
Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação
Científica

**Equação de Convecção-Difusão: Análise
de Pseudo Espectro e Solução Numérica**

Felipe Luy Valério
Orientador: Prof. Dr. Fermin S. V. Bazán

Florianópolis
Março de 2008

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica

**Equação de Convecção-Difusão: Análise de
Pseudo Espectro e Solução Numérica**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica, do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina, para a obtenção do grau de Mestre em Matemática, com Área de Concentração em Matemática Aplicada.

Felipe Luy Valério
Florianópolis
Março de 2008

Equação de Convecção-Difusão: Análise de Pseudo Espectro e Solução Numérica

por

Felipe Luy Valério

Esta Dissertação foi julgada para a obtenção do Título de “Mestre”, Área de Concentração em Matemática Aplicada, e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica.

Clóvis Caesar Gonzaga
Coordenador

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Fermin S. V. Bazán (UFSC-Orientador)

Prof. Dra. Maria Cristina Castro Cunha (UNICAMP)

Prof. Dr. Jauber Cavalcante de Oliveira (UFSC)

Prof. Dr. Milton dos Santos Brait (UFSC)

Florianópolis, Março de 2008.

Dedico esta dissertação aos meus pais, Jaime e Rosana, que sempre me apoiaram e aconselharam em todas as minhas decisões profissionais e pessoais e a minha noiva Alexandra, pelo carinho, paciência e compreensão nos momentos mais difíceis.

Agradecimentos

Em primeiro lugar gostaria de agradecer a Deus que tornou tudo isso possível.

Agradeço ao Dr. Fermin V. S. Bazán, pela sua orientação. Um profissional dedicado. Sempre dispôs de tempo e paciência para responder minhas dúvidas. Seu auxílio foi fundamental para a realização deste trabalho. Seus conselhos contribuíram muito para o meu crescimento profissional e pessoal.

Também agradeço aos professores membros da banca pelas correções e sugestões que aprimoraram a versão final deste trabalho.

Aos colegas do Mestrado em Matemática e Computação Científica da UFSC, em especial Alisson e Daiane que foram meus companheiros de estudo e acima de tudo meus grandes amigos.

À Elisa B. Amaral pelo auxílio e assistência ao longo destes dois anos.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES - por ter financiado este projeto pelo período de um ano.

Resumo

Apresentamos uma análise do pseudo espectro do operador convecção-difusão e resolvemos numericamente exemplos da equação associada a esse operador.

A análise do pseudo espectro é feita de duas formas. A primeira utilizando cotas inferiores e superiores para a norma do resolvente do operador convecção-difusão. A segunda através da discretização do operador e cálculo do pseudo espectro das matrizes resultantes da discretização por métodos numéricos.

Como exemplos, resolvemos numericamente os casos lineares e não lineares da equação de convecção-difusão. Para resolver esta equação usamos principalmente o método das linhas baseado no método pseudo espectral de Chebyshev . Uma análise de estabilidade também é apresentada.

abstract

We present an analysis of the pseudospectra of the unidimensional convection-diffusion operator as well as some numerical methods for the corresponding partial differential equation.

The analysis of the pseudospectra is made in two distinct ways. First, using lower and upper bounds for the resolvent of the convection-diffusion operator, and second, using the pseudospectra of matrices obtained by discretizing the operator through several methods.

As examples, we solve numerically the linear and non linear cases of the convection-diffusion equation, this being done by the method of lines coupled with the Chebyshev pseudospectral method. An analysis of stability is also present.

Lista de Figuras

2.1	Regiões de estabilidade dos métodos Runge-Kutta de ordens um, dois, três e quatro	18
2.2	$\ A^k\ $ linha contínua e $\ B^k\ $ linha tracejada.	20
2.3	O espectro da matriz $\Delta t L_N$ está representado por (\bullet). Região de estabilidade do Método RK1 (círculo com centro no ponto $(-1, 0)$ e raio 1). Os demais círculos representam o ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t L_N$, para os valores de $\epsilon = 10^{-2}, 10^{-3}, \dots, 10^{-7}$	22
2.4	Soluções Numéricas do problema (2.10) com $\Delta t = 0.6\Delta x$ e $\Delta t = 1.2\Delta x$.	23
2.5	Pseudo espectro dos operadores discretos de Schorödinger e derivada de segunda ordem para $\epsilon = 10^{-\frac{k}{2}}$ com $k = -1 \dots -8$ e $N = 40$. (a) Operador de Schorödinger (b) Operador derivada de segunda ordem.	26
2.6	Pseudo espectro dos operadores discretos de Schorödinger e derivada de segunda ordem para $\epsilon = 10^{-\frac{k}{2}}$ com $k = -1 \dots -8$ e $N = 70$. (a) Operador de Schorödinger (b) Operador derivada de segunda ordem.	27
3.1	Comportamento da função $\phi = e^{\alpha+x} - e^{\alpha-x}$ com $\lambda \in \Pi$ em que $\lambda = -0.15$, $d = 40$ e $\nu = c = 1$	35
3.2	Acima: curvas de nível representando respectivamente os conjuntos σ_{me} e σ_{se} para $\text{Re}(z)$ variando entre -10 e 1 e -100 e 1 com $\epsilon = 10^{-1}$ e 10^{-2} . As constantes $\nu = 1$ e $c = 1$. Abaixo: Os mesmos conjuntos, com a diferença que consideramos $\nu = -1$	41
3.3	Acima: curvas de nível representando respectivamente os conjuntos σ_{me} e σ_{se} para $\text{Re}(z)$ variando entre -100 e 1 com $\epsilon = 10^{-1}$ e 10^{-2} . As constantes $\nu = c = 0.5$ e $\nu = c = 2$. Abaixo: Os mesmos conjuntos, com a diferença que na figura da esquerda consideramos $\nu = 1$, $c = 0.5$ e na figura direita consideramos $\nu = 0.5$ e $c = 1$	42
4.1	Parábola crítica, linha pontilhada, espectro, denotado pelo sinal (+), e pseudo espectro do operador discreto L_N^{ch} para $\epsilon = 10^{-1} \dots 10^{-7}$. À esquerda consideramos $N=30$ e a direita consideramos $N=150$	48
4.2	Parábola crítica, linha pontilhada, espectro, denotado pelo sinal (+), e pseudo espectro do operador discreto L_N^{eq} para $\epsilon = 10^{-1} \dots 10^{-7}$	50
4.3	Esquerda: Polinômio interpolador usando uma malha com pontos equidistantes. Direita: Polinômio interpolador usando uma malha com pontos de Chebyshev.	52

4.4	Parábola crítica, linha pontilhada, espectro, denotado pelo sinal (+), e pseudo espectro do operador discreto L_N^{CC} para $\epsilon = 10^{-1} \dots 10^{-7}$. Esquerda: Consideramos $N = 30$. Direita: Consideramos $N = 150$.	54
5.1	Esquerda: espectro e ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} para $c = 5$ e $\gamma = 0.01$ com $\epsilon = 10^{k/2}$ $k = -4, 0, \dots, 2.5$. Direita: espectro e ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} para $c = 0.05$ e $\gamma = 0.01$ com $\epsilon = 10^{k/2}$, $k = -4, 0, \dots, 2.5$	60
5.2	ϵ -pseudo espectro de $(\Delta t_{\max})\mathbf{A}$ para $\epsilon = 10^{-k/4}$, $k = 4, \dots, 16$, e $N = 32$. (a): Caso: $\gamma = 0.1$ (b): zoom de (a). (c) Caso: $\gamma = 0.001$, (d): zoom de (c).	61
5.3	Esquerda: Região de estabilidade absoluta do método RK e ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t\mathbf{A}$ para $\Delta t = 0.003$ e $\epsilon = 10^{-k/2}$, $k = 4, 5, \dots, 8$. Direita: Zoom do ϵ -pseudo espectro juntamente com a parábola limite $x = -y^2$.	62
5.4	Esquerda: Região de estabilidade absoluta do método RK e ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t\mathbf{A}$ para $\Delta t = 0.0007$ e $\epsilon = 10^{-k/2}$, $k = 4, 5, \dots, 8$. Direita: Zoom do ϵ -pseudo espectro juntamente com a parábola limite $x = -y^2$.	63
5.5	Esquerda: Erro absoluto de logaritmo na base 10 da solução pelos métodos PSC e PSCA para $t = 0.1$, $\Delta t = 0.001$ $N = 20$ e DF com $m = 55$ e $h \approx 0.01818$ Direita: Resultados para $N = 30$, $\Delta t = 0.0001$ e $m = 40$ com $h \approx 0.025$	64
5.6	Esquerda: Região de estabilidade absoluta do método RK e ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t\mathbf{A}$ para $\Delta t = 0.0008$, $N=20$ e $\epsilon = 10^{-k/2}$, $k = 4, 5, \dots, 8$. Direita: Zoom do ϵ -pseudo espectro	65
5.7	Esquerda: Erro absoluto para $t = 0.8$, $\Delta t = 0.0001$ $N = 20$ Direita: Resultados para $N = 40$, $\Delta t = 0.00004$	65
5.8	Esquerda: Pseudo espectro com $N = 20$ $\gamma = 0.01$ $c = 1$ mais região de estabilidade absoluta do método Runge-Kutta de ordem 4. Direita: Zoom do pseudo espectro	66
5.9	Esquerda: Erro absoluto para $t = 0.8$, $\Delta t = 0.0001$ $N = 20$ Direita: Resultados para $N = 40$, $\Delta t = 0.00001$	67
5.10	Solução exata da equação de Burger para dois tempos diferentes: as linhas sólidas correspondem ao tempo $t = 0.5$ e as trachelhadas ao tempo $t = 1$.	70
5.11	ϵ -pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ para $\epsilon = 10^{-k/4}$, $k = 4, \dots, 16$, e $N = 32$. (a): Caso: $\gamma = 0.1$ (b): zoom de (a). (c) Caso: $\gamma = 0.001$, (d): zoom de (c).	71
5.12	Erro na solução aproximada do método pseudo espectral de Chebyshev para $N = 32$ e $\gamma = 0.1$, nos tempos $t = 1$. (esquerda), e $t = 2$. (direita)	71
5.13	Erro na solução aproximada pelo método pseudo espectral de Chebyshev para $N = 64$ e $\gamma = 0.01$ nos tempos $t = 0.5$ (superior esquerda), $t = 1$. (superior direita), $t = 1.5$ (inferior esquerda), e $t = 2$. (inferior direita)	72
5.14	Instabilidade do método PSC com a escolha $\Delta t = 0.0155$.	73

Sumário

Introdução	2
1 Conceitos Básicos	5
1.1 Espaços de Hilbert	7
1.2 Teoria espectral	8
1.3 Operador Adjunto	9
1.4 Método das linhas	9
1.5 Derivada Generalizada	10
1.6 Teorema de Lax	10
2 Generalidades do pseudo espectro	12
2.1 História do pseudo espectro	12
2.2 Porque estudar pseudo espectro?	15
2.2.1 Regiões de estabilidade	15
2.2.2 Estabilidade Lax e Estabilidade segundo autovalores	19
2.3 Pseudo Espectro de um operador	23
3 O operador convecção-difusão	28
3.1 Espectro do operador Convecção-Difusão	30
3.2 Pseudo espectro do operador convecção-difusão	34
3.2.1 Aproximando o pseudo espectro de \mathcal{L} através da norma do seu resolvente	35
4 Aproximação do pseudo espectro do operador convecção-difusão através discretização do operador	46
4.1 Diferenças finitas	46
4.1.1 Pontos de Chebyshev	47
4.1.2 Pontos equidistantes	48
4.2 Método pseudo espectral de Chebyshev	50
4.2.1 Aproximação pseudo espectral de Chebyshev	50
5 Solução numérica da equação de convecção-difusão linear e não linear	55
5.1 Caso Linear	55
5.1.1 Método de diferenças finitas	56
5.1.2 Modelo pseudo espectral semi discreto	58

5.1.3	Estabilidade Numérica	59
5.1.4	Exemplos Numéricos Para o Caso Linear	62
5.2	Caso não linear: equação de Burger	66
5.2.1	Modelo pseudo espectral semi discreto para a equação de Burger	67
5.2.2	Análise de Estabilidade	69
5.2.3	Resultados Numéricos	70
Conclusões Finais		74

Introdução

Vários modelos matemáticos da ciência e engenharia são descritos por equações diferenciais parciais (EDP's). O rápido desenvolvimento dos computadores nas últimas décadas facilitou a simulação, análise e a solução numérica desses modelos matemáticos. Para a adaptação dessas EDP's no computador é necessário utilizar métodos numéricos baseados em elementos finitos, diferenças finitas, etc.

Modelos matemáticos que envolvem a combinação de processos convectivos e difusivos são muito difundidos nas ciências aplicadas em que a modelagem matemática é importante. Entre esses modelos surgem vários em que a difusão é muito pequena ou apresentam pequenas perturbações nos dados de entrada. Tais circunstâncias dificultam os experimentos com aproximações numéricas comuns. Por esse motivo uma vasta literatura tem construído durante décadas uma variedade de técnicas para analisar e contornar essas dificuldades.

Problemas de dispersão de poluentes em um rio, poluição atmosférica, equações semi-condutores, transporte de água subterrânea, modelos financeiros, etc, são situações em que as equações de convecção-difusão aparecem. Detalhes sobre como a equação de convecção-difusão aparece modelando esses fenômenos e outros exemplos podem ser encontrados em [10, 13, 28].

Neste trabalho estudamos a equação de convecção-difusão

$$u_t = \gamma u_{xx} - cu_x$$

em que $\gamma, c > 0$, γ é um coeficiente de difusão e c o coeficiente de convecção [14]. O coeficiente c pode ser uma constante ou uma função que depende de x .

Uma maneira de resolver uma equação diferencial parcial (EDP) do tipo evolução é através da discretização da variável espacial transformando a EDP num sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's). Este método é conhecido como método das linhas. Uma abordagem baseada em diferenças finitas é apresentada por Salkuyeh [33]. Várias dificuldades na discretização feita por Salkuyeh são apontados por Bazán em [3] onde é apresentada uma abordagem baseada no método pseudo espectral de Chebyshev. O método pseudo espectral de Chebyshev também é utilizado por Calegari [5] em sua dissertação de mestrado. Em seu trabalho ela resolve problemas de propagação de ondas com condições de fronteira absorventes.

Um dos aspectos cruciais na solução numérica do sistema de EDO's, que aparece quando utilizamos o método das linhas, é a escolha do tamanho do passo Δt que garanta a estabilidade das soluções numéricas. Relacionado com este assunto Trefethen em [12, 37, 41] apresenta vários resultados sobre pseudo espectro de operadores e matrizes, as noções de Lax-estabilidade e estabilidade segundo autovalores e o pseudo espectro do operador convecção-difusão. Para a solução numérica de EDP's também apresenta o método das linhas baseado no método pseudo espectral de Chebyshev.

Neste trabalho estudamos a estabilidade das soluções numéricas analisando dois tipos de estabilidade, estabilidade segundo autovalores e Lax-estabilidade. O motivo da escolha destes critérios deve-se ao fato deles estarem geralmente vinculados ao métodos das linhas. Estes tipos de análises são importantes pois, através deles, podemos garantir que a propagação de erros de entrada, arredondamento e condição inicial por exemplo, sejam controladas. Veremos no decorrer deste trabalho que critérios de estabilidade baseados apenas em autovalores podem nos levar a uma escolha do tamanho do passo Δt produzindo soluções numericamente instáveis [30, 31, 36]. Isto depende do grau de não normalidade da matriz associada ao sistema de EDO's [32].

O grau de não normalidade é o quanto uma matriz é não normal. Uma forma de verificarmos o grau de não normalidade de uma matriz ou operador é através da análise do seu pseudo espectro. Quanto mais amplo é o pseudo espectro de uma matriz ou operador, mais não normal é essa matriz ou esse operador [12]. A alta não normalidade de uma matriz ou operador indica uma alta sensibilidade do espectro. Desta forma, pequenas perturbações na matriz, ou operador, podem provocar grandes modificações em seu espectro, o que pode afetar diretamente as soluções numéricas, desestabilizando-as.

Investigaremos, neste trabalho, o pseudo espectro do operador convecção-difusão. Este operador é altamente não normal [12] o que justifica a alta sensibilidade dos problemas associados a ele. Em seguida resolvemos exemplos numéricos lineares e não lineares da equação de convecção-difusão.

Esta dissertação basea-se principalmente nos trabalhos de Salkuyeh [33], Bazán [3], Calegari [5], e Trefethen [12, 37, 41, 43], e está organizada em quatro capítulos. O capítulo 1 contém os conceitos básicos que fundamentam toda a teoria apresentada no trabalho. No capítulo 2 apresentamos generalidades do pseudo espectro. Começamos com uma breve história sobre as noções que foram surgindo sobre o assunto até chegar a definição que conhecemos hoje. Em seguida justificamos com detalhes a necessidade de se investigar o pseudo espectro de operadores e matrizes. Encerramos este capítulo com alguns resultados sobre pseudo espectro.

No capítulo 3 é apresentado o operador convecção-difusão, ilustrando, entre várias características, a sua não normalidade. Em seguida fazemos uma aproximação

teórica do pseudo espectro do operador estabelecendo cotas para a norma do operador resolvente $\|(zI - \mathcal{L})^{-1}\|$ associado [41]. Finalizamos com a análise pseudo espectral de matrizes decorrentes da discretização do operador convecção-difusão por diversos métodos numéricos. Mostramos que estas aproximações são consistentes com a análise teórica.

No capítulo 5 são apresentados vários exemplos numéricos envolvendo problemas lineares e não lineares. A discretização espacial é feita em ambos os casos através do método pseudo espectral de Chebyshev [6, 43]. Para o caso linear, ao discretizarmos a variável espacial, somos levados a um sistema linear de EDO's do tipo

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{V} + \mathbf{b}(t), & t \leq 0 \\ \mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0 \end{cases}$$

então fazemos a análise de estabilidade do método através da inspeção do pseudo espectro de A .

No caso não linear aproximamos numericamente a equação de Burger

$$u_t = \gamma u_{xx} + uu_x.$$

Neste caso somos levados a um sistema não linear de EDO's do tipo

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{V}), \\ \mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0 \end{cases}$$

e a análise de estabilidade é feita através da inspeção do pseudo espectro da matriz Jacobiana $\mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ da função vetorial $\mathbf{F}(t, \mathbf{V})$ num ponto (t_0, \mathbf{V}_0) . Diferente do caso linear, em que obtemos uma matriz constante em todas as iterações, o espectro de $\mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ dependerá da condição inicial e das condições de fronteira. Finalizamos nosso trabalho com algumas considerações finais e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 1

Conceitos Básicos

As definições, teoremas, corolários e exemplos enunciados neste capítulo, tem o propósito de apresentar, ou relembrar, conceitos básicos necessários para o entendimento deste trabalho e que serão utilizados ao longo do texto.

Definição 1 Um espaço vetorial E sobre o corpo \mathbb{K} (\mathbb{C} ou \mathbb{R}) é dito um espaço normado se E está equipado com uma "norma" isto é $\|\cdot\| : E \rightarrow \mathbb{R}_+ = [0, \infty)$ tal que $\forall y$ tal que $x \in E, \forall \lambda \in \mathbb{K}$,

1. $\|x\| = 0 \iff x = 0$,
2. $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$,
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

Normas típicas em um espaço de dimensão finita:

Exemplo 1 Considere $x \in \mathbb{K}^n$. Então temos:

norma 1: $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$

norma 2: $\|x\|_2 = (x^T x)^{\frac{1}{2}} = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \dots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}}$

norma p : $\|x\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}} \quad \forall 1 \leq p \leq \infty$

norma ∞ : $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$

Definição 2 Considere $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$ definimos a norma- p por

$$\|A\|_p = \max_{\|x\| \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$$

Definição 3 Considere $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$. Um escalar λ é chamado de autovalor de A se existe um vetor não nulo x tal que $Ax = \lambda x$.

Teorema 1 Para todo $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$ temos $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

As raízes quadradas dos autovalores de $A^T A$ são chamados de valores singulares de A e denotados por σ_i com $1 \leq i \leq n$. Consideraremos $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$.

Propriedade 1 Se $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ e $\det(A) \neq 0$, então $\|A^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sigma_n}$

Esta propriedade é uma consequência do teorema da fatoração SVD (Singular Value Decomposition) ou, traduzindo para o português, fatoração em valores singulares.

Teorema 2 (SVD) Toda matriz $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$ pode ser escrita como $A = U\Sigma V^T$ em

que $U = [u_1, \dots, u_m]_{m \times m}$, $\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_n \end{bmatrix}_{m \times n}$, com $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$ e $V = [v_1, \dots, v_n]_{n \times n}$ com $\{u_i\}_{i=1}^m$ e $\{v_i\}_{i=1}^n$ ortogonais

A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [27]. A seguir apresentamos alguns exemplos de normas em espaços de dimensão infinita.

Exemplo 2 $\mathcal{C}[a, b]$ $a < b$, é a notação usual para o conjunto de todas as funções contínuas $f[a, b] \rightarrow \mathbb{K}$. $\mathcal{C}[a, b]$ é um espaço vetorial munido da norma, por exemplo $\|f\|_\infty = \sup_{x \in [a, b]} |f(x)|$, portanto $(\mathcal{C}[a, b], \|\cdot\|)$ forma um espaço normado.

Exemplo 3 Seja l_p com $p \leq 1$ o conjunto de todas as seqüências escalares $x = (x_1, x_2, \dots)$ com $x_i \in \mathbb{K}$, tais que $\sum_{i=1}^{\infty} |x_i|^p < \infty$. Para cada $x = (x_1, x_2, \dots) \in l_p$ podemos definir $\|x\|_p = (\sum_{i=1}^{\infty} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$

Exemplo 4 Seja l_∞ o conjunto de todas as seqüências $x = (x_1, x_2, \dots)$ com $x_i \in \mathbb{K}$, tais que $\sup |x_i| < \infty$. Para cada $x = (x_1, x_2, \dots) \in l_\infty$ podemos definir $\|x\|_\infty = \sup_{n \in \mathbb{N}} |x_n|$

Exemplo 5 $V = L_2[a, b]$, o espaço das funções mensuráveis $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{K}$ tais que $\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$. Para cada $f \in L_2[a, b]$ definimos a norma de f como sendo

$$\|f\|_2 = \left(\int_a^b |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

Definição 4 Dado $E = (E, \|\cdot\|)$ define-se

$$d : E \times E \rightarrow \mathbb{R}$$

por

$$d(x, y) = \|x - y\|$$

É fácil ver que d é uma métrica sobre E , esta métrica é chamada *métrica induzida pela norma*.

Definição 5 Um espaço X é dito completo se toda seqüência de Cauchy em X é convergente

Definição 6 Um espaço de Banach é um espaço vetorial normado E que é completo com relação à métrica induzida pela norma.

Os espaços normados apresentados nos exemplos 2 a 5 são exemplos de espaços de Banach.

1.1 Espaços de Hilbert

Definição 7 Dado um espaço vetorial V , dizemos que uma função $V \times V \rightarrow \mathbb{K}$, $(v, w) \rightarrow \langle v, w \rangle$, é um produto interno se:

1. $\langle x + \lambda y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \lambda \langle y, z \rangle \quad \forall x, y, z \in V \text{ e } \lambda \in \mathbb{K}$
2. $\overline{\langle x, y \rangle} = \langle y, x \rangle$
3. $\langle x, x \rangle \geq 0 \quad \forall x \in V$
4. $\langle x, x \rangle = 0 \implies x = 0$

Exemplo 6 Em \mathbb{K}^n definimos

$$\langle (x_1, x_2, \dots, x_n), (y_1, \dots, y_n) \rangle = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i$$

Exemplo 7 Se $V = l_2$ então definimos o produto interno entre a e $b \in V$ como:

$$\langle a, b \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \bar{b}_n$$

Exemplo 8 Considere $V = L_2[a, b]$, definimos o produto interno entre f e $g \in V$ como:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \overline{g(x)} dx$$

Propriedade 2 Dado um produto interno num espaço vetorial temos (desigualdade de Cauchy- Shwartz):

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle$$

Propriedade 3 Num espaço V com produto interno a função

$$x \in V \rightarrow \|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle} \in \mathbb{R}_+$$

é uma norma

Dizemos que a norma acima definida é a norma induzida pelo produto interno.

Definição 8 Um espaço de Hilbert é um espaço vetorial com produto interno que é completo com relação á norma induzida pelo produto interno.

Exemplo 9 No espaço $L_2[a, b]$ definimos o produto interno por:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \overline{g(x)} dx$$

e

$$\sqrt{\langle f, f \rangle} = \left(\int_a^b |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} = \|f\|_2$$

que é a norma definida para esse espaço. O espaço $L_2[a, b]$ é completo com relação a essa norma e portanto é um espaço de Hilbert.

Definição 9 Uma transformação linear $T : E \rightarrow F$, onde E e F são espaços normados, é dita aberta se para todos os conjuntos $U \subseteq E$ abertos tem-se que $T(U)$ é aberto.

Teorema 3 Sejam E e F espaços de Banach se $T : E \rightarrow F$ é uma transformação linear contínua sobrejetora, então T é aberta.

O teorema 3, acima enunciado, é chamado de Teorema da aplicação aberta.

Corolário 1 Se $T : E \rightarrow F$ é bijetora e contínua com E, F Banach então T^{-1} é contínua.

Definição 10 Sejam E e F espaços normados $D \subseteq E$ um subespaço vetorial denso e $T : D \rightarrow F$ uma transformação linear. Nestas condições, T é denominado um operador densamente definido em E .

Definição 11 Um tal operador é dito fechado se

$$G(T) = \{(x, y) \in E \times F : x \in D \text{ e } y = T(x)\}$$

é fechado em $E \times F$

1.2 Teoria espectral

Definição 12 Dado um operador $T \in B(X)$, em que $B(X)$ denota o conjunto de operadores limitados em X e X um espaço de Banach, dizemos que um escalar $\lambda \in \mathbb{K}$ é um valor espectral de T se $T - \lambda I$ não é bijetor

O espectro de T é o conjunto de todos os valores espectrais e é denotado por $\sigma(T)$ ou $(sp(T))$. O conjunto Resolvente de T é o conjunto $\rho(T) = \mathbb{K} \setminus \sigma(T)$

Observação 1 Se $\lambda \in \rho(T)$, isto é, $T - \lambda I$ é bijetor, como X é Banach, pelo corolário 1, do teorema da aplicação aberta, tem-se que $(T - \lambda I)^{-1}$ é contínuo. Este operador é chamado o operador Resolvente $R_\lambda = (T - \lambda I)^{-1}$.

Quando se quer resolver a equação $T(x) = \lambda x + y$ na incógnita x , dado y , supondo-se que $\lambda \in \rho(T)$, a única solução é $x = R_\lambda(y)$.

Observação 2 Todo autovalor é um valor espectral pois se $Ax = \lambda x$ para $x \neq 0$ então $(A - \lambda I)x = 0$ e então $x \neq 0$ e $x \in \ker(A - \lambda I)$ não é bijetor e portanto $\lambda \in \sigma(A)$

1.3 Operador Adjunto

Definição 13 *Seja X e Y espaços normados e $T : D(T) \rightarrow Y$ um operador linear, em que $D(T) \subset X$. O operador T é dito limitado se existe um número real c tal que para todo $x \in D(T)$*

$$\|Tx\| \leq c\|x\|$$

Definição 14 *Seja $T : H_1 \rightarrow H_2$ um operador linear limitado, em que H_1 e H_2 são espaços de Hilbert. Então o operador Hilbert-adjunto T^* de T é o operador*

$$T^* : H_2 \rightarrow H_1$$

tal que para todo $x \in H_1$ e $y \in H_2$,

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle \quad (1.1)$$

Note que $\langle Tx, y \rangle$ denota o produto interno em H_2 e $\langle x, T^*y \rangle$ o produto interno em H_1 .

Definição 15 *Um operador linear $T : H \rightarrow H$ num espaço de Hilbert H é dito auto-adjunto se:*

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle \quad (1.2)$$

Definição 16 *Um operador linear $T : H \rightarrow H$ num espaço de Hilbert H é dito normal se:*

$$T^*T = TT^* \quad (1.3)$$

Quando o operador está definido em espaços de dimensão finita então T^* é a matriz hermitiana de T .

1.4 Método das linhas

Uma maneira de resolver um problema de evolução descrito por uma equação do tipo

$$U_t = \mathcal{L}U, \quad U(x, 0) = f(x), \quad t \in [0, T] \quad (1.4)$$

em que \mathcal{L} é um operador diferencial que independe do tempo t , e U é uma função escalar ou um vetor que depende de t e de uma ou mais variáveis espaciais, é resolver um sistema de equações diferenciais ordinárias, que depende do tempo, resultante de discretizar a variável espacial. Este sistema, é resolvido por algum esquema de aproximação como Runge-Kutta, multi-passos etc. Este tipo de esquema de aproximação para equações diferenciais parciais é denominado métodos das linhas. O método das linhas pode ser descrito da seguinte maneira

- i. Aproximação das derivadas em relação as variáveis espaciais de (1.4) via diferenças finitas, elementos finitos, volumes finitos, métodos pseudo espectrais, em uma malha discreta, transforma a EDP em um sistema de EDO's (modelo semi discreto).

$$\tilde{U}_t = L_h \tilde{U}, \quad \tilde{U}(0) = f_N \quad (1.5)$$

em que $\tilde{U}(t)$ é um vetor de dimensão N e L_h uma matriz $N \times N$. Aqui, h é um parâmetro relacionado com o tamanho da malha usada na discretização espacial.

- ii. O sistema (1.5) é resolvido com algum método para a resolução de sistemas de EDO's (Runge-Kutta, etc.), produzindo soluções $\tilde{U}(x_i, t) \approx U(x_i, t)$ "ao longo das linhas (x_i, t) " com $0 \leq i \leq N$.

1.5 Derivada Generalizada

Definição 17 *Seja $u \in L_2(a, b)$. Diz-se que $v \in L_2(a, b)$ é a derivada generalizada de u se*

$$\int_a^b u(x)\varphi(x)dx = - \int_a^b v(x)\varphi'(x)dx$$

para toda $\varphi \in C_0^\infty(a, b)$. Nesse caso se escreve que $v = u'$.

Observação 3 *A derivada generalizada quando existe é a única devido ao lema de Du Bois Reymond, Brezis [4]*

Teorema 4 *$C_0^\infty(a, b)$ é denso em $L^p(a, b)$ $1 \leq p \leq \infty$.*

A demonstração desse teorema pode ser encontrada em Brezis [4]

Observação 4 *Como consequência desse teorema temos que*

$$\Omega = \{u \in C^1[0, d]; u'' \in L_2[0, d] \text{ e } u(0) = u(d) = 0\} \quad (1.6)$$

em que $C^1[0, d]$ é o espaço das funções contínuas que possuem a primeira derivada contínua no intervalo $[0, d]$. É denso em $L_2[0, d]$

1.6 Teorema de Lax

Teorema 5 *(teorema de Equivalencia de Lax) Suponha que o problema de valor inicial*

$$\begin{cases} u_t = \mathcal{A}u, & 0 \leq t \leq T \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (1.7)$$

em que $\mathcal{A} : V_0 \rightarrow V$ é um operador linear (geralmente não limitado) bem posto, V espaço de Banach, $V_0 \subseteq V$ subespaço denso de V . Para um método de diferenças abstrato, existe um subespaço V_c de V denso tal que, para todo $u_0 \in V_0$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\| \frac{C(\Delta t)u(t) - u(t + \Delta t)}{\Delta t} \right\| = 0$$

uniformemente em $[0, T]$, em que u é a solução generalizada de (1.7). E $C(\Delta t) : V \rightarrow V$ com $0 < \Delta t \leq \Delta t_0$ é uma família de operadores lineares uniformemente limitados com $\Delta t_0 > 0$ um número fixo. Então a estabilidade é equivalente a convergência.

Capítulo 2

Generalidades do pseudo espectro

Este capítulo está dividido em três partes. Na primeira parte apresentamos uma breve história do pseudo espectro descrevendo desde as primeiras idéias que aparecem sobre o assunto até a definição que conhecemos hoje. Em seguida justificamos o porque do seu estudo e, por último, apresentamos a definição de pseudo espectro de um operador juntamente com alguns exemplos.

2.1 História do pseudo espectro

Descreveremos uma breve história de como se desenvolveu o conceito de pseudo-espectro. Procuramos apenas relatar, de forma resumida, datas, autores, motivação que levaram os pesquisadores a estudar o assunto, e suas principais contribuições. Mais detalhes podem ser encontradas em Trefethen [12].

No contexto de matrizes Hermitianas e quase-Hermitianas, os físicos matemáticos Vishik e Lyusternik [46], em 1957, introduziram o conceito de quase-modos ou pseudo-autovetores e, a primeira referência que se tem, data de 1972 no artigo '*Modes and Quasimodes*' escrito por Arnol'd [1]. Mas os problemas de interesse eram diferentes dos problemas de não normalidade de operadores e matrizes que conhecemos hoje.

No contexto de não normalidade, em 1967, J. M. Varah [44], em sua tese '*The Computation of Bounds for the Invariant Subspaces of a General Matrix Operator*' pela Universidade de Stanford, introduziu a noção de ϵ -pseudo-autovalor com o nome de autovalor r -aproximado, definição 18, motivado pela análise de precisão dos cálculos de algoritmos.

Definição 18 $\left\{ \begin{array}{c} \lambda \\ y \end{array} \right\}$ é um r - $\left\{ \begin{array}{c} \text{autovalor} \\ \text{autovetor} \end{array} \right\}$ aproximado da matriz A se existe uma matriz E com $\|E\|_2 = r\eta$ tal que $\left\{ \begin{array}{c} \lambda \\ y \end{array} \right\}$ é um $\left\{ \begin{array}{c} \text{autovalor} \\ \text{autovetor} \end{array} \right\}$ exato de $A + E$

O parâmetro η foi incorporado por Varah na sua definição para descrever uma precisão de ponto-flutuante. Mais tarde, em 1979, J. M. Varah, retornou com idéias similares em [45], motivado pela investigação de condicionamento da equação de

Silvester $AX - XB = C$. Varah queria saber em quais condições os espectros de duas matrizes A e B são ditos bem separados. Ele definiu a 2-norma ϵ -pseudo-espectro em termos do menor valor singular $\sigma_{\min}(A - \lambda I)$ com o nome de ϵ -espectro e utilizou a notação $S_\epsilon(A)$. Varah notou que existe uma definição equivalente para matrizes perturbadas e percebeu que, para uma matriz que não é normal, o pseudo-espectro pode ser muito diferente do espectro.

Em 1975 H.J. Landau, do laboratório AT&T Bell, publicou um artigo, '*On Szegő's Eigenvalue Distribution Theorem and Non-Hermitian Kernels*' [26], que introduziu ϵ -pseudo autovalores com o nome de ϵ -autovalor aproximado. Landau aplicou este conceito para a teoria de matrizes Toeplitz e operadores ortogonais associados.

Definição 19 λ é um autovalor ϵ -aproximado de A , se existe φ , com $\|\varphi\| = 1$, tal que $\|A\varphi - \lambda\varphi\| \leq \epsilon$. Chamamos φ uma autofunção ϵ -aproximada correspondente a λ .

Na década de 80, em Novosibirsk, S. K. Godunov e seu grupo conduziram pesquisas sobre pseudo-espectro. Godunov, que com Ryabenkii e outros, já davam significantes contribuições desde os anos 60 com estudos de como a não normalidade afeta a estabilidade numérica de operadores diferenciais discretizados. De fato, em sua monografia, Godunov e Ruabenkii, em 1962, introduziram o *espectro de uma família de operadores* $\{R_h\}$ [16], indexado por um parâmetro de malha h . Um ponto $zI \in \mathbb{C}$ está neste conjunto se, para todo $\epsilon > 0$, z é um ϵ -pseudo autovalor de R_h para todo h suficientemente pequeno. Num trabalho posterior [17], nos anos 80, envolveram explicitamente o pseudo-espectro, em um trabalho direcionado para análise de 'garantia de precisão' das soluções de sistemas de equações lineares em espaços euclidianos, em álgebra linear computacional. De acordo com Malyshev e Kostin [17], esse trabalho começou em torno de 1982. O grupo Novosibirsk define o *epsilon-espectro* por $\sigma_\epsilon(A) = \{z \in \mathbb{C} : \|(zI - A)^{-1}\| \geq (\epsilon\|A\|)^{-1}\}$. Em dois artigos, [15] e [23], o grupo, calculou gráficos do pseudo-espectro que chamaram de 'Retrato espectral de matrizes' em 1985. No artigo de Kostin e Razzakov [24] aparecem duas figuras de pseudo-espectro e posteriormente num trabalho deste grupo aparece no livro de Godunov [18], com uma figura colorida do pseudo-espectro na capa.

Um dos últimos papers do analista numérico J. H. Wilkinson, '*Sensitivity Eigenvalues II*' (1986) [47], definiu o ϵ -pseudoespectro para uma norma de matriz arbitrária $\|\cdot\|$ induzida pela norma de vetor. O conjunto foi denotado por $D(\eta)$ e descrito por Wilkinson em termos de perturbações de matrizes ou a norma do resolvente. Ele discutiu várias aplicações e exemplos em pequenas dimensões, e mencionou no fim a extensão para problemas de autovalores generalizados. Segundo Trefethen [12], Wilkinson levou trinta anos para ter a idéia de pseudoespectro, apesar do seu interesse em problemas de autovalores e análise de erros.

O pseudoespectro foi investigado em diversos papers por J. W. Demmel [11] em meados dos anos 80, aparecendo com as notações de $S(A, \epsilon)$ e $\sigma(\epsilon, A)$. E em um de seus papers aparece o primeiro gráfico feito em computador de um pseudo-espectro que é conhecido hoje. O ponto de partida de Demmel era um problema discutido

em sua tese em 1983: criar uma teoria análoga à da forma canônica de Jordan, que é algo bastante robusto, para dar significado a presença de erros de arredondamento e outras perturbações.

No início dos anos 80, D. Hinrichsen e A. J. Pritchard escreveram inúmeros artigos sobre raio de estabilidade de uma matriz, ou seja, a distância de um conjunto instável de matrizes. Em 1992 no paper [19] eles introduziram o termo conjunto valor espectral e a notação $\sigma(A, \rho)$ para denotar a estrutura real do ϵ -pseudo espectro de uma matriz não normal. Outro artigo de Hinrichsen e Kelb em 1993 [20] estendeu essas idéias para perturbações complexas e também para perturbações estruturadas mais gerais. Neste trabalho apresentaram exemplos de valores espectrais de várias matrizes ilustrados por gráficos feitos com a superposição dos autovalores, com perturbações aleatórias.

Outro tipo de trabalho relacionado ao pseudo espectro foi desenvolvido por F. Chatelin, e seus colegas na França. Iniciando em 1980, este grupo investigou questões de condicionamento, estabilidade, e aritmética de ponto flutuante com a ajuda de perturbações aleatórias [9, 8]. Perturbando um problema aleatoriamente, eles indicaram que é possível descrever as propriedades de um problema não perturbado. Embora o pseudo espectro não tivesse sido definido explicitamente nos artigos [9, 8], pelo menos eles tinham uma idéia intuitiva.

A primeira publicação de Trefethen mencionando o pseudo espectro foi em 1990 [38, 31], com o nome de ϵ -autovalor aproximado. Este era uma consequência de um trabalho escrito em 1987 por Trefethen e Trummer [36], que encontrou autovalores que eram extremamente sensíveis a perturbações mas não perceberam sua importância. Um colaborador crucial neste trabalho do Trefethen foi o estudante Satish Reddy, que iniciou seu trabalho com pseudo espectro em 1988 e fez muitas contribuições depois disso. Reddy trabalhou anteriormente esses tópicos em sua tese em 1991 no MIT [32]. Em 1992, Trefethen no artigo 'Pseudospectra of Matrices' [40], é apresentado uma idéia de pseudo espectro e exibido treze exemplos. Depois desse artigo a idéia começou a ser conhecida inteiramente. Um trabalho posterior 'Pseudospectra of linear Operators' trouxe dez exemplos envolvendo operadores em espaços de dimensão infinita [42].

Os artigos de Demmel e Wilkinson citam um ao outro, e ambos citam Varah [45]. Fora esses casos, nenhum dos artigos citados antes de 1990 citam uns aos outros. Isto sugere que o pseudo espectro foi inventado em cinco fases:

J. M. Varah	1967	r-autovalor aproximado
	1979	ϵ -espectro
H. J. Landau	1975	ϵ -autovalor aproximado
S. K. Godunov et al.	1982	retrato espectral
L.N. Trefethen	1990	ϵ -pseudo espectro
D. Hinrichsen e A. J. Pritchard	1992	conjunto valor espectral

Trefethen [12] esclarece que não devemos confiar nesta tabela completamente. Pois é possível que Godunov ou Wilkinson tenham pensado sobre pseudo espectro antes dos anos 60, e certamente, von Neumann pode ter pensado sobre isto nos anos 30. Ou outros tais como Dunford e Schwartz, Gohberg, Halmos, Kato, Keldysch,

ou Kreiss.

2.2 Porque estudar pseudo espectro?

Na seção 1.4 ilustramos um método para solução numérica de equações diferenciais parciais, o método das linhas, que consiste em aproximar a variável espacial por algum método numérico, transformando a (EDP) num sistema de equações diferenciais ordinárias que é então resolvido por algum método para resolução de sistemas de (EDO's). Para solução numérica deste sistema de (EDO's) um aspecto fundamental é a escolha do tamanho de passo Δt , de modo que a propagação de erros de entrada, como por exemplo na condição inicial, seja evitada. Ou seja, gostaríamos de escolher um tamanho de passo que garanta a *estabilidade* da solução numérica do problema discretizado completamente e o pseudo espectro está diretamente envolvido com esta questão.

Na seção 2.2.1 apresentamos a análise de estabilidade dos esquemas de aproximação para sistemas de EDO's através do conceito de região de estabilidade, focando em particular, as regiões de estabilidade para os esquemas Runge-Kutta (RK). O método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) será utilizado nos exemplos numéricos que aparecem no capítulo 5. Esses conceitos são essenciais para a análise de estabilidade dos métodos das linhas pseudo espectrais. A seção 2.2.2 contém uma revisão de conceitos que servem como suporte para uma discussão sobre duas noções de estabilidade frequentemente exploradas em conexão com o método das linhas: estabilidade segundo Lax, e estabilidade segundo autovalores. Aqui o teorema da Equivalência de Lax é usado como ferramenta para assegurar a convergência de esquemas de aproximação Lax-estáveis.

Além disso, mostraremos que a estabilidade segundo autovalores pode implicar em conclusões erradas a respeito da escolha do tamanho de passo Δt , motivando com isso o estudo de pseudo espectro, o qual é apresentado na seção 2.3. Em particular, mostramos que o pseudo espectro ilustra o grau de não normalidade do operador e contorna as limitações da análise espectral.

2.2.1 Regiões de estabilidade

Considere o seguinte problema de valor inicial (PVI)

$$\begin{cases} u_t = f(t, u(t)), & 0 \leq t \leq T, \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

Um dos aspectos cruciais na construção de soluções numéricas é a escolha do tamanho do passo Δt que evite a propagação de erros dos dados iniciais, isto é, a escolha de Δt que garanta a estabilidade das soluções numéricas [2].

Uma maneira de analisar a estabilidade de um método numérico consiste em estabelecer regiões do plano complexo conforme a definição abaixo

Definição 20 *Considere um método numérico de aproximação para problemas de valor inicial, do tipo (2.1), com tamanho de passo Δt .*

i. Um método de aproximação é **absolutamente estável** num ponto $\lambda\Delta t$ do plano complexo se a seqüência $\{u_k\}$ gerada pelo método aplicado à equação de referência

$$u_t = \lambda u \quad (2.2)$$

com tamanho de passo Δt for limitada e $u_k \rightarrow 0$ quando $t_k \rightarrow \infty$.

ii. A **região de estabilidade absoluta** é o conjunto de pontos $\lambda\Delta t \in \mathbb{C}$ para os quais o método é absolutamente estável.

A equação de referência (2.2), é útil na análise da estabilidade do problema (2.1), porque expandindo $u_t = f(t, u(t))$ em série de Taylor em torno de (t_0, u_0) obtemos

$$v_t \approx \lambda v + g(t), \quad (2.3)$$

na qual

$$v(t) = u(t) - u(t_0), \quad \lambda = f_u(t_0, u_0), \quad g(t) = f_t(t_0, u_0)(t - t_0).$$

O termo $g(t)$ é eliminado quando efetuamos a diferença entre a solução do problema original e a do problema com uma perturbação, nos levando à equação de referência (2.2).

Observação 5 Quando o PVI (2.1) envolve um sistema de equações, o parâmetro $f_u(t_0, u_0)$ torna-se a matriz Jacobiana da função vetorial $f(t, u)$ no ponto (t_0, u_0) , $Jf(t_0, u_0)$, e a estabilidade do método depende das propriedades espectrais de $Jf(t_0, u_0)$. Veja, por exemplo, [12].

Regiões de estabilidade dos métodos de Runge-Kutta

A seguir apresentamos as regiões de estabilidade dos métodos Runge-Kutta de primeira, segunda, terceira e quarta ordens, determinadas através da definição 2.1. Como motivação, iniciamos com o método de Euler (RK1). A região de estabilidade absoluta do método runge Kutta de orde quatro será utilizada no capítulo 5. Escolhemos este método pela alta precisão da solução que ele proporciona, equivalente aos obtidos com série de Taylor, com a vantagem de não precisarmos das derivadas da função $f(t, u(t))$. Os métodos Runge-Kutta (RK) são da forma:

$$u_{k+1} = u_k + \Delta t \Phi(t_k, u_k, \Delta t) \quad (2.4)$$

com Φ representando uma aproximação para $f(t, u(t))$ no intervalo $[t_k, t_{k+1}]$. Os esquemas de aproximação de Runge-Kutta de primeira ordem (Euler), segunda, terceira e quarta ordens são respectivamente, (2.5), (2.6), (2.7) e (2.8):

Runge-Kutta de primeira ordem (RK1):

$$u_{k+1} = u_k + \Delta t(f(t_k, u_k)), \quad \text{para cada } k = 0, 1, \dots \quad (2.5)$$

Runge-Kutta de segunda ordem (RK2):

$$\begin{cases} u_{k+1} = u_k + (\Delta t/2)[f(t_k, u_k) + f(t_k + \Delta t, u_k + \Delta t f(t_k, u_k))], \\ \text{para cada } k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2.6)$$

Runge-Kutta de terceira ordem (RK3):

$$\begin{cases} K_1 = f(t_k, u_k), \\ K_2 = f(t_k + \Delta t/2, u_k + (\Delta t/2)K_1), \\ K_3 = f(t_k + \Delta t, u_k + 2\Delta t K_2 - \Delta t K_1), \\ u_{k+1} = u_k + (\Delta t/6)[K_1 + 4K_2 + K_3], \text{ para cada } k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2.7)$$

Runge-Kutta de quarta ordem (RK4):

$$\begin{cases} K_1 = f(t_k, u_k), \\ K_2 = f(t_k + \Delta t/2, u_k + (\Delta t/2)K_1), \\ K_3 = f(t_k + \Delta t/2, u_k + (\Delta t/2)K_2), \\ K_4 = f(t_k + \Delta t, u_k + \Delta t K_3) \\ u_{k+1} = u_k + (\Delta t/6)[K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4], \\ \text{para cada } k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2.8)$$

A região de estabilidade do método de Euler (RK1), por exemplo, é obtida quando resolvemos a equação de referência 2.2 através do esquema 2.5. Assim temos

$$\begin{aligned} u_{k+1} &= u_k + \Delta t f(t_k, u(t_k)) \\ &= u_k + \Delta t (\lambda u_k) \\ &= (1 + \lambda \Delta t) u_k. \end{aligned}$$

Analogamente, para a segunda e terceira iteração teremos, respectivamente, $u_{k+2} = (1 + \lambda \Delta t)^2 u_k$ e $u_{k+3} = (1 + \lambda \Delta t)^3 u_k$. Portanto podemos concluir que na n -ésima iteração teremos $u_{k+n} = (1 + \lambda \Delta t)^n u_k$. Assim para que $\{u_k\}$ seja limitada é necessário que $|1 + \lambda \Delta t| \leq 1$. De fato, considere $\lambda \in \mathbb{C}$

$$|1 + \lambda \Delta t| \leq 1$$

e defina $\lambda = a + ib$ assim

$$|1 + (a + ib)\Delta t| \leq 1$$

calculando o módulo e elevando ambos os lados da desigualdade ao quadrado temos

$$(1 + a\Delta t)^2 + (b\Delta t)^2 \leq 1$$

considere $x = a\Delta t$ e $y = b\Delta t$, então

$$(1 + x)^2 + y^2 \leq 1$$

portanto a região de estabilidade do método de Euler, consiste num disco de centro em $(-1, 0)$ e raio 1. A análise de região de estabilidade dos métodos RK de ordem

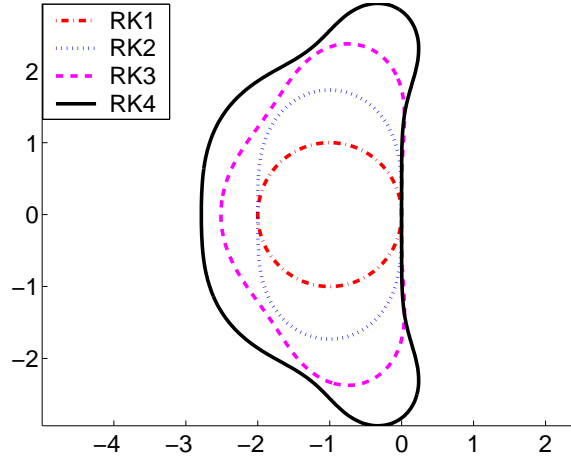


Figura 2.1: Regiões de estabilidade dos métodos Runge-Kutta de ordens um, dois, três e quatro

2, 3 e 4 são feitos de forma análoga ao feito com o método de Euler. As regiões de estabilidade dos métodos de Runge-Kutta são ilustradas na Figura 2.1

Para o problema (2.1) linear com coeficientes constantes, $f(t, u) = L u$, em que $L \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e independe de t , as aproximações RK podem ser descritas como em (2.5, 2.6, 2.7, 2.8), respectivamente. Portanto, as regiões de estabilidade dos métodos RK para problemas da forma $U_t = L_N U$, lineares com coeficientes constantes, também são obtidos através da definição 2.2. De fato para o **método de Euler** temos

$$U_{k+1} = U_k + \Delta t L_N U_k = (I + \Delta t L_N) U_k = (I + \Delta t L_N)^k U_0$$

Para o método **Runge-Kutta de segunda ordem** temos

$$\begin{aligned} U_{k+1} &= [I + \Delta t L_N + \frac{(\Delta t)^2}{2} L_N^2] U_k \\ &= [I + \Delta t L_N + \frac{(\Delta t)^2}{2} L_N^2]^k U_0 \end{aligned}$$

Runge-Kutta de terceira ordem

$$U_{k+1} = [I + \Delta t L_N + \frac{(\Delta t)^2}{2} L_N^2 + \frac{(\Delta t)^3}{3!} L_N^3]^k U_0$$

Runge-Kutta de quarta ordem

$$U_{k+1} = [I + \Delta t L_N + \frac{(\Delta t)^2}{2} L_N^2 + \frac{(\Delta t)^3}{3!} L_N^3 + \frac{(\Delta t)^4}{4!} L_N^4]^k U_0$$

Assim, se $P_S(\Delta t L_N) = I + \Delta t L_N + \frac{(\Delta t)^2}{2} L_N^2 + \dots + \frac{(\Delta t)^{S-1}}{(S-1)!} L_N^{S-1} + \frac{(\Delta t)^S}{S!} L_N^S$, em que S indica a ordem do método teremos, já que estamos interessados na estabilidade das aproximações numéricas dos métodos RK, devemos impor que $\|P_S(\Delta t L_N)\| \leq 1$, desta forma a região de estabilidade dos métodos Runge-Kutta de ordem S é dada por

$$S = \{z \in \mathbb{C} \text{ tal que } |P_S(z)| \leq 1\}$$

2.2.2 Estabilidade Lax e Estabilidade segundo autovalores

Nesta seção vamos explorar duas noções de estabilidades numéricas para EDP's: estabilidade segundo auto valores e estabilidade segundo Lax. Para isso, considere \mathcal{H} um espaço de Hilbert, com uma norma $\|\cdot\|$, convenientemente definida, e o problema de valor inicial,

$$\begin{cases} u_t = \mathcal{A}u, & 0 \leq t \leq T, \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (2.9)$$

com $\mathcal{A} : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \longrightarrow \mathcal{H}$, um operador diferencial que não depende de t e que pode incorporar condições de fronteira, $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ um subespaço denso em Ω e u uma função que também depende das variáveis espaciais.

A estabilidade e a consistência de um problema bem posto são as noções chave para a convergência, pois de acordo com o teorema de Lax, teorema 5 da seção 1.6, um método numérico consistente será convergente se e somente se é estável.

Definição 21 *Considere $S_{\Delta t, N}$ um esquema de aproximação numérica, em que N representa os pontos da malha deste esquema numérico e Δt o tamanho de passo, para o problema (2.9):*

i. $S_{\Delta t, N}$ é consistente se para qualquer u suficientemente suave

$$\|(S_{\Delta t, N} - \mathcal{A})u\| \longrightarrow 0, \text{ quando } \Delta t \longrightarrow 0 \text{ e } N \rightarrow \infty,$$

para cada (x, t) .

ii. $S_{\Delta t, N}$ é convergente se

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0, k\Delta t = t} \|(S_{\Delta t, N})^k u_0 - u(t)\| = 0$$

para qualquer $t \in [0, T]$, onde $u(t)$ é a solução exata do problema de valor inicial (2.9) no instante de tempo t para algum dado inicial u_0 .

A definição 22 apresenta as duas noções de estabilidade que discutiremos ao longo deste capítulo. O motivo dessa escolha deve-se ao fato destas noções de estabilidade aparecerem freqüentemente vinculadas ao uso do método das linhas.

Definição 22 *Seja $S_{\Delta t, N}$ um esquema de aproximação numérica para o problema (2.9):*

i. $S_{\Delta t, N}$ é estável segundo autovalores se para alguma constante $C > 0$, N e Δt fixos, $\|(S_{\Delta t, N})^k\| \leq C$ para todo k .

ii. $S_{\Delta t, N}$ é Lax-estável se para alguma constante $C > 0$, $\|(S_{\Delta t, N})^k\| \leq C$ para todo N e k tal que $k\Delta t \leq T$ e Δt suficientemente pequeno.

Podemos observar na definição acima que a Lax-estabilidade implica em um limite uniforme de uma família de matrizes. Na estabilidade segundo autovalores a estabilidade da solução numérica depende de um limite para a potência de uma única matriz respectiva a uma malha espacial fixa.

Vamos nos concentrar agora na estabilidade segundo autovalores. Em geral a análise segundo autovalores é feita verificando a condição de Von Neumann, ou seja, $r(S_{\Delta t, N}) \leq 1$, em que $r(S_{\Delta t, N})$ indica o raio espectral de $S_{\Delta t, N}$. Mas esse tipo de análise não se aplica a aproximações pseudo espectrais, que implicam em matrizes e operadores altamente não normais pois, em geral, matrizes com autovalores sensíveis a pequenas perturbações, tendem a não ter potências limitadas. Por exemplo, considere as matrizes

$$A = \begin{bmatrix} 0.7 & 1 \\ 0 & 0.6 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 0.7 & 0 \\ 0 & 0.6 \end{bmatrix}$$

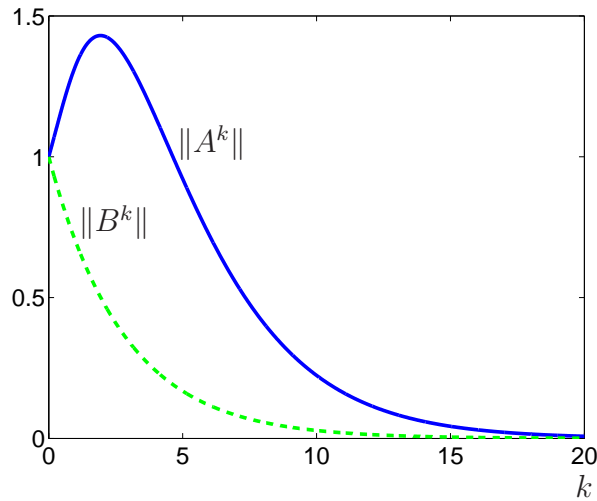


Figura 2.2: $\|A^k\|$ linha contínua e $\|B^k\|$ linha tracejada.

Podemos notar na figura 2.2 que, apesar de A e B possuírem o mesmo espectro e conseqüentemente o mesmo raio espectral, o comportamento da norma de suas potências são completamente diferentes.

Portanto, na prática, o critério de estabilidade segundo autovalores, para aproximações espectrais associadas ao método das linhas recomenda a escolha do tamanho do passo Δt conforme o quadro abaixo.

Critério de Estabilidade Segundo Autovalores para o Método das Linhas

Uma condição necessária para a estabilidade numérica do método das linhas é que o espectro de $\Delta t L_N$ esteja contido na região de estabilidade do esquema de aproximação no tempo para $\Delta t \approx 0$.

Na prática a estabilidade segundo Lax é verificada escolhendo Δt pela regra

Estabilidade Numérica do Método das Linhas

Uma condição para a estabilidade numérica do método das linhas é que os ϵ -pseudo espectros de $\Delta t L_N$ esteja contido na região de estabilidade do esquema de aproximação no tempo para $\epsilon, \Delta t \rightarrow 0$.

Observação 6 *Os aspectos teóricos que asseguram os critérios práticos de estabilidade, segundo autovalores e segundo Lax, necessitam de um estudo especial e fogem do escopo deste trabalho. Informações teóricas sobre o assunto podem ser encontradas em Atkinson [2], Trefethen [37, 39].*

Observe que, na prática, o critério de estabilidade segundo Lax utiliza o ϵ -pseudo espectro ao invés do espectro o conceito de ϵ -pseudo espectro é discutido na seção 2.3. Por enquanto, queremos apenas justificar a necessidade de se explorar esse assunto. No exemplo 10, utilizamos os dois critérios de estabilidade, e mostramos que o critério segundo Lax garante a estabilidade do método das linhas enquanto a estabilidade segundo autovalores nos leva a uma escolha incorreta do tamanho do passo Δt . A solução numérica obtida através do método das linhas, com a escolha de Δt segundo o critério de autovalores, como pode ser visto na figura 2.3, apresenta instabilidades ao longo do tempo.

Exemplo 10 *Considere o problema*

$$\begin{cases} u_t(x, t) = u_x(x, t), & x \in (-1, 1), \quad t \geq 0 \\ u(x, 0) = \begin{cases} \cos^2(\pi(x - 0.25)), & \text{se } |x - 0.25| \leq 0.5 \\ 0, & \text{se } |x - 0.25| > 0.5 \end{cases} \\ u(1, t) = 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

O método das linhas é aplicado a (2.10) com o esquema *upwind* para a aproximação na variável espacial x , o qual resulta no sistema semi discreto,

$$\frac{d}{dt} u_j(t) = \frac{u_{j+1}(t) - u_j(t)}{\Delta x} \implies \bar{u}_t = L_N \bar{u}, \quad (2.11)$$

$$\text{com } \bar{u} = \begin{bmatrix} u_0(t) \\ u_1(t) \\ \vdots \\ u_{N-1}(t) \end{bmatrix} \text{ e } L_N = \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 \\ & & & & & -1 \end{bmatrix}.$$

Para o sistema de EDO's (2.11), utilizamos o método de Euler (veja a seção 2.5), para a aproximação no tempo. Obtendo assim o problema completamente discreto,

$$u_j^{k+1} = u_j^k + \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^k - u_j^k), \quad (2.12)$$

com u_j^k a aproximação numérica de $u(x, t)$ no ponto x_j e no instante de tempo k .

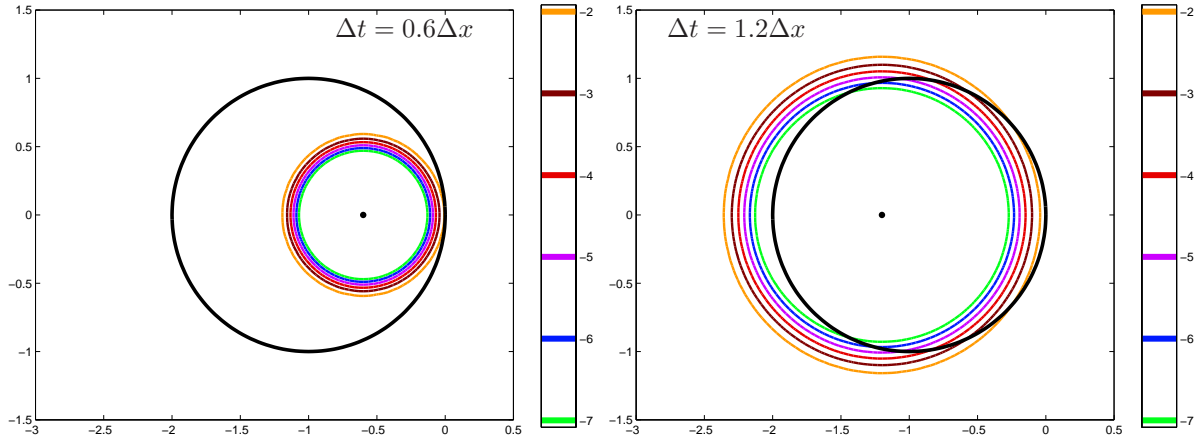


Figura 2.3: O espectro da matriz $\Delta t L_N$ está representado por (\bullet) . Região de estabilidade do Método RK1 (círculo com centro no ponto $(-1, 0)$ e raio 1). Os demais círculos representam o ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t L_N$, para os valores de $\epsilon = 10^{-2}, 10^{-3}, \dots, 10^{-7}$

Na forma matriz - vetor, a equação (2.12) torna-se,

$$v^{k+1} = S_{\Delta t, N} v^k, \quad \text{com } v = \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{bmatrix}, \quad S_{\Delta t, N} = \begin{bmatrix} 1 - \sigma & \sigma & & & \\ & 1 - \sigma & \sigma & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \sigma & \\ & & & & 1 - \sigma \end{bmatrix},$$

$$\text{e } \sigma = \frac{\Delta t}{\Delta x}.$$

escolhemos, para resolver este problema, dois valores de σ , $\sigma = 0.6$ e $\sigma = 1.2$, portanto $\Delta t = 0.6\Delta x$ e $\Delta t = 1.2\Delta x$. A estabilidade segundo autovalores é garantida para as duas escolhas de Δt , uma vez que, o espectro, indicado na figura 2.3 por um ponto, está dentro da região de estabilidade absoluta do método RK1, círculo de centro em $(-1, 0)$ e raio 1. A estabilidade segundo Lax é garantida apenas para $\Delta t = 0.6\Delta x$, uma vez que, o ϵ -pseudo espectro, ilustrado na figura 2.3 pelos outros círculos, estão dentro da região de estabilidade absoluta do método RK1.

A solução do problema 2.10 é da forma $f(x+t)$ em que f é a função definida pela condição inicial, ou seja, uma onda que se desloca ao longo do tempo. A figura 2.4, mostra o problema 2.10 resolvido numericamente utilizando os dois critérios de estabilidade. À direita utilizamos o critério de estabilidade segundo autovalores, à esquerda o critério de estabilidade segundo Lax. Podemos observar que a solução numérica, em que utilizamos o critério segundo autovalores, apresenta instabilidades a partir de certo t . A solução numérica utilizando o critério de estabilidade segundo Lax permanece estável para todo t . Concluimos portanto que o pseudo espectro tem papel fundamental na garantia de estabilidade do método das linhas e por esse motivo se faz necessário o estudo deste assunto.

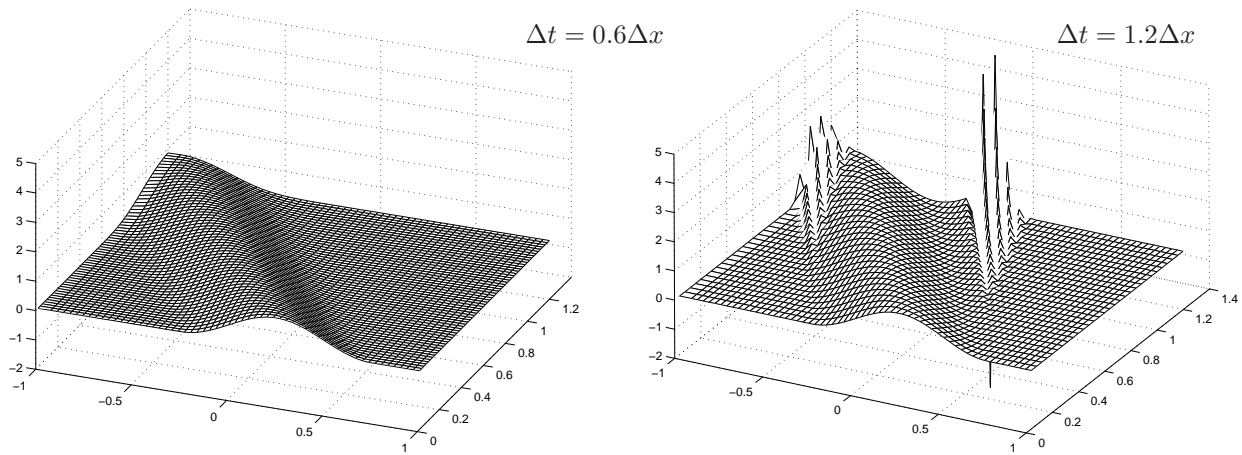


Figura 2.4: Soluções Numéricas do problema (2.10) com $\Delta t = 0.6\Delta x$ e $\Delta t = 1.2\Delta x$.

2.3 Pseudo Espectro de um operador

Através da análise do pseudo espectro de um operador podemos indicar o grau de não normalidade do mesmo: quanto mais amplo é o seu pseudo espectro, mais não normal é o operador [32, 42]. Veremos que a não normalidade de um operador governa a estabilidade das soluções numéricas dos problemas de valor inicial tipo (2.1) e justifica a alta sensibilidade de problemas que envolvem um operador altamente não normal.

Antes de iniciarmos este capítulo, vamos indicar as notações que estamos utilizando. Denotamos por $\mathcal{B}(X)$ o conjunto de operadores limitados em X , $\mathcal{C}(X)$ o conjunto de operadores fechados em X , $\mathcal{D}(A)$ indica o domínio de A que é densamente definido em X . Quando nos referimos ao operador $(z - A)^{-1}$ queremos nos referir a $(zI - A)^{-1}$ em que I é o operador identidade.

Teorema 6 *Considere $A \in \Omega$, um operador linear fechado em Ω . Então para qualquer $E \in \mathcal{B}$ com $\|E\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$, $A + E$ tem uma inversa limitada $(A + E)^{-1}$ satisfazendo*

$$\|(A + E)^{-1}\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|E\|\|A^{-1}\|}$$

Reciprocamente, para qualquer $\mu > \frac{1}{\|A^{-1}\|}$, existe $E \in \mathcal{B}(X)$ com $\|E\| < \mu$ tal que $(A + E)u = 0$ para algum $u \in X$ não nulo

A demonstração deste teorema pode ser vista em [12]. A teoria de resolvente, espectro, e pseudo espectro é derivado pela aplicação do Teorema 6 no operador deslocado $z - A$, em que z é um número complexo. Ou seja

Definição 23 *Dado $\mathcal{A} \in \mathcal{C}(\mathcal{X})$ e $z \in \mathbb{C}$ temos*

- i. o resolvente de \mathcal{A} em z é o operador $(z - \mathcal{A})^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, se este existe.*

- ii. O conjunto resolvente $\rho(\mathcal{A})$ é o conjunto de números $z \in \mathbb{C}$ para os quais $(z - \mathcal{A})^{-1}$ existe $(z - \mathcal{A})^{-1}$ é limitado e densamente definido em \mathcal{X} .

O complemento de $\rho(\mathcal{A})$ no plano complexo é o espectro de \mathcal{A} , como já foi mencionado no capítulo 1, e denotamos por $\sigma(\mathcal{A})$.

Do teorema 6, fazendo algumas considerações sobre a matriz E , temos que para qualquer $A \in \mathcal{C}(X)$ e $z \in \rho(A)$, temos que

$$\|(z - A)^{-1}\| \geq \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(A))} \quad (2.13)$$

Assim quando $\|(z - A)^{-1}\|$ aproxima-se de ∞ quando z se aproxima do espectro. Por convenção se $z \in \sigma(A)$ então $\|(z - A)^{-1}\| = \infty$. Assim podemos usar a notação $\|(z - A)^{-1}\|$ mesmo que $(z - A)^{-1}$ não exista.

Teorema 7 Dado $A \in \mathcal{C}(X)$, e com $\|(z - A)^{-1}\|$ definido como ∞ para $z \in \sigma(A)$, a norma do resolvente $\|(z - A)^{-1}\|$ é uma função de $z \in \mathcal{C}$ para $(0, \infty]$ com as seguintes propriedades:

- i. É contínua, não limitada e toma o valor ∞ exatamente em $\sigma(\mathcal{A})$.
- ii. Para $z \notin \sigma(\mathcal{A})$ então (2.13) é válida.
- iii. Se $z \notin \sigma(\mathcal{A})$ então $z \notin \sigma(\mathcal{A} + E)$ para algum $E \in B(\mathcal{X})$ que satisfaz $\|E\| \leq 1/\|(z - \mathcal{A})^{-1}\|$. Reciprocamente, para algum $\epsilon > \|(z - \mathcal{A})^{-1}\|^{-1}$ existe $E \in B(\mathcal{X})$ com $\|E\| < \epsilon$ tal que $(\mathcal{A} + E)u = zu$ para algum $u \in \mathcal{X}$ não nulo.

O que o teorema 7 quer dizer é que se $z \notin \sigma(A)$ então z não irá pertencer $\sigma(A + E)$ para $\|E\|$ suficientemente pequeno. Desta forma, uma pequena perturbação do operador A pode aumentar ou diminuir apenas muito pouco o espectro de A . Agora, depois de todos esses resultados preliminares, temos condições de definir o pseudo espectro de um operador.

Definição 24 Seja $\mathcal{A} \in \mathcal{C}(\mathcal{X})$ e $\epsilon > 0$ arbitrário. O ϵ -pseudo espectro de \mathcal{A} , $\sigma_\epsilon(\mathcal{A})$, é o conjunto dos números $z \in \mathcal{C}$, definido equivalentemente por uma das seguintes condições:

- i. $\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| \geq \epsilon^{-1}$.
- ii. $z \in \sigma(\mathcal{A} + E)$ para algum $E \in B(\mathcal{X})$ com $\|E\| < \epsilon$.
- iii. $z \in \sigma(\mathcal{A})$ ou $\|(z - \mathcal{A})u\| < \epsilon$ para algum $u \in D(\mathcal{A})$ com $\|u\| = 1$.

Se $\|(z - \mathcal{A})u\| < \epsilon$ como em (iii.), então z é um ϵ -pseudo autovalor de \mathcal{A} e u o ϵ -pseudo autovetor (ou ϵ -pseudo autofunção) correspondente.

Observação 7 Na definição acima caso u seja uma auto função então z é um autovalor. Isso não afeta a definição acima pois os valores espectrais também estão no ϵ -pseudo espectro.

Traduzindo em palavras o que esta definição diz é que um elemento pertence ao pseudo espectro quando a norma do resolvente é grande, indicando assim, que este elemento é quase um valor espectral, ou equivalentemente como em (ii) é o espectro do operador levemente perturbado.

Da definição 24, para um dado $\mathcal{A} \in \mathcal{C}(\mathcal{X})$, o pseudo espectro $\{\sigma(A)\}_{\epsilon>0}$ tem as seguintes propriedades :

- i Ele pode ser definido equivalentemente por qualquer uma das condições que aparecem na definição 24
- ii Cada $\sigma_\epsilon(A)$ é um subconjunto não vazio e aberto de \mathbb{C}
- iii Para qualquer ϵ o $\sigma_\epsilon(A)$ tem uma intersecção não vazia com $\sigma(A)$
- iv $\bigcap_{\epsilon>0} \sigma_\epsilon(A) = \sigma(A)$.

A definição de pseudo espectro para matrizes é similar a definição 24. Suponha que A é uma matriz quadrada e $\|\cdot\|$ uma norma matricial convenientemente definida. Para cada $\epsilon > 0$, o ϵ -pseudo espectro de A é o subconjunto do plano complexo,

$$\sigma_\epsilon(A) = \{z \in \mathbb{C} : \|(zI - A)^{-1}\| \geq \epsilon^{-1}\},$$

com I representando a matriz identidade. Uma maneira equivalente de definir $\sigma_\epsilon(A)$, quando A é uma matriz, é:

$$\sigma_\epsilon(A) = \{z \in \mathbb{C} : \sigma_{\min}(zI - A) \leq \epsilon\} \quad (2.14)$$

A equação 2.14 é muito útil para aproximar o ϵ -pseudo espectro de uma matriz $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Basta calcular o menor valor singular de $(z - A)$, para cada $z \in \mathbb{C}$ em alguma malha escolhida numa região do plano complexo, em seguida plotando as curvas de nível do conjunto $\{z \in \mathbb{C} : \sigma_{\min}(zI - A) = \epsilon\}$ através do comando *contour* do **Matlab**. No caso de um operador podemos discretiza-lo, por algum método numérico, e em seguida calculamos o pseudo espectro da matriz resultante da discretização deste operador. Quanto mais preciso o método de discretização usado para aproximar o operador mais próximo do pseudo espectro do operador será o pseudo espectro da matriz de aproximação. No capítulo 4 faremos a aproximação do operador convecção difusão por vários métodos de discretização.

O pseudo espectro de um operador nos mostra o quanto é não normal ou normal esse operador. A observação abaixo nos indica quais características devemos observar para reconhecermos o grau de não normalidade de um dado operador.

Observação 8

- i. Se A é uma matriz ou operador normal, o ϵ -pseudo espectro $\sigma_\epsilon(A)$ é formado pela união de bolas de raio ϵ centradas nos pontos do espectro de A , o que implica que os autovalores de A são insensíveis a pequenas perturbações.
- ii. Se A está longe da normalidade, $\sigma_\epsilon(A)$ pode ser muito grande e ter um contorno muito diferente: quanto maior o pseudo espectro, maior a não normalidade do operador [12].

O exemplo abaixo ilustra o pseudo espectro de dois operadores, o primeiro altamente não normal, e o segundo quase normal.

Exemplo 11 Pseudo espectros de dois operadores diferenciais

Primeiro, considere o operador diferencial de Shorödinger agindo em $L_2(\mathbb{R})$ altamente não normal definido por,

$$\mathcal{A}u = -u_{xx} + k x^2 u, \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.15)$$

As Figuras 2.5 e 2.6, item (a) , apresentam o pseudo espectro deste operador, com $k = 1 + 3i$. Podemos ver que o seu pseudo espectro é bem amplo e não é formado de bolas em torno dos autovalores, representados pelo símbolo (\bullet) . Concluimos portanto que o operador de Shorödinger está longe de ser normal (observação 8, item ii). De fato, a norma do resolvente deste operador cresce exponencialmente a medida que ϵ aumenta. Mais detalhes sobre as características do operador de Schrödinger podem ser encontradas em [12].

O segundo, é o operador derivada de segunda ordem, definido por

$$\begin{cases} \mathcal{B}u = u_{xx} & x \in [-1, 1] \\ u(\pm 1, t) = 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

As Figuras 2.5 e 2.6, item (b), mostram que o espectro deste operador é formado por autovalores reais e o pseudo espectro é formado por bolas em torno destes autovalores. Isto indica, conforme observação 8 item i, que o operador derivada de segunda ordem é um operador quase normal.

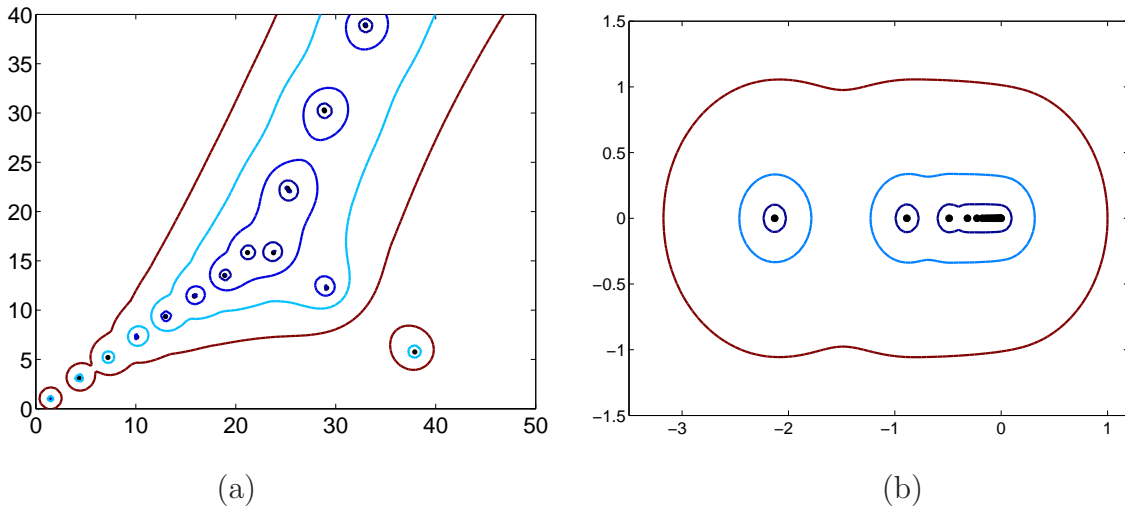


Figura 2.5: Pseudo espectro dos operadores discretos de Schorödinger e derivada de segunda ordem para $\epsilon = 10^{-\frac{k}{2}}$ com $k = -1 \dots - 8$ e $N = 40$. (a) Operador de Schorödinger (b) Operador derivada de segunda ordem.

Nas Figuras 2.5 e 2.6, item (b), as escalas dos eixos que ilustram o ϵ -pseudo espectro do operador derivada de segunda ordem estão multiplicadas por 10^4 . Na

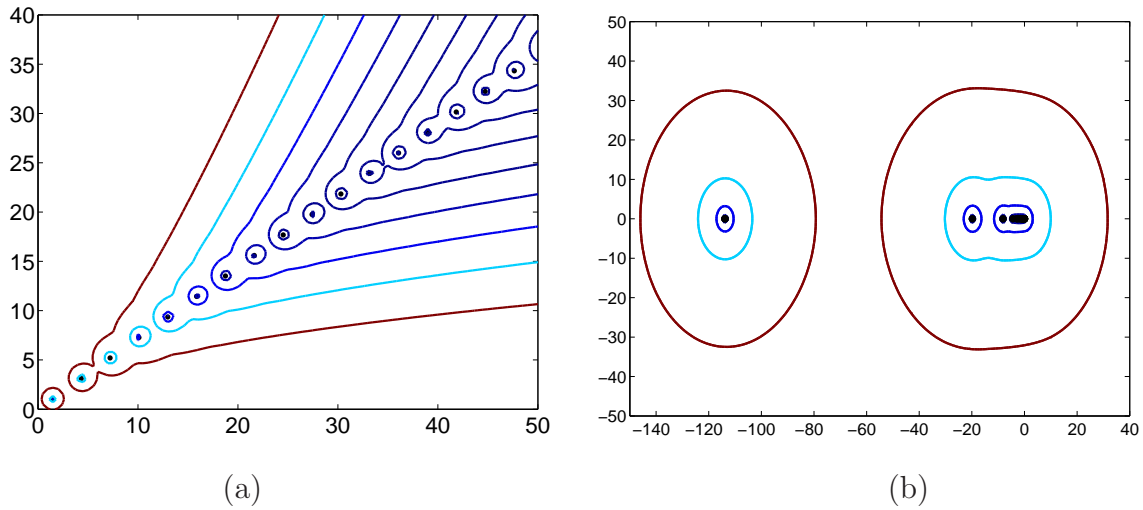


Figura 2.6: Pseudo espectro dos operadores discretos de Schorödinger e derivada de segunda ordem para $\epsilon = 10^{-\frac{k}{2}}$ com $k = -1 \dots -8$ e $N = 70$. (a) Operador de Schorödinger (b) Operador derivada de segunda ordem.

Figura 2.5 apresentamos os pseudo espectros das matrizes A_N , resultantes da discretização dos operadores de Schorödinger e derivada de segunda ordem, com $N = 40$. Na Figura 2.6 apresentamos os pseudo espectros dos operadores discretos de Schorödinger e derivada de segunda ordem com $N = 70$. Detalhes de como esta implementação é feita pode ser encontrado em Trefethen[43].

Capítulo 3

O operador convecção-difusão

Um exemplo comum de aplicações que envolvem operadores não normais aparece na combinação de fenômenos de difusão e convecção, conforme ocorre freqüentemente em mecânica dos fluidos, matemática financeira e muitas outras áreas [28]. Matematicamente, esta mistura corresponde à combinação da segunda derivada u_{xx} ou Δu com a primeira derivada u_x ou ∇u . As equações de convecção-difusão também são chamadas de equações de advecção-difusão, Fokker-Planck, e Ginzburg-Landau.

Definimos o operador convecção-difusão num espaço de Hilbert $L_2[0, d]$ para algum $d > 0$ por:

$$\mathcal{L}u = \nu u'' + cu', \quad u(0) = u(d) = 0$$

com ν e c , constantes positivas.

O domínio de definição deste operador, que denotaremos por $D(\mathcal{L})$, é o espaço de Sobolev

$$\Omega = \{u \in \mathcal{C}^1[0, d]; u'' \in L_2[0, d] \text{ e } u(0) = u(d) = 0\} \quad (3.1)$$

em que $\mathcal{C}^1[0, d]$ é o espaço das funções contínuas que possuem a primeira derivada contínua no intervalo $[0, d]$.

Note que o domínio do operador convecção-difusão é denso em $L_2[0, d]$, conforme observação 4 da seção 1.5, e portanto este operador é densamente definido em $L_2[0, d]$.

O operador convecção-difusão é não normal, pois, caso contrário, não faria sentido estudar o seu pseudo espectro porque para cada $\epsilon > 0$, o ϵ -pseudo espectro deste operador seria uma união de bolas fechadas em torno dos autovalores, conforme observação 8 item i, apresentada na seção 2.3.

Para provar que o operador convecção-difusão é não normal mostraremos que $\mathcal{L}^*\mathcal{L} \neq \mathcal{L}\mathcal{L}^*$. Para isso precisamos encontrar o seu operador adjunto. Para um operador linear $T : X \rightarrow Y$, podem existir, em geral, muitos operadores de Y^* para X^* , em que X^* e Y^* são os duais dos espaços normados X e Y respectivamente, que são adjuntos a T . Se $\overline{D(T)} = X$, então existe um único operador T^* adjunto a T [22, 7]. Sabemos que Ω é denso em $L_2[0, d]$, observação 4, então o operador adjunto ao operador convecção-difusão pode ser construído conforme Lema seguinte.

Lema 1 *O operador adjunto ao operador convecção-difusão é o operador $\mathcal{L}^* : \Omega \rightarrow L^2[0, d]$ tal que:*

$$\begin{cases} \mathcal{L}^*v = \nu v''(x) - cv'(x) \\ v(0) = v(d) = 0 \end{cases}$$

Demonstração: Primeiro vamos calcular $\langle \mathcal{L}u, v \rangle$. Então

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}u, v \rangle &= \int_0^d \mathcal{L}u(x) \overline{v(x)} dx \\ &= \int_0^d (\nu u'' + cu'(x)) \overline{v(x)} dx \\ &= \int_0^d \nu u''(x) \overline{v(x)} dx + \int_0^d cu'(x) \overline{v(x)} dx \\ &= \int_0^d u(x) (\overline{\nu v''(x)} - \overline{cv'(x)}) dx + \nu \overline{v(d)} u'(d) - \overline{v(0)} u'(0) \\ &= \int_0^d u(x) (\overline{\nu v''(x)} - \overline{cv'(x)}) dx + \nu \overline{v(d)} u'(d) - \overline{v(0)} u'(0) \\ &= \langle u, \nu v''(x) - cv'(x) \rangle + \nu \overline{v(d)} u'(d) - \overline{v(0)} u'(0). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\langle \mathcal{L}u, v \rangle = \langle u, \nu v''(x) - cv'(x) \rangle + \nu \overline{v(d)} u'(d) - \overline{v(0)} u'(0). \quad (3.2)$$

Para que tenhamos $\langle \mathcal{L}u, v \rangle = \langle u, \mathcal{L}^*v \rangle$ é suficiente que, na equação (3.2), $v(0) = v(d) = 0$ e $v \in \mathcal{C}'[0, d]$ com $v'' \in L_2[0, d]$, ou seja, $v \in \Omega$, que é o mesmo domínio do operador convecção-difusão. Assim, considerando $v \in \Omega$ temos que o operador $\mathcal{L}^* : \Omega \rightarrow L_2[0, d]$ definido por:

$$\begin{cases} \mathcal{L}^*v = \nu v''(x) - cv'(x) \\ v(0) = v(d) = 0 \end{cases}$$

é o operador adjunto ao operador convecção-difusão. ■

Usando o Lema 1 mostraremos que o operador convecção-difusão é não normal.

Teorema 8 *O operador convecção-difusão $\mathcal{L} : \Omega \rightarrow L_2[0, d]$ definido por:*

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = \nu u''(x) + cu'(x) \\ u(0) = u(d) = 0 \end{cases}$$

é não normal.

Demonstração: Se o operador convecção-difusão fosse um operador normal teríamos, para todo $u \in D(\mathcal{L}) = D(\mathcal{L}^*) = \Omega$, que

$$\|\mathcal{L}u\|^2 = \langle \mathcal{L}u, \mathcal{L}u \rangle = \langle u, \mathcal{L}^* \mathcal{L}u \rangle = \langle u, \mathcal{L} \mathcal{L}^* u \rangle = \langle \mathcal{L}^* u, \mathcal{L}^* u \rangle = \|\mathcal{L}^* u\|^2.$$

Portanto, para provar que este operador é não normal, mostraremos que existe $u \in \Omega$ tal que

$$\|\mathcal{L}u\|^2 \neq \|\mathcal{L}^* u\|^2.$$

Considere $u \in \Omega$. Calculando $\|\mathcal{L}u\|^2$ temos

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{L}u\|^2 &= \langle \mathcal{L}u, \mathcal{L}u \rangle \\
&= \int_0^d |\nu u''(x) - cu'(x)|^2 dx \\
&= \int_0^d \nu^2 |u''(x)|^2 + c^2 |u'(x)|^2 + c\nu(u''(x)\overline{u'(x)} + u'(x)\overline{u''(x)}) dx \\
&= \nu^2 \|u''(x)\|^2 + c^2 \|u'(x)\|^2 + c\nu \int_0^d (u'(x)\overline{u''(x)})' dx \\
&= \nu^2 \|u''(x)\|^2 + c^2 \|u'(x)\|^2 + c\nu(|u'(d)|^2 - |u'(0)|^2)
\end{aligned}$$

Analogamente

$$\|\mathcal{L}^*u\|^2 = \nu^2 \|u''(x)\|^2 + c^2 \|u'(x)\|^2 - c\nu(|u'(d)|^2 - |u'(0)|^2).$$

Seja $u(x) = x^2(x-d)$, note que $u \in D(\mathcal{L}) = D(\mathcal{L}^*)$ e $\|\mathcal{L}u\|^2 - \|\mathcal{L}^*u\|^2 = 2\nu cd^4$, ou seja, existe $u \in \Omega$ tal que $\|\mathcal{L}u\|^2 \neq \|\mathcal{L}^*u\|^2$. Portanto, \mathcal{L} é não normal. ■

3.1 Espectro do operador Convecção-Difusão

No teorema abaixo tratamos o espectro e as autofunções do operador convecção-difusão

Teorema 9 *O espectro de \mathcal{L} é $\sigma(\mathcal{L}) = \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$, com*

$$\lambda_n = -\frac{c^2}{4\nu} - \frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2} \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (3.3)$$

Demonstração: Primeiramente calcularemos os autovalores do operador. Com efeito, se λ é um autovalor de \mathcal{L} e u é uma autofunção associada, então $\mathcal{L}u = \lambda u$, ou $\nu u'' + cu' = \lambda u$. A equação característica associada é

$$\nu m^2 + cm - \lambda = 0$$

e suas raízes são

$$m = -\frac{c}{2\nu} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4\lambda}{\nu}}.$$

Portanto, a solução geral da equação diferencial de segunda ordem é

$$u(x) = k_1 e^{\alpha_+ x} + k_2 e^{\alpha_- x},$$

em que k_1 e k_2 são constantes arbitrárias e

$$\alpha_+ = -\frac{c}{2\nu} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4\lambda}{\nu}}, \quad \alpha_- = -\frac{c}{2\nu} - \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4\lambda}{\nu}}.$$

Para que $u(x)$ seja autofunção associada ao autovalor λ é necessário que ela satisfaça as condições de fronteira. Assim, para $x = 0$ temos:

$$u(0) = k_1 e^{\alpha_+ 0} + k_2 e^{\alpha_- 0} = 0 \implies k_1 = -k_2;$$

sem perda de generalidade consideramos $k_1 = 1$. Para $x = d$ temos:

$$u(d) = e^{\alpha_+ d} - e^{\alpha_- d} = 0 \implies e^{(\alpha_+ - \alpha_-)d} = 1.$$

Como $1 = \cos 2\pi n + i \sin 2\pi n = e^{2\pi i n}$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Da equação acima vem

$$(\alpha_+ - \alpha_-)d = 2\pi i n, \quad n \geq 0.$$

Note agora que $(\alpha_+ - \alpha_-) = \sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4\lambda}{\nu}}$. Portanto

$$\sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4\lambda}{\nu}} d = 2\pi i n$$

e isolando λ obtemos

$$\lambda = -\frac{c^2}{4\nu} - \frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2}.$$

Assim, para cada n , os autovalores do operador convecção-difusão são dados por

$$\lambda_n = -\frac{c^2}{4\nu} - \frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.4)$$

e as autofunções correspondentes são

$$u_n(x) = e^{\alpha_+ n x} - e^{\alpha_- n x}, \quad (3.5)$$

com

$$\alpha_{\pm n} = -\frac{c}{2\nu} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4\lambda_n}{\nu}}.$$

Para provar que $\sigma(\mathcal{L}) = \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$, mostraremos que qualquer escalar (real ou complexo) que não pertence ao conjunto $\bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$, pertence ao conjunto resolvente $\rho(\mathcal{L})$. Para tanto, para $\gamma \notin \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$, provaremos que $(\mathcal{L} - \gamma I)$ é bijetor, em que I é o operador identidade. Para isso primeiro vamos provar que $(\mathcal{L} - \gamma I)$ é injetor e depois sobrejetor.

a) Prova da injetividade de $(\mathcal{L} - \gamma I)$: Se $u \in \Omega$ tal que $(\mathcal{L} - \gamma I)u = 0$, provaremos que u é a função nula. De fato, se u pertence ao espaço nulo do operador $(\mathcal{L} - \gamma I)$, então

$$\begin{cases} \nu u'' + cu' - \gamma u = 0 \\ u(0) = u(d) = 0. \end{cases}$$

Logo $u(x) = k_1 e^{\alpha+x} + k_2 e^{\alpha-x}$. Como esta função deve satisfazer as condições de fronteira, devemos ter que

$$\gamma = -\frac{c^2}{4\nu} - \frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2},$$

para algum n . Mas como $\gamma \notin \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$, para que $u(x)$ satisfaça o problema de contorno devemos ter $u(x) = 0$ em todo domínio, pois u é contínua. Portanto, o operador $(\mathcal{L} - \gamma I)$ é injetor.

b) Prova que $(\mathcal{L} - \gamma I)$ é sobrejetor: mostraremos que para todo $v \in L_2[0, d]$ existe $u \in \Omega$ tal que $(\mathcal{L} - \gamma)u = v$. Ou seja, temos que encontrar u tal que:

$$\begin{cases} \nu u'' + cu' - \gamma u = v \\ u(0) = u(d) = 0 \end{cases}$$

Resolvendo este problema pelo método de Duhamel, a solução deste problema de contorno é

$$u(t) = \int_0^t w(t-s, t) ds,$$

em que $w(t, s)$ é solução do problema

$$\begin{cases} \nu w'' + cw' - \gamma w = 0 \\ w(0, s) = 0, \quad w(d, s) = v(s) \end{cases}$$

A solução de $\nu w'' + cw' - \gamma w = 0$ é $w(t, s) = A(s)e^{\alpha+t} + B(s)e^{\alpha-t}$ em que $A(s)$ e $B(s)$ são funções arbitrárias e s é uma variável auxiliar. Analisando as condições de fronteira, para $x = 0$, $w(0, s) = 0$ implica que $A(s) = -B(s)$, enquanto para $x = d$, $w(d, s) = v(s)$ implica $A(s)e^{\alpha+d} - A(s)e^{\alpha-d} = v(s)$. Como $\gamma \notin \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$, então

$e^{\alpha+d} - e^{\alpha-d} \neq 0$ e, portanto, $A(s) = \frac{v(s)}{e^{\alpha+d} - e^{\alpha-d}}$. Assim, basta tomar

$$u(t) = \int_0^t \frac{v(s)}{e^{\alpha+d} - e^{\alpha-d}} (e^{\alpha+(t-s)} - e^{\alpha-(t-s)}) ds.$$

Logo $(\mathcal{L} - \gamma)$ é sobrejetor e, portanto, bijetor.

Seja $\Gamma = \{\gamma \in \mathbb{C} / (\mathcal{L} - \gamma) \text{ é bijetor}\} = \mathbb{C} \setminus \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$. De a) e b) concluímos que

$$\bigcup_{n>0} \{\lambda_n\} \subseteq \sigma(\mathcal{L}) \tag{3.6}$$

e que, como $\gamma \in \Gamma \implies \gamma \in \rho(\mathcal{L})$, então $\Gamma \subseteq \rho(\mathcal{L})$. Mas, como $\rho(\mathcal{L}) = \mathbb{C} \setminus \sigma(\mathcal{L})$, então $\mathbb{C} \setminus \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\} \subseteq \mathbb{C} \setminus \sigma(\mathcal{L})$, e daí

$$\sigma(\mathcal{L}) \subseteq \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}. \tag{3.7}$$

De (3.6) e (3.7) temos $\sigma(\mathcal{L}) = \bigcup_{n>0} \{\lambda_n\}$. ■

Assim $\sigma(\mathcal{L})$ é um conjunto discreto de números reais no intervalo $\left(-\infty, -\frac{c^2}{4\nu}\right)$. Em alguns livros encontramos o operador convecção-difusão descrito como um operador num espaço de Hilbert $L_2[0, d]$ para algum $d > 0$ por:

$$\mathcal{L}u = -\nu u'' + cu', \quad u(0) = u(d) = 0$$

com $\nu, c > 0$. Com o mesmo domínio descrito anteriormente. Essa alteração no sinal da constante ν altera apenas o sinal dos auto valores λ_n transformando-os em:

$$\lambda_n = \frac{c^2}{4\nu} + \frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2} \forall n \in \mathbb{N} \quad (3.8)$$

O que não acontece caso mudássemos o sinal da constante c . O que concluímos então é que o sinal das constante ν transforma o $\sigma(\mathcal{L})$ de um conjunto discreto de números reais no intervalo $\left(-\infty, -\frac{c^2}{4\nu}\right)$ no oposto deste conjunto, ou seja, no conjunto discreto de números reais no intervalo $\left(\frac{c^2}{4\nu}, \infty\right)$. Isso, obviamente, se reflete no pseudo espectro do operador convecção-difusão como veremos no capítulo 3.2.

Se o operador convecção-difusão fosse um operador puramente difusivo, o termo $\frac{-c}{2\nu}$ desapareceria e, as auto funções $u_n(x) = e^{\alpha_n x} - e^{\alpha_n - x}$ se transformariam em $u_n(x) = e^{\sqrt{\frac{\lambda_n}{\nu}} x} - e^{-\sqrt{\frac{\lambda_n}{\nu}} x}$ com $\lambda_n = -\frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2}$ e assim, $u_n(x)$ teria uma parcela crescente e a outra decrescente. Para o nosso problema, no entanto, existem escolhas de λ que fazem com que α_+ e α_- pertençam à metade esquerda do plano complexo fazendo com que ambas as parcelas das autofunções que aparecem em (3.5), tornem-se decrescentes.

Para as autofunções que aparecem em (3.5) isso acontece, por exemplo, quando $\text{Re}(\alpha_+) = \text{Re}(\alpha_-) = \frac{-c}{2\nu}$. Se definimos $\phi(x) = e^{\alpha x} - e^{\alpha - x}$, em que α_{\pm} é solução da equação $\lambda = \nu\alpha^2 + c\alpha$, isto ocorre quando $-\frac{c}{\nu} \leq \text{Re}(\alpha) \leq 0$. E assim, $\phi(d)$, para d razoavelmente grande, se aproxima de zero se λ pertence ao conjunto

$$\Pi = \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda = \nu\alpha^2 + c\alpha, \quad -\frac{c}{\nu} \leq \text{Re}(\alpha) \leq 0\} \quad (3.9)$$

Lema 2 *Se definimos $\lambda = x + yi$ e $\alpha = a + bi$ então a região Π pode ser reescrita como*

$$\Pi = \{x + yi \in \mathbb{C} : -y^2 > \frac{c^2}{\nu}x, \quad -\frac{c}{\nu} \leq a \leq 0\} \quad (3.10)$$

Demonstração: De fato, $\lambda = \nu\alpha^2 + c\alpha \Rightarrow x + yi = \nu(a + bi)^2 + c(a + bi) \Rightarrow$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{x}{\nu} = a^2 + \frac{c}{\nu}a - b^2 \\ \frac{y^2}{c^2} = 4\nu^2 \frac{b^2}{c^2} \left(a^2 + \frac{c}{\nu}a\right) + b^2 \end{cases}$$

Note que, quando $-\frac{c}{\nu} \leq a \leq 0$, $a^2 + \frac{c}{\nu}a < 0$. Assim,

$$-\frac{y^2}{c^2} = -4\nu^2 \frac{b^2}{c^2} \left(a^2 + \frac{c}{\nu}a \right) - b^2 \geq \left(a^2 + \frac{c}{\nu}a \right) - b^2 = \frac{x}{\nu}$$

Portanto,

$$-y^2 > \frac{c^2}{\nu}x$$

■

Note que, se ignoramos a condição de fronteira $u(d) = 0$, ϕ , definida acima, é solução do problema $(\lambda - \mathcal{L})u = 0$ e se $\lambda \in \Pi$ então ϕ é quase uma autofunção.

A "parábola crítica", que é o limite do conjunto Π , ou seja limite onde ϕ é quase uma autofunção, é o conjunto

$$P = \{ \lambda \in \mathbb{C} : \lambda = \nu\alpha^2 + c\alpha, \operatorname{Re}(\alpha) = 0 \text{ ou } \operatorname{Re}(\alpha) = -\frac{c}{\nu} \} \quad (3.11)$$

Lema 3 Se definimos $\lambda = x + yi$ e $\alpha = a + bi$ então a "parábola crítica" P pode ser reescrita como

$$P = \{ x + yi \in \mathbb{C} : -y^2 = \frac{c^2}{\nu}x, a = 0 \text{ ou } a = -\frac{c}{\nu} \} \quad (3.12)$$

Demonstração: Caso 1: $a = 0$

De fato, $\lambda = \nu\alpha^2 + c\alpha \Rightarrow x + yi = \nu(bi)^2 + c(bi) \Rightarrow$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{x}{\nu} = -b^2 \\ \frac{y^2}{c^2} = b^2 \end{cases}$$

Portanto, $\frac{c^2}{\nu}x = -y^2$. O **caso 2:** $a = -\frac{c}{\nu}$ é análogo. ■

Suponha agora que λ é qualquer número complexo no interior de Π , então $\phi(x)$ decresce exponencialmente. Se d é razoavelmente grande e a condição de fronteira $u(d) = 0$ é aproximadamente satisfeita. A Figura 3.1 ilustra o comportamento da função ϕ para $\lambda \in \Pi$.

Concluimos portanto que, quando $\lambda \in \Pi$, temos que $\phi(d) \approx 0$ para d razoavelmente grande e $\lambda \in \Pi$ é quase um autovalor associado a ϕ pode ser visto na Figura 3.1 para $\lambda = -0.15$, $c = \nu = 1$ e $d = 40$.

3.2 Pseudo espectro do operador convecção-difusão

O cálculo da norma do resolvente de um operador é muito difícil de ser feito e não existe uma fórmula fechada para encontrá-la. Neste capítulo calcularemos aproximações para a norma do resolvente do operador convecção-difusão $\|(\mathcal{L} - \lambda I)^{-1}\|$ de duas formas, a primeira estabelecendo cotas superiores e inferiores para a norma do

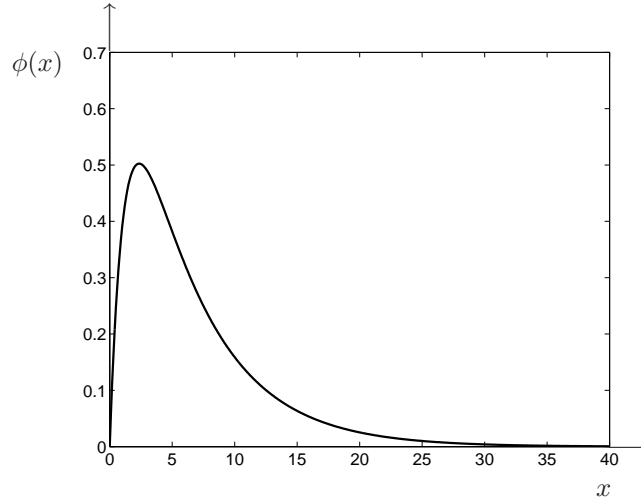


Figura 3.1: Comportamento da função $\phi = e^{\alpha+x} - e^{\alpha-x}$ com $\lambda \in \Pi$ em que $\lambda = -0.15$, $d = 40$ e $\nu = c = 1$

resolvente do operador. A segunda através da discretização do operador convecção-difusão, por três métodos numéricos: dois baseados no método de diferenças finitas centradas, um utilizando pontos equidistantes e outro pontos de Chebyshev, e um utilizando o método pseudo espectral de Chebyshev. Assim, ao invés de calcularmos a norma do resolvente do operador convecção-difusão, calcularemos numericamente a norma $\|(A_N - \lambda I)^{-1}\|$ em que A_N é a matriz resultante da discretização do operador convecção-difusão por algum método numérico, λ é um escalar, complexo, e I a matriz identidade de ordem apropriada.

3.2.1 Aproximando o pseudo espectro de \mathcal{L} através da norma do seu resolvente

Aproximaremos o ϵ -pseudoespectro do operador convecção-difusão através de cotas para a norma do resolvente do operador, uma inferior e outra superior. Através destas cotas, definiremos respectivamente os conjuntos $\sigma_{me}(\mathcal{L})$ e $\sigma_{se}(\mathcal{L})$ de forma que o espectro do operador convecção-difusão $\sigma_\epsilon(\mathcal{L})$ fique contido no conjunto $\sigma_{se}(\mathcal{L})$ e contenha o conjunto $\sigma_{me}(\mathcal{L})$, ou seja, teremos que $\sigma_{me}(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_\epsilon(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_{se}(\mathcal{L})$. Portanto o ϵ -pseudoespectro do operador convecção-difusão será o conjunto de todos os escalares, reais ou complexos, que estão contidos entre os conjuntos $\sigma_{me}(\mathcal{L})$ e $\sigma_{se}(\mathcal{L})$.

Cota superior para a norma do resolvente do operador convecção-difusão

Considere $z \in \rho(\mathcal{L})$ e $u, f \in L_2[0, d]$. Como $z \notin \sigma(\mathcal{L})$ problema de valor na fronteira $(z - \mathcal{L})u = f$ tem única solução $u = (z - \mathcal{L})^{-1}f$ em que $(z - \mathcal{L})^{-1}$ é o operador resolvente do operador convecção-difusão. Definimos, para facilitar a notação, $G_z = (z - \mathcal{L})^{-1}$. Aplicando em um ponto $x \in [0, d]$ temos $u(x) = (z - \mathcal{L})^{-1}f(x)$. Por outro lado, se z não é um valor espectral então a equação diferencial ordinária de segunda

ordem possui única solução dada pela seguinte fórmula

$$u(x) = \int_0^d g_z(x, \xi) f(\xi) d\xi \quad (3.13)$$

em que $g_z(x, \xi)$ é a função de Green associada ao problema $(z - \mathcal{L})u = f$. Portanto

$$G_z f(x) = \int_0^d g_z(x, \xi) f(\xi) d\xi. \quad (3.14)$$

Desenvolvendo a equação $(z - \mathcal{L})u = f$ encontramos o seguinte problema de valor na fronteira

$$\begin{cases} \nu u'' + cu' - zu = -f \\ u(0) = u(d) = 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

Para este tipo de problema existe uma fórmula explícita para a função de Green que aparece em (3.13). Assim, para encontrarmos função de Green associada ao problema $(z - \mathcal{L})u = f$ transformamos a equação $zu - \nu u'' - cu' = f$ na equação

$$\left[\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u' \right]' - \frac{z}{\nu} \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u = -\frac{\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)}{\nu} f. \quad (3.16)$$

Esta equação está na forma geral de Sturm-Liouville [29]. Definindo $p(x) = \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)$, $q(x) = -\frac{z}{\nu} \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)$ e $h(x) = -\frac{\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)}{\nu} f$, transformamos o problema original (3.15) no seguinte problema

$$\begin{cases} \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u'' + \frac{c}{\nu} \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u' - \frac{z}{\nu} \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u = -\frac{\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)}{\nu} f \\ u(0) = u(d) = 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

Para encontrar a função de Green associada ao problema (3.17) teremos que considerar duas funções $u_1(x)$ e $u_2(x)$ que satisfazem o problema homogêneo, que $u_1(x)$ satisfaça a condição de fronteira $u(0) = 0$ e $u_2(x)$ satisfaça a condição de fronteira $u(d) = 0$ e calcular o Wronskiano referente a essas duas funções. Então considere as seguintes funções $u_1(x) = e^{\alpha_+ x} - e^{\alpha_- x}$ e $u_2(x) = e^{\alpha_+(x-d)} - e^{\alpha_-(x-d)}$. Note que u_1 e u_2 satisfazem o problema homogêneo $\left[\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u' \right]' - \frac{z}{\nu} \exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)u = 0$, com u_1 satisfazendo a condição de fronteira $u(0) = 0$ e u_2 satisfazendo a condição de fronteira $u(d) = 0$.

O Wronskiano referente às soluções u_1 e u_2 é:

$$W(x) = (\alpha_+ - \alpha_-) \left\{ e^{(\alpha_+ + \alpha_-)x} [e^{-\alpha_- d} - e^{-\alpha_+ d}] \right\}$$

como $(\alpha_+ + \alpha_-) = -\frac{c}{2\nu} + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + 4\frac{\lambda}{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{c}{2\nu} - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + 4\frac{\lambda}{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} = -\frac{c}{\nu}$ então o Wronskiano $W(x) = (\alpha_+ - \alpha_-) e^{-\frac{c}{\nu}x} [e^{-\alpha_- d} - e^{-\alpha_+ d}]$. Portanto a fórmula de Green associada ao problema (3.17) é:

$$G(x, \xi) = \begin{cases} -\frac{u_2(x)u_1(\xi)}{e^{\frac{c}{\nu}\xi}(\alpha_+ - \alpha_-)e^{-\frac{c}{\nu}\xi} [e^{-\alpha_- d} - e^{-\alpha_+ d}]} & 0 \leq \xi \leq x \\ -\frac{u_1(x)u_2(\xi)}{e^{\frac{c}{\nu}\xi}(\alpha_+ - \alpha_-)e^{-\frac{c}{\nu}\xi} [e^{-\alpha_- d} - e^{-\alpha_+ d}]} & x \leq \xi \leq d \end{cases}$$

Denotando por $k = (\alpha_+ - \alpha_-) [e^{-\alpha_- d} - e^{-\alpha_+ d}]$ a função de Green para o problema (3.17) fica

$$G(x, \xi) = \begin{cases} -\frac{1}{k} u_2(x) u_1(\xi) & a \leq \xi \leq x \\ -\frac{1}{k} u_1(x) u_2(\xi) & x \leq \xi \leq b \end{cases}$$

E a solução explicita para o problema (3.17) é:

$$u(x) = \int_0^d G(x, \xi) \frac{\exp(\frac{c}{\nu} \xi)}{\nu} f(\xi) d\xi \quad (3.18)$$

A função de Green para o problema $(z - \mathcal{L})u = f$ com condições de fronteira $u(0) = u(d) = 0$ é $G(x, \xi) \frac{\exp(\frac{c}{\nu} \xi)}{\nu}$ como mostrada abaixo:

$$g_z(x, \xi) = \begin{cases} -\frac{1}{k} u_2(x) u_1(\xi) \frac{\exp(\frac{c}{\nu} \xi)}{\nu} & a \leq \xi \leq x \\ -\frac{1}{k} u_1(x) u_2(\xi) \frac{\exp(\frac{c}{\nu} \xi)}{\nu} & x \leq \xi \leq b \end{cases} \quad (3.19)$$

Através desta função de Green conseguimos estabelecer uma cota superior para a norma do resolvente do operador convecção-difusão $\|G_z\|$, como segue

$$\|u\| = \|G_z f\| = \left(\int_0^d \left(\int_0^d g_z(x, \xi) f(\xi) d\xi \right)^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

por Cauchy Schwarz

$$\begin{aligned} &\leq \left(\int_0^d \int_0^d (g_z(x, \xi))^2 d\xi \int_0^d (f(x))^2 d\xi dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \left(\int_0^d \int_0^d |g_z(x, \xi)|^2 d\xi \int_0^d |f(x)|^2 d\xi dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(\int_0^d \int_0^d |g_z(x, \xi)|^2 d\xi \|f\|_2^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(\int_0^d \int_0^d |g_z(x, \xi)|^2 d\xi dx \right)^{\frac{1}{2}} \|f\|_2 \\ &= \|g_z\|_2 \|f\|_2 \end{aligned}$$

Portanto $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| = \|G_z\| \leq \|g_z\|_2$ em que $\|g_z\|_2^2 = \int_0^d \int_0^d |g_z(x, \xi)|^2 d\xi dx$. Calculando esta integral temos

$$\begin{aligned} \int_0^d \int_0^d |g_z(x, \xi)|^2 d\xi dx &= \int_0^d \int_0^x |g_z(x, \xi)|^2 d\xi dx + \int_0^d \int_x^d |g_z(x, \xi)|^2 d\xi dx \\ &= \int_0^d \int_0^x \frac{1}{|k|^2} |u_1(\xi) u_2(x) \frac{\exp(\frac{c}{\nu} \xi)}{\nu}|^2 d\xi dx + \\ &+ \int_0^d \int_x^d \frac{1}{|k|^2} |u_1(x) u_2(\xi) \frac{\exp(\frac{c}{\nu} \xi)}{\nu}|^2 d\xi dx \\ &= \frac{1}{|k|^2} \int_0^d \int_0^x |e^{\alpha_+(x)} - e^{\alpha_-(x)}|^2 |e^{\alpha_+(\xi-d)} - e^{\alpha_-(\xi-d)}|^2 \frac{\exp(\frac{2c}{\nu} \xi)}{\nu^2} d\xi dx \\ &+ \frac{1}{|k|^2} \int_0^d \int_x^d |e^{\alpha_+(x-d)} - e^{\alpha_-(x-d)}|^2 |e^{\alpha_+(\xi)} - e^{\alpha_-(\xi)}|^2 \frac{\exp(\frac{2c}{\nu} \xi)}{\nu^2} d\xi dx \end{aligned}$$

Note que $\alpha_{\pm}(x) = -\frac{c}{2\nu} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4z}{\nu}}$, considerando $a + bi = \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4z}{\nu}}$ teremos

$$\begin{aligned} \|g_z(x, \xi)\|_2^2 &= \frac{1}{|k|^2\nu^2} \int_0^d \int_0^x (e^{(2a-\frac{c}{\nu})x} - 2e^{-\frac{c}{\nu}x} \cos 2bx + e^{-(2a+\frac{c}{\nu})x}) e^{\frac{2c}{\nu}\xi} \times \\ &\quad \times (e^{(2a-\frac{c}{\nu})(\xi-d)} - 2e^{-\frac{c}{\nu}(\xi-d)} \cos 2b(\xi-d) + e^{-(2a+\frac{c}{\nu})(\xi-d)}) d\xi dx \\ &+ \frac{1}{|k|^2\nu^2} \int_0^d \int_x^d (e^{(2a-\frac{c}{\nu})\xi} - 2e^{-\frac{c}{\nu}\xi} \cos 2b\xi + e^{-(2a+\frac{c}{\nu})\xi}) e^{\frac{2c}{\nu}\xi} \times \\ &\quad \times (e^{(2a-\frac{c}{\nu})(x-d)} - 2e^{-\frac{c}{\nu}(x-d)} \cos 2b(x-d) + e^{-(2a+\frac{c}{\nu})(x-d)}) d\xi dx \end{aligned}$$

Calculando as integral e associando os termos de mesmo denominador encontramos a seguinte resposta:

$$\begin{aligned} \|g_z(x, \xi)\|_2^2 &= \frac{8e^{\frac{c}{\nu}d}}{|k|^2} \left(\frac{ad \operatorname{senh}(2ad)}{4a^2\nu^2 - c^2} - \frac{c^2 \cosh(2ad)}{(4a^2\nu^2 - c^2)^2} + \frac{c^2 \cosh(\frac{c}{\nu}d)}{(4a^2\nu^2 - c^2)^2} \right) + \\ &+ \frac{8e^{\frac{c}{\nu}d}}{|k|^2} \left(\frac{2b^2 \cos(2bd)}{(4b^2\nu^2 + c^2)(a^2 + b^2)} - \frac{2a^2 \cosh(2ad)}{(4a^2\nu^2 - c^2)(a^2 + b^2)} \right) + \\ &+ \frac{8e^{\frac{c}{\nu}d}}{|k|^2} \left(\frac{2c^2 \cosh(\frac{c}{\nu}d)}{(4a^2\nu^2 - c^2)(c^2 + 4b^2\nu^2)} + \frac{c^2 \cosh(\frac{c}{\nu}d)}{(c^2 + 4b^2\nu^2)^2} - \frac{c^2 \cos(2bd)}{(c^2 + 4b^2\nu^2)^2} \right) + \\ &+ \frac{8e^{\frac{c}{\nu}d}}{|k|^2} \left(\frac{bd \operatorname{sen}(2bd)}{c^2 + 4b^2\nu^2} \right). \end{aligned}$$

Assim temos que $\|g_z(x, \xi)\|_2$ é igual a:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|k|} \left\{ 8e^{\frac{c}{\nu}d} \left[\left(\frac{4\nu^2 c(a^2 + b^2)}{(4a^2\nu^2 - c^2)(4b^2\nu^2 + c^2)} \right)^2 \cosh(\frac{c}{\nu}d) + \frac{ad}{4a^2\nu^2 - c^2} \operatorname{senh}(2ad) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{bd}{4b^2\nu^2 + c^2} \operatorname{sen}(2bd) + \frac{-8a^4\nu^2 + a^2c^2 - b^2c^2}{(4a^2\nu^2 - c^2)^2(a^2 + b^2)} \cosh(2ad) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{8b^4\nu^2 + b^2c^2 - a^2c^2}{(4b^2\nu^2 + c^2)^2(a^2 + b^2)} \cos(2bd) \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.20)$$

A função g_z não está definida no espectro $\sigma(\mathcal{L})$ de \mathcal{L} , por causa da constante k que divide g_z . Como o pseudo espectro é o conjunto dos $z \in \mathbb{C}$ tal que $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| \geq \frac{1}{\epsilon}$, e por convenção escrevemos $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| = \infty$ quando $z \in \sigma(\mathcal{L})$, podemos definir o conjunto $\sigma_{se}(\mathcal{L})$, formado através da cota superior da norma do resolvente do operador convecção-difusão, por

$$\sigma_{se}(\mathcal{L}) = \left\{ z \in \rho(\mathcal{L}); \|g_z\| \geq \frac{1}{\epsilon} \right\} \cup \sigma(\mathcal{L}). \quad (3.21)$$

Em que $\rho(\mathcal{L})$ é o conjunto resolvente de \mathcal{L} .

Cota inferior para a norma do resolvente do operador convecção-difusão

Anteriormente encontramos uma cota superior para a norma do resolvente do operador convecção-difusão e definimos o conjunto $\sigma_{se}(\mathcal{L})$ que contém o ϵ -pseudo espectro

$\sigma_\epsilon(\mathcal{L})$ do operador convecção-difusão. Agora estabeleceremos uma cota inferior para a norma deste operador e através desta cota definiremos o conjunto $\sigma_{me}(\mathcal{L})$.

Note que pela definição de norma temos

$$\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| = \sup_{\|f\| \neq 0} \frac{\|(z - \mathcal{L})^{-1}f\|}{\|f\|}.$$

Definindo $g = (z - \mathcal{L})^{-1}f$ a definição da norma fica expressa por

$$\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| = \sup_{\|g\| \neq 0} \frac{\|g\|}{\|(z - \mathcal{L})g\|} \quad (3.22)$$

Então uma possibilidade de estabelecermos uma cota inferior para a norma do resolvente do operador convecção-difusão é escolhendo alguma função $f_z \in L_2[0, d]$ tal que $\frac{\|(z - \mathcal{L})^{-1}f_z\|}{\|f_z\|}$ fique próximo da norma do resolvente $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\|$ ou, utilizando a última igualdade (3.22), escolhendo uma função $\Phi_z \in D(\mathcal{L})$ tal que

$$\frac{\|\Phi_z\|}{\|(z - \mathcal{L})\Phi_z\|} \approx \|(z - \mathcal{L})^{-1}\|. \quad (3.23)$$

Para isto, seja $z \in \rho(\mathcal{L})$. Se omitirmos a condição de fronteira $u(d) = 0$, então a função $\phi_z(x) = e^{\alpha_+ x} - e^{\alpha_- x}$ satisfaz o problema de valor de fronteira $(z - \mathcal{L})\phi_z = 0$, em que o α_\pm são soluções da equação $z = \nu\alpha^2 + c\alpha$.

Se escolhermos $\Phi_z = \phi_z + \delta\phi_z$, em que $\delta\phi_z$ é uma pequena perturbação de ϕ_z , a relação descrita em (3.23) será satisfeita. A função $\delta\phi_z$ será definida sendo zero, exceto em um pequeno intervalo $[d - \frac{1}{k}, d]$, com $\frac{1}{k} \ll 1$, por

$$\delta\phi_z = -\phi_z(d) \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x \leq d - \frac{1}{k} \\ k^2(x - (d - \frac{1}{k}))^2 & \text{se } d - \frac{1}{k} \leq x \leq d \end{cases}$$

Note que $\delta\phi'_z = -2\phi_z(d)k^2(x - (d - \frac{1}{k}))$ e $\delta\phi''_z(x) = -2\phi_z(d)k^2$ se $d - \frac{1}{k} < x < d$ e 0 caso contrário. Note também que $(z - \mathcal{L})\Phi_z(x) = z\delta\phi_z(x) - \delta\nu\phi''_z(x) - \delta c\phi'_z(x)$ em que $\Phi_z = \phi_z + \delta\phi_z$. A constante k que aparece na definição da função $\delta\phi_z$ é tomada igual a 100 e não varia. Daí

$$\begin{aligned} \|(z - \mathcal{L})\Phi_z\|^2 &= \|z\delta\phi_z(x) - \delta\nu\phi''_z(x) - \delta c\phi'_z(x)\|^2 \\ &= \int_{d - \frac{1}{k}}^d |z\delta\phi_z(x) - \delta\nu\phi''_z(x) - \delta c\phi'_z(x)|^2 dx \\ &= \int_{d - \frac{1}{k}}^d |k^2\phi_z(d)|^2 \cdot |z(x - (d - \frac{1}{k}))^2 - 2\nu - 2c(x - (d - \frac{1}{k}))|^2 dx \\ &= k^4|\phi_z(d)|^2 \int_{d - \frac{1}{k}}^d |z(x - (d - \frac{1}{k}))^2 - 2\nu - 2c(x - (d - \frac{1}{k}))|^2 dx; \end{aligned}$$

fazendo uma troca de variável $u = x - (d - \frac{1}{k})$ temos:

$$\|(z - \mathcal{L})\Phi_z\|^2 = k^4|\phi_z(d)|^2 \int_0^{\frac{1}{k}} |zx^2 - 2cx - 2\nu|^2 dx;$$

como $|zx^2 - 2cx - 2\nu|^2 = |zx^2|^2 + |2cx|^2 + 4\nu^2 - 4\text{Re}(zcx^3 + z\nu x^2 - 2c\nu x)$,

$$\begin{aligned} & k^4 |\phi_z(d)|^2 \int_0^{\frac{1}{k}} |zx^2 - 2cx - 2\nu|^2 dx = \\ & = |\phi(d)| \left[\frac{|z|^2}{5k} + 4\nu^2 k^3 + 4c\nu k^2 + \frac{4}{3}c^2 k + \text{Re} \left(z \left(c + \frac{4}{3}\nu k \right) \right) \right] \end{aligned}$$

Portanto:

$$\|(z - \mathcal{L})\Phi_z\|^2 = |\phi(d)| \left[\frac{|z|^2}{5k} + 4\nu^2 k^3 + 4c\nu k^2 + \frac{4}{3}c^2 k + \text{Re} \left(z \left(c + \frac{4}{3}\nu k \right) \right) \right].$$

Calculando $\|\Phi_z\|$:

$$\begin{aligned} \|\Phi_z\|^2 & \approx \|\phi_z\|^2 = \int_0^d |\phi_z(x)|^2 dx \\ & = \int_0^d |e^{\alpha+x} - e^{\alpha-x}|^2 dx \\ & = \int_0^d |e^{\alpha+x}|^2 - 2\text{Re}(e^{\alpha+x} e^{\alpha-x}) + |e^{\alpha-x}|^2 dx; \end{aligned}$$

como $\alpha_{\pm} = -\frac{c}{2\nu} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4z}{\nu}}$, chamamos $a + bi = \sqrt{\left(\frac{c}{\nu}\right)^2 + \frac{4z}{\nu}}$ e lembrando que $\text{Re}(e^{i\theta}) = \cos \theta$ temos:

$$\begin{aligned} \|\Phi_z\|^2 & \approx \|\phi_z\|^2 = \int_0^d e^{(2a-\frac{c}{\nu})x} - 2e^{-\frac{c}{\nu}x} \cos 2bx + e^{(-2a-\frac{c}{\nu})x} dx \\ & = 2\nu \left\{ \frac{e^{-\frac{c}{\nu}d} [c \cosh(2ad) + 2\nu a \sinh(2ad)] - c}{4a^2\nu^2 - c^2} + \frac{e^{-\frac{c}{\nu}d} [c \cos(2bd) - 2b\nu \sin(2bd)] - c}{4b^2\nu^2 + c^2} \right\}. \end{aligned}$$

Concluimos assim que $\frac{\|\Phi_z\|}{\|(z - \mathcal{L})\Phi_z\|}$ é aproximadamente igual a

$$\left\{ \frac{2\nu \left[\frac{e^{-\frac{c}{\nu}d} (c \cosh(2ad) + 2\nu a \sinh(2ad)) - c}{4a^2\nu^2 - c^2} + \frac{e^{-\frac{c}{\nu}d} (c \cos(2bd) - 2b\nu \sin(2bd)) - c}{4b^2\nu^2 + c^2} \right]}{|\phi(d)| \left[\frac{|z|^2}{5k} + 4\nu^2 k^3 + 4c\nu k^2 + \frac{4}{3}c^2 k + \text{Re} \left(z \left(c + \frac{4}{3}\nu k \right) \right) \right]} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.24)$$

Que limita a norma do resolvente $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\|$ inferiormente. Note que Φ_z está definida para todo z no conjunto resolvente. Através deste limitante inferior da norma do resolvente $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\|$ definimos o conjunto $\sigma_{me}(\mathcal{L})$, incluindo o ϵ -pseudo espectro $\sigma_{\epsilon}(\mathcal{L})$ para todo $\epsilon > 0$, tal que $\sigma_{me}(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_{\epsilon}(\mathcal{L})$ como segue

$$\sigma_{me}(\mathcal{L}) = \left\{ z \in \mathbb{C}; \frac{\|\Phi_z\|}{\|(z - \mathcal{L})\Phi_z\|} \geq \frac{1}{\epsilon} \right\} \cup \sigma_{\epsilon}(\mathcal{L}) \quad (3.25)$$

Assim, definimos dois conjuntos $\sigma_{me}(\mathcal{L})$ e $\sigma_{se}(\mathcal{L})$ com o conjunto $\sigma_{me}(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_{\epsilon}(\mathcal{L})$ e o conjunto $\sigma_{se}(\mathcal{L})$ contendo o espectro do operador convecção- difusão $\sigma_{\epsilon}(\mathcal{L})$. Desta

forma temos definido para todo $\epsilon > 0$ dois conjuntos tais que $\sigma_{me}(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_\epsilon(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_{se}(\mathcal{L})$.

A Figura 3.2 mostra as duas aproximações $\sigma_{me}(\mathcal{L})$ e $\sigma_{se}(\mathcal{L})$. Os valores de $\frac{\|\Phi\|}{\|(z-\mathcal{L})\Phi\|}$ e $\|g_z\|$ são calculados numa malha de 100×100 . Ou seja, construímos duas malhas, uma representando $\text{Re}(z)$ e outra $\text{Im}(z)$, ambas com 100 pontos. Em seguida com o comando *meshgrid* do **Matlab** construímos a malha de 100×100 comentada anteriormente e quanto maior a malha mais evidente ficam os autovalores e o seu pseudo espectro. Por fim, calculamos $\frac{\|\Phi\|}{\|(z-\mathcal{L})\Phi\|}$ e $\|g_z\|$ nos pontos da malha. Os resultados de cada um são armazenados em uma matriz e em seguida plotamos essa matriz com o comando *contour* do **Matlab**. Para os experimentos, escolhemos $d = 40$, e consideramos c e ν com alguns valores iguais e diferentes que indicamos nos parágrafos posteriores. As curvas pontilhadas representam os valores de $\frac{\|\Phi\|}{\|(z-\mathcal{L})\Phi\|} = \frac{1}{\epsilon}$, as linhas sólidas representam os valores da malha aplicada em $\|g_z\| = \frac{1}{\epsilon}$, e são plotados para os valores de $\epsilon = 10^{-1}, \dots, 10^{-4}$.

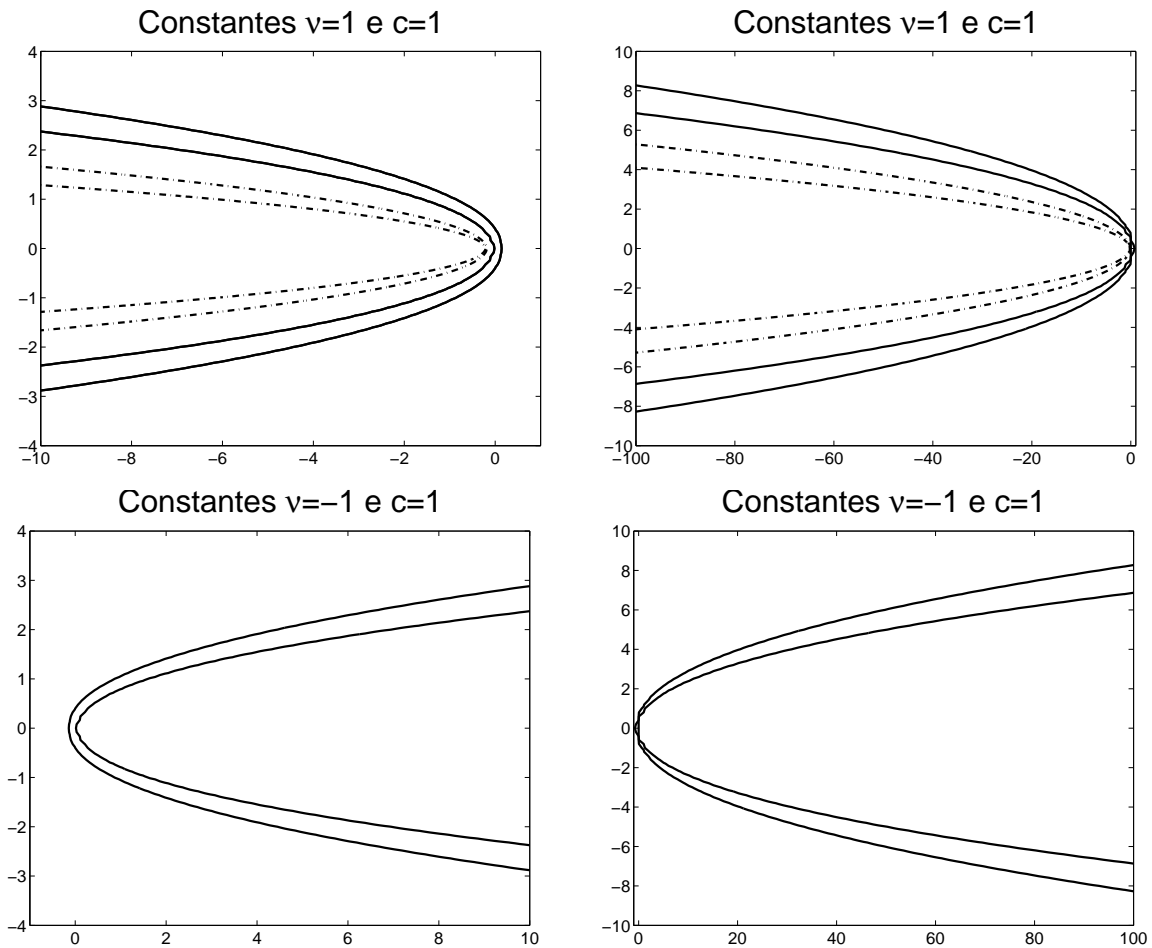


Figura 3.2: Acima: curvas de nível representando respectivamente os conjuntos σ_{me} e σ_{se} para $\text{Re}(z)$ variando entre -10 e 1 e -100 e 1 com $\epsilon = 10^{-1}$ e 10^{-2} . As constantes $\nu = 1$ e $c = 1$. Abaixo: Os mesmos conjuntos, com a diferença que consideramos $\nu = -1$.

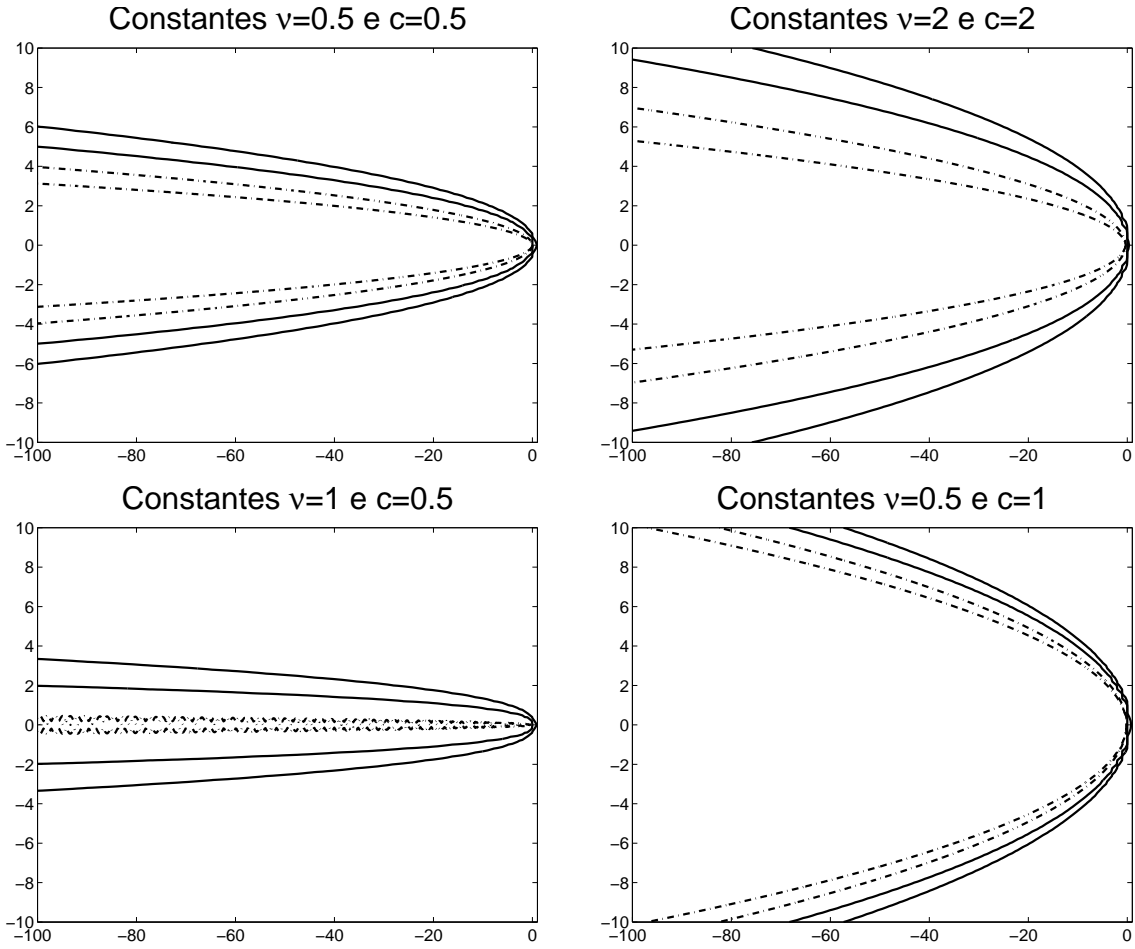


Figura 3.3: Acima: curvas de nível representando respectivamente os conjuntos σ_{me} e σ_{se} para $\text{Re}(z)$ variando entre -100 e 1 com $\epsilon = 10^{-1}$ e 10^{-2} . As constantes $\nu = c = 0.5$ e $\nu = c = 2$. Abaixo: Os mesmos conjuntos, com a diferença que na figura da esquerda consideramos $\nu = 1, c = 0.5$ e na figura direita consideramos $\nu = 0.5$ e $c = 1$.

Nas Figura 3.2 e 3.3 fica claro que o conjunto $\sigma_{me}(\mathcal{L})$ representado em linha pontilhada esta contido no conjunto $\sigma_{se}(\mathcal{L})$ representado pela linha sólida. O pseudo espectro do operador convecção-difusão não é conhecido exatamente, mas como sabemos que $\sigma_{me}(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_{\epsilon}(\mathcal{L}) \subseteq \sigma_{se}(\mathcal{L})$ temos que o pseudo espectro do operador é algo entre estes dois conjuntos.

A Figura 3.2 ilustra o pseudo espectro do operador difusão convecção quando consideramos a constante ν positiva ou negativa. Concluimos que quando consideramos ν negativo, o resultado que obtemos do pseudo espectro, assim como no espectro, é um conjunto simétrico, em relação ao eixo y , ao que obtemos considerando ν positivo. As aproximações através da cota inferior, para ν negativo, não são muito informativas quando consideramos este caso.

A Figura 3.3 mostra o que acontece quando consideramos as constantes ν e c iguais mas maiores ou menores que um e diferentes entre si. Nas duas figuras superiores consideramos na esquerda $\nu = c = 0.5$ e na direita $\nu = 2$ e $c = 2$ e o

que percebemos é que o pseudo espectro torna-se menor para $\nu = c = 0.5$ e mais amplo para $\nu = c = 2$. Nas figuras inferiores consideramos na esquerda $\nu = 1$ e $c = 0.5$ e na direita $\nu = 0.5$ e $c = 1$ e concluímos que quando $c \approx 0$ as parábolas tornam-se mais fechadas, enquanto que, quando consideramos $\nu \approx 0$ as parábolas tornam-se mais abertas e o mesmo acontece respectivamente quando consideramos $\nu > c$ e $c > \nu$.

A forma do pseudo espectro do operador convecção-difusão não é conhecida. Apesar das aproximações numéricas feitas anteriormente, a única informação que temos até momento é que o pseudo espectro deste operador é algo entre os conjuntos $\sigma_{me}(\mathcal{L})$ e $\sigma_{se}(\mathcal{L})$. Além disso, as aproximações ficam restritas à região escolhida. Assim, para obtermos resultados mais informativos, a análise do pseudo espectro do operador convecção-difusão deve ser estendida para todo o plano complexo. Para tanto, defina $\mathcal{K} : \Omega \rightarrow L_2[0, d]$ por

$$\mathcal{K}u(x) = \nu u''(x) - \frac{c^2}{4\nu}u(x)$$

defina também, o operador $\mathcal{M} : L_2[0, d] \rightarrow L_2[0, d]$ por

$$\mathcal{M}v = \exp\left(-\frac{c}{2\nu}x\right)v,$$

isto implica que $\mathcal{L} = \mathcal{M}\mathcal{K}\mathcal{M}^{-1}$ com o operador $\mathcal{M}^{-1} : \Omega \rightarrow \Omega$ definido por

$$\mathcal{M}^{-1}v = \exp\left(\frac{c}{2\nu}x\right)v.$$

Para verificarmos que $\mathcal{L} = \mathcal{M}\mathcal{K}\mathcal{M}^{-1}$ considere $v \in \Omega$, então

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\mathcal{K}\mathcal{M}^{-1}v(x) &= \mathcal{M}\mathcal{K}\exp\left(\frac{c}{2\nu}x\right)v \\ &= \mathcal{M}\left[\nu\left(\frac{c^2}{4\nu^2}\exp\left(\frac{c}{2\nu}x\right)v(x) + \frac{c}{\nu}v'(x)\exp\left(\frac{c}{2\nu}x\right)\right) + \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{M}\left[\nu v''(x)\exp\left(\frac{c}{2\nu}x\right) - \frac{c^2}{4\nu}\exp\left(\frac{c}{2\nu}x\right)v(x)\right]\right] \\ &= \mathcal{M}\exp\left(\frac{x}{2}\right)(\nu v''(x) + cv'(x)) \\ &= cv'(x) + \nu v''(x) \\ &= \mathcal{L}v(x) \end{aligned}$$

Os lemas que apresentaremos a seguir, servirão como resultados auxiliares para a demonstração do teorema da estimativa do operador convecção-difusão.

Lema 4 *Seja $\mathcal{L} = \mathcal{M}\mathcal{K}\mathcal{M}^{-1}$ então*

- i) \mathcal{K} é um operador auto adjunto*
- ii) $\|\mathcal{M}\| = 1$, $\|\mathcal{M}^{-1}\| = \exp\left(\frac{c}{2\nu}d\right)$*

Demonstração: Para mostrar (i) vamos provar que dados $u, v \in D(\mathcal{L})$ temos

$$\langle \mathcal{K}u, v \rangle = \langle u, \mathcal{K}v \rangle$$

de fato

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{K}u, v \rangle &= \int_0^d \mathcal{K}u(x) \overline{v(x)} dx \\ &= \int_0^d \nu u''(x) \overline{v(x)} - \frac{c^2}{4\nu} u(x) \overline{v(x)} dx \end{aligned}$$

aplicando integração por partes, duas vezes, na primeira parcela do integrando temos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{K}u, v \rangle &= \int_0^d \nu u(x) \overline{v''(x)} - \frac{c^2}{4\nu} u(x) \overline{v(x)} dx \\ &= \int_0^d u(x) (\nu \overline{v''(x)} - \frac{c^2}{4\nu} \overline{v(x)}) dx \\ &= \langle u, \mathcal{K}v \rangle \end{aligned}$$

portanto temos que \mathcal{K} é um operador auto-adjunto, ou seja,

$$\langle \mathcal{K}u, v \rangle = \langle u, \mathcal{K}v \rangle. \quad (3.26)$$

(ii) Para mostrarmos este item, primeiro vamos mostrar que $\|\mathcal{M}\| \leq 1$ e em seguida apresentaremos uma função $v \in L_2[0, d]$ tal que $\|\mathcal{M}v\| = 1$, utilizaremos a mesma idéia para mostrar $\|\mathcal{M}^{-1}\| = \exp(\frac{c}{2\nu}d)$. Assumiremos que as constantes ν e c tem o mesmo sinal, pois, caso tenham sinais contrários, então $\mathcal{M}v = \exp(\frac{c}{2\nu}x)v$ e $\mathcal{M}^{-1}w = \exp(-\frac{c}{2\nu}x)w$, que implicará em $\|\mathcal{M}\| = \exp(\frac{c}{2\nu}d)$ e $\|\mathcal{M}^{-1}\| = 1$ e, de qualquer forma, $\|\mathcal{M}\|\|\mathcal{M}^{-1}\| = \exp(\frac{c}{2\nu}d)$. Então, sem perda de generalidade, considere as constantes ν e c com mesmo sinal.

Assim, seja $v \in L_2[0, d]$, então

$$\|\mathcal{M}v\|^2 = \|\exp(-\frac{c}{2\nu}x)v\|^2 = \int_0^d |\exp(-\frac{c}{2\nu}x)v(x)|^2 dx = \int_0^d |\exp(-\frac{c}{\nu}x)||v(x)|^2 dx;$$

no intervalo $[0, d]$ temos que $|\exp(-\frac{c}{\nu}x)| \leq 1$, então

$$\int_0^d |\exp(-\frac{c}{\nu}x)||v(x)|^2 dx \leq \int_0^d |v(x)|^2 dx = \|v\|^2$$

Portanto, $\|\mathcal{M}v\| \leq \|v\|$ implicando que $\|\mathcal{M}\| \leq 1$. Considere $v(x) = \frac{\exp(\frac{c}{2\nu}x)}{\sqrt{d}}$ então

$$\|\mathcal{M}v\| = \|\exp(\frac{-c}{2\nu}x) \frac{\exp(\frac{c}{2\nu}x)}{\sqrt{d}}\| = \|\frac{1}{\sqrt{d}}\| = 1$$

Logo concluímos que $\|\mathcal{M}\| = 1$. Analogamente considere $w \in \Omega$, então

$$\|\mathcal{M}^{-1}w\| = \|\exp(\frac{c}{2\nu}x)w\| = \int_0^d |\exp(\frac{c}{2\nu}x)w(x)|^2 dx = \int_0^d |\exp(\frac{c}{\nu}x)||w(x)|^2 dx;$$

sabemos que, no intervalo $[0, d]$, $|\exp(\frac{c}{\nu}x)| \leq \exp(\frac{c}{\nu}d)$ então

$$\int_0^d |e^{\frac{c}{2\nu}x}| |w(x)|^2 dx \leq \int_0^d \exp(\frac{c}{\nu}d) |w(x)|^2 dx = \exp(\frac{c}{\nu}d) \|w\|.$$

Portanto, $\|\mathcal{M}^{-1}w\| \leq \exp(\frac{c}{\nu}d)\|w\|$ implicando em $\|\mathcal{M}^{-1}\| \leq \exp(\frac{c}{\nu}d)$. Considere $w \in \Omega$ em que $w(x) = \frac{1}{\sqrt{d}} \exp(\frac{c}{2\nu}d) \exp(-\frac{c}{2\nu}x)$, então

$$\|\mathcal{M}^{-1}v\| = \|\exp(\frac{c}{2\nu}x) \exp(-\frac{c}{2\nu}x) \frac{1}{\sqrt{d}} \exp(\frac{c}{2\nu}d)\| = \|\frac{1}{\sqrt{d}} \exp(\frac{c}{2\nu}d)\| = \exp(\frac{c}{2\nu}d).$$

Logo, mostramos que $\|\mathcal{M}^{-1}\| = \exp(\frac{c}{2\nu}d)$. \blacksquare

Lema 5 *Se \mathcal{K} é um operador auto adjunto então*

$$\|(z - \mathcal{K})^{-1}\| = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{K}))} = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L}))} \quad (3.27)$$

Como \mathcal{K} é um operador adjunto, concluímos que $(z - \mathcal{K})$ é um operador normal. Assim, esse resultado pode ser facilmente verificado e portanto não o demonstraremos.

O Lema 5 nos fornece um valor exato para a norma do resolvente do operador \mathcal{K} que possui o mesmo espectro do operador convecção-difusão. Este é um resultado importante, porque através dele encontraremos uma cota superior para a norma do resolvente do operador convecção-difusão. Com esta cota, determinamos uma região em que o pseudo espectro do operador convecção-difusão está contido.

Teorema 10 *Para qualquer $d > 0$ e $z \in \mathbb{C}$*

$$\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| \leq \frac{\kappa(\mathcal{M})}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L}))} = \frac{\exp(\frac{c}{2\nu}d)}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L}))} \quad (3.28)$$

em que $\kappa(\mathcal{M}) = \|\mathcal{M}\|\|\mathcal{M}^{-1}\| = e^{\frac{c}{2\nu}d}$

Demonstração: Para demonstrar esse teorema usaremos os Lemas (4) e (5). Para tanto, note que

$$(z - \mathcal{L})^{-1} = (zI - \mathcal{M}\mathcal{K}\mathcal{M}^{-1})^{-1} = \mathcal{M}(zI - \mathcal{K})^{-1}\mathcal{M}^{-1}.$$

Aplicando a norma em ambas as igualdades temos

$$\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| = \|\mathcal{M}(zI - \mathcal{K})^{-1}\mathcal{M}^{-1}\| \leq \|\mathcal{M}\|\|(zI - \mathcal{K})^{-1}\|\|\mathcal{M}^{-1}\|$$

e, portanto, utilizando os Lemas (4) e (5)

$$\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| \leq \frac{\kappa(\mathcal{M})}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L}))} = \frac{\exp(\frac{c}{2\nu}d)}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L}))}. \quad \blacksquare$$

Como, por definição, o ϵ -pseudo espectro de um operador é o conjunto dos $z \in \mathbb{C}$ tal que $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\| \geq \frac{1}{\epsilon}$ temos $\frac{1}{\epsilon} \leq \|(z - \mathcal{L})^{-1}\| \leq \frac{\exp(\frac{c}{2\nu}d)}{\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L}))}$ e, portanto, $\text{dist}(z, \sigma(\mathcal{L})) \leq \epsilon \exp(\frac{c}{2\nu}d)$. Assim, concluímos pelo Teorema 10 que o pseudo espectro do operador convecção-difusão está contido no conjunto $\{z \in \mathbb{K} : |z - \lambda_n| < \epsilon \exp(\frac{c}{2\nu}d)\}$, em que $\lambda_n = -\frac{c^2}{4\nu} - \frac{\pi^2 n^2 \nu}{d^2}$ que é o espectro do operador convecção-difusão. Mais precisamente

$$\sigma_\epsilon(\mathcal{L}) \subseteq \bigcup_{n \in \mathbb{N}} D(\lambda_n, \epsilon \exp(\frac{c}{2\nu}d)) \quad (3.29)$$

em que $D(\lambda_n, \epsilon \exp(\frac{c}{2\nu}d))$ representa um disco com centro nos autovalores λ_n do operador convecção-difusão e raio $\epsilon \exp(\frac{c}{2\nu}d)$.

Capítulo 4

Aproximação do pseudo espectro do operador convecção-difusão através discretização do operador

Nesta seção faremos a aproximação do pseudo espectro do operador convecção-difusão através de alguns métodos numéricos. Primeiro discretizando o operador, e em seguida, calculando numericamente a norma $\|(z - A_N)^{-1}\|$ em que A_N é a matriz resultante da discretização do operador convecção-difusão por algum método numérico. Utilizaremos três métodos, dois baseados em diferenças finitas e um baseado na aproximação pseudo espectral de Chebyshev. Um dos métodos baseados em diferenças finitas utilizam uma malha igualmente espaçada e o outro utiliza uma malha formada por pontos de Chebyshev.

As figuras ilustradas neste capítulo mostram o espectro e o ϵ -pseudo espectro das matrizes A_N , para os valores: $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-7}$. A norma do resolvente $\|(z - A_N)^{-1}\|$ é calculada numa malha de 50×50 , os resultados são armazenados em uma matriz que em seguida é plotada utilizando o comando *contour* do **Matlab**, para todos os esquemas de discretização. Os autovalores das matrizes A_N serão denotados pelo sinal $+$. A parábola crítica $\frac{c^2}{\nu}x = -y^2$, que apresentamos no capítulo 3, é plotada juntamente. Em todas as figuras ν e c são considerados iguais a um.

4.1 Diferenças finitas

Para aproximar o operador convecção-difusão usaremos o método de diferenças finitas centradas. Dois tipos de malhas serão usadas, na primeira subseção usamos pontos de Chebyshev e na segunda pontos equidistantes. Em cada caso o operador convecção-difusão é aproximado por uma matriz tridiagonal de ordem $N - 1$.

Definiremos por L_N^{eq} a matriz resultante da discretização do operador convecção-difusão quando usamos pontos equidistantes e por L_N^{ch} quando usamos pontos de Chebyshev. O espectro e o pseudo espectro serão mostrados em cada caso. A conclusão é que o espectro e o pseudo espectro das matrizes L_N^{eq} , resultantes da discretização do operador convecção-difusão pelo método baseado em diferenças finitas

utilizando pontos equidistantes, aproximam melhor o espectro e o pseudo espectro do operador do que no caso da discretização utilizando uma malha com pontos de Chebyshev.

4.1.1 Pontos de Chebyshev

Como mencionado anteriormente, a discretização do operador convecção-difusão através do método baseado em diferenças finitas utilizando pontos de Chebyshev, $x_i = \left(\frac{d}{2}\right) \left(1 - \cos\left(\frac{i\pi}{N}\right)\right)$ para $1 \leq i \leq N$, resulta em uma matriz tridiagonal, que definimos por L_N^{ch} , de ordem $N - 1$.

A fórmula de aproximação da primeira derivada de u utilizando diferenças finitas com uma malha equidistante é

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h}$$

em que h representa a diferença entre dois pontos consecutivos quaisquer da malha. Como estamos utilizando pontos de Chebyshev, o que implica em uma malha não igualmente espaçada, consideremos $h = x_{i+1} - x_i$ e, portanto, $2h = x_{i+1} - x_{i-1}$ assim a fórmula de diferenças finitas centradas fica

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$

para deduzir a fórmula da segunda derivada, utilizamos os pontos auxiliares $\frac{x_{i+1}+x_i}{2}$ e $\frac{x_i+x_{i-1}}{2}$ assim

$$u''(x_i) \approx \frac{u'\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right) - u'\left(\frac{x_i+x_{i-1}}{2}\right)}{\frac{x_{i+1}+x_i}{2} - \frac{x_i+x_{i-1}}{2}}$$

e como $u'\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}\right) \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$ e $u'\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) \approx \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$ temos

$$u''(x_i) \approx 2 \left[\frac{(x_i - x_{i-1})u_{i+1} - (x_{i+1} - x_{i-1})u_i + (x_{i+1} - x_i)u_{i-1}}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} \right]$$

para $1 \leq i \leq N - 1$ em que $u_i = u(x_i)$. Então as entradas da matriz L_N^{ch} tornam-se:

$$\begin{aligned} l_{i, i+1} &= \frac{2\nu}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} + \frac{c}{x_{i+1} - x_{i-1}} \\ l_{i, i-1} &= \frac{2\nu}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} - \frac{c}{x_{i+1} - x_{i-1}} \\ l_{i, i} &= \frac{2\nu}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} \quad \forall 1 \leq n \leq N - 1 \end{aligned}$$

Note que a matriz L_N^{ch} não é simétrica e não é de Toeplitz. Neste caso não existe uma fórmula explícita para os autovalores, como no caso de pontos equidistantes.

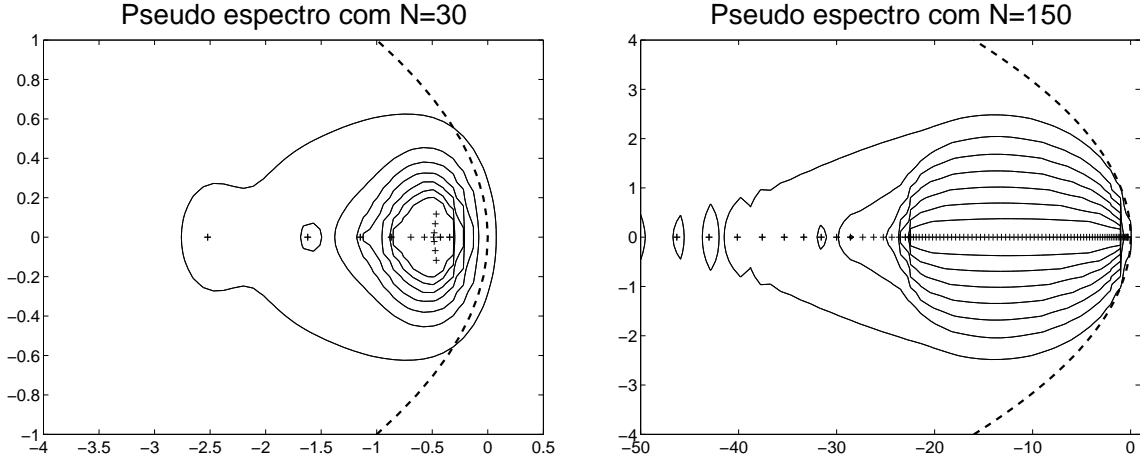


Figura 4.1: Parábola crítica, linha pontilhada, espectro, denotado pelo sinal (+), e pseudo espectro do operador discreto L_N^{ch} para $\epsilon = 10^{-1} \dots 10^{-7}$. À esquerda consideramos $N=30$ e a direita consideramos $N=150$.

A Figura 4.1, mostra o espectro e o pseudo espectro da matriz L_{30}^{ch} na esquerda, e L_{150}^{ch} na direita.

A matriz L_{30}^{ch} , onde tomamos $N = 30$, tem um autovalor real "outlier", ou seja, um autovalor muito distante do restante dos outros autovalores, de valor aproximadamente igual a sessenta que não aparece na Figura 4.1, esquerda. Note que, em ambos os casos, $N = 30$ e $N = 150$, não há uma boa aproximação do pseudo espectro do operador convecção difusão. Podemos observar também que, para $N = 30$, Figura 4.1 a esquerda, o espectro da matriz não corresponde com o espectro do operador convecção-difusão. Quando consideramos $N = 150$, todos os autovalores apresentam parte imaginária igual a zero análogo ao operador convecção-difusão.

4.1.2 Pontos eqüidistantes

O método de diferenças finitas centradas, utilizando pontos eqüidistantes, consiste na aproximação das derivadas de primeira e segunda ordem por

$$u'(x_j) \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h}, \quad u''(x_j) \approx \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2}$$

Em que $N > 1$ e $h = \frac{d}{N}$. Os pontos da malha são dados por $x_j = jh$ para todo $j = 1, \dots, N - 1$.

A aproximação do operador convecção-difusão, por esse método, produz uma matriz tridiagonal de Toeplitz de ordem $N - 1$ com entradas:

$$l_{i, i} = -\frac{2\nu}{h^2}; \quad l_{i, i\pm 1} = \frac{\nu}{h^2} \pm \frac{c}{2h} \quad \forall 1 \leq i \leq N - 1$$

E $l_{i, i\pm 1} = \frac{\nu}{h^2} \pm \frac{c}{2h} = \frac{\nu N^2}{d^2} (1 \pm \frac{cd}{2\nu N})$. Note que a parcela $\frac{cd}{2\nu N}$, que denotaremos por \overline{Pe} , é o número de Péclet, $Pe = \frac{cd}{\nu}$, dividido por $2N$. Assim a matriz L_N^{eq} fica da seguinte forma:

$$L_N^{eq} = \frac{\nu}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 + \overline{Pe} & & & \\ 1 - \overline{Pe} & -2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 - \overline{Pe} & -2 & 1 + \overline{Pe} \\ & & & & 1 - \overline{Pe} & -2 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Note que a matriz L_N^{eq} , resultante da discretização do operador convecção-difusão utilizando o método de diferenças finitas com pontos equidistantes, é tridiagonal de Toeplitz cujos autovalores são dados explicitamente por [27]

$$\lambda_k = \frac{2\nu}{h^2} + 2 \left(\frac{\nu^2}{h^4} - \frac{c^2}{4h^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \left(\frac{k\pi}{N-1} \right) \quad \forall k = 1, 2, \dots, N-1$$

ou equivalentemente

$$\lambda_k = \frac{2\nu}{h^2} \left[1 - \sqrt{1 - \overline{Pe}} \cos \left(\frac{k\pi}{N-1} \right) \right] \quad \forall k = 1, 2, \dots, N-1. \quad (4.2)$$

De acordo com a forma dos autovalores que aparecem em (4.2), temos três possibilidades para o espectro das matrizes L_N^{eq} resultantes da discretização do operador convecção-difusão

1. Se $\overline{Pe} > 1$, caso em que a ordem de discretização N é menor que $\frac{Pe}{2}$, então os autovalores de L_N^{eq} serão complexos e da forma $\frac{-2\nu}{(h^2)} + iy$ com $y \in \mathbb{R}$ e $i = \sqrt{-1}$.
2. Se $\overline{Pe} = 1$, caso em que a ordem da discretização $N = \frac{Pe}{2}$, os autovalores de L_N^{eq} são todos iguais a $\frac{-2\nu}{h^2}$.
3. Se $\overline{Pe} < 1$, caso em que a ordem da discretização é maior que $\frac{Pe}{2}$. Os autovalores da matriz L_N^{eq} são reais, negativos e simples.

O caso mais importante é quando N é grande, ou seja, $N \gg \frac{pe}{2}$, ou $\overline{Pe} \ll 1$. Neste caso, o espectro e o pseudo espectro de L_N^{eq} aproximam melhor o espectro e o pseudo espectro do operador convecção-difusão.

Observamos, na Figura 4.2, que para $N = 10$ e $N = 20$ os autovalores das matrizes L_{10}^{eq} e L_{20}^{eq} se enquadram respectivamente nos casos um e dois descritos anteriormente. Portanto, os autovalores das matrizes não aproximam os autovalores do operador convecção-difusão. Em todos os casos o ϵ -pseudo espectro das matrizes L_N^{eq} são elipses. Entre os dois tipos de aproximação baseados no método de diferenças finitas, o método que melhor aproximou o pseudo espectro do operador foi o que utilizou uma malha igualmente espaçada.

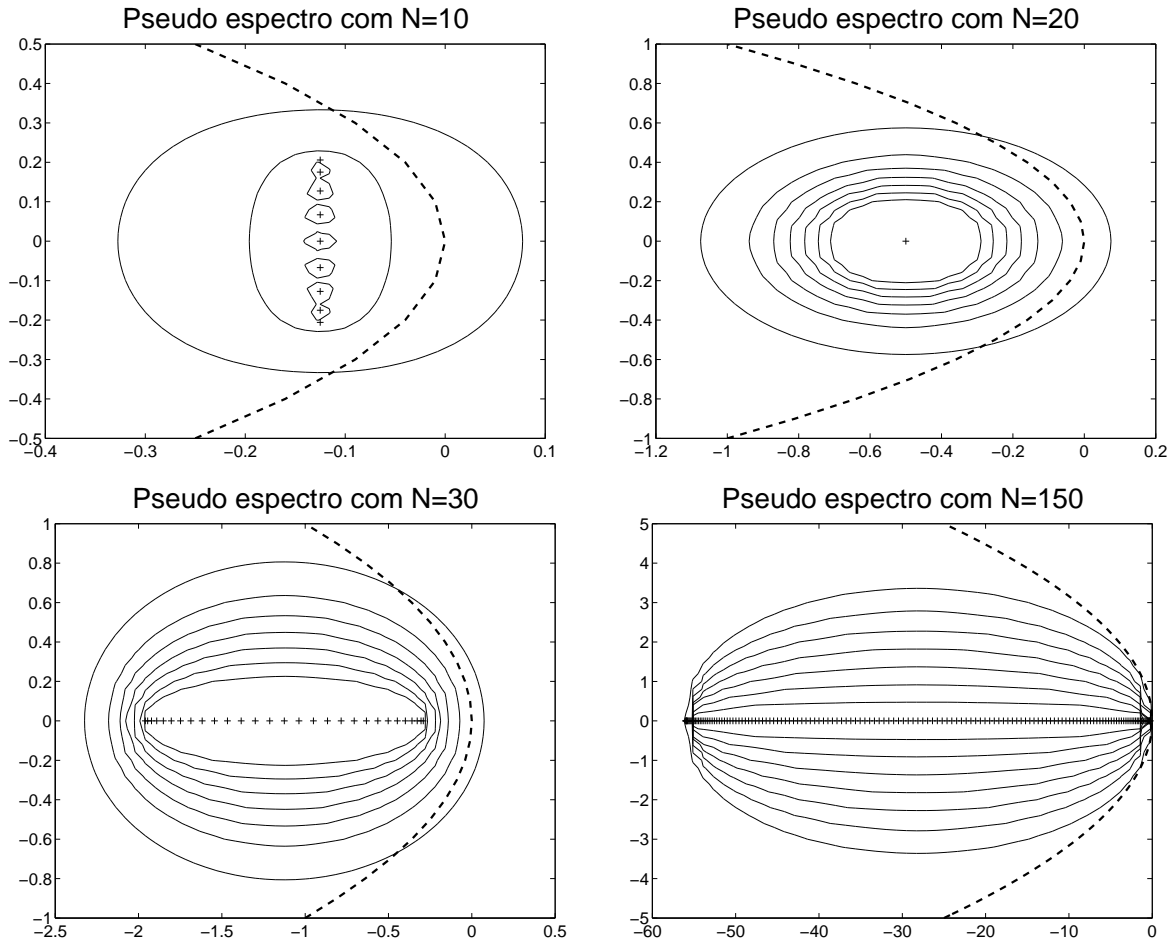


Figura 4.2: Parábola crítica, linha pontilhada, espectro, denotado pelo sinal (+), e pseudo espectro do operador discreto L_N^{eq} para $\epsilon = 10^{-1} \dots 10^{-7}$.

4.2 Método pseudo espectral de Chebyshev

Nesta seção é desenvolvido um estudo do método pseudo espectral de Chebyshev para aproximar o operador convecção-difusão. Denotaremos a matriz resultante da aproximação por este método por L_N^{CC} . O espectro e o pseudo espectro das matrizes são apresentados em todas as figuras.

4.2.1 Aproximação pseudo espectral de Chebyshev

Para aproximar o operador convecção-difusão com o método pseudo espectral de Chebyshev utilizamos a matriz diferenciação de Chebyshev, definida aqui por D , de ordem $N + 1$. O cálculo dessa matriz é feito da seguinte forma:

- Calculamos o polinômio interpolador $p(x)$ de grau menor igual a N , tal que $p(x_j) = u(x_j)$ e $0 \leq j \leq N$
- Tomamos o polinômio $p'(x_j)$ como aproximação para $u_x(x_j)$, isto é, $u_x(x_j) \approx p'(x_j)$

Assim temos que

$$\begin{bmatrix} u'(x_0) \\ u'(x_1) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} p'(x_0) \\ p'(x_1) \\ \vdots \\ p'(x_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{00} & d_{01} & \cdots & d_{0N} \\ d_{10} & d_{11} & \cdots & d_{1N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{N0} & d_{N1} & \cdots & d_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p(x_0) \\ p(x_1) \\ \vdots \\ p(x_N) \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Em que $D = [d_{ij}]$, com $0 \leq i, j \leq N$. Repetindo o processo descrito acima, obtemos uma relação entre a segunda derivada e os valores de u nos pontos de colocação.

$$\begin{bmatrix} p''(x_0) \\ p''(x_1) \\ \vdots \\ p''(x_N) \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} p'(x_0) \\ p'(x_1) \\ \vdots \\ p'(x_N) \end{bmatrix} = D^2 \begin{bmatrix} p(x_0) \\ p(x_1) \\ \vdots \\ p(x_N) \end{bmatrix}$$

Portanto a derivada de ordem p de $u(x)$ nos pontos de colocação é dada por

$$u^{(p)}(x_j) = e_j^T D^p \bar{u}, \quad p \geq 1, \quad (4.4)$$

Neste trabalho utilizaremos os pontos de colocação de Chebyshev, x_j , definidos da forma

$$x_j = \frac{d}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{j\pi}{N} \right) \right] \quad (4.5)$$

em que $1 \leq n \leq N$. Esses pontos de colocação são raízes de uma família de polinômios ortogonais e não são igualmente espaçados [5]. Essa escolha da malha é melhor que uma igualmente espaçada pois evita o fenômeno de Runge que consiste em grandes oscilações nos extremos de um intervalo $[a, b]$ quando aproximamos uma função por um polinômio interpolador. A figura 4.3 ilustra duas aproximações, por um polinômio interpolador, para a função $f(x) = \frac{1}{(1+25x^2)}$ no intervalo $[-1, 1]$ em que na esquerda usamos uma malha com pontos igualmente espaçados, onde podemos observar o fenômeno de Runge, e na direita pontos de Chebyshev.

Vamos discretizar o operador convecção-difusão, para isso, denotamos

$$D = [d_1, \dots, d_{N+1}] = \begin{bmatrix} l_1^T \\ \vdots \\ l_{N+1}^T \end{bmatrix},$$

$$D_1 = [d_2, \dots, d_N], \quad D_2 = [l_2, \dots, l_N]^T \text{ e } D_3 = E^T D E \text{ com } E = [e_2, \dots, e_N]^T, \quad (4.6)$$

em que e_i é a i -ésima coluna da matriz identidade de ordem $N + 1$. Agora introduziremos a versão semidiscreta da equação de difusão convecção obtida pelo uso da matriz de diferenciação D . Lembre que se $v = [v_0, \dots, v_N]^T$ denota um vetor de dados com posição x_j , $j = 0, \dots, n$, a matriz diferenciação D de primeira ordem da uma alta precisão na aproximação para $v'(x_j)$, $v''(x_j)$, etc..., simplesmente fazendo $v'(x_j) = (Dv)_j$, $v''(x_j) = (D^2v)_j$ como descrito na fórmula (4.4). O arquivo-m do Matlab, para o cálculo das entradas da matriz D juntamente com os pontos de colocação, é o seguinte:

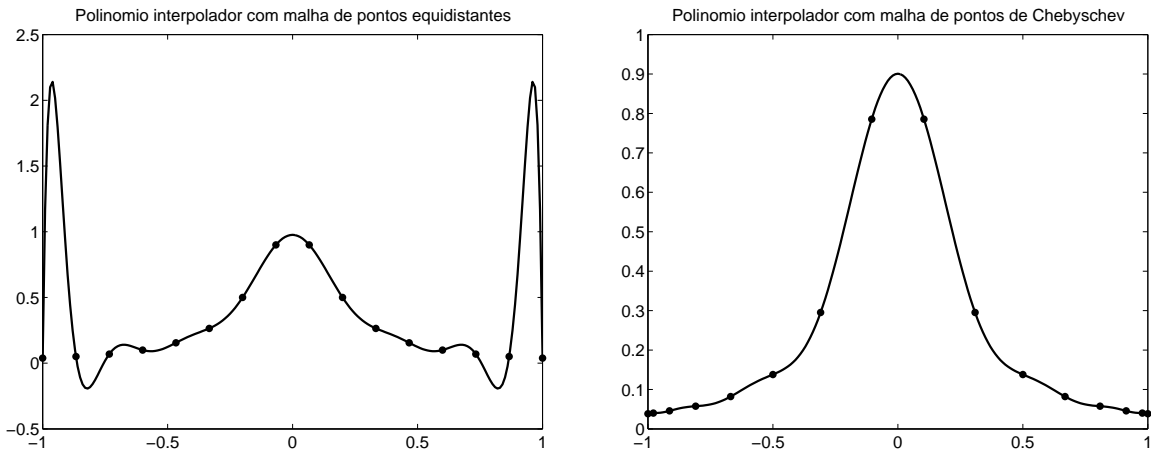


Figura 4.3: Esquerda: Polinômio interpolador usando uma malha com pontos equidistantes. Direita: Polinômio interpolador usando uma malha com pontos de Chebyshev.

```
% cheby calculo D=matriz diferenciação , y=chebyshev grade
function [D,y]=cheby(N)
if N==0,D=0;
    x=1;
    return,
end
x=cos(pi*(0:N)/N)';%calcula os pontos da malha
y=x;
c=[2; ones(N-1,1);2].*(-1).^ (0:N)';
X= repmat(y,1,N+1);
dX=X-X';
%Calcula os elementos da matriz D
D1=(c*(1./c)') ./ (dX+(eye(N+1)));
D1=D1-diag(sum(D1'));
%ordena os pontos da malha em ordem crescente
y=flipud(y);
%reordena os elementos da matriz D de acordo com os pontos da malha
D=flipud(fliplr(D1));
```

os pontos de colocação x_i são numerados da direita para a esquerda e definidos em $[0, 1]$. Para que esta função calcule a matriz diferenciação de Chebyshev D e os pontos de colocação para um intervalo $[a, b]$ qualquer, basta alterar de $y = x$ para $y = \frac{1}{2}((b - a)x + (b + a))$ a linha de código proposta acima.

Vejamos a discretização do operador convecção-difusão usando o método de colocação pseudo espectral de Chebyshev. De fato, para a derivada de primeira ordem temos

$$\begin{bmatrix} u'(x_0) \\ u'(x_1) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} u(x_0) \\ u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_N) \end{bmatrix} = D_1 \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix} + u(x_0)d_1 + u(x_N)d_{N+1}$$

Os pontos x_0 e x_N correspondem aos extremos do intervalo $[0, d]$ assim $u(x_0) = u(0) = 0 = u(d) = u(x_N)$ e então

$$\begin{bmatrix} u'(x_0) \\ u'(x_1) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix} = D_1 \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Como estamos apenas interessados no comportamento da função apenas no interior do intervalo $[0, d]$, sem os extremos, multiplicamos, em ambos os lados da igualdade, pela esquerda, pela matriz E^T , a equação (4.7), logo

$$E^T \begin{bmatrix} u'(x_0) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix} = E^T D_1 \begin{bmatrix} u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix}$$

Note que quando multiplicamos a matriz D_1 , pela direita, pela matriz E^T , obtemos uma matriz de ordem $N - 1$, em que essa matriz resultante é a matriz D_1 sem a primeira e a última linha, ou seja, a matriz D_3 , assim $E^T D_1 = E^T [d_2, \dots, d_n] = D_3$.

Portanto

$$\begin{bmatrix} u'(x_1) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix} = D_3 \begin{bmatrix} u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_N) \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Usando um processo similar para a segunda derivada de $u(x)$ temos

$$\begin{bmatrix} u''(x_1) \\ u''(x_2) \\ \vdots \\ u''(x_{N-1}) \end{bmatrix} = D_2 D_1 \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Portanto temos que $\mathcal{L}u(x) = \nu u''(x) + cu'(x)$ nos pontos de colocação fica

$$\mathcal{L} \begin{bmatrix} u(x_0) \\ u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_N) \end{bmatrix} = \nu \begin{bmatrix} u''(x_0) \\ u''(x_1) \\ \vdots \\ u''(x_N) \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} u'(x_0) \\ u'(x_1) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix}$$

e então

$$\mathcal{L} \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix} \approx (\nu D_2 D_1 + c D_3) \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix}$$

Portanto definimos $L_N^{CC} = (\nu D_2 D_1 + c D_3)$ a matriz dada pela aproximação por colocação do operador convecção-difusão com $N + 1$ pontos de colocação.

Na Figura 4.4, mostramos o espectro e o pseudo espectro da matriz aproximada L_{30}^{CC} de ordem 30, com ν e c tomados iguais a um, e o espectro e o pseudo espectro da matriz L_{150}^{CC} de ordem 150, também com as constantes ν e c iguais a um.

Podemos perceber que as aproximações obtidas com a matriz diferenciação de Chebyshev são consistentes com as aproximações encontradas, teoricamente, do pseudo espectro através das cotas superiores e inferiores da norma de $\|(z - \mathcal{L})^{-1}\|$ que fizemos na seção 3.2.

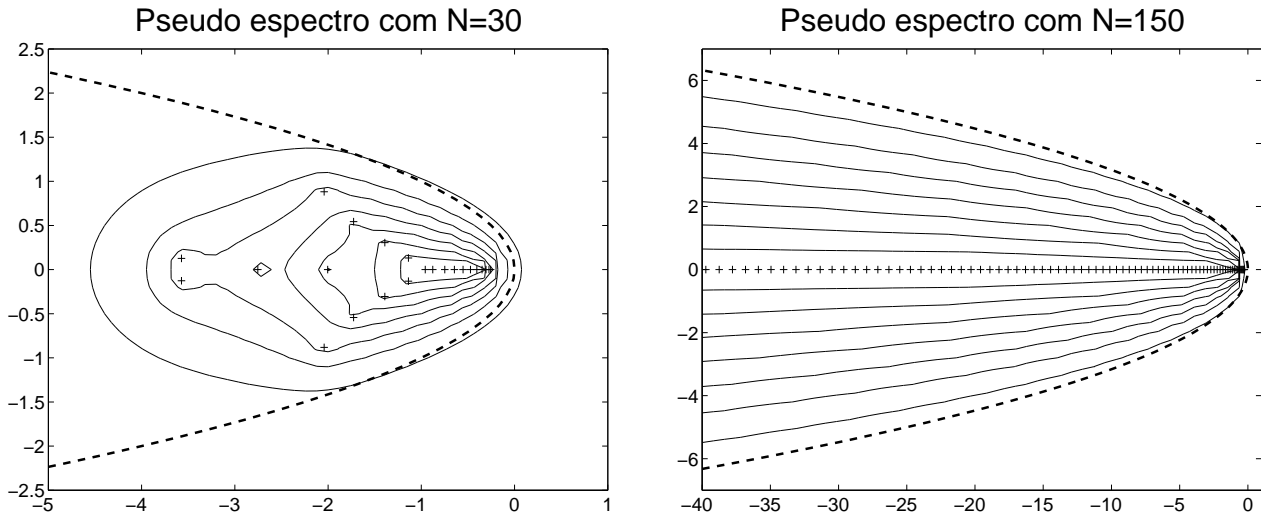


Figura 4.4: Parábola crítica, linha pontilhada, espectro, denotado pelo sinal (+), e pseudo espectro do operador discreto L_N^{CC} para $\epsilon = 10^{-1} \dots 10^{-7}$. Esquerda: Consideramos $N = 30$. Direita: Consideramos $N = 150$.

Capítulo 5

Solução numérica da equação de convecção-difusão linear e não linear

Como exemplos, resolveremos numericamente algumas equações de convecção-difusão tanto para o caso linear como para o caso não linear. O exemplo não linear é a equação de Burger . Neste capítulo, ilustraremos como é feita a discretização para os modelos linear e não linear, incluindo em ambos casos uma análise do pseudo espectro do operador discreto resultante e resultados numéricos que ilustram a precisão alcançada.

5.1 Caso Linear

Consideramos a equação de convecção-difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - c \frac{\partial u}{\partial x} \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (5.1)$$

com condições iniciais e de contorno

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= f(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \\ u(0, t) &= g_0(t), \quad t \geq 0, \\ u(1, t) &= g_1(t), \quad t \geq 0. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Nosso objetivo é descrever um método para resolver a equação de convecção-difusão, baseado no método de colocação pseudo espectral de Chebyshev (PSC). Como introdução, apresentamos também um método baseado em diferenças finitas proposto por Salkuyeh [33] e analisado em [3].

A idéia básica de ambos os métodos é discretizar a variável espacial primeiro, transformando o problema (5.1)-(5.2) num sistema de EDO's do tipo

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{V} + \mathbf{b}(t), \quad \mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0, \quad (5.3)$$

em que \mathbf{A} é uma matriz, \mathbf{V} e \mathbf{b} , vetores de dimensão N_h , e h um parâmetro positivo que determina a malha espacial, e então resolver o sistema resultante através de algum método de integração no tempo.

Para resolver o sistema de EDO's (5.3), além da proposta de Salkuyeh, utilizaremos dois métodos, o primeiro sendo o método Runge-Kutta de ordem quatro, e o segundo um método baseado no cálculo dos autovalores da matriz \mathbf{A} do sistema.

5.1.1 Método de diferenças finitas

Considere uma malha igualmente espaçada no intervalo $[0, 1]$ em que $x_0 = 0$, $x_m = 1$ e $h = \frac{1}{m}$, com $x_i = h_i$, $i = 1, \dots, m - 1$.

Utilizando as fórmulas já conhecidas para aproximar as derivadas

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t) &= \frac{u(x_{i+1}, t) - u(x_{i-1}, t)}{2h} + O(h^2) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t) &= \frac{u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t))}{h^2} + \\ &\quad + O(h^2)\end{aligned}$$

e ignorando o erro de aproximação, transformamos o problema de convecção-difusão num sistema com $m - 1$ equações diferenciais ordinárias

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = A_d V + b(t) \\ V(0) = [f(x_1), \dots, f(x_{m-1})]^T \end{cases} \quad (5.4)$$

em que \mathbf{V} é uma função vetorial com componentes $v_i(t)$ que aproximam $u(x_i, t)$,

$$A_d = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} p & r & & & \\ q & p & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & p & r \\ & & & q & p \end{bmatrix}_{(m-1) \times (m-1)}, \quad b(t) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} qg_0(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ rg_1(t) \end{bmatrix}; \quad (5.5)$$

com $p = -2\gamma$, $q = \gamma + \frac{ch}{2}$, $r = \gamma - \frac{ch}{2}$.

A solução formal de (5.4) sujeita as condições iniciais é dada por

$$\begin{aligned}\mathbf{V}(t) &= \exp(\mathbf{A}_d t) \mathbf{V}(0) + \frac{q}{h^2} \left[\int_0^t \exp(\mathbf{A}_d(t - \tau)) g_0(\tau) \mathbf{e}_1 d\tau \right] \\ &\quad + \frac{r}{h^2} \left[\int_0^t \exp(\mathbf{A}_d(t - \tau)) g_1(\tau) \mathbf{e}_{m-1} d\tau \right],\end{aligned} \quad (5.6)$$

em que $\exp(\mathbf{A}_d t)$ fica determinada pela exponencial de $\mathbf{A}_d t$ e \mathbf{e}_i é o i -ésimo vetor canônico em \mathbb{R}^{m-1} .

Quando $\mathbf{b}(t)$ não depende de t , que é o caso quando as condições de contorno são constantes, a única solução de (5.4) reduz-se para:

$$\mathbf{V}(t) = -\mathbf{A}_d^{-1}\mathbf{b} + \exp(t\mathbf{A}_d)(\mathbf{V}(0) + \mathbf{A}_d^{-1}\mathbf{b}). \quad (5.7)$$

A solução em (5.7), junto com uma fórmula explícita para $\exp(t\mathbf{A}_d)$ num tempo fixado, são usados por Salkuyeh em [33] para calcular a solução numérica de vários problemas testes do tipo (5.1)-(5.2) envolvendo uma função exponencial dependendo do tempo como condições de fronteira.

Salkuyeh em [33] observa que A_d é uma matriz tridiagonal de Toeplitz e portanto diagonalizável, ou seja, $\mathbf{A}_d = P\Lambda P^{-1}$, com P a matriz dos autovetores de \mathbf{A}_d e Λ a matriz correspondente de autovalores, e que P e Λ possuem fórmulas conhecidas. Então através da fórmula de P mostrada em (5.8) Salkuyeh encontra uma fórmula para P^{-1} .

$$p_i = \begin{bmatrix} (q/r)^{1/2} \sin(1i\pi/m) \\ (q/r)^{2/2} \sin(2i\pi/m) \\ \vdots \\ (q/r)^{(m-1)/2} \sin((m-1)i\pi/m) \end{bmatrix}, \quad (5.8)$$

$$i = 1, \dots, m-1,$$

Várias dificuldades na discretização feita por Salkuyeh são apontados por Bazán em [3]. Por exemplo, é ignorado que por causa do fato de ser $\frac{q}{r} > 1$, é inevitável a presença de mal condicionamento em P quando n é suficientemente grande. Mesmo assim, em [3] é mostrado que o fato de \mathbf{A}_d ser tridiagonal pode ser explorado para contornar as dificuldades no método proposto por Salkueyeh. Com a finalidade de comparar os resultados de Salkueyeh, apresentamos um lema que descreve condições para que a solução do problema seja da forma $u(x, t) = \exp(\alpha x + \beta t)$ com α e β cuidadosamente escolhidos.

Lema 6 *Seja \mathbf{A}_d com decomposição espectral $\mathbf{A}_d = P\Lambda P^{-1}$. Então uma condição necessária para $u(x, t) = \exp(\alpha x + \beta t)$ resolver o problema (5.1)-(5.2) é que $g_0(t) = \exp(\beta t)$, $g_1(t) = \exp(\alpha + \beta t)$, e $\gamma\alpha^2 - c\alpha - \beta = 0$. Além disso, a solução aproximada por diferenças finitas é definida por*

$$\mathbf{V}(t) = P \left[\exp(t\Lambda)w_0 + \frac{1}{h^2} ((\beta I - \Lambda)^{-1}(\exp(\beta I t) - \exp(\Lambda t))w_1) \right], \quad (5.9)$$

em que

$$w_0 = P^{-1}\mathbf{V}(0), \quad w_1 = P^{-1}(q\mathbf{e}_1 + \exp(\alpha)r\mathbf{e}_{n-1}),$$

sendo \mathbf{e}_i o i -ésimo vetor coluna da matriz identidade de ordem n .

Prova: A primeira parte é uma consequência imediata do fato de que a solução para (5.1)-(5.2) é da forma $u(x, t) = \exp(\alpha x + \beta t)$. Quanto a equação (5.9), ela resulta de usar $\mathbf{A}_d = P\Lambda P^{-1}$ em (5.6) e as condições de fronteira especificadas.

Na penúltima seção relataremos os resultados numéricos da implementação do método baseado em (5.9) onde P contem os autovetores normalizados e w_0 e w_1 são

obtidas pela resolução de um sistema linear ao invés do uso de uma fórmula para P^{-1} . Enfatizamos que o erro de truncamento do método nesta discretização é da ordem de $O(h^2)$ e não pode ser melhorado, exceto para casos especiais. De fato, se o problema (5.1)- (5.2) tem solução como no lema 1, fica imediato provar o seguinte resultado

Lema 7 *Seja a solução de (5.1)-(5.2) com as hipóteses do lema 1. Então o erro de truncamento em (x_i, t) na discretização (1) por diferenças finitas satisfaz*

$$\tau_i(t) \approx \left(c \frac{\alpha^3 \exp(\alpha)}{6} - \gamma \frac{\alpha^4}{12} \right) h^2 \exp(\beta t) \quad (5.10)$$

É claro que o erro desta discretização fica pequeno quando $\alpha \ll 1$ e $\beta < 0$. E isto será ilustrado na última seção.

5.1.2 Modelo pseudo spectral semi discreto

Para a discretização, utilizaremos as matrizes D_1 , D_2 , D_3 e E que aparecem na seção 4.2.1, e os pontos de Chebyshev, conforme descrito em (4.5). A discretização do problema de convecção-difusão usando o método de colocação pseudo spectral de Chebyshev é análoga ao que foi visto na seção 4.2.1. De fato, para a derivada de primeira ordem temos

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x}(x_1, t) \\ \vdots \\ \frac{\partial u}{\partial x}(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} \approx D_3 \begin{bmatrix} u(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} + g_0(t)E^T d_1 + g_1(t)E^T d_{N+1}$$

e, por um processo similar, encontramos a derivada segunda para $u(x, t)$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_1, t) \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} \approx D_2 D_1 \begin{bmatrix} u(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} + g_0(t)D_2 d_1 + g_1(t)D_2 d_{N+1}.$$

Ignorando o erro de aproximação e denotando por $v_i(t)$ a aproximação para $u(x_i, t)$ a versão semi discreta da equação de convecção-difusão nos leva a um sistema de $N - 1$ EDO's

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = \mathbf{A}V + \mathbf{b}(t), \quad t \geq 0 \\ V(0) = [f(x_1), \dots, f(x_{N-1})]^T \end{cases} \quad (5.11)$$

com x_i como pontos de colocação, e

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \gamma D_2 D_1 - c D_3, \\ \mathbf{b}(t) &= g_0(t)(\gamma D_2 - c E^T) d_1 + g_1(t)(\gamma D_2 - c E^T) d_{N+1} \\ V(t) &= [v_1(t), \dots, v_{N-1}(t)]^T. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Quando a decomposição espectral de $\mathbf{A} = P\Lambda P^{-1}$ é viável, é simples verificar que a solução para o problema de valor inicial é

$$\mathbf{V}(t) = P \exp(t\Lambda) \left[w_0 + \int_0^t \exp(-\Lambda\tau)g_0(\tau)d\tau w_1 + \int_0^t \exp(-\Lambda\tau)g_0(\tau)d\tau w_2 \right], \quad (5.13)$$

sendo

$$w_0 = P^{-1}\mathbf{V}(0), \quad w_1 = P^{-1}(\gamma D_2 - cE^T)d_1,$$

e

$$w_2 = P^{-1}(\gamma D_2 - cE^T)d_{N+1}.$$

Apesar do fato dos autovalores da matriz \mathbf{A} não serem conhecidos através de uma fórmula fechada, deve-se notar que a solução baseada nos autovalores para o sistema semi discreto pode ser implementada sem dificuldade quando N é um número moderado. Outra possibilidade é resolver as EDO's usando qualquer método numérico para o problema da forma

$$\begin{cases} d\mathbf{V}/dt = \mathbf{f}(t, \mathbf{V}) \\ \mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0. \end{cases}$$

Neste trabalho resolvemos (5.11) através do método de Runge-Kutta de ordem 4 (RK4).

5.1.3 Estabilidade Numérica

O objetivo da seção é analisar a escolha do tamanho do passo máximo que assegure a estabilidade numérica do método pseudo espectral em conjunção com RK4 para uma dada malha espacial. Para tanto, lembremos que para assegurar estabilidade numérica de um método no caso do sistema de EDO's (5.11) envolver uma matriz A quase normal, o tamanho do passo Δt deve ser escolhido de tal forma que o espectro da matriz $\Delta t\mathbf{A}$ esteja contido na região de estabilidade do método. Lembremos também que quando \mathbf{A} é não normal, esta condição de estabilidade nem sempre é confiável, falhando freqüentemente quando \mathbf{A} é muito longe de ser normal [39, 37, 43]. Para contornar as dificuldades provenientes de se trabalhar com matrizes altamente não normais, Trefethen e seus colaboradores [39, 43] provaram que para se garantir estabilidade de um método segundo Lax, o tamanho de passo deve ser escolhido tal que o ϵ -pseudo espectro de $\Delta t\mathbf{A}$ fique dentro e a uma distância $\mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\Delta t)$ da região de estabilidade com $\Delta t \rightarrow 0$.

Assim, para analisarmos a estabilidade do método RK4 quando aplicado ao sistema semi discreto associado ao problema de convecção-difusão, devemos analisar se a matriz do sistema $\mathbf{A} = \gamma D_2 D_1 - c D_3$ em (5.11) é quase normal ou não. Duas observações seguem de maneira imediata:

- $D_2 D_1$ é quase normal
- D_3 é não normal

A quase normalidade de D_2D_1 provém do fato dessa matriz aproximar o operador $\mathcal{L}u = u''(x)$ com condições de fronteira nulas no intervalo $[-1, 1]$. Já a parcela não normal, ela aproxima o operador $\mathcal{L}u = u'(x)$. Detalhes sobre o assunto podem ser encontrados em [37].

Como a matriz \mathbf{A} combina ambas as propriedades de maneira altamente não linear, espera-se que ela seja altamente não normal, exceto provavelmente quando $c \approx 0$, caso em que fica aproximadamente igual a D_2D_1 . Isto pode ser verificado de várias maneiras, e uma delas é pela inspeção do ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} que é mostrado na Figura 5.1 para $n = 30$ e $\gamma = 0.01$, e para duas escolhas da constante c : $c = 5$ e $c = 0.05$. Observe que para $c = 5$ o ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} fica mais amplo do que para $c = 0.05$, daí podemos concluir que o grau de não normalidade de A é maior no primeiro caso.

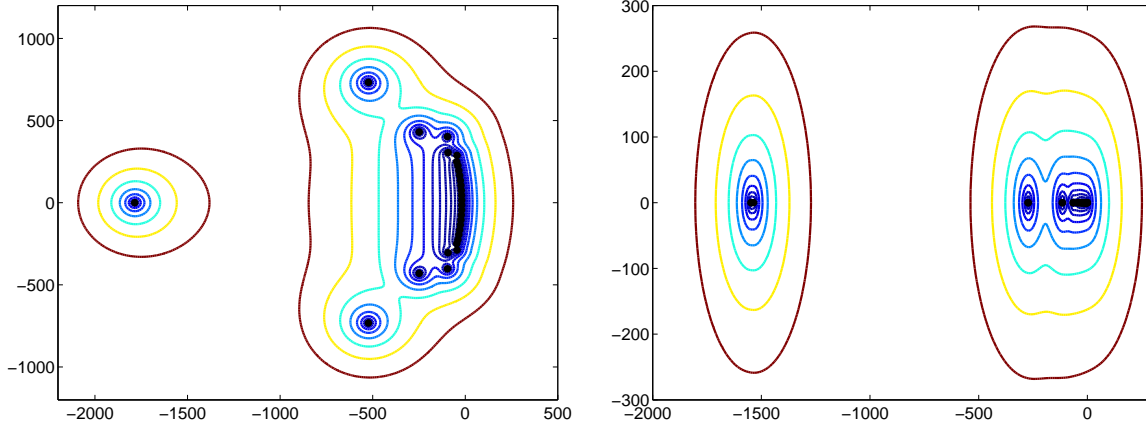


Figura 5.1: Esquerda: espectro e ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} para $c = 5$ e $\gamma = 0.01$ com $\epsilon = 10^{k/2}$ $k = -4, 0, \dots, 2.5$. Direita: espectro e ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} para $c = 0.05$ e $\gamma = 0.01$ com $\epsilon = 10^{k/2}$, $k = -4, 0, \dots, 2.5$

Fica portanto evidente que \mathbf{A} pode-se tornar altamente não normal quando a velocidade c não é pequena em relação a γ , em cujo caso concluímos que uma forma correta de garantir a estabilidade do método RK4 é através da inspeção do ϵ -pseudo espectro. Para fazer isto exploraremos o fato de que em geral, o raio espectral da matriz é determinado por autovalores reais [3], e que o ponto extremo no eixo x da região de estabilidade absoluta para o método RK4 é aproximadamente 2.78. Usando esta informação calculamos o passo máximo que garante a estabilidade do método "via análise de autovalores" pela fórmula

$$\Delta t_{\max} = \frac{2.78}{\rho(\mathbf{A})} \quad (5.14)$$

em que $\rho(\mathbf{A})$ é o raio espectral de A , e então escolhemos o tamanho de passo que garanta a estabilidade pela inspeção do ϵ -pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{A}$ com Δt levemente menor do que Δt_{\max} . Caso o raio espectral não seja determinado por um autovalor real, o tamanho do passo Δt_{\max} pode ser estimado impondo a restrição

$$\Delta t_{\max} = \frac{|z|}{\rho(\mathbf{A})} \quad (5.15)$$

em que z é o ponto na curva da região de estabilidade do método RK4, veja seção 2.2.1, na direção do maior autovalor absoluto.

Para avaliar a influência de c em relação a γ na estabilidade do método, calculamos o tamanho de passo máximo segundo a análise de autovalores da matriz $\Delta t \mathbf{A}$ ((5.14) e (5.15)) e analisamos o ϵ -pseudo espectro da matriz para três valores de γ e com c fixo igual a 1.7. O resultado da análise do tamanho de passo máximo aparece na tabela 5.1.

N	$\Delta t_{\max} (\gamma = 0.1)$	$\Delta t_{\max} (\gamma = 0.01)$	$\Delta t_{\max} (\gamma = 0.001)$
8	0.0303×10^0	0.1259×10^0	0.1133×10^0
16	0.0021×10^0	0.0196×10^0	0.0272×10^0
32	1.3807×10^{-4}	0.0013×10^0	0.0088×10^0
64	8.7285×10^{-6}	8.5222×10^{-5}	7.5546×10^{-4}

Tabela 5.1: Tamanho de passo pelo critério de autovalores da matriz $\Delta t \mathbf{A}$

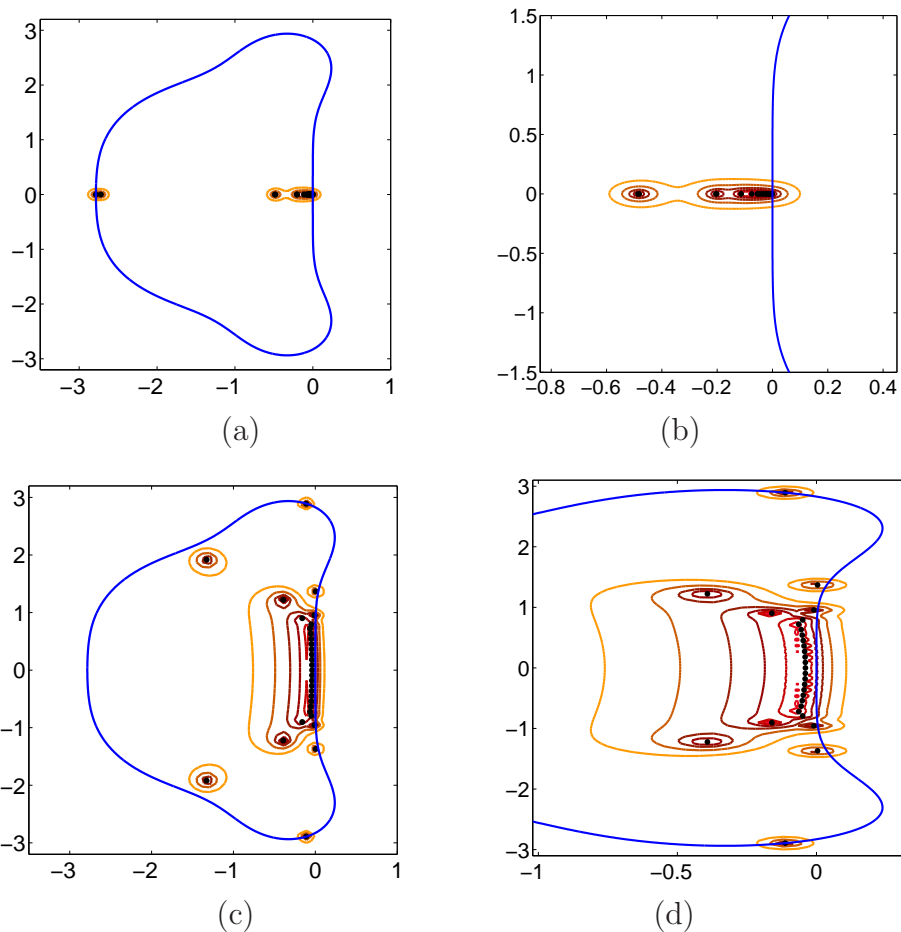


Figura 5.2: ϵ -pseudo espectro de $(\Delta t_{\max})\mathbf{A}$ para $\epsilon = 10^{-k/4}$, $k = 4, \dots, 16$, e $N = 32$. (a): Caso: $\gamma = 0.1$ (b): zoom de (a). (c) Caso: $\gamma = 0.001$, (d): zoom de (c).

Este mesmo processo foi seguido em vários experimentos numéricos, dois dos

quais serão discutidos nesta seção.

5.1.4 Exemplos Numéricos Para o Caso Linear

Exemplo 1.

Escolhemos a equação de convecção-difusão em que a solução é da forma:

$$u(x, t) = \exp(\alpha x + \beta t), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0.$$

Assim, as condições iniciais e de contorno são:

$$u(x, 0) \equiv f(x) = \exp(\alpha x),$$

$$u(0, t) \equiv g_0(t) = \exp(\beta t),$$

$$u(1, t) \equiv g_1(t) = \exp(\alpha + \beta t).$$

O problema será resolvido pelo método de diferenças finitas (DF) e por duas versões do método pseudo espectral de Chebyshev, uma baseada no método Runge-Kutta de ordem quatro (PSC), e a outra baseada no cálculo dos autovalores (PSCA) conforme descrito em (5.13). Os cálculos numéricos são feitos no Matlab. Os parâmetros usados neste exemplo são

$$c = 3.5, \quad \gamma = 0.022, \quad \alpha = 0.02854797991928 \quad \text{e} \quad \beta = -0.0999$$

Escolhemos este exemplo pois ele é um dos que aparecem no artigo de Salkuyeh [33]. Direcionaremos nossa atenção para a escolha do tamanho do passo que garanta a estabilidade do método PSC.

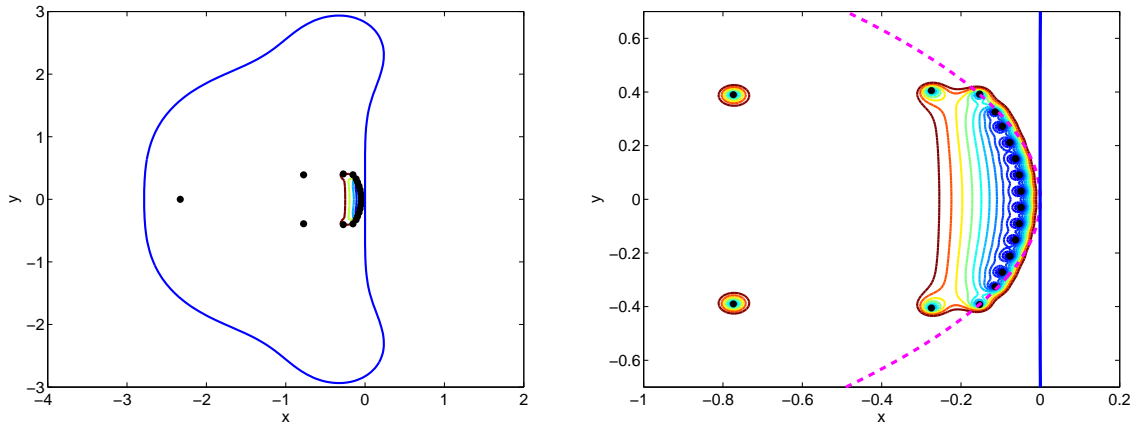


Figura 5.3: Esquerda: Região de estabilidade absoluta do método RK e ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t \mathbf{A}$ para $\Delta t = 0.003$ e $\epsilon = 10^{-k/2}$, $k = 4, 5, \dots, 8$. Direita: Zoom do ϵ -pseudo espectro juntamente com a parábola limite $x = -y^2$.

A inspeção do espectro de \mathbf{A} para $N = 20$ revela que, exceto para um outlier, autovalor afastado do restante, real igual a $-776,2908$, o resto do espectro vem em

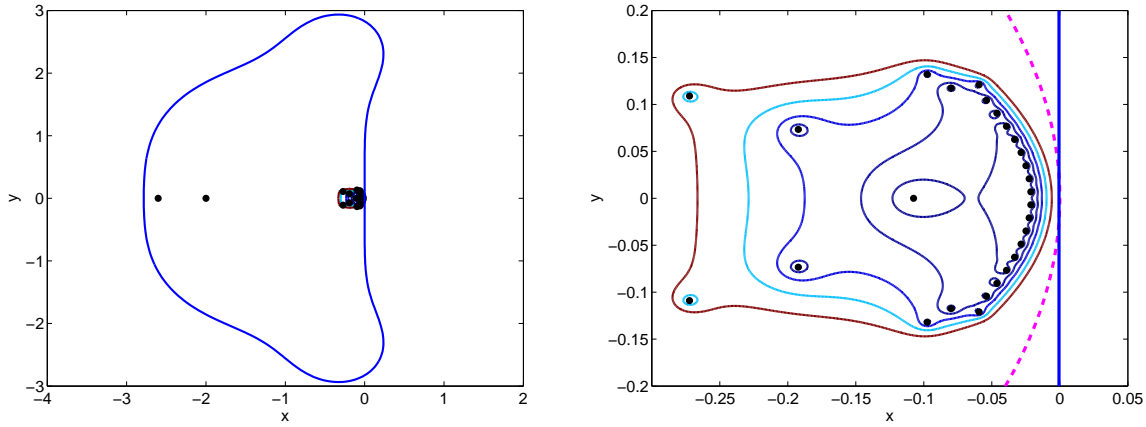


Figura 5.4: Esquerda: Região de estabilidade absoluta do método RK e ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t \mathbf{A}$ para $\Delta t = 0.0007$ e $\epsilon = 10^{-k/2}$, $k = 4, 5, \dots, 8$. Direita: Zoom do ϵ -pseudo espectro juntamente com a parábola limite $x = -y^2$.

pares complexos conjugados e que o raio espectral é determinado pelo outlier. O tamanho do passo máximo no sentido da análise da estabilidade dos autovalores, utilizando a fórmula (5.14), é assim dada por $\Delta t_{\max} = 0.0036$. Analisando o ϵ -pseudo espectro de \mathbf{A} , figura 5.3, concluímos que um tamanho de passo razoável que garanta integração estável, isto é, que garanta que o pseudo espectro fique totalmente contido na região de estabilidade absoluta do método Runge-Kutta de ordem quatro, é $\Delta t = 0.003$. Isto segue da inspeção do ϵ -pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{A}$, veja figura 5.3 em que tomamos $\Delta t = 0.003$.

Fizemos a mesma análise para o caso em que $N = 30$ e a inspeção do espectro de \mathbf{A} revela que, com exceção de três autovalores reais, o espectro vem em pares complexos conjugados, e o raio espectral é determinado pelo outlier $-3,7176 \times 10^3$. Portanto, o tamanho do passo máximo no sentido da análise da estabilidade baseada em autovalores é dado por $\Delta t_{\max} = 0.00074779$. Analisando o ϵ -pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{A}$ concluímos que um tamanho de passo razoável que garanta integração estável é $\Delta t = 0.0007$, veja figura 5.4.

Observe que em ambos os casos, como mostram as figuras 5.3 e 5.4 na direita, o pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{A}$ encontram-se na parte interna da parábola limite, linha pontilhada, conforme comentado anteriormente no capítulo 3.

A solução numérica dos métodos PSC e PSCA para $t = 0.1$, $N = 20$, $\Delta t = 0.001$ e a solução numérica do método DF com $m = 55$ e tamanho do passo $h \approx 0.01818$ são mostrados na Figura 5.5, a esquerda. Na direita, apresentamos a solução numérica com $N = 30$ e $\Delta t = 0.001$ para os métodos PSC e PSCA, e a solução numérica do método DF com $m = 40$ e $h = 0.025$. Os resultados apresentados na Figura 5.5, a esquerda, mostram que o método PSCA é melhor do que o método PSC e que o método de diferenças finitas DF deteriora muito. Para $N = 30$ e $\Delta t = 0.0001$ há uma significativa melhora do PSC e menor precisão da solução para PSCA. A solução por diferenças finitas com $m = 40$ e tamanho do passo $h \approx 0.025$ estabiliza, mas é inferior aos outros dois métodos apresentados. A superioridade de PSC sobre

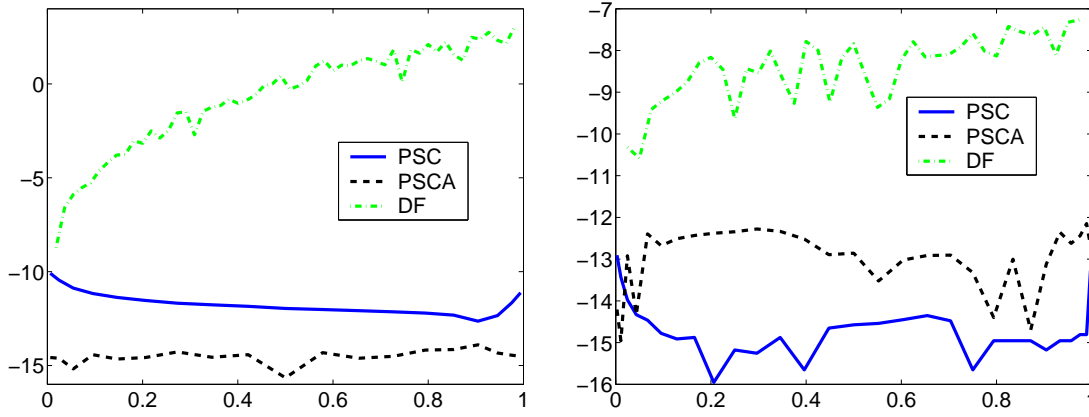


Figura 5.5: Esquerda: Erro absoluto de logaritmo na base 10 da solução pelos métodos PSC e PSCA para $t = 0.1$, $\Delta t = 0.001$ $N = 20$ e DF com $m = 55$ e $h \approx 0.01818$ Direita: Resultados para $N = 30$, $\Delta t = 0.0001$ e $m = 40$ com $h \approx 0.025$

PSCA acontece devido à imprecisão do cálculo dos autovalores para $N = 30$ devido a influencia da não normalidade da matriz \mathbf{A} , comentada na seção anterior. A conclusão é que usar PSCA pode não ser uma boa idéia.

Exemplo 2.

No exemplo anterior nos preocupamos em mostrar a precisão do método pseudo espectral de Chebyshev em relação ao método proposto por Salkuyeh e verificamos a superioridade do método pseudo espectral. Nosso objetivo agora, com os exemplos que virão, é mostrar o comportamento do pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{A}$ com diferentes escolhas de γ , assim como a precisão do método PSC. Utilizaremos dois valores de N , $N = 20$ e $N = 40$, e o tempo $t = 0.8$.

Neste exemplo, a solução da equação de convecção-difusão é da forma

$$u(x, t) = \sqrt{\frac{5}{5 + 10\gamma t}} \exp \left[-\frac{(x - 2 - ct)^2}{0.4(5 + 10\gamma t)} \right]$$

em que c e γ são as mesmas constantes que aparecem na equação 5.1. As condições iniciais e de contorno são

$$u(x, 0) \equiv f(x) = \exp \left[-\frac{(x - 2)^2}{2} \right],$$

$$u(0, t) \equiv g_0(t) = \sqrt{\frac{5}{5 + 10\gamma t}} \exp \left[-\frac{(2 + ct)^2}{0.4(5 + 10\gamma t)} \right],$$

$$u(1, t) \equiv g_1(t) = \sqrt{\frac{5}{5 + 10\gamma t}} \exp \left[-\frac{(1 + ct)^2}{0.4(5 + 10\gamma t)} \right].$$

Caso 1: $c = 1$, $\gamma = 0.1$

A inspeção do espectro de A para $N = 20$ revela um autovalor outlier igual a -3.1155×10^3 que determina o raio espectral. Desta forma, o tamanho do passo máximo, no sentido da análise da estabilidade dos autovalores, é dado por $\Delta t_{\max} = 8.9873 \times 10^{-4}$. Assim, um tamanho de passo razoável, que garanta integração estável, é $\Delta t = 0.0008$. Estas escolhas seguem da inspeção do ϵ -pseudo espectro de $\Delta t A$. Conforme é mostrado na Figura 5.6.

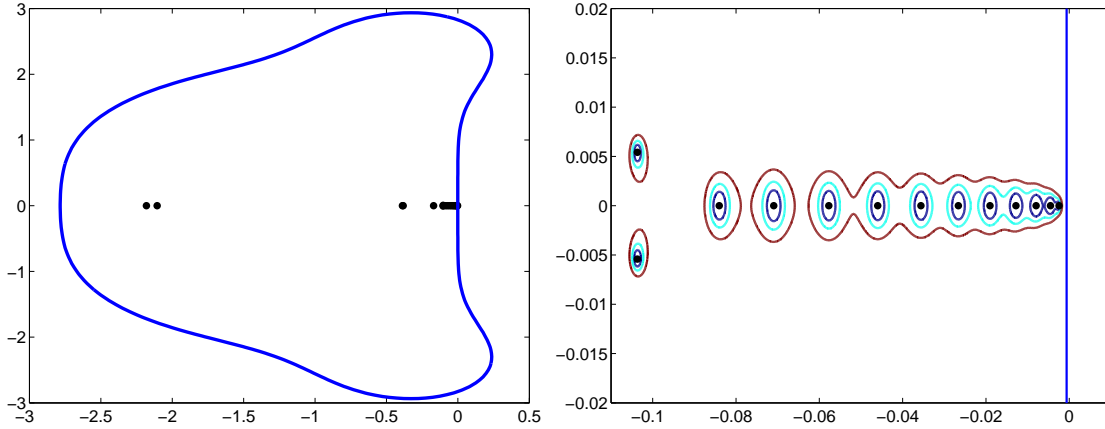


Figura 5.6: Esquerda: Região de estabilidade absoluta do método RK e ϵ -pseudo espectro da matriz $\Delta t \mathbf{A}$ para $\Delta t = 0.0008$, $N=20$ e $\epsilon = 10^{-k/2}$, $k = 4, 5, \dots, 8$. Direita: Zoom do ϵ -pseudo espectro

A mesma análise foi feita para $N = 40$, revelando um autovalor outlier igual a -4.8841×10^4 que determina o raio espectral. Logo, $\Delta t_{\max} = 5.7329 \times 10^{-5}$ e uma escolha de tamanho de passo razoável é $\Delta t = 0.00005$.

O erro absoluto da solução numérica do método com o tempo $t = 0.8$ para $N = 20$, $N = 40$ e respectivamente $\Delta t = 0.0001$ e $\Delta t = 0.00004$ são mostrados na Figura 5.7

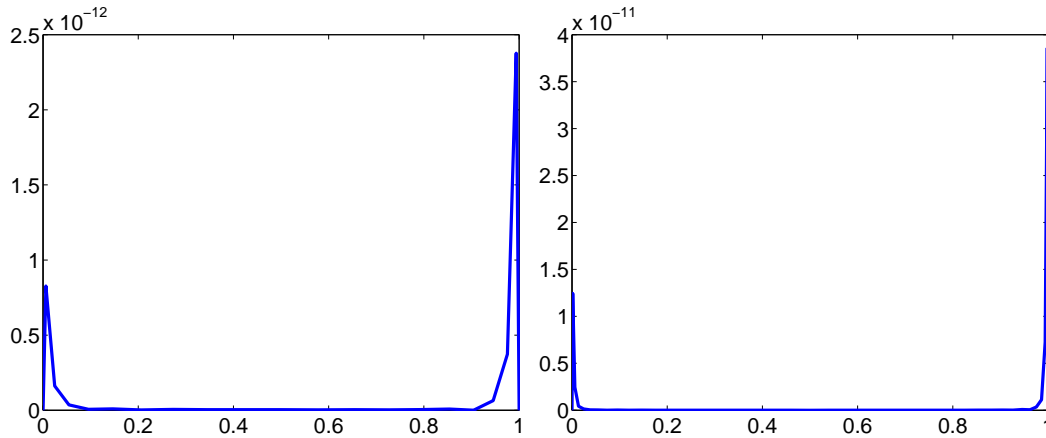


Figura 5.7: Esquerda: Erro absoluto para $t = 0.8$, $\Delta t = 0.0001$ $N = 20$ Direita: Resultados para $N = 40$, $\Delta t = 0.00004$

Caso 2: $c = 1$, $\gamma = 0.01$

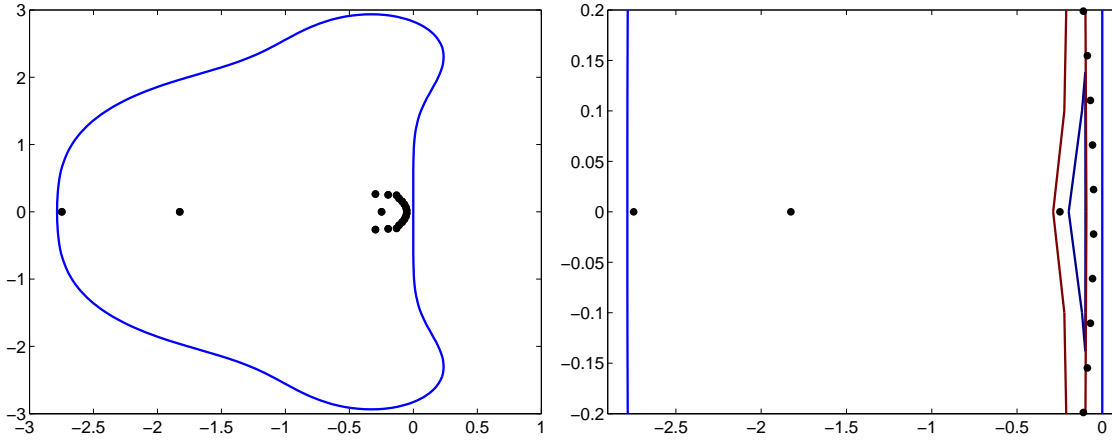


Figura 5.8: Esquerda: Pseudo espectro com $N = 20$ $\gamma = 0.01$ $c = 1$ mais região de estabilidade absoluta do método Runge-Kutta de ordem 4. Direita: Zoom do pseudo espectro

A inspeção do espectro de A para $N = 20$ revela um auto valor outlier igual a -3.4340×10^2 . O raio espectral é que é dado pelo outlier. Desta forma, o tamanho do passo máximo, no sentido da análise da estabilidade dos autovalores, é dado por 0.0082. Assim, um tamanho de passo razoável, que garanta integração estável, é $\Delta t = 0.008$. Estas escolhas seguem da inspeção do ϵ -pseudo espectro de $\Delta t A$, mostrados na Figura 5.8. A mesma análise feita para $N = 40$ revela um outlier igual a -5.0559×10^3 . O raio espectral é 5.0559×10^3 é dado pelo outlier. Logo, $\Delta t_{\max} = 5.5381 \times 10^{-4}$ é uma escolha de tamanho de passo razoável é $\Delta t = 0.0005$.

A análise do pseudo espectro de A , através da figura 5.8, revela que A é mais não normal, que no caso um. Isto acontece, devido ao fato de que $\gamma \approx 0$ que implica $A \approx -cD_3$ que é altamente não normal, como foi discutido em 5.1.3. Na Figura 5.8, a direita, as linhas verticais que aparecem nos extremos desta figura, são a fronteira da região de estabilidade absoluta do método Runge-Kutta de ordem 4.

A solução numérica do método com o tempo $t = 0.8$ para $N = 20$, $N = 40$ e respectivamente $\Delta t = 0.001$ e $\Delta t = 0.0001$ são mostrados na figura 5.9.

5.2 Caso não linear: equação de Burger

Resolveremos, pelo método pseudo espectral de Chebyshev, um modelo não linear da equação de convecção-difusão conhecido como equação de Burguer [35] descrita por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u \frac{\partial u}{\partial x}, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (5.16)$$

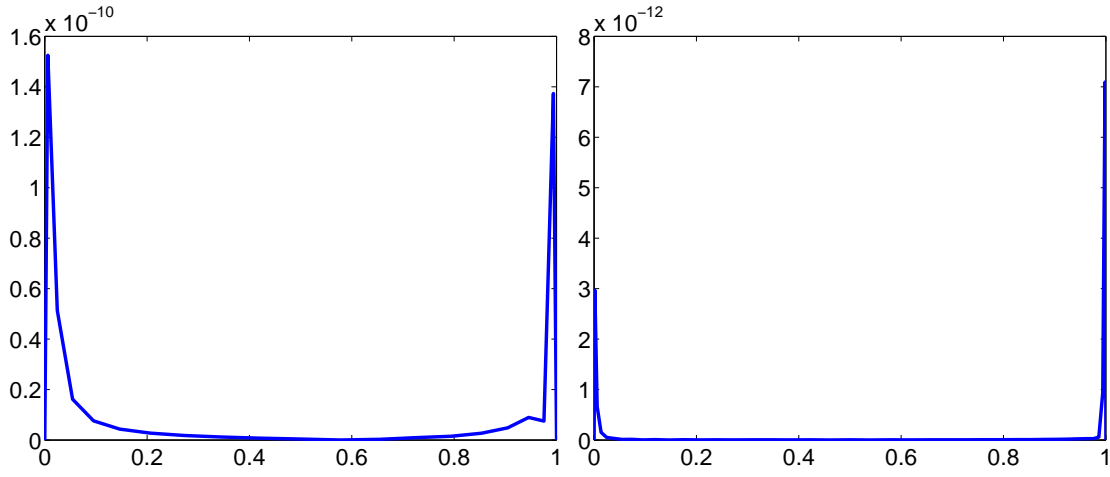


Figura 5.9: Esquerda: Erro absoluto para $t = 0.8$, $\Delta t = 0.0001$ $N = 20$ Direita: Resultados para $N = 40$, $\Delta t = 0.00001$

com condições iniciais e de contorno

$$\begin{aligned}
 u(x, 0) &= f(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \\
 u(0, t) &= g_0(t), \quad t \geq 0, \\
 u(1, t) &= g_1(t), \quad t \geq 0.
 \end{aligned} \tag{5.17}$$

Como feito anteriormente, primeiro discretizamos a variável espacial, transformando o problema (5.16)-(5.17) num sistema não linear de EDO's e, a seguir, resolvemos o sistema resultante utilizando o método Runge-Kutta de ordem quatro. Uma análise de estabilidade do método baseado na inspeção do ϵ -pseudo espectro da matriz Jacobiana de um modelo linearizado associado ao modelo não linear também é apresentado.

5.2.1 Modelo pseudo espectral semi discreto para a equação de Burger

A discretização do problema é feita usando as matrizes D_1 , D_2 , D_3 e E definidas na seção 4.2.1. Para tanto, faremos apenas a aproximação da parcela não linear, ou seja, uu_x , pois a discretização da segunda derivada é feita exatamente como no caso linear. Com efeito, lembremos primeiro que

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x}(x_0, t) \\ \vdots \\ \frac{\partial u}{\partial x}(x_N, t) \end{bmatrix} \approx D_1 \begin{bmatrix} u(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} + g_0(t)d_1 + g_1(t)d_{N+1}$$

Logo, para a parcela uu_x temos logo

$$\begin{bmatrix} u(x_0, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_0, t) \\ \vdots \\ u(x_N, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_N, t) \end{bmatrix} \approx \mathcal{U} D_1 \begin{bmatrix} u(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} + g_0(t) \mathcal{U} d_1 + g_1(t) \mathcal{U} d_{N+1}$$

em que

$$\mathcal{U} = \begin{bmatrix} u(x_0, t) & & \\ & \ddots & \\ & & u(x_N, t) \end{bmatrix}.$$

Como já conhecemos a solução nos extremos do intervalo, multiplicaremos pela esquerda em ambos os lados da equação acima por E^T . Feito isto obtemos

$$\begin{bmatrix} u(x_1, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} \approx \mathcal{U}_1 D_3 \begin{bmatrix} u(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}, t) \end{bmatrix} + g_0(t) \mathcal{U}_1 E^T d_1 + g_1(t) \mathcal{U}_1 E^T d_{N+1},$$

sendo

$$\mathcal{U}_1 = \text{diag}(u(x_1, t), \dots, u(x_{N-1}, t)).$$

Lembrando que para a derivada de segunda ordem temos

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_1, t) \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_N, t) \end{bmatrix} \approx D_2 D_1 \begin{bmatrix} u(x_1, t) \\ \vdots \\ u(x_N, t) \end{bmatrix} + g_0(t) D_2 d_1 + g_1(t) D_2 d_{N+1},$$

ignorando o erro de aproximação e denotando por $v_i(t)$ a aproximação para $u(x_i, t)$, vemos que a versão semi discreta da equação de Burger é descrita por um sistema de $N - 1$ EDO's de primeira ordem da forma

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{V}) \\ \mathbf{V}(0) = V_0, \end{cases}, \quad (5.18)$$

em que os x_i são os pontos de colocação de Chebyshev,

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{V}) = (\gamma D_2 D_1 - \mathcal{V} D_3) \mathbf{V} + g_0(t) (\gamma D_2 - \mathcal{V} E^T) d_1 + g_1(t) (\gamma D_2 - \mathcal{V} E^T) d_{N+1}$$

$$\mathcal{V} = \text{diag}(v_1(t), \dots, v_{N-1}(t)),$$

e

$$\mathbf{V}(t) = [v_1(t), \dots, v_{N-1}(t)]^T, \quad V_0 = [f(x_1) \dots f(x_{N-1})].$$

5.2.2 Análise de Estabilidade

Conforme descrito na Observação 5, cap.2, a estabilidade do modelo semidiscreto no caso não linear depende das propriedades do espectro da matriz Jacobiana do modelo linearizado associado. Seja $\mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ a matriz Jacobiana da função vetorial $\mathbf{F}(t, \mathbf{V})$ no ponto (t_0, \mathbf{V}_0) . Defina

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \text{diag}(f(x_1), \dots, f(x_{N-1})), \quad \mathcal{X} = \text{diag}([D_3 \mathbf{V}]_i), \\ \mathcal{Y} &= \text{diag}([E^T d_1]_i), \quad \mathcal{Z} = \text{diag}([E^T d_{N+1}]_i),\end{aligned}\tag{5.19}$$

Então pode-se verificar que a matriz Jacobiana é dada por

$$\mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0) = \gamma D_2 D_1 - \mathcal{F} D_3 - \mathcal{X} - g_0(t_0) \mathcal{Y} - g_1(t_0) \mathcal{Z}.\tag{5.20}$$

Observe que, diferente do caso linear, o espectro de $\mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ depende da condição inicial e das condições de fronteira, podendo ser fortemente influenciado pela parte “quase” normal, $\gamma D_2 D_1$, ou pela parte “não normal” descrita pelo termo $\mathcal{F} D_3$, segundo o “tamanho” de γ . Com intuito de avaliar a influência do parâmetro γ na estabilidade do método Runge-Kutta, analisaremos a equação de Burger cuja solução é

$$u(x, t) = \frac{\mu + \alpha + (\mu - \alpha) \exp(K\xi)}{1 + \exp(K\xi)}, \quad 0 \leq x \leq 1, t \geq 0,$$

em que μ , β e α são constantes positivas, $K = \alpha/\gamma$, e $\xi = x - \mu t - \beta$ [35]. As condições iniciais e de contorno são portanto

$$\begin{aligned}u(x, 0) &\equiv f(x) = \frac{\mu + \alpha + (\mu - \alpha) \exp(K(x - \beta))}{1 + \exp(K(x - \beta))}, \\ u(0, t) &\equiv g_0(t) = \frac{\mu + \alpha + (\mu - \alpha) \exp(K(-\mu t - \beta))}{1 + \exp(K(-\mu t - \beta))}, \\ u(1, t) &\equiv g_1(t) = \frac{\mu + \alpha + (\mu - \alpha) \exp(K(1 - \mu t - \beta))}{1 + \exp(K(1 - \mu t - \beta))}.\end{aligned}$$

Por outro lado, sabe-se que o grau de dificuldade no cálculo de soluções numéricas precisas através de métodos espectrais depende da regularidade da solução [6] e que problemas cujas soluções apresentam picos ou gradientes elevados são mais difíceis de se resolver. A equação de Burger é um exemplo que ilustra bem essas dificuldades, especialmente quando o parâmetro γ é pequeno.

O comportamento da solução como função de γ , para

$$\alpha = 0.4, \quad \beta = 0.125, \quad \mu = 0.6,$$

mostrado na figura 5.10, sugere maiores dificuldades quando $\gamma \leq 0.01$.

Para avaliar a influência de γ na estabilidade do método, calculamos o tamanho de passo máximo segundo a análise de autovalores da matriz $\Delta t \mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ e analisamos o ϵ -pseudo espectro da matriz jacobiana para três valores de γ . O resultado da análise do tamanho de passo máximo aparece na tabela 5.2.

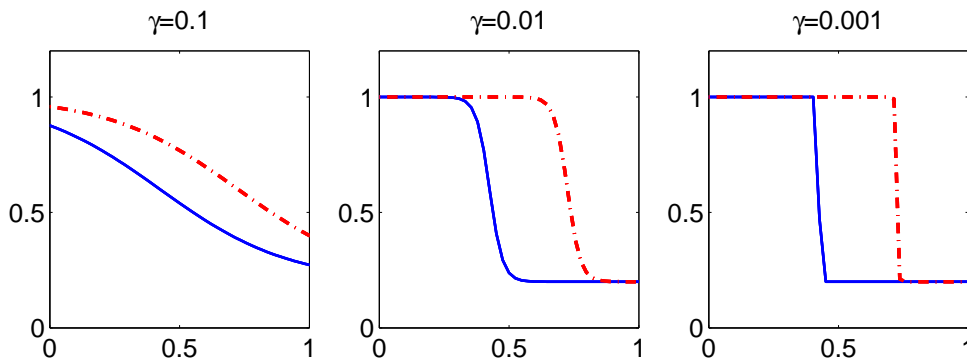


Figura 5.10: Solução exata da equação de Burger para dois tempos diferentes: as linhas sólidas correspondem ao tempo $t = 0.5$ e as tracejadas ao tempo $t = 1$.

N	$\Delta t_{\max} (\gamma = 0.1)$	$\Delta t_{\max} (\gamma = 0.01)$	$\Delta t_{\max} (\gamma = 0.001)$
8	0.3932×10^0	0.5049×10^0	0.5741×10^0
16	0.2167×10^{-2}	0.1928×10^{-1}	0.6203×10^{-1}
32	0.1389×10^{-3}	0.1319×10^{-2}	0.1567×10^{-1}
64	0.8742×10^{-5}	0.8613×10^{-4}	0.7800×10^{-3}

Tabela 5.2: Tamanho de passo pelo critério de autovalores da matriz $\Delta t \mathbf{J}(t_0, V_0)$

Experimentos numéricos mostraram que o tamanho de passo máximo nos casos $\gamma = 0.1$ e $\gamma = 0.01$ assegura estabilidade de RK4, mas o mesmo não ocorre quando $\gamma = 0.001$. Esses fatos dependem do comportamento do ϵ -pseudo da matriz $\Delta t \mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ o qual é mostrado na figura 5.11. Dessa figura fica claro que enquanto o critério de estabilidade segundo pseudo autovalores é satisfeito para $\gamma = 0.1$, isto é, o ϵ -pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ fica contido dentro da região de estabilidade absoluta do método RK4 para ϵ suficientemente pequeno, isso não ocorre quando $\gamma = 0.001$ conforme visto nas partes (c)-(d) da mesma figura. Resultados análogos ao caso $\gamma = 0.1$ foram obtidos quando $\gamma = 0.01$ (não mostrado aqui). Resultados numéricos que ilustram estes fatos são apresentados na próxima seção.

5.2.3 Resultados Numéricos

Nesta seção apresentamos resultados do nosso experimento numérico correspondente a três valores de γ e alguns valores de N . A escolha do tamanho do passo foi feita analogamente ao caso linear, isto é, escolhendo tamanhos de passo Δt um pouco menores daqueles apresentados na tabela 5.2.

Caso 1: $\gamma = 0.1$

A ausência de gradientes elevados na solução sugere que este caso não deve apresentar dificuldades e que a precisão das soluções numéricas construídas pelo método deve melhorar significativamente a medida que a dimensão aumenta. Resultados ilustrativos obtidos com $N = 32$ e tamanho de passo $\Delta t = 0.0001$ são mostrados na

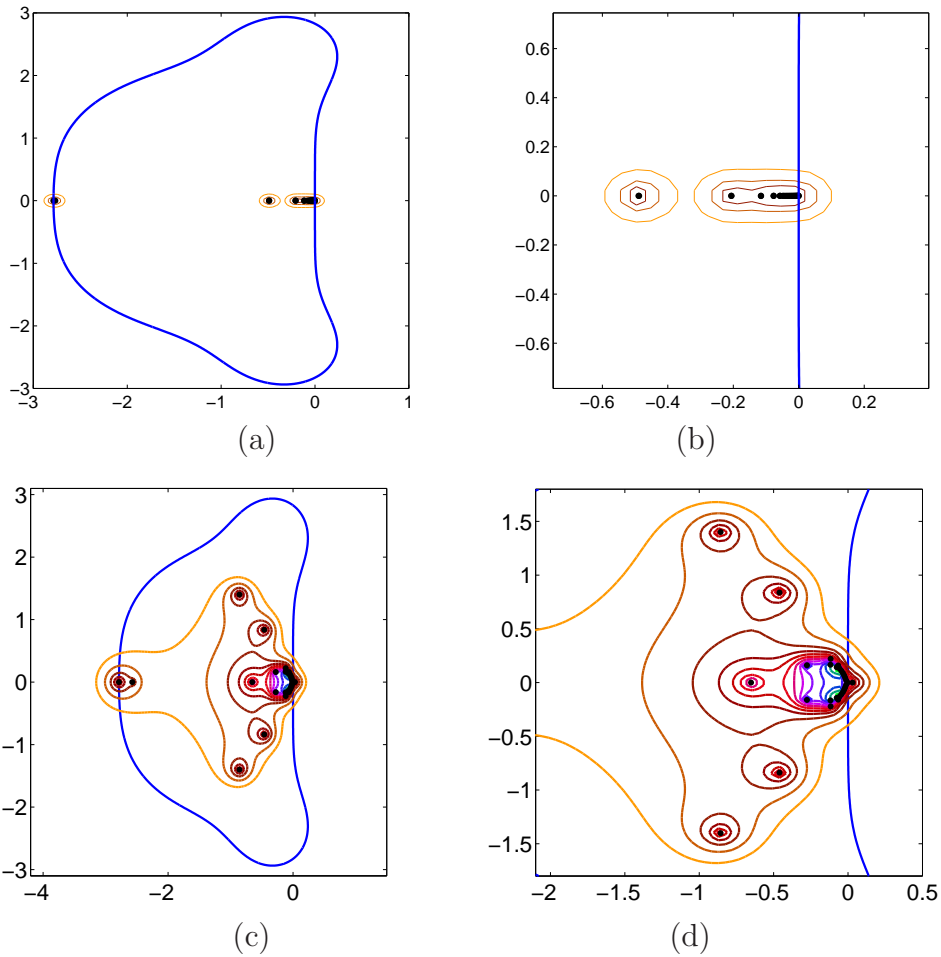


Figura 5.11: ϵ -pseudo espectro de $\Delta t \mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ para $\epsilon = 10^{-k/4}$, $k = 4, \dots, 16$, e $N = 32$. (a): Caso: $\gamma = 0.1$ (b): zoom de (a). (c) Caso: $\gamma = 0.001$, (d): zoom de (c).

Figura 5.12.

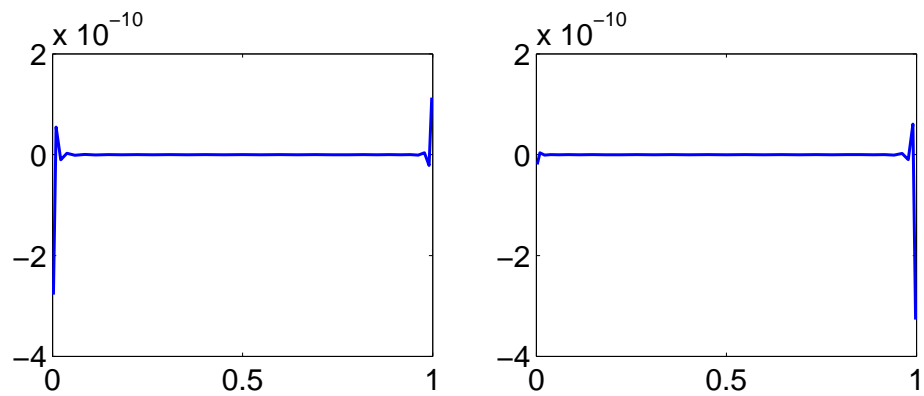


Figura 5.12: Erro na solução aproximada do método pseudo espectral de Chebyshev para $N = 32$ e $\gamma = 0.1$, nos tempos $t = 1$. (esquerda), e $t = 2$. (direita)

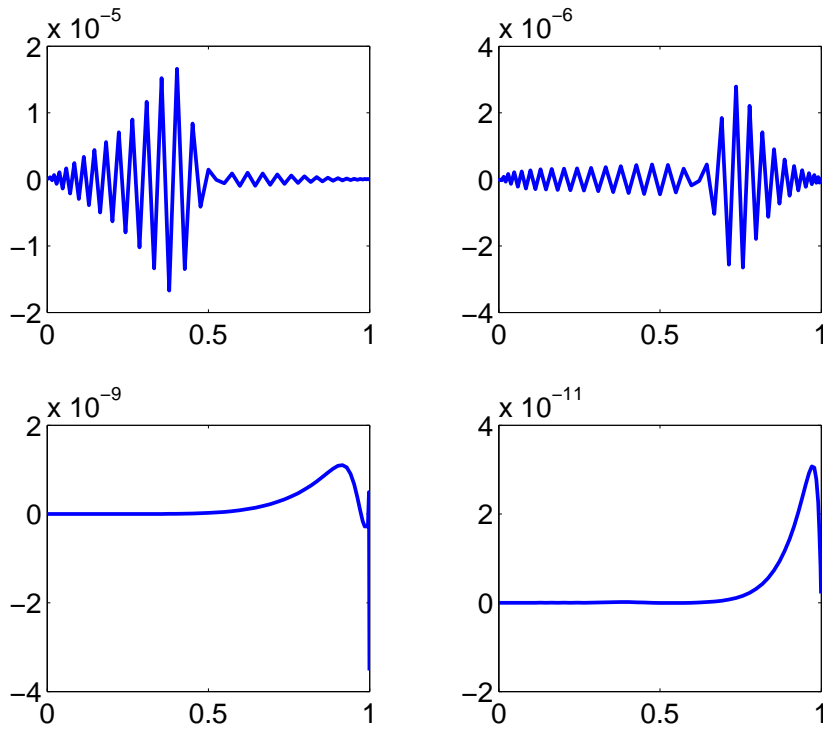


Figura 5.13: Erro na solução aproximada pelo método pseudo espectral de Chebyshev para $N = 64$ e $\gamma = 0.01$ nos tempos $t = 0.5$ (superior esquerda), $t = 1$. (superior direita), $t = 1.5$ (inferior esquerda), e $t = 2$. (inferior direita)

Caso 2: $\gamma = 0.01$

A presença de gradientes elevados no domínio da solução apresenta dificuldades que se traduzem na perda de precisão na solução numérica calculada. Neste caso, para atingir a precisão mostrada nos diferentes quadros da figura 5.13, usamos $N = 64$ e $\Delta t = 0.00005$. Observe que a escolha do tamanho de passo Δt é concordante com os valores apresentados na tabela 5.2. Observe também que as oscilações na solução ocorrem na vizinhança onde a solução exata apresenta gradientes elevados, a saber, aproximadamente em torno de $x = 0.4$ para $t = 0.5$ e, aproximadamente em torno de $x = 0.7$ para $t = 1$.

Caso 3: $\gamma = 0.001$

O objetivo aqui é mostrar que a escolha do tamanho do passo nem sempre pode ser feita baseado na análise de autovalores. Para confirmar este fato, mostramos na figura 5.14 a solução para $N = 32$ e com $\Delta t = 0.0155$.

Note que apesar do tamanho do passo ter sido escolhido menor que Δt_{\max} conforme descrito na tabela 5.2, a solução numérica explode numericamente muito rapidamente. A razão disso é que o espectro da matriz Jacobiana é muito sensível a pequenos erros ocorridos no processo, conforme previsto apartir do comportamento do seu pseudo espectro mostrado na figura 5.11. A escolha do tamanho de passo não pode ser feita de acordo com o critério dos autovalores. Outra dificuldade que aparece em conexão com o problema é a presença de oscilações na solução nos pontos de gradiente elevado. O estudo de técnicas que permitam contornar essas dificuldades

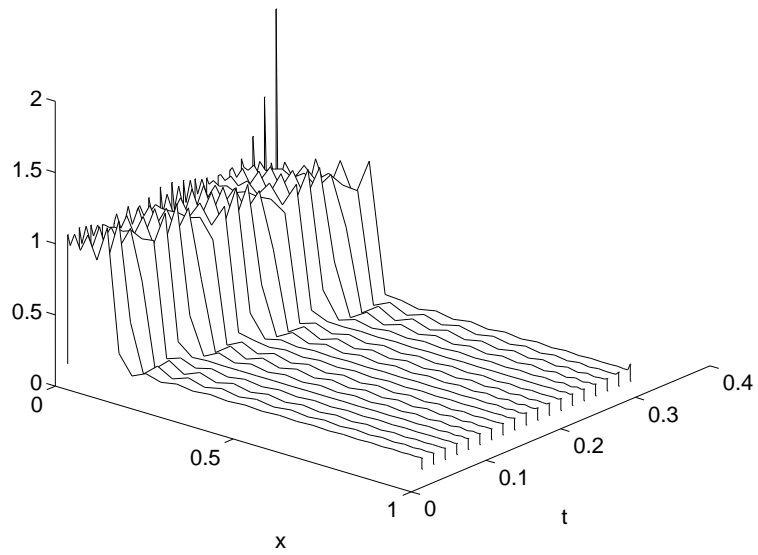


Figura 5.14: Instabilidade do método PSC com a escolha $\Delta t = 0.0155$.

é motivo de pesquisa atual e não será abordado neste trabalho.

Conclusões Finais

Apresentamos uma análise pseudo espectral do operador convecção-difusão. Esta análise foi feita de forma teórica através da limitação da norma do resolvente deste operador, por cotas inferiores e superiores. Outra análise também foi feita através da discretização do operador convecção-difusão e em seguida avaliado o pseudo espectro das matrizes resultantes da discretização. Percebemos que o pseudo espectro das matrizes, resultantes da discretização do operador por algum método numérico, são consistentes com o pseudo espectro do operador obtido através da análise teórica.

Verificamos que a análise de estabilidade, através do pseudo espectro do operador, se faz importante pelo fato de que análises de estabilidade segundo autovalores podem nos conduzir a conclusões erradas com respeito à escolha do tamanho do passo Δt . Mostramos, através de exemplos, que quando trabalhamos com operadores não normais, como demonstramos ser o caso do operador convecção-difusão, nos levam a soluções instáveis.

Em seguida apresentamos vários exemplos de equações de convecção-difusão, em uma dimensão, lineares e não lineares resolvidos pelo método pseudo espectral de Chebyshev. Observamos que as matrizes que aparecem nos sistemas de equações diferenciais ordinárias, caso linear, possuem um comportamento semelhante ao do operador convecção-difusão. O mesmo acontece com a matriz Jacobiana $\mathbf{J}(t_0, \mathbf{V}_0)$ da função vetorial $\mathbf{F}(t, \mathbf{V})$ num ponto (t_0, \mathbf{V}_0) , caso não linear. Em alguns exemplos mostramos que essas matrizes ficam dentro da região do pseudo espectro do operador convecção-difusão.

Como sugestão para trabalhos futuros, indicamos um estudo sobre convergência do método pseudo espectral de Chebyshev. Também indicamos um estudo dos problemas de convecção-difusão em duas ou mais dimensões, acompanhado pela análise de estabilidade, verificando o comportamento dos seus pseudo espectros e comparando com o comportamento do pseudo espectro do operador.

Referências Bibliográficas

- [1] ARNOL'D, V.I. Modes and quasimodes. *Funct. Anal. Appl.*, 6:94-101, 1972. (41,102)
- [2] ATKINSON. K. E. An introduction to numerical analysis. 2nd ed, Wiley, 1989
- [3] BAZÁN,F.S.V. Chebyshev pseudospectral method for computing numerical solution of convection-diffusion equation. Aceito para publicação em *Appl. Math Comput.*
- [4] BREZIS, H., *Analyse Fonctionnelle théorie et applications*, 1rd ed, Masson, Paris 1983.
- [5] CALEGARI, P., Método Pseudo espectral de Chebyshev para problemas de propagação de ondas com condições de fronteira absorventes. Dissertação de mestrado defendida em fevereiro de 2007, Dep. Matemática UFSC.
- [6] CANUTO C., HUSSAIMI M.Y., QUARTERONI A., ZANG T.A. *Spectral methods fundamentals in single domains*, 1rd ed, Springer 2006.
- [7] CHATELIN, Françoise, *Spectral approximation of linear operators*, 1rd ed., Academic Press, 1883
- [8] CHATELIN, F. Resolutions approchée d'équations sur orkinateur. Technical report, laboratoire de Satisfique Théorique et Appliquée, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1989.
- [9] CHAITIN-CHATELIN, F. e FRAYSSÉ, V. *Lectures on finite precision computations*. Siam, Philadelphia, 1996
- [10] CHATWIN, P. C. e ALLEN, C. M., *Mathematical models of dispersion in rivers and estuaries*, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 17(1985), 119-149
- [11] DEMMEL, J. W. A conterexample for two conjectures about stability. *IEEE Trans. Auto. Control*, AC-32:340-343, 1987.
- [12] EMBREE, Mark, E TREFETHEN, L. N. *Spectra and Pseudospectra: The Behavior of Nonnormal Matrices and Operator*, 1rd ed., Princeton University Press,2005

- [13] FATTAH, Q. N. e HOOPEs, A. J., Dispersion in anisotropic, homogeneous porous media, *J. Hydrol. Eng.* 111(1985), no. 5, 810-827.
- [14] FIGUEIREDO, D. G., *Análise de Fourier e equações diferenciais parciais*. 4ed. Rio de Janeiro: IMPA 2005
- [15] GODUNOV, S.K., KIRILYUK, O. P. E KOSTIN, V. I. Spectral portraits of matrices. Technical Report Preprint 3, Inst. o Maht., Sib. Branch of USSR Acad. Si., 1990. In Russian.
- [16] GODUNOV, S. K. e RYABENKII, V. S. *Theory of difference schemes: an Introduction*. North-Holland, Amsterdam, 1964.
- [17] GODUNOV, S.K., ANTONOV, A. G. KIRILYUK, O. P. E KOSTIN, V. I. Guaranteed accuracy of the solution to systems of linear equations in Euclidean spaces. Nauka, Moscow, 1988. In Russian. English translation of second, revised edition published as *Guaranteed Accuracy in Numerical Linear Algebra* by Kluwer, Dordrecht, 1993.
- [18] GODUNOV, S.K., *Modern aspects of linear algebra*. Scientific Books, Novosibirsk, 1997. English translation published by American Mathematical Society, Providence, RI, 1999.
- [19] HINRICHSEN, D. e PRITCHARD, A. J. On spectral variations under bounded real matrix perturbations. *Numer. Math.*, 60:509-524, 1992.
- [20] HINRICHSEN, D. e KELB, B. Spectral value sets: A graphical tool for robustness analysis. *Sys. Control Lett.*, 21:127-136,1993.
- [21] JOHNSON, Claes, *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*, 1rd ed, Cambridge University Press, 1987
- [22] KATO, T. *Perturbation theory for linear operators*, 2rd ed., Springer-Verlag, 1984
- [23] KOSTIN, V. I. On definition of matrices' spectra. In M. Durant and F. D. Kabaghi, editors, *High Performance Computing II*. North-Holland, Amsterdam, 1991
- [24] KOSTIN, V. I., RAZZAKOV, S. I. On convergence of the power orthogonal method of spectrum computing. *Trans. Inst. Math. Sib. Branch Acad. Sci.*, 6:55-84,1985
- [25] KREYSZIG, Erwin, *Introductory functional analysis with applications*, 1rd ed., John Wiley, 1989
- [26] LANDAU, H. J. On Szgö's engenvalue distribution theorem and non-Hermitian kernels. *J. d'Analyse Math.*, 28:335-357, 1975.

- [27] MEYER, Carl D., Matrix analysis and applied linear algebra, 1rd ed., SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- [28] MORTON K. W. Numerical solution of convection-diffusion problems, Chapman e Hall
- [29] PINSKY, Mark A., Partial differential equations and boundary-value problems with aplications, 2rd ed., International Series in Pure and Applied Mathematics
- [30] REDDY,S.C., e TREFETHEN, L.N., Stability of the method of lines, Num. Math, 62(1992), 235-267.
- [31] REDDY, S. C. e TREFETHEN, L. N. Lax-stability of fully discrete spectral methods via stability regions and pseudo-eigenvalues. Com. Methods Appli. Mech. Eng., 80:147-164,1990.
- [32] REDDY, S. C. Pseudospectra of operators and discretizations matrices and an application to stability of the method of lines. Ph.D. thesis, MIT, Cambridge, MA, 1991.
- [33] SALKUYEH,D. Khojasteh, On the finite difference approximation to the convection-diffusion equation, Appl. Math Comput. 179 (2006) 79-86.
- [34] STRIKWERDA, J. C., Finite difference schemes and partial differential equations, Wadsworth& Brooks, California, 1989.
- [35] TEMSAH, R. S. Numerical solutions for convection-difusion equation using El-Gendi method. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation aceito para publicação em 2007.
- [36] TREFETHEN, L. N. e TRUMMER, M. R. An instability phenomenon in spectra methods. SIAM J. Numer. Anal., 24:1008-1023, 1987.
- [37] TREFETHEN, L. N. , Lax stability vs. eigenvalue stability of spectral methods, in K. W. Morton, M. J. Baines (Eds.), Numerical Methods for Fluid Dynamics III, Clarendon Press, Oxford, 1988.
- [38] TREFETHEN, L. N. Approximation theory and numerical linear algebra. In J. c. Mason adn M. G. cox, editors, Algorithms for approximation II. Chapman and Hall, London, 1990.
- [39] TREFETHEN,L.N. e REDDY, S. , Stability analysis of the method of lines, Numer. Math. 62, p. 237-267, 1992.
- [40] TREFETHEN, L. N. Pseudospectra of matrices. In K. F. Griffiths and G. A. Watson, editors, Numerical Analysis 1991, pages 234-266. Longman Sicientivc and Technical, Harlow, Essex, UK, 1992.
- [41] TREFETHEN, L. N. e REDDY, S. C., Pseudospectra of the convection-difusion operator. SIAM J. A ppl, Math., vol. 54, No, 6, pp. 1634-1649. 1994

- [42] TREFETHEN, L. N, Pseudospectra of linear operators. SIAM Review, 39:383-406, 1997
- [43] TREFETHEN, L. N., Spectral Methods in Matlab, SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- [44] VARAH, J. M. The computation of bounds for the invariant subspaces of a general matrix operator. Technical Report CS 66, Computer science Department, Stanford University, 1967.
- [45] VARAH, J. M. On the separation of two matrices. SIAM J. Numer. Anal., 16:216-222, 1979.
- [46] VISIK, M. I. e LYUSTERNIK, L. A. Regular degeneration and boundary layer for linear differential equations with small parameter. Uspehi Mat. Nauk (N.S.), 12:3-122,1957. English translation in Amer. Math. Soc. Trans. (Ser.2)20(1992) 239-364.(41)
- [47] WILKINSON, J. H. Sensitivity of eigenvalues II. Utilitas Math., 30:243-286,1986