (3.16), (3.17) e (3.18). Para  $(\varphi_t)_{n,l}$  e  $(\varphi_{tx})_{n,l}$  com  $l = 0, L$  é análogo. Apenas temos de analisar o que acontece para  $\varphi_z$  e  $\varphi_{txz}$  nos pontos da fronteira na direção do eixo  $Oz$ .

Começemos por desenvolver  $(\varphi_{tz})_{n,0}^{m+\frac{1}{2}}$ . Fazendo a expansão de Taylor de  $u_{n,1}(t^{m+1})$  em torno de  $(x_n, z_0, t^{m+1})$ , vem

$$u_{n,1}(t^{m+1}) = u_{n,0}(t^{m+1}) + h_z \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{n,0} (t^{m+1}) + \frac{h_z^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,0} (t^{m+1}) + \frac{h_z^3}{2} \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,\gamma} (t^{m+1}) (1-\gamma)^2 d\gamma$$

e como, para todo o  $m = 0, \dots, M$ ,  $\left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{n,0} (t^m) = (g_c)_n(t^m)$  pela condição de fronteira do problema, temos que

$$\begin{aligned} 2 \frac{u_{n,1}(t^{m+1}) - u_{n,0}(t^{m+1}) - h_z (g_c)_n(t^{m+1})}{h_z^2} &= \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,0} (t^{m+1}) + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,\gamma} (t^{m+1}) (1-\gamma)^2 d\gamma \\ &= \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,0} (t^{m+\frac{1}{2}}) + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,\gamma} (t^{m+\frac{1}{2}}) (1-\gamma)^2 d\gamma + \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^2 \partial t} \right)_{n,0} (t^{m+\frac{1}{2}}) \right. \\ &\quad \left. + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^3 \partial t} \right)_{n,\gamma} (t^{m+\frac{1}{2}}) (1-\gamma)^2 d\gamma \right] + \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2} \right)_{n,0} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) \right. \\ &\quad \left. + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2} \right)_{n,\gamma} (t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) (1-\gamma)^2 d\gamma \right] (1-s) ds, \end{aligned}$$

onde no último passo fizemos uma expansão de Taylor em torno de  $(x_n, z_l, t^{m+\frac{1}{2}})$ . Procedendo de modo análogo para  $u_{n,l}(t^m)$ , vem

$$\begin{aligned} 2 \frac{u_{n,1}(t^m) - u_{n,0}(t^m) - h_z(g_c)_n(t^m)}{h_z^2} &= \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}}) + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}})(1-\gamma)^2 d\gamma \\ &- \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^2 \partial t} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}}) + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^3 \partial t} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}})(1-\gamma)^2 d\gamma \right] \\ &+ \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right] (1-s) ds, \end{aligned}$$

peço que

$$\begin{aligned} 2 \frac{u_{n,1}(t^{m+\frac{1}{2}}) - u_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}}) - h_z(g_c)_n(t^{m+\frac{1}{2}})}{h_z^2} &= \\ &= \frac{1}{2} 2 \frac{u_{n,1}(t^{m+1}) - u_{n,0}(t^{m+1}) - h_z(g_c)_n(t^{m+1})}{h_z^2} + \frac{1}{2} 2 \frac{u_{n,1}(t^m) - u_{n,0}(t^m) - h_z(g_c)_n(t^m)}{h_z^2} \\ &= \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}}) + h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}})(1-\gamma)^2 d\gamma + \frac{\Delta t^2}{8} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) \right. \\ &+ h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma + \left. \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right. \\ &+ \left. h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right] (1-s) ds. \end{aligned}$$

Sendo assim,

$$\begin{aligned} (\varphi_{tz})_{n,0}^{m+\frac{1}{2}} &= h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}})(1-\gamma)^2 d\gamma + \frac{\Delta t^2}{8} \int_0^1 \left[ \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) \right. \\ &+ h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma + \left. \left( \frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2} \right)_{n,0}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right. \\ &+ \left. h_z \int_0^1 \left( \frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2} \right)_{n,\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right] (1-s) ds. \end{aligned}$$

Para  $l = L$  temos, do mesmo modo,  $(\varphi_{tz})_{n,L}^{m+\frac{1}{2}}$ . Fazendo a expansão de Taylor de  $u_{n,L-1}(t^{m+1})$  em torno de  $(x_n, z_L, t^{m+1})$ , vem

$$u_{n,L-1}(t^{m+1}) = u_{n,L}(t^{m+1}) - h_z \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{n,L}(t^{m+1}) + \frac{h_z^2}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_{n,L}(t^{m+1}) - \frac{h_z^3}{2} \int_0^1 \left( \frac{\partial^3 u}{\partial z^3} \right)_{n,L-\gamma}(t^{m+1})(1-\gamma)^2 d\gamma.$$

Como, pela condição de fronteira do problema  $\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{n,L}(t^m) = (g_d)_n^m$  para  $m = 0, \dots, M$ , fazendo uma expansão de Taylor em torno de  $(x_n, z_L, t^{m+\frac{1}{2}})$  temos que

$$\begin{aligned} 2 \frac{u_{n,L-1}(t^{m+\frac{1}{2}}) - u_{n,L}(t^{m+\frac{1}{2}}) + h_z(g_d)_n^{m+\frac{1}{2}}}{h_z^2} &= \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right)_{n,L}(t^{m+\frac{1}{2}}) - h_z \int_0^1 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial z^3}\right)_{n,L-\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}})(1-\gamma)^2 d\gamma \\ &+ \frac{\Delta t^2}{8} \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2}\right)_{n,L}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) - h_z \int_0^1 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2}\right)_{n,L-\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right. \\ &\left. + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2}\right)_{n,L}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) - h_z \int_0^1 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2}\right)_{n,L-\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right] (1-s) ds, \end{aligned}$$

donde vem,

$$\begin{aligned} (\varphi_{tz})_{n,L}^{m+\frac{1}{2}} &= -h_z \int_0^1 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial z^3}\right)_{n,L-\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}})(1-\gamma)^2 d\gamma \\ &+ \frac{\Delta t^2}{8} \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2}\right)_{n,L}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + h_z \int_0^1 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2}\right)_{n,L-\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right. \\ &\left. + \left(\frac{\partial^4 u}{\partial z^2 \partial t^2}\right)_{n,L}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) - h_z \int_0^1 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial z^3 \partial t^2}\right)_{n,L-\gamma}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2})(1-\gamma)^2 d\gamma \right] (1-s) ds. \end{aligned}$$

Por fim, seguindo os passos utilizados para chegarmos a (3.18), obtemos para  $n = 1, \dots, N-1$ ,  $l = 0, \dots, L$ ,

$$(\varphi_{txz})_{n,l}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t^2}{8} \frac{\delta_x^2 \delta_z^2}{h_x^2 h_z^2} \left( \int_0^1 \left[ \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} + \frac{s\Delta t}{2}) + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{n,l}(t^{m+\frac{1}{2}} - \frac{s\Delta t}{2}) \right] ds \right).$$

Deste modo, recorrendo ao Teorema de estabilidade (3.4) e usando um raciocínio análogo ao que foi feito para obter (3.20), concluimos que

$$\|e^{m+1}\|_h \leq \mathcal{O}(\Delta t^2 + h_x^2 + h_z), \quad m = 1, \dots, M-1. \quad (3.45)$$

Terminamos assim de demonstrar o seguinte teorema.

**Teorema 3.5** (Convergência). *Seja  $u \in C^{(4,4)}(\bar{\Omega} \times [0, T])$  a solução do problema (2.2), (2.3), (2.6), (2.7), (2.8) para  $(k_1, k_2, k_3, k_4) = (1, 0, 1, 0)$  e  $g_d$  independente de  $u$  e seja  $U_{n,l}^m$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$ ,  $l = 0, 1, \dots, L$ ,  $m = 0, 1, \dots, M$ , a solução do método numérico ADI (3.28) – (3.29). Então, este método é convergente.*

De acordo com (3.45), obtivemos que o método ADI com condições de fronteira mistas tem ordem de convergência pelo menos um no espaço e dois no tempo. Na secção seguinte vamos apresentar testes que ilustram a convergência do método, numericamente.

### 3.3.2 Testes numéricos

Consideremos a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t) + f(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega = (0, 25, 1, 5) \times (1, 5, 2, 75), \quad t \in (0, 1],$$

com  $f$  dada por (3.21), condição inicial (3.22) e condições de fronteira

$$\begin{aligned} u(0, 25, z, t) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-t) \sin(\pi z), & u(1, 5, z, t) &= -\exp(-t) \sin(\pi z), \\ \frac{\partial u}{\partial z}(x, 1, 5, t) &= 0, & \frac{\partial u}{\partial z}(x, 2, 75, t) &= -\frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-t) \sin(\pi x). \end{aligned}$$

A solução exata deste problema é dada por (3.24).

Tabela 3.3 Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no tempo para o caso com condições de fronteira mistas.

$\Delta t$	$\ u^M - U^M\ _h$	ordem de convergência
0,0625	$1,95309 \times 10^{-3}$	2,00
0,03125	$4,86700 \times 10^{-4}$	2,00
0,015625	$1,21639 \times 10^{-4}$	2,00
0,0078125	$3,04622 \times 10^{-5}$	1,99
0,00390625	$7,67254 \times 10^{-6}$	1,96
0,001953125	$1,97641 \times 10^{-6}$	

Para obtermos a ordem de convergência do método procedemos do mesmo modo que na secção 3.2.2. Contudo, a norma aqui considerada foi a norma  $-h$  definida em (3.34). Como podemos ver pela observação das Tabelas 3.3 e 3.4, numericamente, obtém-se segunda ordem tanto no espaço como no tempo, o que representa um aumento de ordem relativamente ao que provámos teoricamente.

### 3.4 Modelo com uma condição de fronteira não linear

Nesta secção vamos apenas apresentar alguns testes numéricos de modo a ilustrar a ordem de convergência do método descrito na secção 2.3.3. Relembramos que este método é uma combinação do método ADI-Peaceman-Rachford e do método de Newton. Aqui apresentamos um exemplo com condições de fronteira de Dirichlet e uma condição não linear.

Tabela 3.4 Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no espaço para o caso com condições de fronteira mistas.

$h_x = h_z$	$\ u^M - U^M\ _h$	ordem de convergência
0,0625	$4,36758 \times 10^{-4}$	2,00
0,03125	$1,08962 \times 10^{-4}$	2,00
0,015625	$2,72277 \times 10^{-5}$	2,00
0,0078125	$6,80850 \times 10^{-6}$	2,00
0,00390625	$1,70460 \times 10^{-6}$	1,99
0,001953125	$4,28689 \times 10^{-7}$	

### 3.4.1 Testes numéricos

Consideremos o problema de equação

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, z, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, z, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}(x, z, t) + f(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega = (0, 25, 0, 5) \times (0, 25, 0, 5), \quad t \in (0, 1],$$

com  $f$  dada por (3.21), condição inicial (3.22) e condições de fronteira

$$u(0, 25, z, t) = \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-t) \sin(\pi z), \quad u(0, 5, z, t) = 0,$$

$$u(x, 0, 25, t) = \frac{\sqrt{2}}{2} \exp(-t) \sin(\pi x), \quad -\frac{\partial u}{\partial z}(x, 0, 5, t) = u^4(x, 0, 5, t) - c^2(x, t) + u(x, 0, 5, t) - c(x, t),$$

com  $c(x, t) = -1/2 + \sqrt{1 + 4(\exp(-t) \sin(\pi x) + \exp(-4t) \sin(\pi x)^4)}/2$ . A solução exata deste problema é dada, uma vez mais, por (3.24).

A norma considerada para determinar uma estimativa para a ordem de convergência foi a norma  $-h$  definida em (3.34), uma vez que temos de considerar os pontos da fronteira na direção do eixo  $Oz$ .

Na Tabela 3.5 determinamos uma estimativa para a ordem de convergência no tempo, mantendo constante  $h_x = h_z = 0,001$  e passando  $\Delta t$  a metade. A tabela está de acordo com o esperado, uma vez que o método ADI é de segunda ordem no tempo assim como o método de Newton, sendo que o método de Newton precisa de uma solução inicial suficientemente próxima para convergir, o que acontece para valores de  $\Delta t$  menores.

Na Tabela 3.6 determinamos uma estimativa para a ordem de convergência no espaço, fixando  $\Delta t = 0,001$  e dividindo o passo no espaço por dois sucessivamente. Os valores também vão ao encontro do esperado, uma vez que utilizámos uma aproximação de primeira ordem para discretizar a derivada presente na condição de fronteira não linear.

Tabela 3.5 Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no tempo para o caso com uma condição de fronteira não linear.

$\Delta t$	$\ u^M - U^M\ _h$	ordem de convergência
0,0625	$7,74752 \times 10^{-3}$	0,24
0,03125	$6,57350 \times 10^{-3}$	0,67
0,015625	$4,13633 \times 10^{-3}$	1,16
0,0078125	$1,85251 \times 10^{-3}$	1,76
0,00390625	$5,45316 \times 10^{-4}$	2,02
0,001953125	$1,34398 \times 10^{-4}$	

Tabela 3.6 Norma do erro e estimativa da ordem de convergência no espaço para o caso com uma condição de fronteira não linear.

$\Delta t$	$\ u^M - U^M\ _h$	ordem de convergência
0,0625	$4,11361 \times 10^{-4}$	0,60
0,03125	$2,71419 \times 10^{-4}$	0,82
0,015625	$1,53832 \times 10^{-4}$	0,89
0,0078125	$8,30063 \times 10^{-5}$	0,90
0,00390625	$4,44687 \times 10^{-5}$	0,87
0,001953125	$2,43850 \times 10^{-5}$	



## Capítulo 4

# Conclusão

Neste trabalho estudámos um modelo matemático que pretende simular a evolução térmica do SLM. O estudo do problema bidimensional, que consistiu na simplificação do modelo tridimensional, foi o nosso primeiro passo na compreensão do problema.

No sentido de determinar uma solução numérica para esse modelo, estudámos neste trabalho o método da direção implícita alternada Peaceman-Rachford. Este método ADI é um método computacionalmente eficiente que constitui uma alternativa ao método de Crank-Nicolson, para problemas de dimensão superior a um no espaço. Sumariamente, a sua implementação consiste na resolução de dois ou três sistemas envolvendo matrizes tridiagonais, consoante estejamos perante um problema em duas ou três dimensões, respetivamente.

Neste trabalho também estudámos a convergência do método ADI Peaceman-Rachford em duas dimensões, para condições de fronteira de Dirichlet e para condições de fronteira mistas. Teoricamente, provou-se que o método ADI sujeito a condições de fronteira de Dirichlet tem convergência de segunda ordem no tempo e no espaço. A análise da convergência do método ADI Peaceman-Rachford com condições de fronteira mistas não é trivial e não foi encontrada na literatura, sendo que aqui provámos que o método bidimensional é convergente. Numericamente, verificámos que o método tem convergência de segunda ordem no tempo e no espaço em ambos os casos.

Apesar de não estar incluído neste trabalho, prova-se que o método ADI-Peaceman Rachford em três dimensões é condicionalmente estável. Para além disso, a convergência de primeira ordem no tempo faz com que este método não seja o mais utilizado em problemas de três ou mais dimensões. De facto, existem outros métodos ADI para mais do que duas dimensões espaciais que são incondicionalmente estáveis e têm convergência de ordem pelo menos dois, como é o caso do método ADI Douglas-Rachford [12, 17]. De qualquer modo, em termos de eficiência computacional, o método ADI Peaceman-Rachford tem vantagem relativamente ao método  $\theta$  correspondente (2.42). Como trabalho futuro tencionamos explorar outros métodos ADI em três dimensões, com o intuito de os aplicar na resolução do problema de fusão seletiva a *laser*.



# Bibliografia

- [1] Boyd, J. P. (2001). *Chebyshev and Fourier spectral methods*. Courier Corporation.
- [2] Contuzzi, N., Campanelli, S., and Ludovico, A. (2011). 3 d finite element analysis in the selective laser melting process. *International Journal of Simulation Modelling*, 10(3):113–121.
- [3] Criales, L. E., Arisoy, Y. M., and Özel, T. (2016). Sensitivity analysis of material and process parameters in finite element modeling of selective laser melting of inconel 625. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 86(9-12):2653–2666.
- [4] Dai, K. and Shaw, L. (2005). Finite element analysis of the effect of volume shrinkage during laser densification. *Acta Materialia* 53, page 4743–4754.
- [5] Foroozmehr, A., Badrossamay, M., Foroozmehr, E., et al. (2016). Finite element simulation of selective laser melting process considering optical penetration depth of laser in powder bed. *Materials & Design*, 89:255–263.
- [6] Gockenbach, M. and Schmidtke, K. (2009). Newton’s law of heating and the heat equation. *Involve, a Journal of Mathematics*, 2(4):419–437.
- [7] Hodge, N., Ferencz, R., and Solberg, J. (2014). Implementation of a thermomechanical model for the simulation of selective laser melting. *Computational Mechanics*, 54(1):33–51.
- [8] Huang, Y., Yang, L., and Yang, Y. (2005). Finite element analysis of thermal behaviour of metal powder during selective laser melting. *Acta Materialia* 53, page 4743–4754.
- [9] Hussein, A., Hao, L., Yan, C., and Everson, R. (2013). Finite element simulation of the temperature and stress fields in single layers built without-support in selective laser melting. *Materials and Design* 52, pages 638–647.
- [10] Jovanović, B. and Süli, E. (2013). *Analysis of finite difference schemes: for linear partial differential equations with generalized solutions*, volume 46. Springer Science & Business Media.
- [11] Kolossov, S., Boillat, E., Glardon, R., Fischer, P., and Locher, M. (2004). 3d fe simulation for temperature evolution in the selective laser sintering process. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 44(2):117–123.
- [12] Lakoba, T. (2014). The heat equation in 2 and 3 spatial dimensions [PDF]. [http://www.cems.uvm.edu/~tlakoba/math337/notes\\_15.pdf](http://www.cems.uvm.edu/~tlakoba/math337/notes_15.pdf).
- [13] Liao, H. and Sun, Z. (2010). Maximum norm error bounds of adi and compact adi methods for solving parabolic equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 26(1):37–60.
- [14] Richtmyer, R. and Morton, K. (1967). *Difference Methods for Initial-Value Problems*. Interscience Publishers, second edition.
- [15] Rupp, I. and Péniguel, C. (1999). Coupling heat conduction, radiation and convection in complex geometries. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 9.

- 
- [16] Sod, G. A. (1985). *Numerical methods in fluid dynamics: initial and initial boundary-value problems*, volume 1. Cambridge University Press.
- [17] Thomas, J. (1995). *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Springer-Verlag New York, Inc.
- [18] Valli, A. and Quarteroni, A. (1997). *Numerical approximation of partial differential equations*, volume 23. Springer, second edition.
- [19] Xiao, B. and Zhang, Y. (2007). Marangoni and buoyancy effects on direct metal laser sintering with a moving laser beam. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 51(8):715–733.
- [20] Yin, J., Zhu, H., Ke, L., Hu, P., He, C., Zhang, H., and Zeng, X. (2016). A finite element model of thermal evolution in laser micro sintering. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 83:1847–1859.
- [21] Zeng, K., Pal, D., and Stucker, B. (2012). A review of thermal analysis methods in laser sintering and selective laser melting. *Proceedings of the Solid Freeform Fabrication Symposium, Austin, TX*, pages 796–814.