

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Análise de Fluxos
Unidimensionais via Método
de Runge-Kutta e Noções da
Teoria de “Shadowing”**

por

Carolina Cardoso

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli
Orientador

Prof. Dr. Mark Thompson
Co-orientador

Porto Alegre, Outubro de 2001.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Cardoso, Carolina

Análise de Fluxos Unidimensionais via Método de Runge-Kutta e Noções da Teoria de "Shadowing" / Carolina Cardoso.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2001.

120 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2001.

Orientador: De Bortoli, Álvaro Luiz; Co-orientador: Thompson, Mark

Dissertação: Matemática Aplicada
Modelo, Dissertação

**Análise de Fluxos
Unidimensionais via Método de
Runge-Kutta e Noções da Teoria
de “Shadowing”**

por

Carolina Cardoso

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica de Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli

Co-orientador: Prof. Dr. Mark Thompson

Banca examinadora:

Prof. Dr. Marco Antônio Raupp
LNCC

Prof. Dr. Andrei Bourchtein
UFPel

Prof. Dr. Paulo Zingano
UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
19 de Outubro de 2001.

Prof. Vilmar Trevisan
Coordenador

*A duas pessoas admiráveis,
meus pais, Maria Helena e Odilon.*

AGRADECIMENTO

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da UFRGS pela oportunidade de frequentar o seu curso de Mestrado e à CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - pelo financiamento dos meus estudos.

Agradeço aos Professores Álvaro L. De Bortoli e Mark Thompson pela sua orientação, mas principalmente pelas inúmeras e frutíferas discussões. Agradeço também ao Professor Rudnei D. da Cunha pela sua ajuda com a última parte do trabalho, na qual os seus conhecimentos computacionais sobre cálculo de autovalores tornaram-se fundamentais.

Agradeço aos amigos e colegas do Licc, companheiros de muitas dúvidas, mas também de muitas soluções. Gostaria de registrar uma lembrança especial para a Ana, a Cristiane, a Denise, a Lessa, a Sani e a Sânzara, que me acompanham desde o início da graduação.

Agradeço ao Evandro, pelo seu amor e carinho em todas as horas.

Agradeço à minha família, por ter me ensinado a fazer escolhas e por ter me mostrado o caminho; mas principalmente, pelo apoio muitas vezes discreto e silencioso, mas sem dúvida constante.

LISTA DE SÍMBOLOS

A	matriz jacobiana do vetor fluxo \vec{Q}
$arg(\cdot)$	argumento de um ângulo
c_v	calor específico a volume constante
c_p	calor específico à pressão constante
c	velocidade do som
$C, c, \delta, \theta, K, M$	constantes
$D(L)$	domínio do operador L
\vec{D}	vetor dissipação artificial
D_p	derivada de Fréchet
E	energia total
e	energia interna por unidade de massa
g	fator de amplificação
h	entalpia por unidade de massa, distância entre dois pontos no espaço
i	$\sqrt{-1}$
k	passo de tempo
$k^{(2)}, k^{(4)}$	coeficientes de dissipação
L_D	operador dissipação
$L(t)$	gerador infinitesimal do semigrupo $T(t)$
L_Q	discretização espacial dos termos convectivos
L_D	discretização espacial dos termos dissipativos
m	quantidade de movimento em relação à velocidade v
M	número de Mach
p	pressão, modos pequenos da solução u
\bar{p}	aproximação de Galerkin
\vec{P}	vetor resíduo
P	razão entre a pressão antes e depois do choque, projeção no espaço L^2
q	modos grandes da solução u
\vec{Q}	vetor dos fluxos convectivos
R	constante dos gases,
Re	número de Reynolds
s	entropia
S_ω	setor do plano complexo
S_+	operador para frente
S_-	operador para trás
T	temperatura
$T(t)$	família de operadores lineares limitados
$T(\bar{z})$	aplicação de um conjunto S em $\mathbb{R}^{m(N+1)}$
t/L	espessura relativa de uma onda de choque

u	velocidade, solução da equação de Burgers
V	velocidade de propagação da descontinuidade de contato
X	espaço de Banach
\vec{W}	vetor das variáveis características
\hat{y}	solução aproximada
z	razão entre a massa específica antes e depois do choque, símbolo de Fourier da discretização espacial

Símbolos Especiais

α_r	coeficientes do método de Runge-Kutta
β	número de onda
γ	razão entre calores específicos
Δ	operador de Dirichlet
ϵ_n	erro global no tempo n
$\epsilon^{(2)}$ e $\epsilon^{(4)}$	coeficientes de dissipação
η	número de onda adimensional
λ	comprimento de onda, número de Courant
λ_m	autovalor do operador de Dirichlet
μ	coeficiente de dissipação
ν	sensor de pressão, viscosidade
ξ	ângulo de fase
ρ	massa específica
σ	velocidade de propagação da descontinuidade
$\sigma(\cdot)$	espectro de um operador
τ	intervalo de tempo
ϕ	solução dinâmica simulada
Φ	sistema dinâmico discreto da solução exata
ω	freqüência de onda, ângulo
Ω	conjunto aberto
$\ \cdot \ $	norma euclidiana
$\ \cdot \ _p$	norma L^p
$\ \cdot \ _h$	norma no espaço discreto das funções da malha
$\ \cdot \ _\infty$	norma do supremo essencial
$ \cdot $	norma em um espaço de Banach
\mathbb{C}	conjunto dos números complexos
\mathbb{R}	conjunto dos números reais
\mathbb{Z}	conjunto dos números inteiros

SUMÁRIO

LISTA DE SÍMBOLOS	III
LISTA DE FIGURAS	VII
LISTA DE TABELAS	IX
RESUMO	X
ABSTRACT	XI
1 INTRODUÇÃO	1
2 O PROBLEMA FÍSICO	12
2.1 A equação de Burgers	14
2.2 As equações de Euler	15
2.2.1 Propriedades das equações de Euler	18
2.3 Tubo de choque	22
2.3.1 Descrição do algoritmo	33
3 PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO NUMÉRICA EM DIFERENÇAS FINITAS	36
3.1 Algumas Definições Básicas	39
3.2 A análise de von Neumann e o Método de Fourier	43
3.3 Dissipação	48
3.3.1 Dissipação Natural - Equações de Burgers	48
3.3.2 Definição de Dissipação Numérica	49
3.3.3 Dissipação Artificial	54
3.4 Esquema de evolução temporal	65
3.4.1 Métodos clássicos de Runge-Kutta	69
3.4.2 Esquemas simplificados de multi-estágios	73

4	CONSIDERAÇÕES ANALÍTICAS: TAXAS DE CONVERGÊNCIA E <i>SHADOWING</i> FINITO	76
4.1	Estimativas a posteriori de erro para o método de Runge-Kutta em dimensão infinita	76
4.1.1	Definições importantes	76
4.1.2	Análise da convergência de um método de Runge-Kutta sim- plificado	78
4.2	O que é <i>shadowing</i>	88
4.3	Algumas considerações analíticas sobre a equação de Burgers	91
4.4	<i>Shadowing</i> finito para a equação de Burgers	99
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	111
	BIBLIOGRAFIA	114

LISTA DE FIGURAS

Fig. 2.1	Estado inicial (em $t = 0$) [21]	12
Fig. 2.2	Estado do escoamento em $t > 0$ [21]	26
Fig. 2.3	Evolução no tempo da solução exata do tubo de choque [2]	26
Fig. 3.1	Representação esquemática dos pontos no eixo das abcissas	37
Fig. 3.2	Ilustração para as derivadas de primeira ordem [22]	38
Fig. 3.3	Relações entre consistência, estabilidade e convergência [22]	42
Fig. 3.4	Representação do fator de amplificação para o esquema <i>upwind</i> . [22]	47
Fig. 3.5	Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 1$	59
Fig. 3.6	Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 10$	59
Fig. 3.7	Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 25$	60
Fig. 3.8	Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 1$	60
Fig. 3.9	Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 10$	61
Fig. 3.10	Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 25$	61
Fig. 3.11	Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 1$	62
Fig. 3.12	Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 10$	62
Fig. 3.13	Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 25$	63
Fig. 3.14	Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 10$ para a malha refinada.	63
Fig. 3.15	Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 10$ para a malha refinada.	64

Fig. 3.16	Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 10$ para a malha refinada.	64
Fig. 3.17	Regiões de estabilidade para o método de Runge-Kutta, $r=1,2,3,4$	72
Fig. 3.18	Intersecção da região de estabilidade para o método de Runge-Kutta, $r=1,2$, com o símbolo de Fourier para $\mu = 0$	72
Fig. 3.19	Intersecção da região de estabilidade para o método de Runge-Kutta, $r=3,4$, com o símbolo de Fourier para $\mu = 0$	73
Fig. 4.1	Órbitas para x_0 e y_0 [29]	90
Fig. 4.2	Órbitas para y_0 e z_0 [29]	90
Fig. 4.3	Evolução de L para a linearização da equação de Burgers com condição inicial $u_0 = 1$ ao longo do tempo.	109
Fig. 4.4	Evolução de L para a linearização da equação de Burgers ao longo do tempo com condição inicial variável.	109
Fig. 4.5	Ampliação da figura 4.3 perto de $L = 0$	110
Fig. 4.6	Ampliação da figura 4.4 perto de $L = 0$	110

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Relação entre o número de estágios e a máxima ordem possível	70
Tabela 3.2	Relação entre os coeficientes γ e o número de estágios [31] . . .	75

RESUMO

Neste trabalho faz-se uma análise de fluxos unidimensionais usando as equações de Burgers e de Euler. Para esta última, é obtida a solução exata e uma aproximação desta via método numérico. A obtenção da solução exata é baseada na combinação de ondas simples (uma onda de choque, uma descontinuidade de contato e uma onda de expansão) e na validade das relações de salto para as equações de Euler. Os resultados assim obtidos são utilizados para verificar (certificar) os resultados numéricos.

As equações de Euler são integradas no tempo através de um esquema simplificado de Runge-Kutta; considera-se também a adição explícita de termos dissipativos ao esquema de discretização espacial. São apresentadas comparações entre as soluções exata e numérica, além de comparações da solução numérica para diferentes valores dos coeficientes de dissipação. Analisa-se também as regiões de estabilidade de métodos de Runge-Kutta para uma equação modelo, cujas propriedades são semelhantes às das equações de Burgers e de Euler. Por fim, propõe-se o estudo da convergência de um esquema semelhante ao de Runge-Kutta; faz-se uma estimativa de erro *a posteriori* em espaços de Banach de dimensão infinita.

Além disto, são calculadas algumas estimativas *a priori* para a equação de Burgers que são usadas, juntamente com idéias da teoria de “shadowing” para estabelecer estimativas relativas à validade de simulações numéricas para a equação de Burgers. Além disto, são mostrados alguns estudos computacionais relevantes sobre a separação espectral, os quais poderiam ser entendidos como uma forma de estimativas *a posteriori*.

ABSTRACT

In this work we analyze unidimensional flows using Burgers and Euler equations. We show how to obtain both an exact and an approximate solution to the Euler equations. The exact solution is obtained by simple waves interaction (a shock wave, a contact discontinuity and an expansion fan). It is based on the jump relations for the Euler equations. We use the exact solution thus obtained as a mean of comparison to the approximate (numerical) solution.

A simplified Runge-Kutta method is used to integrate the Euler equations in time. Dissipation terms are added to the spatial discretized equations. We study the effect of these terms by plotting the exact versus the approximate solution considering different dissipation coefficients. We choose a model equation, which has similar properties to the Burgers and Euler equations, in order to study the stability regions of the Runge-Kutta scheme. Finally, we propose a convergence analysis of a Runge-Kutta-like scheme and make *a posteriori* error estimates in infinite dimensional Banach spaces.

Furthermore, we perform some *a priori* estimates for the Burgers' equation and use them together with ideas of the Shadowing Theory in order to establish estimates concerning the validity of numerical simulations for Burgers' equation. As well we show a few relevant computer studies on the spectral separation which could be regarded as a form of *a posteriori* estimates.

1 INTRODUÇÃO

A literatura em Dinâmica de Fluidos Computacional é repleta e vasta quando se trata de métodos numéricos. Os primeiros métodos, como os de Euler e de Newton, sofreram e vêm sofrendo modificações com o passar dos anos, no sentido de torná-los mais eficientes. Eficiência, hoje em dia, é sinônimo de conceitos como rapidez, economia e precisão, os quais serão, oportunamente, detalhados. É justamente a necessidade de eficiência que justifica a diversidade de métodos numéricos existentes.

Como não existe unanimidade, cada pesquisador, muitas vezes, adapta os esquemas existentes à sua realidade criando, assim, novos métodos. Isto sugere, naturalmente, um questionamento sobre o mérito de um determinado método numérico: em que casos ele é válido, quais as suas propriedades de robustez, de consistência, de convergência e de estabilidade.

A questão da escolha de um método numérico se torna ainda mais delicada quando o problema físico que se quer solucionar não tem, via de regra, propriedades suavizantes (como a presença de efeitos viscosos, por exemplo). Este é o caso de escoamentos compressíveis a alta velocidade, onde há presença de descontinuidades, como ondas de choque. Nestes casos a determinação do método, da malha computacional, das aproximações e bem como da sua interação é fundamental. Mas a questão ainda continua em aberto: como se deve fazer a escolha? O que se sabe, intuitivamente, é que, quanto maior o conhecimento do fenômeno físico e das propriedades de um determinado método numérico, maiores as chances de sucesso. Para tanto, existem os problemas de teste que, geralmente, são problemas simplificados, utilizados para que cada esquema possa ser testado e estudado mais profundamente.

O tubo de choque é um destes problemas de teste, pois ele possui características comuns a muitos outros problemas compressíveis em uma geometria

extremamente simples, que pode, inclusive, ser reduzida ao caso unidimensional, tornando a simulação do escoamento extremamente facilitada e eficaz. Além disso, ele possui solução exata, o que confere confiabilidade à comparação de resultados obtidos numericamente.

Outra maneira de validar os resultados numéricos é comparando-os com dados experimentais (obtidos em laboratório). Isto acontece principalmente quando o problema simulado via computador é complexo, para o qual ainda não existem resultados analíticos; em alguns casos até existem informações analíticas, mas que são obtidas mediante hipóteses simplificadas.

Quando resolvidas numericamente, existem basicamente quatro métodos com os quais as equações governantes podem ser discretizadas: diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Tradicionalmente, segundo Maliska [36], o método de elementos finitos foi mais empregado na área estrutural e o de diferenças finitas, na área de fluidos, devido às peculiaridades de cada um (os problemas em fluidos contem termos não lineares, o que não acontece com os problemas em elasticidade linear).

Esta situação motivou o surgimento do método de volumes finitos, no qual as equações são obtidas através de balanços de conservação da propriedade envolvida (como massa ou quantidade de movimento) no volume elementar. Atualmente, muitas das dificuldades que restringiam a aplicabilidade destes métodos a uma área específica já foram ou estão sendo sanadas, o que não poderia ser diferente, já que todos os métodos numéricos podem ser obtidos do método de resíduos ponderados, empregando-se funções peso diferentes, próprias a cada um deles [36].

Neste trabalho escolheu-se o método de diferenças finitas, pois com o uso de coordenadas generalizadas, ele torna-se bastante versátil e atraente, inclusive por ser de fácil implementação. Na literatura, alguns trabalhos como o de Sod [48], Ortega et al. [39], Jin e Xin [27] e Harten [18] apresentam comparações entre

diversos esquemas em diferenças finitas utilizados na solução do problema do tubo de choque.

O trabalho de Sod [48] discute métodos tradicionalmente conhecidos, como Lax-Wendroff, Godunov e *upwind*, aplicados na integração das equações de Euler unidimensionais em coordenadas cartesianas para um fluido não viscoso e que não conduz calor.

O artigo de Harten [18] apresenta uma nova classe de esquemas de segunda ordem. São esquemas não lineares obtidos pela combinação de um esquema de primeira ordem, não oscilatório, com uma função de fluxo adequadamente modificada. O esquema de segunda ordem assim produzido é de alta resolução com preservação da robustez do esquema original de primeira ordem não oscilatório.

Em [39], Azevedo et al. implementam três algoritmos, fazendo uma comparação entre eles: Beam-Warming - baseado no esquema implícito de marcha no tempo de Euler com adição de termos dissipativos, *Flux Vector Splitting* - um tipo de esquema *upwind* baseado na decomposição do vetor fluxo em função dos autovalores da matriz jacobiana - e TVD (*Total Variation Diminishing*) - baseado na imposição de condições para que a variação total em qualquer tempo seja uniformemente limitada pela variação total dos dados iniciais.

Jin e Xin [27] apresentam uma classe de esquemas de conservação em várias dimensões. A idéia é usar relaxação local e constituir um sistema linear hiperbólico com um termo de baixa ordem “stiff” que aproxima o sistema original com uma pequena correção dissipativa.

Entretanto, nenhum deles utiliza o método de Runge-Kutta conforme introduzido por Jameson et al. [26], que combina um mecanismo explícito de dissipação artificial com um esquema de marcha no tempo do tipo Runge-Kutta. Esse mecanismo consiste na combinação de diferenças de segunda e de quarta ordens, onde a contribuição de cada uma é definida pelo raio espectral da matriz jacobiana e por um sensor de pressão, que identifica as diferentes regiões do escoamento. O es-

quema de marcha no tempo é semelhante ao dos esquemas clássicos de Runge-Kutta, mas apresenta algumas vantagens em relação àquele, como redução do custo computacional. Além disso, seus coeficientes podem ser escolhidos de forma a expandir a região de estabilidade [32].

Os próprios idealizadores deste método, além de outros pesquisadores, sugeriram algumas adaptações e modificações, tendo em vista a necessidade de se obter soluções confiáveis para problemas cada vez mais complexos, no menor tempo possível, sem se esquecer, é claro, da precisão.

Kallinderis e McMorris [30] discutem a dissipação artificial escalar acoplada com o método de Lax-Wendroff e propõem uma maneira de calcular os coeficientes de dissipação, ao invés de escolhê-los *a priori*. Além disso, a quantidade de dissipação fica limitada e valores diferentes são empregados para cada uma das equações governantes.

No trabalho de Pulliam [43], vários modelos de dissipação são usados com diferenças centrais, juntamente com um esquema implícito, como o de Beam e Warming. São analisados seus efeitos referentes à precisão, à estabilidade e a taxas de convergência.

Um esquema semelhante a esse, mas que segue a linha de Jameson et al. [26] é estudado por Swanson et al. [52]: o esquema SLIP (*Symmetric Limited Positive*). Neste caso, apenas um dos coeficientes é livre, pois o outro é escolhido em função deste. Neste trabalho também são comparados os esquemas CUSP (*Convective Upwind and Split Pressure*) e MATD (*Matrix Dissipation*). No primeiro, os termos dissipativos de cada equação discreta são calculados com os autovalores da matriz jacobiana do fluxo e não com o raio espectral, como é o caso da dissipação artificial. Na verdade, ela funciona como uma imitação de um esquema *upwind* na vizinhança de ondas de choque, evitando oscilações. O segundo pode ser considerado como um tipo de viscosidade artificial, pois ele é definido como uma soma da média dos fluxos centrais com um fluxo dissipativo. Ele pode ser usado com uma variedade

de esquemas de passo de tempo, inclusive com esquemas de multi-estágios, que não avaliam os fluxos de dissipação artificial em cada estágio (visando à redução do custo computacional).

Swanson e Turkel [53] também discutem a dissipação matricial, indicando condições para que esse esquema apresente características TVD. Esse método também é discutido por Turkel e Vatsa [56] com ênfase para escoamentos tridimensionais.

Como já comentado, o conceito de dissipação artificial é bastante antigo, podendo ser abordado e formalizado de diversas maneiras. A necessidade de algum tipo de mecanismo dissipativo pode ser entendida tanto pelo ponto de vista físico como pelo numérico, conforme [45], [14] e [50], por exemplo. Conforme Richtmyer [45], fisicamente, pode-se associar dissipação com viscosidade e condução de calor, que têm efeito suavizador sobre os choques: a superfície de descontinuidade é substituída por uma fina camada de transição, na qual as quantidades variam rapidamente, mas não descontinuamente. Degrez [14] e Strikwerda [50] também apresentam esta noção, mas associam a dissipação com os modos de Fourier da solução e do erro (de alta ou de baixa frequência) que, conforme se propagam, podem produzir efeitos oscilatórios ou suavizantes sobre a solução.

Entretanto, ao se buscar, na literatura, uma análise rigorosa do método de Jameson para escoamentos compressíveis [26], do ponto de vista matemático, não se encontra muita coisa. Os esquemas analisados têm, na maioria das vezes, características de monotonicidade (são esquemas do tipo TVD). Inclusive, em [52] é apresentado um esquema denominado LED (*Local Extremum Diminishing*). Por isto, estuda-se um pouco mais a fundo o método de Jameson, procurando estabelecer conclusões quanto às suas propriedades, como convergência, e analisar atentamente o tipo de Runge-Kutta empregado.

Os métodos numéricos têm, hoje em dia, um papel muito importante em ciência e em tecnologia, especialmente devido ao desenvolvimento impressionante

dos recursos computacionais nos últimos anos. Mas é justamente neste ponto que se pode perceber uma desvantagem: da maneira com que estes recursos têm sido empregados, muitas vezes não se sabe se os resultados fornecidos pelo computador, sozinhos, são confiáveis. Isto é, quando se trabalha com equações diferenciais não lineares, não existe resultado como o Teorema de Equivalência de Lax [45] (resultado que refere-se a equações lineares aproximadas por métodos discretos lineares) com o qual se possa contar.

Quando em um processo iterativo, o computador realiza cálculos que envolvem muitas iterações de uma determinada aplicação. Conseqüentemente, seria válido perguntar: os cálculos realizados por um computador são confiáveis? Devido à aritmética de máquina, os computadores têm um grau finito de precisão e, portanto, essencialmente a cada operação realizada pela máquina, são cometidos pequenos erros. Desta forma, seria prudente acreditar nas figuras geradas por determinados “softwares” e nas conclusões a que se chega tendo por base os cálculos deste computador? Esta é sem dúvida uma questão profunda e sem resposta definitiva.

A verdade é que muitas das técnicas numéricas (como a viscosidade artificial) usadas para resolver problemas importantes em áreas como Aerodinâmica, Meteorologia, Biologia Matemática, dentre muitas outras, ainda precisam de uma análise matemática rigorosa para que se possa confiar inteiramente nelas, por si próprias.

Existem, na literatura, diversos trabalhos analisando aproximações para leis de conservação escalares da forma

$$\begin{aligned} v_t + \nabla \cdot f(v) &= 0 & \text{em} & (0, T) \times \mathbb{R}^d, \\ v(0) &= v_0 & \text{em} & \mathbb{R}^d \end{aligned}$$

e para sistemas de leis de conservação (como as equações de Burgers e de Euler - ver capítulo 2), mas os esquemas analisados não são semelhantes ao de Jameson, que se quer estudar.

Cockburn e Gau [8] e Cockburn e Gremaud [9] obtêm estimativas para métodos numéricos para leis de conservação. Em [8], obtém-se uma estimativa *a posteriori* que é independente da dimensão do espaço, do tipo de não linearidade da função f e do método numérico. Em [9], a estimativa obtida é *a priori*, com base na modificação de uma teoria de aproximação já existente na literatura. Mostra-se que estas estimativas podem ser obtidas sem necessidade de usar explicitamente quaisquer propriedades de regularidade da solução aproximada.

Para sistemas de leis de conservação em uma dimensão espacial, Johnson e Szepessy [28] provam estimativas *a posteriori* para um método em elementos finitos, baseando-se fortemente em uma estimativa de estabilidade forte para o problema dual associado e na ortogonalidade do método de Galerkin. Embora os resultados apresentados restrinjam-se a uma dimensão no que concerne à justificação matemática, a metodologia de controle adaptativo do erro é de natureza geral e pode ser aplicada também em mais de uma dimensão.

Entretanto, nenhum destes trabalhos trata do método de Runge-Kutta, peça fundamental no esquema de Jameson utilizado neste trabalho. Por isso, o objetivo é proceder à análise da aproximação das equações de Burgers e de Euler pelo método de Jameson, levando em consideração a não linearidade destas equações, a influência dos termos dissipativos e o esquema de integração temporal; enfim, que englobe todas as características de um problema real, de interesse técnico. Desta forma, tendo em vista a complexidade de tal análise, dá-se, neste trabalho, apenas uma introdução a este estudo.

Em uma primeira instância, considera-se um problema modelo simplificado: uma equação diferencial linear ordinária não autônoma (com dependência explícita na variável temporal). Através do método de Tanabe e Sobolevski, [61], [33], constrói-se uma solução exata para o problema. Esta é comparada com uma solução numérica obtida pelo citado método de Runge-Kutta, de onde conclusões, para a situação analisada, relativas à convergência do método, podem ser auferi-

das. Esta análise depende de conceitos oriundos da análise funcional e da teoria de semigrupos, principalmente.

Além disto, independente da análise deste método de Runge-Kutta em dimensão infinita e apesar de que o principal objetivo deste trabalho fosse desenvolver estimativas para as equações de Euler, inicialmente estuda-se um protótipo mais simples: a equação de Burgers. Esta equação tem uma característica desejável: graças a um princípio de máximo, Heywood e Xie [20] mostram que ela possui soluções globais suaves (as soluções locais podem ser continuadas indefinidamente no tempo). Portanto, conforme Heywood e Rannacher [19] já haviam observado, o erro para o método de Galerkin é melhorado de $O(\lambda_m^{-1})$ para $O(\lambda_m^{-2})$, onde λ_m é autovalor do operador de Dirichlet. Este fato, associado ao conceito de “shadowing” finito como apresentado por Chow e Palmer [7] permite que se mostre que órbitas numéricas para a equação de Burgers começando em um determinado dado inicial permaneçam perto de uma órbita verdadeira (começando em um dado inicial que é na verdade uma perturbação deste) por um certo período de tempo.

O passado recente e os últimos tempos têm sido marcados pelo uso do computador como uma ferramenta de multi-propósitos. Muitas pesquisas científicas acabaram se tornando possíveis graças ao seu advento. Mesmo assim, a maioria dos seus usuários não costuma parar para refletir como ele opera ou quais poderiam ser as implicações da utilização do computador como ferramenta de trabalho.

Suponha que se esteja usando o computador para simular as iterações de uma aplicação com dependência sensível das condições iniciais. Um computador digital comete pequenos erros em operações de ponto flutuante porque a sua memória representa cada número por um número finito de dígitos. Quando um pequeno erro de arredondamento é feito pelo computador, ele se move da órbita verdadeira, que ele deveria seguir, para uma outra órbita vizinha. Entretanto, se a aplicação em questão é caótica, a órbita vizinha poderá divergir exponencialmente rápido da órbita verdadeira. Entretanto, é possível que a órbita gerada pelo computador seja uma aproximação muito boa da órbita verdadeira, mas iniciando de uma outra

condição inicial, bem próxima da condição inicial dada. Frequentemente, ela é próxima o suficiente para que a órbita calculada pelo computador seja aceitável para aquilo que se está analisando.

Entretanto, verificar que, em um dado caso, o fenômeno de “shadowing” realmente acontece pode ser muito difícil, requerendo, entre outras coisas, o uso de aritmética intervalar para limitar o erro de arredondamento gerado, e programas suficientemente complicados para permitir um elemento de dúvida quanto à validade do processo como um todo. Além disto, conforme cresce a dimensão do problema, cresce também a dificuldade de verificação do fenômeno de “shadowing” [11].

Estes problemas são motivados por questões relativas à validade da solução numérica de equações diferenciais. Pode ser mostrado [11] que, para alguns sistemas dinâmicos, métodos numéricos suficientemente (localmente) precisos produzem uma solução numérica que está sempre próxima de alguma solução real, possivelmente com condições iniciais diferentes daquelas especificadas.

Desde Anosov e Bowen, com seu resultado clássico de “shadowing” (sombreamento) - o Lema de “Shadowing”, esta teoria tem sido analisada por muitos especialistas, como pode ser visto pelo livro de Stuart e Humphreys [51], pelo trabalho de Pilyugin [42] e pelo artigo de Ostermann e Palencia [40]. Esta teoria é ao mesmo tempo muito atraente e interessante: ela reúne idéias simples com sofisticados conceitos matemáticos. Ela tem se desenvolvido intensamente nos últimos anos e acabou por se tornar uma parte significativa da teoria qualitativa de sistemas dinâmicos, contendo muitos resultados interessantes e profundos.

As estimativas de erro apresentadas neste trabalho são do tipo existente na literatura [42], [7]. Resultados mais abrangentes em sua aplicabilidade requerem estimativas “forward” (para frente) e “backward” (para trás) usando propagadores de perturbação locais, que serão objeto de estudos futuros. Também foram realizados alguns experimentos computacionais que indicam existir uma separação no espectro

da linearização dependente do tempo (ou seja, $Re(\lambda) \geq 0$ ou $Re(\lambda) < 0$, onde $Re(\lambda)$ é a parte real do autovalor λ).

Desta forma, discute-se alguns tópicos com maior atenção. Enfatiza-se algumas particularidades do problema físico, o método de diferenças finitas, algumas noções básicas em análise numérica, o conceito de dissipação e a forma como ele pode ser empregado, esquemas de passo de tempo e o método de Runge-Kutta.

No capítulo 2, define-se o problema físico que é objeto da investigação numérica, cuja teoria é desenvolvida nos capítulos subseqüentes. Este problema é um tubo de choque, escolhido por possuir solução exata, facilitando a validação dos resultados obtidos. Mostra-se como obter as equações de Euler, utilizadas para modelar o problema físico, e a maneira com que estas equações são transformadas em condições de salto (válidas nas descontinuidades - ondas de choque e descontinuidades de contato). A partir destas condições, desenvolve-se expressões para pressão, velocidade e massa específica em cada região deste. Elas são empregadas na obtenção da solução exata das equações de Euler para este tubo e os resultados são mostrados graficamente.

No capítulo 3, apresenta-se brevemente o método de diferenças finitas, associando-o com expansões de Taylor e mostrando algumas funções de interpolação para derivadas de primeira e segunda ordens em relação a uma variável independente. Depois, define-se consistência, estabilidade e convergência, entre outros conceitos, para que possa ser enunciado o teorema da equivalência de Lax, que é um resultado de grande importância, principalmente para equações lineares. Em seguida, apresenta-se a análise de Fourier e de von Neumann para equações lineares a coeficientes constantes, pois nos próximos capítulos é importante que se tenha claro o entendimento de algumas noções relativas à propagação de ondas. Finalmente, indica-se como é feita a aproximação espacial das equações do escoamento.

Discute-se também a questão da dissipação. Primeiramente, faz-se uma revisão conceitual de dissipação e de dispersão, com maior ênfase para a primeira.

Depois, mostra-se a razão porque é necessário fazer a introdução explícita dos termos de dissipação natural ou artificial no esquema numérico escolhido. Apresenta-se também, como não poderia deixar de ser, a forma com que isto é feito, juntamente com os resultados obtidos.

Na seqüência, estuda-se algumas vantagens dos métodos de integração temporal, especialmente o de Runge-Kutta. É principalmente neste momento que são necessárias algumas noções de estabilidade, conforme apresentadas no capítulo 3. Estuda-se brevemente o método clássico de Runge-Kutta e, através de uma equação modelo com propriedades semelhantes às equações de Burgers e de Euler, analisa-se algumas propriedades de estabilidade dos esquemas de Runge-Kutta.

No capítulo 4, analisa-se mais detalhadamente a convergência do método de multi-estágios. Para tanto, considera-se uma equação diferencial linear não autônoma. Através do método de Tanabe e Sobolevski, escreve-se a sua solução analítica que, comparada à solução do método numérico, fornece estimativas de erro para o esquema de integração temporal considerado. Além disto, emprega-se técnicas da teoria de “shadowing” na análise da existência de soluções numéricas para a equação de Burgers.

Finalmente, no capítulo 5, são apresentadas as conclusões sobre a metodologia empregada, tanto numérica quanto analítica. Avalia-se a importância de resultados analíticos que permitam a realização de testes por computador para problemas reais reduzindo a necessidade de realização de inúmeros testes em laboratório, o que invariavelmente aumenta o orçamento de um projeto. Enfatiza-se, também, a importância destes resultados analíticos como fator de apoio ao analista numérico, na medida em que eles possam servir de indicativo referente à confiabilidade dos dados fornecidos pelo computador. Além disso, quer-se mostrar a importância de buscar um ponto de convergência entre o embasamento analítico-teórico e a habilidade no tratamento com métodos numéricos.

2 O PROBLEMA FÍSICO

Um dos problemas físicos que se quer estudar neste trabalho é o tubo de choque, também conhecido como problema de Riemann (Smoller, [47]). Ele é um dispositivo em que ondas de choque do tipo normal são geradas pela ruptura de um diafragma que separa um gás a alta pressão (estado L) de outro, a baixa pressão (estado R), conforme mostra a figura 2.1. Segundo James [23], ele é uma ferramenta útil não só para investigar fenômenos de choque, mas também auxilia no entendimento do comportamento de materiais e de objetos quando submetidos a condições extremas de pressão e de temperatura, importantes no escoamento do gás atrás da onda (região que fica perturbada após a passagem desta). Portanto, não só a cinética de uma reação química que acontece a altas temperaturas pode ser estudada, mas também, por exemplo, o desempenho de um corpo durante a reentrada na atmosfera terrestre.

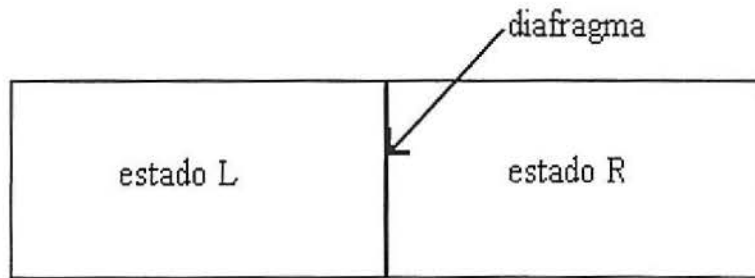


Fig. 2.1: Estado inicial (em $t = 0$) [21]

Este caso teste nada mais é do que um tubo cheio de gás em repouso, inicialmente dividido por uma membrana (ou diafragma) em duas seções. Em uma das metades, o gás tem massa específica e pressão maiores do que na outra. No tempo $t=0$, a membrana é repentinamente removida e o gás fica livre para movimentar-se no interior do tubo. Após a ruptura do diafragma, o sistema acaba, depois de decorrido um certo tempo, por atingir o equilíbrio termodinâmico; o estado final, na extremidade fechada do tubo, é determinado pela primeira lei da termodinâmica. Sem transferência de calor, a energia interna total dos gases no estado final é igual

à soma das energias internas dos gases inicialmente presentes em cada um dos lados do diafragma.

Entretanto, o principal objetivo ao se estudar o tubo de choque não é o estado final de equilíbrio dos gases, mas sim o fenômeno de choque transiente que ocorre logo após a ruptura do diafragma. Espera-se, então, que uma onda de choque normal se movimente na direção do gás de menor pressão, com uma série de ondas de expansão se propagando em direção à região do gás de mais alta pressão. Na região posterior à onda de choque normal à direção do escoamento existe uma *descontinuidade de contato*, que separa o gás comprimido pelo choque daquele resfriado pela expansão.

Para a modelagem do fenômeno físico podem ser aplicadas as equações de Euler em uma dimensão, pois, assumindo-se que o escoamento é uniforme ao longo do tubo, existe variação em uma direção apenas. Em um tubo de choque experimental real as variáveis de estado não seriam descontínuas, nem na onda de choque, nem na descontinuidade de contato, devido a efeitos tais como viscosidade e condução de calor, os quais são ignorados nas equações de Euler (número de Reynolds - forças inerciais/forças viscosas - elevado).

Se as equações utilizadas fossem as de Navier-Stokes, que levam em conta estes efeitos, a solução das equações parciais também seria suave, apesar de quase descontínua. Isto se deveria ao fato de que o aumento na massa específica acontece em uma distância que é microscópica se comparada à escala natural de comprimento do tubo de choque. De acordo com LeVeque [35], o resultado de uma simulação numérica é praticamente o mesmo com cada qual dos conjuntos de equações escolhido.

Apresenta-se, inicialmente, as equações de Burgers unidimensionais por serem mais simples que as de Euler e de Navier-Stokes e por admitirem procedimentos de análise que até o momento não podem ser estendidos completamente para aquelas equações. Além disto, as equações de Burgers servem como base para

o entendimento de análise das equações de Euler. Estas apresentam o termo de pressão, dificultando tal análise.

2.1 A equação de Burgers

Considere a equação escalar não linear

$$u_t + f(u)_x = 0 \quad (2.1)$$

onde $f(u)$ é uma função não linear de u . O problema modelo mais importante deste tipo é a equação de Burgers, para a qual $f(u) = \frac{u^2}{2}$, de forma que (2.1) torna-se

$$u_t + u u_x = 0. \quad (2.2)$$

Esta é na verdade a equação de Burgers não viscosa, já que a equação originalmente estudada por Burgers também inclui um termo de viscosidade (ν):

$$u_t + u u_x = \nu u_{xx}. \quad (2.3)$$

Este é um modelo simples que inclui efeitos não lineares e viscosos em dinâmica dos fluidos. Pode-se mostrar [60] que a equação (2.3), mediante a transformação de Cole-Hopf, possui solução exata, já que esta transformação reduz a equação (2.3), não linear, à equação linear do calor. Observe também que a equação (2.2) pode ser entendida como de convecção, característica que a torna semelhante às equações de Euler.

Na próxima seção, 2.2, discute-se a obtenção das equações de Euler, e na seção seguinte, 2.3, mostra-se como elas são empregadas no tubo de choque, já que este problema, sob determinadas condições, possui solução exata.

2.2 As equações de Euler

Seja ρ a massa específica, u a velocidade, E a energia total e p a pressão do gás. A equação da continuidade é

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0, \quad (2.4)$$

onde o fluxo de massa é dado por ρu . Mais geralmente, para qualquer quantidade z que é “acelerada” com o fluxo, existirá uma contribuição do fluxo para z da forma zu . Assim, a equação da quantidade de movimento tem uma contribuição da forma $(\rho u)u = \rho u^2$ e a equação da energia tem contribuição do fluxo Eu .

Além da convecção, existem forças no fluido que causam aceleração devido às leis de Newton; conseqüentemente, mudanças na quantidade de movimento. Se não existem forças externas, então a única força é devido a variações no próprio fluido, e esta é proporcional ao gradiente de pressão, o qual é simplesmente p_x , em uma dimensão. Combinando este com o fluxo convectivo, resulta a equação da quantidade de movimento

$$(\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_x = 0. \quad (2.5)$$

A energia total E é decomposta como

$$E = \frac{1}{2}\rho u^2 + \rho e. \quad (2.6)$$

onde o primeiro termo é a energia cinética, enquanto que o segundo termo é a energia interna. A variável e , energia interna por unidade de massa, é chamada energia interna específica (em geral, específica significa por unidade de massa). A energia interna inclui as energias rotacionais e vibracionais e, possivelmente, outras formas de energia em situações mais complexas. Nas equações de Euler assume-se que o gás está em equilíbrio químico e termodinâmico e que a energia interna é uma função conhecida da pressão e da massa específica, conforme

$$e = e(p, \rho). \quad (2.7)$$

Esta é a equação de estado; ela depende da natureza do gás que se quer estudar.

A energia total varia com o fluxo, mas é também modificada devido ao trabalho realizado pelo sistema. Na ausência de forças externas, o trabalho é realizado somente pelas forças de pressão e é proporcional ao gradiente de up . A lei de conservação para a energia total toma a forma:

$$E_t + [u(E + p)]_x = 0 \quad (2.8)$$

em uma dimensão.

Colocando estas equações juntas tem-se o conjunto completo de equações de Euler em uma dimensão

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}_x = 0, \quad (2.9)$$

que também pode ser escrito de forma mais compacta como

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{Q}}{\partial x} = 0, \quad (2.10)$$

onde

$$\vec{W} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

e

$$\vec{Q} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

Agora, busca-se ainda relacionar a energia interna com a pressão e a temperatura, o que é feito por meio da relação de estado para um gás ideal. Neste caso, a energia interna é função apenas da temperatura, $e = e(T)$, e a relação entre temperatura, pressão e massa específica é dada pela lei de gás ideal:

$$p = \rho RT, \quad (2.13)$$

onde R é uma constante. Logo, a energia interna é proporcional à temperatura,

$$e = c_v T, \quad (2.14)$$

onde c_v é o calor específico a volume constante. Tais gases são denominados politrópicos¹. Se a uma quantidade fixa de gás adiciona-se energia e o volume é mantido constante, então as variações de energia e de temperatura relacionam-se via

$$d e = c_v d T. \quad (2.15)$$

Por outro lado, se há expansão do gás com aumento de energia, mas a pressão é mantida constante, nem toda a energia colabora para o acréscimo da energia interna. O trabalho realizado para expandir o volume $1/\rho$ por $d(1/\rho)$ é $p d(1/\rho)$, o que fornece a relação

$$d e + p d \left(\frac{1}{\rho} \right) = c_p d T, \quad (2.16)$$

ou

$$d \left(e + \frac{p}{\rho} \right) = c_p d T, \quad (2.17)$$

onde c_p é o calor específico a pressão constante. A quantidade

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad (2.18)$$

é denominada entalpia, que é devida à energia interna e à pressão. Para um gás politrópico, assume-se que c_p é constante, tal que (2.17) resulta

$$h = c_p T. \quad (2.19)$$

Ainda, pela lei de gás ideal,

$$c_p - c_v = R. \quad (2.20)$$

¹Para um gás ideal a energia interna é uma função apenas da temperatura. Se, em particular, a energia interna é simplesmente proporcional à temperatura, o gás é chamado politrópico.

Assim, a equação de estado para um gás politrópico depende apenas da taxa de calores específicos, denotada usualmente por

$$\gamma = c_p/c_v. \quad (2.21)$$

Como $T = p/R\rho$, tem-se

$$e = c_v T = \left(\frac{c_v}{R}\right) \frac{p}{\rho}. \quad (2.22)$$

Agora, usando (2.20) e (2.21), obtém-se

$$e = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}. \quad (2.23)$$

Usando isto em (2.6) tem-se a forma da equação de estado comumente utilizada para um gás politrópico:

$$p = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2} \rho u^2 \right). \quad (2.24)$$

As equações de Euler, utilizadas na modelagem de problemas físicos nos quais o efeito da viscosidade pode ser desconsiderado, possuem algumas propriedades especiais, as quais são discutidas a seguir.

2.2.1 Propriedades das equações de Euler

Examinando as equações de Euler (2.10), percebe-se que as derivadas de ordem mais alta (ordem 1, neste caso) ocorrem linearmente. Por esta razão, diz-se que estas equações formam um sistema quasi-linear [1], que pode ser escrito como

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{W}}{\partial x} = 0, \quad (2.25)$$

onde A é a matriz jacobiana do vetor fluxo \vec{Q} , ou seja,

$$A = \frac{\partial \vec{Q}}{\partial \vec{W}}. \quad (2.26)$$

As equações de Euler têm uma propriedade especial que muitas vezes é útil na construção de métodos numéricos. O vetor \vec{Q} é uma função homogênea de grau 1 em relação ao vetor das variáveis conservativas \vec{W} , ou seja

$$\vec{Q}(\alpha \vec{W}) = \alpha \vec{Q}(\vec{W}) \quad (2.27)$$

para qualquer α . Conseqüentemente a sua matriz jacobiana A é uma função homogênea de grau zero. Chama-se atenção aqui para o fato de que isto depende da forma da relação de estado. As equações de Euler são homogêneas se esta relação pode ser escrita na forma $p = \rho f(e)$, onde e é a energia interna por unidade de massa.

Usando a regra da cadeia tem-se que, para qualquer vetor \vec{W} ,

$$\frac{\partial \vec{Q}}{\partial x} = \left[\frac{\partial \vec{Q}}{\partial \vec{W}} \right] \frac{\partial \vec{W}}{\partial x} = A \frac{\partial \vec{W}}{\partial x}. \quad (2.28)$$

Para a função \vec{Q} homogênea de grau 1, diferenciando a equação (2.27) em relação a α e fazendo $\alpha = 1$, tem-se que

$$\vec{Q} = A \vec{W} \quad (2.29)$$

e que

$$\frac{\partial \vec{Q}}{\partial x} = A \frac{\partial \vec{W}}{\partial x} + \left[\frac{\partial A}{\partial x} \right] \vec{W}. \quad (2.30)$$

Portanto, comparando as equações (2.28) e (2.30), percebe-se que

$$\left[\frac{\partial A}{\partial x} \right] \vec{W} = 0 \quad (2.31)$$

apesar de que, individualmente, $\frac{\partial A}{\partial x}$ e \vec{W} não sejam necessariamente iguais a zero.

Com as observações acima, pode parecer que não faz diferença se a matriz jacobiana está dentro ou fora da derivada, já que

$$\frac{\partial}{\partial x}(A \vec{W}) = A \frac{\partial \vec{W}}{\partial x}.$$

Entretanto, do ponto de vista numérico, as duas formulações

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{W}}{\partial x} = 0$$

e

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} A \vec{W} = 0,$$

denominadas *não conservativa* e *conservativa*, respectivamente, não conduzem a discretizações idênticas. Na simulação de escoamentos com ocorrência de descontinuidades como choques, por exemplo, prefere-se usualmente a segunda alternativa, conforme Anderson, Jr. [1].

Entretanto, é mais fácil obter os autovalores do sistema de equações de Euler quando estas estão escritas na forma não conservativa, como função das variáveis primitivas ρ, u, p , pois a estrutura da matriz jacobiana neste caso é mais simples. Pode-se mostrar [31] que as matrizes jacobianas das variáveis conservativas, A , e das variáveis não conservativas, \tilde{A} , estão relacionadas por uma transformação de similaridade, ou seja, elas têm os mesmos autovalores. Isto permite que as propriedades das equações de Euler sejam analisadas na forma não conservativa (caso mais simples). Sabe-se então [21] que os autovalores de \tilde{A} , dada por

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \rho c^2 & u \end{bmatrix}, \quad (2.32)$$

são puramente reais e distintos. Isto significa que a matriz A pode ser diagonalizada localmente como

$$\Lambda = X^{-1} A X, \quad (2.33)$$

onde Λ é uma matriz diagonal que contém os autovalores de A e X é a matriz dos autovetores. Pré-multiplicando a equação (2.25) por X^{-1} , tem-se

$$X^{-1} \frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + X^{-1} A \frac{\partial \vec{W}}{\partial x} = 0 \quad (2.34)$$

Pós multiplicando A pelo produto $X X^{-1}$ e considerando uma aproximação constante para X e X^{-1} em uma dada vizinhança, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (X^{-1} W) + \frac{\partial}{\partial x} (X^{-1} A X) X^{-1} W = 0. \quad (2.35)$$

Definindo $U = X^{-1}W$, a equação (2.35) acima pode ser escrita como

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad (2.36)$$

o que implica que as equações podem ser desacopladas em três equações escalares da forma

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u_i}{\partial x} = 0 \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.37)$$

Os elementos u_i são chamados de variáveis características. Cada variável característica satisfaz a equação linear da convecção com velocidade dada pelo autovalor correspondente. Assim, tem-se que um sistema hiperbólico na forma da equação (2.25) tem solução dada pela superposição de ondas que viajam na direção positiva ou negativa com velocidades variáveis.

Os autovalores da matriz jacobiana são $u - c$, u , e $u + c$, onde u é a velocidade local do fluido e c , a velocidade local do som; a matriz dos autovetores correspondentes é

$$X = \begin{bmatrix} -\frac{\rho}{c} & 1 & \frac{\rho}{c} \\ 1 & 0 & 1 \\ -\rho c & 0 & \rho c \end{bmatrix}$$

Portanto, em um escoamento supersônico, onde $|u| > c$, todas as velocidades de onda têm o mesmo sinal. Em um escoamento subsônico, onde $|u| < c$, estão presentes velocidades de onda tanto com sinal positivo quanto negativo. Isto mostra que os métodos numéricos empregados para as equações de Euler devem ser apropriados para velocidades de onda de sinais arbitrários e de magnitudes que podem ser extremamente diferentes.

Na verdade, isto pode conduzir inclusive a problemas de condicionamento, o que tem gerado extensivas investigações na literatura em busca de um método robusto, que forneça bons resultados para intervalos cada vez maiores do número de Mach (relação entre a velocidade do fluido e a velocidade do som no

meio). Alguns trabalhos nesta área são os de Turkel et al. [55], de Choi e Merkle [6] e de De Bortoli [12].

Além disso, os sinais dos autovalores também são importantes na determinação de condições de contorno apropriadas. Cada variável característica satisfaz a equação linear da convecção com a velocidade da onda dada pelo autovalor correspondente. Portanto, as condições de contorno podem ser especificadas de acordo, isto é, variáveis características associadas a autovalores positivos podem ser especificadas na fronteira esquerda, que corresponde à entrada para estas variáveis. Variáveis características associadas a autovalores negativos podem ser especificadas na fronteira direita, que é a entrada para estas variáveis.

Estas idéias são usadas, por exemplo, na determinação das fórmulas que definem o conjunto de condições de contorno denominado *far field*, descrito por Whitfield [59] e que é muito utilizado na simulação de escoamentos externos [3] como uma forma de diminuir o domínio computacional necessário para levar um esquema numérico à convergência.

Todas estas características das equações de Euler são importantes quando se resolve utilizá-las para resolver um determinado problema. Neste trabalho está-se interessado na aplicação destas equações para o problema do tubo de choque, discutido a seguir, pois ele possui solução exata e por isto é utilizado como um caso teste para a validação de esquemas unidimensionais.

2.3 Tubo de choque

O movimento de um fluido ideal é freqüentemente caracterizado por linhas ou curvas no plano (x, t) (ou, mais geralmente, superfícies no espaço (\mathbf{X}, t)) nas quais certas quantidades dependentes são descontínuas. Nestas discontinuidades as equações diferenciais, que não fazem mais sentido, devem ser substituídas por

condições de salto [47] que, para as equações de Euler, são:

$$\sigma[\rho] = [\rho u] \quad (2.38)$$

$$\sigma[\rho u] = [p + \rho u^2] \quad (2.39)$$

$$\sigma \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + e \right) \right] = \left[\rho u + \rho u \left(\frac{u^2}{2} + e \right) \right], \quad (2.40)$$

onde σ é a velocidade de propagação da descontinuidade e, para uma determinada quantidade Φ , $[\Phi] = \Phi - \Phi_0$, onde Φ_0 e Φ correspondem aos estados anterior e posterior à descontinuidade, respectivamente.

É conveniente realizar uma mudança de variáveis nas equações (2.38) a (2.40). Para tanto, define-se

$$\begin{aligned} v &= u - \sigma \\ m &= \rho v. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Estas relações são usadas primeiramente para eliminar u da equação (2.38), o que resulta

$$\begin{aligned} \sigma(\rho - \rho_0) &= \rho u - \rho_0 u_0 \\ &= m - m_0 + \sigma(\rho - \rho_0), \end{aligned} \quad (2.42)$$

ou seja, a equação (2.38) reduz-se a

$$[m] = 0. \quad (2.43)$$

Para a segunda equação (2.39), tem-se

$$\sigma(\rho u - \rho_0 u_0) = p + \rho u^2 - p_0 - \rho_0 u_0^2. \quad (2.44)$$

Usando (2.42), o lado esquerdo de (2.44) fica

$$\sigma(\rho u - \rho_0 u_0) = \sigma(m - m_0) + \sigma^2(\rho - \rho_0) \quad (2.45)$$

e desenvolvendo o lado direito de (2.44), obtém-se

$$\begin{aligned} p - p_0 + \rho u^2 - \rho_0 u_0^2 &= p - p_0 + \rho(v + \sigma)^2 - \rho_0(v_0 + \sigma)^2 \\ &= p - p_0 + m v - m_0 v_0 + 2\sigma(m - m_0) + \sigma^2(\rho - \rho_0). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Igualando (2.45) e (2.46), resulta

$$\sigma(m_0 - m) + m_0 v_0 - m v = p - p_0. \quad (2.47)$$

Como $[m] = 0$, a equação (2.47) fornece a nova forma de (2.39), ou seja,

$$[m v + p] = 0. \quad (2.48)$$

Para a terceira equação, (2.40), tem-se

$$m_0 \left(\frac{u_0^2}{2} + e_0 \right) - m \left(\frac{u^2}{2} + e \right) = p u - p_0 u_0, \quad (2.49)$$

que é o mesmo que

$$\left[m \left(\frac{u^2}{2} + e \right) + p u \right] = 0. \quad (2.50)$$

Mas, sabendo que a velocidade do som é $c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$, pode-se escrever

$$p v = \frac{\gamma p \rho v}{\rho \gamma} = \frac{m c^2}{\gamma} \quad (2.51)$$

e conforme (2.23), lembrando também que $m = \rho v$, tem-se

$$e = \frac{c^2}{\gamma(\gamma - 1)}. \quad (2.52)$$

Usando estas duas equações, (2.51) e (2.52), juntamente com (2.43) e (2.48), chega-se a

$$m \left[\frac{2}{\gamma - 1} c^2 + v^2 \right] = 0, \quad (2.53)$$

pois m é constante.

Assim, as condições de salto (2.38) a (2.40) ficam:

$$[m] = 0 \quad (2.54)$$

$$[m v + p] = 0 \quad (2.55)$$

$$m \left[\frac{2}{\gamma - 1} c^2 + v^2 \right] = 0. \quad (2.56)$$

Agora podem ser discutidas as condições que, a partir das relações de salto (2.54) a (2.56), dão origem à solução exata das equações de Euler para o tubo de choque, que contém ao mesmo tempo uma onda de choque, uma descontinuidade de contato e ondas de expansão, conforme mostra a figura 2.2.

Este problema é produzido experimentalmente pela súbita ruptura de um diafragma em um longo tubo unidimensional. Este diafragma separa dois estados iniciais de um gás, com pressão e massa específica diferentes (assume-se que o gás é o mesmo nas duas regiões). As condições iniciais são as seguintes:

$$\begin{aligned} u = u_L, \quad p = p_L, \quad \rho = \rho_L, \quad x < x_0 \quad t = 0 \\ u = u_R, \quad p = p_R, \quad \rho = \rho_R, \quad x > x_0 \quad t = 0 \end{aligned} \quad (2.57)$$

com $\rho_R < \rho_L$ e localização do diafragma $x = x_0$ (lembrando que sempre é possível, mediante uma translação, considerar $x_0 = 0$). A partir de agora, usa-se u_R e u_L genericamente, mas se está particularmente interessado no caso em que $u_R = u_L = 0$.

Se os efeitos da viscosidade podem ser negligenciados ao longo das paredes do tubo e se um tubo infinitamente longo é considerado, evitando reflexões nas suas extremidades, a solução exata das equações de Euler pode ser obtida com base em ondas simples, separando as regiões com condições uniformes (Hirsch [21]).

Quando o diafragma se rompe, no instante inicial, uma descontinuidade na pressão se propaga à direita (região R), na direção de menor pressão. Simultaneamente, ondas de expansão se propagam à esquerda (região L), na região de alta pressão. Além disto, uma descontinuidade de contato, que separa as duas regiões do gás, se propaga à direita no tubo. Esta situação é ilustrada nas figuras 2.2 e 2.3.

Como o choque e a descontinuidade de contato movem-se em regiões de condições uniformes, eles têm velocidade constante e a expansão está centrada na posição inicial do diafragma ($t = 0$).

Considera-se, no interior do tubo, as seguintes regiões²: a região R contém o gás não perturbado, à baixa pressão, p_R . Ela é separada da região 2, que contém o gás perturbado, à baixa pressão, por uma onda de choque. A descontinuidade de contato separa a região 2 da região do gás perturbado, à alta pressão (região 3). O gás na região 3 sofre influência das ondas de expansão que se propagam para a esquerda, em direção à região L , onde o gás a alta pressão não está perturbado. A região 5 é a das ondas de expansão, onde as quantidades do escoamento variam continuamente. Como cada região tem características distintas, suas propriedades são discutidas detalhadamente.

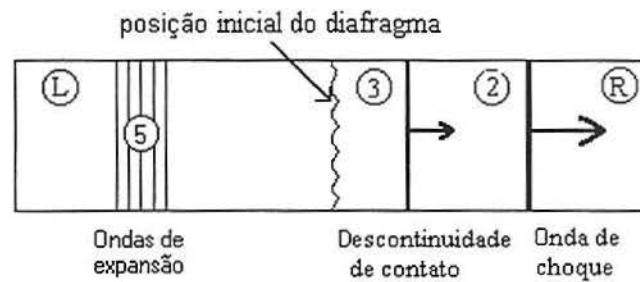


Fig. 2.2: Estado do escoamento em $t > 0$ [21]

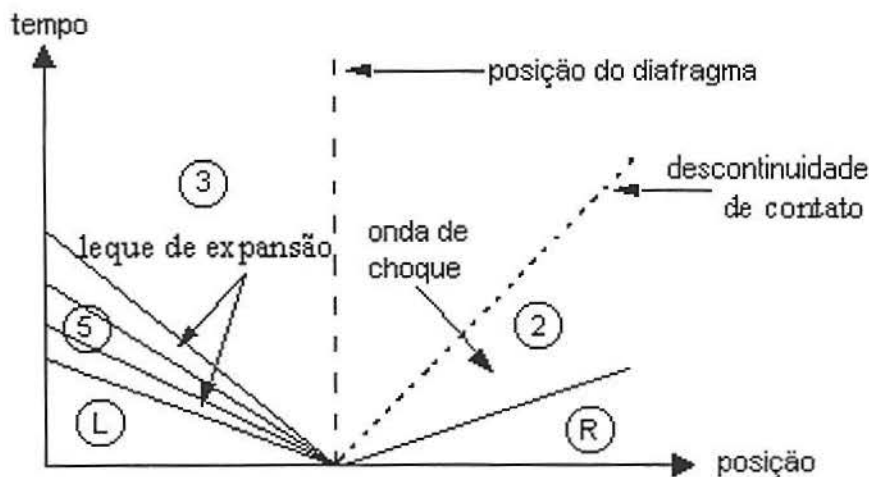


Fig. 2.3: Evolução no tempo da solução exata do tubo de choque [2]

²A nomenclatura para as regiões segue a literatura [21], [2]

O choque é gerado entre as regiões R e 2 e as relações de salto (2.54) a (2.56) são válidas (Smoller [47]). Primeiro, para facilitar os cálculos, define-se as seguintes constantes

$$P = \frac{p_2}{p_R}, \quad z = \frac{\rho_2}{\rho_R}, \quad \beta = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}. \quad (2.58)$$

A relação entre as velocidades do som nos meios R e 2 é:

$$\left(\frac{c_R}{c_2}\right)^2 = \left(\frac{p_R}{\rho_R}\right) \left(\frac{\rho_2}{p_2}\right) = \frac{z}{P} \quad (2.59)$$

Similarmente, como $[m] = 0$, $\rho_R v_R = \rho_2 v_2$ fornece

$$\frac{v_2}{v_R} = \frac{\rho_R}{\rho_2} = \frac{1}{z}. \quad (2.60)$$

A equação (2.56) é escrita como

$$\frac{2}{\gamma - 1} c_R^2 + v_R^2 = \frac{2}{\gamma - 1} c_2^2 + v_2^2. \quad (2.61)$$

Dividindo (2.61) por c_R^2 e usando (2.59), tem-se

$$\left(\frac{v_R}{c_R}\right)^2 = \frac{2}{\gamma - 1} \left(\frac{P}{z} - 1\right) + \frac{v_2^2}{c_R^2}.$$

De acordo com (2.60), sabe-se que

$$v_2 = \frac{v_R}{z} \quad (2.62)$$

de onde conclui-se que

$$\left(\frac{v_R}{c_R}\right)^2 = \frac{2}{\gamma - 1} \frac{z(z - P)}{1 - z^2}. \quad (2.63)$$

Agora, a equação (2.55) fornece

$$p_R + m v_R = p_2 + m v_2, \quad (2.64)$$

e como $m = \rho v$ e $p = \frac{c^2}{\gamma} \rho$, tem-se

$$\rho_R \left(\frac{c_R^2}{\gamma} + v_R^2\right) = \rho_2 \left(\frac{c_2^2}{\gamma} + v_2^2\right). \quad (2.65)$$

Dividindo (2.65) por c_R^2 , usando (2.59) e (2.62), tem-se que

$$\rho_R \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{v_R^2}{c_R^2} \right) = \rho_2 \left(\frac{P}{\gamma z} + \frac{v_R^2}{z c_R^2} \right).$$

Usando ainda (2.60) para eliminar ρ_R e ρ_2 a equação (2.65) fica

$$\left(\frac{v_R}{c_R} \right)^2 = \frac{z(1-P)}{\gamma(1-z)}. \quad (2.66)$$

Igualando (2.63) e (2.66) e equacionando, chega-se a

$$z = \frac{1 + \beta P}{\beta + P}. \quad (2.67)$$

Para a obtenção da equação para a variação da velocidade no choque, o primeiro passo é isolar P em (2.67) e substituir a expressão encontrada em (2.63), o que resulta em

$$\left(\frac{v_R}{c_R} \right)^2 = \frac{2z}{\gamma - 1} \frac{1}{\beta - z}. \quad (2.68)$$

Depois, verificando que

$$\frac{2}{\gamma - 1} = \beta - 1,$$

tem-se

$$\frac{v_R}{c_R} = \pm \left[\frac{z(\beta - 1)}{\beta - z} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.69)$$

Deve-se escolher o sinal negativo na equação (2.69) pois $c_R > 0$ e $v_R < 0$ (já que se está interessado no caso particular em que $u_R = 0$). Depois, lembrando que $v = u - \sigma$, obtém-se a seguinte fórmula para a velocidade do choque:

$$\sigma = u_R + c_R \left[\frac{z(\beta - 1)}{\beta - z} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.70)$$

A equação (2.60) implica em

$$u_2 - \sigma = \frac{u_R - \sigma}{z} \quad (2.71)$$

e portanto,

$$\begin{aligned} u_2 - u_R &= \frac{z-1}{z}(\sigma - u_R) \\ &= c_R(z-1)\sqrt{\frac{\beta-1}{z(\beta-z)}}. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Usando (2.67) novamente, chega-se às expressões

$$z-1 = \frac{(\beta-1)(P-1)}{\beta+P} \quad (2.73)$$

e

$$(\beta-z)z = \frac{(\beta^2-1)(1+\beta P)}{(\beta+P)^2} \quad (2.74)$$

que, usadas (juntamente com a definição de β em (2.58)) para eliminar z na equação (2.72), resultam finalmente na equação desejada,

$$u_2 - u_R = c_R \sqrt{\frac{2}{\gamma(\gamma-1)} \frac{P-1}{\sqrt{1+\beta P}}}, \quad (2.75)$$

que representa a variação da velocidade no choque.

Para o número de Mach, M , tem-se

$$M = \frac{\sigma - u_R}{c_R}. \quad (2.76)$$

Usa-se (2.70) para substituir o valor de σ na equação (2.76), de forma que

$$M = \left[\frac{z(\beta-1)}{\beta-z} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.77)$$

Com a equação (2.67), conclui-se que

$$\frac{z}{\beta-z} = \frac{1+\beta P}{\beta^2-1}, \quad (2.78)$$

que pode ser substituída em (2.77), resultando

$$M = \left[\frac{1+\beta P}{\beta+1} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Isolando $\sqrt{1+\beta P}$ em (2.75) e usando novamente a definição de β , tem-se que

$$M = \frac{(P-1)c_R}{\gamma(u_2 - u_R)}. \quad (2.79)$$

Igualando (2.76) e (2.79) chega-se a uma equação para a velocidade do choque,

$$\sigma = u_R + \frac{(P-1)c_R^2}{\gamma(u_2 - u_R)}. \quad (2.80)$$

A descontinuidade de contato ocorre na massa específica, ao passo que a pressão e a velocidade normal a esta são contínuas (Hirsch, [21]). Portanto, a descontinuidade de contato se propaga com velocidade V , com $V \equiv u_2$. Por isto, as seguintes condições devem ser satisfeitas:

$$\begin{aligned} p_3 &= p_2 \\ u_3 &= u_2 \equiv V. \end{aligned} \quad (2.81)$$

A região das ondas de expansão é formada pelas características de tangentes $u - c$ e as informações entre as regiões L e 3 são transmitidas ao longo das características de tangentes u e $u + c$ (conforme análise da figura 2.3).

Ao longo das características com tangente u a entropia (representada por s) é constante,

$$s_3 = s_L \quad (2.82)$$

ou seja,

$$\frac{p_3}{\rho_3^\gamma} = \frac{p_L}{\rho_L^\gamma} \quad (2.83)$$

e ao longo das características cuja tangente é $u+c$, a variável de Riemman é constante (Hirsch, [21]), da forma,

$$\frac{\gamma-1}{2}u_L + c_L = \frac{\gamma-1}{2}u_3 + c_3. \quad (2.84)$$

Utilizando $u_3 = V$, a equação (2.84) fica

$$V - u_L = \frac{2}{\gamma-1}(c_L - c_3) = \frac{2}{\gamma-1}c_L \left(1 - \frac{c_3}{c_L}\right) \quad (2.85)$$

e sabendo que $c^2 = \gamma p/\rho$,

$$\left(\frac{c_3}{c_L}\right)^2 = \frac{p_3 \rho_L}{p_L \rho_3} \quad (2.86)$$

que, com (2.83) resulta

$$\frac{c_3}{c_L} = \left[\frac{p_3}{p_L} \left(\frac{p_3}{p_L}\right)^{-\frac{1}{\gamma}} \right]^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{p_3}{p_L}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}}. \quad (2.87)$$

Com isto, obtém-se

$$V - u_L = \frac{2}{\gamma - 1} c_L \left[1 - \left(\frac{p_3}{p_L}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \right]. \quad (2.88)$$

As relações acima, equações (2.65), (2.71), (2.81) e (2.86), permitem a determinação de todos os estados que são constantes nas regiões 2, 3 e L . Em particular, usando a equação (2.81) em (2.75), estabelece-se uma relação entre $u_2 = V$ e a razão P :

$$\frac{V - u_R}{c_R} = \sqrt{\frac{2}{\gamma(\gamma - 1)} \frac{P - 1}{\sqrt{1 + \beta P}}}. \quad (2.89)$$

Uma outra relação entre V e P é obtida quando se introduz a condição de continuidade da pressão na superfície de contato ($p_3 = p_2$) em (2.88):

$$V - u_L = \frac{2}{\gamma - 1} c_L \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_L}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \right]. \quad (2.90)$$

Estas duas equações, (2.89) e (2.90), são empregadas para eliminar V .

Assim,

$$\sqrt{\frac{2}{\gamma(\gamma - 1)} \frac{P - 1}{\sqrt{1 + \beta P}}} = \frac{2}{\gamma - 1} \frac{c_L}{c_R} \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_L}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \right] + \frac{u_L - u_R}{c_R}, \quad (2.91)$$

é uma equação implícita para P e pode ser resolvida por algum esquema iterativo, como o método de Newton. Conhecido o valor de P , todas as outras variáveis são determinadas com as relações descritas acima.

A evolução contínua das variáveis através da região 5, que separa as regiões L e 3, também deve ser determinada. O estado do gás na região 5 é determinado pelas condições (2.83) e (2.84), que expressam as informações (constantes) transportadas pelas características de tangentes u e $u + c$. Portanto,

$$\frac{p_5}{\rho_5^\gamma} = \frac{p_L}{\rho_L^\gamma} \quad (2.92)$$

e

$$\frac{\gamma - 1}{2} u_5 + c_5 = \frac{\gamma - 1}{2} u_L + c_L. \quad (2.93)$$

A região de expansão é formada pelas características de tangente $u - c$, ao longo das quais

$$\frac{\gamma - 1}{2} u_5 - c_5 = \text{constante} \quad \text{ao longo de} \quad \frac{dx}{dt} = u_5 - c_5. \quad (2.94)$$

Cada característica da região de expansão é definida por

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\gamma + 1}{2} u_5 - c_L - \frac{\gamma - 1}{2} u_L, \quad (2.95)$$

de acordo com (2.93). Combinando as equações (2.93) e (2.94), percebe-se que u_5 e c_5 são ambas constantes ao longo desta característica, o que significa que elas podem ser definidas por

$$\frac{x}{t} = u_5 - c_5. \quad (2.96)$$

Desta forma, como u_5 varia entre u_L e V , segue que

$$-c_5 < \frac{x}{t} < V - c_5.$$

Agora, considerando a posição inicial do diafragma como $x = 0$ (caso contrário, faz-se uma translação $(x - x_0)$) tem-se, na região de expansão,

$$u_5 = \frac{2}{\gamma + 1} \left(\frac{x}{t} + c_L + \frac{\gamma - 1}{2} u_L \right) \quad (2.97)$$

para

$$-u_- < \frac{x}{t} < u_+$$

onde

$$u_- = \frac{\gamma - 1}{2} u_L + c_L \quad (2.98)$$

e

$$u_+ = \frac{\gamma + 1}{2} V - c_L - \frac{\gamma - 1}{2} u_L.$$

Além disto,

$$c_5 = c_L - \frac{\gamma - 1}{2} (u_5 - u_L) = u_5 - \frac{x}{t}, \quad (2.99)$$

$$\begin{aligned} p_5 &= p_L \left(\frac{c_5}{c_L} \right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \\ &= p_L \left[\frac{2}{\gamma+1} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \frac{u_L}{c_L} - \frac{\gamma-1}{2} \frac{x}{c_L t} \right) \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}}, \end{aligned} \quad (2.100)$$

$$\rho_5 = \rho_L \left[\frac{2}{\gamma+1} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \frac{u_L}{c_L} - \frac{\gamma-1}{2} \frac{x}{c_L t} \right) \right]^{\frac{2}{\gamma-1}}. \quad (2.101)$$

É importante observar que a solução completa do tubo de choque depende apenas de x/t e das condições iniciais (estados L e R). Um algoritmo pode ser desenvolvido para que a solução exata do tubo de choque seja obtida através das equações apresentadas nesta seção. A maneira com que isto é realizado é descrita a seguir.

2.3.1 Descrição do algoritmo

Conforme descrição acima, a solução exata do tubo de choque baseia-se na combinação de ondas. Logo, o primeiro passo quando se constrói o algoritmo é definir estados principais (relacionados a estas ondas), a partir dos quais os estados intermediários serão localizados (no espaço-tempo).

Primeiro, aplica-se um algoritmo de quebra (neste caso, bissecção) à equação (2.91) para definir o valor da pressão após o choque, p_2 . Com esta informação define-se a massa específica ρ_3 à esquerda da descontinuidade de contato através da equação (2.83). Conhecendo-se p_2 , c_L e p_L pode-se determinar a velocidade do fluido

após o choque (v_2) (isto é, a velocidade da descontinuidade de contato) com $u_L = 0$, $u_2 = u_3 = V$ e $p_3 = p_2$. Com este dado estabelece-se a massa específica após o choque, ρ_2 , com a equação (2.67). A velocidade do choque é calculada igualando-se as equações (2.76) e (2.79). Do resultado, isola-se σ e considera-se $u_R = 0$. Agora, a velocidade da cauda do leque de expansão é obtida com a equação (2.95), fazendo $u_L = 0$.

Conhecendo-se as variáveis citadas anteriormente, é possível definir regiões do tubo nas quais cada variável assume um determinado valor. Este procedimento de solução fica mais claro quando colocado na forma de algoritmo.

1. Define-se $\rho_R, \rho_L, p_R, p_L, u_R, u_L, c_R$ e c_L .
2. Determina-se p_2 com o algoritmo da bissecção na equação (2.91).
3. Calcula-se ρ_3 através de (2.83).
4. Calcula-se $u_2 \equiv V$ através de (2.88).
5. Calcula-se ρ_2 através de (2.67).
6. Calcula-se σ através de (2.80).
7. Calcula-se u_5 através de (2.97).
8. Calcula-se p_5 através de (2.100).
9. Calcula-se ρ_5 através de (2.101).
10. Para $i = 0$ até n
 11. Se $x_i \leq -u_- t$ $\rho = \rho_L, p = p_L, u = u_L$
 12. Se não
 13. Se $x_i \leq u_+ t$ $\rho = \rho_5, p = p_5, u = u_5$
 14. Se não
 15. Se $x_i \leq V t$ $\rho = \rho_3, p = p_2, u = u_2$
 16. Se não
 17. Se $x_i \leq \sigma t$ $\rho = \rho_2, p = p_2, u = u_2$
 18. Se não $\rho = \rho_R, p = p_R, u = u_R$
 19. Fim Se
 20. Fim Para

Este algoritmo fornece a solução do problema do tubo de choque para dados iniciais como:

$$\begin{aligned} u_L = 0, \quad p_L = 1, \quad \rho_L = 1, \quad x < x_0 \quad t = 0 \\ u_R = 0, \quad p_R = 0,1, \quad \rho_R = 0,125, \quad x > x_0 \quad t = 0 \end{aligned} \quad (2.102)$$

Agora que se tem uma descrição do problema físico e a sua solução exata, pode-se discutir o método numérico empregado para aproximar as soluções. No capítulo 3 são apresentados alguns conceitos, como diferenças finitas, dissipação (natural e artificial) e esquema de Runge-Kutta, que são empregados na aproximação numérica propriamente dita.

3 PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO NUMÉRICA EM DIFERENÇAS FINITAS

O método de diferenças finitas é um dos mais antigos aplicados na obtenção de soluções numéricas de equações diferenciais e a literatura existente é bastante vasta. Em livros como os de Richtmyer [45], de Hirsch [22] e de Strikwerda [50], além de outros tantos, encontra-se material bem amplo e acessível sobre as fórmulas de diferenças finitas e suas aplicações. A idéia deste método de aproximação é bastante simples.

Como exemplo, toma-se a derivada de uma função $u(x)$ no ponto x , que é definida por

$$u_x = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h}. \quad (3.1)$$

Se h é suficientemente pequeno, a expressão do lado direito é uma aproximação para o valor exato de u_x . Esta aproximação pode ser melhorada com a redução de h . Entretanto, para qualquer valor finito de h , um erro, que tende a zero para h tendendo a zero, é introduzido. Este é o chamado *erro de truncamento*. A potência de h com a qual ele tende a zero é chamada de *ordem da aproximação a diferenças* e pode ser obtida através de um desenvolvimento em série de Taylor de $u(x+h)$ em torno do ponto x . Desenvolvendo $u(x+h)$, obtém-se

$$u(x+h) = u(x) + hu_x(x) + \frac{h^2}{2}u_{xx}(x) + \dots \quad (3.2)$$

e portanto,

$$\frac{u(x+h) - u(x)}{h} = u_x(x) + \frac{h}{2}u_{xx}(x) + \dots \quad (3.3)$$

Então

$$\frac{u(x+h) - u(x)}{h} = u_x(x) + O(h), \quad (3.4)$$

é uma aproximação de primeira ordem para $u_x(x)$ em h , indicando que o erro de truncamento é de $O(h)$.

Para entender como estas fórmulas são aplicadas na aproximação das equações diferenciais considera-se, no espaço unidimensional, o eixo x . Faz-se uma discretização do eixo, tal que o contínuo é substituído por um conjunto discreto de N pontos x_j , $j = 1, \dots, N$, com espaçamento constante e igual a h entre os pontos, conforme representação na figura 3.1. Denota-se por u_j os valores da função $u(x)$ nos pontos $x_j = jh$ (ou seja, u_j é igual a $u(x_j)$).

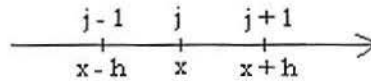


Fig. 3.1: Representação esquemática dos pontos no eixo das abcissas

As seguintes aproximações em diferenças finitas podem ser definidas para a primeira derivada no ponto $x = x_j$, $(u_x)_j$:

$$(u_x)_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{h} + O(h), \quad (3.5)$$

$$(u_x)_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{h} + O(h). \quad (3.6)$$

A primeira fórmula é denominada *diferença ascendente* e a segunda, *diferença descendente*. Ambas são aproximações de primeira ordem para $(u_x)_j$. Outras fórmulas, com diferentes ordens de aproximação, podem ser obtidas. A mais comum é a de segunda ordem, obtida conforme descrição abaixo.

Fazendo duas expansões diferentes em série de Taylor para a primeira derivada,

$$u(x+h) = u(x) + hu_x(x) + \frac{h^2}{2}u_{xx}(x) + \dots \quad (3.7)$$

e

$$u(x-h) = u(x) - hu_x(x) + \frac{h^2}{2}u_{xx}(x) + \dots, \quad (3.8)$$

e diminuindo (3.8) de (3.7), obtém-se

$$u_x(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + O(h^2), \quad (3.9)$$

que é uma aproximação de segunda ordem para $u_x(x)$. Na notação de diferenças finitas, esta expressão fica

$$(u_x)_j = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} + O(h^2), \quad (3.10)$$

cuja ordem de precisão é maior do que em (3.5) e (3.6).

Uma ilustração gráfica para os três tipos de aproximação para a derivada de primeira ordem, dados em (3.5), (3.6) e (3.10), é fornecida pela figura 3.2.

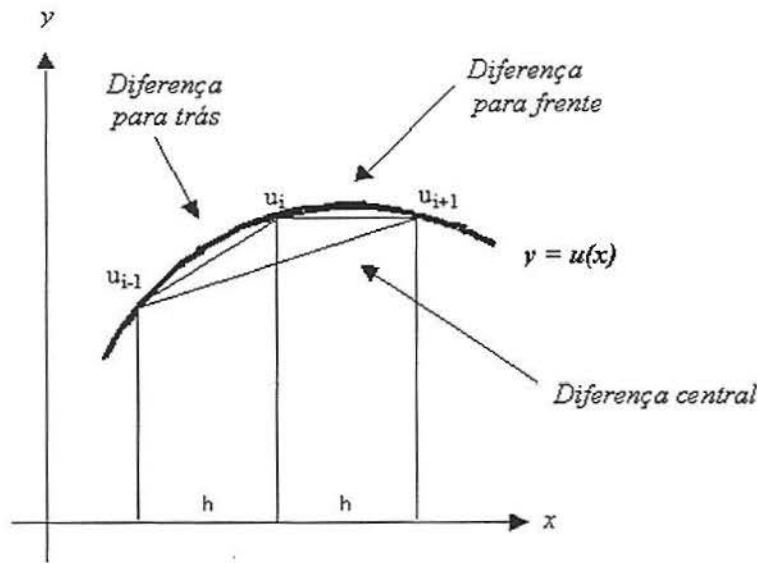


Fig. 3.2: Ilustração para as derivadas de primeira ordem [22]

Ainda, para exemplificar outras fórmulas de diferenças finitas, são apresentadas as aproximações centrais de segunda ordem (geralmente, as mais utilizadas em problemas de fluidos [12]) para as derivadas abaixo:

$$(u_{xx})_j = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + O(h^2), \quad (3.11)$$

$$(u_{xxxx})_j = \frac{u_{j+2} - 4u_{j+1} + 6u_j - 4u_{j-1} + u_{j-2}}{h^4} + O(h^2), \quad (3.12)$$

Antes de apresentar a discretização das equações com as fórmulas acima, acredita-se necessário discutir algumas noções e propriedades básicas dos esquemas numéricos.

3.1 Algumas Definições Básicas

No momento de discretizar as equações que se quer resolver, algumas decisões precisam ser tomadas, como por exemplo: qual o tipo de diferenças que deve ser empregado e qual a precisão necessária. Naturalmente que cada escolha pode acarretar diferentes conseqüências: a solução numérica pode apresentar melhoras, pode manter-se inalterada, ou ainda, pode deteriorar-se completamente. Para caracterizar as propriedades dos diversos esquemas numéricos que podem levar a vários tipos de comportamento, existem três noções básicas: consistência, estabilidade e convergência. Elas são condições sobre os aspectos das relações entre as equações discretizadas, a solução numérica e a solução exata (analítica) das equações diferenciais. Elas podem ser definidas de maneiras distintas, seguindo a nomenclatura e a notação de cada autor. As definições utilizadas nesta seção seguem o modelo de Sod [49].

Considere um problema de valor inicial

$$\partial_t v = P(\partial_x)v \quad (3.13)$$

$$v(x, 0) = f(x) \quad (3.14)$$

onde $P(\partial_x)$ é um polinômio em ∂_x . Por exemplo, se $P(z) = z^2 + 5z + 1$, então $P(\partial_x) = \partial_x^2 + 5\partial_x + 1$ e (3.13) fica $\partial_t v = \partial_x^2 v + 5\partial_x v + v$.

Definição 1 (Problema Bem Posto) *O problema de valor inicial acima é bem posto, em uma norma $\|\cdot\|$, se uma solução única e que depende continuamente da condição inicial¹ existe, no seguinte sentido: se existem constantes C e α tais que*

$$\|v(\cdot, t)\| \leq Ce^{\alpha t} \|v(\cdot, 0)\|.$$

Sejam $u^n = u_j^n$ funções da malha no tempo $t = nk$, onde n é o número de intervalos de tempo e k é o seu tamanho. Seja $u_j^0 = f(x_j) = f(jh)$ a condição

¹Na verdade, é importante que a desigualdade seja válida para estados iniciais $v(\cdot, 0)$ arbitrários.

inicial discreta. De acordo com [49], o problema (3.13)-(3.14) pode ser aproximado por diferenças finitas da seguinte forma:

$$u^{n+1} = Qu^n, \quad n \geq 0, \quad (3.15)$$

onde Q é um polinômio, função dos operadores *para frente* S_+ e *para trás* S_- , onde $S_+u_j = u_{j+1}$ e $S_-u_j = u_{j-1}$.

Definição 2 (Estabilidade) *O método de diferenças finitas (3.15) é estável em uma dada norma $\|\cdot\|_h$ se existem constantes K e β tal que*

$$\|u^n\|_h \leq Ke^{\beta t} \|u^0\|_h, \quad (3.16)$$

onde $t = nk$ e K e β são independentes de h e de k .

A essência da estabilidade é que deve haver um limite para o nível a que cada componente de uma função inicial pode ser ampliado no procedimento numérico. Observa-se ainda, seguindo Sod [49], que a definição de um problema estável é equivalente à definição de um problema bem posto, para o caso contínuo.

Definição 3 (Consistência) *Um esquema de diferenças finitas é consistente até o tempo T em uma norma $\|\cdot\|_h$ se a solução verdadeira v do problema (3.13)-(3.14) é tal que*

$$v^{n+1} = Qv^n + k\tau^n, \quad (3.17)$$

onde $\|\tau^n\|_h \leq \tau(h)$, $nk \leq T$ e $\tau(h) \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$. Aqui, assume-se que k é definido em termos de h e tende a zero com h . Além disso, v_j^n denota $v(jh, nk)$, a solução exata calculada no ponto (jh, nk) da malha, e τ^n é o erro de truncamento local no tempo nk .

Em outras palavras, um esquema é consistente se o erro de truncamento tende a zero para h e k tendendo a zero. Ou seja, consistência significa que as

²A notação $\|\cdot\|_h$ destaca que esta é uma norma no espaço (discreto) das funções da malha, já que h refere-se à medida do espaçamento da malha.

equações discretizadas devem tender às equações diferenciais com as quais elas estão relacionadas, quando h e k tendem a zero.

Definição 4 (Ordem de Precisão) *O método de diferenças finitas (3.15) é de ordem (p, q) se*

$$\|v^{n+1} - Qv^n\|_h = k(O(h^p) + O(k^q)). \quad (3.18)$$

Neste caso, o erro de truncamento é $O(h^p) + O(k^q)$.

A solução numérica u_j^n deve aproximar a solução exata da equação diferencial em qualquer ponto $x_j = jh$ e tempo $\tau = nk$ quando h e k tendem a zero. Esta noção é o que motiva o conceito de convergência.

Definição 5 (Convergência) *O método de diferenças finitas (3.15) é convergente na norma $\|\cdot\|_h$ em um intervalo $[0, T]$ se*

$$\|v(\cdot, t^n) - u^n\|_h \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad h, k \rightarrow 0 \quad (3.19)$$

uniformemente em $n > 0$ tal que $nk \leq T$ ³. Ele é convergente de ordem (p, q) em uma norma $\|\cdot\|$ se

$$\|v(\cdot, t^n) - u^n\| = O(h^p) + O(k^q). \quad (3.20)$$

Convergência implica que uma solução do esquema em diferenças finitas aproxima a solução da equação diferencial parcial.

Todas estas definições estão interligadas (o esquema 3.3 a seguir sintetiza o significado de cada uma delas); a relação precisa entre elas está contida no seguinte teorema fundamental, cuja demonstração pode ser encontrada no livro de Richtmyer [45].

³Aqui $v(\cdot, t^n)$ denota a solução exata vista como função dos pontos de malha, ou seja, projetada sobre o espaço discreto.

Teorema 1 (Teorema da Equivalência de Lax) *Dado um problema de valor inicial linear bem posto e uma aproximação em diferenças finitas linear que satisfaz a condição de consistência, estabilidade é a condição necessária e suficiente para convergência.*

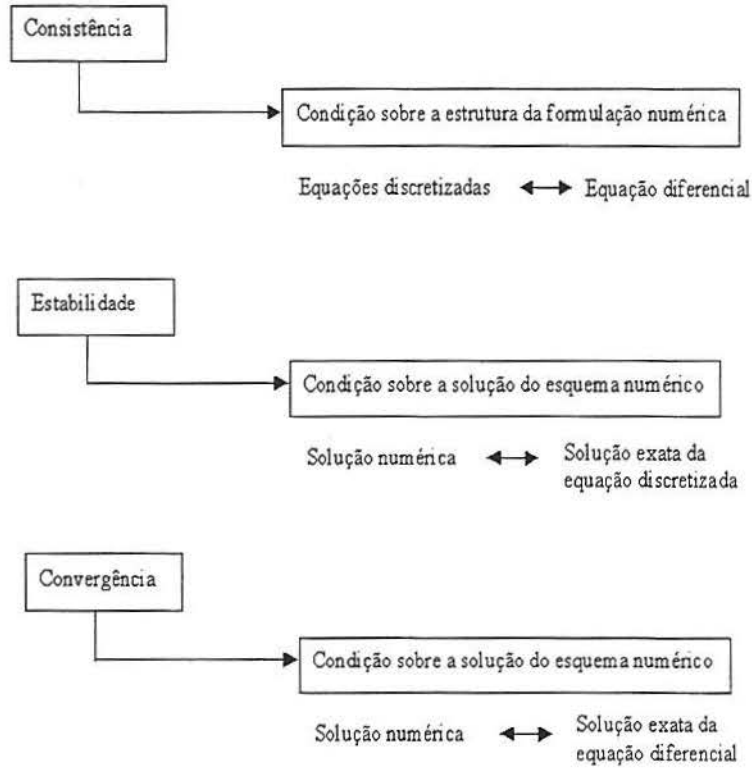


Fig. 3.3: Relações entre consistência, estabilidade e convergência [22]

A investigação completa da análise de estabilidade pode ser extremamente complicada, particularmente na presença das condições de contorno e de sua representação numérica. Hoje em dia, o método de von Neumann, conforme Hirsch [22], é a técnica mais utilizada para análise de estabilidade porque, mais do que isto, ele permite uma extensiva investigação do comportamento do erro como função da frequência dos dados iniciais e da solução.

3.2 A análise de von Neumann e o Método de Fourier

A questão da estabilidade para um problema linear com coeficientes constantes é atualmente bem entendida quando a influência das fronteiras pode ser desconsiderada [22]. Este é o caso tanto para um domínio infinito como para condições periódicas em um domínio finito. Neste último, considera-se que o domínio computacional no eixo x , de comprimento L , é repetido periodicamente. Portanto, todas as quantidades, como a solução e os erros, podem ser desenvolvidas em séries de Fourier finitas sobre o domínio $2L$. Este desenvolvimento forma a base do método de von Neumann para a análise de estabilidade.

Quando é preciso trabalhar com coeficientes variáveis e (ou) com termos não lineares nas equações básicas as informações sobre a estabilidade se tornam bastante restritas. Neste caso, é necessário recorrer à análise de estabilidade local, com valores fixos para os coeficientes não lineares e variáveis, no intuito de tornar a formulação linear.

Muitos fenômenos em escoamento de fluidos mostram um tipo de movimento similar ao de uma onda. Portanto, é útil considerar a solução exata como se ela fosse composta por seus componentes de Fourier separados. Na seção 3.3.2 isto motivará o questionamento sobre se o processo de discretização representa ondas de diferentes comprimentos com a mesma precisão.

Pode-se representar a transformada discreta de Fourier da função $u = u_j$ por

$$\hat{u}(\xi) = \sum_j u_j e^{-ij\xi} \quad (3.21)$$

com $-\pi \leq \xi \leq \pi$.

A região perto de $\xi = 0$ corresponde às baixas frequências do espectro e a região perto de $\xi = \pi$, às altas. Em particular, o valor $\xi = \pi$ corresponde à frequência mais alta que é possível representar na malha, ou seja, à frequência cujo comprimento de onda é $2h$.

Observa-se agora a ação da transformada discreta de Fourier sobre o operador *para frente*, S_+ , onde $S_+u = u_{j+1}$:

$$\begin{aligned}\widehat{(S_+u)}(\xi) &= \sum_j u_{j+1} e^{-ij\xi} \\ &= \sum_j u_j e^{-i(j-1)\xi} \\ &= e^{i\xi} \hat{u}(\xi).\end{aligned}\tag{3.22}$$

Portanto, a ação de S_+ nos espaços da transformada discreta de Fourier corresponde a uma multiplicação por $e^{i\xi}$. Analogamente, $\widehat{(S_-u)}(\xi) = e^{-i\xi} \hat{u}(\xi)$ e segue-se que se

$$u^{n+1} = Q(S_+, S_-)u^n,\tag{3.23}$$

como em (3.15), então,

$$\hat{u}^{n+1} = Q(e^{i\xi}, e^{-i\xi}) \hat{u}^n.\tag{3.24}$$

Isto mostra que aplicar o operador $Q(S_+, S_-)$ a u^n e tomar a transformada discreta de Fourier é o mesmo que multiplicar a transformada discreta de Fourier \hat{u}^n por $Q(e^{i\xi}, e^{-i\xi})$. Isto motiva a seguinte definição (para o caso escalar) [50]:

Definição 6 (Fator de Amplificação) *A fórmula (3.24) mostra que avançar a solução do esquema em um passo de tempo é equivalente a multiplicar a transformada discreta de Fourier da solução por um fator $g(\xi) = Q(e^{i\xi}, e^{-i\xi})$, denominado fator de amplificação. Ele recebe esta denominação porque sua magnitude é a quantidade que a amplitude de cada frequência na solução, dada por $\hat{u}^n(\xi)$, é aumentada (amplificada) quando se avança a solução em um passo de tempo.*

Para entender melhor esta definição, considera-se a equação unidimensional do calor,

$$\partial_t v = a^2 \partial_x^2 v, \quad -\infty < x < \infty, \quad t > 0\tag{3.25}$$

com condição inicial

$$v(x, 0) = f(x),$$

onde $f(x)$ é uniformemente limitada por uma constante M , ou seja, $|f(x)| \leq M$ para todo x . Sua aproximação em diferenças finitas é dada por

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= \mu u_{j+1}^n + (1 - 2\mu) u_j^n + \mu u_{j-1}^n \\ &= (\mu S_+ + (1 - 2\mu) I + \mu S_-) u_j^n \\ &\equiv Q(S_+, S_-) u_j^n, \end{aligned}$$

com $\mu = a^2 \frac{k}{h^2}$.

O fator de amplificação $g(\xi)$ é obtido via aplicação da transformada discreta de Fourier à equação anterior, de forma que

$$\hat{u}^{n+1}(\xi) = g(\xi) \hat{u}^n(\xi)$$

e

$$\begin{aligned} g(\xi) &= Q(e^{i\xi}, e^{-i\xi}) \\ &= \mu e^{i\xi} + (1 - 2\mu) + \mu e^{-i\xi} \\ &= 1 - 2\mu(1 - \cos \xi), \end{aligned}$$

para $-\pi < \xi < \pi$.

Através da definição de fator de amplificação e por meio da transformada discreta de Fourier, percebe-se que todo esquema de passo único pode ser colocado na forma

$$\hat{u}^n(\xi) = g^n(\xi) \hat{u}^0(\xi), \quad (3.26)$$

o que motiva o teorema a seguir, válido para o caso escalar ⁴.

⁴É importante destacar também que a norma $\|\cdot\|_h$ refere-se sempre à norma l_2 :

$$\|u^n\|_h = \left(\sum_j h |u_j^n|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Teorema 2 *Um esquema de diferenças finitas de passo único, com coeficientes constantes, é estável se e somente se existe uma constante K (independente de ξ , de k e de h) e espaçamentos positivos k_0 e h_0 tais que*

$$|g(\xi, k, h)| \leq 1 + Kh \quad (3.27)$$

para todo ξ , $0 < k \leq k_0$, $0 < h \leq h_0$. Se $g(\xi, k, h)$ é independente de h e de k , a condição de estabilidade (3.27) pode ser substituída por

$$|g(\xi, k, h)| \leq 1. \quad (3.28)$$

Um procedimento simples para obter uma expressão para $g(\xi)$ é substituir u_j^n no esquema de diferenças finitas por $g^n e^{ij\xi}$ para cada valor de j e de n . A equação resultante pode então ser resolvida para o fator de amplificação.

Uma maneira interessante e sobretudo prática de analisar a estabilidade de um determinado esquema é a representação do fator de amplificação no plano complexo. Escrevendo $g(\xi)$ como a soma das partes real e imaginária, ou seja, $g(\xi) = x + iy$, obtém-se a sua representação paramétrica em função do parâmetro ξ . No plano complexo, a condição de estabilidade (3.28), por exemplo, exige que a curva que representa $g(\xi)$ para todos os valores de ξ deve pertencer ao interior do círculo unitário.

Uma ilustração deste fato é encontrada na figura 3.4, para o seguinte esquema *upwind* de primeira ordem:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = -\lambda (u_j^n - u_{j-1}^n)$$

onde $\lambda = \frac{k}{h}$.

Observe que o círculo maior, de raio unitário, delimita a fronteira entre as regiões de estabilidade e de instabilidade e o círculo menor representa o fator de amplificação, g .

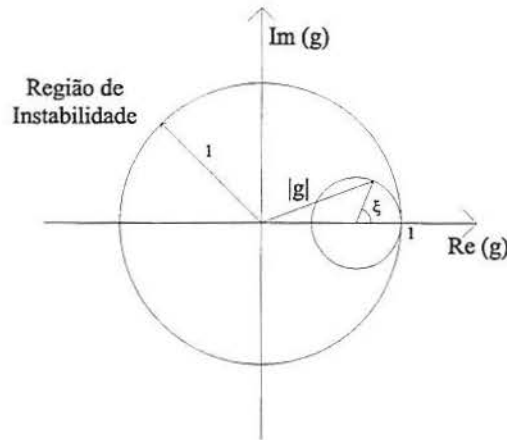


Fig. 3.4: Representação do fator de amplificação para o esquema *upwind*. [22]

Até este momento, algumas informações importantes quanto ao método de diferenças finitas foram discutidas. Entretanto, elas possuem limitações. Embora, em alguns casos, estas informações possam ser entendidas em um contexto mais amplo (equações não lineares ou coeficientes variáveis, por exemplo), isto não é, em geral, válido. Mesmo assim, este tipo de análise é importante, pois ela faculta um pouco de “insight” (percepção) nos problemas mais complexos.

Conforme o Capítulo 2, um dos problemas escolhidos para simulação é o tubo de choque, que representa um fenômeno não linear, com presença de ondas de choque. Certamente este é um caso que exige um método de solução poderoso, capaz de representar com precisão o fenômeno físico e eficiente também quanto à economia computacional. O método escolhido para realizar as simulações é um esquema simplificado de Runge-Kutta [24] para avançar a solução no tempo. Para a discretização espacial utiliza-se diferenças centrais com a adição de alguns termos de dissipação artificial. Esta nomenclatura será oportunamente discutida nas páginas que se seguem. Agora, em vista do que já foi discutido, apresenta-se as fórmulas da discretização espacial. Desta forma, o sistema (2.10) pode ser reduzido a um conjunto de equações diferenciais ordinárias,

$$\frac{d\vec{W}}{dt} + \vec{P} = 0, \quad (3.29)$$

conforme secção 3.4. O vetor \vec{P} , tal que $\vec{P} = L_Q - L_D$, é o vetor resíduo, que envolve apenas as discretizações dos termos convectivos (L_Q) e dos termos dissipativos (L_D).

Os termos convectivos são aproximados com diferenças centrais ⁵ (de segunda ordem, conforme (3.10)), de forma que

$$L_Q = \frac{S_+ \vec{Q}_j - S_- \vec{Q}_j}{2h}. \quad (3.30)$$

A escolha deste tipo de função de interpolação causa o aparecimento de oscilações espúrias na solução. É por isto que se inclui os termos de dissipação artificial, representados por L_D . A natureza e a aproximação destes termos, assim como outros conceitos a eles relacionados, serão discutidos mais detalhadamente na próxima secção.

3.3 Dissipação

Tradicionalmente, a dissipação pode ser classificada como dissipação natural - inerente ao problema físico - e dissipação numérica - somada explícita ou implicitamente ao método numérico com fins de estabilização da solução.

3.3.1 Dissipação Natural - Equações de Burgers

Na seção 2.1, observa-se que a equação originalmente estudada por Burgers,

$$u_t + u u_x = \nu u_{xx},$$

contém um termo de dissipação. Neste caso, ele é a própria viscosidade natural, ν . Esta viscosidade inerente ao problema físico também pode ser vista como um fator de estabilização da solução numérica (controlando oscilações). Ela pode inclusive ser comparada ao conceito de dissipação artificial introduzido na próxima seção: ao invés de um mecanismo “inteligente”, que seleciona as regiões de maior gradiente para aplicar maior dissipação, a dissipação natural da equação de Burgers poderia ser entendida como uma dissipação uniforme para o domínio inteiro.

⁵Convém observar que o método em questão é conservativo, o que decorre do fato de se ter usado sempre as equações de Euler na forma conservativa - ver (2.9) ou (2.10).

São várias as formas encontradas na literatura para justificar a utilização da dissipação, explicar o seu efeito e entender o seu funcionamento. A maneira mais simples de começar é entendendo o que ela é, ou seja, através da sua definição.

3.3.2 Definição de Dissipação Numérica

Uma equação diferencial parcial envolve pontos no espaço e no tempo. Logo, suas propriedades lineares podem ser descritas pela ação de uma onda no espaço e no tempo. Observa-se como uma equação diferencial parcial age em uma única onda no tempo e no espaço, chamada de modo de Fourier (conforme trabalho de Degrez em [14]),

$$v(x, t) = \hat{v} e^{i(\omega t + \beta x)}, \quad (3.31)$$

onde ω é a frequência da onda e β é o número de onda (que está relacionado ao comprimento de onda, λ , por $\beta = 2\pi/\lambda$).

Inicialmente, considera-se a seguinte equação de difusão:

$$v_t = a v_{xx}. \quad (3.32)$$

Substituindo (3.31) na equação de difusão, (3.32), tem-se

$$i \omega \hat{v} e^{i(\omega t + \beta x)} = -a \beta^2 \hat{v} e^{i(\omega t + \beta x)}, \quad (3.33)$$

que fornece,

$$\omega = ia\beta^2. \quad (3.34)$$

Como ω é imaginário, o modo de Fourier decai com o tempo, pois, substituindo (3.34) em (3.31), obtém-se

$$v(x, t) = \hat{v} e^{-a\beta^2 t + i\beta x}, \quad (3.35)$$

onde $e^{-a\beta^2 t}$ é um fator que decai exponencialmente conforme t cresce.

Agora, considera-se a equação de convecção dada por

$$v_t + c v_x = 0, \quad (3.36)$$

que descreve o transporte de uma quantidade v com velocidade c . Sua solução geral é $v = f(x - ct)$.

Substituindo (3.31) em (3.36), chega-se a

$$i\omega \hat{v} e^{i(\omega t + \beta x)} + i c \beta \hat{v} e^{i(\omega t + \beta x)} = 0, \quad (3.37)$$

que fornece a relação

$$\omega = -c\beta. \quad (3.38)$$

Substituindo (3.38) em (3.31), obtém-se o modo de Fourier para a equação da convecção:

$$v(x, t) = \hat{v} e^{i\beta(x-ct)}, \quad (3.39)$$

que representa a propagação de uma onda de comprimento $2\pi/\beta$ com velocidade c e sem amortecimento.

Conforme Sod [49], pode-se dizer que *dissipação* (ou difusão) ocorre quando os diferentes modos de Fourier decaem com o tempo e *dispersão*, quando os modos de Fourier de comprimentos (ou números) de onda diferentes se propagam com velocidades diferentes.

Comparando (3.35) e (3.39), percebe-se que a equação da convecção descreve a propagação de uma onda sem amortecimento, ao passo que a solução da equação de difusão apresenta amortecimento com o passar do tempo. É por esta razão que a dissipação numérica, definida mais detalhadamente a seguir, é muitas vezes associada ao fenômeno da difusão viscosa.

Para caracterizar estes conceitos do ponto de vista numérico, pode-se utilizar o fator de amplificação, definido na seção 3.2. Considerando (3.39) uma

solução particular periódica para a equação (3.36), o fator de amplificação para a solução exata é

$$\frac{v(x, t + k)}{v(x, t)} = e^{-ic\beta k} \quad (3.40)$$

$$= e^{-i\eta\lambda}, \quad (3.41)$$

com

$$\lambda = \frac{ck}{h} \quad (3.42)$$

$$\eta = \beta h, \quad (3.43)$$

onde k e h são as distâncias entre dois pontos no tempo e no espaço, respectivamente; λ é chamado de *número de Courant* e η , de *número de onda adimensional* [1].

Uma solução numérica resultaria

$$\frac{u_i^{n+1}}{u_i^n} = g(\eta, \lambda).$$

Quando se quer obter uma reprodução satisfatória de um fenômeno transiente real, deve-se ter $g(\eta, \lambda)$ o mais próximo possível de $e^{-i\eta\lambda}$. Para que o esquema seja estável é preciso que $|g(\eta, \lambda)| \leq 1$ para todo η . Segundo Degrez [14], a diferença entre $|g(\eta, \lambda)|$ e a unidade é chamada de dissipação (ou erro dissipativo) e a diferença entre $\arg(g(\eta, \lambda))$, o argumento de $g(\eta, \lambda)$, e $\eta\lambda$, de dispersão (ou erro dispersivo).

Não apenas termos difusivos de segunda ordem tais como os considerados acima podem produzir atenuação. Termos de quarta ordem e, em geral, todas as derivadas pares em relação à variável espacial produzem este efeito [35]. A dissipação de um esquema numérico é, em geral, amortecimento produzido pela união de alguns (ou de todos) estes termos de ordem par. A natureza desta união depende do esquema considerado e pode ser determinada pela técnica da equação modificada, descrita por Warming e Hyett em [57]. Segundo esta análise, termos de ordem par no resto do erro de truncamento produzem dissipação e termos de ordem ímpar, dispersão.

Esclarece-se, assim, a razão pela qual foi mencionado anteriormente que se deve ter alguns critérios quando se escolhe as funções de interpolação: um esquema de segunda ordem produz oscilações indesejáveis, que um esquema de primeira ordem não produz; por outro lado, o esquema de primeira ordem é menos preciso do que o outro, podendo, por isso, não representar a solução corretamente. Em outras palavras: um pouco de dissipação é necessária para amortecer algumas oscilações, mas se ela passar de um certo limite, pode deixar de ser benéfica e passar a influenciar negativamente. Entretanto, não é apenas a função de interpolação que pode interferir na estabilização do método numérico. Existem outros fatores igualmente importantes, relacionados à necessidade de converter um problema contínuo em discreto: a limitação natural dos métodos numéricos e a malha.

Uma maneira de resolver uma equação diferencial em um domínio infinito é recorrer à transformada de Fourier, se as condições necessárias para isto são satisfeitas. A solução pode então ser expressa como a soma de funções espaciais periódicas. Como o domínio é infinito, a soma pode ser transformada em uma integral tal que a solução envolva todos os números de onda $0 \leq \beta \leq \infty$. A limitação de qualquer solução numérica é que ela não pode representar números de onda β maiores do que π/h . Uma onda é chamada de modo numérico extremo (Degrez, em [14]) quando apresenta número de onda π/h e exibe um padrão de oscilação nos pontos da malha da forma $+1, -1, +1, \dots$

A malha geralmente é escolhida tal que os números de onda presentes na solução não se estendam ao modo numérico extremo, ou seja, os números de onda de interesse são tais que βh é pequeno se comparado a 1 [14]. Mesmo assim, existem casos em que números de onda altos estão naturalmente presentes, como acontece quando há presença de ondas de choque ou de descontinuidades de contato. Mesmo começando com condições suaves, descontinuidades podem ser produzidas pela interação não linear entre as ondas. Numericamente, essas interações geram altas frequências que acabam por atingir o limite de resolução da malha. Quando isso acontece, duas possibilidades existem: as altas frequências são rebatidas para

o interior como baixas frequências e alteram a precisão da solução numérica ou elas se acumulam. Além disso, ambos os efeitos juntos podem causar instabilidades.

Para ilustrar uma importante fonte de altas frequências, considera-se o seguinte problema de convecção-difusão, descrito por Degrez [14]:

$$\begin{aligned}c v_x &= \beta v_{xx} \\v(0) &= 0 \\v(1) &= 1,\end{aligned}\tag{3.44}$$

cuja solução analítica é

$$v = \frac{e^{\frac{c}{\beta}x} - 1}{e^{\frac{c}{\beta}} - 1}.\tag{3.45}$$

Quando $\beta \rightarrow 0$ (o que é análogo a $Re \rightarrow \infty$ em mecânica dos fluidos, onde Re é o número de Reynolds), a maior parte das variações da solução ocorre em uma estreita camada de espessura β/c (e diz-se que a solução é do tipo camada limite). Quando este problema é resolvido numericamente com diferenças centrais aparecem oscilações indesejadas se $R = \frac{ch}{\beta}$, o número de Reynolds da malha, é maior do que 2 [14].

Para contornar o problema, uma alternativa seria melhorar a malha, ou seja, refiná-la, já que a manutenção do termo v_{xx} na equação indica que se tem interesse na estrutura da camada limite em $x = 1$. Entretanto, em alguns problemas em dinâmica dos fluidos, é aconselhável manter os termos viscosos, mesmo que não se esteja interessado nos seus efeitos. Este é o caso de escoamentos com ondas de choque, por exemplo. A espessura relativa de uma onda de choque é $\frac{t}{L} = O(\frac{1}{Re}) = O(\frac{\beta}{v_\infty L})$ ou $t = O(\frac{\beta}{v_\infty})$, que é uma expressão similar à encontrada para a espessura da camada limite no problema modelo anterior. Assim, para captar adequadamente uma onda de choque, seria necessário usar h igual a uma fração de $\frac{\beta}{v_\infty}$. Isso não é prático, já que $\frac{\beta}{v_\infty}$ é da ordem de uns poucos livres caminhos médios entre as moléculas (uma distância extremamente pequena em escoamentos densos, para números de Reynolds elevados). Além disto, na maioria dos casos, não se está interessado na estrutura detalhada de uma onda de choque.

Em contraste a isso, as camadas limites que ocorrem em problemas de escoamentos laminares em duas ou em três dimensões têm espessura relativa $\frac{t}{L} = O(\frac{1}{\sqrt{Re}})$. Essas camadas são importantes e devem, em situações de interesse, ser captadas pela malha. Em escoamentos com altos números de Reynolds, tem-se uma coexistência de fenômenos viscosos, alguns dos quais são de interesse (camadas limite de parede, camadas de cisalhamento: fenômenos difusivos transversais) e outros que, na maior parte dos casos (estrutura de ondas de choque: fenômenos difusivos na direção do fluxo), não são.

Nestes casos, quando há presença de ambos os fenômenos, se um algoritmo sem dissipação é utilizado, haverá presença de oscilações inaceitáveis, pois a malha é inadequada para representar os fenômenos difusivos na direção do fluxo. Por outro lado, se um esquema com algum mecanismo que produza dissipação artificialmente for empregado, esta pode mascarar a dissipação física, fornecendo resultados irreais (especialmente para escoamentos com número de Reynolds alto). Isto sugere que, nestes casos, deve-se tomar cuidado para produzir uma dissipação adequada, que deve ser necessariamente anisotrópica, isto é, mais forte na direção do fluxo do que na direção transversal, na qual seria ideal que ela se anulasse.

3.3.3 Dissipação Artificial

A discretização das equações governantes com fórmulas centrais não é dissipativa. Para problemas nos quais a convecção é dominante, estas fórmulas conduzem a sérios problemas de oscilações espúrias, devido à falta de dissipação numérica (para funções de interpolação de ordem 2 ou superior). Em outras palavras, isto significa que as oscilações de alta frequência na solução não são amortecidas. A dissipação artificial é necessária para evitar a ocorrência de oscilações desta natureza, especialmente na presença de ondas de choque.

Ela também é necessária para escoamentos viscosos, pois os comprimentos de onda presentes na situação real (que são limitados pela viscosidade),

geralmente não são bem resolvidos com o uso de malhas práticas (elas deveriam ser mais refinadas, o que implicaria em maior custo computacional).

A dissipação artificial é considerada um recurso comum para estabilizar soluções numéricas. Mas ela também pode causar a deterioração da precisão numérica, especialmente em escoamentos viscosos (no cálculo da camada limite laminar e do arrasto). Este problema pode ser minimizado através do emprego de esquemas “upwind” ou de dissipação matricial. Contudo, a dissipação escalar é mais barata e fácil de implementar. Ela consiste basicamente de uma combinação de diferenças de segunda ordem (que devem atuar na captura do choque) e de quarta ordem (que devem atuar no amortecimento das oscilações numéricas da solução).

Esta estruturação foi concebida com o intuito de criar um esquema de alta precisão em regiões suaves e, ao mesmo tempo, capaz de captar ondas de choque e descontinuidades de contado com boa resolução. Entretanto, em escoamentos com presença de atrito (camada limite, cálculo do coeficiente de arrasto), a dissipação artificial pode ser uma importante fonte de erro numérico. Este fato levou alguns pesquisadores a propor mecanismos para redução deste erro, ou seja, mecanismos de dosagem da dissipação baseados no número de Mach local e na vorticidade [16], já que a dissipação escalar é uma técnica de fácil implementação e de baixo custo.

A dissipação escalar utilizada é baseada no modelo introduzido em [26]. O operador dissipação L_D é definido como:

$$L_D W_j = \delta^2 W_j - \delta^4 W_j,$$

onde

$$\begin{aligned} \delta^2 W_j &= \nabla \left[(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}) \Delta W_j \right], \\ \delta^4 W_j &= \nabla \left[(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(4)}) \Delta \nabla \Delta W_j \right], \end{aligned}$$

que, portanto, também pode ser escrita como

$$L_D W_j = d_{j+\frac{1}{2}} - d_{j-\frac{1}{2}},$$

onde o índice j indica um nó da malha e os operadores ∇ e Δ representam diferenças tais que $\nabla W_j = W_j - W_{j-1}$ e $\Delta W_j = W_{j+1} - W_j$.

O fator de escala anisotrópico, $\lambda_{j+\frac{1}{2}}$, é definido como

$$\lambda_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [(\bar{\lambda}_\xi)_j + (\bar{\lambda}_\xi)_{j+1}],$$

onde λ_ξ é o raio espectral da matriz jacobiana associada às equações de Euler. Em duas dimensões, com (ξ, η) correspondendo a coordenadas curvilineares generalizadas, o fator de escala geralmente é definido como

$$\begin{aligned} (\bar{\lambda}_\xi)_{j,k} &= \phi_{j,k}(r)(\lambda_\xi)_{j,k}, \\ \phi_{j,k}(r) &= 1 + r_{j,k}^\zeta \end{aligned}$$

e $r_{j,k} = \lambda_\eta/\lambda_\xi$ (onde λ_η e λ_ξ são os raios espectrais das matrizes jacobianas associadas às equações de Euler nas direções η e ξ , respectivamente). Usualmente tem-se $0 \leq \zeta \leq \frac{2}{3}$. Procura-se empregar valores de ζ mais próximos de $\frac{2}{3}$, especialmente onde há grandes diferenças entre $\Delta\xi$ e $\Delta\eta$, porque então menos dissipação é introduzida. Para o caso unidimensional $\phi_{j,k}(r) = 1$.

O fator de escala é escolhido de forma que seja possível dar aos termos dissipativos o seu peso adequado. Entretanto, ele nem sempre foi definido nos moldes acima. Nos primeiros modelos deste tipo de dissipação ele era isotrópico [24] e, em geral, satisfatório para escoamentos não viscosos, quando malhas típicas para este tipo de situação eram empregadas, isto é, quando a razão de aspecto ($\Delta\eta/\Delta\xi$) é $O(1)$. Em casos de malhas com razão de aspecto alta, como para escoamentos viscosos com alto número de Reynolds (algumas malhas têm razão de aspecto $O(10^3)$), a dissipação introduzida pode ser excessiva [53]. É por esta razão que atualmente o fator de escala é empregado na forma descrita anteriormente.

Os coeficientes $\epsilon^{(2)}$ e $\epsilon^{(4)}$ são escolhidos para colocar a quantidade suficiente de dissipação nos pontos em que ela é necessária. Eles usam a pressão como

sensor para detectar a presença de gradientes mais significativos e são definidos como

$$\begin{aligned}\epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)} &= k^{(2)} \max(\nu_{j-1}, \nu_j, \nu_{j+1}, \nu_{j+2}), \\ \nu_j &= \left| \frac{p_{j+1} - 2p_j + p_{j-1}}{p_{j+1} + 2p_j + p_{j-1}} \right|, \\ \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(4)} &= \max(0, k^{(4)} - \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}),\end{aligned}$$

onde valores característicos para $\epsilon^{(2)}$ e $\epsilon^{(4)}$ empregados por Swanson et al. em [52] são:

$$\begin{aligned}\frac{1}{4} &\leq k^{(2)} \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{64} &\leq k^{(4)} \leq \frac{1}{32}.\end{aligned}$$

Essas faixas de valores para os coeficientes $k^{(2)}$ e $k^{(4)}$ podem apresentar variações. Jameson, em um de seus primeiros trabalhos [24], sugere $k^{(2)} = 1$ e $k^{(4)} = 1/32$. Pulliam [43] diz que os valores mais indicados são $k^{(2)} = 1/4$ e $k^{(4)} = 1/100$. Para o tubo de choque, especificamente, Kroll e Rossow [32] apresentam resultados para $0,8 \leq k^{(2)} \leq 10$ com

$$\frac{1}{128} \leq k^{(4)} \leq \frac{1}{64}. \quad (3.46)$$

O sensor ν pode ser interpretado como um limitador, pois ele maximiza a contribuição da diferença de segunda ordem nos picos (variações de maior magnitude) e elimina a influência do termo de quarta ordem. Além disso, na presença de ondas de choque, a dissipação é de primeira ordem e o esquema torna-se um *upwind* de primeira ordem. Nas regiões suaves do escoamento a dissipação é de terceira ordem.

Assim, percebe-se a existência da ação de dois mecanismos de dissipação diferentes. Quem determina qual deles deve agir em cada região é o sensor de pressão. Para regiões suaves, ν é pequeno e o termo de dissipação consiste de uma diferença linear de quarta ordem (a palavra ordem, aqui, refere-se ao tipo de diferença empregada e não à dissipação, especificamente), que amortece as altas frequências (que não são amortecidas pelo esquema de diferenças centrais).

Isto é aconselhável para que o estado estacionário seja atingido com maior facilidade. Perto de gradientes significativos na pressão, ν torna-se grande e ativa os termos de dissipação de segunda ordem, simultaneamente reduzindo os termos de dissipação de quarta ordem. Isto acontece para que seja introduzida uma condição como a de entropia (conforme Swanson e Turkel em [53]), fazendo com que as relações de choque sejam corretamente satisfeitas e com que as oscilações perto das descontinuidades sejam reduzidas.

Existem alternativas para a escolha do sensor de pressão, pois deve-se tomar cuidado na escolha da variável na qual ele é baseado. Neste caso, o uso da pressão para identificar as descontinuidades não é casual; em particular, o tratamento numérico para ondas de choque introduz mais dissipação do que no caso de descontinuidades lineares, como as de contato. Em geral, se uma quantidade com a mesma dependência funcional que a entropia (isto é, p/ρ^γ) é escolhida, consegue-se melhor resolução na determinação de choques em escoamentos transônicos viscosos, por exemplo. Entretanto, esta mesma escolha pode causar efeito contrário para a tensão de cisalhamento na superfície, devido à variação significativa da variável escolhida na camada limite [53].

Os resultados obtidos com a implementação do modelo descrito acima são apresentados a seguir. Analisa-se o comportamento da solução em função da variação do parâmetro de dissipação $k^{(2)}$, tendo a malha considerada quinhentos pontos. Em cada um dos gráficos, linha cheia representa a solução exata, obtida conforme descrição no capítulo 2, e linha pontilhada representa a solução obtida numericamente.

Os resultados mostrados a seguir são, na verdade, uma comparação entre as soluções obtidas para alguns valores de $k^{(2)}$. Nada é mostrado a respeito do coeficiente $k^{(4)}$ porque nos diversos testes realizados, concluiu-se que se ele estiver dentro da faixa estabelecida (como (3.46)), ele praticamente não causa alterações na solução.

Nas figuras 3.5 a 3.7 observa-se que as oscilações próximas ao choque não são bem amortecidas. Com o coeficiente $k^{(2)}$ menor, a posição do choque obtido é mais próxima da solução exata do que para o maior valor de $k^{(2)}$. No entanto, como é de se esperar, os maiores valores de $k^{(2)}$ amortecem melhor as oscilações indesejadas.

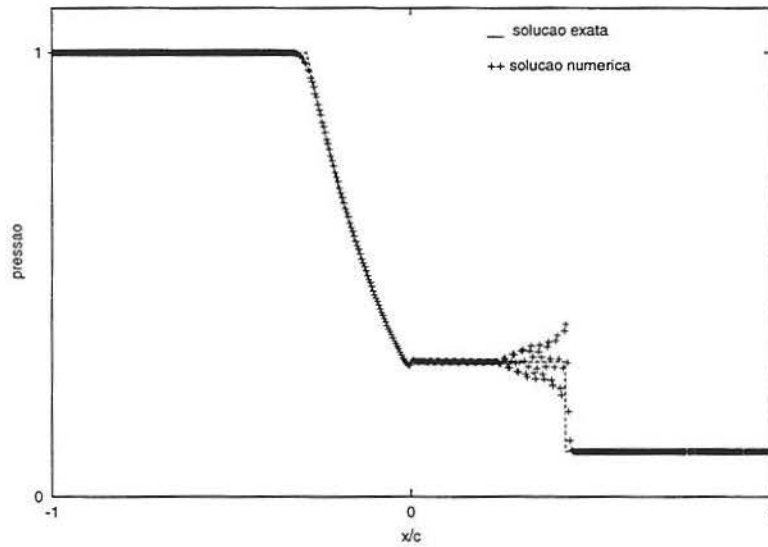


Fig. 3.5: Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 1$.

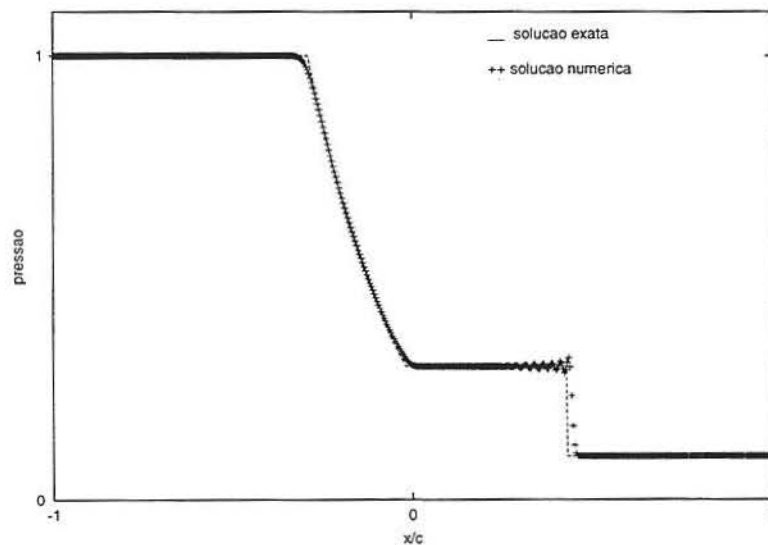


Fig. 3.6: Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 10$.

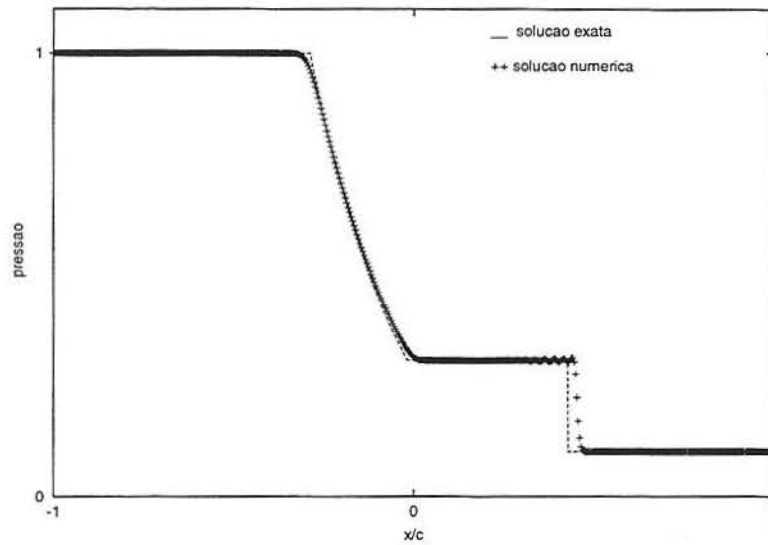


Fig. 3.7: Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 25$.

Nas figuras 3.8 a 3.10 observa-se também a dificuldade entre conciliar um bom resultado para a posição do choque e para o amortecimento das oscilações. Novamente, o resultado que parece ser mais satisfatório (um meio termo entre precisão na posição do choque e amortecimento das oscilações) está na figura 3.9, para $k^{(2)} = 10$, o que está de acordo com a faixa indicada na literatura por Kroll e Rossow [32] em volumes finitos.

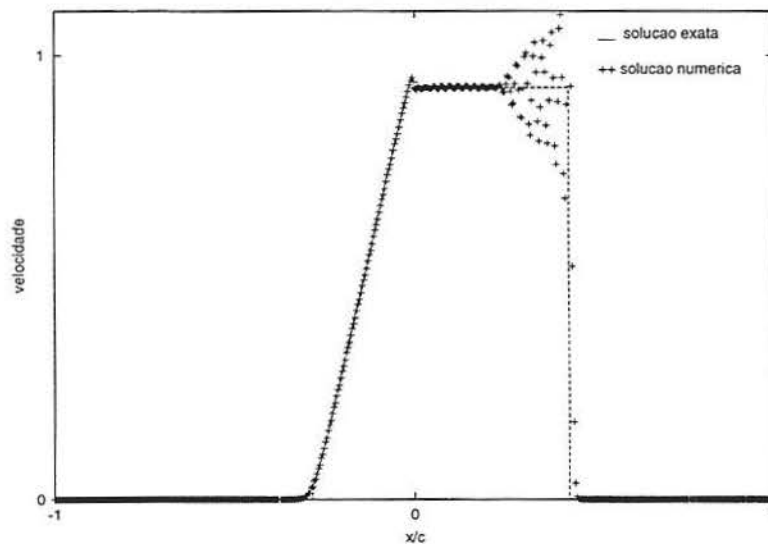


Fig. 3.8: Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 1$.

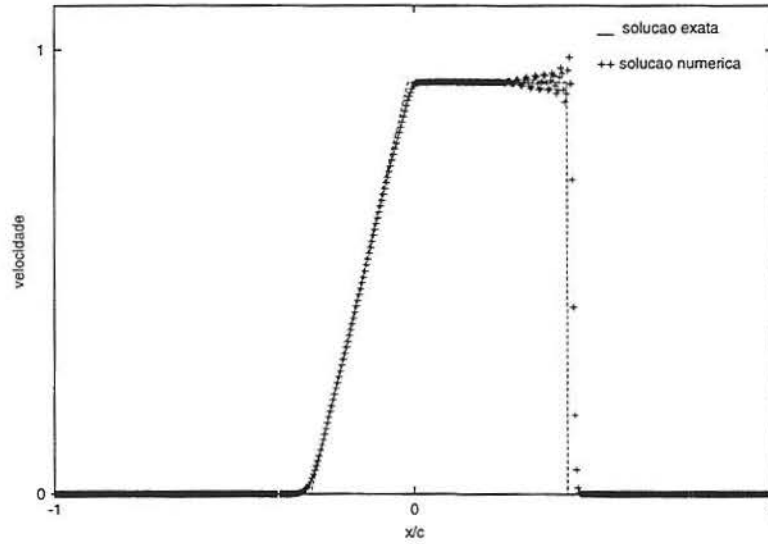


Fig. 3.9: Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 10$.

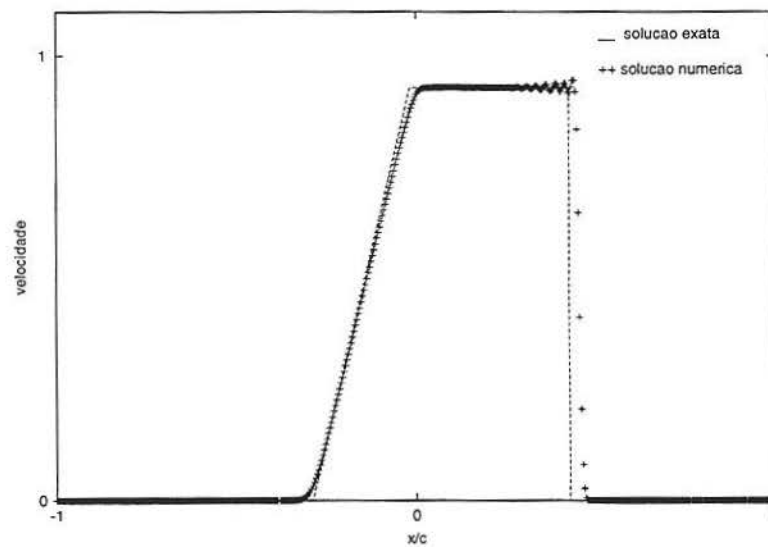


Fig. 3.10: Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 25$.

O comportamento observado nas figuras 3.11 a 3.13 tem as mesmas características já discutidas nas figuras 3.5 a 3.10, já que as três variáveis, p , u , ρ estão relacionadas entre si. No entanto, as figuras para a massa específica mostram a distinção entre as regiões 3 e 2, que é característica desta variável, pois é apenas ela que apresenta a descontinuidade de contato. Novamente, a tentativa de diminuí-las, aumentando $k^{(2)}$, descaracteriza (suaviza) a descontinuidade.

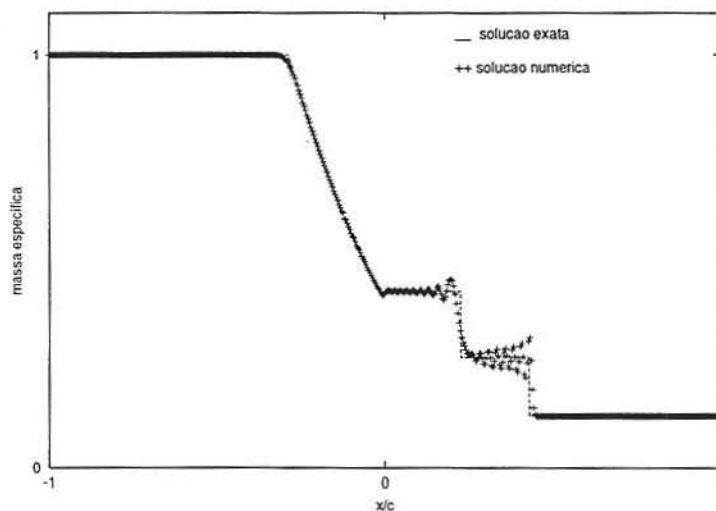


Fig. 3.11: Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 1$.

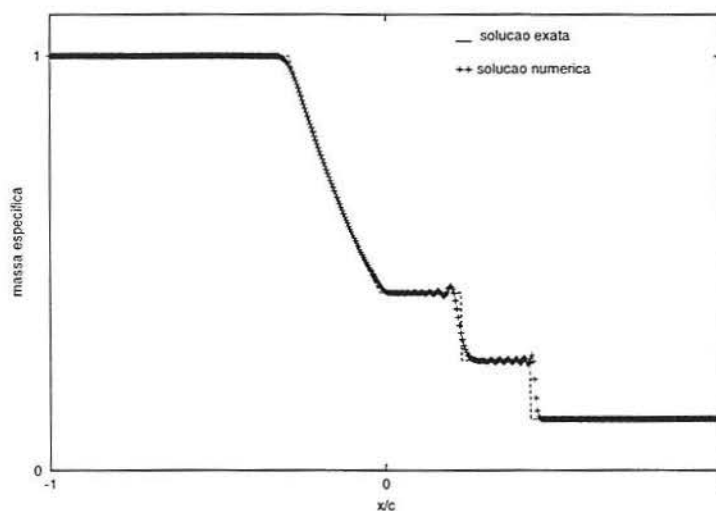


Fig. 3.12: Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 10$.

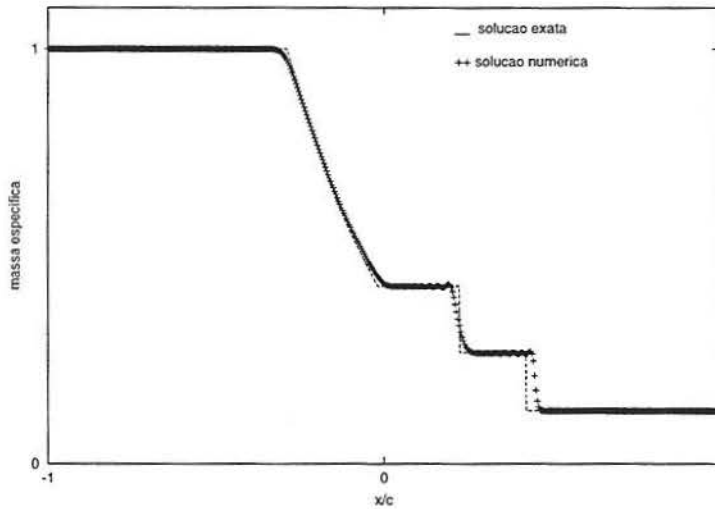


Fig. 3.13: Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 25$.

Foi também verificado que se o espaçamento h for diminuído, o choque é captado bem mais próximo à posição correta. Entretanto, as oscilações que aparecem antes do choque não são amortecidas devidamente, conforme figuras 3.14 a 3.16, nas quais o número de pontos é 1000. Com esta malha refinada é mais difícil apropriar a variação do coeficiente de dissipação $k^{(2)}$, pois embora nas regiões suaves a solução numérica fique mais próxima da exata, nas proximidades do choque as oscilações aumentam, tornando a solução numérica mais instável.

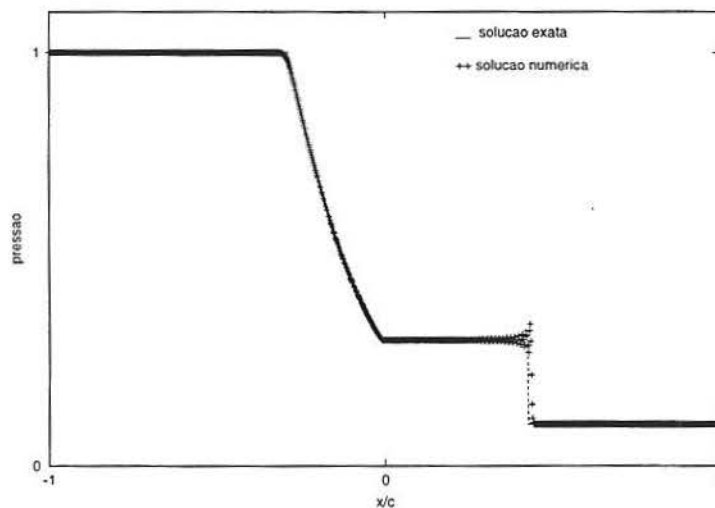


Fig. 3.14: Comparação das soluções exata e numérica para a pressão com $k^{(2)} = 10$ para a malha refinada.

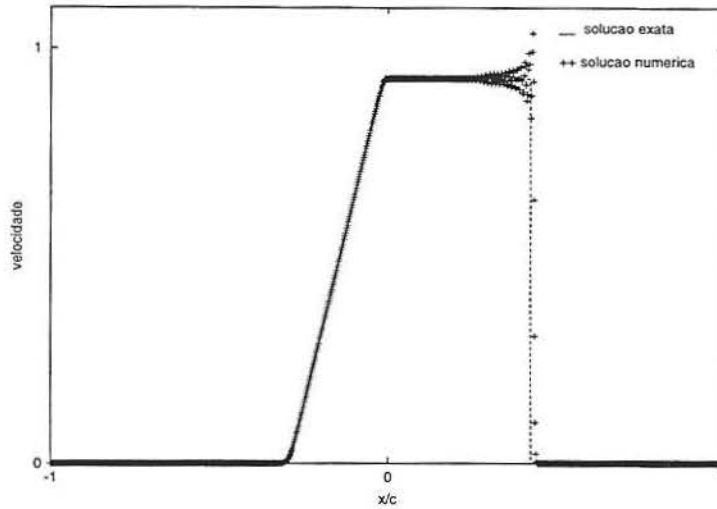


Fig. 3.15: Comparação das soluções exata e numérica para a velocidade com $k^{(2)} = 10$ para a malha refinada.

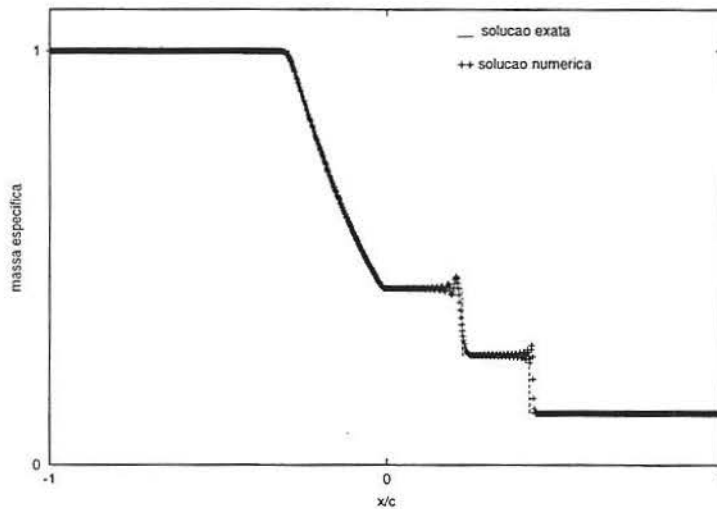


Fig. 3.16: Comparação das soluções exata e numérica para a massa específica com $k^{(2)} = 10$ para a malha refinada.

Estes resultados são obtidos com aproximações centrais e adição de fluxos dissipativos para os termos espaciais. O esquema de evolução temporal é o de Runge-Kutta proposto por Jameson et al. [26]. Como este ainda não foi aqui discutido mais atentamente, reserva-se as seções 3.4 e 4.1 para fazê-lo.

3.4 Esquema de evolução temporal

Conforme visto nas seções anteriores, depois da obtenção da malha, as equações diferenciais são transformadas em equações algébricas que envolvem os valores das incógnitas nos pontos da malha. Segundo Hirsch [22], a base de todos os métodos numéricos consiste na transformação das equações físicas em um sistema algébrico, linear ou não-linear. Uma estratégia para se obter aproximações em diferenças finitas é aproximar apenas as derivadas espaciais, sem aproximar a derivada temporal. Este processo converte a equação diferencial básica em um conjunto de equações diferenciais ordinárias acopladas. De uma forma geral, estas equações seriam expressas na forma

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{F}(\vec{u}, t) \quad (3.47)$$

e, depois, integradas no tempo através de um esquema de marcha para obter uma solução para um problema transiente.

Para o problema em questão, o sistema de equações de Euler, a semi-discretização (ou seja, discretização no tempo) da equação

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{Q}}{\partial x} = 0 \quad (3.48)$$

dá origem a um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem no tempo,

$$\frac{d}{dt} \vec{W} + \vec{P} = 0 \quad (3.49)$$

onde

$$\vec{P} = L_Q - L_D \quad (3.50)$$

e o vetor \vec{P} é chamado de resíduo do sistema (3.49), com L_Q e L_D as discretizações espaciais dos termos convectivos e dissipativos, respectivamente.

O sistema resultante (3.49) é resolvido através da utilização de um esquema de multi-estágios explícito de marcha no tempo do tipo Runge-Kutta, o qual tem diversas vantagens, entre elas [31]:

1. Propriedades bem investigadas na literatura de equações diferenciais ordinárias (livros como os de Butcher [4] e de Lambert [34]).
2. Os estágios extras podem ser usados para obter alta ordem de precisão temporal ou para estender a região de estabilidade.

Antes de estudar os esquemas do tipo Runge-Kutta, escolhe-se um problema modelo. Esta é uma situação mais simples do que aquela que se resolve de fato (solução das equações de Euler com os termos de dissipação artificial através do método simplificado de Runge-Kutta) e que se gostaria de analisar, mas contém propriedades semelhantes. Por esta razão toma-se uma determinada equação modelo [24],

$$u_t + u_x + \mu h^3 u_{xxxx} = 0, \quad (3.51)$$

e se estuda suas características de estabilidade, principalmente.

Esta é uma equação linear com uma variável dependente e μ uma constante. Para $\mu = 0$ ela descreve a propagação de uma perturbação com velocidade unitária sem distorção. O termo $\mu h^3 u_{xxxx}$ corresponde à dissipação. Aproximando as derivadas espaciais com diferenças centrais obtém-se um sistema de equações diferenciais de primeira ordem com relação ao tempo do tipo

$$\frac{du_j}{dt} + P_j = 0 \quad (3.52)$$

onde

$$k P_j = \frac{\lambda}{2} (u_{j+1} - u_{j-1}) + \lambda \mu (u_{j+2} - 4u_{j+1} + 6u_j - 4u_{j-1} + u_{j-2}) \quad (3.53)$$

e $\lambda = \frac{k}{h}$ é o número de Courant.

Introduzindo

$$\hat{u}(\xi) = \sum_j u_j e^{ij\xi},$$

onde u_j é definido em (3.52) e em (3.53), ou seja,

$$k \frac{du_j}{dt} + \frac{\lambda}{2} (u_{j+1} - u_{j-1}) + \lambda \mu (u_{j+2} - 4u_{j+1} + 6u_j - 4u_{j-1} + u_{j-2}) = 0, \quad (3.54)$$

obtem-se, multiplicando (3.54) por $e^{ij\xi}$ e somando em j ,

$$k \frac{d\hat{u}}{dt} + \frac{\lambda}{2} (e^{i\xi} - e^{-i\xi}) \hat{u} + \lambda\mu (e^{2i\xi} - 4e^{i\xi} + 6 - 4e^{-i\xi} + e^{-2i\xi}) \hat{u} = 0, \quad (3.55)$$

de onde se conclui que o símbolo de Fourier do operador da discretização espacial, $z = -kP$, é

$$z = -4\lambda\mu(\cos\xi - 1)^2 - \lambda i \operatorname{sen}\xi. \quad (3.56)$$

Portanto, o crescimento da amplitude do modo de Fourier é governado por

$$k \frac{d\hat{u}}{dt} = z\hat{u}. \quad (3.57)$$

O símbolo de Fourier varia com o ângulo de fase ξ , ou seja, $z = z(\xi)$. A parte imaginária corresponde à aproximação dos termos convectivos com diferenças centrais e a parte real, à aproximação dos termos dissipativos.

Um único passo de um dado esquema no tempo com múltiplos estágios para (3.57) resulta

$$\hat{u}^{n+1} = g(z) \hat{u}^n \quad (3.58)$$

onde $g(z)$ é o fator de amplificação do esquema, conforme definição 6, na secção 3.2. A região de estabilidade é definida por

$$H = \{z \in \mathbb{C} : |g(z)| \leq 1\} \quad (3.59)$$

onde \mathbb{C} denota o plano complexo.

A região de estabilidade não depende da equação diferencial; depende apenas do esquema temporal. Para que a integração da equação (3.57) satisfaça as condições necessárias para estabilidade, o símbolo de Fourier deve pertencer à região de estabilidade do esquema em questão para $-\pi \leq \xi \leq \pi$, conforme ilustração feita para o esquema *upwind* na figura 3.4.

A seguir são mostradas algumas fórmulas explícitas para o fator de amplificação $g(z)$ (também conhecido como função de estabilidade). Estas fórmulas

são específicas para cada esquema de integração temporal e dependem inclusive do número de estágios. Também serão mostrados gráficos do fator de amplificação, indicando a região que ele representa no plano complexo, além do seu módulo. Por isso, antes de dar seguimento, é interessante explicar a maneira com que serão oportunamente esboçados os gráficos de $g(z)$.

Os contornos da região de estabilidade (conforme definida acima - equação (3.59)) podem ser desenhados através do seguinte procedimento:

1. observa-se que, pelo princípio do módulo máximo, a fronteira de cada região é dada por $|g(z)| = 1$ (ver (3.71) para a forma de $g(z)$). Por isto, admite-se que $g(z) = e^{i\xi}$, onde $0 \leq \xi \leq 2\pi m$ e que $z = x + iy$ (m é o número de estágios).
2. resolve-se $e^{i\xi} = \sum_{r=0}^m \frac{z^r}{r!}$ através do método de Newton-Raphson para sistemas, conforme (para $m = 3$)

$$\begin{aligned}\psi(x, y) &= 1 + x + \frac{1}{2}(x^2 - y^2) + \frac{1}{6}(x^3 - 3xy^2) - \cos(\xi) \\ \varsigma(x, y) &= y + xy + \frac{1}{6}(3x^2y - y^3) - \sin(\xi)\end{aligned}\quad (3.60)$$

com determinante da matriz jacobiana

$$J = \psi_x \varsigma_y - \psi_y \varsigma_x \quad (3.61)$$

e esquema iterativo

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n - \frac{\psi \varsigma_y - \varsigma \psi_y}{J} \\ y_{n+1} &= y_n - \frac{\varsigma \psi_x - \psi \varsigma_x}{J}\end{aligned}\quad (3.62)$$

onde ξ é constante para cada iteração.

Assim, o símbolo de Fourier do operador central, equação (3.56), pode ser descrito calculando-se $x = x(\xi)$ e $y = y(\xi)$ para cada valor do ângulo de fase ξ . Logo, para obter o gráfico de $z = z(x, y)$, basta “plotar” x por y .

Outra ferramenta gráfica útil na análise da aproximação dos operadores é o módulo do fator de amplificação, que mostra a variação deste com o ângulo ξ . O objetivo é observar como ocorre o amortecimento das altas frequências do erro.

Agora, pode-se estudar os esquemas de Runge-Kutta. Primeiro discute-se os esquemas clássicos, ou seja, aqueles que surgiram na era pré-computador. Depois discute-se outros, que surgem das necessidades atuais de se obter soluções precisas com a maior economia computacional possível.

3.4.1 Métodos clássicos de Runge-Kutta

Seja o problema de valor inicial

$$\begin{aligned}y' &= f(t, y) \\ y(0) &= y_0\end{aligned}\tag{3.63}$$

Existem diversos métodos para obter a solução numérica deste problema. Um deles é o de Euler,

$$y^{n+1} - y^n = k f(t_n, y^n) = k f^n,\tag{3.64}$$

que é explícito, de um passo apenas e permite facilmente a mudança do passo k durante os cálculos. Entretanto, ele é de primeira ordem, o que torna, na prática, o seu uso restrito.

Esquemas lineares de passo múltiplo têm ordem mais alta, mas não têm a vantagem do passo único, embora mantenham a linearidade [34]. Pode-se obter ordem mais alta com perda de linearidade, mas mantendo a natureza do passo único. Ainda segundo Lambert, esta é a idéia dos métodos propostos por Runge e, subsequentemente, por Kutta e Heun. Assim, os métodos de Runge-Kutta têm as vantagens dos métodos de passo único, mas, devido à não linearidade, a análise do erro é consideravelmente mais difícil do que no caso dos métodos lineares de passo múltiplo.

O método clássico de r estágios de Runge-Kutta é definido, de forma geral, para um problema de valor inicial (3.63) como

$$\begin{aligned}
 y^{n+1} &= y^n + k \phi(t_n, y^n, k) \\
 \phi(t, y, k) &= \sum_{l=1}^r c_l k_l \\
 k_1 &= f(t, y) \\
 k_l &= f\left(t + k a_l, y + k \sum_{s=1}^{l-1} b_{ls} k_s\right), \quad l = 2, 3, \dots, r \\
 a_l &= \sum_{s=1}^{l-1} b_{ls}, \quad l = 2, 3, \dots, r.
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

Observa-se que um método de r estágios envolve r cálculos da função f por passo de tempo. Cada uma das funções $k_l(t, y, k)$, $l = 1, 2, \dots, r$ (lembrando que as funções k_l não devem ser confundidas com k , o passo de tempo) pode ser interpretada como uma aproximação da derivada $y'(t)$ e a função $\phi(t, y, k)$, como uma média ponderada destas aproximações. Em [4], são encontradas as maneiras adequadas para que os coeficientes de um determinado método sejam escolhidos.

Estes coeficientes podem ser determinados de tal maneira que ordem elevada seja obtida. Pode-se mostrar [4] que a relação entre o número de estágios r e a máxima ordem temporal possível é dada conforme a tabela 3.1.

Tabela 3.1: Relação entre o número de estágios e a máxima ordem possível

estágios	1	2	3	4	5	6	7	$r \geq 8$
ordem	1	2	3	4	4	5	6	$r \leq r - 2$

O método clássico de quarta ordem, dado pelos coeficientes

$$\begin{aligned}
 b_{21} = b_{32} &= \frac{1}{2}, \quad b_{31} = b_{41} = b_{42} = 0, \quad b_{43} = 1 \\
 c_1 = c_4 &= \frac{1}{6}, \quad c_2 = c_3 = \frac{1}{3},
 \end{aligned} \tag{3.66}$$

quando aplicado à equação (3.49), é escrito conforme

$$\begin{aligned}\vec{W}_j^{(0)} &= \vec{W}_j^{(n)} \\ \vec{W}_j^{(1)} &= \vec{W}_j^{(0)} - \frac{k}{2}\vec{P}_j^{(0)}\end{aligned}\quad (3.67)$$

$$\vec{W}_j^{(2)} = \vec{W}_j^{(0)} - \frac{k}{2}\vec{P}_j^{(1)} \quad (3.68)$$

$$\vec{W}_j^{(3)} = \vec{W}_j^{(0)} - k\vec{P}_j^{(2)} \quad (3.69)$$

$$\begin{aligned}\vec{W}_j^{(4)} &= \vec{W}_j^{(0)} - \frac{k}{6} \left[\vec{P}_j^{(0)} + 2\vec{P}_j^{(1)} + 2\vec{P}_j^{(2)} + \vec{P}_j^{(3)} \right] \\ \vec{W}_j^{(n+1)} &= \vec{W}_j^{(4)}\end{aligned}\quad (3.70)$$

onde $\vec{P}^{(k)}$ é dado pela equação (3.50).

Este esquema não é muito eficiente, pois requer o cálculo dos quatro fluxos convectivos $L_Q^{(l)}$ e dos quatro termos dissipativos $L_D^{(l)}$. Além disso, os termos intermediários $\vec{P}^{(l)}$ ($l = 1, 2, 3, 4$) precisam ser armazenados. Isto pode causar problemas de armazenamento em três dimensões [31].

Para esquemas de r estágios de ordem r ($r = 1, 2, 3, 4$, conforme tabela 3.1), o fator de amplificação é dado por

$$g(z) = \sum_{m=0}^r \frac{z^m}{m!}. \quad (3.71)$$

Os detalhes da obtenção desta fórmula podem ser encontrados em livros como os de Butcher [4] e de Lambert [34] e as regiões de estabilidade correspondentes são mostradas na figura 3.17.

Aplicando estes esquemas ao problema modelo sem dissipação ($\mu = 0$), o símbolo de Fourier é puramente imaginário (ver procedimento para obtenção da equação (3.56)), ou seja, ele está exatamente sobre o eixo das ordenadas. Logo, intersecção da região de estabilidade com este eixo determina o valor máximo do número de Courant. Assim, os métodos de Runge-Kutta de primeira e de segunda ordem não são estáveis, conforme figura 3.18 (já que nestes casos o símbolo de Fourier apenas tangencia a região de estabilidade e não pertence a ela). Entretanto, os de terceira e de quarta ordem o são até número de Courant igual a 1,72 e a

$2\sqrt{2}$, respectivamente (que são os valores onde o símbolo de Fourier tem intersecção com a região de estabilidade), conforme figura 3.19. Usando-se um Runge-Kutta explícito de r estágios, o valor computado em um ponto (x_j, t^n) da malha depende dos valores calculados em (x_{j+i}, t^{n-1}) para $-r \leq i \leq r$, o que permite a possibilidade de estabilidade com números de Courant maiores do que 1.

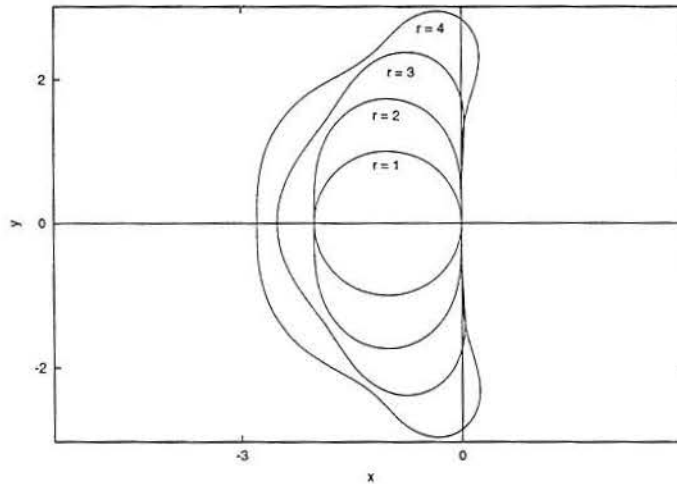


Fig. 3.17: Regiões de estabilidade para o método de Runge-Kutta, $r=1,2,3,4$

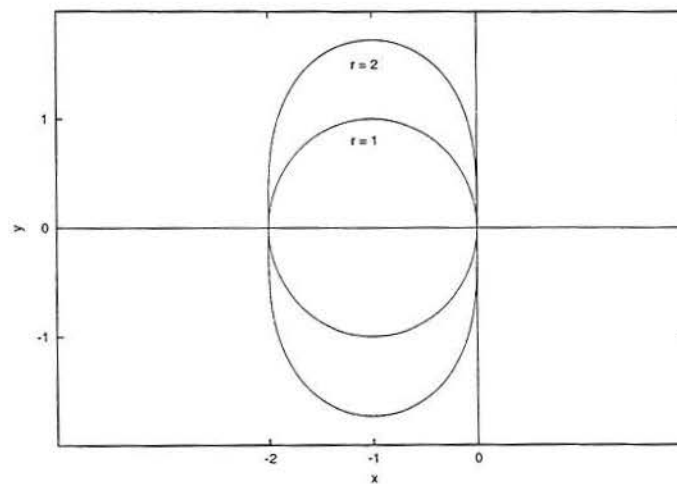


Fig. 3.18: Intersecção da região de estabilidade para o método de Runge-Kutta, $r=1,2$, com o símbolo de Fourier para $\mu = 0$

A região de estabilidade, especialmente para o esquema de quarta ordem, estende-se bastante para o lado esquerdo do eixo imaginário, o que é importante para a introdução de termos dissipativos (lembrando que para que o esquema seja

considerado estável o símbolo de Fourier deve pertencer à região de estabilidade quando $-\pi \leq \xi \leq \pi$).

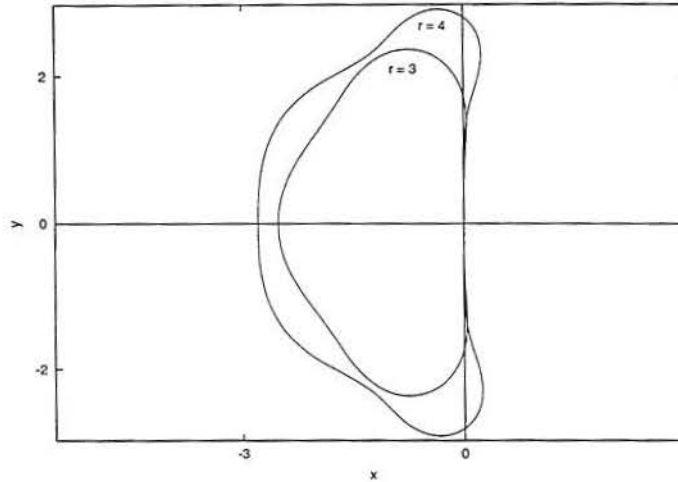


Fig. 3.19: Intersecção da região de estabilidade para o método de Runge-Kutta, $r=3,4$, com o símbolo de Fourier para $\mu = 0$

Agora, pode-se estudar os esquemas de multi-estágios simplificados empregados primeiramente por Jameson et al. [26] e que, subsequente, tornaram-se bastante populares, sendo empregados também por Kroll e Jain [31], Kroll e Radespiel [32] e De Bortoli [13], entre outros.

3.4.2 Esquemas simplificados de multi-estágios

Uma classe de esquemas simplificados empregada em [24], que requer capacidade de armazenamento computacional mínima quando aplicada ao sistema (3.49), é dado por

$$\begin{aligned}
 \vec{W}_j^{(0)} &= \vec{W}_j^{(n)} \\
 \vec{W}_j^{(1)} &= \vec{W}_j^{(0)} - \alpha_1 k \vec{P}_j^{(0)} \\
 &\vdots \\
 \vec{W}_j^{(r)} &= \vec{W}_j^{(0)} - \alpha_r k \vec{P}_j^{(r-1)} \\
 \vec{W}_j^{(n+1)} &= \vec{W}_j^{(r)}
 \end{aligned} \tag{3.72}$$

Como os fluxos convectivos e dissipativos são computados o mesmo número de vezes, estes são denominados (r, r) esquemas. Sua aplicação ao problema modelo resulta no seguinte fator de amplificação [32],

$$g(z) = 1 + \alpha_r z + \alpha_r \alpha_{r-1} z^2 + \cdots + \alpha_r \alpha_{r-1} \cdots \alpha_1 z^r. \quad (3.73)$$

Um esquema eficiente de quatro estágios é dado pelos coeficientes

$$\alpha_1 = \frac{1}{4}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{3}, \quad \alpha_3 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_4 = 1. \quad (3.74)$$

Ele é de segunda ordem para problemas não lineares e de quarta ordem para problemas lineares [31], correspondendo então ao método clássico de Runge-Kutta de quarta ordem. A intersecção da região de estabilidade com o eixo imaginário neste caso acontece em $2\sqrt{2}$ e, portanto, este é o máximo valor admissível do número de Courant.

Para que esquemas de multi-estágios com fator de amplificação da forma

$$g(z) = 1 + z + \gamma_2 z^2 + \cdots + \gamma_r z^r \quad (3.75)$$

sejam de segunda ordem a condição $\gamma_2 = \frac{1}{2}$ deve ser satisfeita [31]. Para um esquema de r -estágios, onde r é ímpar, o máximo intervalo possível γ_{imag} no eixo imaginário dentro da região de estabilidade é $r - 1$. Os coeficientes do fator de amplificação são listados na tabela 3.2.

Para que esquemas com o máximo número de Courant possível sejam construídos os coeficientes do esquema de multi-estágios devem ser determinados de tal maneira que os coeficientes do fator de amplificação correspondente tenham os valores dados na tabela acima. A comparação entre as funções de estabilidade (3.73) e (3.75) indica que [32]

$$\begin{aligned} \alpha_r &= 1 \\ \alpha_r \alpha_{r-1} &= \gamma_2 \\ &\vdots \\ \alpha_k &= \frac{\gamma_{r+1-k}}{\gamma_{r-k}} \quad k = 1, 2, \dots, r-2 \end{aligned} \quad (3.76)$$

Tabela 3.2: Relação entre os coeficientes γ e o número de estágios [31]

r	γ_{imag}	γ_3	γ_4	γ_5
3	2	$\frac{1}{4}$		
5	4	$\frac{3}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{128}$

Esquemas eficientes de três e de cinco estágios, respectivamente, são dados pelos coeficientes

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= \frac{1}{2}, & \alpha_2 &= \frac{1}{2}, & \alpha_3 &= 1 \\
 \alpha_1 &= \frac{1}{4}, & \alpha_2 &= \frac{1}{6}, & \alpha_3 &= \frac{3}{8}, & \alpha_4 &= \frac{1}{2}, & \alpha_5 &= 1
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

Esquemas com mais de cinco estágios parecem não ser muito eficientes, pois o trabalho computacional envolvido é muito grande.

A apresentação e discussão destes resultados sobre o esquema de passo de tempo utilizado, o método simplificado de Runge-Kutta, finaliza este capítulo sobre o procedimento de solução numérica. Conforme o que já foi observado na introdução, dedica-se o próximo capítulo a algumas considerações analíticas sobre os esquemas de Runge-Kutta e sobre a equação de Burgers.

4 CONSIDERAÇÕES ANALÍTICAS: TAXAS DE CONVERGÊNCIA E *SHADOWING* FINITO

Neste capítulo, são feitas algumas considerações analíticas: analisa-se semi-discretizações de problemas lineares evolutivos formulados em espaços de Banach e depois, independentemente, introduz-se a teoria de “shadowing” com algumas considerações sobre a equação de Burgers.

A primeira secção deste capítulo é dedicada à apresentação de algumas definições importantes da teoria de semigrupos e à sua aplicação na análise de convergência de um método de Runge-Kutta em dimensão infinita.

4.1 Estimativas a posteriori de erro para o método de Runge-Kutta em dimensão infinita

Para analisar a convergência de métodos análogos aos de Runge-Kutta empregado na obtenção dos resultados apresentados no capítulo 3, são necessários alguns conhecimentos da teoria de semigrupos.

4.1.1 Definições importantes

Definição 7 (Semigrupos de Operadores Lineares Limitados) *Seja X um espaço de Banach. Uma família $T(t)$, $0 \leq t < \infty$, de operadores lineares limitados de X em X é um semigrupo de operadores lineares limitados em X se (Pazy, [41])*

1. $T(0) = I$ (I é o operador identidade em X).
2. $T(t+s) = T(t)T(s)$ para todo $t, s \geq 0$ (propriedade de semigrupo).

Um semigrupo de operadores lineares limitados, $T(t)$, é uniformemente contínuo se

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} |T(t) - I| = 0. \quad (4.1)$$

Um operador linear L definido por

$$D(L) = \left\{ x \in X : \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{T(t)x - x}{t} \text{ existe} \right\} \quad (4.2)$$

e

$$Lx = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{T(t)x - x}{t} = \frac{d^+ T(t)x}{dt} \Big|_{t=0} \quad (4.3)$$

para $x \in D(L)$, é o gerador infinitesimal do semigrupo $T(t)$, onde $D(L)$ é o domínio de L .

Definição 8 (Semigrupo Fortemente Contínuo) Um semigrupo $T(t)$, $0 \leq t < \infty$, de operadores lineares limitados em X é um semigrupo fortemente contínuo se (Pazy, [41])

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} T(t)x = x \quad (4.4)$$

para todo $x \in X$.

Introduz-se agora uma classe importante de semigrupos, aqueles que podem, como função do parâmetro t , ser continuados analiticamente em um setor do plano complexo \mathbb{C} que contenha o eixo t positivo. O símbolo S_ω denotará o setor $S_\omega = \{t \in \mathbb{C} : |\arg t| < \omega, t \neq 0\}$.

Definição 9 (Semigrupo analítico) Um semigrupo fortemente contínuo $\{e^{-tL}\}$, é chamado de semigrupo analítico se as seguintes condições são satisfeitas (Ladas e Lakshmikantham [33]):

1. e^{-tL} pode ser continuado analiticamente como um semigrupo fortemente contínuo em um setor S_ω para algum $\omega \in (0, \frac{\pi}{2})$;

2. para cada $t \in S_\omega$ os operadores $L e^{-tL}$ e $\frac{de^{-tL}}{dt}$ são operadores limitados

e

$$\frac{de^{-tL}x}{dt} = -L e^{-tL}x, \quad (4.5)$$

onde $x \in X$;

3. para qualquer $0 < \varepsilon < \omega$ os operadores e^{-tL} e $t L e^{-tL}$ são uniformemente limitados no setor $S_{\omega-\varepsilon}$, isto é, existe uma constante $C = C(\varepsilon)$ tal que

$$|e^{-tL}| \leq C \quad (4.6)$$

e

$$|L e^{-tL}| \leq \frac{C}{|t|}, \quad (4.7)$$

onde $t \in S_{\omega-\varepsilon}$.

4.1.2 Análise da convergência de um método de Runge-Kutta simplificado

Importante: Nesta seção o operador $L(t)$ é o inverso do que era considerado na seção anterior, ou seja, ele é $-L(t)$.

Tendo em mente estas definições, analisa-se a convergência de um método de Runge-Kutta para a solução do problema de valor inicial

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= L(t)y \\ y(0) &= y_0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

em um intervalo de tempo finito $[0, T]$. Para isto observa-se a maneira com que os erros numéricos cometidos em cada passo se propagam ao longo de n passos.

Define-se o erro global, ϵ_n , no tempo $t = t_n$ como:

$$\epsilon_n = y(t_n) - \hat{y}(t_n),$$

onde $y(t_n)$ e $\hat{y}(t_n)$ são as soluções exata e aproximada, respectivamente, calculadas no tempo $t = t_n$. Observa-se ainda que quando $t = 0$, $y(0) = y_0 = \hat{y}(0)$, o que implica que $\epsilon_0 = 0$.

Para simplificar a notação, adota-se

$$\begin{aligned}t_n &= n\tau, \\L_n &= L(n\tau), \\y_n &= y(n\tau).\end{aligned}$$

A solução aproximada para (4.8) é calculada pelo método de Runge-Kutta de três estágios¹,

$$\hat{y}_{n+1} = (I + \alpha_3 \tau L_n + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_n^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_n^3) \hat{y}_n$$

com coeficientes $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}$ e $\alpha_3 = 1$.

A solução exata para (4.8) é construída com o método de Tanabe e Sobolevski [61, p.431], onde se considera que, para cada t , $L(t)$ é o gerador infinitesimal de um semigrupo analítico. Diz-se também que (4.8) é uma equação parabólica (ou seja, a informação em um determinado ponto P influencia toda a região a partir de P).

Empregando este método, a equação de evolução para a solução de (4.8) é dada por

$$y(t) = e^{(t-t_n)L_n} y_n + \int_{t_n}^t e^{(t-s)L(s)} R(s, t_n) y_n ds$$

onde

$$\begin{aligned}R(s, t_n) &= \sum_{m=1}^{\infty} R_m(s, t_n), \\R_1(s, t_n) &= (L(s) - L_n) e^{(s-t_n)L_n}, \\R_m(s, t_n) &= \int_{t_n}^s R_1(s, \sigma) R_{m-1}(\sigma, t_n) d\sigma \quad m = 2, 3, \dots\end{aligned}$$

com $t_n \leq s < t \leq t_{n+1}$. Agora algumas hipóteses são necessárias para que seja possível provar a convergência do método numérico.

¹Ver equação (3.73), lembrando que z é o símbolo de Fourier da discretização espacial e, neste caso, $z = -\tau L_n$.

Hipótese 1 O espectro $\sigma(L(t))$ do operador $L(t)$ é discreto, $\sigma(L(t)) = \{\lambda_j(t)\}_{j=1}^{\infty}$, e

$$|e^{\theta L(s)}| \leq C e^{-\operatorname{Re}(\lambda_1(s))\theta}$$

com

$$C e^{-\operatorname{Re}(\lambda_1(s))\frac{\tau}{2}} = \lambda(s) \leq \lambda < 1.$$

A partir de agora C será utilizada como uma constante genérica.

Hipótese 2 O domínio $D(L(t)) = D$ não depende de t , de modo que o operador $L(t)L(r)^{-1}$ é de variação limitada e existe uma constante positiva K tal que

$$|(L(s) - L(t))L(r)^{-1}| \leq K |s - t|, \quad \text{para } s, t, r \in [0, \tau].$$

Hipótese 3 (Estimativa a posteriori) Supõe-se que $\hat{y}_n \in D(L_n^3)$ e que

$$|L_n^3 \hat{y}_n| \leq M,$$

com M uma constante positiva que pode depender do intervalo de tempo (ver Ostermann e Palencia [40]).

Para demonstrar o principal resultado desta seção, o Teorema 3, é necessário mostrar antes que o resultado é válido para o primeiro nível de tempo, ou seja, quando $n = 1$ e $t = \tau$. Isto é feito através do lema a seguir.

Lema 1 Se $y_0 \in D(L_0^3)$, então $|\epsilon_1| \leq C\tau^2$, com $\epsilon_1 = y(\tau) - \hat{y}_1$ e C uma constante positiva que depende de M e de K .

Demonstração

Utilizando o método de Tanabe e Sobolevski [61, p.431], tem-se

$$y(\tau) = e^{\tau L_0} y_0 + \int_0^{\tau} e^{(\tau-s)L(s)} \sum_{m=1}^{\infty} R_m(s, 0) y_0 ds,$$

$$y(\tau) = e^{\tau L_0} y_0 + \int_0^{\tau} e^{(\tau-s)L(s)} R_1(s, 0) y_0 ds + \int_0^{\tau} e^{(\tau-s)L(s)} \sum_{m=2}^{\infty} R_m(s, 0) y_0 ds.$$

Por outro lado, o método de Runge-Kutta escrito para o problema modelo quando $t = \tau$ é:

$$\hat{y}_1 = (I + \alpha_3 \tau L_0 + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_0^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_0^3) y_0$$

Desta forma, o erro global para o primeiro passo de tempo, ϵ_1 , pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= e^{\tau L_0} y_0 - (I + \alpha_3 \tau L_0 + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_0^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_0^3) y_0 \\ &+ \int_0^\tau e^{(\tau-s)L(s)} R_1(s, 0) y_0 ds + \int_0^\tau e^{(\tau-s)L(s)} \sum_{m=2}^{\infty} R_m(s, 0) y_0 ds. \end{aligned}$$

Seja

$$\begin{aligned} I_1 &= e^{\tau L_0} y_0 - (I + \alpha_3 \tau L_0 + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_0^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_0^3) y_0, \\ I_2 &= \int_0^\tau e^{(\tau-s)L(s)} R_1(s, 0) y_0 ds, \\ I_3 &= \int_0^\tau e^{(\tau-s)L(s)} \sum_{m=2}^{\infty} R_m(s, 0) y_0 ds, \end{aligned}$$

de forma que

$$\epsilon_1 = I_1 + I_2 + I_3.$$

Para analisar I_1 faz-se uma expansão em termos das potências do gerador infinitesimal. Logo,

$$I_1 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\tau^k}{k!} L_0^k y_0 - (I + \alpha_3 \tau L_0 + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_0^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_0^3) y_0.$$

Definindo [5]

$$B_\tau^r = \frac{r!}{\tau^r} \left(e^{\tau L_0} - \sum_{k=0}^{r-1} \frac{\tau^k}{k!} L_0^k \right),$$

I_1 pode ser escrita como

$$I_1 = y_0 + L_0 y_0 \tau + B_\tau^2 y_0 \frac{\tau^2}{2} - (I + \alpha_3 \tau L_0 + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_0^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_0^3) y_0.$$

Entretanto, como para o método de três estágios considerado,

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad \alpha_3 = 1,$$

tem-se

$$I_1 = \frac{\tau^2}{2} B_\tau^2 y_0 - \frac{\tau^2}{2} L_0^2 y_0 - \frac{\tau^3}{4} L_0^3 y_0.$$

De acordo com [5, proposição 2.2.2], como $y_0 \in D(L_0^2)$, $s\text{-}\lim_{\tau \rightarrow 0^+} B_\tau^2 y_0 = L_0^2 y_0$, o que resulta

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} |B_\tau^2 y_0| = |L_0^2 y_0|.$$

Logo,

$$|B_\tau^2 y_0| \leq C |L_0^2 y_0|.$$

para τ suficientemente pequeno.

Além disto, de acordo com a hipótese *a posteriori*, sabe-se que

$$|L_0^{k-1} y_0| \leq C |L_0^k y_0|, \quad \text{para} \quad k = 1, 2, 3.$$

Desta forma,

$$|I_1| \leq C \tau^2. \tag{4.9}$$

Para I_2 é preciso multiplicar o integrando por $I = L_0^{-1} L_0$ e utilizar a propriedade de comutatividade do semigrupo com o seu gerador infinitesimal (já que $y_0 \in D(L_0)$). Desta forma,

$$I_2 = \int_0^\tau e^{(\tau-s)L(s)} (L(s) - L_0) L_0^{-1} e^{sL_0} L_0 y_0 ds. \tag{4.10}$$

Usando a hipótese 2 com $t = r = 0$, tem-se

$$|(L(s) - L_0) L_0^{-1}| \leq Ks. \tag{4.11}$$

Por outro lado, utilizando a *Hipótese 1* e a desigualdade (4.11), fica-se com

$$\begin{aligned} |I_2| &\leq K \lambda^2 \int_0^\tau s |L_0 y_0| ds, \\ &\leq K \lambda^2 \frac{\tau^2}{2} |L_0 y_0| \\ &\leq C \tau^2. \end{aligned} \tag{4.12}$$

Para I_3 escreve-se, usando novamente a hipótese 1,

$$|I_3| \leq \lambda \int_0^\tau \left| \sum_{m=2}^{\infty} R_m(s, 0) y_0 \right| ds. \tag{4.13}$$

Observando que

$$R_1(s, 0) = (L(s) - L_0) L_0^{-1} L_0 e^{sL_0},$$

e sabendo que $L_0 e^{sL_0} \leq C/s$ (conseqüência da definição 9), tem-se que $|R_1(s, 0)| \leq KC$. Ainda, aplicando o princípio de indução e lembrando que

$$R_m(s, 0) = \int_0^s R_1(s, \varsigma) R_{m-1}(\varsigma, 0) d\varsigma \quad m = 2, 3, \dots$$

conclui-se que

$$|R_m(s, 0)| \leq (KC)^m \frac{s^{m-1}}{(m-1)!}. \tag{4.14}$$

Com isto chega-se a

$$|I_3| \leq \lambda \int_0^\tau \sum_{m=2}^{\infty} (KC)^m \frac{s^{m-1}}{(m-1)!} |y_0| ds.$$

Agora,

$$\begin{aligned} |I_3| &\leq \lambda \sum_{m=2}^{\infty} (KC)^m \frac{\tau^m}{m!} |y_0| \\ &\leq \lambda (e^{KC\tau} - 1 - KC\tau) |y_0|, \\ &\leq C\tau^2. \end{aligned} \tag{4.15}$$

Juntando (4.9), (4.12) e (4.15), tem-se

$$\begin{aligned} |\epsilon_1| &\leq |I_1| + |I_2| + |I_3|, \\ \epsilon_1 &\leq C\tau^2, \end{aligned} \tag{4.16}$$

que é o resultado esperado.

Agora, pode-se passar ao enunciado e à demonstração do *Teorema 3*.

Teorema 3 *Considera-se que as hipóteses 1, 2 e 3 são válidas e que (4.8) é uma equação parabólica, com $L(t)$ o gerador infinitesimal de um semigrupo analítico. Então se $\tau \leq \tau^*$, onde*

$$\lambda(1 + KC\tau^* e^{KC\tau^*}) = 1,$$

o erro global satisfaz

$$|\epsilon_{n+1}| \leq C\tau^2$$

com C uma constante que depende de M (hipótese 3) e de K (hipótese 2) e λ como na hipótese 1.

Demonstração

Para a solução exata em $t = t_{n+1}$, tem-se

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= e^{(t_{n+1}-t_n)L_n} y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) y_n ds, \\ &= e^{\tau L_n} y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) y_n ds. \end{aligned}$$

Como

$$\epsilon_{n+1} = y_{n+1} - \hat{y}_{n+1},$$

tem-se

$$\begin{aligned} \epsilon_{n+1} &= e^{\tau L_n} y_n - (I + \alpha_3 \tau L_n + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_n^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_n^3) \hat{y}_n + \\ &\quad \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) y_n ds. \end{aligned}$$

Rearranjando os termos,

$$\begin{aligned}\epsilon_{n+1} = & e^{\tau L_n} \epsilon_n + e^{\tau L_n} \hat{y}_n - (I + \alpha_3 \tau L_n + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_n^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_n^3) \hat{y}_n + \\ & \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) (y_n - \hat{y}_n) ds + \\ & \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) \hat{y}_n ds.\end{aligned}$$

Para facilitar, escreve-se

$$\epsilon_{n+1} = T_1 + T_2 + T_3 + T_4,$$

onde

$$\begin{aligned}T_1 &= e^{\tau L_n} \epsilon_n, \\ T_2 &= e^{\tau L_n} \hat{y}_n - (I + \alpha_3 \tau L_n + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_n^2 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_n^3) \hat{y}_n \\ T_3 &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) (y_n - \hat{y}_n) ds, \\ T_4 &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R(s, t_n) \hat{y}_n ds.\end{aligned}$$

A estimativa para T_1 é obtida com o auxílio da *Hipótese 1*, ou seja,

$$|T_1| \leq \lambda |\epsilon_n|. \quad (4.17)$$

Para analisar T_2 , escreve-se

$$|T_2| \leq |e^{\tau L_n} \hat{y}_n - (I + \alpha_3 \tau L_n) \hat{y}_n| + \alpha_2 \alpha_3 \tau^2 L_n^2 \hat{y}_n + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \tau^3 L_n^3 \hat{y}_n. \quad (4.18)$$

Como $\alpha_3 = 1$, tem-se

$$|T_2| \leq |e^{\tau L_n} \hat{y}_n - (I + \tau L_n) \hat{y}_n| + C \tau^2 \quad (4.19)$$

para uma constante $C > 0$, pois, de acordo com a hipótese *a posteriori*, sabe-se que

$$|L_n^{k-1} \hat{y}_n| \leq C |L_n^k \hat{y}_n| \quad k = 1, 2, 3. \quad (4.20)$$

Ainda, conforme [5, p.95],

$$e^{\tau L_n} \hat{y}_n - (I + \tau L_n) \hat{y}_n = \frac{\tau^2}{2} B_\tau^2 \hat{y}_n, \quad (4.21)$$

onde

$$B_{\tau}^2 \hat{y}_n = \frac{2}{\tau^2} \int_0^{\tau} (\tau - u) T(u) L_n^2 \hat{y}_n du,$$

ou seja,

$$|B_{\tau}^2 \hat{y}_n| \leq \frac{2}{\tau^2} \int_0^{\tau} (\tau - u) |T(u)| |L_n^2 \hat{y}_n| du.$$

Usando novamente a *Hipótese 1*, tem-se

$$\begin{aligned} |B_{\tau}^2 \hat{y}_n| &\leq \lambda \frac{2}{\tau^2} |L_n^2 \hat{y}_n| \int_0^{\tau} (\tau - u) du, \\ &\leq C. \end{aligned}$$

Assim, observa-se que a equação (4.21) fica

$$|e^{\tau L_n} \hat{y}_n - (I + \tau L_n) \hat{y}_n| \leq C \frac{\tau^2}{2}.$$

Agora, a estimativa para (4.18) é

$$|T_2| \leq C \tau^2. \quad (4.22)$$

Para T_3 , é preciso antes estimar $R(s, t_n)$. Para tanto, emprega-se o mesmo procedimento utilizado na obtenção da equação (4.14), observando que, neste caso, chega-se a

$$|R_m(s, t_n)| \leq (K C)^m \frac{(s - t_n)^{m-1}}{(m-1)!}. \quad (4.23)$$

Usando a definição de $R(s, t_n)$, ou seja,

$$\begin{aligned} R(s, t_n) &= \sum_{m=1}^{\infty} R_m(s, t_n) \\ &\leq \sum_{m=1}^{\infty} (K C)^m \frac{(s - t_n)^{m-1}}{(m-1)!} \\ &\leq K C e^{K C (s - t_n)}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Agora, para T_3 , escreve-se

$$\begin{aligned}
 |T_3| &\leq \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} |R(s, t_n)| |\epsilon_n| ds, \\
 &\leq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \lambda K C e^{KC(s-t_n)} |\epsilon_n| ds, \\
 &\leq \lambda K C \tau e^{KC\tau} |\epsilon_n|.
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

No caso de T_4 é conveniente escrever

$$\begin{aligned}
 T_4 &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} R_1(s, t_n) \hat{y}_n ds \\
 &+ \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(t_{n+1}-s)L(s)} \sum_{m=2}^{\infty} R_m(s, t_n) \hat{y}_n ds,
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

para que se possa utilizar o mesmo procedimento adotado na demonstração do *Lema* 1 para obter (4.12) e (4.15), que, para T_4 , resulta

$$|T_4| \leq C\tau^2. \tag{4.27}$$

Reunindo (4.17), (4.22), (4.25) e (4.27), obtém-se para ϵ_{n+1} :

$$|\epsilon_{n+1}| \leq \lambda(1 + KC\tau e^{KC\tau}) |\epsilon_n| + C\tau^2.$$

Observando a seqüência dos erros, obtém-se, indutivamente, que

$$|\epsilon_{n+1}| \leq \lambda^n (1 + KC\tau e^{KC\tau})^n |\epsilon_1| + C\tau^2 \left[\frac{1 - \lambda^n (1 + KC\tau e^{KC\tau})^n}{1 - \lambda(1 + KC\tau e^{KC\tau})} \right]. \tag{4.28}$$

De acordo com o *Lema* 1, sabe-se que $|\epsilon_1| < C\tau^2$ e a expressão (4.28) pode ser escrita como

$$|\epsilon_{n+1}| \leq C\tau^2 \left[\frac{1 - \lambda^{n+1} (1 + KC\tau e^{KC\tau})^{n+1}}{1 - \lambda(1 + KC\tau e^{KC\tau})} \right],$$

ou seja,

$$|\epsilon_{n+1}| \leq C\tau^2 \sum_{i=0}^n \lambda^i (1 + KC\tau e^{KC\tau})^i.$$

Esta série converge se

$$\lambda(1 + K C \tau e^{K C \tau}) < 1,$$

ou seja, se $\tau \leq \tau^*$, onde

$$\lambda(1 + K C \tau^* e^{K C \tau^*}) = 1.$$

Logo, a série é convergente e, finalmente, segue-se o resultado,

$$|\epsilon_{n+1}| \leq C \tau^2,$$

para n suficientemente grande.

Agora, independentemente das estimativas para o problema evolutivo apresentado anteriormente, descreve-se a teoria de “shadowing”, bem como algumas estimativas obtidas no sentido de empregar esta teoria no estudo de convergência de equações diferenciais parciais.

4.2 O que é *shadowing*

A idéia principal envolvida na teoria de “shadowing” é a comparação da solução numérica com uma trajetória verdadeira que obedece uma condição inicial um pouco diferente. As estimativas existentes na literatura são, em sua maioria, válidas para curtos períodos de tempo, já que as constantes envolvidas podem crescer exponencialmente com o tamanho do intervalo de tempo. É neste contexto que a teoria de “shadowing” surge como uma alternativa para a obtenção de estimativas para tempo longo, principalmente quando há presença de uma estrutura hiperbólica, ou seja, quando as componentes estável e instável do problema podem ser separadas.

Entretanto, para entender o que é *shadowing*, é interessante examinar um exemplo simples primeiro. Considere o operador *shift*, que é uma aplicação não inversível do intervalo $[0, 1)$ nele mesmo. Ele é dado por

$$x_{k+1} = 2x_k \text{ mod}(1), \quad \text{para } k = 0, 1, \dots$$

e apresenta dependência sensível às condições iniciais. Com efeito, na medida em que, a cada iteração, as distâncias são multiplicadas por dois, dadas duas distâncias infinitesimalmente próximas, a diferença entre elas cresce geometricamente com a aplicação de sucessivas iterações. Dado um ponto inicial x_0 e a sua correspondente órbita exata (gerada pela equação acima), admite-se erros em cada passo dos cálculos que são efetuados (os quais não devem ser confundidos com os erros acumulados das iterações anteriores). Primeiro, o dado inicial pode não estar representado exatamente. Se y_0 é a aproximação de x_0 e ϵ_0 , o erro desta aproximação, então

$$x_0 = y_0 + \epsilon_0.$$

Baseado neste valor de y_0 , uma órbita y_0, y_1, y_2, \dots é calculada. Entretanto, esta não é uma órbita para y_0 , pois em cada iteração haverá um erro. Mais precisamente,

$$y_k = 2 y_{k-1} \text{ mod}(1) + \epsilon_k,$$

onde ϵ_k é o erro na k -ésima iteração. Daí, observa-se que qualquer erro introduzido pode aumentar a cada iteração. Depois de apenas alguns passos, não há absolutamente nenhuma correlação entre o que é calculado e qualquer uma das órbitas verdadeiras começadas em x_0 ou em y_0 . Mas ainda assim, é possível mostrar que existe alguma órbita exata iniciada em algum ponto z_0 , perto de x_0 e de y_0 . Esta situação é esboçada nas figuras 4.1 e 4.2 .

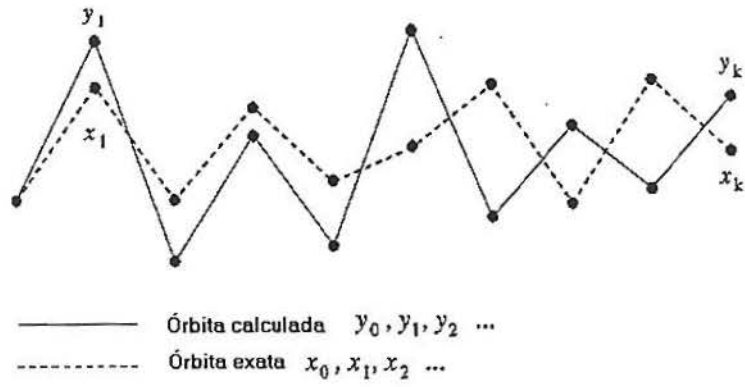
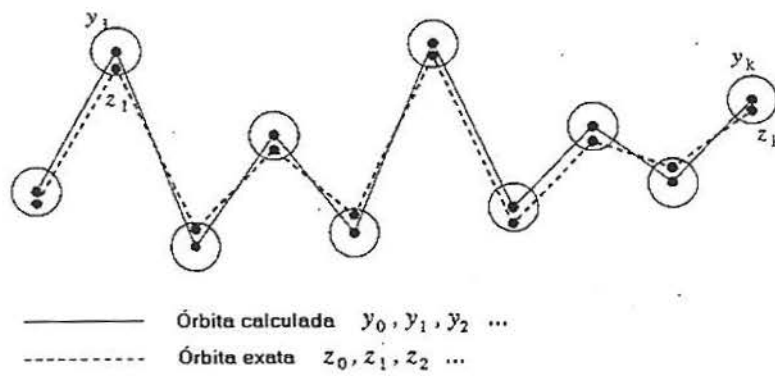
A única hipótese necessária para provar este fato e determinar o ponto inicial z_0 é que os erros sejam limitados por uma constante $\epsilon > 0$,

$$|\epsilon_k| \leq \epsilon \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

A conclusão é que, para qualquer iteração, a órbita exata gerada a partir de z_0 estará a uma distância ϵ da órbita computada. Na k -ésima iteração tem-se

$$|z_k - y_k| \leq \epsilon.$$

A demonstração para esta versão do lema de “shadowing” pode ser encontrada em [29].

Fig. 4.1: Órbitas para x_0 e y_0 [29]Fig. 4.2: Órbitas para y_0 e z_0 [29]

As idéias apresentadas anteriormente podem ser formalizadas na seguinte definição:

Definição 10 *Uma d -pseudotrajetória² é uma seqüência de pontos $\bar{x} = \{x_k \in X : k \in \mathbb{Z}\}$ ou $\bar{x} = \{x_k \in X : k \in \mathbb{Z}_+\}$ tal que*

$$\|\phi(x_k) - x_{k+1}\| \leq d.$$

Desta forma, diz-se que “shadowing” acontece para um determinado ponto x se as desigualdades

$$\|\phi^k(x) - x_k\| \leq \epsilon$$

são satisfeitas para uma pseudotrajetória $\bar{x} = \{x_k\}$. Isto significa que \bar{x} está próxima de uma trajetória real de ϕ .

Antes de entender como a idéia de “shadowing” é aplicada ao estudo de convergência, são feitas algumas considerações analíticas sobre a equação de Burgers através do método de Galerkin.

4.3 Algumas considerações analíticas sobre a equação de Burgers

Considere a equação de Burgers com $u \in \mathbb{R}^n$

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u + u \cdot \nabla u = 0 \quad , \quad x \in \Omega \quad t > 0 \quad (4.29)$$

$$u(0) = u_0 \quad t = 0$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0$$

²Em geral uma pseudotrajetória é considerada como um resultado da aplicação de um método numérico a um sistema dinâmico ϕ . Neste caso, o valor d mede os erros do método a cada passo e os erros de arredondamento.

É possível demonstrar [20] que para dados iniciais suficientemente regulares

$$\|\Delta^2 u\| \leq M \quad (4.30)$$

onde $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{L^2}$, $\|\cdot\|_p = \|\cdot\|_{L^p}$, $\|\cdot\|_\infty = \text{ess sup}_\Omega |\cdot|$ (norma do supremo essencial) e M é uma constante genérica que depende de ν e de Ω .

Alguns trabalhos na literatura, como os de Heywood and Rannacher [19], de Heywood and Xie [20] e de Constantin [10] mostram que esta equação possui soluções globais suaves, ou seja, soluções locais da equação de Burgers podem ser continuadas indefinidamente no tempo.

Também é observado em [19] que ambas as aproximações, Galerkin e Galerkin não linear, podem ser introduzidas exatamente para as equações de Navier-Stokes e as provas das estimativas relacionadas são exatamente como antes, exceto pelo fato que o operador de Dirichlet Δ para o Laplaciano se reduz ao operador de Stokes. Se $\Delta u|_{\partial\Omega} = 0$ como no caso do problema em questão, o erro será melhorado para λ_m^{-2} e $\lambda_m^{-\frac{5}{2}}$, respectivamente (onde λ_m é o m -ésimo autovalor de $-\Delta$). Sejam u_1, \dots, u_m as primeiras m autofunções de Δ (contando as multiplicidades em $L^2(\Omega)$) e P a projeção no subespaço V_m gerado por elas. Fixa-se $p = Pu$, $u \in H = L^2(\Omega)$ e $q = Qu = (I - P)u$.

A estimativa local para a equação de Burgers (4.29) é apresentada como uma proposição e, no decorrer da sua demonstração, são necessárias algumas desigualdades, como as que são listadas a seguir.

Desigualdade de Poincaré: Suponha Ω aberto limitado. Então existe uma constante c (que depende de Ω e de p) tal que

$$\|f\|_p \leq c \|\nabla f\|_p, \quad \forall f \in W_0^{1,p}(\Omega), \quad 1 \leq p < \infty.$$

Em particular, a expressão $\|\nabla \cdot\|_p$ é uma norma em $W_0^{1,p}(\Omega)$ equivalente à norma $\|\cdot\|_{1,p}$.

Desigualdade de Hölder generalizada: Sejam f_1, f_2, \dots, f_k funções $f_i \in L^{p_i}(\Omega)$, $1 \leq p_i \leq \infty$, $1 \leq i \leq k$ com $\frac{1}{p} = \frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} + \dots + \frac{1}{p_k} \leq 1$. Então, o produto $f = f_1 f_2 \dots f_k \in L^p(\Omega)$ e

$$\|f\|_p \leq \|f_1\|_{p_1} \|f_2\|_{p_2} \dots \|f_k\|_{p_k}.$$

Desigualdade de Young: $\forall a, b, \epsilon > 0, \forall p, 1 < p < \infty, q = \frac{p}{p-1}$

tem-se

$$ab \leq \frac{\epsilon}{p} a^p + \frac{1}{q \epsilon^{\frac{q}{p}}} b^q.$$

Além disto, $\|\nabla p\|, \|\nabla q\| \leq \|\nabla u\|, \|\Delta p\|, \|\Delta q\| \leq \|\Delta u\|$ e $\|\Delta^2 p\|, \|\Delta^2 q\| \leq \|\Delta^2 u\|$ desde que $p = Pu, q = Qu$ e $u \in D(\Delta)$.

Como, em geral, pode-se escrever [19]

$$\|q\| \leq \lambda_m^{-\alpha} \|\Delta^\alpha q\| \leq \lambda_m^{-\alpha} \|\Delta^\alpha u\| \quad \text{para todo } \alpha \geq 0,$$

daqui por diante serão empregadas as seguintes desigualdades:

$$\begin{aligned} \|\Delta^2 p\| &\leq \lambda_m \|\Delta p\| \leq \lambda_m^{\frac{3}{2}} \|\nabla p\| \leq \lambda_m^2 \|p\| \quad \forall p \in P L^2(\Omega), \\ \|q\| &\leq \lambda_m^{-\frac{1}{2}} \|\nabla q\| \leq \lambda_m^{-1} \|\Delta q\| \leq \lambda_m^{-2} \|\Delta^2 q\| \quad \forall q \in Q L^2(\Omega) \cap D(\Delta). \end{aligned}$$

bem como (caso $n = 3$) [19]

$$\begin{aligned} \|\nabla f\| &\leq c \|\Delta f\|, \\ \|f\|_6 &\leq c \|\nabla f\| \\ \|f\|_3 &\leq c \|f\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla f\|^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Proposição 1 (Estimativa local) *Suponha que (4.30) seja válida para a equação de Burgers (4.29). Então pode ser estabelecida uma estimativa de erro da forma*

$$\|p - \bar{p}\| \leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2}$$

onde \bar{p} é uma aproximação para p .

Demonstração:

A equação de Burgers é equivalente a [19]

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} - \nu \Delta p + P[(p+q) \cdot \nabla (p+q)] = 0 \\ \frac{\partial q}{\partial t} - \nu \Delta q + Q[(p+q) \cdot \nabla (p+q)] = 0 \end{cases} \quad (4.31)$$

e as aproximações simples de Galerkin \bar{p} são dadas pela solução do sistema de aproximação:

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \nu \Delta \bar{p} + P[\bar{p} \cdot \nabla \bar{p}] = 0 \\ \bar{p}(0) = p(0) \end{cases} \quad (4.32)$$

Fazendo $w = \bar{p} - p$, a equação (4.31) fica

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \frac{\partial w}{\partial t} - \nu \Delta \bar{p} + \nu \Delta w + P[(\bar{p} - w + q) \cdot \nabla (\bar{p} - w + q)] = 0. \quad (4.33)$$

Subtraindo (4.33) de (4.32), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} - \nu \Delta w - P[w \cdot \nabla w] + P[\bar{p} \cdot \nabla w] - P[\bar{p} \cdot \nabla q] + P[w \cdot \nabla \bar{p}] \\ + P[w \cdot \nabla q] - P[q \cdot \nabla \bar{p}] + P[q \cdot \nabla w] - P[q \cdot \nabla q] = 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Como $u = p + q$, faz-se $\bar{p} = u - q + w$ em (4.34), de forma que

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} - \nu \Delta w - P[w \cdot \nabla w] + P[(u - q + w) \cdot \nabla w] \\ - P[(u - q + w) \cdot \nabla q] + P[w \cdot \nabla (u - q + w)] + P[w \cdot \nabla q] \\ - P[q \cdot \nabla (u - q + w)] + P[q \cdot \nabla w] - P[q \cdot \nabla q] = 0, \end{aligned} \quad (4.35)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} - \nu \Delta w + P[u \cdot \nabla w + w \cdot \nabla u] - P[q \cdot \nabla w + w \cdot \nabla q] \\ - P[q \cdot \nabla u + u \cdot \nabla q] + P[w \cdot \nabla w] - P[q \cdot \nabla q] = 0. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Tomando agora o produto interno de (4.36) com w , obtém-se

$$\begin{aligned}
 \left(w, \frac{dw}{dt} \right) - \nu (w, \Delta w) &= - (w, u \cdot \nabla w + w \cdot \nabla u) \\
 &+ (w, q \cdot \nabla w + w \cdot \nabla q) \\
 &+ (w, q \cdot \nabla u + u \cdot \nabla q) \\
 &- (w, w \cdot \nabla w) + (w, q \cdot \nabla q).
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

Calculando os dois primeiros termos do lado esquerdo de (4.37) separadamente, chega-se a

$$\begin{aligned}
 \left(w, \frac{dw}{dt} \right) &= \int w \frac{dw}{dt} d\Omega \\
 &= \frac{1}{2} \int \frac{dw^2}{dt} d\Omega \\
 &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int w^2 d\Omega \\
 &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w\|^2
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

e, via integração por partes,

$$\begin{aligned}
 (w, \Delta w) &= \int w_i \partial_i \partial_i w_i d\Omega \\
 &= - \int \partial_i w_i \partial_i w_i d\Omega \quad \text{já que } w|_{\partial\Omega} = 0. \\
 &= - \int (\nabla w)^2 d\Omega \\
 &= - \|\nabla w\|^2
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

Substituindo (4.38) e (4.39) no lado esquerdo de (4.37), chega-se a

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w\|^2 + \nu \|\nabla w\|^2 &= - (w, u \cdot \nabla w + w \cdot \nabla u) + (w, q \cdot \nabla w + w \cdot \nabla q) \\
 &+ (w, q \cdot \nabla u + u \cdot \nabla q) - (w, w \cdot \nabla w) + (w, q \cdot \nabla q).
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Como

$$(w, u \cdot \nabla q) = (w, \nabla(u \cdot q)) - (w, q \cdot \nabla u)$$

a equação (4.40) fica

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w\|^2 + \nu \|\nabla w\|^2 &= -(w, u \cdot \nabla w + w \cdot \nabla u) + (w, q \cdot \nabla w + w \cdot \nabla q) \\ &+ (w, \nabla(u \cdot q)) - (w, w \cdot \nabla w) + (w, q \cdot \nabla q). \end{aligned} \quad (4.41)$$

Agora, faz-se, separadamente, as estimativas para cada termo do lado direito da equação (4.41). Como $(u, v + z) = (u, v) + (u, z)$ genericamente, escreve-se

$$A = -(w, u \cdot \nabla w)$$

$$B = -(w, w \cdot \nabla u)$$

$$C = (w, q \cdot \nabla w)$$

$$D = (w, w \cdot \nabla q)$$

$$E = (w, \nabla(u \cdot q))$$

$$F = -(w, w \cdot \nabla w)$$

$$G = (w, q \cdot \nabla q)$$

de forma que a equação (4.41) fica

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w\|^2 + \nu \|\nabla w\|^2 = A + B + C + D + E + F + G \quad (4.42)$$

Analisando o primeiro termo, A , da equação (4.42) tem-se

$$\begin{aligned} A = -(w, u \cdot \nabla w) &= - \int u_i \partial_i w_j w_j d\Omega \\ &\leq \left| - \int u_i \partial_i w_j w_j d\Omega \right| \\ &\leq \int |u| |\nabla w \cdot w| d\Omega \\ &\leq \|u\|_\infty \|w\| \|\nabla w\| \\ &\leq \epsilon \nu \|\nabla w\|^2 + \frac{c_\epsilon}{\nu} \|u\|_\infty^2 \|w\|^2 \end{aligned} \quad (4.43)$$

onde $c_\epsilon = c(\epsilon)$.

Os demais termos da equação (4.42) são estimados de forma semelhante, resultando:

$$\begin{aligned}
 B = -(w, w \cdot \nabla u) &\leq \|w\| \|w\|_4 \|\nabla u\|_4 \\
 &\leq c \|w\| \|\nabla w\| \|\Delta u\|, \\
 &\leq \epsilon \nu \|\nabla w\|^2 + \frac{c_\epsilon}{\nu} \|\Delta u\|^2 \|w\|^2
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

$$\begin{aligned}
 C = -(w, q \cdot \nabla w) &\leq \|q\|_6 \|w\|_3 \|\nabla w\| \\
 &\leq c \|\nabla q\| \|w\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla w\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla w\| \\
 &\leq c \lambda_m^{-\frac{3}{2}} \|\Delta^2 q\| \|\nabla w\|^2
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

$$\begin{aligned}
 D = (w, w \cdot \nabla q) &\leq \|w\|_6 \|w\|_3 \|\nabla q\| \\
 &\leq c \|\nabla w\| \|w\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla w\|^{\frac{1}{2}} \lambda_m^{-1} \|\Delta q\| \\
 &\leq c \lambda_m^{-\frac{3}{2}} \|\Delta^2 q\| \|\nabla w\|^2
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

$$\begin{aligned}
 E = (w, \nabla(u \cdot q)) &= -(\nabla \cdot w, (u \cdot q)) \\
 &\leq \|u\|_\infty \|q\| \|\nabla w\| \\
 &\leq \epsilon \nu \|\nabla w\|^2 + \frac{c_\epsilon}{\nu} \lambda_m^{-4} \|\Delta^2 q\|^2 \|u\|_\infty^2
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

$$\begin{aligned}
 F = -(w, w \cdot \nabla w) &\leq \|w\|_3 \|w\|_6 \|\nabla w\| \\
 &\leq c \|w\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla w\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla w\|^2 \\
 &\leq c \|\nabla w\|^3
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

$$\begin{aligned}
 G = (w, q \cdot \nabla q) &\leq \|w\|_6 \|q\|_3 \|\nabla q\| \\
 &\leq c \|\nabla w\| \|q\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla q\|^{\frac{1}{2}} \|\nabla q\| \\
 &\leq c \|\nabla w\| \lambda_m^{-\frac{3}{2}} \|\Delta q\|^2 \\
 &\leq \epsilon \nu \|\nabla w\|^2 + \frac{c_\epsilon}{\nu} \lambda_m^{-6} \|\Delta^2 q\|^4
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Como $\|\Delta q\| \leq \|\Delta u\|$ e $\|\Delta^2 q\| \leq \|\Delta^2 u\| \leq M$ (estimativas *a priori* - equação (4.30)), pode-se estimar os termos de (4.43) a (4.49).

Os termos

$$\frac{c_\epsilon}{\nu} \|u\|_\infty^2 \|w\|^2 \quad \text{e} \quad \frac{c_\epsilon}{\nu} \|\Delta u\|^2 \|w\|^2$$

presentes em (4.43) e em (4.44) causam crescimento exponencial na estimativa de erro se a solução u cresce muito.

Em (4.45) e (4.46), o termo

$$c \lambda_m^{-\frac{3}{2}} \|\Delta^2 q\| \|\nabla w\|^2$$

pode se desprezado, já que ele se torna muito pequeno quando $m \rightarrow \infty$.

De forma semelhante, em (4.49),

$$\frac{c_\epsilon}{\nu} \lambda_m^{-6} \|\Delta^2 q\|^4$$

também pode ser desprezado, pois ele fica pequeno quando comparado a

$$\frac{c_\epsilon}{\nu} \lambda_m^{-4} \|u\|_\infty^2 \|\Delta^2 q\|^2,$$

presente em (4.47).

Além disso, todos os termos do tipo $\epsilon \nu \|\nabla w\|^2$ podem ser absorvidos no lado esquerdo de (4.42).

Assim, pode-se obter como em [46] ou em [54], modificando um pouco a formulação em [19], uma estimativa da forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w\|^2 + \frac{\nu}{2} \|\nabla w\|^2 &\leq \alpha_1 \|w\|^2 + c \|\nabla w\|^3 + \alpha_2 \lambda_m^{-4}, & (4.50) \\ w(0) &= 0 \end{aligned}$$

onde α_1 e α_2 são constantes que dependem de c , ν , M .

Agora, para obter a estimativa desejada, para w , esboça-se informalmente a argumentação. Da teoria de equações diferenciais ordinárias, para cada m existe um intervalo de tempo $[0, \tau]$ no qual

$$\|\nabla w\| \leq \frac{\nu}{2c}. \quad (4.51)$$

Então o termo não linear em (4.50), em $[0, \tau]$, pode ser absorvido pelo lado esquerdo de (4.50) tal que

$$\frac{d}{dt} \|w\|^2 \leq 2\alpha_1 \|w\|^2 + 2\alpha_2 \lambda_m^{-4}. \quad (4.52)$$

Pela desigualdade de Gronwall [51] tem-se que

$$\|w\|^2 \leq \gamma \lambda_m^{-4}$$

com

$$\gamma = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} (e^{2\alpha_1 \tau} - 1).$$

Agora, escolhendo $m \geq m_*$ suficientemente grande tal que

$$\sqrt{\gamma} \lambda_m^{-\frac{3}{2}} \leq \frac{\nu}{2c}$$

e argumentando por contradição, chega-se à conclusão que (4.51) continua válida para $[0, T]$, com $T \leq \tau$.

Segue-se então que

$$\|w\| \leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2} \quad (4.53)$$

que é, de fato, o resultado previsto por Heywood e Rannacher [19], já que a equação de Burgers possui soluções globais suaves, o que foi demonstrado por Heywood e Xie [20] via um princípio de máximo. \square

4.4 *Shadowing* finito para a equação de Burgers

Nos últimos anos o impacto da teoria de sistemas dinâmicos em análise numérica tem sido considerável, como pode ser visto no trabalho de Pilyugin [42] e também pelo livro de Stuart e Humphreys [51]. Chow and Palmer em [7] concentram-se em estimativas de erro para tempo finito que podem ser consideradas apropriadas para simulações numéricas.

Para τ e m como na secção anterior, introduz-se as aplicações Φ (solução exata) e ϕ (solução numérica):

$$\Phi(p_n) = p_{n+1} = p((n+1)\tau)$$

onde $\phi(\bar{p})$ é a solução de (4.32) com $\bar{p}(0) = p$ calculada no tempo τ .

Desta forma, o que foi mostrado acima é equivalente a

$$\|\Phi(\bar{p}_n) - \bar{p}_{n+1}\| \leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2} \quad (4.54)$$

$$\|\phi(p_n) - p_{n+1}\| \leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2}$$

e o que se quer mostrar é que existe um $\bar{p} \neq p(0)$ tal que $\|\phi^{(n)}(\bar{p}) - p_n\|$ é pequeno.

Supõe-se que podem ser estabelecidos limites

$$\|\Delta^2 \phi\| \leq M \quad \text{conforme (4.30)} \quad (4.55)$$

de onde também se observa que

$$\|\Delta^{-\frac{1}{2}} \phi \cdot \nabla\| \leq c \|\nabla \phi\|, \quad (4.56)$$

uma estimativa padrão de operadores singulares [38], assim como

$$\|\Delta^{\frac{1}{2}} e^{\nu \Delta \theta}\| \leq c \theta^{-\frac{1}{2}} e^{-\delta \theta}, \quad (4.57)$$

um resultado de interpolação ou de um cálculo espectral [61], [41], onde θ e δ são constantes positivas.

Genericamente considera-se

$$u_{n+1} - (D_{p_n} \phi) u_n = h_n, \quad 0 \leq n \leq N-1$$

com solução

$$\begin{aligned} u_1 &= h_0 + (D_{p_0} \phi) u_0 \\ &\vdots \\ u_{N+1} &= (D_{p_N} \phi \dots D_{p_0} \phi) u_0 + \sum_{k=1}^N (D_{p_N} \phi \dots D_{p_k} \phi) h_{k-1} + h_N \end{aligned} \quad (4.58)$$

Como ϕ é solução da equação diferencial (4.32), esta aplicação satisfaz

$$\phi(\tau)(p) = e^{\nu \Delta \tau} p - \int_0^\tau e^{\nu \Delta(\tau-s)} (P \phi \cdot \nabla \phi)(s) ds,$$

da mesma forma que as derivadas de Fréchet $D_p \phi$ satisfazem a equação evolutiva

$$D_p \phi = e^{\nu \Delta \tau} - \int_0^\tau e^{\nu \Delta(\tau-s)} P [D_p (\phi \cdot \nabla \phi)](s) ds \quad (4.59)$$

Antes de prosseguir são estabelecidos dois lemas técnicos.

Lema 2 *Assuma que a aplicação ϕ satisfaça (4.55) tal que (4.56) e (4.57) são ambas válidas. Se a condição $c(\tau + \sqrt{\tau}) < \frac{1}{2}$ for satisfeita, pode ser estabelecido que*

$$\|D_{p_n}(\phi)(\tau)\| \leq (1 + c_n \sqrt{\tau}) e^{-\delta \tau},$$

com a constante c_n identificando explicitamente a dependência de n .

Demonstração:

Para estimar $\|D_{p_n} \phi\|$, fixa-se

$$w(t) = \max_{0 \leq s \leq t} \|(D_{p_n} \phi)(s)\| e^{\delta s}.$$

e $t = \tau$ tal que $w(\tau) = \|(D_{p_n} \phi)(\tau)\| e^{\delta \tau}$.

Agora, pode-se estimar $w(\tau)$ empregando as desigualdades (4.56) e (4.57), de forma que

$$\begin{aligned} w(\tau) &\leq e^{\delta \tau} \left\{ \|e^{\nu \Delta \tau}\| + \int_0^\tau \|e^{\nu \Delta(\tau-s)} [D_{p_n} (\phi \cdot \nabla \phi)(s)]\| ds \right\} \\ &\leq e^{\delta \tau} \left\{ e^{-\delta \tau} + \int_0^\tau \|\Delta^{\frac{1}{2}} e^{\nu \Delta(\tau-s)} \Delta^{-\frac{1}{2}} D_{p_n} (\phi \cdot \nabla \phi)(s)\| ds \right\} \\ &\leq 1 + c e^{\delta \tau} \int_0^\tau (\tau - s)^{-\frac{1}{2}} e^{-\delta(\tau-s)} \|(D_{p_n} \phi)(s)\| ds \\ &\leq 1 + c \sqrt{\tau} w(\tau). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Conseqüentemente,

$$w(\tau) \leq \frac{1}{1 - c\sqrt{\tau}} \quad (4.61)$$

e se a condição $c(\tau + \sqrt{\tau}) < \frac{1}{2}$ é satisfeita, pode ser estabelecido que

$$w(\tau) \leq 1 + c\sqrt{\tau}.$$

De fato, tem-se

$$\|D_{p_n}(\phi)(\tau)\| = w(\tau) e^{-\delta\tau} \leq (1 + c_n\sqrt{\tau}) e^{-\delta\tau}. \quad (4.62)$$

com $w(\tau) \leq 1 + c_n\sqrt{\tau}$ identificando explicitamente a dependência de n . \square

Deve ser observado aqui que, como a constante c vem sendo empregada genericamente, a sua dependência de n será explicitada apenas quando necessário.

Lema 3 *Se o Lema 2 vale, então a derivada de segunda ordem de Fréchet de ϕ pode ser estimada como*

$$\|D_{p_n}^2 \phi\| \leq c\sqrt{\tau}.$$

Demonstração:

Para estimar a derivada de segunda ordem de Fréchet de ϕ é preciso voltar mais uma vez a (4.59). Primeiro calcula-se $\nabla D_{p_n} \phi$.

$$\nabla D_{p_n} \phi = \nabla e^{\nu \Delta \tau} - \int_0^\tau \nabla e^{\nu \Delta(\tau-s)} P(D_{p_n} \phi \cdot \nabla \phi + \phi \cdot \nabla D_{p_n} \phi) ds.$$

Fixa-se $V(t) = \max_{0 \leq s \leq t} \|\nabla D_{p_n} \phi(s)\|$. Então escolhendo novamente o valor de τ e usando o Lema 2, observa-se que

$$\begin{aligned} V(\tau) &\leq c\tau^{-\frac{1}{2}}e^{-\delta\tau} + c \int_0^\tau e^{-\delta(\tau-s)}(\tau-s)^{-\frac{1}{2}} \|(D_{p_n} \phi)(s)\| ds \\ &\quad + c \int_0^\tau e^{-\delta(\tau-s)}(\tau-s)^{-\frac{1}{2}} \|\nabla D_{p_n} \phi(s)\| ds \\ &\leq c\tau^{-\frac{1}{2}}e^{-\delta\tau} + c \int_0^\tau (\tau-s)^{-\frac{1}{2}}(1+c\sqrt{\tau}) ds \\ &\quad + c \int_0^\tau (\tau-s)^{-\frac{1}{2}} V(s) ds \\ &\leq c\tau^{-\frac{1}{2}}e^{-\delta\tau} + c\sqrt{\tau} V(\tau) + c\tau + c\sqrt{\tau}. \end{aligned}$$

Segue-se que

$$\begin{aligned} V(\tau) &\leq c(1 + o(\sqrt{\tau})) \{ \tau^{-\frac{1}{2}} e^{-\delta\tau} + \tau + \sqrt{\tau} \} \\ &\leq c\tau^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Voltando à equação (4.59) percebe-se que

$$\begin{aligned} D_{p_n}^2 \phi &= -2 \int_0^\tau e^{\nu\Delta(\tau-s)} P_m(D_{p_n}\phi \cdot \nabla D_{p_n}\phi) ds \\ &\quad - \int_0^\tau e^{\nu\Delta(\tau-s)} (P(D_{p_n}^2\phi \cdot \nabla\phi) + P(\phi \cdot \nabla D_{p_n}^2\phi)) ds. \end{aligned}$$

Portanto, pode-se escolher τ , usar o Lema 2 e estimar como antes

$$\begin{aligned} \|D_{p_n}^2 \phi\| &\leq 2c \int_0^\tau (1 + c_n\sqrt{s}) s^{-\frac{1}{2}} ds \\ &\quad + c \int_0^\tau \|D_{p_n}^2 \phi\| ds + c \int_0^\tau (\tau - s)^{-\frac{1}{2}} \|D_{p_n}^2 \phi\| ds, \end{aligned}$$

de onde se conclui que

$$\begin{aligned} \|D_{p_n}^2 \phi\| &\leq \frac{c\tau + c\sqrt{\tau}}{1 - c\tau - c\sqrt{\tau}} \\ &\leq c\sqrt{\tau}, \end{aligned}$$

o que completa o resultado. \square

Teorema 4 *Seja $\epsilon > 0$. Assuma que tanto o Lema 2 como o Lema 3 sejam válidos e que*

$$\|\phi(p_n) - p_{n+1}\| \leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2} \quad \text{para} \quad 0 \leq n \leq N - 1.$$

*Suponha também que uma hipótese da forma*³

$$\sum_{l=1}^{\lfloor \frac{\tau}{\epsilon} \rfloor} c_l \leq \frac{\alpha}{\sqrt{\tau}}, \quad 0 < \alpha \leq 1,$$

³Em determinados problemas onde existe boa separação do espectro e lenta variação da solução no tempo, é plausível que uma hipótese como esta acima possa ser assumida (ver trabalho de Ostermann e Palencia [40]). No entanto, mais experimentação numérica é necessária.

seja satisfeita. Então existe um ponto $\tilde{p} \in \mathbb{R}^m$ tal que se para m suficientemente grande,

$$\lambda_m^{-2} \leq \epsilon^2 \quad e \quad \tau = \frac{4ecc\epsilon}{\delta},$$

e para T suficientemente grande tal que

$$e^{\alpha - \delta T} \leq \frac{1}{2}$$

tem-se que

$$\|\phi^{(n)}(\tilde{p}) - p_n\| \leq \epsilon \quad \text{para} \quad 0 \leq n \leq N.$$

Demonstração:

Seguindo a discussão em [7] e em [42], toma-se

$$z_n = \phi^n(\tilde{p}) - p_n.$$

Então, tem-se que

$$\begin{aligned} z_{n+1} &= \phi(\phi^n(\tilde{p})) - p_{n+1} \\ &= \phi(z_n + p_n) - p_{n+1} \\ &= \phi(p_n) - p_{n+1} + (D_{p_n}(\phi))(z_n) + \phi(z_n + p_n) - \phi(p_n) - (D_{p_n}(\phi))(z_n) \end{aligned}$$

onde D_{p_n} é a derivada de Fréchet de ϕ em relação a p_n .

Fixando

$$g_n(z_n) = \{\phi(p_n) - p_{n+1}\} + \{\phi(z_n + p_n) - \phi(p_n) - (D_{p_n}(\phi))(z_n)\}$$

tal que

$$z_{n+1} = (D_{p_n}\phi)(z_n) + g_n(z_n), n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (4.63)$$

Seja $\bar{z} = (z_0, z_1, \dots, z_N) \in \mathbb{R}^{N+1}$ e $S = \{\bar{z} : |z_n| \leq \epsilon, 0 \leq n \leq N\}$, S um subconjunto convexo compacto de $\mathbb{R}^{m(N+1)}$.

Então, usando (4.58) e o lema 2, tem-se

$$\begin{aligned} \|u_{N+1}\| &\leq \prod_{l=0}^N (1 + c_l \sqrt{\tau}) e^{-\delta(N+1)\tau} \|u_0\| \\ &\quad + \sum_{k=1}^N \prod_{l=k}^N (1 + c_l \sqrt{\tau}) e^{-\delta(N-k+1)\tau} \|h_{k-1}\| + \|h_N\|. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Mas $(1 + c_l \sqrt{\tau}) \leq e^{c_l \sqrt{\tau}}$, ou seja,

$$\prod_{l=k}^N (1 + c_l \sqrt{\tau}) \leq \prod_{l=k}^N e^{c_l \sqrt{\tau}} = e^{(\sum_{l=k}^N c_l) \sqrt{\tau}}$$

de forma que

$$\begin{aligned} \|u_{N+1}\| &\leq e^{(\sum_{l=0}^N c_l) \sqrt{\tau} - \delta(N+1)\tau} \|u_0\| \\ &\quad + \sum_{k=1}^N e^{(\sum_{l=k}^N c_l) \sqrt{\tau} - \delta(N-k+1)\tau} \|h_{k-1}\| + \|h_N\|. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Define-se $T : S \leftrightarrow \mathbb{R}^{m(N+1)}$ como a seqüência obtida de (4.58) (propagação para frente) usando (z_0, \dots, z_N) :

$$T(\bar{z})_n = (D_{p_n} \phi)(z_n) + g_n(z_n).$$

Observando a construção de T , é fácil ver que a aplicação é contínua. Aplicando a estimativa (4.64) à seqüência $(\bar{z}_0, \dots, \bar{z}_N)$ em (4.58) obtém-se que

$$\begin{aligned} \|T(\bar{z})_0\| &= \|(D_{p_0} \phi)(z_0) + g_0(z_0)\| \\ \|T(\bar{z})_N\| &\leq \prod_{l=0}^N (1 + c_l \sqrt{\tau}) e^{-\delta(N+1)\tau} \|z_0\| \\ &\quad + \sum_{k=1}^N \prod_{l=k}^N (1 + c_l \sqrt{\tau}) e^{-\delta(N-k+1)\tau} \|g_{k-1}(z_{k-1})\| + \|g_N(z_N)\| \end{aligned}$$

e, novamente,

$$\begin{aligned} \|T(\bar{z})_N\| &\leq e^{(\sum_{l=0}^N c_l) \sqrt{\tau} - \delta(N+1)\tau} \|z_0\| \\ &\quad + \sum_{k=1}^N e^{(\sum_{l=k}^N c_l) \sqrt{\tau} - \delta(N-k+1)\tau} \|g_{k-1}(z_{k-1})\| + \|g_N(z_N)\|. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Agora observa-se que

$$\begin{aligned} \|g_n(\bar{z}_n)\| &\leq \|\phi(p_n) - p_{n+1}\| + \|\phi(z_n + p_n) - \phi(p_n) - (D_{p_n}\phi)(z_n)\| \\ &\leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2} + \|\phi(z_n + p_n) - \phi(p_n) - (D_{p_n}\phi)(z_n)\| \end{aligned} \quad (4.67)$$

Do teorema de Taylor [15],

$$\phi(z_n + p_n) - \phi(z_n) - (D_{p_n}\phi)(z_n) = \frac{1}{2} \int_0^1 (D_{p_n+\theta z_n}^2 \phi)(z_n^2) d\theta \quad (4.68)$$

e usando o lema 3 chega-se à conclusão que

$$\begin{aligned} \|\phi(z_n + p_n) - \phi(z_n) - (D_{p_n}\phi)(z_n)\| &\leq \frac{1}{2} \int_0^1 c\sqrt{\tau} \|z_n\|^2 d\theta \\ &\leq c \|z_n\|^2 \end{aligned} \quad (4.69)$$

De (4.67) e de (4.69) obtém-se que

$$\|g_n(z_n)\| \leq \sqrt{\gamma} \lambda_m^{-2} + c\epsilon^2,$$

já que, por hipótese, $\|z_n\| < \epsilon$. De (4.66) conclui-se que

$$\begin{aligned} \|T(\bar{z})_N\| &\leq e^{(\sum_{i=0}^N c_i)\sqrt{\tau}-\delta(N+1)\tau} \epsilon + \sum_{k=1}^{N+1} e^{(\sum_{i=k}^N c_i)\sqrt{\tau}-\delta(N-k+1)\tau} c (\lambda_m^{-2} + \epsilon^2) \\ &\leq e^{(\sum_{i=0}^N c_i)\sqrt{\tau}-\delta(N+1)\tau} \epsilon + c \frac{e^{(\sum_{i=1}^N c_i)\sqrt{\tau}}}{\delta\tau} (\lambda_m^{-2} + \epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.70)$$

De acordo com a hipótese,

$$\sum_{l=1}^{\lfloor \frac{T}{\tau} \rfloor} c_l \leq \frac{\alpha}{\sqrt{\tau}},$$

que conduz a

$$\|T(\bar{z})_N\| \leq e^{\alpha-\delta(N+1)\tau} \epsilon + c \frac{e^\alpha}{\delta\tau} (\lambda_m^{-2} + \epsilon^2).$$

Como $\tau = \frac{T}{N}$, a estimativa (4.71) fica

$$\|T(\bar{z})_N\| \leq e^{\alpha-\delta T} \epsilon + c \frac{e^\alpha}{\delta\tau} (\lambda_m^{-2} + \epsilon^2).$$

Novamente, de acordo com a hipótese tem-se que

$$\|T(\bar{z})_N\| \leq e^{\alpha-\delta T} \epsilon + \frac{2ce\epsilon^2}{\delta\tau}.$$

Escolhendo

$$\tau = \frac{4ce\epsilon}{\delta},$$

e T suficientemente grande tal que $e^{\alpha-\delta T} \leq \frac{1}{2}$, pode ser estabelecido que

$$\|T(\bar{z})_N\| \leq \epsilon.$$

Portanto $T : S \hookrightarrow S$ e o teorema do ponto fixo de Brouwer [17] assegura a existência de $\bar{z} \in S$ tal que $T(\bar{z}) = \bar{z}$. Examinando a construção, isto significa que quando se toma $\bar{p} = p_0 + z_0$, tem-se

$$\|\phi^n(\bar{p}) - p_n\| \leq \epsilon,$$

o que completa a demonstração. \square

Examina-se agora um exemplo,

$$\lambda_m^{-2} = \epsilon^2 \quad \text{ou} \quad \epsilon = \lambda_m^{-1}$$

Sabe-se que em três dimensões $\lambda_m \approx m^{\frac{2}{3}}$ [58], [37] (essencialmente um resultado de Weyl sobre distribuições assintóticas de autovalores) e então

$$\epsilon \approx m^{-\frac{2}{3}}.$$

Fixando, por exemplo,

$$\tau = \frac{4ce\epsilon}{\delta}$$

então

$$\tau \approx \epsilon \approx m^{-\frac{2}{3}} \quad \text{e} \quad m\tau \approx m^{\frac{1}{3}}$$

é um tipo de condição de *CFL* (relação entre as discretizações espacial e temporal).

Acredita-se que as estimativas obtidas aqui podem ser melhoradas se uma metodologia um pouco diferente for utilizada. Em geral, os trabalhos encontrados na literatura, como o de Ostermann e Palencia [40], assumem um tipo de condição de hiperbolicidade, ou seja, existência de clara separação entre as componentes estável e instável do problema (o que é crucial para qualquer análise baseada em “shadowing”). Não obstante somente soluções mais regulares de muitos dos problemas práticos, como as equações de Navier-Stokes, por exemplo, satisfazem esta condição. Conseqüentemente, ao invés de propagar a solução apenas para frente como é feito aqui, é necessário propagá-la para frente (sobre a direção estável) e para trás (sobre a direção instável).

Por esta razão, algum tipo de estimativa *a posteriori* precisa estar envolvida, mostrando a separação do espectro pelo menos para a solução calculada numericamente (já que muitas vezes não é possível assegurar que esta condição seja satisfeita para a solução analítica- estimativas *a priori*). De fato, estas estimativas *a posteriori* podem ser obtidas para algumas soluções da equação de Burgers (com condições de fronteira regulares, por exemplo, como é feito aqui), conforme estudos realizados computacionalmente e mostrados nas figuras 4.3 a 4.6, onde $L = \min_{Re(\lambda) > 0} - \max_{Re(\lambda) \leq 0}$ (diferença entre a parte real do menor autovalor positivo e a parte real do maior autovalor negativo).

Alguns testes foram efetuados para a equação de Burgers com diversas condições de contorno (figuras 4.3 e 4.4). A solução numérica foi obtida com o mesmo método simplificado de Runge-Kutta descrito no capítulo anterior. Através das rotinas SGEHRD e SHSEQR da biblioteca LAPACK e de um código implementado em FORTRAN 90, os autovalores para uma linearização da equação de Burgers foram calculados.

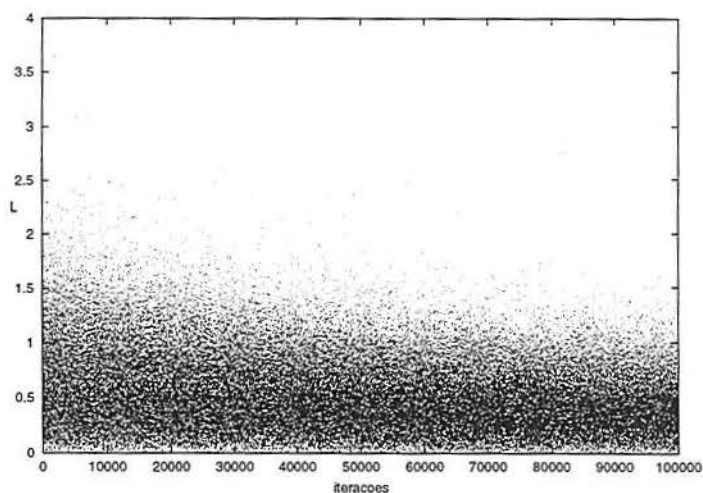


Fig. 4.3: Evolução de L para a linearização da equação de Burgers com condição inicial $u_0 = 1$ ao longo do tempo.

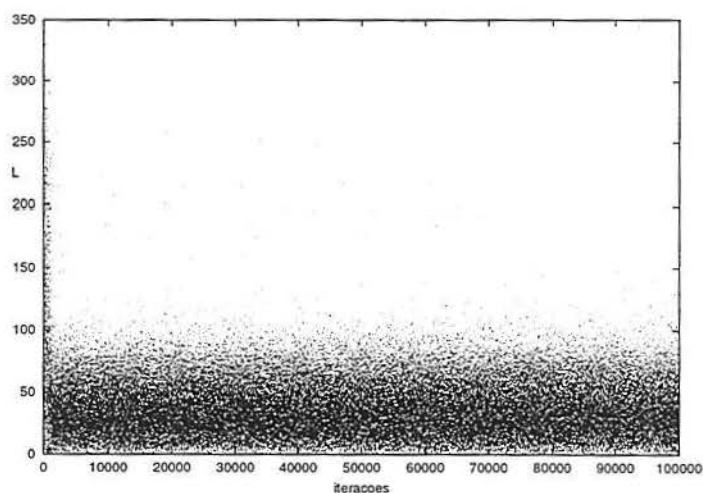


Fig. 4.4: Evolução de L para a linearização da equação de Burgers ao longo do tempo com condição inicial variável.

Os gráficos mostram que existe uma clara separação do espectro, já que os cálculos foram efetuados em dupla precisão. Neste caso, o ϵ da máquina é da ordem de 10^{-15} e para que um valor possa ser considerado diferente de zero, ele deve ser maior do que $\sqrt{\epsilon}$. De fato, pode ser observado (especialmente nas figuras 4.5 e 4.6) que esta condição é satisfeita para os testes realizados.

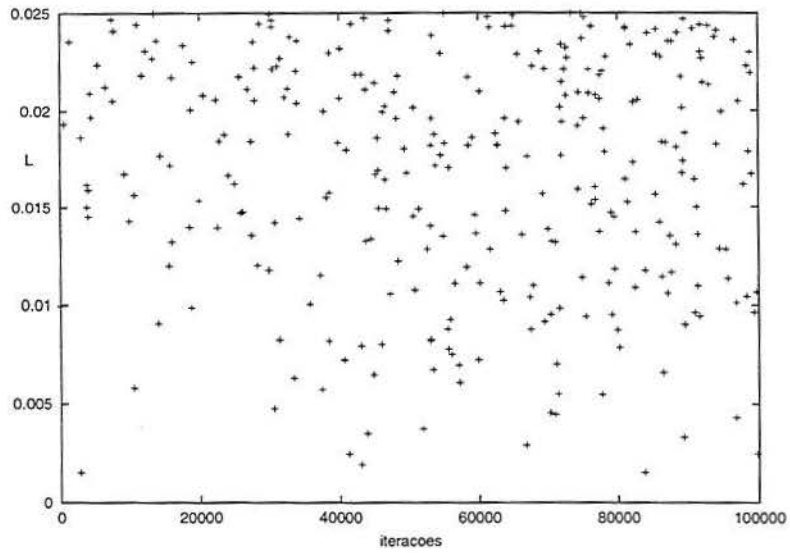


Fig. 4.5: Ampliação da figura 4.3 perto de $L = 0$.

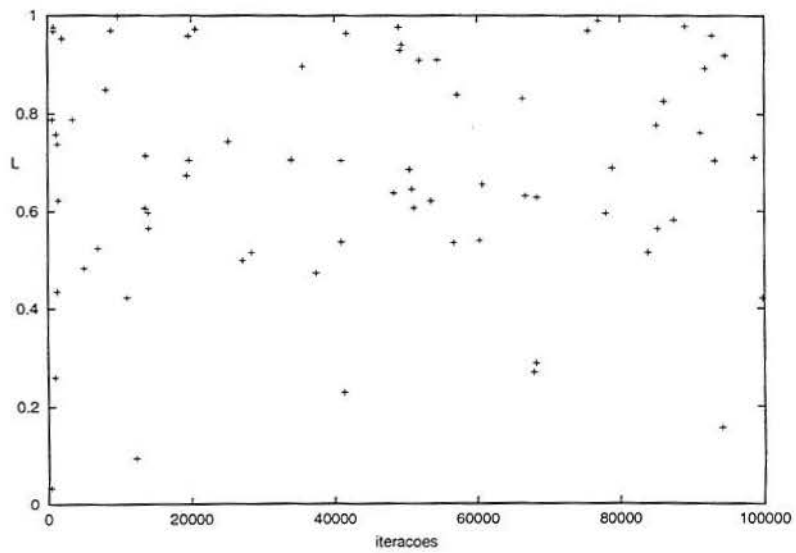


Fig. 4.6: Ampliação da figura 4.4 perto de $L = 0$.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O objetivo central deste trabalho é aliar a aplicação de sofisticados métodos numéricos à sua análise do ponto de vista da teoria matemática. Escolheu-se problemas físicos que possuíssem boas propriedades analíticas (no caso do tubo de choque, este possui solução exata e no caso da equação de Burgers, esta possui soluções globais suaves) e que ao mesmo tempo apresentassem, em uma escala menor, é claro, as mesmas características dos problemas sofisticados que são alvo do interesse não só de pesquisadores, mas de indústrias e de órgãos de segurança internacionais.

O método numérico escolhido para simular o escoamento no interior do tubo de choque e para calcular a solução da equação de Burgers (neste caso, como a dissipação natural está presente, não se fez necessária a adição de termos de dissipação artificial) é basicamente o mesmo que começou a ser desenvolvido há aproximadamente vinte anos [26], que veio sendo aperfeiçoado e que hoje em dia é empregado para calcular as propriedades aerodinâmicas de aeronaves [44].

Para o problema do tubo de choque, este método não se mostrou tão eficiente como para os casos em duas e em três dimensões divulgados na literatura especializada [24], [25]. Isto acontece provavelmente devido à malha, pois sabe-se que esta também introduz dissipação em um esquema. Com a malha em uma dimensão apenas, o efeito dissipativo inerente à malha não é tão efetivo. Conseqüentemente, apenas a introdução de termos de dissipação artificial e o método de marcha no tempo com propriedades de relaxação (amortecimento das altas frequências) não são suficientes para amortecer as oscilações causadas principalmente por fenômenos não lineares, como as ondas de choque.

Sabe-se que esquemas do tipo TVD forneceriam melhores resultados [18] (praticamente livres de oscilações) se aplicados ao tubo de choque, mas estes tornam-se caros em três dimensões. Nestes casos, esquemas semelhantes ao que é

estudado neste trabalho (otimizados) apresentam resultados excelentes - em termos de qualidade e de custo - mesmo para geometrias tridimensionais complexas.

Entretanto, a dificuldade em encontrar trabalhos que analisem rigorosamente estes esquemas é grande. A maior parte dos trabalhos existentes volta-se para a análise de esquemas numéricos que satisfaçam as propriedades TVD, as quais em geral não se aplicam aos esquemas que exigem a adição explícita de termos dissipativos, principalmente quando estes termos são tratados na forma escalar (dissipação artificial).

A última parte deste trabalho é uma tentativa de iniciar um estudo analítico-numérico destes esquemas sofisticados. O resultado apresentado aqui para o método de Runge-Kutta é restrito, pois considera-se apenas a semi-discretização de um problema linear evolutivo em dimensão infinita baseado em estimativas *a posteriori*. Para analisar matematicamente o problema, conforme ele é implementado no computador, serão necessárias ainda algumas etapas envolvendo a aplicação das idéias da teoria de "shadowing", especialmente de "shadowing" finito, em uma extensão da análise preliminar que é realizada neste trabalho para a equação de Burgers.

Desta forma, o presente trabalho reuniu discussões e métodos em diferentes áreas, buscando entrelaçá-las. Analisou-se o fenômeno físico - o escoamento em um tubo de choque: um problema unidimensional aparentemente simples, mas que pode servir como um modelo bem simples para a reentrada de espaçonaves na atmosfera terrestre, por exemplo. A solução para este problema foi estudada analítica e numericamente, sendo que foram obtidas a solução exata e aproximações para esta (via método numérico).

Empregou-se um esquema numérico de solução comprovadamente eficiente para escoamentos em duas e em três dimensões. Kroll e Rossow [32] apresentam o resultado para uma simulação do tubo de choque também com este método, porém com o acréscimo de técnicas de aceleração da convergência. O resultado

deles apresenta menos oscilações do que aqueles apresentados no capítulo 3, o que provavelmente se deve às técnicas de aceleração da convergência, que tratam justamente do amortecimento do erro.

Analisou-se a ordem de convergência para um esquema semelhante ao de Runge-Kutta simplificado descrito no capítulo 3. As condições para obtenção deste resultado são ainda restritas e, portanto, precisam ser estendidas para situações mais gerais, que incluam problemas reais, de interesse técnico. E, finalmente, empregou-se a teoria de “shadowing” a um protótipo, a equação de Burgers, observando-se que as estimativas obtidas aqui são apenas o começo de um longo trabalho, que sem dúvida renderá anos de pesquisa e trará importantes contribuições ao estudo de convergência de métodos numéricos para equações diferenciais parciais.

Neste sentido, dificuldades maiores serão encontradas em problemas de interesse prático, como aqueles em Dinâmica dos Fluidos Computacional. As equações de Navier-Stokes não possuem solução analítica, salvo para alguns casos particulares, o que sugere a utilização da teoria de “shadowing” *a posteriori*, mas sem deixar de lado algumas estimativas *a priori* com as desigualdades de Sobolev, como é feito para a equação de Burgers no capítulo 4. Além disto, em regimes de turbulência, por exemplo, as dificuldades de utilização da teoria de “shadowing” crescem, pois a separação no espectro, relacionada com a hiperbolicidade, torna-se cada vez mais tênue. Isto implicaria na necessidade de, naquelas regiões onde esta separação é (praticamente) inexistente, empregar a teoria da variedade central.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANDERSON, JR., J. D. *Governing Equations of Fluid Dynamics*, second ed. J. F. Wendt, Germany, 1996, a von Karman Institute Book 2, pp. 15–51.
- [2] BECK, B. C. Shock tube exact solution algorithm. Disponível na Internet via WWW.URL: <http://www.ccalmr.ogi.edu/beck/isu/thesis/node30.html>, 2000.
- [3] BUSATTO, A. D. Solução de escoamentos compressíveis sobre o aerofólio NACA 0012 baseado no arranjo centrado em volumes finitos. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Rio Grande do Sul, 1999.
- [4] BUTCHER, J. C. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations - Runge-Kutta and General Linear Methods*. John Wiley & Sons, 1987.
- [5] BUTZER, P. L., AND BERENS, H. *Semi-groups of Operators and Approximation*. Springer-Verlag, New York, 1967.
- [6] CHOI, Y.-H., AND MERKLE, C. L. The application of preconditioning in viscous flows. *Journal of Computational Physics* 105 (1993), 207–223.
- [7] CHOW, S. N., AND PALMER, K. J. On the numerical computation of orbits of dynamical systems. *Journal of Complexity* 8 (1992), 398–423.
- [8] COCKBURN, B., AND GAU, H. A posteriori error estimates for general numerical methods for scalar conservation laws. *Matemática Aplicada e Computacional* 14, 1 (1995), 37–47.
- [9] COCKBURN, B., AND GREMAUD, P. A. A priori error estimates for numerical methods for scalar conservation laws. Part I: the general approach. *Mathematics of Computation* 65, 214 (1996), 533–573.

- [10] CONSTANTIN, R. Navier-Stokes equations and area of interfaces. *Communications on Mathematical Physics* 129 (1990), 241–266.
- [11] CORLESS, R. M., AND PILYUGIN, S. Y. Approximate and real trajectories for dynamical systems. *J. Math. Anal. and Appl.* 189 (1995).
- [12] DE BORTOLI, A. L. Solution of incompressible flows using compressible flow solvers. Tech. Rep. IB129-94/18, DLR, Braunschweig, 1994.
- [13] DE BORTOLI, A. L. Three-dimensional supersonic flow analysis over a satellite vehicle launcher. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 103 (1999), 33–41.
- [14] DEGREGZ, G. *Implicit Time-Dependent Methods for Inviscid and Viscous Compressible Flows, with a Discussion of the Concept of Numerical Dissipation*, second ed. J. F. Wendt, Germany, 1996, a von Karman Institute Book 9, pp. 180–229.
- [15] DIEUDONNÉ, J. *Foundations of modern analysis*, 2nd ed. Academic Press, 1961.
- [16] FREW, K., ZINGG, D. W., AND DE RANDO, S. Artificial dissipation schemes for viscous airfoil computations. *AIAA Journal* 36, 9 (1998), 1732–1734.
- [17] GILBERT, D. E., AND TRUDINGER, N. S. *Elliptic partial differential equations of second order*. Springer-Verlag, Berlin, 1977.
- [18] HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 49 (1983), 357–393.
- [19] HEYWOOD, J. G., AND RANNACHER, R. On the question of turbulence modeling by approximate inertial manifolds and nonlinear Galerkin method. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 30 (1993), 1603–1621.

- [20] HEYWOOD, J. G., AND XIE, W. Smooth solutions of the vector Burgers equation in nonsmooth domains. *Differential and Integral Equations* 10, 5 (1997), 961–974.
- [21] HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, vol. 2 of *Wiley series in numerical methods in engineering*. John Wiley & Sons, 1990.
- [22] HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, vol. 1 of *Wiley series in numerical methods in engineering*. John Wiley & Sons, 1992.
- [23] JAMES, J. E. A. *Gas Dynamics*. Allyn and Bacon, Inc., USA, 1984.
- [24] JAMESON, A. *Transonic Flow Calculations for Aircraft*, vol. 1127 of *Lecture Notes in Mathematics*. F. Brezzi, ed. Springer-Verlag, 1985, ch. Numerical Methods in Fluid Dynamics, pp. 156–242.
- [25] JAMESON, A., AND MARTINELLI, L. Mesh refinement and modeling errors in flow simulation. *AIAA Journal* 36, 5 (1998), 676–686.
- [26] JAMESON, A., SCHMIDT, W., AND TURKEL, E. Numerical solution of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. AIAA Paper 81-1259, 1981.
- [27] JIN, S., AND XIN, Z. The relaxation schemes for systems of conservation laws in arbitrary space dimensions. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 48 (1995), 235–276.
- [28] JOHNSON, C., AND SZEPESSY, A. Adaptive finite element methods for conservation laws based on a posteriori error estimates. *Communications in Pure and Applied Mathematics* 48, 3 (1995), 199–234.
- [29] JÜRGENS, H., PEITGEN, H., AND SAUPE, D. *Fractals for the Classroom - Part Two - Complex Systems and Mandelbrot Set*. Springer-Verlag, 1992.

- [30] KALLINDERIS, T., AND MCMORRIS, H. Magnitude of artificial dissipation for numerical simulations. *AIAA Journal* 33 (1995), 1526–1529.
- [31] KROLL, N., AND JAIN, R. K. Solution of two-dimensional Euler equations - experience with a finite volume code. DFVLR-FB 87-41, 1987.
- [32] KROLL, N., AND ROSSOW, C. Foundations of numerical methods for the solution of Euler equations. Prepared for the Lecture F6.03 of the CCG: “Fundamentals and Application of Numerical Methods for Solution of Euler Equations in Design Aerodynamics, Braunschweig, May 1989.
- [33] LADAS, G. E., AND LAKSHMIKATHAM, V. *Differential Equations in Abstract Spaces*, vol. 85 of *Mathematics in Science and Engineering*. Academic Press, 1972.
- [34] LAMBERT, J. D. *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*. Introductory Mathematics for Scientists and Engineers. John Wiley & Sons, 1976.
- [35] LEVEQUE, R. J. Numerical methods for conservation laws. Lecture in Mathematics, 1992.
- [36] MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. LTC, Rio de Janeiro, 1995.
- [37] MÉTIVIER, G. *Étude Asymptotique des Valeurs Propres et de la fonction spectrale de problèmes aux limites*. PhD thesis, L’Université de Nice, 1976.
- [38] NERI, U. Singular integrals. *Lecture Notes in Mathematics* 200 (1971).
- [39] ORTEGA, M. A., CARVALHO, M. A. M., AND AZEVEDO, J. L. F. Comparison of some numerical schemes for the computation of inviscid flows with strong discontinuities. XIV CNMAC, Nova Friburgo, RJ, Setembro 1991.

- [40] OSTERMANN, A., AND PALENCIA, C. Shadowing for nonautonomous parabolic problems with applications to long-time error bounds. *SIAM J. Numer. Anal.* 37, 5 (2001), 1399–1419.
- [41] PAZY, A. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, vol. 44 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [42] PILYUGIN, S. Y. Shadowing in dynamical systems. *Lecture Notes in Mathematics 1706* (1999).
- [43] PULLIAM, T. H. Artificial dissipation models for the Euler equations. *AIAA Journal* 24 (1986), 1931–1940.
- [44] REUTHER, J., ALONSO, J. J., RIMLINGER, M. J., AND JAMESON, A. Aerodynamic shape optimization of supersonic aircraft configurations via an adjoint formulation on distributed memory parallel computers. *Computers & Fluids* 28 (1999), 675–700.
- [45] RICHTMYER, R. D. *Difference Methods for Initial-Value Problems*. Interscience Publishers, New York, 1957.
- [46] RUBIO, O. E. *Técnicas analíticas na teoria de fluidos fracamente viscoelásticos*. Dissertação de doutorado, PPGMAP - UFRGS, 1996.
- [47] SMOLLER, J. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, vol. 258 of *A series of comprehensive studies in Mathematics*. Springer-Verlag, 1983.
- [48] SOD, G. A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 27 (1978), 1–31.
- [49] SOD, G. A. *Numerical methods in fluid dynamics : initial and initial boundary-value problems*. Cambridge: Cambridge University, 1985.

- [50] STRIKWERDA, J. C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Chapman & Hall, New York, 1989.
- [51] STUART, I. M., AND HUMPHREYS, A. R. *Dynamical systems and numerical analysis*. CNP, Cambridge, 1996.
- [52] SWANSON, R. C., AND R. RADESPIEL AND E. TURKEL. Comparison of several dissipation algorithms for central difference schemes. Disponível na Internet via WWW.URL: <http://www.icas.edu>, 2000.
- [53] SWANSON, R. C., AND TURKEL, E. On central-difference and upwind schemes. *Journal of Computational Physics* 101 (1992), 292–306.
- [54] THOMPSON, M. Approximate inertial manifolds for the mhd equations with thermal dispersion. *Atas - Seminário Brasileiro de Análise* 51 (2000), 323–348.
- [55] TURKEL, E., RADESPIEL, R., AND KROLL, N. Assesment of preconditioning methods for multidimensional aerodynamics. *Computers & Fluids* 26 (1997), 613–634.
- [56] TURKEL, E., AND VATSA, V. N. Effect of artificial viscosity on three-dimensional flow solutions. *AIAA Journal* 32 (1994), 39–45.
- [57] WARMING, R. F., AND HYETT, B. J. The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods. *Journal of Computational Physics* 14 (1974), 159–179.
- [58] WEINBERGER, H. F. *Variational Methods for Eigenvalue Approximation*, vol. 15. SIAM, 1974.
- [59] WHITFIELD, D. Three-dimensional unsteady Euler-equation solutions using flux vector splitting. Tech. Rep. MS39762, Mississippi State University, 1983.
- [60] WHITHAM, G. *Linear and nonlinear waves*. Wiley-Interscience, 1974.

- [61] YOSIDA, K. *Functional Analysis*, second ed., vol. 123 of *Die Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen*. Springer-Verlag, Germany, 1966.