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

**Método Pseudo Espectral de Chebyshev para
Problemas de Propagação de Ondas com Condições
de Fronteira Absorventes**

Priscila Cardoso Calegari
Orientador: Prof. Dr. Fermin S. V. Bazán

Florianópolis
Fevereiro de 2007

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

**Método Pseudo Espectral de Chebyshev para Problemas de
Propagação de Ondas com Condições de Fronteira Absorventes**

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.

Priscila Cardoso Calegari
Florianópolis
Fevereiro de 2007

Método Pseudo Espectral de Chebyshev para Problemas de Propagação de Ondas com Condições de Fronteira Absorventes

por

Priscila Cardoso Calegari

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. Sandra Malta (LNCC)

Prof. Dr. Jauber Cavalcante de Oliveira (UFSC)

Prof. Dr. Milton dos Santos Brait (UFSC)

Florianópolis, Fevereiro de 2007.

Dedico esta dissertação a meus pais, Antônio e Helena cujo exemplo de honestidade e trabalho têm direcionado minha vida e para Marciano, pelo apoio, carinho e paciência nos momentos mais difíceis.

Agradecimentos

Em primeiro lugar gostaria de agradecer ao professor Dr. Fermin V. S. Bazán, pela sua orientação. Toda a sua dedicação, paciência, confiança, dicas e conselhos foram essenciais para a realização deste trabalho e 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 Ana Maria, Diane, Fabiana, João e Luciane, pelas alegrias e pelo companheirismo nos momentos de maior dificuldade.

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 investigação sobre simulações numéricas para problemas de propagação de ondas unidimensionais e bidimensionais, proposto recentemente por Jackiewicz e Renaut [19], baseado no método *Pseudo espectral de Chebyshev*. O modelo considerado é a equação da onda linear clássica, na qual incorporamos condições de fronteira apropriadas (*ditas absorventes*), introduzidas com a finalidade de atenuar reflexões indesejadas [9, 17, 19, 28, 29, 30, 40].

O método pseudo espectral de Chebyshev [13, 19, 28, 30] investigado está baseado no *método das linhas* [27, 38], o qual transforma o problema original em um sistema semi discreto de EDO's, que aproxima o problema de evolução $u_t = \mathcal{A}u$, associado ao modelo original. Uma característica do problema é que o operador diferencial \mathcal{A} é não normal. Neste caso, a análise espectral torna-se insuficiente para descrever o comportamento do sistema com a evolução do tempo [9], o que motiva o estudo do pseudo espectro do operador.

Dentre os principais resultados deste trabalho destacamos, uma fórmula fechada para o autosistema do operador diferencial associado ao problema de evolução, que generaliza resultados prévios de Driscoll e Trefethen [9], resultados teóricos que *corrigem* conclusões erradas em [19] (para o problema 1D), e a proposta de *Métodos Pseudo Espectrais de Chebyshev* para determinar as soluções aproximadas para os problemas 1D e 2D.

Alguns resultados *originais* do trabalho podem ser vistos em [5, 6]. Os resultados teóricos são ilustrados através de experimentos numéricos onde apresentamos as vantagens dos métodos propostos.

Abstract

We present an investigation on numerical simulation of 1D and 2D waves propagation problems recently proposed by Jackiewicz and Renault [19] based on the *Chebyshev pseudospectral method*. The considered model is the classical linear wave equation in which we incorporate *absorbing boundary conditions* to mitigate undesired reflections [9, 17, 19, 28, 29, 30, 40].

The investigated Chebyshev pseudospectral method [13, 19, 28, 30] relies on the *Method of lines* [27, 38], in which the original problem is first transformed to a semidiscrete system of ODE's that approximates the evolution problem $u_t = \mathcal{A}u$ associated with the original model. A characteristic of the problem is that \mathcal{A} is a differential operator which in general is far from normal. In this case, spectral analysis alone of \mathcal{A} can be insufficient to describe the behavior of the system with evolution in time [9], a fact that motivates the study of the pseudospectrum of \mathcal{A} .

Among the most important results of the work we include, a closed formula for the eigenstructure of the associated differential operator that generalizes earlier results by Driscoll and Trefethen [9], theoretical results that *correct* wrong conclusions in [19] (for the 1D problem) and the proposal of *Chebyshev Pseudospectral Methods* to determine approximate solutions for the 1D and 2D wave propagation problems. Some *original* results of the work can be found in [5, 6].

The theoretical results are illustrated through numerical experiments that illustrate the advantages of the proposed methods.

Lista de Figuras

1.1	Fenômeno de Runge	6
1.2	Quatro primeiros polinômios de Chebyshev	7
1.3	Aproximação da derivada da função $u(x)$ e erro na aproximação de $u'(x)$	16
1.4	Solução aproximada e erro de aproximação do problema (1.23).	18
1.5	Localização dos elementos na matriz L_N	20
1.6	Solução aproximada do problema (1.30), para $f(x, y) = 90.72\text{sen}(3\pi x)\text{sen}(2\pi y)$	20
1.7	Equação da onda unidirecional	22
1.8	Norma das potências das matrizes $P_3(\Delta t L_N)$ e $P_3(\Delta t \tilde{D})$	23
2.1	Regiões de estabilidade dos métodos de Runge Kutta de ordem 1, 2, 3 e 4.	28
2.2	Função ϕ aplicando a região de estabilidade \mathcal{S} em $\overline{\mathcal{D}}$	29
2.3	$\ A^k\ $ e $\ \tilde{A}^k\ $, linhas contínua e tracejada, respectivamente	32
2.4	Operador \mathcal{A} com perturbação ϵ_1 e ϵ_2 , e seus respectivos pseudo espectros.	35
2.5	Pseudo espectro de um operador não normal e de um operador quase normal	37
2.6	Espectro e Pseudo espectro da matriz $\Delta t A$ e região de estabilidade (RK1)	42
2.7	Soluções Numéricas do problema (2.36) com $\Delta t = 0.6\Delta x$ e $\Delta t = 1.2\Delta x$	42
3.1	Propagação da onda 1D: solução exata e solução aproximada com condições de fronteira Dirichlet nulas	46
3.2	Espectro $\wedge(\mathcal{A})$ e pseudo espectro $\wedge_\epsilon(\mathcal{A})$ com $\delta = 0.2$ e $\delta = 0.99$	49
3.3	Pseudo espectro de \mathcal{A} , $\wedge_\epsilon(\mathcal{A})$ com $\delta = 1$	49
3.4	Espectro e pseudo espectro de \hat{L}_N (diferenças finitas)	51
3.5	Espectro e pseudo espectro de B_N (Método pseudo espectral de Chebyshev)	53
3.6	Espectro e pseudo espectro de \mathcal{A} para $c_1 = c_2 = 0.2$ e $c_1 = c_2 = 0.99$	56
3.7	Pseudo espectro de \mathcal{A} para $c_1 = c_2 = c = 1$	56
3.8	Espectro e pseudo espectro das matrizes A_1 e A_2 $c = c_1 = c_2 = 0.2$	58
3.9	Autovalores das matrizes A_1 e A_2 com $N + 1 = 32$ e $N + 1 = 64$	59
3.10	θ , (ξ/ω) e (η/ω) para a equação da onda unidirecional.	63
3.11	O problema de aproximação: $r(s) \approx \sqrt{1 - s^2}$	64
3.12	Coefficientes de reflexão das condições de fronteira absorventes de ordens 1, 2 e 3 em $x = 0$	66
3.13	Autovalores da matriz A_1 (à esquerda) e da matriz A_2 , (à direita), com $N = 15$	70
4.1	Espectro e pseudo espectro de L_N e A_1 e Região de estabilidade (RK4)	75
4.2	Soluções exata e aproximada para o problema unidimensional (exe. 1)	76
4.3	Comparação entre os erros dos métodos MP , MJ e MJM	76
4.4	Soluções exata e aproximada para o problema unidimensional (exe. 2)	77

4.5	Espectro e pseudo espectro das matrizes M_1 e M_2 , com $N + 1 = 16$	82
4.6	Solução aproximada para o problema bidimensional (4.8) através do método 1. . .	83
4.7	Solução aproximada para o problema bidimensional (4.8), através do método 2. .	84
4.8	Erro das soluções obtidas pelos métodos 1 e 2, fixando y	84
4.9	Erro das soluções obtidas através dos métodos 1 e 2	85

Lista de Tabelas

3.1	Condições de fronteira e coeficientes de reflexão, para problemas de propagação de ondas unidimensionais, na fronteira $x = 0$	46
3.2	Número de Jordan na norma 2 das matrizes A_1 e A_2 com $N + 1 = 32$ e $N + 1 = 64$	59
3.3	Condições de fronteira e coeficiente de reflexão, para problemas de propagação de ondas bidimensionais na fronteira $x = 0$	66
4.1	Tamanho de passo Δt máximo que garante a estabilidade segundo autovalores, para diferentes dimensões $N + 1$	74
4.2	Tamanho de passo Δt máximo que garante a estabilidade segundo autovalores, para diferentes dimensões $N + 1$, para as matrizes M_1 e M_2	82

Sumário

Introdução	2
1 Métodos Pseudo Espectrais	5
1.1 Polinômios de Chebyshev	5
1.2 Matriz de Diferenciação de Chebyshev	11
1.3 Método pseudo espectral de Chebyshev	15
1.4 O Método das Linhas	21
1.4.1 Método das Linhas: Discretização espacial upwind+RK3	22
1.4.2 Método das Linhas: Discretização espacial pseudo espectral+RK3	24
2 Estabilidade do Método das Linhas Pseudo Espectral	25
2.1 Regiões de estabilidade	25
2.1.1 Regiões de estabilidade dos métodos de Runge-Kutta	26
2.1.2 Região de estabilidade para o método das linhas	29
2.2 Estabilidade e Convergência	30
2.3 Espectro e Pseudo Espectro	33
2.3.1 Algumas considerações sobre $\ (z - \mathcal{A})^{-1}\ $ e $\ \exp(t\mathcal{A})\ $	37
2.4 Estabilidade do método das linhas	40
3 Propagação de Ondas	43
3.1 Modelo contínuo unidimensional	44
3.1.1 Condições de fronteira e coeficientes de reflexão	44
3.2 Equação da onda com uma condição de fronteira absorvente	46
3.3 Sistemas semi discretos associados ao modelo de Driscoll e Trefethen	49
3.3.1 Sistema semi discreto baseado em diferenças finitas	50
3.3.2 Sistema semi discreto baseado no método pseudo espectral de Chebyshev	52
3.4 Equação da onda com condições de fronteira transparentes	54
3.4.1 Problema semi discreto unidimensional de Jackiewicz e Renault	57
3.5 Modelo bidimensional	61
3.5.1 Condições de fronteira e coeficientes de reflexão	62
3.5.2 Problema semi discreto de Jackiewicz e Renault	67
4 Métodos Pseudo Espectrais de Chebyshev Propostos	71
4.1 Método proposto 1D	72
4.1.1 Estabilidade do método proposto e dos métodos de Jackiewicz e Renault	73
4.1.2 Exemplos numéricos	74

4.2	Método proposto 2D	77
4.2.1	Método 1: Condições de fronteira absorventes de primeira ordem	77
4.2.2	Método 2: Condições de fronteira absorventes de segunda ordem	79
4.2.3	Considerações sobre estabilidade numérica dos métodos 2D	81
4.2.4	Exemplo numérico	83
	Conclusões Finais	86
	A Produto Kronecker	88
	B Semigrupos de Operadores: Conceitos e resultados básicos	91
	Referências Bibliográficas	93

Introdução

A simulação numérica de problemas de propagação de ondas em domínios não limitados, na prática é abordada restringindo o domínio para uma região limitada “artificialmente”. Entretanto, apesar da conveniência computacional, a abordagem requer técnicas que atenuem ou eliminem reflexões espúrias nas fronteiras artificiais, sendo um aspecto crucial do processo a escolha de condições que absorvam ondas incidentes a fronteira, atenuando as reflexões indesejadas. Condições de fronteira desse tipo são ditas *absorventes*. Aplicações do tópico são encontradas frequentemente em geofísica, oceanografia, acústica, etc [7, 10, 17, 29, 30, 31].

A análise do efeito das reflexões obtidas através de condições de fronteira absorventes nas soluções numéricas foi investigada primeiro por Engquist e Madja [10] e Clayton e Engquist [7], influenciando Halpern e Rahmouni [17] e Trefethen e Halpern [39] em trabalhos posteriores.

Motivados pelo trabalho de Veselić [40], Driscoll e Trefethen em [9], usam um sistema hiperbólico de primeira ordem e analisam os efeitos da não normalidade do operador diferencial associado a equação da onda unidimensional com uma condição de fronteira Dirichlet nula, na fronteira esquerda, e uma condição de fronteira absorvente na direita. Os autores concluem que a análise espectral, nesse caso, torna-se insuficiente para a análise do comportamento do sistema no decorrer do tempo. Para contornar essas dificuldades, o pseudo espectro desse operador, bem como o pseudo espectro das matrizes envolvidas nos sistemas semi discretos associados ao modelo original, são analisados. A partir desse trabalho, Renaut [28] analisa a estabilidade numérica de um método pseudo espectral de Chebyshev, para o problema de propagação de ondas bidimensional. Outros trabalhos nessa direção são encontrados em [29, 30]. Já Jackiewicz e Renaut em [19] apresentam diferentes abordagens para o esquema numérico, que dependem da maneira que as condições de fronteira absorventes são incorporadas no modelo.

Os métodos pseudo espectrais descritos nestes trabalhos são baseados no esquema do *Método das Linhas*, o qual converte a equação diferencial parcial, através de uma reformulação apropriada, em um sistema semi discreto de equações diferenciais ordinárias, ou seja, um problema de valor inicial da forma $v_t = Av$. A vantagem do Método das Linhas Pseudo Espectral [13, 19, 28, 38] está na simplicidade de seu esquema, bem como na alta precisão da aproximação pseudo espectral das derivadas nas variáveis espaciais através da matriz de diferenciação de Chebyshev [23, 37].

Neste trabalho continuamos uma investigação de Jackiewicz e Renaut [19], sobre a estabilidade numérica de um *Método das Linhas Pseudo Espectral de Chebyshev* para o problema de propagação de ondas, restrita a domínios limitados, com condições de fronteira absorventes [9, 13, 17, 19, 28, 40]. A maior parte do trabalho está baseado nos resultados de Jackiewicz e Renaut [19], Driscoll e Trefethen [9] Trefethen [36], Reddy e Trefethen [26, 27] e Trefethen e Embree [38].

Dentre os resultados desta investigação destacamos: a descrição do autosistema do opera-

dor diferencial obtido pela proposta de Jackiewicz e Renault, o qual generaliza um resultado prévio de Driscoll e Trefethen [9]; e a proposta de um Método das Linhas Pseudo Espectral de Chebyshev que determina diretamente o deslocamento u a cada passo do tempo, contrário as propostas encontradas em [9, 13, 19] as quais determinam aproximações para o deslocamento a partir de estimativas das derivadas em relação ao tempo e as variáveis espaciais, isto é u_t , u_x e u_y . O método proposto possui basicamente as mesmas características de estabilidade numérica daqueles propostos por Jackiewicz e Renault, mas com a vantagem de ser mais preciso.

O trabalho está organizado em quatro capítulos, dos quais os dois primeiros contém resultados teóricos necessários para o trabalho que envolvem: teoria de aproximação de funções, resultados de análise funcional, noções de estabilidade numérica de métodos para equações diferenciais parciais (EDP's), e técnicas de álgebra linear computacional, entre outros. O material desses capítulos é em geral auto suficiente mas o leitor precisa estar familiarizado com noções elementares dos tópicos listados acima. Uma descrição do conteúdo do trabalho é como segue:

No capítulo 1 apresentamos definições e conceitos necessários para a descrição do Método das Linhas Pseudo Espectral de Chebyshev. O capítulo inclui uma síntese da teoria de aproximação de funções através de polinômios de Chebyshev, a qual serve como base para a definição da matriz de diferenciação de Chebyshev, ferramenta básica para a aproximação das derivadas em relação as variáveis espaciais; e uma descrição detalhada do *método das linhas*, incluindo o método pseudo espectral, o qual é ilustrado através de exemplos numéricos.

No capítulo 2 destacamos os resultados teóricos sobre a estabilidade do *método das linhas*, enfatizando os esquemas de Runge-Kutta para a solução do sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) semi discreto obtido pela aplicação do método das linhas, bem como a definição de regiões de estabilidade. Resultados sobre a estabilidade e a convergência de métodos de aproximação para problemas de valor inicial são também apresentados, focando em particular conceitos sobre estabilidade segundo Lax e segundo autovalores. Noções sobre espectro, conjunto resolvente e pseudo espectro de operadores são também incluídos. O capítulo encerra apresentando resultados que garantem a estabilidade segundo autovalores e a estabilidade segundo Lax do *método das linhas* usando o pseudo espectro como ferramenta.

No capítulo 3 surgem as primeiras contribuições do trabalho. Nele descrevemos as investigações de Driscoll e Trefethen [9] e Jackiewicz e Renault [19], as quais são essenciais para a descrição dos métodos pseudo espectrais propostos. Os efeitos das reflexões originadas pela condições de fronteira artificiais também são incluídos. A primeira contribuição apresenta *fórmulas fechadas* para o auto sistema do operador associado ao modelo descrito em [19], generalizando o resultado prévio de Driscoll e Trefethen descrito em [9]. Além disso, a análise do pseudo espectro do operador é apresentada. A segunda contribuição mostra teórica e numericamente que um resultado de Jackiewicz e Renault [19] é *incorreto*. Encerramos o capítulo descrevendo os modelos semi discretos, descrito em [19], associados ao problema bidimensional.

No capítulo 4 surgem as últimas contribuições. Incluímos novas abordagens numéricas para os modelos de propagação de ondas unidimensional e bidimensional, que apresentam vantagens em relação as propostas em [19]. Para o problema bidimensional acrescentamos um método no qual incorporamos condições de fronteira absorventes de segunda ordem, baseado no esquema numérico descrito em [13]. Além disso, discutimos as características de estabilidade dos métodos propostos e exemplos numéricos que ilustram as vantagens dos métodos propostos em relação aos métodos de Jackiewicz e Renault [19], usando problemas testes da literatura especializada [13, 19, 28, 29, 30, 31]. Todo o material deste capítulo é *original*.

No final do trabalho apresentamos algumas considerações finais e um apêndice contendo

alguns resultados auxiliares que envolvem: a definição e as principais propriedades do produto Kronecker; e resultados básicos da teoria de semigrupos de operadores. Os leitores interessados em aprofundar o estudo desses assuntos, podem dirigir-se a [21, 25].

Capítulo 1

Métodos Pseudo Espectrais

Os métodos pseudo espectrais surgem do problema fundamental de aproximar funções através de um polinômio interpolador em um intervalo $[a, b]$, envolvendo um conjunto de pontos relacionado a uma família de polinômios ortogonais. O capítulo está organizado da seguinte forma. Na seção 1.1, apresentamos uma dessas famílias: *os polinômios de Chebyshev*. Os polinômios de Chebyshev são utilizados para mitigar erros de aproximação, comuns na interpolação de Lagrange usando pontos igualmente espaçados, através da colocação otimizada dos pontos de interpolação. Neste capítulo, vamos considerar o intervalo $[-1, 1]$ para apresentar alguns resultados sobre teoria de aproximação, ressaltando que os resultados são válidos em um intervalo $[a, b]$ através da transformação $y(x) = (1/2)[(b - a)x + (b + a)]$.

O objetivo é descrever, de forma geral, os métodos das linhas pseudo espectrais para resolver equações diferenciais parciais. Esses métodos são baseados na aproximação pseudo espectral das variáveis espaciais, via matriz de diferenciação de Chebyshev, cuja dedução é apresentada na seção 1.2. Para equações diferenciais parciais com evolução no tempo, a aproximação pseudo espectral das variáveis espaciais, associa o problema original a um sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo e é denominada *método das linhas*.

1.1 Polinômios de Chebyshev

A primeira idéia para se aproximar funções em domínios limitados é utilizar polinômios interpoladores em pontos igualmente espaçados. Entretanto, apesar do fato da aproximação ser eficiente e simples em uma variedade de problemas, em geral aproximações de funções suaves por polinômios em $N + 1$ pontos igualmente espaçados, não convergem e resultam no conhecido *fenômeno de Runge* [23, 37]. Uma maneira de se evitar o fenômeno de Runge é através da interpolação polinomial em pontos não igualmente espaçados, associados, em geral, a uma família de polinômios ortogonais. Para ilustração, a figura 1.1 apresenta o polinômio que interpola a função $u(x) = 1/\sqrt{(1 + 16x^2)}$, com $N + 1 = 16$, usando pontos igualmente espaçados e pontos de Chebyshev ¹ definidos por

$$x_j = \cos\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (1.1)$$

¹Os pontos x_j são também conhecidos como *pontos de Chebyshev-Gauss-Lobatto* ou *pontos de Chebyshev-Lobatto*, em referência a certas fórmulas de quadratura. Estes pontos podem ser visualizados como as projeções, no intervalo $[-1, 1]$ de pontos igualmente espaçados sobre o semicírculo unitário. Isso implica na maior concentração de pontos próximos as fronteiras [37].

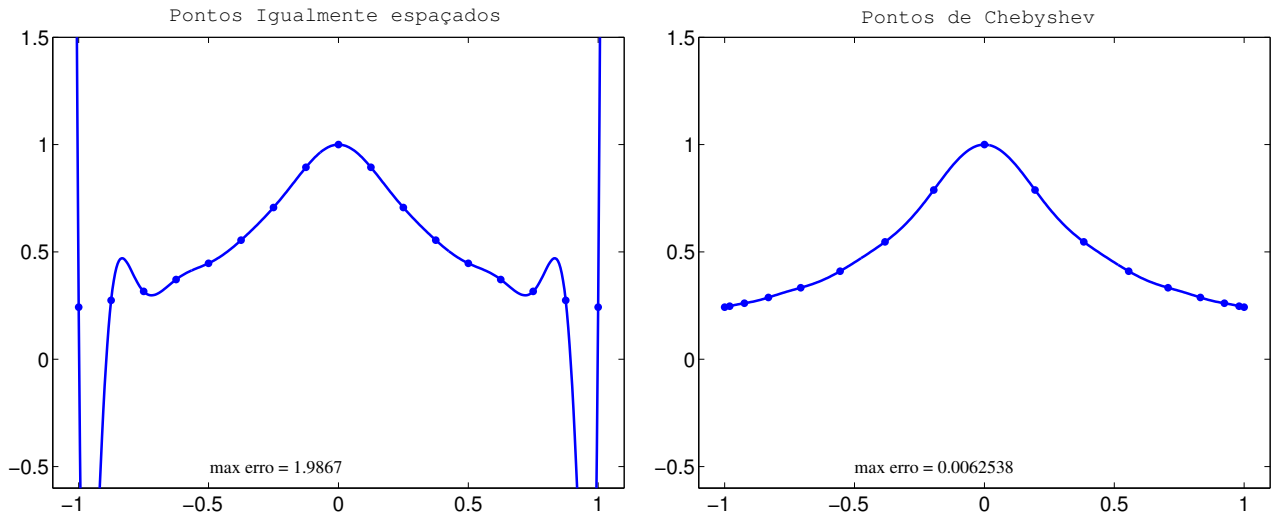


Figura 1.1: Polinômio interpolador usando pontos igualmente espaçados (esquerda) e pontos de Chebyshev (direita). Fenômeno de Runge (esquerda).

O fenômeno de Runge é caracterizado por grandes oscilações nos extremos do intervalo (figura 1.1, esquerda). Com pontos igualmente espaçados, quando N cresce, o erro de aproximação cresce exponencialmente. Enquanto que com pontos de Chebyshev, o erro de aproximação decresce exponencialmente.

O objetivo desta seção é apresentar alguns resultados da teoria de aproximação de funções envolvendo polinômios de Chebyshev que constituem um dos suportes deste trabalho. Para tanto, vamos introduzir duas categorias de polinômios de Chebyshev, os de primeira espécie $T_N(x)$ e os de segunda espécie $U_N(x)$. A vantagem de se utilizar esses polinômios está na relação entre as funções seno e cosseno, que surgem na descrição de vários fenômenos naturais.

Definição 1.1 *O polinômio de Chebyshev de primeira espécie $T_N(x)$ é um polinômio na variável x de grau N , definido pela relação*

$$T_N(x) = \cos(N\theta), \text{ com } x = \cos(\theta). \quad (1.2)$$

Se x varia no intervalo $[-1, 1]$, θ varia no intervalo $[0, \pi]$ e essas variações seguem em direções opostas, já que $x_N = -1$, corresponde a $\theta = \pi$ e $x_0 = 1$ corresponde a $\theta = 0$. Da definição 1.1, usando relações trigonométricas para somar $T_{N+1}(x)$ e $T_{N-1}(x)$, obtemos a relação de recorrência,

$$T_{N+1}(x) = 2xT_N(x) - T_{N-1}(x), \text{ com } T_0(x) = 1 \text{ e } T_1(x) = x. \quad (1.3)$$

Da equação (1.3) segue que os 3 seguintes polinômios de Chebyshev de primeira espécie são:

$$\begin{aligned} T_2(x) &= 2x^2 - 1, \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x, \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \end{aligned}$$

sendo o primeiro coeficiente de um polinômio de Chebyshev de primeira espécie $T_N(x)$ igual a 2^{N-1} para todo $N \geq 1$. A figura 1.2 apresenta os polinômios de Chebyshev T_1 , T_2 , T_3 e T_4 .

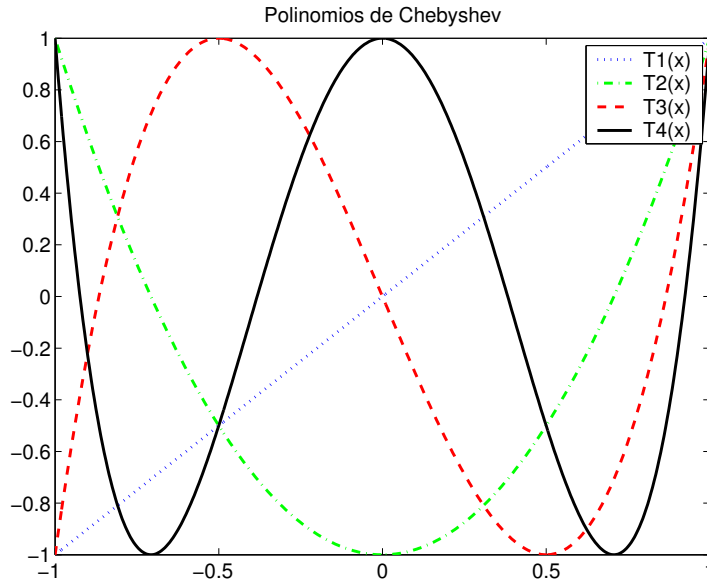


Figura 1.2: Quatro primeiros polinômios de Chebyshev, $T_1(x)$, $T_2(x)$, $T_3(x)$ e $T_4(x)$.

Definição 1.2 O polinômio de Chebyshev de segunda espécie $U_N(x)$ é um polinômio de grau N em x , definido por

$$U_N(x) = \frac{\text{sen}(N+1)\theta}{\text{sen}(\theta)}, \text{ com } x = \cos(\theta). \quad (1.4)$$

Utilizando relações trigonométricas, também obtemos uma relação de recorrência para os polinômios de Chebyshev de segunda espécie ao somarmos $U_{N+1}(x)$ e $U_{N-1}(x)$:

$$U_{N+1}(x) = 2xU_N - U_{N-1}(x), \text{ com } U_0(x) = 1 \text{ e } U_1(x) = 2x. \quad (1.5)$$

A partir da equação (1.5) podem ser obtidos os próximos polinômios de Chebyshev de segunda espécie :

$$U_2(x) = 4x^2 - 1, \quad U_3(x) = 8x^3 - 4x, \text{ etc,}$$

sendo o coeficiente do termo x^N do polinômio $U_N(x)$ igual a 2^N , para $N \geq 0$.

Corolário 1.1 Dados os polinômios de Chebyshev $T_N(x)$ e $U_N(x)$, as seguintes relações são satisfeitas:

1. $U_N(x) - U_{N-2}(x) = 2T_N(x)$.
2. $(1 - x^2)U_N(x) = \frac{1}{2}[T_{N+2}(x) - T_N(x)]$

Demonstração: O primeiro resultado segue da identidade trigonométrica:

$$\text{sen}(N+1)\theta - \text{sen}(N-1)\theta = 2\text{sen}(\theta)\cos(\theta).$$

O segundo resultado segue de maneira imediata:

$$(1 - x^2)U_N(x) = \frac{\text{sen}^2(\theta)\text{sen}(N+1)\theta}{\text{sen}(\theta)} = \text{sen}(\theta)\text{sen}(N+1)\theta.$$

Por outro lado,

$$2\text{sen}(\theta)\text{sen}(N+1)\theta = \cos(N+2)\theta - \cos(N)\theta.$$

O que conclui a demonstração. □

Proposição 1.1 *Os polinômios de Chebyshev $T_N(x)$ de grau $N \geq 1$ têm N raízes simples no intervalo $[-1, 1]$ dadas por*

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2N}\pi\right), \text{ com } k = 1, 2, \dots, N. \quad (1.6)$$

Além disso, $T_N(x)$ assume seu extremo absoluto em

$$\bar{x}_k = \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right), \text{ com } T_N(\bar{x}_k) = (-1)^k \text{ para cada } k = 0, 1, \dots, N. \quad (1.7)$$

Demonstração: Basta determinar as raízes da função $\cos(N\theta)$. Para a segunda parte deve-se derivar $\cos(N\theta)$ em relação a x e determinar suas raízes. □

Em vista de que os polinômios de Chebyshev $T_N(x)$ têm $N+1$ pontos extremos, conclui-se que $T_N(x)$ atinge sua magnitude máxima 1 com sinal alternante em $N+1$ pontos dados em (1.7).

Proposição 1.2 *Os polinômios de Chebyshev $U_N(x)$ de grau $N \geq 1$, têm N raízes simples no intervalo $[-1, 1]$ dadas por*

$$x_k = \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right), \text{ para cada } k = 1, 2, \dots, N. \quad (1.8)$$

Demonstração: Determinar as raízes de $U_N(x)$ é equivalente a determinar as raízes da função $\text{sen}(N+1)\theta$. Que são $\theta_k = (k\pi)/(N+1)$ com $k = 1, 2, \dots, N$. □

É natural estender o conjunto de pontos dados em (1.8), incluindo os pontos extremos do intervalo, $x_0 = 1$ e $x_{N+1} = -1$. Obtendo os zeros do polinômio $(1-x^2)U_N(x)$.

Observação 1.1 *Os pontos extremos de $T_N(x)$ são os zeros do polinômio $(1-x^2)U_{N-1}(x)$.*

A principal aplicação dos polinômios de Chebyshev é na teoria de aproximação de funções. No que segue vamos apresentar alguns resultados e a propriedade mínima dos polinômios de Chebyshev, omitindo algumas demonstrações que podem ser encontradas em [11, 23]. O Teorema de Weierstrass 1.1, garante a existência de uma aproximação polinomial.

Teorema 1.1 (Teorema de Weierstrass) *Seja $f \in C[a, b]$ Dado $\epsilon > 0$ existe um polinômio p_N de grau N com N suficientemente grande tal que*

$$\|f - p_N\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p_N(x)| < \epsilon.$$

Daqui em diante vamos representar por \mathcal{P}_N o espaço vetorial dos polinômios de grau menor ou igual N , e por \mathcal{P}_N^* o espaço vetorial dos polinômios mônicos ² de grau N . A seguinte proposição expressa uma propriedade de minimização que distingue os polinômios de Chebyshev mônicos dos demais polinômios mônicos de grau N .

$$T_N^*(x) := \frac{1}{2^{N-1}} T_N(x), \quad U_N^*(x) := \frac{1}{2^{N-1}} (1-x^2) U_{N-1}(x). \quad (1.9)$$

Proposição 1.3 *Os polinômios de Chebyshev $T_N^*(x)$ quando $N \geq 1$ têm a seguinte propriedade:*

$$\frac{1}{2^{N-1}} = \max_{-1 \leq x \leq 1} |T_N^*(x)| \leq \max_{-1 \leq x \leq 1} |p_N(x)| \quad \forall p_N \in \mathcal{P}_N^*. \quad (1.10)$$

Demonstração: Vamos supor que $p_N(x) \in \mathcal{P}_N^*$ e que p_N satisfaça,

$$\max_{x \in [-1,1]} |p_N(x)| \leq \frac{1}{2^{N-1}} = \max_{x \in [-1,1]} |T_N^*(x)|. \quad (1.11)$$

Seja $q(x) = T_N^*(x) - p_N(x)$. Como $T_N^*(x)$ e $p_N(x) \in \mathcal{P}_N^*$, então $q(x)$ é um polinômio de grau $(N-1)$. Além disso, nos pontos extremos de $T_N^*(x)$, vale $q(\bar{x}_k) = T_N^*(\bar{x}_k) - p_N(\bar{x}_k)$. Usando (1.11) segue que

$$|p_N(\bar{x}_k)| \leq \frac{1}{2^{N-1}} \implies -\frac{1}{2^{N-1}} \leq p_N(\bar{x}_k) \leq \frac{1}{2^{N-1}}, \text{ para cada } k = 0, 1, \dots, N.$$

Portanto, se k é par temos

$$q(\bar{x}_k) = \frac{1}{2^{N-1}} - p_N(\bar{x}_k) \geq \frac{1}{2^{N-1}} - \frac{1}{2^{N-1}} = 0.$$

Se k é ímpar, temos

$$q(\bar{x}_k) = \frac{1}{2^{N-1}} - p_N(\bar{x}_k) \leq -\frac{1}{2^{N-1}} + \frac{1}{2^{N-1}} = 0.$$

Assim, para cada $k = 0, \dots, N-1$, se k é ímpar então $q(\bar{x}_k) \leq 0$ e $q(\bar{x}_{k+1}) \geq 0$. Caso contrário, se k é par então $q(\bar{x}_k) \geq 0$ e $q(\bar{x}_{k+1}) \leq 0$. Como $q(x)$ é contínuo, pelo teorema do valor intermediário, $q(x)$ tem pelo menos uma raiz entre \bar{x}_k e \bar{x}_{k+1} para cada $k = 0, 1, \dots, N-1$. Assim $q(x)$ tem N raízes no intervalo $[-1, 1]$, que é uma contradição pois o grau de $q(x)$ é $(N-1)$, e portanto $q(x)$ terá no máximo $N-1$ raízes. Então $p_N(x)$ satisfaz (1.10) e $q(x) \equiv 0$. O que implica que, $p_N(x) \equiv T_N^*(x)$. □

Observação 1.2 *Um resultado semelhante é obtido quando utilizamos os polinômios mônicos $U_N^*(x)$ no lugar dos polinômios $T_N^*(x)$.*

O conjunto dos pontos de colocação dos métodos pseudo espectrais será associado as raízes de um conjunto de polinômios ortogonais, conforme apresenta o teorema 1.2. O produto interno utilizado é dado por:

$$\langle p, q \rangle_w = \int_a^b w(x) p(x) q(x) dx \quad (1.12)$$

com $p, q \in \mathcal{P}_N$ e $w(x)$ uma função peso [4, 23].

A seguinte proposição mostra que os polinômios de Chebyshev $T_N(x)$ são ortogonais com relação a função peso $w(x) = (1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$. Já a proposição 1.5, mostra que os polinômios $U_N(x)$ são ortogonais com relação a função peso $w(x) = (1-x^2)^{\frac{1}{2}}$.

²Um polinômio $p_N(x) = a_N x^N + a_{N-1} x^{N-1} + \dots + a_1 x + a_0$ é mônico quando $a_N = 1$.

Proposição 1.4 Os polinômios de Chebyshev $T_N(x)$ são ortogonais no intervalo $[-1, 1]$ com relação a função peso $w(x) = (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}}$.

Demonstração: Usando o fato de que $x = \cos(\theta)$, $T_N(x) = \cos(N\theta)$ e $dx = -\text{sen}(\theta)d\theta = -\sqrt{1 - x^2}d\theta$, temos que

$$\langle T_M, T_N \rangle_w = \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}} T_M(x) T_N(x) dx = \int_0^\pi \cos(N\theta) \cos(M\theta) d\theta.$$

Então para $N \neq M$, a identidade

$$\cos(N\theta) \cos(M\theta) = \frac{1}{2} [\cos(N + M)\theta + \cos(N - M)\theta].$$

implica que,

$$\langle T_N, T_M \rangle_w = \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos(N + M)\theta + \cos(N - M)\theta] d\theta = \frac{1}{2} \left[\frac{\text{sen}(N + M)\theta}{N + M} + \frac{\text{sen}(N - M)\theta}{N - M} \right]_0^\pi = 0.$$

Agora se $N = M \neq 0$,

$$\|T_N\|_w^2 = \langle T_N, T_N \rangle = \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos(2N)\theta + 1] d\theta = \frac{1}{2} \left[\frac{\text{sen}(2N)\theta}{2N} + \theta \right]_0^\pi = \frac{\pi}{2}.$$

Para $N = 0$, $\|T_0\|_w^2 = \langle 1, 1 \rangle = \pi$. O que mostra o resultado. □

Proposição 1.5 Os polinômios de Chebyshev $U_N(x)$ são ortogonais no intervalo $[-1, 1]$ com relação a função peso $w(x) = (1 - x^2)^{\frac{1}{2}}$.

Demonstração: De maneira análoga a demonstração da proposição 1.4 quando $N \neq M$ temos que,

$$\langle U_N, U_M \rangle_w = \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_N(x) U_M(x) dx = \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}} (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_N(x) (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_M(x) dx.$$

Como $(1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_N(x) = \text{sen}(\theta) U_N(x) = \text{sen}(N + 1)\theta$, segue que

$$\langle U_N, U_M \rangle_w = \int_0^\pi \text{sen}(N + 1)\theta \text{sen}(M + 1)\theta d\theta = \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos(M + N + 2)\theta - \cos(N - M)\theta] d\theta = 0.$$

O que mostra o resultado. □

Os próximos resultados, referentes a colocação otimizada dos pontos de interpolação, são o ponto de partida para a definição de matrizes de diferenciação. O polinômio $p_N(x) \in \mathcal{P}_N$, que interpola a função contínua $f(x)$ nos $N + 1$ pontos distintos x_0, \dots, x_N pode ser representado pela fórmula de Lagrange

$$p_N(x) = \sum_{i=0}^N l_i(x) f(x_i) \quad \text{com} \quad l_i(x) = \prod_{k=0, k \neq i}^N \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right). \quad (1.13)$$

Vamos considerar $\{\Phi_i(x), i = 0, 1, \dots\}$ um sistema de polinômios ortogonais com relação a função peso $w(x)$ no intervalo $[a, b]$. O próximo teorema garante que o erro de interpolação, $e_N(x) = \|f(x) - p_N(x)\|_w \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$, onde $\|\cdot\|_w$ é a norma induzida pelo produto interno definido em (1.12).

Teorema 1.2 (Erdős & Durán) *Sejam $f \in C[a, b]$ e $\{\Phi_i(x); i = 0, 1, \dots\}$. Se $p_N(x)$ interpola $f(x)$ nas raízes de $\Phi_{N+1}(x)$ então*

$$\|p_N - f\|_w \longrightarrow 0 \text{ quando } N \longrightarrow \infty.$$

Detalhes da demonstração podem ser encontrados em Mason [23].

A conclusão mais importante do teorema acima é que polinômios interpoladores com zeros de polinômios ortogonais como pontos de interpolação evitam o fenômeno de Runge, independente do número de pontos de interpolação utilizados.

Resultados mais informativos podem ser obtidos assumindo mais regularidade da função f . De fato, vamos assumir que $f \in C^{(N+1)}[-1, 1]$ e sejam x_0, x_1, \dots, x_N pontos distintos no intervalo $[-1, 1]$. Um resultado clássico sobre o erro de interpolação garante que para cada $x \in [-1, 1]$ existe $\xi(x) \in (-1, 1)$ tal que,

$$e_N(x) = f(x) - p_N(x) = f^{(N+1)}(\xi(x)) \frac{1}{(N+1)!} \prod_{k=0}^N (x - x_k),$$

onde $p_N(x)$ é dado por (1.13). Gostaríamos de determinar os pontos x_0, x_1, \dots, x_N , de modo que o erro $e_N(x)$ seja tão pequeno quanto possível. Mas, como não temos controle sobre $\xi(x)$, vamos nos concentrar em uma escolha dos pontos de modo que o termo $|(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_N)|$ seja minimizado no intervalo $[-1, 1]$. Para tanto, já que $(x - x_0) \cdots (x - x_N)$ é um polinômio mônico de grau $N + 1$, da proposição 1.3 segue que o mínimo é atingido quando,

$$(x - x_0) \cdots (x - x_N) = T_{N+1}^*(x).$$

Assim, o valor máximo de $|(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_N)|$ é menor quando x_k é escolhido como sendo a k -ésima raiz de $T_{N+1}^*(x)$, para cada $k = 0, 1, \dots, N$, isto é, quando

$$x_k := x_k^* = \frac{\cos(2k+1)}{2(N+1)} \pi.$$

Desta forma, temos que

$$\max_{x \in [-1, 1]} |T_{N+1}^*(x)| = \frac{1}{2^N} \implies \frac{1}{2^N} = \max_{x \in [-1, 1]} |(x - x_1^*) \cdots (x - x_{N+1}^*)| \leq \max_{x \in [-1, 1]} |(x - x_0) \cdots (x - x_N)|,$$

para qualquer escolha de x_0, x_1, \dots, x_N no intervalo $[-1, 1]$. Como uma consequência desta análise obtemos o seguinte resultado.

Corolário 1.2 *Se $p_N(x) \in \mathcal{P}_N$ é o polinômio que interpola $f(x)$ nas raízes de $T_{N+1}(x)$, e $f \in C^{(N+1)}[-1, 1]$, então*

$$\max_{x \in [-1, 1]} |f(x) - p_N(x)| \leq \frac{1}{2^N(N+1)!} \max_{x \in [-1, 1]} |f^{(N+1)}(\xi(x))|.$$

Observação 1.3 *Considerando o polinômio interpolador $p_N(x)$ nas raízes do polinômio $U_{N+1}^*(x)$ dados por $x_k = (\cos(k\pi)/N)$, obtemos um resultado semelhante ao corolário 1.2.*

1.2 Matriz de Diferenciação de Chebyshev

Nos métodos espectrais, aproximamos $u(x)$ pela série de Chebyshev truncada,

$$u_N(x) \approx \sum_{i=0}^N c_i \Phi_i(x) \text{ com } \Phi_i(x) = T_i(x) \text{ ou } U_i(x) \text{ e } c_i = \frac{\langle u, \Phi_i \rangle_w}{\langle \Phi_i, \Phi_i \rangle_w}$$

em que c_i são $N + 1$ coeficientes a serem determinados. A representação espectral é feita através dos coeficientes c_i da série de Chebyshev. Outra alternativa é a representação pseudo espectral, que utiliza o polinômio interpolador de grau N para aproximar a função f , em seus valores nos pontos de colocação. Os $N + 1$ pontos de colocação, são suficientes para determinar um polinômio unicamente. Nos métodos pseudo espectrais construímos fórmulas de diferenciação, expressando a derivada de qualquer ordem em um dado ponto de colocação em termos dos valores da função em todos os pontos de colocação. Mais precisamente, dado um conjunto de valores $u(x_j)$, $j = 0, 1, \dots, N$ de uma função u , a derivada discreta em relação a x no ponto x_j , $u'(x_j)$, via métodos pseudo espectrais é determinada através do esquema a seguir:

Diferenciação de Chebyshev

1. Calcule o polinômio interpolador $p(x)$ de grau menor ou igual a N , com $p(x_j) = u(x_j)$ e $0 \leq j \leq N$.
2. Tome $p'(x_j)$ como aproximação para $u'(x_j)$, isto é, $u'(x_j) \approx p'(x_j)$.

Como esta operação é linear, podemos representá-la na forma matriz - vetor conforme segue,

$$\begin{bmatrix} u'(x_0) \\ u'(x_1) \\ \vdots \\ u'(x_N) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} p'(x_0) \\ p'(x_1) \\ \vdots \\ p'(x_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{00} & d_{01} & \cdots & d_{0N} \\ d_{10} & d_{11} & \cdots & d_{1N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{N0} & d_{N1} & \cdots & d_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p(x_0) \\ p(x_1) \\ \vdots \\ p(x_N) \end{bmatrix} \quad (1.14)$$

A matriz $D = [d_{ij}]$, com $0 \leq i, j \leq N$, é chamada matriz de diferenciação. A ordem da matriz D é $N + 1$. 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 , $p \geq 0$ de $u(x)$ nos pontos de colocação é dada por

$$u^{(p)}(x_j) = e_j^T D^p \bar{u}, \quad p \geq 1, \quad (1.15)$$

onde e_j é o $(j + 1)$ -ésimo vetor canônico de ordem $N + 1$ e $\bar{u} = [u(x_0), \dots, u(x_N)]^T$.

Agora suponha que os pontos de colocação x_j sejam os zeros de algum polinômio $\Phi_{N+1}(x)$ de grau $N + 1$. Para cada $k = 0, 1, \dots, N$ defina $p_k(x) = \Phi_{N+1}(x)/(x - x_k)$. Então $p_k(x)$, polinômio que vale 1 no ponto x_k e 0 nos demais pontos x_j , com $k \neq j$ tem grau N , pois x_k é uma raiz do polinômio $\Phi_{N+1}(x)$. Além disso temos que

$$\begin{cases} p_k(x_k) = \Phi'_{N+1}(x_k), \\ p_k(x_j) = 0, \text{ para } j \neq k, \\ p'_k(x_k) = \frac{1}{2} \Phi''_{N+1}(x_k), \\ p'_k(x_j) = \frac{\Phi'_{N+1}(x_j)}{(x_j - x_k)}, \text{ para } j \neq k. \end{cases} \quad (1.16)$$

A primeira e a terceira equações em (1.16) são obtidas aplicando limite quando $x \rightarrow x_k$. Dessa forma, fazendo $p(x) = p_k(x)$ em (1.14), obtemos a k -ésima coluna da matriz de diferenciação D , que contém a derivada do polinômio interpolador $p_k(x)$ de grau N .

$$\begin{cases} d_{kk} = \frac{\Phi''_{N+1}(x_k)}{2\Phi'_{N+1}(x_k)}, \\ d_{jk} = \frac{\Phi'_{N+1}(x_j)}{(x_j - x_k)\Phi'_{N+1}(x_k)}, \text{ para } j \neq k. \end{cases} \quad (1.17)$$

O seguinte resultado afirma que a matriz D é singular, o que não é visto diretamente através de seus elementos.

Lema 1.1 *A matriz D é singular.*

Demonstração: Se $p(x_0) = p(x_1) = \dots = p(x_N) = 1$ então $p(x) = 1$ e $p'(x) = 0$ para todo x . Portanto a matriz D aplica o vetor $[1, 1, \dots, 1]^T$ no vetor nulo. O que demonstra o resultado desejado. \square

É de interesse considerar os $N + 1$ pontos $x_k = \cos((k\pi)/N)$, $k = 0, 1, \dots, N$, que são as raízes do polinômio $\Phi_{N+1}(x) = (1 - x^2)U_{N-1}(x)$ no intervalo $[-1, 1]$. Da definição 1.2, equação (1.4) temos que $\Phi_{N+1}(x) = \text{sen}(\theta)\text{sen}(N\theta)$. Derivando em relação a x , com $x = \cos(\theta)$ temos que:

$$\begin{cases} \Phi'_{N+1}(x) = -\frac{\cos(\theta)\text{sen}(N\theta) + N\text{sen}(\theta)\cos(N\theta)}{\text{sen}(\theta)}, \\ \Phi''_{N+1}(x) = -\frac{\cos^2(\theta)\text{sen}(N\theta) - N\text{sen}(\theta)\cos(\theta)\cos(N\theta) + (1 + N^2)\text{sen}(N\theta)\text{sen}^2(\theta)}{\text{sen}^3(\theta)}. \end{cases} \quad (1.18)$$

Como $\theta_k = (k\pi)/N$ então $\text{sen}(N\theta_k) = 0$ e $\cos(N\theta_k) = (-1)^k$, as equações (1.18) resultam em,

$$\begin{cases} \Phi'_{N+1}(x_k) = -(-1)^k N, \text{ para } 0 < k < N, \\ \Phi'_{N+1}(x_0) = -2N, \\ \Phi'_{N+1}(x_N) = -2(-1)^N N. \end{cases} \quad (1.19)$$

As equações em (1.19) são obtidas ao aplicarmos limite quando $\theta \rightarrow (k\pi)/N$. De maneira análoga, obtemos

$$\begin{cases} \Phi''_{N+1}(x_k) = N \frac{x_k(-1)^k}{1 - x_k}, \text{ para } 0 < k < N, \\ \Phi''_{N+1}(x_0) = -\frac{2N}{3}(1 + 2N^2), \\ \Phi''_{N+1}(x_N) = \frac{2N}{3}(-1)^N(1 + 2N^2). \end{cases} \quad (1.20)$$

Substituindo as equações (1.19) e (1.20) em (1.17) obtemos os seguintes elementos da matriz de diferenciação de Chebyshev

$$\begin{aligned}
d_{00} &= \frac{1 + 2N^2}{6}, & d_{NN} &= -\frac{1 + 2N^2}{6}, \\
d_{0k} &= \frac{2(-1)^k}{1 - x_k}, & d_{k0} &= -\frac{1(-1)^k}{2(1 - x_k)}, \\
d_{Nk} &= -\frac{2(1)^{N-k}}{1 + x_k}, & d_{kN} &= \frac{1(-1)^{k-N}}{2(1 + x_k)}, \\
d_{0N} &= \frac{(-1)^N}{2}, & d_{N0} &= -\frac{(-1)^N}{2}, \\
d_{kk} &= \frac{1}{2} \frac{x_k}{1 - x_k^2}, & & \text{para } 0 < k < N, \\
d_{jk} &= \frac{(-1)^{j-k}}{x_j - x_k}, & & \text{para } 0 < j \neq k < N.
\end{aligned}$$

E assim a matriz de diferenciação de Chebyshev D de ordem $N + 1$ é dada por,

$$D = \begin{bmatrix} \frac{1 + 2N^2}{6} & -\frac{2}{1 - x_1} & \frac{2}{1 - x_2} & \cdots & \frac{2(-1)^{N-1}}{1 - x_{N-1}} & \frac{(-1)^N}{2} \\ \frac{1}{2(1 - x_1)} & -\frac{x_1}{2(1 - x_1^2)} & -\frac{1}{x_1 - x_2} & \cdots & \frac{(-1)^{N-2}}{x_1 - x_{N-1}} & \frac{(-1)^{N-1}}{2(1 + x_1)} \\ -\frac{1}{2(1 - x_2)} & -\frac{1}{x_2 - x_1} & -\frac{x_2}{2(1 - x_2^2)} & \cdots & \frac{(-1)^{N-3}}{x_2 - x_{N-1}} & \frac{(-1)^{N-2}}{2(1 + x_2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\frac{(-1)^{N-1}}{2(1 - x_{N-1})} & \frac{(-1)^{N-2}}{x_{N-1} - x_1} & \frac{(-1)^{N-3}}{x_{N-1} - x_2} & \cdots & -\frac{x_{N-1}}{2(1 - x_{N-1}^2)} & -\frac{1}{2(1 + x_{N-1})} \\ -\frac{(-1)^N}{2} & -\frac{2(-1)^{N-1}}{1 + x_1} & -\frac{2(-1)^{N-2}}{1 + x_2} & \cdots & \frac{2}{1 + x_{N-1}} & -\frac{1 + 2N^2}{6} \end{bmatrix} \quad (1.21)$$

A matriz D é densa, não é simétrica, nem anti-simétrica. A matriz D satisfaz a propriedade [37]: $d_{ij} = -d_{(N-i)(N-j)}$. Como exemplo, se $N = 1$ os pontos são $x_0 = 1$ e $x_1 = -1$ e assim,

$$D = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad D^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

Para $N = 2$, os pontos são $x_0 = 1$, $x_1 = 0$ e $x_N = -1$ e as matrizes D e D^2 são:

$$D = \begin{bmatrix} \frac{3}{2} & -2 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 2 & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}, \quad D^2 = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix},$$

e assim por diante. Note que as matrizes D e D^2 são singulares conforme esperado. Além disso, as matrizes são não normais ³ a medida que N aumenta, o que dificulta a análise de estabilidade dos métodos pseudo espectrais de Chebyshev, assunto que será discutido no capítulo 2.

³Uma matriz (ou operador) A é normal quando possui um sistema completo de autovetores (autofunções) ortogonal. Equivalentemente, A é normal se e somente se $A^*A = AA^*$. Matrizes simétricas, anti-simétricas e ortogonais pertencem a essa categoria. O símbolo $*$ representa a conjugação complexa para vetores e a transposição conjugada para matrizes, que é denotada também por H .

Para efeitos de computação, a matriz de diferenciação de Chebyshev pode ser calculada através da seguinte *função* MATLAB, a qual é uma adaptação da função *cheb.m*, definida em [37, pág. 54] no intervalo $[-1, 1]$, e com pontos de colocação ordenados da direita para a esquerda. Uma implementação eficiente da matriz de diferenciação de Chebyshev também pode ser feita usando um algoritmo publicado em Fornberg [12].

```
% A função cheby calcula a matriz de diferenciação
% D e os pontos de colocação y_j, em um intervalo [a,b].
% Os pontos y_j são ordenados da esquerda para a direita.

function [D,y] = cheby(N,b,a)
if N==0, D=0; x=1; return, end
x = cos(pi*(0:N)/N)'; y=0.5*((b-a)*x+(b+a));
c = [2; ones(N-1,1); 2].*(-1).^(0:N)';
X = repmat(y,1,N+1);
dX = X-X';
D1 = (c*(1./c)')./(dX+(eye(N+1))); % elementos fora da diagonal
D1 = D1 - diag(sum(D1')); % elementos da diagonal
y = flipud(y); % ordenando pontos crescentemente
D = flipud(fliplr(D1)); % reordenando linhas e colunas
```

No Teorema de Erdős & Durán 1.2 vimos que quando interpolamos funções contínuas usando polinômios com os zeros de polinômios ortogonais como pontos de interpolação, o erro de interpolação pode ser feito arbitrariamente pequeno tomando N suficientemente grande. Portanto, a pergunta natural que aparece é se existe um resultado análogo para o erro na diferenciação espectral de Chebyshev. A resposta é afirmativa e depende da regularidade da função a ser diferenciada. Na prática, *quanto mais regular for a função melhor a qualidade da aproximação da derivada via diferenciação espectral*. A seguinte proposição, cuja demonstração pode ser encontrada em Tadmor [33], descreve o assunto mais precisamente.

Proposição 1.6 *Seja f analítica no intervalo $[-1,1]$ e sobre a elipse com focos em $(-1,0)$ e $(1,0)$. Seja w_j a derivada pseudo espectral de ordem p , $p \geq 1$, de f no ponto x_j , $0 \leq j \leq N$. Então*

$$|w_j - f(x_j)^{(p)}| = \mathcal{O}(K^{-N}), \quad (1.22)$$

onde $K > 1$ é uma constante que depende de f .

Observação 1.4 *Como a constante K na proposição 1.6 é da forma e^η com η sendo uma constante apropriada, diz-se que a diferenciação espectral de Chebyshev tem precisão exponencial.*

A precisão da diferenciação espectral de Chebyshev é ilustrada na figura 1.3, a qual apresenta a aproximação da primeira derivada da função suave $u(x) = \exp(x)\sin(5x)$, com $N = 20$ à esquerda e o erro cometido na aproximação à direita.

1.3 Método pseudo espectral de Chebyshev

O esquema de aproximação pseudo espectral para resolver EDO's ou EDP's (equações diferenciais parciais) consiste basicamente em aproximar as derivadas em relação as variáveis espaciais através da matriz de diferenciação de Chebyshev, transformando o problema original em um sistema algébrico de equações lineares ou em um sistema de EDO's dependente do tempo.

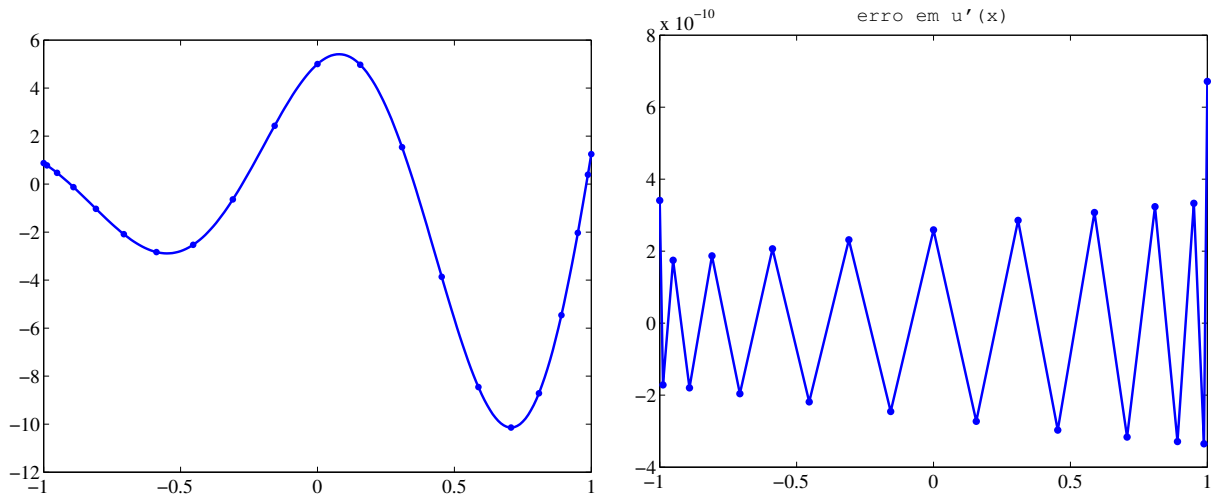


Figura 1.3: Aproximação da derivada da função $u(x)$ e erro na aproximação de $u'(x)$ com $N = 20$.

Por considerarmos importante para o entendimento dos problemas apresentados nos próximos capítulos, vamos ilustrar a idéia do método abordando a solução numérica de dois problemas de valor na fronteira envolvendo condições do tipo Dirichlet nulas.

Exemplo 1: Um problema de valor na fronteira unidimensional

Vamos considerar o problema de valor de fronteira em uma dimensão,

$$\begin{cases} u_{xx} = \exp(4x), & -1 < x < 1 \\ u(-1) = u(1) = 0 \end{cases} \quad (1.23)$$

A solução exata do problema é dada por:

$$u(x) = \frac{1}{16} \exp(4x) - x \operatorname{senh}(4) - \cosh(4). \quad (1.24)$$

Como o problema envolve apenas uma variável espacial, o método pseudo espectral procede aproximando a derivada de segunda ordem nos pontos de colocação de Chebyshev,

$$-1 = x_0 > x_1 > \dots > x_N = 1, \quad \text{com } x_j = \cos\left(\frac{j\pi}{N}\right), \quad j = 0, 1, \dots, N$$

transformando o problema contínuo em um problema discreto descrito através de um sistema algébrico de equações lineares, o qual pode ser deduzido como segue.

Avaliando (1.23) nos pontos de colocação temos

$$\begin{aligned} u_{xx}(x_0) &= \exp(4x_0) \\ u_{xx}(x_1) &= \exp(4x_1) \\ &\vdots \\ u_{xx}(x_{N-1}) &= \exp(4x_{N-1}) \\ u_{xx}(x_N) &= \exp(4x_N) \end{aligned}$$

Se $\bar{u} \doteq [u(x_0), \dots, u(x_N)]^T$ e $\bar{u}_{xx} \doteq [u_{xx}(x_0), \dots, u_{xx}(x_N)]^T$, usando a matriz diferenciação de Chebyshev obtemos um conjunto de relações

$$D^2 \bar{u} \approx \bar{u}_{xx} = \begin{bmatrix} \exp(4x_0) \\ \vdots \\ \exp(4x_N) \end{bmatrix} \doteq \bar{e} \quad (1.25)$$

que é quase um sistema algébrico com $N + 1$ incógnitas.

Se assumimos que as aproximações para $u(x_j)$ satisfazem (1.25) como igualdade, isto é, se desprezamos o erro de aproximação em (1.25), obtemos um sistema de equações lineares do tipo

$$D^2 \bar{u} = \bar{e}, \quad (1.26)$$

com as aproximações para $u(x_j)$ como incógnitas, onde por simplicidade, também usamos \bar{u} para denotar o vetor de soluções aproximadas. Para finalizar o processo de discretização do problema contínuo, as condições de fronteira $u(x_0) = u(x_N) = 0$ devem ser incorporadas em (1.26). Para tanto, vamos representar a matrix de diferenciação de Chebyshev através de suas linhas l_j^T e colunas d_j , respectivamente, como

$$D = \begin{bmatrix} l_0^T \\ \vdots \\ l_N^T \end{bmatrix} = [d_0 \ \cdots \ d_N]. \quad (1.27)$$

Usando (1.27) e as condições de fronteira segue que

$$D^2 \bar{u} = \begin{bmatrix} l_0^T \\ \vdots \\ l_N^T \end{bmatrix} [d_1 \ \cdots \ d_{N-1}] \begin{bmatrix} u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix}.$$

Substituindo este resultado em (1.26), após a eliminação da primeira e da última equação para se obter um sistema quadrado, obtem-se o sistema linear

$$D_1 D_2 \check{u} = \check{e} \quad (1.28)$$

com

$$D_1 = [l_1, \dots, l_{N-1}]^T, \quad D_2 = [d_1, \dots, d_{N-1}], \quad (1.29)$$

$$\check{e} = [\exp(4x_1), \dots, \exp(4x_{N-1})]^T, \quad \text{e} \quad \check{u} = [u(x_1), \dots, u(x_{N-1})]^T.$$

O sistema (1.28) é o *problema discreto* correspondente ao problema contínuo (1.23).

Resumindo, a solução aproximada do problema (1.23) via método pseudospectral de Chebyshev requer a solução do sistema algébrico de equações lineares (1.28). Para resolver (1.28) é necessário mostrar que a matrix $D_1 D_2$ é inversível. A seguinte proposição mostra esse fato.

Proposição 1.7 *A matrix $D_1 D_2$ é não singular.*

Demonstração: Basta observar que a matrix $D_1 D_2$ têm $N - 1$ autovalores não nulos que aproximam os autovalores do problema de autovalores contínuo $u'' = \lambda u$, com $u(-1) = u(1) = 0$, veja por exemplo [37].

□

A figura 1.4 apresenta a solução aproximada do problema (1.23) (esquerda) nos pontos da malha e o erro na aproximação (direita), já que a solução exata é dada por (1.24).

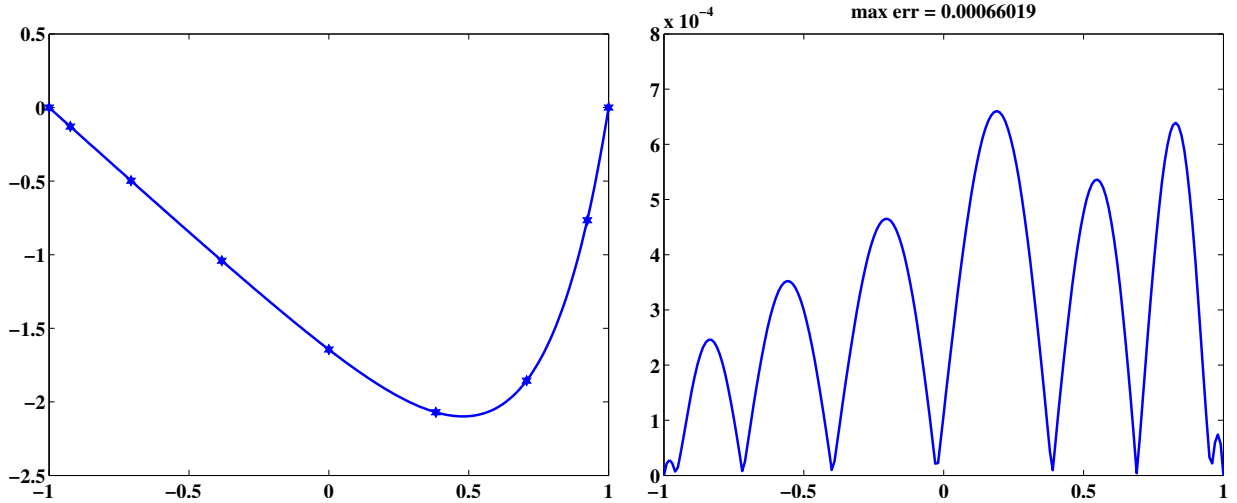


Figura 1.4: Solução aproximada e erro de aproximação do problema (1.23).

Exemplo 2: Um problema de valor na fronteira bidimensional

Vamos considerar o problema de valor na fronteira em duas dimensões,

$$\begin{cases} u_{xx} + u_{yy} = f(x, y), & \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (1.30)$$

Para esse problema vamos considerar uma malha discreta para o domínio Ω , baseada nos pontos de Chebyshev definidos anteriormente. A aproximação para a derivada espacial é feita de maneira análoga ao caso unidimensional (veja exemplo 1) em cada uma das direções x e y , nos $N + 1$ pontos de Chebyshev, e como no exemplo 1 os pontos da malha discreta se concentram perto da fronteira do domínio Ω .

Para exemplificar, vamos considerar uma malha com $N + 1 = 5$ pontos em cada uma das direções x e y , e vamos aproximar o operador Laplaciano ($\Delta u = u_{xx} + u_{yy}$) nos $(N + 1)^2$ pontos da malha. A matriz L_N que aproxima Δu é obtida através da aproximação da derivada espacial fixando cada um dos pontos y_j (com $0 \leq j \leq N$) para aproximar a derivada na variável x , e fixando cada um dos pontos x_j para aproximar a derivada na variável y . Como as condições de fronteira são do tipo Dirichlet nulas, o problema se restringe ao interior do domínio numérico onde as incógnitas são organizadas no vetor

$$\check{u} = \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \end{bmatrix}, \quad \text{com } \bar{u}_i \doteq [u(x_1, y_i) \ u(x_2, y_i) \ u(x_3, y_i)]^T, \quad 1 \leq i \leq 3.$$

Fixando y_i e usando a notação acima segue então que

$$\check{u}_{xx} \doteq \begin{bmatrix} \bar{u}_{1,xx} \\ \bar{u}_{2,xx} \\ \bar{u}_{3,xx} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} D_1 D_2 \bar{u}_1 \\ D_1 D_2 \bar{u}_2 \\ D_1 D_2 \bar{u}_3 \end{bmatrix}$$

com $u_{i,xx} \doteq [u_{xx}(x_1, y_i), \ u_{xx}(x_2, y_i), \ u_{xx}(x_3, y_i)]^T$ e as matrizes D_1 e D_2 definidas como em

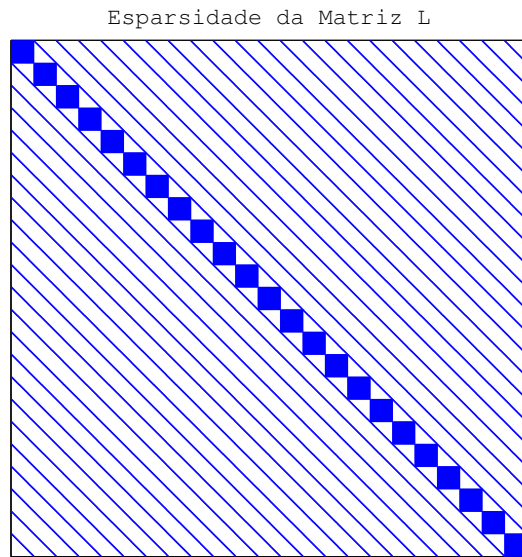


Figura 1.5: Localização dos elementos na matriz L_N .

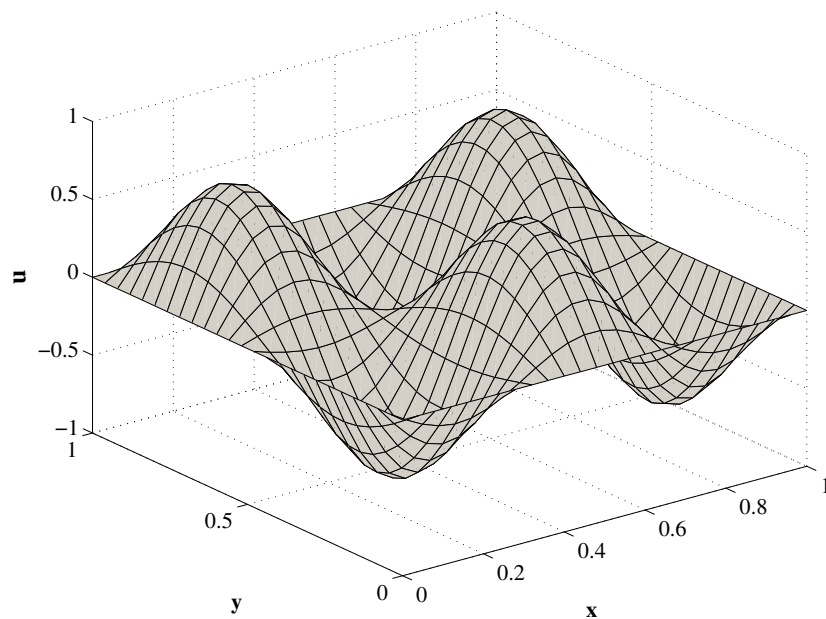


Figura 1.6: Solução aproximada do problema (1.30), para $f(x, y) = 90.72\text{sen}(3\pi x)\text{sen}(2\pi y)$.

A matriz L_N não é muito esparsa (figura 1.5, com $N + 1 = 25$) e de ordem $(N - 1)^2$. O aumento da dimensão do sistema a medida que N cresce poderia resultar em dificuldades computacionais. Na prática isso não ocorre graças a precisão do método pseudo espectral que garante resultados satisfatórios para dimensões moderadas. Por outro lado, da mesma forma

⁴Também conhecido, produto tensorial, é definido no apêndice A onde são incluídas a definição e algumas propriedades.

que mostramos, para o exemplo 1, que a matriz $D_1 D_2$ é não singular, precisamos mostrar que L_N é não singular. A afirmação segue da proposição 1.7 e do corolário A.1, no apêndice A.

Para o exemplo numérico bidimensional, usamos $N + 1 = 25$ e consideramos a função f definida por $f(x, y) = 90.72 \text{sen}(3\pi x) \text{sen}(2\pi y)$. A solução exata para o problema (1.30) é dada por: $u(x, y) = -(1/\sqrt{2}) \text{sen}(3\pi x) \text{sen}(2\pi y)$. A solução aproximada é apresentada na figura 1.6 e erro máximo em relação a solução exata é $4.0798 \cdot 10^{-5}$.

Os dois esquemas descritos nestes exemplos serão a base para os problemas de propagação de ondas apresentados no capítulo 3 e para os métodos pseudo espectrais de Chebyshev apresentados no capítulo 4.

1.4 O Método das Linhas

Para equações diferenciais que dependem do tempo, a aplicação do método pseudo espectral, descrito na seção anterior, resulta em um sistema de EDO's dependente do tempo. Esse sistema pode ser resolvido por algum esquema de aproximação para sistemas de EDO's [9, 19, 28], por exemplo: métodos de Runge-Kutta (RK), multi passos, etc. Essa associação entre as variáveis espaciais e a variável temporal é conhecido como *método das linhas* [26, 27, 37, 38]. A principal vantagem do método das linhas está na simplicidade do seu esquema de resolução. Para descrever o método mais precisamente, considere a equação evolução,

$$U_t = \mathcal{L}U, \quad U(x, 0) = f(x), \quad t \in [0, T] \quad (1.34)$$

com \mathcal{L} um operador diferencial que independe do tempo t (que pode envolver as condições de fronteira), e U um escalar ou um vetor que depende de t e de uma ou mais variáveis espaciais.

Método das Linhas

- i. A aproximação das derivadas em relação as variáveis espaciais de (1.34) via diferenças finitas, elementos finitos, métodos pseudo espectrais, em uma malha discreta, transforma a EDP em um sistema de EDO's (modelo semi discreto).

$$\tilde{U}_t = L_h \tilde{U}, \quad \tilde{U}(0) = f_N \quad (1.35)$$

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

- ii. O sistema (1.35) 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 $0 \leq i \leq N$.

Um aspecto fundamental do esquema é a escolha do tamanho de passo Δt , que garanta a estabilidade do método que resolve o sistema de EDO's semidiscreto (1.35). Por exemplo, se o sistema (1.35) é resolvido através dos métodos de Runge-Kutta, veja a seção 2.1.1, as soluções numéricas ao longo das linhas x_i são da forma

$$\tilde{U}(t_k, x_i) = P_s(\Delta t L_N) \tilde{U}(t_{k-1}, x_i) \doteq \tilde{U}(t_k) = [P_s(\Delta t L_N)]^k \tilde{U}(t_0)$$

com

$$P_s(\Delta t L_N) := I + \Delta t L_N + \cdots + \frac{1}{s!} (\Delta t L_N)^s \quad (1.36)$$

e s a ordem do método de Runge-Kutta. Dessa forma, para garantir que as soluções numéricas não propaguem erros iniciais ou erros de arredondamento, é necessário que a escolha do tamanho do passo Δt seja feita de modo que

$$\|P_s(\Delta t L_N)\| \leq 1,$$

para alguma norma matricial.

Detalhes sobre estabilidade dos métodos Runge-Kutta serão descritos no próximo capítulo. Aqui, o objetivo é ilustrar o esquema do método das linhas. Para isto, vamos considerar o problema,

$$\begin{cases} u_t(x, t) = u_x(x, t), & x \in (-1, 1), \quad t > 0 \\ u(x, 0) = f(x) = \begin{cases} \cos^2(\pi(x - 0.25)), & \text{se } |x - 0.25| \leq 0.5, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \\ u(1, t) = 0, \quad \forall t. \end{cases} \quad (1.37)$$

A solução exata do problema (1.37), é dada por: $u(x, t) = f(x + t)$, com $x \in \mathbb{R}$ e $t > 0$, ou seja, a função $f(x)$ é deslocada para a esquerda ao longo do tempo, veja a figura 1.7.

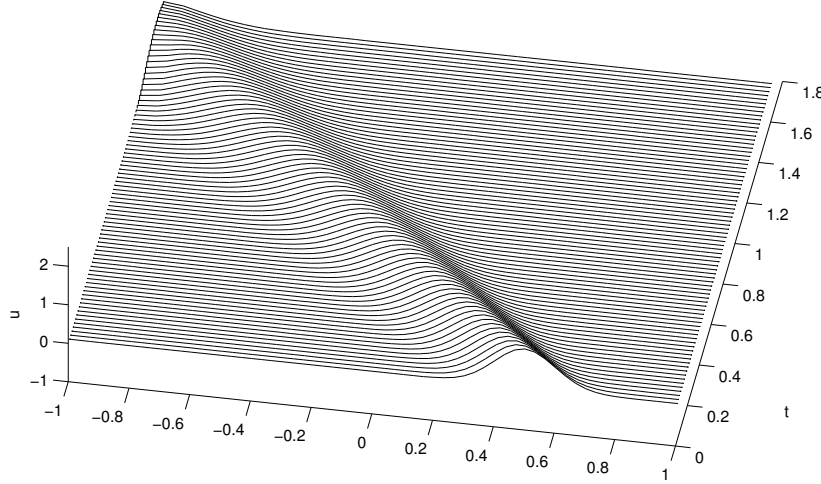


Figura 1.7: Equação da onda unidirecional: solução do problema (1.37).

Para mostrar a dificuldade de se determinar Δt vamos apresentar dois esquemas para a aproximação da derivada espacial: o método *upwind* e o método pseudo espectral de Chebyshev.

1.4.1 Método das Linhas: Discretização espacial *upwind*+RK3

Neste caso, vamos considerar a malha espacial com pontos igualmente espaçados: $x_i = -1 + i\Delta x$, com $\Delta x := 2/N$. Assim temos,

$$\frac{d}{dt}u(x_i, t) = \frac{u(x_{i+1}, t) - u(x_i, t)}{\Delta x}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1.$$

Então, se $\bar{u} \doteq [u(x_0, t) \ u(x_1, t) \ \cdots \ u(x_{N-1}, t)]^T$, o método das linhas associa ao problema contínuo o sistema semi discreto

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \bar{u} = L_N \bar{u}, \\ \bar{u}(0) = \bar{f}, \end{cases} \quad L_N = \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ & -1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & -1 \end{bmatrix}. \quad (1.38)$$

Para resolver (1.38), vamos considerar o método de Runge-Kutta de terceira ordem,

$$\bar{u}(t_{k+1}) = \left[I + \Delta t L_N \frac{(\Delta t L_N)^2}{2} + \frac{(\Delta t L_N)^3}{6} \right] \bar{u}(t_k). \quad (1.39)$$

O sistema (1.39) é um bom exemplo para mostrar que a estabilidade baseada somente na análise dos autovalores de matrizes não normais, como L_N , pode levar a conclusões erradas a respeito da escolha do tamanho de passo Δt . Na verdade, verificando apenas que os autovalores da matriz $\Delta t L_N$ satisfaçam a condição $|P_3(-\Delta t/\Delta x)| \leq 1$, resulta na condição $(\Delta t/\Delta x) \leq 2.5$. Essa condição não garante a estabilidade das soluções numéricas, já que as potências da matriz L_N não são limitadas, conforme ilustra a figura 1.8 (esquerda). Portanto não podemos esperar bons resultados com essa escolha para Δt [33].

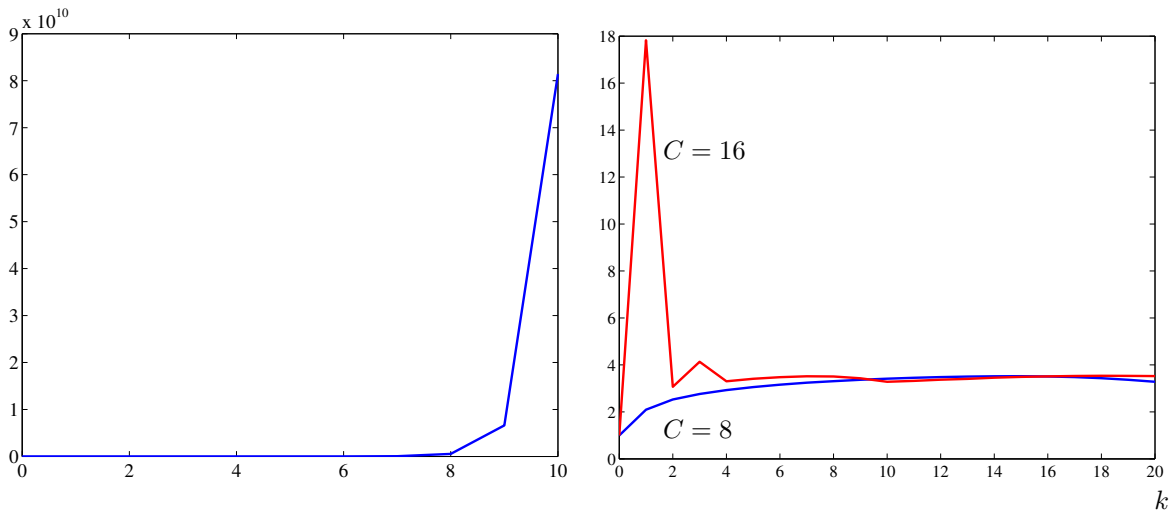


Figura 1.8: Norma das potências de $\|[P_3(\Delta t L_N)]^k\|$ com $\Delta t = 2.5 \Delta x$ (para o esquema *upwind* + *RK3* à esquerda) e $\|P_3(\Delta t \tilde{D})\|$, com $\Delta t \leq CN^{-2}$ (para o método pseudo espectral à direita), $N = 80$.

No próximo capítulo, os conceitos envolvidos neste exemplo serão apresentados com mais detalhes, junto com a condição que é necessária e suficiente para a estabilidade das soluções do sistema (1.35).

1.4.2 Método das Linhas: Discretização espacial pseudo espectral+RK3

Aproximando as derivadas das variáveis espaciais através do método pseudo espectral descrito na seção anterior, obtemos o sistema semi discreto:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\tilde{u} = \tilde{D}\tilde{u}, \\ \tilde{u}(0) = \tilde{f}, \end{cases} \quad (1.40)$$

em que $\tilde{u} \doteq [u(x_0, t), \dots, u(x_{N-1}, t)]^T$, x_j são os pontos de Chebyshev, e \tilde{D} é a matriz formada tomando as N primeiras linhas e N primeiras colunas da matriz de diferenciação de Chebyshev descrita em (1.21). A $(N+1)$ -ésima coluna da matriz D é desconsiderada por causa da fronteira $u(x_N, t) = 0$.

Tadmor em [34] e Gottlieb, Shu e Tadmor em [16], analisam a solução numérica através do método RK3 e mostram que a escolha $\Delta t \leq CN^{-2}$, com C sendo uma constante adequada, garante a estabilidade do método das linhas. A figura 1.8 (direita), apresenta a norma das potências das matrizes $P_3(\Delta t \tilde{D})$, como uma função de k para $\Delta t = CN^{-2}$, para $C = 8$ e $C = 16$. Para as duas constantes C , $\|[P_3(\Delta t \tilde{D})]^k\|$ são limitadas. Na figura 1.7 apresentamos a solução do problema (1.37), com $N = 80$ e $C = 8$ através do método pseudo espectral de Chebyshev. No capítulo 4 utilizaremos o método das linhas para resolver problemas de propagação de onda, através dos métodos pseudo espectrais de Chebyshev. A questão da estabilidade dos métodos é discutida no próximo capítulo.

Capítulo 2

Estabilidade do Método das Linhas Pseudo Espectral

Na seção anterior vimos que a solução numérica de uma EDP do tipo evolução através do método das linhas é construída resolvendo um problema de valor inicial (PVI) proveniente da discretização espacial do problema original, através de um método para um sistema de EDO's semi discreto. Um aspecto crucial na solução desse PVI é escolher o tamanho de passo Δt , de modo que a propagação de erros de entrada (na condição inicial, por exemplo) seja evitada, isto é, de modo que a solução numérica do problema completamente discreto seja *estável*. A análise de estabilidade do *método das linhas pseudo espectral* é o ponto central deste capítulo.

O capítulo é organizado da seguinte maneira. Na seção 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), já que o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) será utilizado nos métodos pseudo espectrais de Chebyshev propostos no capítulo 4. Conforme serão vistos, esses conceitos tornam-se essenciais para a análise de estabilidade dos métodos das linhas pseudo espectrais.

A seção 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 [26, 27].

Além disso, mostra-se 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, mostra-se que o pseudo espectro ilustra o grau de não normalidade do operador e contorna as limitações da análise espectral. Alguns resultados que relacionam a norma do operador evolução $\|\exp(t\mathcal{A})\|$ e a norma do conjunto resolvente $\|(z - \mathcal{A})^{-1}\|$ são também apresentados nessa seção.

O capítulo encerra com a seção 2.4 destacando os resultados que garantem a estabilidade segundo autovalores e segundo Lax do *método das linhas pseudo espectral*.

2.1 Regiões de estabilidade

Nesta seção, vamos considerar um PVI da forma,

$$\begin{cases} u_t = f(t, u(t)), & t \in [0, T] \\ u(t_0) = u_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

focando um dos aspectos cruciais da construção de soluções numéricas, a escolha do tamanho de passo Δt que evite a propagação de erros dos dados iniciais, isto é, a escolha de Δt que garanta a estabilidade das soluções numéricas.

Uma maneira de analisar a estabilidade de um método numérico para o problema de valor inicial (2.1) é através de certas regiões do plano complexo ditas *regiões de estabilidade do método*. Essas regiões podem ser definidas como segue.

Definição 2.1 *Considere um método numérico de aproximação para problemas de valor inicial com tamanho de passo Δt .*

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

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

com tamanho de passo Δt for limitada, isto é, $u_k \rightarrow 0$ 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.*

- iii. Um método é **A-estável** se a sua região de estabilidade incluir todo o semi plano complexo negativo.*

O uso de regiões de estabilidade para análise de estabilidade de soluções numéricas para o problema 2.1 pode ser justificado da seguinte maneira. Expandindo $u_t = f(t, u(t))$ em série de Taylor em torno de (t_0, u_0) segue que

$$\begin{aligned} u_t &\approx f(t_0, u_0) + f_t(t_0, u_0)(t - t_0) + f_u(t_0, u_0)(u(t) - u(t_0)) \\ &= \lambda(u(t) - u_0) + g(t), \end{aligned}$$

em que $\lambda = f_u(t_0, u_0)$ e $g(t) = f(t_0, u_0) + f_t(t_0, u_0)(t - t_0)$, o que é válido se $t - t_0$ é suficientemente pequeno. Introduzindo a nova variável $v(t) = u(t) - u_0$, a aproximação acima pode ser reescrita

$$v_t \approx \lambda v + g(t)$$

Quando se analisa a questão da estabilidade, efetua-se a diferença entre a solução do problema original e do problema perturbado. Assim, o termo $g(t)$ é eliminado sem afetar o resultado sobre a estabilidade. Isto leva à equação de referência descrita em (2.2).

2.1.1 Regiões de estabilidade dos métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Runge-Kutta (RK) produzem resultados equivalentes aos obtidos com séries de Taylor com termos de ordem superiores e têm a vantagem de não precisarem do uso das derivadas da função $f(t, u(t))$ [1]. Nesta seção, apresentamos uma breve discussão sobre as regiões de estabilidade dos métodos de Runge-Kutta. Esses conceitos serão usados posteriormente no capítulo 4. Os métodos RK são da forma,

$$u_{k+1} = u_k + \Delta t \Phi(t_k, u_k, \Delta t) \quad (2.3)$$

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, (2.4), (2.5), (2.6) e (2.7):

Runge-Kutta de primeira ordem (RK1):

$$u_{k+1} = u_k + \Delta t(f(t_k, u_k)), \text{ para cada } k = 0, 1, \dots \quad (2.4)$$

Runge-Kutta de segunda ordem (RK2):

$$\begin{cases} u_{k+1} = u_k + (\Delta t/2)[f(t_k, u_k) + f(t_k + \Delta t, u_k + \Delta t f(t_k, u_k))], \\ \text{para cada } k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2.5)$$

Runge-Kutta de terceira ordem (RK3):

$$\begin{cases} K_1 = f(t_k, u_k), \\ K_2 = f(t_k + \Delta t/2, u_k + (\Delta t/2)K_1), \\ K_3 = f(t_k + \Delta t, u_k + 2\Delta t K_2 - \Delta t K_1), \\ u_{k+1} = u_k + (\Delta t/6)[K_1 + 4K_2 + K_3], \text{ para cada } k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2.6)$$

Runge-Kutta de quarta ordem (RK4):

$$\begin{cases} K_1 = f(t_k, u_k), & K_2 = f(t_k + \Delta t/2, u_k + (\Delta t/2)K_1), \\ K_3 = f(t_k + \Delta t/2, u_k + (\Delta t/2)K_2), & K_4 = f(t_k + \Delta t, u_k + \Delta t K_3) \\ u_{k+1} = u_k + (\Delta t/6)[K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4], \text{ para cada } k = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (2.7)$$

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 (2.4, 2.5, 2.6, 2.7), respectivamente. Por exemplo, o método RK4 segue o esquema (2.7) da seguinte maneira:

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

A seguir apresentamos as regiões de estabilidade dos métodos de 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 do método de Euler é obtida quando resolvemos a equação de referência (2.2), através do esquema (2.4).

$$u_{k+1} = (1 + \lambda \Delta t)u_k \approx \exp(\lambda \Delta t)u_k. \quad (2.9)$$

Dessa forma a sequência u_k é limitada quando $|1 + \lambda \Delta t| \leq 1$. O que implica, para λ real, $-2 \leq \lambda \Delta t \leq 0$. A partir da desigualdade (2.9) obtemos a região de estabilidade do método, apresentada na figura 2.1, (círculo).

A região de estabilidade do método RK2 (2.5), é obtida de forma análoga. É imediato que

$$u_{k+1} = \left[1 + \lambda \Delta t + \frac{(\lambda \Delta t)^2}{2} \right] u_k \approx \exp(\lambda \Delta t)u_k.$$

E da mesma forma, a sequência u_k é limitada se

$$\left| 1 + \lambda\Delta t + \frac{(\lambda\Delta t)^2}{2} \right| \leq 1. \quad (2.10)$$

O conjunto dos $\lambda\Delta t$, que satisfazem (2.10) é apresentado na figura 2.1.

Para os métodos de RK de terceira e quarta ordens as regiões de estabilidade são expressas respectivamente pelas equações (2.11) e (2.12).

$$\left| 1 + \lambda\Delta t + \frac{(\lambda\Delta t)^2}{2} + \frac{(\lambda\Delta t)^3}{6} \right| \leq 1. \quad (2.11)$$

$$\left| 1 + \lambda\Delta t + \frac{(\lambda\Delta t)^2}{2} + \frac{(\lambda\Delta t)^3}{6} + \frac{(\lambda\Delta t)^4}{24} \right| \leq 1. \quad (2.12)$$

As regiões de estabilidade dos métodos RK3 e RK4 também são apresentadas na figura 2.1 pelas duas regiões maiores. No método RK de terceira ordem os pontos de intersecção são, no eixo x , -2.51 e no eixo iy , $-\sqrt{3}$ e $\sqrt{3}$. No método RK de quarta ordem os pontos de intersecção são, no eixo x , -2.78 e no eixo iy , $-2\sqrt{2}$ e $2\sqrt{2}$.

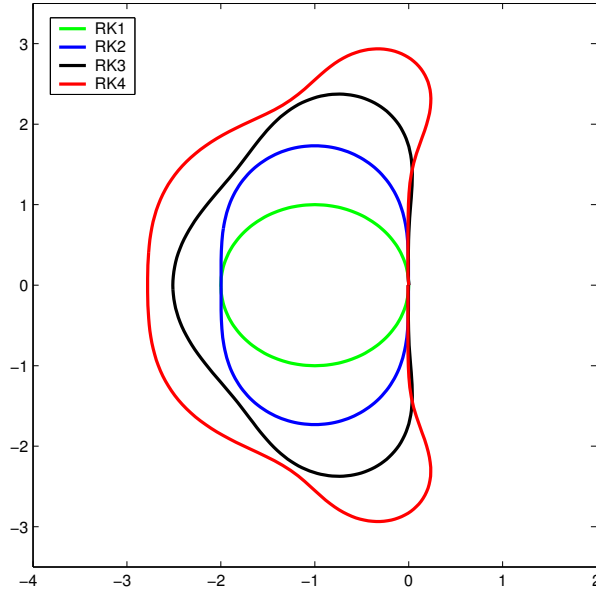


Figura 2.1: Regiões de estabilidade dos métodos de Runge Kutta de ordem 1, 2, 3 e 4.

As regiões de estabilidade dos métodos RK para problemas da forma (2.1) lineares com coeficientes constantes, ou seja, $f(t, u(t)) = L_N u$, também podem ser obtidas através da definição 2.2.

Reescrevendo o problema (2.1) na forma completamente discreta, pode ser visto facilmente que as soluções no nível de tempo k podem ser escritas de modo que

$$u_k = P_s(\Delta t L_N) u_{k-1} \implies u_k = P_s(\Delta t L_N)^k u_0 \quad \forall k \geq 0, \quad (2.13)$$

com $P_s(\Delta t L_N)$ representando o polinômio de grau s associado ao método RK de ordem s (veja, seção 1.4, equação (1.36)). Assim, a solução no nível de tempo k pode ser escrita em função da condição inicial e de um operador evolução, da forma:

$$u_k = [P_s(\Delta t L_N)]^k u_0 \quad \forall k \geq 0. \quad (2.14)$$

Já que estamos interessados na estabilidade das aproximações numéricas dos métodos RK, devemos impor a restrição

$$\|[P_s(\Delta t L_N)]^k\| \leq 1, \quad \forall k \geq 0.$$

Dessa forma, a região de estabilidade dos métodos RK de ordem s é dada por,

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

conforme visto na seção 1.4.1.

2.1.2 Região de estabilidade para o método das linhas

Agora vamos introduzir a região de estabilidade para o método ds linhas (seção 1.4) . Assuma que o problema (1.34) foi completamente discretizado, produzindo um esquema de aproximação do tipo

$$u_k = \phi(\Delta t L_N) u_{k-1} = S_{\Delta t, N} u_{k-1}, \quad (2.15)$$

com $S_{\Delta t, N}$ um esquema de aproximação numérico nos $(N + 1)$ pontos da malha e tamanho de passo Δt , de modo que no instante de tempo k , vale

$$u_k = (S_{\Delta t, N})^k u_0.$$

Aqui, dependendo da discretização temporal utilizada, $\phi(w) = p(w)/q(w)$ é uma função racional ou um polinômio, e u_k é a solução numérica que aproxima u no tempo k ao longo da malha espacial x_i , $0 \leq i \leq N$ [27] .

Assumindo ϕ analítica em um conjunto que contém o espectro de $\Delta t L_N$, pelo teorema da aplicação espectral ¹, temos que o espectro de $S_{\Delta t, N}$ e o espectro de $\Delta t L_N$, denotados, respectivamente por $\wedge(S_{\Delta t, N})$ e $\wedge(\Delta t L_N)$, satisfazem: $\wedge(S_{\Delta t, N}) = \phi(\wedge(\Delta t L_N))$. Então a região de estabilidade, ilustrada pela figura 2.2, de um esquema de aproximação numérico $S_{\Delta t, N}$ é definida da seguinte maneira.

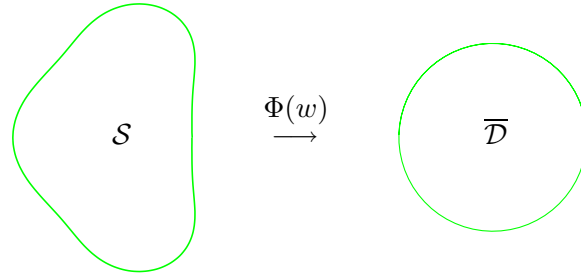


Figura 2.2: Função ϕ aplicando a região de estabilidade \mathcal{S} em $\overline{\mathcal{D}}$.

Definição 2.2 A região de estabilidade de um esquema de aproximação numérico $S_{\Delta t, N}$ é o conjunto \mathcal{S} no plano complexo, $\mathcal{S} = \{z \in \mathbb{C} \text{ tal que } \phi(z) \in \overline{\mathcal{D}}\}$, sendo $\overline{\mathcal{D}}$ o círculo unitário fechado [27].

¹O teorema da aplicação espectral para matrizes é a afirmação que se f é uma função analítica definida em um conjunto contendo $\wedge(A)$ então $f(\wedge(A)) = \wedge(f(A))$. Este resultado é uma consequência da observação que se λ é um autovalor da matriz A então $f(\lambda)$ é um autovalor de $f(A)$ [32]. Em [20] encontra-se a versão do teorema da aplicação espectral para polinômios.

2.2 Estabilidade e Convergência

Vamos considerar \mathcal{H} um espaço de Hilbert, com uma norma $\|\cdot\|$, convenientemente definida, e o problema de valor inicial,

$$\begin{cases} u_t = \mathcal{A}u, & 0 \leq t \leq T, \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (2.16)$$

com $\mathcal{A} : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{H}$, um operador diferencial linear que não depende de t e que pode incorporar condições de fronteira, e $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ um subespaço denso em \mathcal{H} . Observe que u também depende das variáveis espaciais. O problema de valor inicial (2.16) é bem posto se para cada $t \geq 0$, existe uma constante C_t que não depende do dado inicial u_0 , tal que $\|u(t)\| \leq C_t \|u_0\|$ para cada dado inicial u_0 . Isto significa que uma única solução existe para cada dado inicial u_0 e a solução $u(t)$ depende continuamente de u_0 [32].

A noção de estabilidade traz para os esquemas de aproximação numéricos a idéia usada na definição de problemas bem postos em equações diferenciais: a continuidade com relação aos dados iniciais do problema. Na definição 2.3, apresentamos os conceitos de consistência e convergência. Na definição 2.4 são apresentados os conceitos de estabilidade segundo autovalores e estabilidade segundo Lax. A estabilidade e a consistência de um esquema linear são as noções chave para a convergência, já que pelo teorema de Lax:

$$\text{Estabilidade} + \text{Consistência} \iff \text{Convergência}.$$

Definição 2.3 Considere $S_{\Delta t, N}$ um esquema de aproximação numérico (como descrito na seção 2.1.2) para o problema (2.16):

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

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

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 (2.16) no instante de tempo t para algum dado inicial u_0 .

Além das definições acima, várias noções teóricas de estabilidade tais como *estabilidade segundo Lax*, *estabilidade segundo autovalores*, *s-estabilidade*, etc, têm sido investigadas na literatura sobre métodos numéricos para EDP's. Uma discussão sobre várias dessas noções podem ser encontradas em Gottlieb e Orzag [15]. Aqui, vamos discutir duas dessas noções que aparecem vinculadas frequentemente ao uso do método das linhas: estabilidade segundo Lax (ou Lax-estabilidade), e estabilidade segundo autovalores. A próxima definição destaca a diferença entre essas duas noções de estabilidade.

Definição 2.4 Seja $S_{\Delta t, N}$ um esquema de aproximação numérico para o problema (2.16):

$S_{\Delta t, N}$ 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.

Observe que na estabilidade segundo Lax a estabilidade numérica da solução depende de um limite uniforme para uma família de matrizes. No entanto, na estabilidade segundo autovalores obtém-se um limite para a potência de uma única matriz respectiva a uma malha espacial fixa. Courant, Friedrichs e Lewy em 1928, determinaram relações entre Δt e Δx , afim de garantir soluções numéricas estáveis para equações diferenciais através de esquemas de aproximação de diferenças finitas. Essas relações, conhecidas como condição CFL implicam em condições necessárias para a estabilidade das soluções.

Teorema 2.1 *Para um esquema aproximação de diferenças finitas para o problema (2.16) da forma (2.15), com $(\Delta t)/(\Delta x) = \text{constante}$, uma condição necessária para a estabilidade é a condição Courant-Friedrichs-Lewy (CFL),*

$$\left| \lambda_i \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| \leq 1, \quad (2.17)$$

com λ_i representando os autovalores da matriz de aproximação via diferenças finitas na variável espacial.

Detalhes da demonstração são encontrados em [32]. No exemplo, apresentado na seção 1.4.1 mostramos que a condição (2.17) não é suficiente para garantir a estabilidade. Portanto a escolha de Δt é um ponto crucial para garantir a estabilidade de esquemas de aproximação numéricos. A condição CFL (2.17) torna-se inválida para métodos espectrais ou pseudo espectrais, pois o processo de diferenciação é global. Trefethen em [36] generaliza a condição CFL usual para a “pseudo condição CFL”:

$$\Delta t = O(N^{-2}), \quad (2.18)$$

para métodos pseudo espectrais. O autor utiliza o seguinte argumento, para garantir que (2.18) seja necessária para estabilidade segundo Lax: a matriz de diferenciação de Chebyshev D contém elementos de ordem $O(N^2)$ [veja (1.21) na seção 1.2], o que implica que $S_{\Delta t, N}$ contém elementos de ordem $O(\Delta t N^2)$. Se (2.18) não é satisfeita, $\|(S_{\Delta t, N})^k\|$ não pode ser uniformemente limitada em N [36].

Para que a norma das potências das matrizes $S_{\Delta t, N}$ seja limitadas é necessário que exista uma constante $C > 0$ tal que para algum $\tau > 0$

$$[r(S_{\Delta t, N})]^k \leq C \quad \text{para} \quad \begin{cases} 0 \leq \Delta t < \tau \\ 0 \leq k\Delta t < T \end{cases}, \quad (2.19)$$

com $r(S_{\Delta t, N}) := \max\{|\lambda| \text{ tal que } \lambda \in \Lambda(S_{\Delta t, N}), \text{ raio espectral de } S_{\Delta t, N}\}$. Então temos,

$$r(S_{\Delta t, N})^k \leq \|(S_{\Delta t, N})^k\| \leq \|S_{\Delta t, N}\|^k \quad (2.20)$$

Sem perda de generalidade, podemos assumir que $C_1 \geq 1$ em (2.19). Portanto,

$$r(S_{\Delta t, N}) \leq C^{\frac{1}{k}}, \quad 0 \leq k \leq \frac{T}{\Delta t} \implies r(S_{\Delta t, N}) \leq C^{\frac{\Delta t}{T}}.$$

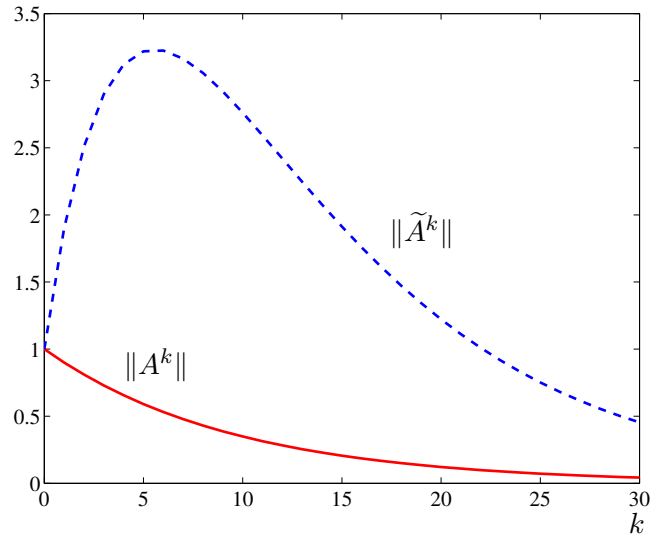


Figura 2.3: $\|A^k\|$ e $\|\tilde{A}^k\|$, linhas contínua e tracejada, respectivamente .

Para Δt no intervalo $0 < \Delta t < \tau$, a expressão $C^{(\Delta t/T)}$ é limitada por uma expressão linear da forma $1 + C_2\Delta t$. Da definição de raio espectral temos a condição,

$$|\lambda_i| \leq 1 + O(\Delta t) \quad \text{para} \quad \begin{cases} 0 < \Delta t < \tau \\ i = 1, \dots, p \end{cases} \quad (2.21)$$

com $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ autovalores da matriz $S_{\Delta t, N}$. A equação (2.21) é a condição de Von Neumann, necessária para a estabilidade [24].

Observação 2.1 Se $S_{\Delta t, N}$ é uma matriz normal a igualdade é válida em (2.20) e então a condição de Von Neumann é necessária e suficiente para a estabilidade. Caso contrário, a condição de Von Neumann dá a condição necessária, mas não suficiente para a estabilidade segundo Lax. Assim, a condição de Von Neumann é equivalente a $r(S_{\Delta t, N}) \leq 1$.

Frequentemente, a análise da estabilidade segundo autovalores é feita checando a condição de Von Neumann. Se ela é satisfeita o método é “teoricamente” estável, o que não garante a estabilidade numérica (veja exemplo na seção 1.4.1). Da mesma forma que a condição CFL, a condição de Von Neumann é inaplicável em aproximações que não são invariantes por translação, como os métodos pseudo espectrais, que implicam em matrizes e operadores altamente não normais.

Em geral, matrizes com autovalores sensíveis a pequenas perturbações, tendem a não terem potências limitadas. Por exemplo, considere as matrizes,

$$A = \begin{bmatrix} 0.9 & 0 \\ 0 & 0.8 \end{bmatrix} \quad \tilde{A} = \begin{bmatrix} 0.9 & 1 \\ 0 & 0.8 \end{bmatrix}$$

A figura 2.3 ilustra esse fenômeno. Apesar das matrizes A e \tilde{A} terem o mesmo espectro e conseqüentemente $r(A) = r(\tilde{A}) = 0.9$, ambas as matrizes decrescem em norma, a medida que $k \rightarrow \infty$. Mas o comportamento da $\|\tilde{A}^k\|$ difere muito do comportamento de $\|A^k\|$, visto que cresce até o ponto $k = 6$ e depois decresce.

O operador solução $\{S_{\Delta t, N}\}$ envolve matrizes com dimensão crescente quando $\Delta t \rightarrow 0$ e N aumenta. Portanto o ponto principal na análise de estabilidade é que a estabilidade das aproximações de EDP's que dependem do tempo, depende da limitação uniforme, em norma, de uma família de matrizes. Se as potências são limitadas uniformemente, a aproximação é Lax-estável. O problema de limitar uma família de potência de matrizes nos leva ao teorema da matriz de Kreiss, no qual basicamente, mostra-se que a limitação de sequência de potências de matrizes é equivalente a limitar a norma do resolvente da matriz em certa região do plano complexo.

Teorema 2.2 *Para uma família \mathcal{M} de matrizes A , $N \times N$, as seguintes afirmações são equivalentes:*

A. *Existe uma constante positiva C_a tal que para toda matriz $A \in \mathcal{M}$ e cada $k = 0, 1, \dots$,*

$$\|A^k\| \leq C_a.$$

R. *Existe uma constante positiva C_r tal que para toda matriz $A \in \mathcal{M}$ e todo número complexo z com $|z| > 1$,*

$$\|(zI - A)^{-1}\| \leq \frac{C_r}{|z| - 1}.$$

Na verdade o teorema 2.2 é uma parte do teorema da matriz de Kreiss, o teorema completo, bem como sua demonstração podem ser encontrados em [32]. Uma variação do teorema da matriz de Kreiss é apresentada na seção 2.4, através do teorema 2.8, o qual descreve sob quais condições a estabilidade segundo Lax é garantida [26, 27, 28].

A conclusão mais importante da seção é portanto que para garantirmos Lax-estabilidade a família de matrizes $\{(S_{\Delta t, N})^k\}$ deve ser limitada uniformemente, o que nem sempre ocorre quando escolhemos Δt de modo que $\|S_{\Delta t, N}\| \leq 1$. Ou seja, análises baseadas somente em autovalores nem sempre capturam o comportamento das potências $(S_{\Delta t, N})^k$, especialmente quando a matriz L_N do modelo semi discreto é altamente não normal [27]. Isto motivou o estudo de estabilidade através da noção de pseudo espectro, conforme veremos na próxima seção.

2.3 Espectro e Pseudo Espectro

As definições e resultados apresentados nesta seção se fazem necessárias para a análise da estabilidade de problemas de valor inicial. Para tanto, vamos considerar \mathcal{X} e \mathcal{H} espaços de Banach e Hilbert, respectivamente, com a norma $\|\cdot\|$ convenientemente definida. Denotaremos $C(\mathcal{X})$ o conjunto dos operadores fechados em \mathcal{X} e $B(\mathcal{X})$ o conjunto dos operadores limitados em \mathcal{X} . O próximo teorema é a base da teoria pseudo espectral. As demonstrações omitidas nesta seção podem ser encontradas em Trefethen e Embree [38].

Teorema 2.3 *Suponha $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ e \mathcal{A}^{-1} seu operador inverso. Então para algum $E \in B(\mathcal{X})$ com $\|E\| < 1/\|\mathcal{A}^{-1}\|$, $\mathcal{A} + E$ tem um operador inverso limitado $(\mathcal{A} + E)^{-1}$ satisfazendo,*

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

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

As definições de operador e conjunto resolvente, espectro e pseudo espectro têm origem ao aplicarmos o teorema 2.3 aos operadores $(z\mathcal{I} - \mathcal{A})$, onde z pertence ao conjunto dos números complexos, \mathbb{C} e \mathcal{I} é o operador identidade. Daqui em diante $(z\mathcal{I} - \mathcal{A})$ será denotado simplesmente por $(z - \mathcal{A})$.

Definição 2.5

- i. Dado $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ e $z \in \mathbb{C}$ o resolvente de \mathcal{A} em z é o operador $(z - \mathcal{A})^{-1} \in B(\mathcal{X})$, 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 definido² em \mathcal{X} .

Definição 2.6 O complemento de $\rho(\mathcal{A})$ no plano complexo é o espectro de \mathcal{A} , denotado por $\Lambda(\mathcal{A})$. O espectro de \mathcal{A} , $\Lambda(\mathcal{A})$ é dividido em três conjuntos disjuntos, como segue:

- i. $\Lambda_p(\mathcal{A})$ é o espectro pontual de \mathcal{A} . É o conjunto dos números $z \in \mathbb{C}$ para os quais $(z - \mathcal{A})^{-1}$ não existe. Um $\lambda \in \Lambda_p(\mathcal{A})$ é chamado autovalor de \mathcal{A} .
- ii. $\Lambda_c(\mathcal{A})$ é o espectro contínuo de \mathcal{A} . É o conjunto dos números $z \in \mathbb{C}$ para os quais $(z - \mathcal{A})^{-1}$ existe e é densamente definido em \mathcal{X} , mas $(z - \mathcal{A})^{-1}$ não é limitado.
- iii. $\Lambda_r(\mathcal{A})$ é o espectro residual de \mathcal{A} . É o conjunto dos números $z \in \mathbb{C}$ para os quais $(z - \mathcal{A})^{-1}$ existe, podendo ser limitado ou não, mas $(z - \mathcal{A})^{-1}$ não é densamente definido em \mathcal{X} .

Observação 2.2 Em dimensão finita o espectro consiste do conjunto dos autovalores. Ou seja, o espectro é o espectro pontual.

Por convenção: Se $z \in \Lambda(\mathcal{A})$, $\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| = \infty$. Do teorema 2.3, para algum $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ e $z \in \rho(\mathcal{A})$ temos que

$$\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| \geq \frac{1}{\text{dist}(z, \Lambda(\mathcal{A}))} \tag{2.22}$$

O próximo resultado é uma consequência do teorema 2.3.

Teorema 2.4 Dado $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ a norma do resolvente é uma função de $z \in \mathbb{C}$ em $(0, \infty)$ com as seguintes propriedades:

- i. É contínua, não limitada e toma o valor ∞ exatamente em $\Lambda(\mathcal{A})$.
- ii. Para $z \notin \Lambda(\mathcal{A})$ então (2.22) é válida.
- iii. Se $z \notin \Lambda(\mathcal{A})$ então $z \notin \Lambda(\mathcal{A} + E)$ 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.

Com o auxílio das definições e resultados apresentados acima podemos agora interpretar bem o conceito de pseudo espectro de um operador. Resumidamente, o pseudo espectro de um operador $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ é o conjunto de todos os autovalores do operador $\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A} + E$, com $\|E\| \leq \epsilon$, (veja a figura 2.4). A definição 2.7 caracteriza formalmente o pseudo espectro de operadores.

²Um operador \mathcal{A} é densamente definido em \mathcal{X} se $\overline{D(\mathcal{A})} = \mathcal{X}$, ou seja $D(\mathcal{A})$ é um subespaço denso em \mathcal{X} , onde $D(\mathcal{A})$ é o domínio de definição do operador \mathcal{A} .

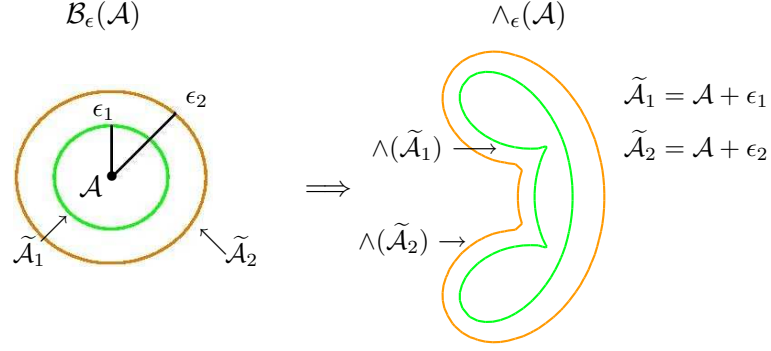


Figura 2.4: Operador \mathcal{A} com perturbação ϵ_1 e ϵ_2 , e seus respectivos pseudo espectros.

Definição 2.7 *Seja $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ e $\epsilon > 0$ arbitrário. O ϵ -pseudo espectro de \mathcal{A} , $\Lambda_\epsilon(\mathcal{A})$, é o conjunto dos números $z \in \mathbb{C}$, definido equivalentemente por uma das seguintes condições:*

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

Da definição 2.7 obtemos a seguinte propriedade: Dado $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ os ϵ -pseudo espectros do operador \mathcal{A} , $\Lambda_\epsilon(\mathcal{A})_{\epsilon > 0}$ satisfazem

$$\bigcap_{\epsilon > 0} \Lambda_\epsilon(\mathcal{A}) = \Lambda(\mathcal{A}).$$

A definição de pseudo espectro para matrizes é similar a definição 2.7. 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,

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

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

$$\Lambda_\epsilon(A) = \{z \in \mathbb{C} : \sigma_{\min}(zI - A) \leq \epsilon\} \quad (2.23)$$

com σ_{\min} representando o menor valor singular da matriz $zI - A$. Uma forma de determinar o pseudo espectro de uma matriz é através de (2.23). Discretizamos o operador \mathcal{A} espectralmente, avaliando $\sigma_{\min}(zI - \mathcal{A})$ nos pontos da malha z_{ij} e então determinamos a curva de nível da superfície obtida no plano complexo. Também podemos caracterizar $\Lambda_\epsilon(A)$ pelos autovalores das matrizes perturbadas, veja a figura 2.4. Em muitas aplicações encontramos operadores ou matrizes que estão longe de serem normais. Essa característica pode ser informada através do pseudo espectro do operador ou da matriz.

Observação 2.3 *i. Se A é uma matriz ou operador normal, o ϵ -pseudo espectro $\Lambda_\epsilon(A)$ 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, $\Lambda_\epsilon(A)$ pode ser muito grande e ter um contorno muito diferente: quanto maior o pseudo espectro, maior a não normalidade do operador [38].

O próximo exemplo ilustra a observação 2.3 através da figura 2.5. No exemplo 1 apresentamos dois operadores diferenciais: um longe de ser normal e outro quase normal.

Exemplo 1 Pseudo espectros de dois operadores diferenciais ³.

O primeiro operador diferencial altamente não normal é o operador de Shorödinger agindo em $L^2(\mathbb{R})$. O operador \mathcal{L} é definido por,

$$\mathcal{L} = -u_{xx} + c x^2 u, \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.24)$$

Os autovalores e autofunções do operador \mathcal{L} em (2.24) são determinados analiticamente e dados por:

$$\lambda_k = \sqrt{c}(2k+1) \quad u_k = \exp(-\sqrt{c}x^2/2)H_k(c^{1/4}x), \quad \text{para } k = 0, 1, \dots$$

em que H_k é o k -ésimo polinômio de Hermite [20]. A figura 2.5 (esquerda), apresenta o pseudo espectro de \mathcal{L} com $c = i$. O que mostra que \mathcal{L} está longe de ser normal, conforme a observação 2.3, item ii. De fato, a norma do resolvente cresce exponencialmente a medida que ϵ aumenta. Mais detalhes sobre as características do operador de Schrödinger podem ser encontradas em [37, 38]

O segundo operador diferencial associado ao problema de propagação de ondas unidimensional, vem da equação,

$$\begin{cases} u_{tt} - u_{xx} = 0 & x \in [0, \pi], \quad t \leq 0 \\ u(0, t) = 0 \\ u_x(\pi, t) + \delta u_t(\pi, t) = 0, \end{cases}$$

é definido por,

$$\mathcal{A}v = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_x \\ u_t \end{bmatrix}.$$

A figura 2.5 (direita), apresenta o pseudo espectro de \mathcal{A} com $\delta = 0.2$. E conforme a observação 2.3 item i. os autovalores de \mathcal{A} são pouco sensíveis a pequenas perturbações, ilustrando com isso que \mathcal{A} é quase normal. Mais detalhes sobre as características pseudo espectrais do operador \mathcal{A} são apresentadas na seção 3.2. Neste exemplo nosso objetivo é apenas ilustrar o pseudo espectro de um operador quase normal. Os pseudo espectros apresentados na figura 2.5 foram construídos discretizando os operadores diferenciais conforme descrito anteriormente. Detalhes adicionais serão vistos mais adiante.

Uma medida para a sensibilidade de um autovalor λ_i de uma matriz A é dada pelo número de condição de λ_i . O número de condição [3, 9, 28] associado ao autovalor λ_i é definido por,

$$k(\lambda_i) = \frac{y_i^* x_i}{\|y_i\| \|x_i\|}, \quad (2.25)$$

sendo x_i e y_i autovetores associados ao autovalor λ_i de A à direita e à esquerda, respectivamente.

³Todos os gráficos sobre pseudo espectro apresentados nesse trabalho foram construídos usando o pacote EigTool [41].

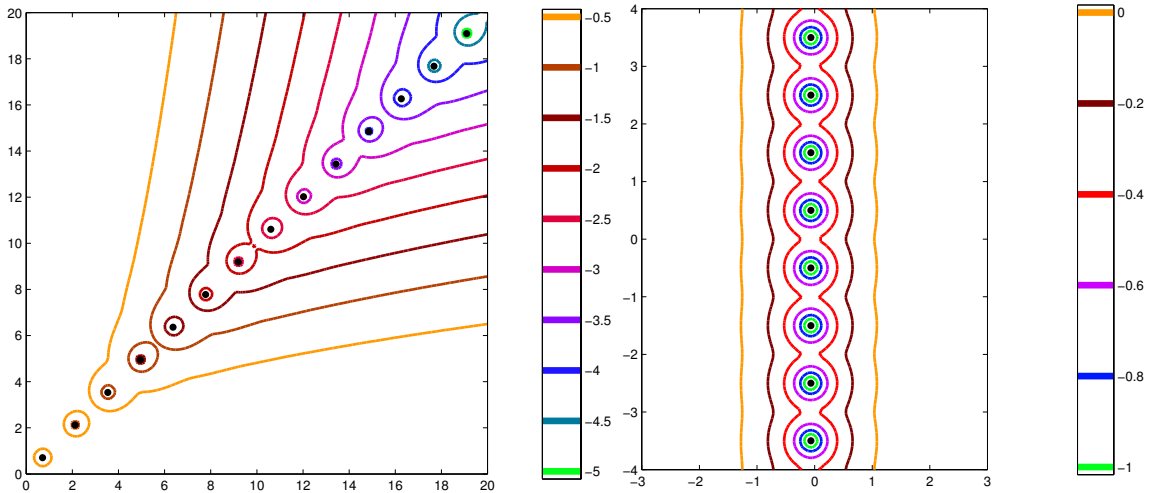


Figura 2.5: Pseudo espectro de um operador não normal (esquerda), com $\epsilon = 10^{-5}, 10^{-5.5}, \dots, 10^{-0.5}$. E de um operador quase normal (direita), com $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-0.8}, \dots, 10^0$. O símbolo \bullet : representa os autovalores dos operadores.

2.3.1 Algumas considerações sobre $\|(z - \mathcal{A})^{-1}\|$ e $\|\exp(t\mathcal{A})\|$.

Uma maneira equivalente de se analisar o problema (2.16): $u_t = \mathcal{A}u$, $u(0) = u_0$, (seção 2.2), é através de sua solução formal: $u = \exp(t\mathcal{A})u_0$, onde $\exp(t\mathcal{A})$ é um operador evolução convenientemente definido. Assim, a evolução do sistema pode ser prevista a partir do comportamento de $\|\exp(t\mathcal{A})\|$ como uma função do tempo. Uma maneira de realizar essa análise é através do espectro do operador. Em particular, se todos os autovalores de \mathcal{A} têm parte real negativa, em geral $\|\exp(t\mathcal{A})\| \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$ [32] (exceto alguns casos em que \mathcal{H} tem dimensão infinita). As dificuldades surgem quando as autofunções do operador \mathcal{A} não são ortogonais, isto é, o operador \mathcal{A} é não normal. Devido a não normalidade do operador \mathcal{A} , a análise espectral tende a perder informações sobre o comportamento com a evolução do sistema em instantes de tempo intermediários [9]. Nestes casos, a análise pseudo espectral é muito significativa, contornando as limitações da análise espectral. Mas em certos casos, estamos interessados no comportamento assintótico do sistema, isto é, quando $t \rightarrow \infty$ e então faz-se necessária a análise espectral.

O objetivo desta seção é apresentar uma relação entre a norma do operador evolução $\|\exp(t\mathcal{A})\|$ e a norma do operador resolvente $\|(z - \mathcal{A})^{-1}\|$, previamente determinada por Trefethen em [9, 38]. Para tanto, vamos especificar o significado de $\exp(t\mathcal{A})$. Se \mathcal{A} é uma matriz ou operador linear limitado, podemos definir $\exp(t\mathcal{A})$ através de uma série de potências convergente,

$$\exp(t\mathcal{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{A})^n}{n!}.$$

Mas, para um operador $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ não limitado, o significado de $\exp(t\mathcal{A})$ vem da teoria de semigrupos ⁴. É conhecido que se \mathcal{A} é um operador fechado, densamente definido em \mathcal{X} que gera um semigrupo de classe C_0 , então existem constantes $w \in \mathcal{R}$ e $M \geq 1$ tais que $\|\exp(t\mathcal{A})\| \leq M \exp(wt)$ para todo $t \geq 0$. Um resultado mais informativo é como segue

⁴Algumas definições encontram-se no apêndice B [25].

Teorema 2.5 *Seja \mathcal{A} um operador linear fechado gerando um C_0 semigrupo, existem $w \in \mathbb{R}$ e $M \geq 1$ tal que*

$$\|\exp(t\mathcal{A})\| \leq M \exp(wt) \quad \forall t \geq 0. \quad (2.26)$$

Além disso, qualquer $z \in \mathbb{C}$ com $\operatorname{Re}(z) > w$, pertence ao conjunto resolvente de \mathcal{A} , $\rho(\mathcal{A})$, valendo

$$(z - \mathcal{A})^{-1} = \int_0^\infty \exp(-zt) \exp(t\mathcal{A}) dt.$$

Mais detalhes sobre o teorema podem ser encontrados em [38, teor.15.1].

Para ilustrar o teorema 2.5, vamos considerar o operador diferencial,

$$\mathcal{D}u = \frac{d}{dx}u \quad (2.27)$$

no espaço $L^2(0, d)$, satisfazendo a condição de fronteira $u(d) = 0$. Então conforme veremos mais adiante (teorema 2.6), o espectro de \mathcal{D} , $\Lambda(\mathcal{D})$, é vazio.

Isto pode ser visto intuitivamente do fato de que, se existissem autofunções associadas ao operador \mathcal{D} , elas seriam $u(x) = \exp(zx)$, para algum $z \in \mathbb{C}$. Mas, como $u(x)$ não satisfaz a condição de fronteira, não existem autofunções. A prova formal dessa afirmação é obtida mostrando-se que o operador resolvente $(z - \mathcal{D})^{-1}$ existe e é um operador limitado para todo $z \in \mathbb{C}$, tal que:

$$(z - \mathcal{D})^{-1}v(x) = \int_x^d \exp(z(x-s))v(s)ds \quad (2.28)$$

De fato, a solução da equação diferencial $zu - u' = v$, através do método da variação de parâmetros, é dada por $u(x) = A(x) \exp(zx)$. Derivando a solução e substituindo na equação diferencial, obtemos que $v(x) = -A'(x) \exp(zx)$. A função $A(x)$ é determinada ao integarmos $A'(x)$,

$$A'(x) = -v(x) \exp(-zx) \implies A(x) = \int_x^d \exp(-zs)v(s)ds$$

já que $A(d) = 0$, da condição de fronteira. Portanto, $(z - \mathcal{D})^{-1}v(x) = u(x)$ implica na equação (2.28), já que $u(x) = A(x) \exp(zx)$.

Já o pseudo espectro de \mathcal{D} é muito significativo. Informações sobre seu comportamento podem ser obtidas através da norma do resolvente dado em (2.28), que cresce como uma função de $\exp(-d\operatorname{Re}(z))$ quando $\operatorname{Re}(z) \rightarrow -\infty$. O próximo teorema reúne essas últimas observações.

Teorema 2.6 *O espectro do operador diferencial \mathcal{D} é o conjunto vazio. A norma do resolvente $\|(z - \mathcal{D})^{-1}\|$ depende de $\operatorname{Re}(z)$, mas não de $\operatorname{Im}(z)$ e satisfaz*

$$\|(z - \mathcal{D})^{-1}\| \leq \frac{1}{\operatorname{Re}(z)} \quad \text{para } \operatorname{Re}(z) > 0, \quad e \quad (2.29)$$

$$\|(z - \mathcal{D})^{-1}\| = \frac{\exp(d|\operatorname{Re}(z)|)}{2|\operatorname{Re}(z)|} + O\left(\frac{1}{|\operatorname{Re}(z)|}\right) \quad \text{para } \operatorname{Re}(z) < 0. \quad (2.30)$$

O pseudo espectro de \mathcal{D} são os semi planos da forma,

$$\Lambda_\epsilon(\mathcal{D}) = \{z \in \mathbb{C} \text{ tal que } \operatorname{Re}(z) < c_\epsilon\}, \quad \text{com } c_\epsilon \approx \begin{cases} \log(\epsilon)/d & \text{quando } \epsilon \rightarrow 0, \\ \epsilon & \text{quando } \epsilon \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.31)$$

Demonstração: Se $u = (z - \mathcal{D})^{-1}v$ dado por (2.28), então u é uma restrição no intervalo $(0, d)$ da convolução $v * g$ ⁵ com v e g funções em $L^2(\mathbb{R})$ e $g(x) = \exp(zx)$ para $x \in [-d, 0]$, 0 caso contrário. Pela transformada de Fourier, temos que

$$\|u\| \leq \|v * g\| = \|\widehat{v * g}\| = \|\widehat{v}\widehat{g}\| \leq \|\widehat{v}\| \sup_{w \in \mathbb{R}} |\widehat{g}(w)|.$$

Da definição de transformada de Fourier segue que,

$$\widehat{g}(w) = \frac{\exp(d(iw - z)) - 1}{iw - z}.$$

E esta última expressão assume seu valor máximo quando $w = \text{Im}(z)$:

$$\sup_{w \in \mathbb{R}} |\widehat{g}(w)| = \frac{\exp(-d\text{Re}(z)) - 1}{|\text{Re}(z)|}.$$

Assim temos que,

$$\|(z - \mathcal{D})^{-1}\| \leq \frac{1 - \exp(-d\text{Re}(z))}{\text{Re}(z)} \quad \text{para } \text{Re}(z) > 0. \quad (2.32)$$

O que mostra (2.29) para $\text{Re}(z) > 0$. Por outro lado, para $\text{Re}(z) < 0$ vamos dividir (2.28) em duas partes:

$$(z - \mathcal{D})^{-1}v(x) = R_1v(x) - R_2v(x) \equiv \int_0^d \exp(z(x-s))v(s)ds - \int_0^x \exp(z(x-s))v(s)ds.$$

Então temos,

$$\|R_1\| - \|R_2\| \leq \|(z - \mathcal{D})^{-1}\| \leq \|R_1\| + \|R_2\|.$$

Com os mesmos argumentos usados para mostrar (2.32), obtemos

$$\|R_2\| \leq -\frac{1}{\text{Re}(z)} \quad \text{para } \text{Re}(z) < 0. \quad (2.33)$$

A norma de R_1 é determinada exatamente, já que $R_1v(x) = \exp(zx) \int_0^d \exp(-zs)v(s)ds$. A dependência de x de $R_1v(x)$ independe da escolha de v . Desta forma escolhendo uma função $v(x)$ que maximiza $|R_1v(0)|/\|v\|$, esta função, também vai maximizar $\|R_1v\|/\|v\|$. Usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz, Uma escolha apropriada é $v(s) = \exp(-\bar{z}s)$, que implica em

$$\|R_1\| = \frac{\|R_1\|}{\|v\|} = \frac{|R_1v(0)|}{|v(d)|} = \frac{\int_0^d \exp(-2s\text{Re}(z))ds}{\exp(-d\text{Re}(z))} = \frac{\exp(-2d\text{Re}(z)) - 1}{-2\text{Re}(z)\exp(-d\text{Re}(z))}. \quad (2.34)$$

Combinando os resultados (2.33) e (2.34), obtemos (2.30). □

Pelo teorema de Hille - Yosida B.2, um operador linear fechado definido densamente que satisfaz $\rho(\mathcal{A}) \subset (0, \infty)$ gera um semigrupo de contrações: $\|\exp(t\mathcal{D})\| \leq 1$ para $t \geq 0$.

O próximo teorema mostra que o pseudo espectro de operadores nilpotentes fornece informações importantes para a análise do operador evolução no tempo. A demonstração do teorema é omitida, já que utiliza resultados que fogem do escopo desse trabalho. Ela pode ser encontrada em [9, 38].

⁵Se f e g são funções contínuas por partes em $[0, t]$ para todo $t > 0$, a convolução $f * g$ é dada por:

$$\int_0^t f(t-s)g(s)ds.$$

Teorema 2.7 *Seja $\mathcal{A} \in C(\mathcal{X})$ gerando um C_0 semigrupo $\exp(t\mathcal{A})$ em um espaço de Hilbert \mathcal{H} . Então $\|\exp(\tau\mathcal{A})\| = 0$ para todo $\tau \geq t_0$ se e somente se o espectro de \mathcal{A} é vazio e*

$$\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| = O(\exp(-\tau \operatorname{Re}(z))), \quad \text{quando } \operatorname{Re}(z) \longrightarrow -\infty.$$

2.4 Estabilidade do método das linhas

Na seção 1.4 apresentamos um exemplo que ilustra as dificuldades envolvidas na análise da estabilidade do método das linhas, quando esse envolve matrizes não normais. A estabilidade do método das linhas relaciona dois elementos dos esquemas de aproximação: uma família de matrizes $\{L_N\}$ associada a aproximação das derivadas das variáveis espaciais e a região de estabilidade do esquema de aproximação do sistema de EDO's semi discreto. No nosso caso as matrizes associadas a aproximação das derivadas espaciais são obtidas através do método pseudo espectral de Chebyshev descrito em 1.3. Enquanto o sistema de EDO's semi discreto é resolvido através do método de Runge-Kutta de quarta ordem, descrito em 2.1.1.

Um critério prático para estabilidade do método das linhas usando autovalores e regiões de estabilidade é como segue [26, 27, 36, 37] :

Critério de Estabilidade para o Método das Linhas Segundo Autovalores

Uma condição suficiente 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 $\Delta t \approx 0$.

Este critério pode ser justificado da seguinte maneira: Se $\wedge(\Delta t L_N) \subset \mathcal{S}$ então $|\phi(\Delta t \lambda)| \leq 1$ para todo $\lambda \in \wedge(\Delta t L_N)$ com ϕ descrita na seção 2.1.2. Por outro lado, $S_{\Delta t, N} = \phi(\Delta t L_N)$ e pelo teorema da aplicação espectral temos que, $\wedge(\phi(\Delta t L_N)) = \phi(\wedge(\Delta t L_N))$. Daí segue que, $|\mu| \leq 1$ para todo $\mu \in \wedge(S_{\Delta t, N})$, a qual é suficiente para garantir a condição de estabilidade: $\|S_{\Delta t, N}^k\| \leq C$ para alguma constante $C > 0$ (veja, seção 2.2, eq. (2.19)-(2.21)), desde que não existam autovalores múltiplos satisfazendo $|\mu| = 1$, [27].

Entretanto, a menos que a matriz L_N seja normal, é conhecido que esta condição não é suficiente para garantir estabilidade numérica no sentido prático, e nem para garantir estabilidade segundo Lax (veja o exemplo descrito na seção 1.4). Reddy e Trefethen em [27] apresentam um resultado que fornece condições necessárias e suficientes para a estabilidade segundo Lax em termos dos ϵ -pseudo espectros de $\Delta t L_N$.

Teorema 2.8 *Seja $S_{\Delta t, N}$ o esquema de aproximação via método das linhas do problema (2.16) e \mathcal{S} a região de estabilidade do esquema de aproximação de passo simples para o sistema de EDO's, satisfazendo:*

- \mathcal{S} é limitada e $\phi'(w) = 0$ para $w \in \partial\mathcal{S}$ (Para as definições de \mathcal{S} e $\phi(w)$ veja seção 2.1.2.)
- Existe um domínio não-vazio $V \subseteq \mathbb{C}$ e uma constante $M < \infty$ tal que $\|(\mu I - \Delta t L_N)^{-1}\| \leq M$ para todo $\mu \in V$ e para todo Δt .

Se $\|(S_{\Delta t, N})^k\| \leq C_1 \quad \forall k \geq 0$ então os ϵ -autovalores $\{\mu_\epsilon\}$ do operador $\{\Delta t L_N\}$ satisfazem

$$\operatorname{dist}(\mu_\epsilon, \mathcal{S}) \leq C_2 \epsilon \quad \forall \epsilon. \quad (2.35)$$

E se (2.35) é válida, então $\|S_{\Delta t, N}^k\| \leq C_3 \min\{N, k\} \quad \forall k > 0$ [36, 38].

A relação entre as constantes C_i dependem do esquema de aproximação, da constante M e do conjunto V . A prova do teorema requer de vários resultados preliminares envolvendo a norma do resolvente do operador $\Delta t L_N$ cujas provas são extensas e por isso são omitidas. Para detalhes, veja [36, 38, 27].

Na prática, a estabilidade segundo Lax é verificada através da seguinte regra,

Estabilidade Numérica do Método das Linhas

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

Para ilustrar a regra acima, vamos considerar o problema,

$$\begin{cases} u_t(x, t) = u_x(x, t), & x \in (-1, 1), \quad t \geq 0 \\ u(x, 0) = \begin{cases} \cos^2(\pi(x - 0.25)), & \text{se } |x - 0.25| \leq 0.5 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \\ u(1, t) = 0. \end{cases} \quad (2.36)$$

O método das linhas é aplicado a EDP (2.36) com o esquema *upwind* para a aproximação na variável espacial x , o qual resulta no sistema de EDO's semi discreto,

$$\frac{d}{dt} u_j(t) = \frac{u_{j+1}(t) - u_j(t)}{\Delta x} \implies \bar{u}_t = L_N \bar{u}, \quad (2.37)$$

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

Para o sistema de EDO's (2.37), utilizamos o método de Euler (veja a seção 2.1.1), para a aproximação no tempo. Obtendo assim o problema completamente discreto,

$$u_j^{k+1} = u_j^k + \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^k - u_j^k), \quad (2.38)$$

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

Na forma matriz - vetor, a equação (2.38) torna-se,

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

Os autovalores de $S_{\Delta t, N}$ satisfazem $|1 - \sigma| < 1$ para $\sigma < 2$. Mas a norma das potências de $S_{\Delta t, N}$, crescem exponencialmente para σ satisfazendo $1 < \sigma < 2$. O que resulta em instabilidades para as soluções aproximadas.

A figura 2.6 ilustra a aplicação do teorema 2.8 para o problema (2.36) com $\sigma = 0.6$ e $\sigma = 1.2$. Estabilidade segundo autovalores é garantida para os dois valores de σ , já que σ é autovalor de $\Delta t L_N$ e está na região de estabilidade do método **RK1**. Já o pseudo espectro da matriz $\Delta t L_N$,

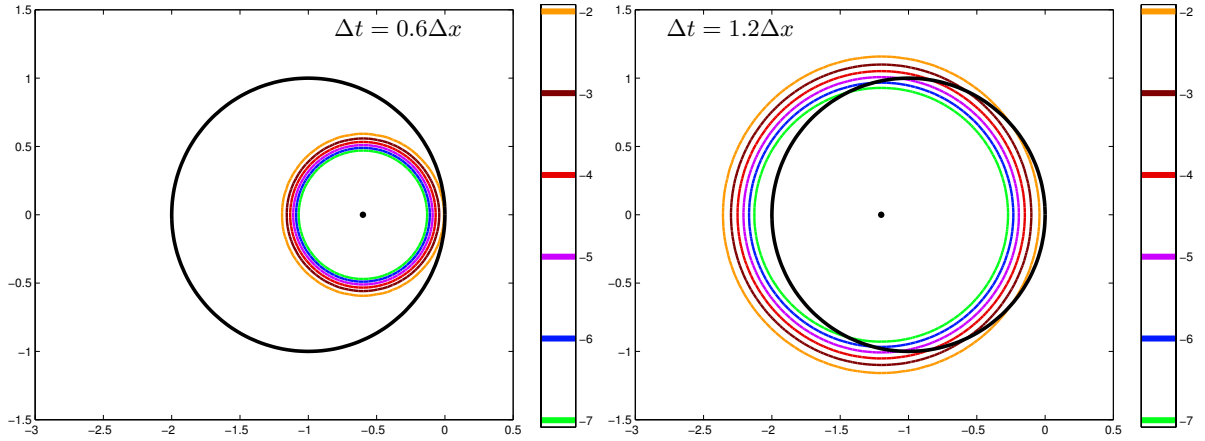


Figura 2.6: Espectro (●) e Pseudo Espectro da matriz $\Delta t L_N$, para $\epsilon = 10^{-2}, 10^{-3}, \dots, 10^{-7}$ e Região de Estabilidade do Método RK1 (círculo com centro no ponto $(-1, 0)$).

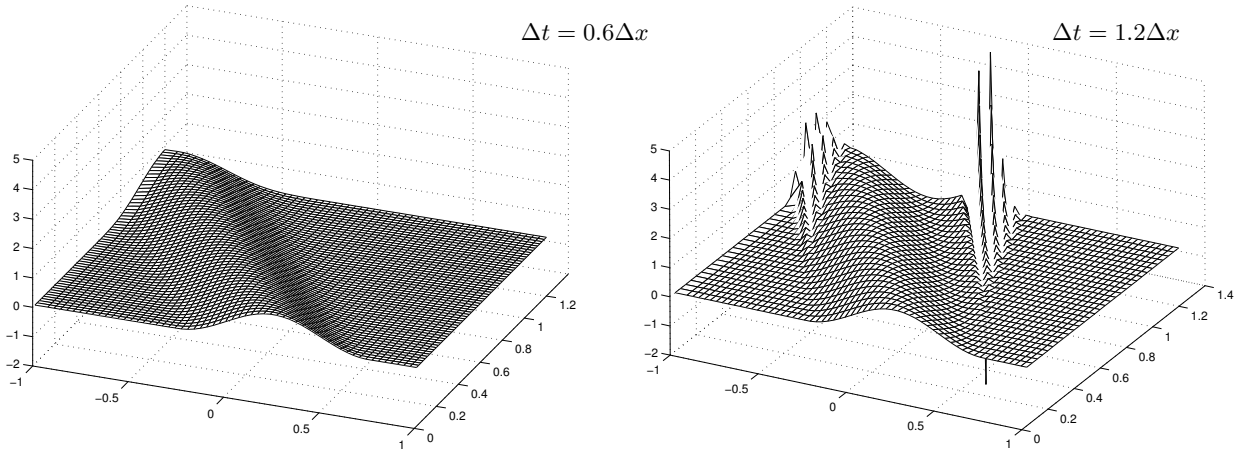


Figura 2.7: Soluções Numéricas do problema (2.36) com $\Delta t = 0.6\Delta x$ e $\Delta t = 1.2\Delta x$.

se estende para fora da região de estabilidade do método **RK1**, no caso em que $\sigma = 1.2$. Dessa forma as soluções aproximadas apresentam instabilidades, veja a figura 2.7 (direita).

No capítulo 4 serão discutidas as características de estabilidade dos método pseudo espectralis para problemas de propagação de ondas. Nessa análise serão utilizados os dois critérios que garantem a estabilidade segundo autovalores e a estabilidade segundo Lax.

Capítulo 3

Propagação de Ondas

A simulação numérica de propagação de ondas em domínios extensos ou provavelmente ilimitados é abordada na prática restringindo o domínio para uma região delimitada por fronteiras artificiais. Embora conveniente do ponto de vista computacional, a abordagem requer técnicas que eliminem reflexões indesejadas nas fronteiras artificiais, e um aspecto crucial do processo é a escolha de condições de fronteira que atenuem essas reflexões. Condições desse tipo são chamadas *condições de fronteira absorventes* [7, 9, 10, 13, 17, 39]. As condições de fronteira que evitam completamente as reflexões, são ditas *transparentes* [17, 19].

Neste capítulo apresentamos brevemente alguns resultados obtidos por Driscoll e Trefethen [9] e Jackiewicz e Renault [19], que motivaram a realização desse trabalho. Esses autores investigaram a estabilidade de um método pseudo espectral de Chebyshev para a propagação de ondas unidimensionais e bidimensionais obtido a partir de um modelo descrito por um sistema hiperbólico de EDO's de primeira ordem. Motivados pelo trabalho de Veselić [40], Driscoll e Trefethen [9] colocam o problema na forma de um sistema autônomo envolvendo um operador não normal, mostrando que a análise espectral é insuficiente para o estudo de estabilidade do modelo. Nesse estudo, o problema é modelado usando a equação da onda linear unidimensional com uma condição Dirichlet nula em uma fronteira e uma condição absorvente (linear decrescente ¹) na outra.

Já Jackiewicz e Renault estudam o problema de propagação da onda com condições de fronteira transparentes em ambas as fronteiras, focando a estabilidade numérica de alguns métodos baseados no método das linhas *em conjunção* com o método pseudo espectral de Chebyshev. O método pseudo espectral, primeiro aproxima o operador diferencial, produzindo um sistema de EDO's da forma $\bar{v}_t = A_N \bar{v}$ (modelo semidiscreto), em que A_N é uma matriz associada a aproximação das derivadas nas variáveis espaciais através da matriz de diferenciação de Chebyshev [37], veja seção 1.2. Em seguida, o método constrói soluções numéricas resolvendo o sistema de EDO's através do método de Runge-Kutta de quarta ordem.

A partir dos trabalhos [9, 19], continuamos a investigação sobre a estabilidade numérica dos métodos propostos nesses trabalhos para problemas de propagação de ondas unidimensionais, restritas ao intervalo $[0, 1]$, e bidimensionais restritas ao domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, com condições de fronteira transparentes e absorventes. Para tanto, usamos uma reformulação da equação da onda na forma $v_t = \mathcal{A} v$, [9, 19, 27, 40], em que \mathcal{A} é um operador diferencial que não depende de t e é definido em um espaço de Hilbert apropriado. A partir dessa reformulação duas contribuições são apresentadas. Na primeira, os resultados de Driscoll e Trefethen [9] sobre o autosistema do operador \mathcal{A} envolvendo uma condição de fronteira Dirichlet nula e outra

¹no sentido de que a fronteira “absorve” energia do sistema.

absorvente são generalizados para o caso em que ambas as condições de fronteira são absorventes. Já na segunda, mostramos que algumas conclusões de Jackiewicz e Renault [19] sobre o espectro de algumas matrizes envolvidas nos modelos semidiscretos e assuntos correlatos são incorretas.

Adicionalmente, enfatizamos que a estabilidade do sistema semi discreto depende fortemente da não normalidade do operador \mathcal{A} e que análises baseadas somente no espectro de \mathcal{A} podem levar a conclusões errôneas sobre a estabilidade das soluções numéricas, tornando-se com isso necessário o uso dos ϵ -pseudo espectros na análise de estabilidade numérica do método das linhas [26, 27].

3.1 Modelo contínuo unidimensional

Nesta seção, apresentamos algumas características físicas do problema e uma reformulação do problema na forma de um sistema autônomo (método das linhas, seção 1.4) que usaremos ao longo do trabalho. Vamos considerar a equação da onda, com velocidade constante c :

$$\begin{aligned} u_{tt} - c^2 u_{xx} &= 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \\ u(x, 0) &= f(x), \quad u_t(x, 0) = 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

com $u(x, 0)$ e $u_t(x, 0)$ condições iniciais do problema, com $f(x) \in C^2(\mathbb{R})$. A solução de (3.1) é dada pela fórmula de D'Alembert:

$$u(x, t) = \frac{1}{2} (f(x + ct) + f(x - ct)). \quad (3.2)$$

Verifica-se que enquanto o primeiro termo $(x, t) \rightarrow \frac{1}{2}f(x + ct)$, se propaga para a esquerda e satisfaz,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{1}{2} f(x + ct) = 0, \quad (3.3)$$

o segundo termo $(x, t) \rightarrow \frac{1}{2}f(x - ct)$, se propaga para a direita satisfazendo,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{1}{2} f(x - ct) = 0. \quad (3.4)$$

O comportamento da solução segundo (3.3) e (3.4) sugere que a solução numérica de (3.1) restrita ao intervalo $[a, b]$ pode ser encontrada adicionando-se a (3.1) as condições de fronteira:

$$\begin{aligned} u_t(a, t) - cu_x(a, t) &= 0, \\ u_t(b, t) + cu_x(b, t) &= 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Observe que se a condição inicial $f(x)$ é de suporte compacto em $[a, b]$ ², então as condições (3.5) são satisfeitas automaticamente. Veremos mais adiante que as condições de fronteira (3.5) evitam reflexões da solução para o interior do domínio.

3.1.1 Condições de fronteira e coeficientes de reflexão

Conforme comentado anteriormente, um aspecto crucial no processo de simulação numérica de propagação de ondas é a escolha de condições de fronteira que atenuem reflexões indesejadas da

² $f(x) \in C([a, b])$ tem suporte compacto se: [i.] $\text{supp} f = \overline{\{x \in [a, b] \mid f(x) \neq 0\}}$, e [ii.] $\text{supp} f \subset (a, b)$.

solução numérica. O aspecto é crucial porque reflexões das fronteiras para o interior do domínio numérico podem distorcer a solução do problema e até mesmo resultar em instabilidades. O objetivo desta seção é apresentar conceitos que esclarecem o fenômeno de reflexão para o caso unidimensional. Para tanto, primeiro vamos considerar soluções da equação da onda

$$u_{tt} = c^2 u_{xx}, \quad (3.6)$$

da forma

$$u(x, t) = \exp(i(\omega t + \xi x)) \quad (3.7)$$

com $\omega, \xi \in \mathbb{R}$ satisfazendo a relação de dispersão

$$\omega^2 = c^2 \xi^2 \iff \xi = \pm \frac{\omega}{c}, \quad (3.8)$$

que é obtida quando substituímos a solução (3.7) em (3.6). Para as ondas que viajam para a esquerda, temos $\xi = (\omega/c)$ e para ondas que viajam para a direita $\xi = -(\omega/c)$. Suponhamos que o domínio seja limitado no intervalo $[0, 1]$, no qual vamos considerar os operadores \mathcal{L}_j associados ao problema (3.1) como condições de fronteira em $x = 0$ descritos como segue

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1 : \quad & u(0, t) = 0, \\ \mathcal{L}_2 : \quad & u_x(0, t) = 0, \\ \mathcal{L}_3 : \quad & c u_x(0, t) - \delta u_t(0, t) = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Sejam

$$u_I(x, t) = \exp(i(\omega t + \xi x)), \quad \text{e} \quad u_R(x, t) = R \exp(i(\omega t - \xi x)), \quad (3.10)$$

a onda incidente e a onda refletida na fronteira artificial $x = 0$, respectivamente, onde R é o coeficiente de reflexão da onda. O objetivo é determinar os coeficientes de reflexão referente a cada uma das condições de fronteira dadas em (3.9). Observe que u_I e u_R dadas em (3.10) são soluções para a equação (3.6), satisfazendo a relação de dispersão (3.8). Como o problema é linear $u_I + u_R$ também é uma solução, então na fronteira [7, 10, 17] temos:

$$\mathcal{L}_j(u_I + u_R) = 0. \quad (3.11)$$

Assim, para as condições de fronteira Dirichlet, Neumann e absorventes na fronteira $x = 0$, respectivamente, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1(u_I + u_R) = 0 & \implies \exp(i\omega t) + R_1 \exp(i\omega t) = 0 & \implies R_1 = -1, \\ \mathcal{L}_2(u_I + u_R) = 0 & \implies \xi \exp(i\omega t) - \xi R_2 \exp(i\omega t) = 0 & \implies R_2 = 1, \\ \mathcal{L}_3(u_I + u_R) = 0 & \implies c\xi(1 - R_3) \exp(i\omega t) - \delta\omega(1 + R_3) \exp(i\omega t) = 0 & \implies R_3 = \frac{1-\delta}{1+\delta}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Da primeira equação de (3.12) segue que a condição de fronteira Dirichlet é totalmente reflexiva, sendo que a onda refletida é invertida. Um exemplo deste fenômeno é ilustrado na figura 3.1. Observe que no caso de propagação “ideal” a onda atravessa a fronteira artificial viajando em ambas as direções, enquanto que no caso de considerarmos condições de fronteira do tipo Dirichlet nula, o fenômeno de reflexão tende a aparecer após certo tempo.

Da segunda equação de (3.12) segue que na condição de fronteira de Neumann, a onda é perfeitamente refletida. A terceira equação em (3.12) define uma família de condições de fronteira absorventes [17]. Se $\delta = 1$ o coeficiente de reflexão torna-se nulo, indicando com isso que as condições de fronteira (3.5) são *completamente transparentes*, isto é, permitem que as ondas atravessem as fronteiras artificiais *eliminando completamente* o fenômeno de reflexão. A tabela 3.1 apresenta as diferentes condições de fronteira (em $x = 0$) usadas frequentemente em conexão com a equação da onda e seus respectivos coeficientes de reflexão.

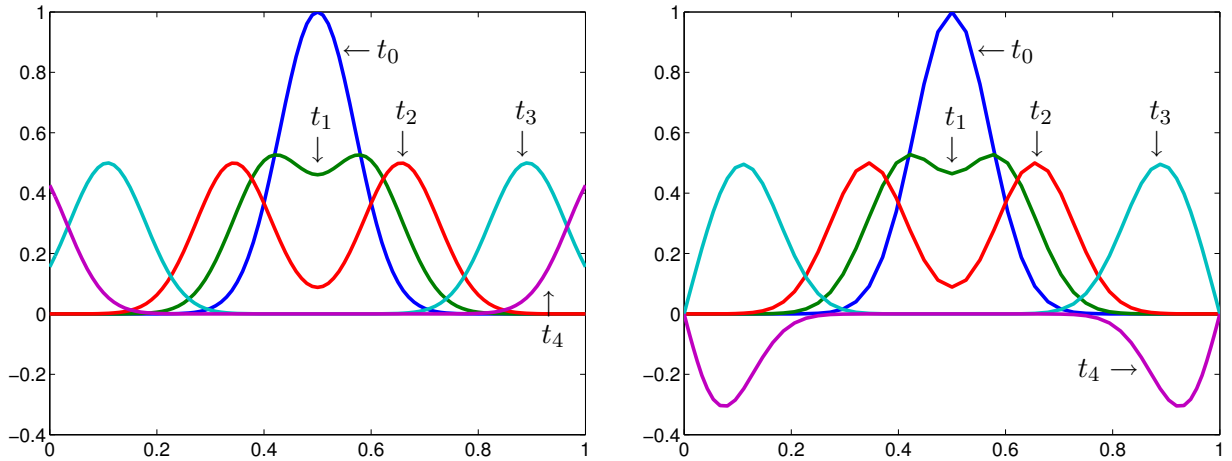


Figura 3.1: Propagação da onda unidimensional segundo (3.2) (esquerda) e propagação da onda numérica usando condições de fronteira Dirichlet nulas (direita).

Condições de fronteira		Coefficiente de reflexão
Dirichlet	$u = 0$	$R = -1$
Neumann	$u_x = 0$	$R = 1$
Absorventes	$\delta u_t - c u_x = 0$	$R = \frac{1-\delta}{1+\delta}$
Transparentes	$u_t - c u_x = 0$	$R = 0$

Tabela 3.1: Condições de fronteira e coeficientes de reflexão, para problemas de propagação de ondas unidimensionais, na fronteira $x = 0$.

3.2 Equação da onda com uma condição de fronteira absorvente

Esta seção é dedicada ao estudo de um modelo analisado por Trefethen e Driscoll em [9]. O modelo considera uma equação da onda linear unidimensional (3.1) no domínio $[0, \pi]$, com uma condição de fronteira Dirichlet nula em $x = 0$ e uma condição de fronteira absorvente em $x = \pi$:

$$\begin{cases} u_{tt} - u_{xx} = 0, & t \geq 0, \quad x \in [0, \pi] \\ u(0, t) = 0 \\ u_x(\pi, t) + \delta u_t(\pi, t) = 0, & \text{com } \delta \in (0, 1]. \end{cases} \quad (3.13)$$

O estudo começa com uma reformulação do problema (3.13). Utilizando as variáveis auxiliares $v_1 = u_x$ e $v_2 = u_t$ obtemos

$$\frac{\partial v_1}{\partial t} = \frac{\partial v_2}{\partial x} \quad \text{e} \quad \frac{\partial v_2}{\partial t} = \frac{\partial v_1}{\partial x},$$

o que nos leva ao sistema da forma

$$\begin{cases} v_t = \mathcal{A} v, & 0 \leq t \leq T \\ v(0) = v_0 \end{cases}, \quad \text{com } v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}, \quad \text{e } \mathcal{A} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.14)$$

sendo \mathcal{A} um operador diferencial linear definido em $\mathcal{A} : \mathcal{D} \mapsto \mathcal{H}$, com $\mathcal{H} = L^2[0, \pi] \times L^2[0, \pi]$ e \mathcal{D} é um subespaço denso em \mathcal{H} formado por funções absolutamente contínuas $v = [v_1, v_2]^T$,

satisfazendo as condições,

$$\begin{aligned} v_2(0, t) &= 0, \\ v_1(\pi, t) + \delta v_2(\pi, t) &= 0, \quad \text{com } \delta > 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Conforme descrito na seção 2.3.1, a análise de estabilidade da solução de (3.14) pode ser feita através do operador $\exp(t\mathcal{A})$, tendo presente que podem ocorrer dificuldades quando \mathcal{A} é não normal. Para tal, uma análise espectral é necessária, tanto para $\delta \in (0, 1)$ constante arbitrária, como para $\delta \rightarrow 1$, e sobretudo, sem ignorar que o comportamento assintótico da solução nem sempre informa sobre a estabilidade numérica da mesma, conforme ocorre com alguns operadores que têm todos os autovalores no semiplano complexo negativo. Driscoll e Trefethen em [9], citam um exemplo na área de estabilidade hidrodinâmica que é assintoticamente estável de acordo com a análise linear, mas que na prática apresenta instabilidades.

Pelas considerações colocadas acima, faz-se necessária uma análise espectral e pseudo espectral do operador \mathcal{A} . A análise espectral do operador começa com a seguinte proposição a qual descreve o auto sistema de \mathcal{A} . Uma outra forma de determinar o autosistema do operador \mathcal{A} é descrita por Veselić em [40].

Proposição 3.1 *Se $0 < \delta < 1$, o autosistema do operador \mathcal{A} , $\{\lambda_n, v_n\}$ é descrito por:*

$$\lambda_n = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{1 - \delta}{1 + \delta} \right) + \left(n + \frac{1}{2} \right) i \quad \forall n \in \mathcal{Z}, \quad (3.16)$$

e $v_n = [v_{1_n} \ v_{2_n}]^T$ com

$$\begin{cases} v_{1_n}(x) = \cosh(\lambda_n x) \\ v_{2_n}(x) = \sinh(\lambda_n x) \end{cases}. \quad (3.17)$$

Demonstração: Seja λ um autovalor de \mathcal{A} e $v = [v_1 \ v_2]^T$ a autofunção correspondente. Da equação $\mathcal{A}v = \lambda v$ vemos que as autofunções devem satisfazer

$$\frac{\partial^2 v_2}{\partial x^2} = \lambda \frac{\partial v_1}{\partial x} = \lambda^2 v_2, \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} = \lambda \frac{\partial v_2}{\partial x} = \lambda^2 v_1 \quad (3.18)$$

Dessas equações segue que

$$v_1 = A_1 \sinh(\lambda x) + B_1 \cosh(\lambda x), \quad \text{e} \quad v_2 = A_2 \sinh(\lambda x) + B_2 \cosh(\lambda x).$$

Da primeira condição de fronteira: $v_2(0, t) = v_2(0) = 0$, segue que $B_2 = 0$ e que A_2 é qualquer constante não nula. Tomando $A_2 = 1$ e considerando que de (3.18) temos que

$$\frac{\partial v_2}{\partial x} = \lambda \cosh(\lambda x) = \lambda v_1(x) \implies v_1(x) = \cosh(\lambda x).$$

Portanto, as autofunções de \mathcal{A} , $v = [v_1 \ v_2]^T$, têm componentes da forma

$$v_1(x) = \cosh(\lambda x), \quad v_2(x) = \sinh(\lambda x),$$

com λ a ser determinado.

Agora vamos determinar os autovalores do operador \mathcal{A} . Impondo a segunda condição de fronteira, temos que

$$(1 + \delta) \exp(\lambda\pi) + (1 - \delta) \exp(-\lambda\pi) = 0 \quad (3.19)$$

De (3.19) obtemos,

$$\exp(2\lambda\pi) = -\frac{1-\delta}{1+\delta} = \exp(i\theta)\frac{1-\delta}{1+\delta}$$

com $\exp(i\theta) = \cos\theta + i\sin\theta = -1$. O que implica que $\theta = (2n+1)\pi$, $\forall n \in \mathbb{Z}$, e daí obtemos (3.16). □

Driscoll e Trefethen organizam essas informações através do seguinte teorema, cuja demonstração pode ser encontrada em [9].

Teorema 3.1 *Para $0 < \delta \leq 1$, a imagem numérica³ de \mathcal{A} é o semi plano fechado esquerdo, e para $\delta = 0$, ela é o eixo imaginário. Consequentemente,*

$$\|(\lambda I - \mathcal{A})^{-1}\| \leq \frac{1}{\operatorname{Re}(\lambda)}, \quad \operatorname{Re}(\lambda) > 0 \quad (3.20)$$

Para $0 < \delta < 1$, o espectro de \mathcal{A} é dado por (3.16). A norma do resolvente é invariante sob translações pelo eixo $i\mathbb{Z}$ e satisfaz,

$$\begin{aligned} \|(\lambda I - \mathcal{A})^{-1}\| &\geq |1 - (1/2R_\pi)| \cdot |\operatorname{Re}(\lambda)|^{-1} + O(\exp(2\pi\operatorname{Re}(\lambda))), \quad \operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty \\ \|(\lambda I - \mathcal{A})^{-1}\| &\leq (1 - (1/2R_\pi)) \cdot |\operatorname{Re}(\lambda)|^{-1} + O(\exp(2\pi\operatorname{Re}(\lambda))), \quad \operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty, \end{aligned} \quad (3.21)$$

com $R_\pi = (1-\delta)/(1+\delta)$, determinando o coeficiente de reflexão da condição na fronteira $x = \pi$. Para $\delta = 1$ o espectro de \mathcal{A} é vazio. A norma do resolvente é invariante sob todas as translações imaginárias e satisfaz,

$$\|(\lambda I - \mathcal{A})^{-1}\| = \frac{\exp(2\pi|\operatorname{Re}(\lambda)|)}{2|\operatorname{Re}(\lambda)|} + O\left(\frac{1}{|\operatorname{Re}(\lambda)|}\right), \quad \text{com } \operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty. \quad (3.22)$$

Observe que, como $\delta \in (0, 1)$, todos os autovalores de \mathcal{A} têm parte real negativa. Além disso, pode-se provar que o espectro do operador \mathcal{A} é formado apenas pelo conjunto dos seus autovalores, o fato segue da segunda equação de (3.21), que mostra que o operador $(\lambda I - \mathcal{A})$ é limitado (veja a definição 2.5, seção 2.3). E que o espectro do operador é vazio quando $\delta = 1$ [9].

A análise pseudo espectral do operador \mathcal{A} foi feita numericamente: os pseudo espectros foram determinados através de um modelo semi discreto com dimensão suficientemente grande, que será apresentado na seção 3.3.2. As seguintes conclusões podem ser feitas.

- Para δ distante de 1, as desigualdades (3.21) confirmam um grau de não normalidade moderado, conforme já ilustrado na seção 2.3, veja figura 3.2 (esquerda).
- Se $\delta \approx 1$, a primeira desigualdade em (3.21) indica que a fronteira esquerda de cada ϵ -pseudo espectro cresce a medida que ϵ aumenta (veja figura 3.2 à direita). Entretanto cada pseudo espectro continua sendo limitado à esquerda e à direita.
- Já para $\delta = 1$, a estimativa (3.22) no semi plano esquerdo mostra que os ϵ -pseudo espectros não são limitados à esquerda, quando $\operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty$, fato ilustrado pela figura 3.3. Além disso, o operador \mathcal{A} é nilpotente, no sentido que $\exp(t\mathcal{A}) = 0$ para $t \geq 2\pi$, (veja seção 2.3.1). O teorema 2.7 relaciona a nilpotência do operador evolução $\exp(t\mathcal{A})$ com a norma do resolvente $\|(\lambda - \mathcal{A})^{-1}\|$, que cresce como uma função de $\exp((-2\pi\operatorname{Re}(z)))$.

Encerramos a seção enfatizando que o operador \mathcal{A} é altamente não normal quando $\delta = 1$, fato que pode acarretar em dificuldades no que diz respeito a estabilidade de esquemas semi discretos para resolver o problema de evolução associado.

³A *imagem numérica (numerical range)* de \mathcal{A} é definida por, $W(\mathcal{A}) := \{\langle \mathcal{A}u, u \rangle : \|u\| = 1\}$.

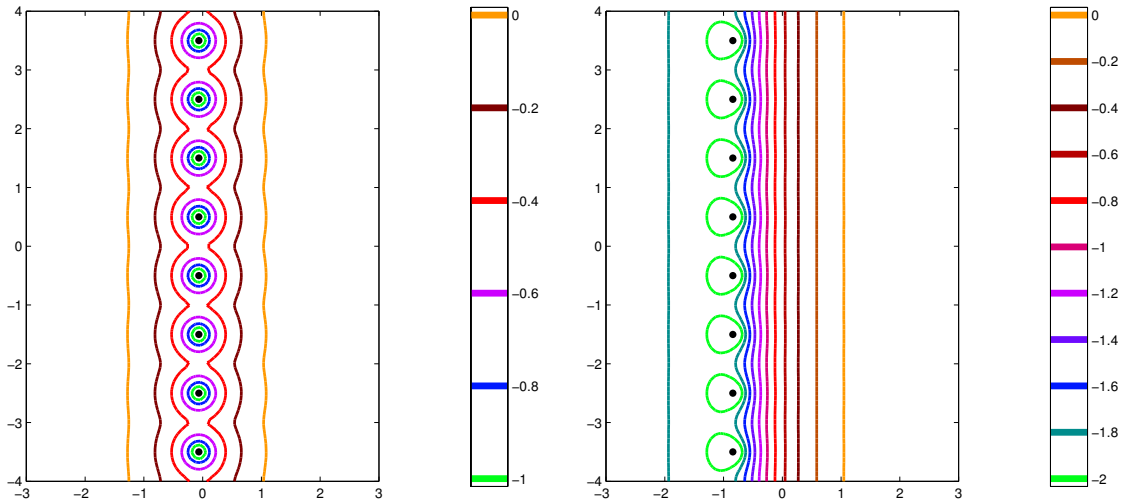


Figura 3.2: Espectro e pseudo espectro do operador \mathcal{A} para $\delta = 0.2$ e $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-0.8}, \dots, 10^0$ (esquerda) e para $\delta = 0.99$ e $\epsilon = 10^{-2}, 10^{-1.8}, \dots, 10^0$ (direita). Os autovalores de \mathcal{A} são marcados pelos pontos.

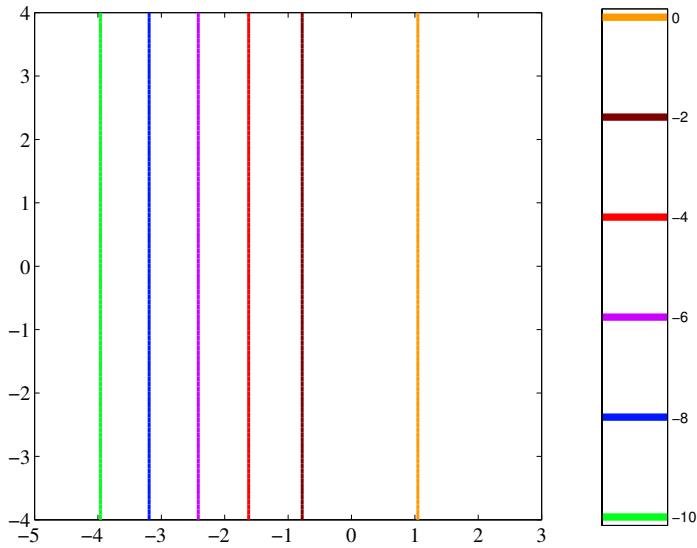


Figura 3.3: Λ_ϵ do operador \mathcal{A} com $\delta = 1$, com $\epsilon = 10^{-10}, 10^{-8}, \dots, 10^0$.

3.3 Sistemas semi discretos associados ao modelo de Driscoll e Trefethen

Nesta seção apresentamos uma análise comparativa de dois modelos semi discretos associados ao modelo (3.13) de Driscoll e Trefethen [9], obtidos aproximando a segunda derivada em relação a variável espacial x através do método de diferenças finitas e através do método pseudo espectral de Chebyshev.

3.3.1 Sistema semi discreto baseado em diferenças finitas

Para o problema (3.13), vamos considerar uma partição do intervalo $[0, \pi]$ com N subintervalos, igualmente espaçados onde $h = \pi/N$,

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = \pi$$

com $x_i = x_0 + ih$ e $i = 0, 1, \dots, N$.

Aproximando u_{xx} via diferenças finitas centradas, obtemos

$$u_{xx}(x_i, t) \approx \frac{u(x_{i-1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i+1}, t))}{h^2} \quad \forall i = 1, \dots, N-1,$$

já que a condição de fronteira $u(x_0, t) = 0 \implies u_{xx}(x_0, t)$. Ou seja,

$$\begin{cases} u_{tt}(x_1, t) \approx -\frac{1}{h^2}(-u(x_0, t) + 2u(x_1, t) - u(x_2, t)) \\ u_{tt}(x_2, t) \approx -\frac{1}{h^2}(-u(x_1, t) + 2u(x_2, t) - u(x_3, t)) \\ \vdots \\ u_{tt}(x_{N-1}, t) \approx -\frac{1}{h^2}(-u(x_{N-2}, t) + 2u(x_{N-1}, t) - u(x_N, t)). \end{cases} \quad (3.23)$$

Usando série de Taylor para aproximar $u_{xx}(x_N, t)$ obtemos,

$$u_{xx}(x_N, t) \approx \frac{2}{h^2}(u(x_{N-1}, t) - u(x_N, t)) + \frac{2}{h}u_x(x_N, t).$$

Portanto, se usamos as condição de fronteira (3.13) em $x_N = \pi$, obtemos

$$u_{tt}(x_N, t) \approx -\frac{1}{h^2}(-2u(x_{N-1}, t) + 2u(x_N, t)) - \frac{2\delta}{h}u_t(x_N, t). \quad (3.24)$$

Se eliminamos o erro de aproximação em (3.23) e (3.24), obtemos o sistema $N \times N$ de EDO's da forma:

$$\bar{v}_{tt} + \frac{\delta}{h}C \bar{v}_t + \frac{1}{h^2}K \bar{v} = 0 \quad (3.25)$$

com, C e K sendo matrizes $N \times N$ definidas por

$$C = \text{diag}(0, \dots, 0, 2), \quad K = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & 2 & -2 \end{bmatrix},$$

e

$$\bar{v} \doteq [v_1(t) \ v_2(t) \ \dots \ v_N(t)]^T,$$

com $v_i(t)$ sendo a aproximação para $u(x_i, t)$, para $1 \leq i \leq N$. O sistema (3.25) pode ser reescrito na forma,

$$U_t = L_N U \quad (3.26)$$

com

$$U = \begin{bmatrix} \bar{v} \\ \bar{v}_t \end{bmatrix}, \quad L_N = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -\frac{1}{h^2}K & -\frac{\delta}{h}C \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

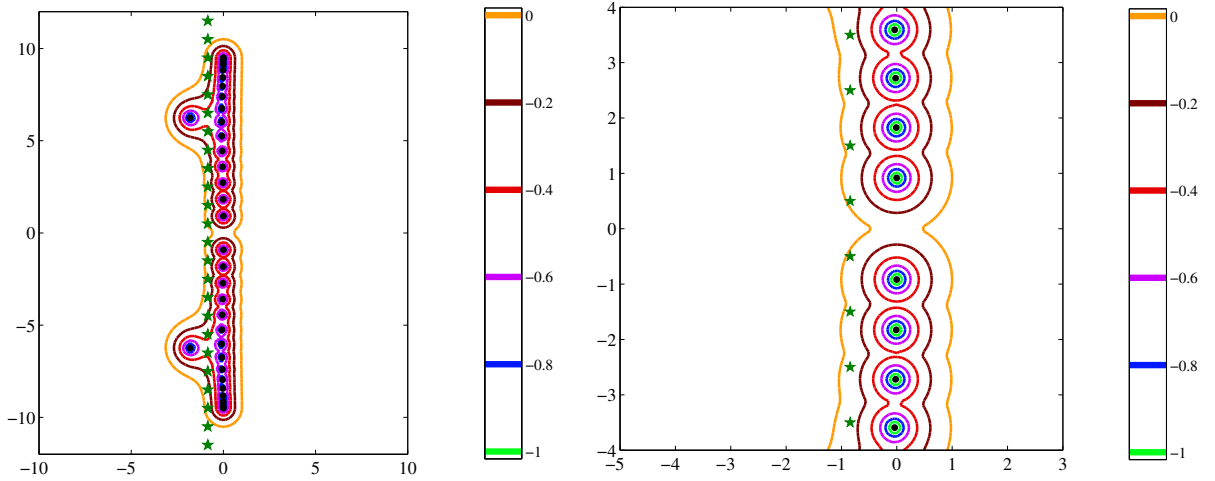


Figura 3.4: Espectro e pseudo espectro da matriz \widehat{L}_N (diferenças finitas), com $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-0.8}, \dots, 10^0$, $N + 1 = 16$ e $\delta = 0.99$ (esquerda). Zoom da aproximação, à direita. Os símbolos \bullet representam os autovalores de L_N e os símbolos $*$, os autovalores de \mathcal{A} .

Como o sistema semidiscreto (3.26) envolve a matriz L_N que não é simétrica (por causa da não simetria da matriz K), um modelo alternativo com melhores propriedades pode ser obtido facilmente. De fato, introduzindo a transformação

$$\widetilde{K} = DKD^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -\sqrt{2}/2 & \\ & & & -\sqrt{2}/2 & 2 & \end{bmatrix}, \text{ com } D = \text{diag}(1, \dots, 1, \sqrt{2}/2),$$

segue que \widetilde{K} é simétrica e definida positiva e com uma fatoração Cholesky obtemos,

$$\widetilde{K} = PP^T.$$

A mudança de variáveis,

$$\begin{aligned} V_1 &= \frac{1}{h} P^T \bar{v} & V_{1,t} &= \frac{1}{h} P^T V_2 \\ V_2 &= \bar{v}_t & V_{2,t} &= -\frac{\delta}{h} C V_2 - \frac{1}{h} V_1 \end{aligned},$$

resulta no sistema semi discreto

$$\begin{bmatrix} V_{1,t} \\ V_{2,t} \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 0 & P^T \\ -P & -\delta C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \end{bmatrix} \doteq \widehat{L}_N \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \end{bmatrix}.$$

A questão que aparece é se o espectro e o pseudo espectro do operador discreto \widehat{L}_N aproxima de fato o espectro e o pseudo espectro do operador \mathcal{A} . A resposta é afirmativa, mas a convergência é muito lenta, conforme pode ser verificado através da figura 3.4 em que $*$ representam os autovalores do operador \mathcal{A} e \bullet , os autovalores da matriz \widehat{L}_N .

3.3.2 Sistema semi discreto baseado no método pseudo espectral de Chebyshev

Nesta seção analisamos a segunda versão semi discreta do problema (3.13), de Driscoll e Trefethen [9]. O modelo provém de aplicar o método pseudo espectral de Chebyshev com pontos de colocação da forma:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b, \quad \text{com} \quad x_j = \frac{1}{2} \left((b-a) \cos \left(\frac{j\pi}{N} \right) + (b+a) \right), \quad 0 \leq j \leq N.$$

Um aspecto fundamental do método apresentado é o uso da matriz de diferenciação de Chebyshev D para discretizar o modelo (3.13). O procedimento para deduzir D é descrito na seção 1.2. Para aproximar a derivada espacial de segunda ordem usando a matriz D , vamos considerar,

$$\bar{u}_{tt} \doteq [u_{tt}(x_0, t), \dots, u_{tt}(x_N, t)]^T, \quad \bar{u}_{xx} \doteq [u_{xx}(x_0, t), \dots, u_{xx}(x_N, t)]^T.$$

Da representação da matriz D usando linhas l_j^T e colunas d_j , com $\bar{u} = [u(x_0, t), \dots, u(x_N, t)]^T$, segue que

$$\begin{aligned} \bar{u}_{xx} &\approx D^2 \bar{u} \\ &\approx (d_0 l_0^T + \dots + d_{N-1} l_{N-1}^T) \bar{u} + d_N l_N^T \bar{u} \\ &\approx (d_0 l_0^T + \dots + d_{N-1} l_{N-1}^T) \bar{u} + d_N u_x(x_N, t), \end{aligned}$$

pois $u_x(x_N, t) \approx l_N^T \bar{u}$. Das condições de fronteira,

$$\begin{cases} u(x_0, t) = 0 \\ u_x(x_N, t) = -\delta u_t(x_N, t) \end{cases}.$$

segue que

$$\begin{aligned} \bar{u}_{xx} &\approx d_N u_x(x_N, t) + \tilde{D}_1 \hat{D}_2 \check{u} \\ &\approx -\delta d_N u_t(x_N, t) + \tilde{D}_1 \hat{D}_2 \check{u}. \end{aligned} \tag{3.28}$$

em que

$$\check{u} \doteq [u(x_1, t), \dots, u(x_N, t)]^T, \quad \tilde{D}_1 = [d_0 \dots d_{N-1}],$$

com \hat{D}_2 sendo formada pelas N últimas colunas da matriz \tilde{D}_2 definida por

$$\tilde{D}_2 = \begin{bmatrix} l_0^T \\ \vdots \\ l_{N-1}^T \end{bmatrix}.$$

Tomando as N últimas equações do sistema (3.28) obtemos o seguinte aproximação para \check{u}_{xx} :

$$\check{u}_{xx} \approx -\delta \hat{d}_N u_t(x_N, t) + \hat{D}_1 \hat{D}_2 \check{u}, \tag{3.29}$$

em que \hat{d}_N é composto pelas N últimas componentes de d_N e \hat{D}_1 é formado pelas N últimas linhas de \tilde{D}_1 . Daí segue que

$$\check{u}_{tt} \approx \hat{C} \check{u}_t + \hat{D}_1 \hat{D}_2 \check{u}$$

com \hat{C} sendo a matriz de ordem N com as $N-1$ primeiras colunas nulas e a última igual a $-\delta \hat{d}_N$, isto é,

$$\hat{C} = -\delta \hat{d}_N e_N^T,$$

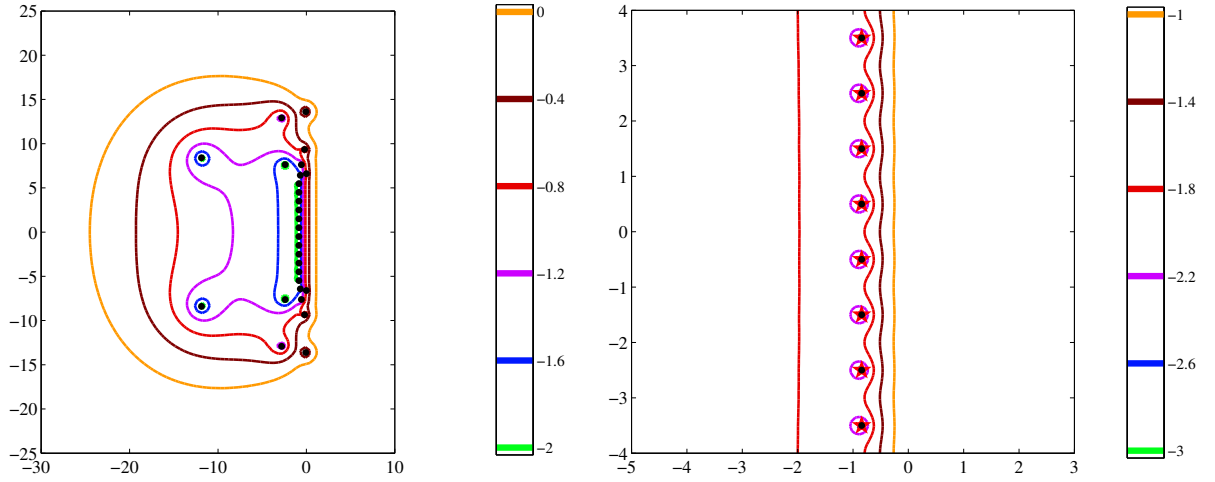


Figura 3.5: Espectro e pseudo espectro da matriz \tilde{B}_N com $\epsilon = 10^{-2}, 10^{-1.6}, \dots, 10^0$, $N+1 = 16$ e $\delta = 0.99$ (esquerda). Zoom da aproximação à direita, com $\epsilon = 10^{-3}, 10^{-2.6}, \dots, 10^0$. Os autovalores de \tilde{B}_N são marcados pelo símbolo \bullet e os autovalores do operador \mathcal{A} pelos símbolo \star .

com e_N sendo o N -ésimo vetor canônico. Desprezando o erro de aproximação em (3.29) obtemos o sistema de EDO's

$$\bar{v}_{tt} = \hat{C} \bar{v}_t + \hat{D}_1 \hat{D}_2 \bar{v}, \quad (3.30)$$

com

$$\bar{v} \doteq [v_1(t), \dots, v_N(t)]^T$$

e $v_i(t)$ sendo a aproximação para $u(x_i, t)$.

O sistema de EDO's de segunda ordem (3.30) pode ser transformado no seguinte sistema de EDO's de primeira ordem

$$V_t = B_N V, \quad \text{com} \quad B_N = \begin{bmatrix} 0 & I \\ \hat{D}_1 \hat{D}_2 & \hat{C} \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad V = \begin{bmatrix} \bar{v} \\ \bar{v}_t \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

A formulação apresentada em [9] é obtida a partir do sistema (3.30) através da mudança de variáveis,

$$\begin{cases} w_1 = \hat{D}_2 \bar{v} \\ w_2 = \bar{v}_t \end{cases} \implies \begin{cases} w_{1,t} = \hat{D}_2 \bar{v}_t = \hat{D}_2 w_2 \\ w_{2,t} = \hat{C} w_2 + \hat{D}_1 w_1 \end{cases},$$

o que resulta no sistema de EDO's,

$$W_t = \tilde{B}_N W, \quad \text{com} \quad \tilde{B}_N = \begin{bmatrix} 0 & \hat{D}_2 \\ \hat{D}_1 & \hat{C} \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad W = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

O caso de máxima não normalidade ocorre quando $\delta = 1$, que é o caso em que o espectro de \mathcal{A} é vazio, (figura 3.3). Já o pseudo-espectro do operador é muito significativo e pode ser usado para prever o comportamento do operador evolução $\|\exp(t\mathcal{A})\|$. A aproximação usando o método pseudo espectral de Chebyshev mostra-se mais eficiente que a aproximação via diferenças finitas, compare as figuras 3.4 e 3.5. A figura 3.5, apresenta o espectro e pseudo espectro da matriz \tilde{B}_N , juntamente com o espectro do operador \mathcal{A} . Observe que os autovalores de \tilde{B}_N (representados por \bullet), coincidem com os autovalores de \mathcal{A} (representados por \star).

3.4 Equação da onda com condições de fronteira transparentes

Nesta seção apresentamos uma análise espectral de um método numérico pseudo espectral de Chebyshev para a simulação numérica de propagação de ondas 1D e 2D, proposto recentemente por Jackiewicz e Renaut em [19]. O modelo unidimensional é a equação da onda (3.1), restrita ao intervalo $[0, 1]$ com condições de fronteira que generalizam (3.5), descrita como um sistema hiperbólico de EDO's de primeira ordem obtido através da transformação $w_1 = u_t$ e $w_2 = u_x$:

$$\begin{cases} w_{1,t} = c^2 w_{2,x}, & 0 < x < 1, t > 0 \\ w_{2,t} = w_{1,x}, & 0 < x < 1, t > 0, \end{cases} \quad (3.33)$$

com condições iniciais e de fronteira

$$\begin{cases} w_1(x, 0) = 0, & 0 \leq x \leq 1, \\ w_2(x, 0) = f_x(x), & 0 \leq x \leq 1, \\ w_1(0, t) - cw_2(0, t) = 0, & t > 0 \\ w_1(1, t) + cw_2(1, t) = 0, & t > 0 \end{cases} \quad (3.34)$$

A segunda equação em (3.33) é a chamada *condição de consistência*: $w_{xt} = w_{tx}$.

Para a análise espectral do modelo, vamos reescrever o problema original na forma

$$\begin{cases} w_t = \mathcal{A}w, & 0 \leq t \leq T \\ w(0) = w_0 \end{cases}, \quad \text{com } w = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}, \quad \text{e } \mathcal{A} = \begin{bmatrix} 0 & c^2 \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

em que \mathcal{A} é um operador linear definido em $\mathcal{A} : \mathcal{D} \mapsto \mathcal{H}$, com $\mathcal{H} = L^2(0, 1) \times L^2(0, 1)$ e \mathcal{D} é um subespaço denso em \mathcal{H} formado por funções absolutamente contínuas satisfazendo as condições de fronteira absorventes

$$\begin{aligned} w_1(0, t) - c_1 w_2(0, t) &= 0 \\ w_1(1, t) + c_2 w_2(1, t) &= 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

com c_1 e c_2 constantes positivas. Note que as condições de fronteira absorventes (3.36) tornam-se as condições de fronteiras transparentes em (3.5) quando $c_1 = c_2 = c$.

Conforme visto nas seções 2.2 e 3.2, a solução formal do problema valor inicial (3.35) é da forma $w(t) = \exp(t\mathcal{A})w(0)$ e pelas mesmas condições as limitações da análise espectral são contornadas pela análise pseudo espectral do operador \mathcal{A} .

Começamos com a seguinte proposição que descreve o auto sistema de \mathcal{A} .

Proposição 3.2 *Se $0 < c_1, c_2 < c$. Então o autosistema do operador \mathcal{A} é formado pelos autovalores:*

$$\lambda_n = \frac{c}{2} \ln \left(\frac{(c - c_1)(c - c_2)}{(c + c_1)(c + c_2)} \right) + cn\pi i \quad \forall n \in \mathcal{Z} \quad (3.37)$$

e pelas autofunções $w_n = [w_{1_n}, w_{2_n}]^T$ com

$$\begin{aligned} w_{1_n}(x) &= \frac{c}{c + c_1} \left[c \operatorname{senh} \left(\frac{\lambda_n x}{c} \right) + c_1 \cosh \left(\frac{\lambda_n x}{c} \right) \right], \\ w_{2_n}(x) &= \frac{1}{c + c_1} \left[c \cosh \left(\frac{\lambda_n x}{c} \right) + c_1 \operatorname{senh} \left(\frac{\lambda_n x}{c} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Demonstração: Seja λ um autovalor de \mathcal{A} e $w = [w_1, w_2]^T$ a autofunção correspondente. A equação $\mathcal{A}w = \lambda w$ exige que

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} w_2 - \frac{\lambda^2}{c^2} w_2 = 0, \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} w_1 - \frac{\lambda^2}{c^2} w_1 = 0,$$

e dessas equações segue que as componentes da autofunção w devem ser da forma:

$$w_2(x) = A_1 \exp\left(\frac{\lambda x}{c}\right) + A_2 \exp\left(-\frac{\lambda x}{c}\right), \quad \text{e} \quad w_1(x) = B_1 \exp\left(\frac{\lambda x}{c}\right) + B_2 \exp\left(-\frac{\lambda x}{c}\right) \quad (3.39)$$

com A_i e B_i , constantes a serem determinadas. Agora note que da primeira condição de fronteira em (3.36) e da relação:

$$\frac{\partial}{\partial x} w_1 = \lambda w_2,$$

temos que

$$B_1 = cA_1, \quad B_2 = -cA_2, \quad \text{e} \quad A_2 = \left(\frac{c - c_1}{c + c_1}\right) A_1.$$

A escolha $B_1 = \frac{1}{2}$ verifica (3.38). A segunda condição de fronteira em (3.36) mostra que,

$$\exp\left(2\frac{\lambda}{c}\right) = \frac{(c - c_1)(c - c_2)}{(c + c_1)(c + c_2)}, \quad (3.40)$$

o qual verifica (3.37). □

Observação 3.1 Podemos também transformar o problema (3.1) em um sistema de equações diferenciais ordinárias, definido da seguinte forma,

$$\begin{cases} \check{w}_t = \mathcal{L}\check{w} \\ \check{w}(0) = \check{w}_0 \end{cases} \quad \text{com} \quad \mathcal{L} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} & 0 \end{bmatrix}, \quad \check{w} = \begin{bmatrix} u \\ u_t \end{bmatrix}. \quad (3.41)$$

A partir da formulação (3.41), os autovalores de \mathcal{L} são dados pela proposição 3.3.

Proposição 3.3 Se $0 < c_1, c_2 < c$. Então o autosistema do operador \mathcal{L} é formado pelos autovalores:

$$\lambda_n = \frac{c}{2} \ln \left(\frac{(c - c_1)(c - c_2)}{(c + c_1)(c + c_2)} \right) + cn\pi i \quad \forall n \in \mathcal{Z} \quad (3.42)$$

e pelas autofunções $w_n = [u_n, \lambda_n u_n]^T$ com

$$u_n(x) = c \sinh\left(\frac{\lambda_n x}{c}\right) + c_1 \cosh\left(\frac{\lambda_n x}{c}\right). \quad (3.43)$$

A demonstração é feita de maneira análoga a demonstração da proposição 3.2.

Observação 3.2 O espectro do operador \mathcal{A} , $\Lambda(\mathcal{A})$, é vazio quando $c_1 = c_2 = c$. Isto pode ser explicado intuitivamente notando que, como as autofunções devem ser da forma (3.38) e já que elas dependem de λ satisfazendo (3.40), conclui-se que não existem autofunções no caso $c_1 = c_2 = c$. Uma demonstração rigorosa deste resultado envolve a análise do operador resolvente $(zI - \mathcal{A})^{-1}$, $z \in \mathbb{C}$, conforme os teoremas 2.6 e 3.1. Mais detalhes veja [9, 38].

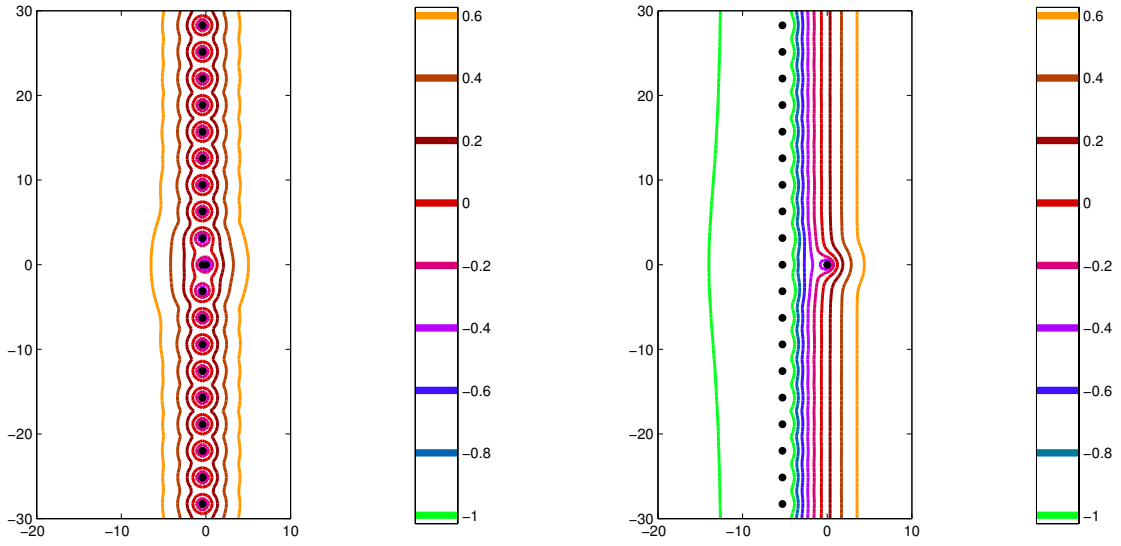


Figura 3.6: Fronteiras do ϵ -pseudo espectro de \mathcal{A} para $c_1 = c_2 = 0.2$ e $c_1 = c_2 = 0.99$, esquerda e direita respectivamente, com $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-0.8}, \dots, 10^{0.6}$. Os autovalores do operador são representados pelo símbolo \bullet .

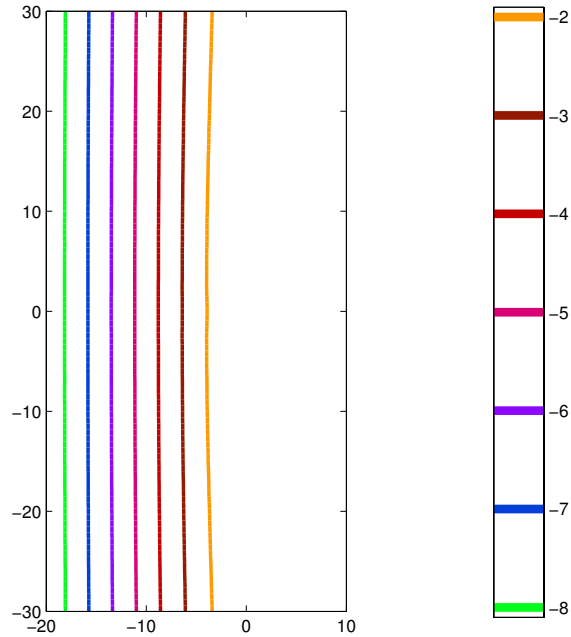


Figura 3.7: Fronteiras do ϵ -pseudo espectro de \mathcal{A} para $c_1 = c_2 = c = 1$, com $\epsilon = 10^{-8}, \dots, 10^{-2}$.

O pseudo espectro de \mathcal{A} é apresentado nas figuras 3.6 e 3.7 para o caso em que a velocidade de propagação da onda é $c = 1$ e algumas escolhas de c_1, c_2 . As conclusões feitas sobre o pseudo espectro do operador descrito em (3.14), com uma condição de fronteira absorvente, podem ser extendidas para o operador (3.35), com condições de fronteira absorventes nas duas fronteiras. Observe na figura 3.6 que a medida que $c_1, c_2 \rightarrow c$, o pseudo espectro torna-se mais amplo e a não normalidade do operador \mathcal{A} aumenta, isto é, os autovalores do operador tornam-se mal

condicionados. Já a figura 3.7, apresenta o pseudo espectro do operador para $c = c_1 = c_2$. Nesse caso, os ϵ -pseudo espectros são os semi planos à esquerda das fronteiras.

3.4.1 Problema semi discreto unidimensional de Jackiewicz e Renaut

Aqui apresentamos dois modelos semi discretos associados ao problema (3.35) propostos por Jackiewicz e Renaut [19], que resultam de incorporar as condições de fronteira de duas maneiras diferentes.

A primeira formulação surge quando incorporamos as condições de fronteira (3.5) eliminando as variáveis $w_2(x_0, t)$ e $w_2(x_N, t)$ fazendo:

$$w_2(x_0, t) = \frac{w_1(x_0, t)}{c} \quad \text{e} \quad w_2(x_N, t) = -\frac{w_1(x_N, t)}{c}. \quad (3.44)$$

Para ver como isto é feito, observe que usando as definições

$$\bar{w}_1 \doteq [w_1(x_0, t), \dots, w_1(x_N, t)]^T, \quad \bar{w}_2 \doteq [w_2(x_0, t), \dots, w_2(x_N, t)]^T,$$

e do sistema (3.33), segue que,

$$\begin{aligned} \bar{w}_{1,t} &\approx c^2 D \bar{w}_2 \\ \bar{w}_{2,t} &\approx D \bar{w}_1 \end{aligned} \quad (3.45)$$

Agora, incorporando as condições de fronteira e substituindo (3.44) em (3.45), obtemos

$$\begin{aligned} \hat{w}_{1,t} &\approx cC \bar{w}_1 + c^2 D_1 \hat{w}_2 \\ \hat{w}_{2,t} &\approx D_2 \bar{w}_1 \end{aligned}, \quad (3.46)$$

com $\hat{w}_1 = \bar{w}_1$, $\hat{w}_2 \doteq [w_2(x_1, t), \dots, w_2(x_{N-1}, t)]^T$, e

$$\begin{aligned} D_1 &= [d_1 \ \dots \ d_{N-1}], \quad D_2 = [l_1^T \ \dots \ l_{N-1}^T], \\ C &= [d_0, 0, \dots, 0 - d_N]^T. \end{aligned} \quad (3.47)$$

A segunda equação em (3.46) foi obtida a partir de (3.45) omitindo a primeira e última relação, devido as condições de fronteira. Desprezando os erros de aproximação, o primeiro modelo semi discreto associado ao modelo contínuo (3.35), é dado por

$$\begin{cases} V_{1,t} = A_1 V_1, \quad t > 0, \\ V_1(0) = [0, \dots, 0, f_x(x_1), \dots, f_x(x_{N-1})]^T \end{cases} \quad (3.48)$$

com

$$A_1 = \begin{bmatrix} cC & c^2 D_1 \\ D_2 & O \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad V_1 = \begin{bmatrix} \hat{w}_1 \\ \hat{w}_2 \end{bmatrix}.$$

A segunda formulação é obtida quando incorporamos as condições de fronteira eliminando $w_1(x_0, t)$ e $w_1(x_N, t)$ fazendo

$$w_1(x_0, t) = c w_2(x_0, t) \quad \text{e} \quad w_1(x_N, t) = -c w_2(x_N, t). \quad (3.49)$$

Procedendo como no caso anterior obtemos,

$$\begin{aligned} \hat{w}_{1,t} &\approx c^2 D_2 \hat{w}_2 \\ \hat{w}_{2,t} &\approx D_1 \hat{w}_1 + cC \hat{w}_2 \end{aligned}, \quad (3.50)$$

as matrizes D_1 , D_2 e C , como na primeira formulação, $\hat{w}_1 \doteq [w_1(x_1, t), \dots, w_1(x_{N-1}, t)]^T$, e $\hat{w}_2 = \bar{w}_2$.

Portanto, o segundo modelo semi discreto obtido em [19] é dado por,

$$\begin{cases} V_{2,t} = A_2 V_2, t > 0, \\ V_2(0) = [0, \dots, 0, f_x(x_0), \dots, f_x(x_N)]^T \end{cases} \quad (3.51)$$

com

$$A_2 = \begin{bmatrix} O & c^2 D_2 \\ D_1 & c C \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad V_2 = \begin{bmatrix} \hat{w}_1 \\ \hat{w}_2 \end{bmatrix}.$$

Baseados em resultados numéricos, Jackiewicz e Renault [19] concluem que as características de estabilidade das soluções numéricas de ambas as formulações são muito semelhantes, apesar das matrizes A_1 e A_2 terem espectros diferentes (com A_1 tendo autovalores no semi plano direito). Uma análise da estabilidade das soluções numéricas dessas formulações é apresentada no próximo capítulo. Aqui, mostraremos que a afirmação sobre os espectros das matrizes A_1 e A_2 é incorreta, veja também a figura 3.8.

Proposição 3.4 *As matrizes A_1 e A_2 são semelhantes.*

Demonstração: Defina

$$S = \begin{bmatrix} O & c^2 I \\ I & O \end{bmatrix} \implies S^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ \frac{1}{c^2} I & O \end{bmatrix}.$$

Utilizando essas matrizes, vemos que $A_1 = S^{-1} A_2 S$, conforme desejado. □

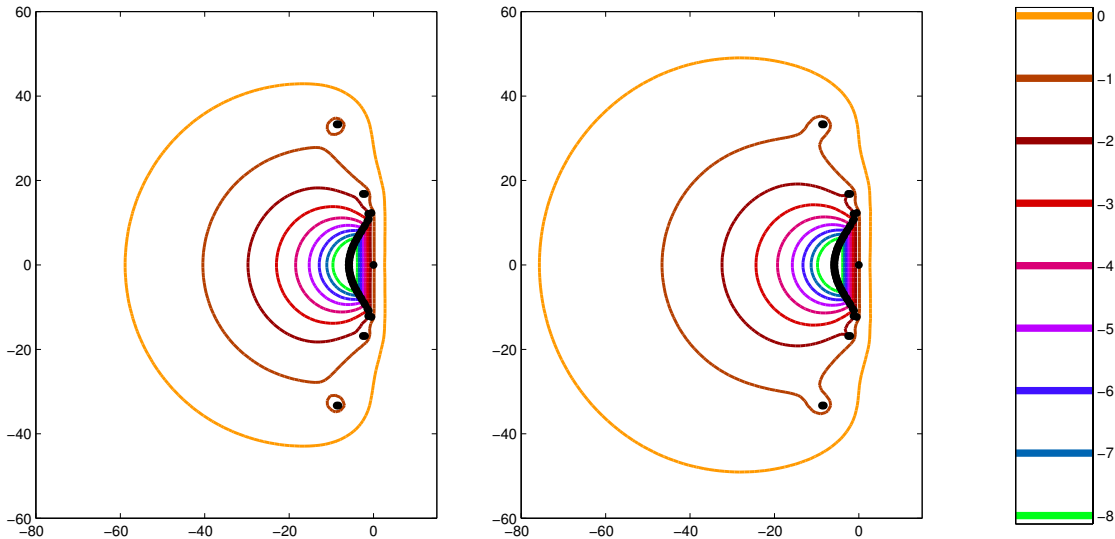


Figura 3.8: Espectro e pseudo espectro de A_1 (esquerda) e A_2 (direita), com $c = c_1 = c_2 = 0.2$ e $N + 1 = 32$.

Os autovalores das matrizes A_1 e A_2 vêm em pares complexos conjugados e muitos destes são muito sensíveis a pequenas perturbações, tal como erros de arredondamento. O fato é ilustrado na figura 3.9. Note que com $N + 1 = 32$ os autovalores de A_1 são iguais aos autovalores de A_2 .

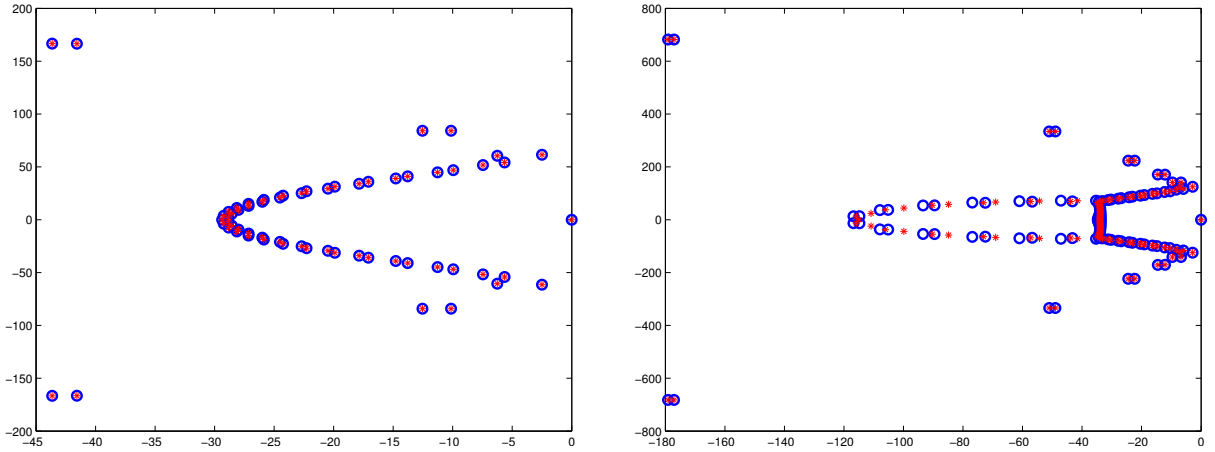


Figura 3.9: Autovalores das matrizes A_1 (círculos pequenos) e A_2 (asteriscos), com $N + 1 = 32$ (esquerda) e $N + 1 = 64$ (direita).

Isto não ocorre com $N + 1 = 64$. Este fato não contradiz a proposição 3.4, simplesmente mostra que as matrizes A_1 e A_2 têm autovalores muito sensíveis a “pequenas perturbações”, a medida que N cresce. Portanto as matrizes A_1 e A_2 estão longe de serem normais.

Uma medida de normalidade de $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é o número de condição de Jordan, associado ao autoproblema.

Definição 3.1 *Seja $A = V \Lambda V^{-1}$ uma decomposição de Jordan da matriz A . O número de condição de Jordan ⁴ é definido por*

$$k(A) = \|V\|_2 \|V^{-1}\|_2.$$

Com $c = 1$, $N + 1 = 32$ e $N + 1 = 64$ o número de condição de Jordan das matrizes A_1 e A_2 , respectivamente, é apresentado na tabela 3.2.

Nº de Condição	$N + 1 = 32$	$N + 1 = 64$
$k(A_1)$	$6.5194 \cdot 10^{11}$	$8.5034 \cdot 10^{14}$
$k(A_2)$	$6.5193 \cdot 10^{11}$	$9.3704 \cdot 10^{14}$

Tabela 3.2: Número de Jordan na norma 2 das matrizes A_1 e A_2 com $N + 1 = 32$ e $N + 1 = 64$.

Uma consequência da proposição 3.4 é que o número de condição dos problemas de autovalor associados as matrizes A_1 e A_2 é dado por uma constante que depende da velocidade de propagação de onda, c , do problema original (3.1). A proposição 3.5 apresenta esse resultado.

Proposição 3.5 *Sejam $k(A_1)$ e $k(A_2)$ os números de condição de Jordan dos problemas de autovalor associados as matrizes A_1 e A_2 , respectivamente. Estes números se relacionam por um fator constante, $\mu \geq 1$ definido por,*

$$\mu = \begin{cases} c^2 & \text{se } c > 1 \\ 1 & \text{se } c = 1 \\ \frac{1}{c^2} & \text{se } c < 1 \end{cases}$$

⁴Se A é normal $k(A) = 1$.

Demonstração: Seja $A_1 = V_1 \wedge V_1^{-1}$ a decomposição de Jordan da matriz A_1 . Pela proposição 3.4 o número de condição $k(V_2)$, da matriz A_2 satisfaz:

$$k(A_2) = \|SV_1\|_2 \|V_1^{-1}S^{-1}\|_2 \leq \|S\|_2 \|S^{-1}\|_2 \|V_1\|_2 \|V_1^{-1}\|_2 = k(S)k(A_1). \quad (3.52)$$

Agora observe que se $c > 1$ temos $\|S\|_2 = c^2$ e $\|S^{-1}\|_2 = 1$, pois as colunas de S são ortogonais. Assim $k(S) = c^2$. Um raciocínio similar implica que $k(S) = (1/c^2)$ se $c < 1$ e $k(S) = 1$ se $c = 1$. Portanto de (3.52) temos que $k(A_2) \leq \mu k(A_1)$. Se invertermos a relação entre $k(A_1)$ e $k(A_2)$ no procedimento acima, obtemos $k(A_1) \leq \mu k(A_2)$. O que mostra o resultado. \square

O resultado ilustrado na figura 3.8 mostra que os problemas de autovalores associados as matrizes A_1 e A_2 são quase igualmente condicionados. Sendo que o número de condição correspondente pode ser extremamente grande a medida que N cresce. Consequentemente, as propriedades de estabilidade dos métodos de integração no tempo, descritas no capítulo 2, para os modelos semi discretos (3.48) e (3.51) não devem diferir significativamente.

Na abordagem de Jackiewicz e Renault, os sistemas (3.48) e (3.51) são resolvidos através do método **RK4**. Uma dificuldade encontrada é que as soluções numéricas obtidas são aproximações para as derivadas u_t e u_x e não para o deslocamento u . Para determinar aproximações para u , os autores utilizam o seguinte procedimento:

Método de Jackiewicz e Renault

Passo 1: Calcule as $N + 1$ aproximações de u_t através do método RK4.

Passo 2: Para $0 \leq i \leq N$ e $k \geq 0$, determine as aproximações de u através da fórmula:

$$u(x_i, t_{k+3}) = u(x_i, t_k) + \Delta t [\beta_0 u_t(x_i, t_k) + \beta_1 u_t(x_i, t_{k+1}) + \beta_2 u_t(x_i, t_{k+2}) + \beta_3 u_t(x_i, t_{k+3})] \quad (3.53)$$

com $\beta_0 = -(51/8)$, $\beta_1 = 171/8$, $\beta_2 = -(153/8)$, $\beta_3 = 57/8$.

Observação 3.3 Para o esquema (3.53) são necessários três dados iniciais: $u(x_i, t_0)$ (que é uma condição inicial do problema original (3.13)), e mais $u(x_i, t_1)$ e $u(x_i, t_2)$ que são introduzidas no esquema exatamente, visto que a solução exata do problema é conhecida e dada por (3.2).

Os autores não comentam como as constantes são obtidas, fazendo apenas a observação que elas aparecem como um resultado de usar um interpolador das soluções $u_t(x_i, t)$ de grau 3. Após várias tentativas frustradas de se obter as constantes citadas, seguindo o procedimento indicado pelos autores, determinamos novas constantes descritas na próxima proposição.

Proposição 3.6 Seja $p_3(x_i, t)$ o polinômio de grau três que interpola 4 pontos sucessivos no tempo $u_t(x_i, t_j), \dots, u_t(x_i, t_{j+3})$. Então $u(x_i, t)$ pode ser aproximado através do esquema (3.53) com as constantes β 's, iguais a

$$\beta_0 = 3/8, \quad \beta_1 = 9/8, \quad \beta_2 = 9/8, \quad \beta_3 = 3/8.$$

Demonstração:

$$\text{Se } u_t(x_i, t) \approx p(t) \text{ com } p(t) = \sum_{k=j}^{j+3} u_t(x_i, t_k) l_k(t) \text{ e } l_k(t) = \prod_{l=j, l \neq k}^{j+3} \frac{(t - t_l)}{(t_k - t_l)}.$$

Então integrando de t_j a t_{j+3} obtemos,

$$u(x_i, t_{j+3}) - u(x_i, t_j) \approx \int_{t_j}^{t_{j+3}} p(t) dt.$$

Com cada constante β dada por

$$\Delta t \beta_k = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_j}^{t_{j+3}} l_k(t) dt, \text{ para } k = 0, \dots, 3. \quad (3.54)$$

Como $t_{j+1} - t_j = \Delta t$ vamos fazer a mudança de variáveis apresentada na figura. Assim obtemos,

$$\overbrace{t_j = 0 \quad t_{j+1} = \Delta t \quad t_{j+2} = 2\Delta t \quad t_{j+3} = 3\Delta t}$$

$$\begin{cases} \beta_0 = -\frac{1}{\Delta t} \frac{1}{6(\Delta t)^3} \int_0^{3\Delta t} (t - \Delta t)(t - 2\Delta t)(t - 3\Delta t) dt \implies \beta_0 = \frac{3}{8} \\ \beta_1 = \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{2(\Delta t)^3} \int_0^{3\Delta t} t(t - 2\Delta t)(t - 3\Delta t) dt \implies \beta_1 = \frac{9}{8} \\ \beta_2 = -\frac{1}{\Delta t} \frac{1}{2(\Delta t)^3} \int_0^{3\Delta t} t(t - \Delta t)(t - 3\Delta t) dt \implies \beta_2 = \frac{9}{8} \\ \beta_3 = \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{6(\Delta t)^3} \int_0^{3\Delta t} t(t - \Delta t)(t - 2\Delta t) dt \implies \beta_3 = \frac{3}{8} \end{cases}$$

conforme desejado. □

Observação 3.4 *Exemplos numéricos apresentados no próximo capítulo mostram que o uso das constantes descritas na proposição 3.6, produzem resultados mais precisos do que aqueles obtidos na proposta de Jackiewicz e Renault em (3.53).*

3.5 Modelo bidimensional

Nesta seção, apresentamos o problema de propagação da onda linear bidimensional, apresentado em [19] por Jackiewicz e Renault, descrito pelo modelo

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2(u_{xx} + u_{yy}), & -\infty < x, y < \infty, t > 0 \\ u(x, y, t) = f(x, y), & -\infty < x, y < \infty \\ u_t(x, y, t) = 0, & -\infty < x, y < \infty \end{cases} \quad (3.55)$$

Como no problema unidimensional, para resolvermos o problema numericamente restringimos o domínio para $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, supondo que a condição inicial $f(x, y)$ seja uma função de suporte compacto em Ω e condições de fronteira artificiais dadas por,

$$\begin{cases} u_t(0, y, t) - c u_x(0, y, t) = 0, & 0 \leq y \leq 1 \\ u_t(1, y, t) + c u_x(1, y, t) = 0, & 0 \leq y \leq 1 \\ u_t(x, 0, t) - c u_y(x, 0, t) = 0, & 0 \leq x \leq 1 \\ u_t(x, 1, t) + c u_y(x, 1, t) = 0, & 0 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (3.56)$$

Posteriormente veremos que estas condições de fronteira são absorventes.

O procedimento é análogo ao caso unidimensional. Isto é, trabalharemos com um sistema hiperbólico de EDO's de primeira ordem, obtido como segue. Utilizando as variáveis auxiliares

$$u_1 = u_t, \quad u_2 = u_x, \quad \text{e} \quad u_3 = u_y,$$

o sistema associado ao problema (3.55) é

$$\begin{cases} u_{1,t} = c^2(u_{2,x} + u_{3,y}), & x, y \in \Omega = [0, 1]^2, \quad t > 0 \\ u_{2,t} = u_{1,x} \\ u_{3,t} = u_{1,y} \end{cases} \quad (3.57)$$

em que $u_{i,s}$ é usado para denotar $\frac{\partial}{\partial s} u_i$. As duas últimas equações em (3.57) são nada mais do que as condições de consistência: $u_{xt} = u_{tx}$ e $u_{yt} = u_{ty}$.

De maneira compacta, o sistema acima pode ser descrito como:

$$\begin{cases} U_t = \mathcal{M}U \\ U(0) = U_0 \end{cases} \quad (3.58)$$

onde \mathcal{M} é um operador diferencial linear definido como

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} 0 & c^2 \frac{\partial}{\partial x} & c^2 \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} & O & O \\ \frac{\partial}{\partial y} & O & O \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad U = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}.$$

As condições iniciais e de fronteira, respectivamente, associadas ao problema (3.58) usando as variáveis auxiliares são

$$\begin{cases} u_1(x, y, 0) = 0, & 0 \leq x, y \leq 1, \\ u_2(x, y, 0) = f_x(x, y), & 0 \leq x, y \leq 1, \\ u_3(x, y, 0) = f_y(x, y), & 0 \leq x, y \leq 1, \\ u_1 - c u_2 = 0, & x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \\ u_1 + c u_2 = 0, & x = 1, \quad 0 \leq y \leq 1, \\ u_1 - c u_3 = 0, & y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \\ u_1 + c u_3 = 0, & y = 1, \quad 0 \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (3.59)$$

Na seção 3.5.2 apresentamos as formulações semi discretas associadas ao modelo contínuo (3.58) que foram descritas em [19].

3.5.1 Condições de fronteira e coeficientes de reflexão

A equação da onda $u_{tt} = c^2(u_{xx} + u_{yy})$ com $x, y \in \mathbb{R}$, $t > 0$, admite como solução a onda,

$$u(x, y, t) = \exp i(\omega t + \xi x + \eta y) \quad (3.60)$$

em que ω é a frequência de onda e ξ , η são os números de onda. Substituindo (3.60) em (3.55) obtemos a relação de dispersão,

$$\omega^2 = c^2(\xi^2 + \eta^2) \quad (3.61)$$

Como no caso unidimensional, precisamos restringir o domínio impondo condições de fronteira artificiais. Se restringimos o domínio com uma condição de fronteira artificial em $x = 0$, por exemplo, queremos que essas ondas que viajam para a esquerda, ultrapassem a fronteira com a menor reflexão possível. Já que na prática, no caso bidimensional, não é possível determinarmos condições de fronteira que evitem completamente as reflexões. Engquist e Madja [10] apresentam um método para construir condições de fronteira *absorventes* que minimizem as reflexões de ondas que viajam em direções perpendiculares próximas as fronteiras. Mais detalhes podem ser encontrados em [7, 17, 35, 39, 29, 31].

O objetivo desta seção é apresentar conceitos que esclareçam o fenômeno de reflexão de ondas, para problemas de propagação de ondas bidimensionais. Para exemplificar, vamos construir as condições de fronteira absorventes na fronteira $x = 0$ com $0 \leq y \leq 1$, e determinar seus respectivos coeficientes de reflexão. A metodologia proposta por Engquist e Madja em [10], envolve a aproximação da raiz quadrada, originada da relação de dispersão (3.61),

$$\xi = \pm \frac{\omega}{c} \left[1 - \left(\frac{c\eta}{\omega} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.62)$$

em potências de $(c\eta)/\omega$. Esta aproximação corresponde a relação de dispersão de uma equação *pseudo diferencial*, que aproxima a equação diferencial parcial, cuja relação de dispersão é dada por (3.61).

Claramente, problemas surgem em (3.62), quando $|(c\eta)/\omega| > 1$. Assim as ondas da forma (3.60) satisfazem $c(-(\xi/\omega), -(\eta/\omega)) = c(\cos \theta, \sin \theta)$ com $\sin \theta \in [-1, 1]$, $\theta \in [-\pi/2, \pi/2]$ (veja figura 3.10). Ou seja, para cada frequência ω , a equação (3.60) admite ondas planas que viajam em todas as direções, com velocidade c , [31, 35, 39].

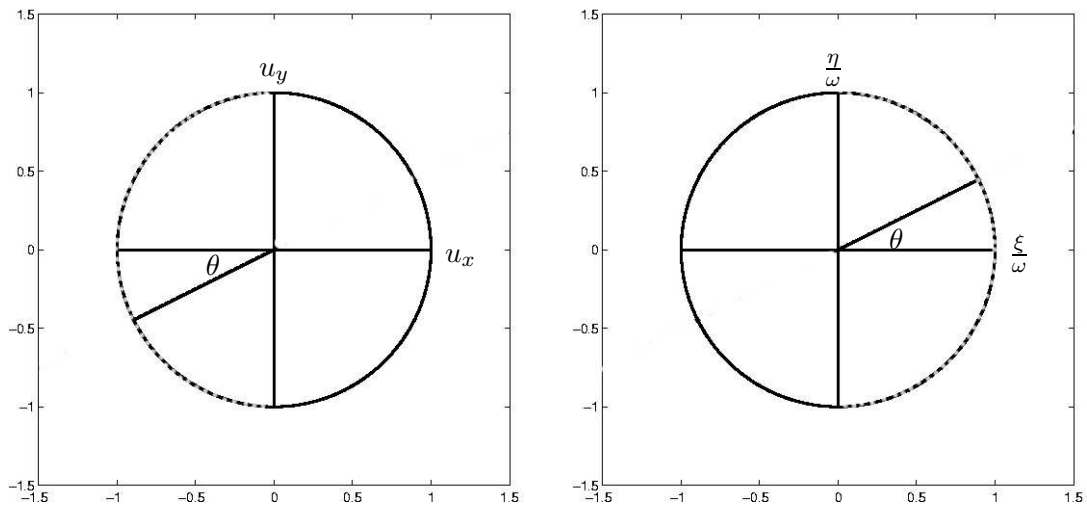


Figura 3.10: θ , (ξ/ω) e (η/ω) para a equação da onda unidirecional.

Para estudar as propriedades de reflexão de uma fronteira sobre a solução numérica do problema de propagação de ondas (3.55), consideramos $u_I(x, y, t)$ e $u_R(x, y, t)$, as ondas incidente e refletida, em relação a fronteira $x = 0$. A onda incidente viaja para a esquerda, enquanto a onda refletida, viaja para a direita. Além disso, vamos supor que as ondas incidente, u_I e refletida, u_R , têm a mesma frequência ω ,

$$u_I(x, y, t) = \exp i(\omega t + \xi x + \eta y) \quad \text{e} \quad u_R(x, y, t) = R \exp i(\omega t - \xi x + \eta y) ,$$

onde R representa o coeficiente de reflexão na onda refletida, que depende do ângulo θ .

O sinal positivo na raiz (3.62), indica que a onda viaja para a esquerda, enquanto o sinal negativo, indica que a onda viaja para a direita. Como queremos analisar a fronteira $x = 0$ tomamos a parte positiva de (3.62),

$$\frac{c\xi}{\omega} = \sqrt{1 - s^2}, \quad \text{com } s = \frac{c\eta}{\omega}. \quad (3.63)$$

A raiz quadrada (3.63) é aproximada pela função racional,

$$r(s) = \frac{p_m(s)}{q_n(s)}$$

com $p_m(s)$ e $q_n(s)$, polinômios de graus m e n , respectivamente, que indicam o grau de aproximação: (m, n) .

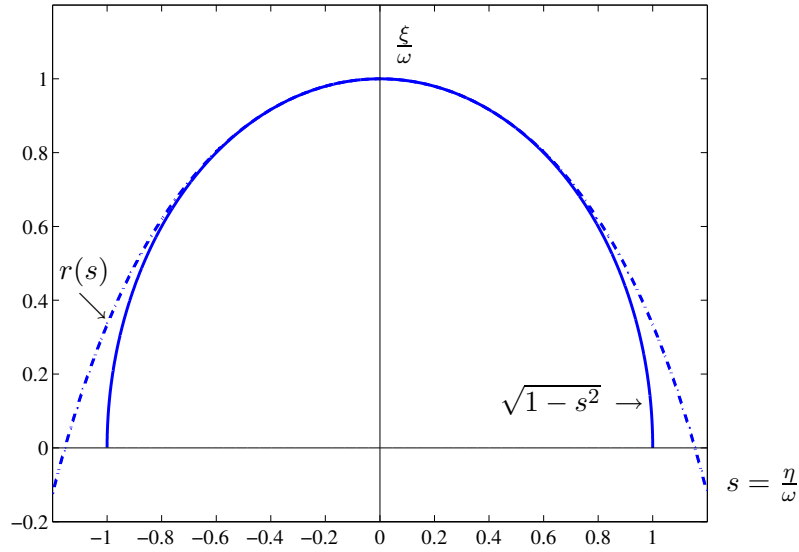


Figura 3.11: O problema de aproximação: $r(s) \approx \sqrt{1 - s^2}$.

Dessa forma, eliminando os erros de aproximação, a equação (3.63) torna-se:

$$\xi = \frac{\omega r(s)}{c},$$

ou equivalentemente,

$$\sum_{j=0}^n q_j \left(\frac{c\eta}{\omega}\right)^j \xi c = \omega \sum_{j=0}^m p_j \left(\frac{c\eta}{\omega}\right)^j. \quad (3.64)$$

Multiplicando pelo termo ω^N , com $N = \max\{n, m - 1\}$, obtemos

$$\sum_{j=0}^n q_j (c\eta)^j \omega^{N-j} \xi c = \sum_{j=0}^m p_j (c\eta)^j \omega^{N-j+1}, \quad (3.65)$$

que é uma relação de dispersão para a equação diferencial,

$$\sum_{j=0}^n q_j c^{j+1} \left(\frac{\partial^j}{\partial y^j} \frac{\partial^{N-j}}{\partial t^{N-j}} \frac{\partial}{\partial x} \right) u = \sum_{j=0}^m p_j c^j \left(\frac{\partial^j}{\partial y^j} \frac{\partial^{N-j+1}}{\partial t^{N-j+1}} \right) u. \quad (3.66)$$

Por exemplo, usando séries de Padé ⁵ para aproximar de (3.63) através da equação (3.64) [7, 10] temos que:

Para $m = n = 0$, a equação (3.66) torna-se,

$$\mathcal{L}_1 : c_0 q_0 u_x - p_0 u_t = 0 \quad \text{com } p_0 = q_0 = 1.$$

Aplicando \mathcal{L}_1 na solução (3.60), obtemos a relação de dispersão $A_1 : c\xi - \omega = 0$. Resultando em (3.65) para $m = n = 0$.

Usando o mesmo procedimento para $m = 2, n = 0$ e $m = n = 2$, obtemos respectivamente:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2 : u_{tt} - c u_{xt} + \frac{c}{2} u_{yy} &= 0, & \text{com } q_0 = p_0 = 1, p_1 = 0, p_2 = -\frac{1}{2}, \\ \mathcal{L}_3 : \frac{1}{c} u_{ttt} - \frac{3c}{4} u_{tyy} - u_{ttx} + \frac{c^2}{4} u_{xyy} &= 0 \quad \text{com } p_0 = q_0 = 1, p_1 = q_1 = 0, p_2 = -\frac{3}{4}, q_2 = -\frac{1}{4}. \end{aligned}$$

Resultando nas relações de dispersão dadas em (3.65),

$$\begin{aligned} A_2 &:= \omega^2 - c\omega\xi + \frac{c}{2}\eta^2 = 0, & m = 2, n = 0 \\ A_3 &:= c\omega\xi - \frac{1}{4}c^2\xi\eta^2 - \omega^3 - \frac{3}{4}c^2\eta^2\omega = 0, & m = n = 2. \end{aligned}$$

Portanto, a condição *absorvente* na fronteira $x = 0$ é modelada pela equação diferencial (3.66). A equação diferencial parcial (3.66) na fronteira é apenas uma aproximação para a equação da onda unidirecional. Desta forma, parte da onda é refletida pela fronteira. Trefethen e Halpern em [39] mostram que as aproximações $r(s)$ com $m = n$ ou $m = n + 2$ levam a soluções estáveis.

Clayton e Enguist [7] determinam a aproximação A_j através da relação de recorrência para aproximações de (3.62) via séries de Padé:

$$A_j = 1 - \frac{s^2}{1 + A_{j-1}} + O(|s|^{2j}), \quad \text{com } j = 2, \dots \quad (3.67)$$

O grau de absorção da condição de fronteira depende da ordem de aproximação em (3.65). Como no caso unidimensional, as condições de fronteira Dirichlet e Neumann nulas, são totalmente reflexivas. Com coeficientes de reflexão $R = -1$ e $R = 1$, respectivamente.

A qualidade das soluções aproximadas pode ser medida pelos coeficientes de reflexão. A próxima proposição apresenta o coeficiente de reflexão de ondas refletidas para a condição de fronteira A_j , associada a aproximação (3.67), na fronteira $x = 0$.

Proposição 3.7 *Seja A_j como em (3.67) uma aproximação para a raiz quadrada (3.62). O coeficiente de reflexão R_j , associado a condição de fronteira \mathcal{L}_j obtida da aproximação (3.66), na fronteira $x = 0$ é dado por:*

$$R_j = - \left(\frac{1 - \cos(\theta)}{1 + \cos(\theta)} \right)^j, \quad (3.68)$$

Demonstração: Como as ondas u_I e u_R são soluções da equação da onda linear $u_{tt} = c^2(u_{xx} + u_{yy})$, a onda $u_I + u_R$ também é solução. Os coeficientes de reflexão (3.68) são obtidos

⁵Neste trabalho vamos analisar somente as aproximações baseadas em séries de Padé, outras técnicas de aproximação para a equação (3.64) são apresentadas em [39, 29, 31], as quais obtêm outros valores para as constantes q_j com $0 \leq j \leq n$ e p_j com $0 \leq j \leq m$.

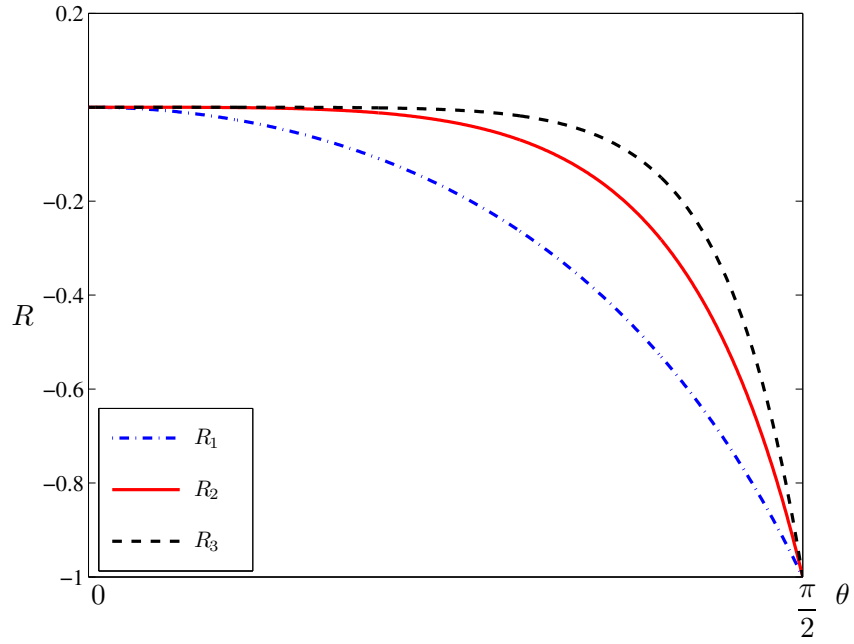


Figura 3.12: Coeficientes de reflexão das condições de fronteira absorventes de ordens 1, 2 e 3 em $x = 0$.

ao impormos que na fronteira $x = 0$, a condição $\mathcal{L}_j(u_I + u_R) = 0$ é satisfeita [7, 17].

□

Observe que a condição de fronteira \mathcal{L}_1 , no caso unidimensional é transparente, mas no caso bidimensional depende do ângulo de incidência da onda sobre a fronteira. A figura 3.12 ilustra o coeficiente de reflexão obtido pelas condições de fronteira absorventes \mathcal{L}_1 , \mathcal{L}_2 e \mathcal{L}_3 com $\theta \in [0, \pi/2]$. A tabela 3.3 apresenta algumas condições de fronteira com seus respectivos coeficientes de reflexão. Vale ressaltar que condições de fronteira com ordem de aproximação maiores se tornam mais difíceis de implementar [7, 10, 17, 39].

Condições de fronteira		Coeficiente de reflexão
Dirichlet	$u = 0$	$R = -1$
Neumann	$u_x = 0$	$R = 1$
Absorventes: O(1), $m = n = 0$	$u_t - c u_x = 0$	$R = -\frac{1 - \cos \theta}{1 + \cos \theta}$
Absorventes: O(2), $m = 2, n = 0$	$-u_{tt} + c u_{tx} + \frac{c^2}{2} u_{yy} = 0$	$R = -\left(\frac{1 - \cos \theta}{1 + \cos \theta}\right)^2$
Absorventes: O(3), $m = n = 2$	$u_{ttt} - \frac{3c^2}{4} u_{tyy} - c u_{ttx} + \frac{c^3}{4} u_{xyy} = 0$	$R_3 = -\left(\frac{1 - \cos \theta}{1 + \cos \theta}\right)^3$

Tabela 3.3: Condições de fronteira e coeficiente de reflexão, para problemas de propagação de ondas bidimensionais na fronteira $x = 0$.

3.5.2 Problema semi discreto de Jackiewicz e Renault

A aproximação da segunda derivada em relação as variáveis espaciais é feita de maneira análoga ao problema unidimensional, aproximando as derivadas nas variáveis espaciais em cada uma das direções x e y , conforme o exemplo 2 da seção 1.3. Vamos considerar:

$$\begin{aligned}\bar{u} &\doteq [u(x_0, y_0, t), \dots, u(x_N, y_0, t), \dots, u(x_0, y_N, t), \dots, u(x_N, y_N, t)]^T, \\ \bar{u}_i &\doteq [u_i(x_0, y_0, t), \dots, u_i(x_N, y_0, t), \dots, u_i(x_0, y_N, t), \dots, u_i(x_N, y_N, t)]^T, \text{ com } i = 1, 2, 3.\end{aligned}$$

Ao fixarmos cada um dos pontos y_j , desprezando erros de aproximação, a derivada discreta na variável x é dada por,

$$\bar{u}_2 = (I \otimes D)\bar{u},$$

com I representando a matriz identidade de ordem $N + 1$ e D a matriz de diferenciação de Chebyshev, descrita na seção 1.2. E fixando cada x_j , a derivada discreta na variável y ,

$$\bar{u}_3 = (D \otimes I)\bar{u}.$$

Aqui, \otimes representa o produto kronecker de duas matrizes, veja o apêndice A, [21]. Dessa forma, um sistema semi discreto geral associado ao sistema (3.58) é dado por,

$$\begin{cases} \hat{U}_t &= M \hat{U} \\ \hat{U}(0) &= \hat{U}_0 \end{cases} \quad (3.69)$$

em que

$$M = \begin{bmatrix} 0 & c^2(I \otimes D) & c^2(D \otimes I) \\ (I \otimes D) & O & O \\ (D \otimes I) & O & O \end{bmatrix}, \text{ e } \hat{U} = \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \end{bmatrix},$$

com \hat{U}_0 contendo as aproximações para as condições iniciais \bar{f}_x e \bar{f}_y . Aqui estamos considerando,

$$\begin{aligned}\bar{f}_x &\doteq [f_x(x_0, y_0, t), \dots, f_x(x_N, y_0, t), \dots, f_x(x_0, y_N, t), \dots, f_x(x_N, y_N, t)]^T \\ \bar{f}_y &\doteq [f_y(x_0, y_0, t), \dots, f_y(x_N, y_0, t), \dots, f_y(x_0, y_N, t), \dots, f_y(x_N, y_N, t)]^T.\end{aligned}$$

Observação 3.5 *Os modelos semi discretos associados ao modelo (3.69), como no caso unidimensional, obtém aproximações para u_t , u_x e u_y . Para obter aproximação da solução u , os autores necessitam de esquemas de aproximação adicionais. Mais informações são encontradas em [19].*

Do sistema de EDO's semi discreto (3.69), temos que

$$\begin{cases} \bar{u}_{1,t} = c^2[(I \otimes D)\bar{u}_2 + (D \otimes I)\bar{u}_3], \\ \bar{u}_{2,t} = (I \otimes D)\bar{u}_1, \\ \bar{u}_{3,t} = (D \otimes I)\bar{u}_1, \end{cases} \quad (3.70)$$

que é a origem de vários sistemas semi discretos associados ao sistema (3.69) obtidos por Jackiewicz e Renault. Esses sistemas semi discretos dependem da maneira de incorporar as condições de fronteira (3.59) no modelo.

A primeira formulação é obtida quando incorporamos as condições de fronteira (3.59) eliminando as variáveis $u_2(x_0, y_j, t)$ e $u_2(x_N, y_j, t)$ fazendo

$$\begin{aligned} u_2(x_0, y, t) &= (1/c)u_1(x_0, y, t) & u_3(x, y_0, t) &= (1/c)u_1(x, y_0, t) \\ u_2(x_N, y, t) &= -(1/c)u_1(x_N, y, t) & u_3(x, y_N, t) &= -(1/c)u_1(x, y_N, t) \end{aligned} \quad (3.71)$$

Fixando cada y_j , com $0 \leq j \leq N$ usando a notação

$$\check{u}_i \doteq [u_i(x_0, y_j, t) \dots, u_i(x_N, y_j, t)]^T, \quad i = 1, 2, 3,$$

e as condições de fronteira (3.71) segue que,

$$\check{u}_{2,x} = \frac{1}{c}C\check{u}_1 + D_1 \widehat{u}_2, \quad \text{para cada } j = 0, 1, \dots, N,$$

com C e D_1 , como em (3.47) e $\widehat{u}_2 = [u_2(x_1, y_j, t), \dots, u_2(x_{N-1}, y_j, t)]^T$.

Usando a notação matricial, a aproximação completa da derivada discreta de u_2 em relação a variável x é dada por,

$$\tilde{u}_{2,x} = \frac{1}{c}(I \otimes C)\tilde{u}_1 + (I \otimes D_1)\tilde{u}_2, \quad (3.72)$$

$$\text{com } \begin{cases} \tilde{u}_2 = [u_2(x_1, y_0, t), \dots, u_2(x_{N-1}, y_0, t), \dots, u_2(x_1, y_N, t), \dots, u_2(x_{N-1}, y_N, t)]^T, \\ \tilde{u}_{2,x} = \bar{u}_{2,x} \text{ e } \tilde{u}_1 = \bar{u}_1. \end{cases}$$

Daqui em diante, para simplicidade, usamos a mesma notação para as incógnitas e as aproximações correspondentes. Para aproximar a derivada de u_3 em relação a y , vamos fixar cada x_j . Incorporando as condições de fronteira dadas pela equação (3.71), os termos $u_3(x_j, y_0, t)$ e $u_3(x_j, y_N, t)$ podem ser eliminados. Procedendo analogamente ao caso anterior, na notação matricial a aproximação completa da derivada discreta de u_3 em relação a y é dada por,

$$\tilde{u}_{3,y} = \frac{1}{c}(C \otimes I)\tilde{u}_1 + (D_1 \otimes I)\tilde{u}_3, \quad (3.73)$$

$$\text{com } \begin{cases} \tilde{u}_3 = [u_3(x_0, y_1, t), \dots, u_3(x_N, y_1, t), \dots, u_3(x_0, y_{N-1}, t), \dots, u_3(x_N, y_{N-1}, t)]^T, \\ \tilde{u}_{3,y} = \bar{u}_{3,y} \text{ e } \tilde{u}_1 = \bar{u}_1. \end{cases}$$

Assim a partir de (3.72) e (3.73) a primeira equação do sistema (3.70) torna-se,

$$\bar{u}_{1,t} = c[(I \otimes C) + (C \otimes I)]\bar{u}_1 + c^2[(I \otimes D_1)\tilde{u}_2 + (D_1 \otimes I)\tilde{u}_3]. \quad (3.74)$$

O mesmo procedimento é utilizado para aproximar $\bar{u}_{1,x}$ e $\bar{u}_{1,y}$ no qual obtemos, fixando y_j e x_j , respectivamente,

$$\begin{aligned} \check{u}_{2,t} &= D_2\bar{u}_1 \\ \check{u}_{3,t} &= D_2\bar{u}_1, \end{aligned} \quad \text{para cada } j = 0, 1, \dots, N,$$

pois pelas condições de fronteira os termos $u_{2,t}(x_0, y_j, t)$, $u_{2,t}(x_N, y_j, t)$, $u_{3,t}(x_j, y_0, t)$ e $u_{3,t}(x_j, y_N, t)$ já foram determinados. A matriz D_2 , é dada como em (3.47). Portanto as duas últimas equações de (3.70) tornam-se,

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{2,t} &= (I \otimes D_2)\bar{u}_1 \\ \tilde{u}_{3,t} &= (D_2 \otimes I)\bar{u}_1. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Das equações (3.74) e (3.75), segue que a primeira formulação de Jackiewicz e Reanut [19] é dada pelo sistema,

$$\begin{cases} \widehat{U}_{1,t} &= A_1 \widehat{U}_1, \\ \widehat{U}_1(0) &= \widehat{U}_1^0 \end{cases} \quad (3.76)$$

onde

$$A_1 = \begin{bmatrix} c(I \otimes C + C \otimes I) & c^2(I \otimes D_1) & c^2(D_1 \otimes I) \\ I \otimes D_2 & O & O \\ D_2 \otimes I & O & O \end{bmatrix}, \quad \widehat{U}_1 = \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \tilde{u}_2 \\ \tilde{u}_3 \end{bmatrix}$$

e \widehat{U}_1^0 contendo as aproximações de \bar{f}_x e \bar{f}_y , nos mesmos pontos de colocação utilizados para as aproximações de \tilde{u}_2 e \tilde{u}_3 .

A segunda formulação em [19] é obtida quando as condições de fronteira (3.59) são incorporadas fazendo

$$\begin{aligned} u_1(x_0, y, t) &= c u_2(x_0, y, t), & u_1(x_N, y, t) &= -c u_2(x_N, y, t), \\ u_1(x, y_0, t) &= c u_3(x, y_0, t), & u_1(x, y_N, t) &= -c u_3(x, y_N, t). \end{aligned} \quad (3.77)$$

Novamente, fixando cada y_j e eliminando os termos $u_1(x_0, y_j, t)$ e $u_1(x_N, y_j, t)$, devido as condições de fronteira (3.77), obtemos:

$$\check{u}_{2,t} = c C \check{u}_2 + D_1 \widehat{u}_1, \quad \text{para cada } j = 0, 1, \dots, N,$$

com $\widehat{u}_1 \doteq [u_1(x_1, y_j, t), \dots, u_1(x_{N-1}, y_j, t)]^T$. Da mesma maneira, fixando cada x_j e eliminando os termos $u_1(x_j, y_0, t)$ e $u_1(x_j, y_N, t)$, obtemos:

$$\check{u}_{3,t} = c C \check{u}_3 + D_1 \widehat{u}_1, \quad \text{para cada } j = 0, 1, \dots, N,$$

com $\widehat{u}_1 \doteq [u_1(x_j, y_1, t), \dots, u_1(x_j, y_{N-1}, t)]^T$. Assim, na forma matricial, as duas últimas equações de (3.70), tornam-se:

$$\begin{aligned} \bar{u}_{2,t} &= c (I \otimes C) \bar{u}_2 + (I \otimes D_1) \tilde{u}_1, \\ \bar{u}_{3,t} &= c (C \otimes I) \bar{u}_3 + (D_1 \otimes I) \tilde{u}_1, \end{aligned} \quad (3.78)$$

com $\tilde{u}_1 \doteq [u_1(x_1, y_1, t), \dots, u_1(x_{N-1}, y_1, t), \dots, u_1(x_1, y_{N-1}, t), \dots, u_1(x_{N-1}, y_{N-1}, t)]^T$. Pelas condições de fronteira (3.77), os termos $u_2(x_0, y_j, t)$, $u_2(x_N, y_j, t)$, $u_3(x_j, y_0, t)$ e $u_3(x_j, y_N, t)$ já foram determinados. Então as aproximações para $\widehat{u}_{2,x}$ e $\widehat{u}_{3,y}$ são dadas por:

$$\begin{aligned} \widehat{u}_{2,x} &= c^2 D_2 \widehat{u}_2 \\ \widehat{u}_{3,y} &= c^2 D_2 \widehat{u}_3, \end{aligned} \quad \text{para cada } j = 0, 1, \dots, N.$$

Logo, na forma matricial, a primeira equação de (3.70), torna-se,

$$\tilde{u}_{1,t} = c^2 [(I \otimes D_2) \bar{u}_2 + (D_2 \otimes I) \bar{u}_3]. \quad (3.79)$$

Portanto pelas equações (3.78) e (3.79), a segunda formulação é dada pelo sistema,

$$\begin{cases} \widehat{U}_{2,t} = A_2 \widehat{U}_2, \\ \widehat{U}_2(0) = \widehat{U}_2^0 \end{cases} \quad (3.80)$$

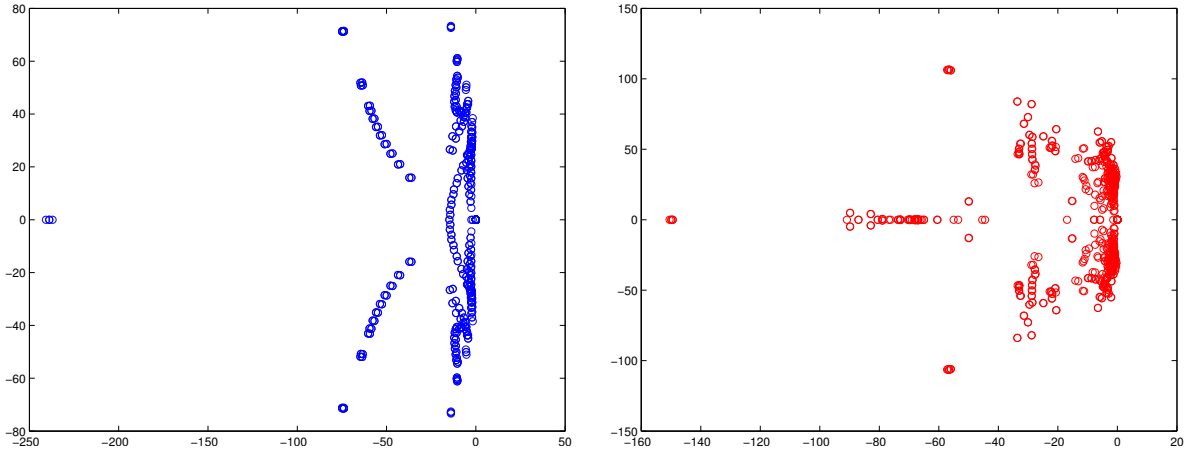


Figura 3.13: Autovalores da matriz A_1 (à esquerda) e da matriz A_2 , (à direita), com $N = 15$.

com

$$A_2 = \begin{bmatrix} O & c^2(I \otimes D_2) & c^2(D_2 \otimes I) \\ I \otimes D_1 & c(I \otimes C) & O \\ D_1 \otimes I & O & c(C \otimes I) \end{bmatrix}, \quad \widehat{U}_2 = \begin{bmatrix} \tilde{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \end{bmatrix}$$

e \widehat{U}_2^0 contendo as aproximações de \bar{f}_x e \bar{f}_y nos mesmos pontos de colocação de \bar{u}_2 e \bar{u}_3 .

Nos sistemas (3.76) e (3.80), os vetores U_1 e U_2 contém informações sobre as derivadas da solução, o que é uma desvantagem do método já que ele não produz imediatamente aproximações para $u(x, y, t)$. Além disso, observe que as dimensões dos sistemas são muito distintas: enquanto a dimensão de A_1 é $2(N+1)(N-1) + (N+1)^2$, a dimensão de A_2 é $2(N+1)^2 + (N+1)(N-1)$. Observe também que, diferente do caso unidimensional, os autovalores das matrizes A_1 e A_2 , são distintos como apresentado na figura 3.13.

No próximo capítulo, apresentamos propostas de métodos pseudo espectrais de Chebyshev para problemas de propagação de ondas unidimensionais e bidimensionais. Uma das vantagens dos métodos propostos é a determinação de aproximações para u a cada passo do tempo.

Capítulo 4

Métodos Pseudo Espectrais de Chebyshev Propostos

No capítulo anterior foi visto que a principal característica dos métodos de Jackiewicz e Renault [19] para propagação de ondas, é que o cálculo do deslocamento das ondas é feito a partir de estimativas de velocidades calculadas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem. Vários exemplos numéricos apresentados em [19] mostram que o método produz resultados promissores. O problema com o método é que além do erro de truncamento ocorrido na estimativa de velocidades, erros adicionais são introduzidos no cálculo do deslocamento a partir das velocidades estimadas, permitindo assim que a potencialidade do método RK4 não seja completamente aproveitada. Por esse motivo, métodos que estimam diretamente o deslocamento das ondas são preferíveis, e o principal objetivo deste capítulo é apresentar uma proposta de método pseudo espectral de Chebyshev com essas características. Portanto, uma das vantagens do método é o cálculo direto da solução u , ou seja, o deslocamento é obtido a cada passo do tempo, contrário à abordagem de Jackiewicz e Renault [19] que calcula aproximações para as derivadas u_t , u_x e u_y (que torna-se importante quando procura-se a energia do sistema).

O sistema semi discreto unidimensional é associado ao modelo contínuo (3.41), enquanto o sistema semi discreto bidimensional é associado ao modelo contínuo:

$$\begin{cases} V_t = \mathcal{M} V \\ V(0) = V_0 \end{cases}, \quad \text{com } \mathcal{M} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ c^2(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{e } V = \begin{bmatrix} u \\ u_t \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

Resumindo, o método proposto está baseado na conjunção do método das linhas com o método pseudo espectral de Chebyshev, e consiste de dois passos conforme descrito a seguir,

Método proposto

- i. Construir a partir de (3.41) ou (4.1) um modelo semi discreto da forma

$$\bar{V}_t = L_N \bar{V}, \quad \text{com } \bar{V} = [\bar{u}, \bar{u}_t]^T,$$

aproximando as derivadas espaciais através do método pseudo espectral de Chebyshev (incorporando as condições de fronteira).

- ii. Resolver o sistema de EDO's semi discreto, através do método de Runge-Kutta de ordem 4.

O capítulo é organizado como segue. Na seção 4.1 descrevemos o método proposto para o problema unidimensional (3.41), discutimos as características de estabilidade do método proposto e dos métodos de Jackiewicz e Renault [19] descritos no capítulo anterior, e ilustramos os resultados através de exemplos numéricos, usando problemas testes da literatura especializada [13, 19, 28, 29, 30, 31]. Em particular, através de resultados numéricos, mostra-se que o método proposto é mais preciso que os métodos de Jackiewicz e Renault.

Na seção 4.2 é descrito o método pseudo espectral proposto para o problema bidimensional. Além disso, mostramos que o método proposto com condições de fronteira de primeira ordem está intimamente ligado a um dos métodos de Jackiewicz e Renault [19] e incluímos uma breve discussão sobre a estabilidade do método. Um segundo método é considerado, no qual incorporamos as condições de fronteira de segunda ordem e comparamos os resultados obtidos pelos dois esquemas. Os resultados também são ilustrados através de exemplos numéricos.

4.1 Método proposto 1D

Ao longo desta seção assumimos que o domínio numérico é o intervalo $[0, 1]$, sendo o modelo contínuo:

$$\begin{cases} u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0, & 0 < x < 1, t > 0 \\ u(x, 0) = f(x), \quad u_t(x, 0) = 0, & \text{Condições Iniciais} \\ u_t(0, t) - c u_x(0, t) = 0, & \\ u_t(1, t) + c u_x(1, t) = 0, & \text{Condição de Fronteira} \end{cases} \quad (4.2)$$

Análogo aos exemplos discutidos anteriormente, a aproximação da segunda derivada da variável espacial é feita via matriz diferenciação de Chebyshev D , através de suas colunas d_j e linhas l_j^T , com $0 \leq j \leq N$, usando como pontos de colocação,

$$x_j = \frac{1}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{j\pi}{N} \right) \right], \quad 0 \leq j \leq N.$$

Assim, se $\bar{u} \doteq [u(x_0, t), \dots, u(x_N, t)]^T$, e usando o fato de que $D^2 = d_0 l_0^T + \dots + d_N l_N^T$, temos que

$$\bar{u}_{tt} = c^2 \bar{u}_{xx} \approx c^2 (d_0 l_0^T + d_1 l_1^T + \dots + d_{N-1} l_{N-1}^T + c_N d_N^T) \bar{u}. \quad (4.3)$$

Agora, usando o fato de que

$$l_0^T \bar{u} \approx u_x(0, t), \quad \text{e} \quad l_N^T \bar{u} \approx u_x(1, t),$$

das condições de fronteira (4.2) segue que (4.3) pode ser reescrito como um sistema de EDO's de segunda ordem da forma:

$$\bar{u}_{tt} - C \bar{u}_t - c^2 D_1 D_2 \bar{u} = 0 \quad (4.4)$$

onde as matrizes C , D_1 e D_2 são como na equação (3.47). Aqui temos desprezado o erro de aproximação e para simplicidade, usamos a mesma notação para soluções aproximadas e soluções exatas.

Agora vemos que o sistema de EDO's de segunda ordem (4.4) pode ser transformado em um sistema de equações diferenciais de primeira ordem da forma:

$$\begin{cases} v_t = L_N v \\ v(0) = [f(x_0), \dots, f(x_N), 0, \dots, 0]^T \end{cases}, \quad (4.5)$$

em que

$$L_N = \begin{bmatrix} O & I \\ c^2 \tilde{D} & C \end{bmatrix}, \quad \tilde{D} = D_1 D_2, \quad v = \begin{bmatrix} \bar{u} \\ \bar{u}_t \end{bmatrix}.$$

Observe que agora, resolvendo (4.5) o deslocamento da onda é estimado diretamente. Uma das diferenças entre o sistema (4.5) e os sistemas (3.48) e (3.51) dos modelos de Jackiewicz e Renault [19] apresentados na seção 3.4.1, está na dimensão. Enquanto a dimensão de L_N é $2N + 2$, a dimensão de A_1 (ou A_2) é $2N$. Apesar disso, o próximo resultado mostra que o espectro de L_N contém basicamente a mesma informação que o espectro de A_i com $i = 1, 2$.

Proposição 4.1 *Exceto por um autovalor nulo de multiplicidade dois, o espectro da matriz L_N definida em (4.5) satisfaz:*

$$\wedge(L_N) = \wedge(A_1) \cup \{0\}.$$

Demonstração: Já que $\tilde{D} = D_1 D_2$, a matriz L_N pode ser reescrita como

$$L_N = \begin{bmatrix} O & I \\ c^2 D_1 D_2 & C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ D_1 & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^2 D_2 & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}.$$

Agora vamos lembrar um resultado da Álgebra Linear Numérica: Seja $F \in \mathbb{R}^{m \times q}$, $G \in \mathbb{R}^{q \times m}$, e $m \geq q$. Então é bem conhecido que exceto por $(m - q)$ autovalores nulos, o espectro das matrizes FG e GF satisfaz (veja, por exemplo, Golub [14, Seção 7.1.6])

$$\wedge(FG) = \wedge(GF) \cup \{0\}. \quad (4.6)$$

Usando a propriedade 4.6 a afirmação da proposição 4.1 segue imediatamente, pois, trocando a ordem dos fatores em L_N temos

$$\wedge \left(\begin{bmatrix} c^2 D_2 & O \\ O & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O & I \\ D_1 & C \end{bmatrix} \right) = \wedge(A_1).$$

□

Na próxima seção serão discutidas as características de estabilidade desses modelos. Em particular, mostaremos que apesar do espectro não nulo das matrizes A_i , $i = 1, 2$ e L_N serem iguais, o pseudo espectro difere. Mas isso não afetará a estabilidade do método proposto, conforme segue.

4.1.1 Estabilidade do método proposto e dos métodos de Jackiewicz e Renault

Nesta seção discutimos a escolha do tamanho de passo Δt , que assegura a estabilidade dos métodos proposto por Jackiewicz e Renault [19] através dos modelos (3.48) e (3.51), e do método proposto nesta seção. Os autores determinam numericamente os tamanhos de passo Δt para o esquema RK4, a partir do espectro e pseudo espectro das matrizes A_1 e A_2 . Usando os resultados da seção 2.4, eles concluem que a escolha de Δt , que assegura a estabilidade do métodos baseados no método RK4, pode ser feita pelo critério de autovalores, o qual requer que o espectro das matrizes A_i ($i = 1, 2$) multiplicados pelo tamanho do passo Δt , isto é, $\wedge(\Delta t A_i)$, esteja contido na região de estabilidade do método **RK4**. Baseados em resultados numéricos eles obtêm diferentes Δt 's para os sistemas A_i . Essas conclusões são parcialmente corretas já que os autores ignoram o fato de que as matrizes A_1 e A_2 são semelhantes, proposição 3.4.

Para nossa análise usamos o fato de que o método proposto e os métodos de Jackiewicz e Renault [19] integram no tempo usando o método RK4, e de que a matriz L_N tem o mesmo raio espectral das matrizes A_i (veja, proposições 3.4, e 4.1). Por isso, uma única análise de estabilidade, segundo o critério de autovalores, pode ser feita para todos os métodos. Para tanto, já que o maior autovalor em módulo de A_i não é real, o tamanho de passo Δt_{\max} pode ser estimado impondo a restrição

$$\Delta t_{\max} \leq \frac{|z|}{r(A_i)} \quad (4.7)$$

em que z é o ponto na curva da região de estabilidade do método RK4 (veja capítulo 2), na direção do maior autovalor em valor absoluto e $r(A_i)$ é o raio espectral da matriz A_i .

Usando a fórmula (4.7), encontramos que os tamanhos de passo Δt que garantem estabilidade do método RK4, segundo autovalores, descritos na tabela 4.1, para alguns valores de N e para o caso em que a velocidade da onda é $c = 1$. Em [2] é mostrado que para determinar Δt_{\max} no caso em que c é arbitrário, basta dividir os valores apresentados na tabela 4.1 por c .

$N + 1$	Δt_{\max} para A_i e L_N .
4	0.61413
8	0.23643
16	0.06906
32	0.01680
64	0.00410
128	0.00101

Tabela 4.1: Tamanho de passo Δt máximo que garante a estabilidade segundo autovalores, para diferentes dimensões $N + 1$.

Um aspecto importante relacionado com a escolha do tamanho do passo Δt é que os Δt_{\max} determinados também asseguram estabilidade segundo Lax para os três métodos, pois os ϵ -pseudo espectros das matrizes A_i e de L_N , quando $\epsilon \rightarrow 0$, estão na região de estabilidade do método RK4 (veja teorema 2.8), conforme ilustrado na figura 4.1. Observe nesta figura que o pseudo espectro da matriz L_N é semelhante ao pseudo espectro de A_1 . Note também que os mesmos níveis de perturbação mostram que o pseudo espectro da matriz L_N é maior que o pseudo espectro de A_1 , indicando assim que os autovalores da matriz L_N são um pouco mais sensíveis a pequenas perturbações. Mas isso não afeta a estabilidade do método visto que a partir da perturbação $\epsilon = 10^{-3}$, os ϵ -pseudo espectros da matriz L_N pertencem a região de estabilidade do método RK4.

A conclusão mais importante que resulta das observações acima é que as características de estabilidade das soluções numéricas obtidas a partir de nossa proposta não se deterioram quando comparadas com aquelas dos métodos de Jackiewicz e Renault [19]. Na próxima seção, exemplos numéricos confirmam essa afirmação.

4.1.2 Exemplos numéricos

Para testar o método pseudo espectral de Chebyshev proposto vários problemas da forma (4.2) foram resolvidos usando MATLAB.

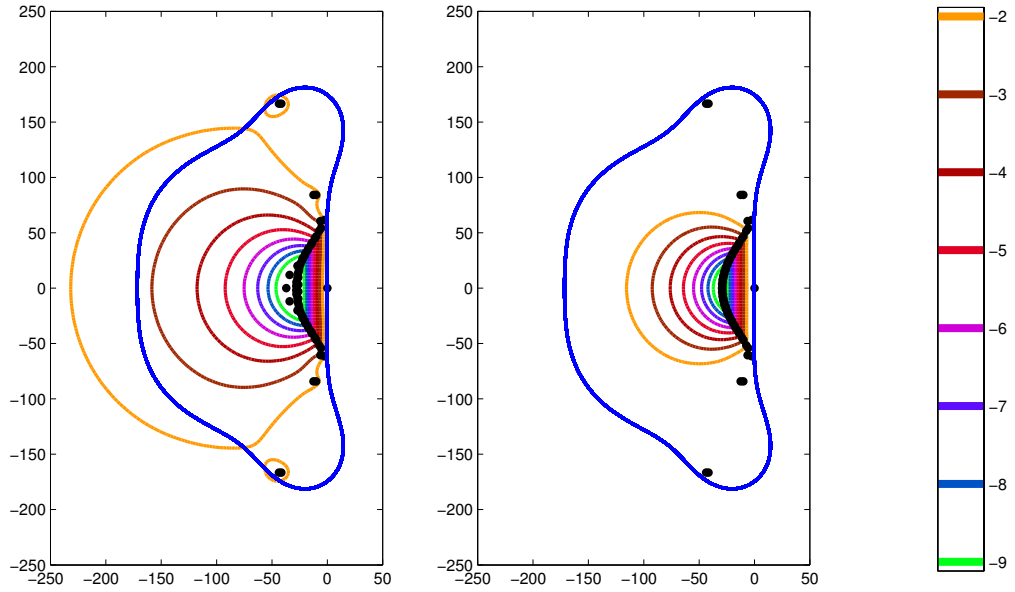


Figura 4.1: Fronteiras do ϵ -pseudo espectro de L_N e A_1 , esquerda e direita respectivamente, com $c = 1$, $N = 31$ e $\epsilon = 10^{-9}, 10^{-7}, \dots, 10^{-2}$ e região de estabilidade do método **RK4**.

No primeiro exemplo, consideramos $c = 1$ e condição iniciais

$$u(x, 0) = f(x) \equiv \exp(-100(x - 0.5)^2), \quad 0 < x < 1, \quad u_t(x, 0) \equiv 0.$$

O número de pontos utilizados foi $N + 1 = 64$ e conforme a tabela 4.1, $\Delta t = 0.004$. O problema foi resolvido no intervalo de tempo $[0, 0.6]$.

Além disso, também implementamos o método pseudo espectral descrito na seção 3.4.1 através da equação (3.53) proposto em [19], com as constantes determinadas por esses autores e com as constantes descritas pela proposição 3.6. Os resultados obtidos pelo método pseudo espectral proposto são apresentados na figura 4.2. Note que neste caso, conforme esperado, as reflexões da solução são completamente eliminadas.

A comparação entre a precisão dos métodos pode ser feita já que a solução exata para o problema unidimensional (4.2) é dada pela equação (3.2). A figura 4.3 ilustra o erro em valor absoluto das soluções numéricas determinadas pelo método pseudo espectral proposto e pelos métodos descritos na seção 3.4.1. Conforme esperado o método proposto é mais preciso já que a solução u é determinada diretamente pelo método **RK4**, enquanto no método de Jackiewicz e Renault, as estimativas para u são determinadas a partir de aproximações para u_t e u_x através do esquema (3.53), fazendo com que o método perca precisão.

O segundo exemplo numérico, foi resolvido sob as mesmas condições do primeiro exemplo, mas com condição inicial $u(x, 0) = f(x) \equiv \exp(-100(x - 0.5)^2)\text{sen}(40(x - 0.5))$. A figura 4.4 apresenta os resultados numéricos obtido com o método pseudo espectral proposto. Nesse caso, as reflexões nas fronteiras também são eliminadas e o erro máximo obtido, entre a solução aproximada e a exata é $6.8821 \cdot 10^{-5}$.

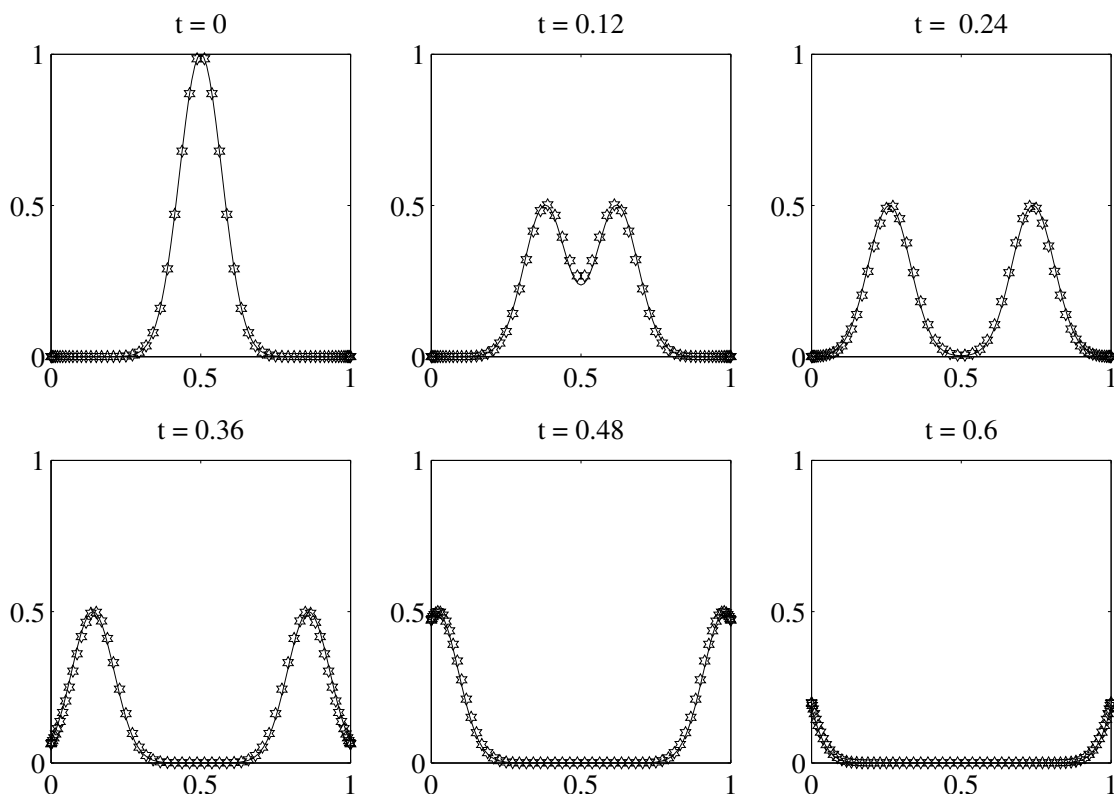


Figura 4.2: Soluções exata (linha contínua) e aproximada (\star , através do método proposto) para a equação da onda unidimensional (4.2) com condição inicial $f(x) = \exp(-100(x - 0.5)^2)$.

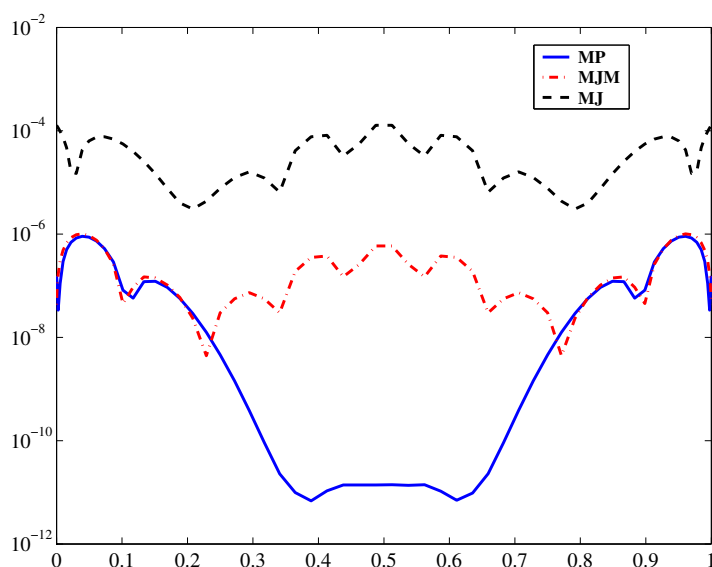


Figura 4.3: Erro em valor absoluto das soluções aproximadas no instante de tempo $t = 0.6$. Com **MP**: O método proposto; **MJM**: O Método de Jackiewicz e Renaut Modificado (proposição 3.6) ; e **MJ**: O Método de Jackiewicz e Renaut (3.53).

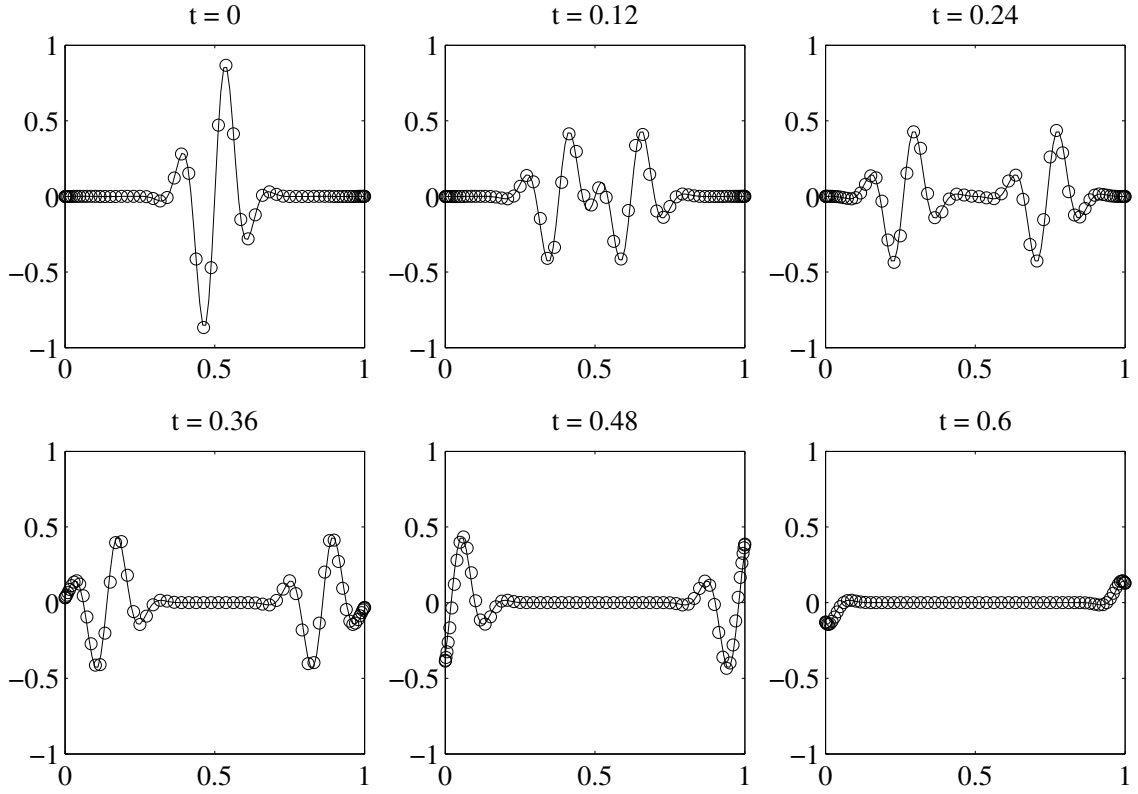


Figura 4.4: Soluções exata (linha contínua) e aproximada (pequenos círculos) para a equação da onda unidimensional (4.2) com condição inicial $f(x) = \exp(-100(x - 0.5)^2)\text{sen}(40(x - 0.5))$.

4.2 Método proposto 2D

Nesta seção propomos para a simulação numérica de propagação de ondas bidimensionais baseados no método das linhas em conjunção com o método pseudo espectral de Chebyshev. A diferença entre os dois métodos, está no tipo de condições de fronteira utilizado. Enquanto no primeiro método, incorporamos as condições de fronteira absorventes de primeira ordem no segundo método, incorporamos as condições de fronteira de segunda ordem, conforme visto na seção 3.5.1.

4.2.1 Método 1: Condições de fronteira absorventes de primeira ordem

Consideramos o problema

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2(u_{xx} + u_{yy}), & 0 < x, y < 1, \quad t > 0 \\ u(x, y, 0) = f(x, y), \quad u_t(x, y, 0) = 0, & \text{Condições Iniciais.} \end{cases} \quad (4.8)$$

com as condições de fronteira

$$\begin{cases} u_t - c u_x = 0, & x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \\ u_t + c u_x = 0, & x = 1, \quad 0 \leq y \leq 1, \\ u_t - c u_y = 0, & y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \\ u_t + c u_y = 0, & y = 1, \quad 0 \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (4.9)$$

O método é uma extensão daquele proposto na seção anterior para o problema unidimensional. Conforme descrito na seção 3.5.2, a aproximação do sistema (4.1) é obtida de maneira análoga a aproximação do sistema (3.58). Vamos fixar cada y_j e considerar

$$\bar{u}_j \doteq [u(x_0, y_j, t), \dots, u(x_N, y_j, t)]^T, \text{ para cada } 0 \leq j \leq N,$$

e representar a matriz D através de suas colunas e linhas, respectivamente. Desprezando os erros de aproximação, temos que

$$\begin{aligned} \bar{u}_{j,xx} &= [d_0 l_0^T + \dots + d_N l_N^T] \bar{u}_j \\ &= \frac{1}{c} d_0 u_t(x_0, y_j, t) + D_1 D_2 \bar{u}_j - \frac{1}{c} d_N u_t(x_N, y_j, t) \\ &= \frac{1}{c} C \bar{u}_{j,t} + D_1 D_2 \bar{u}_j, \end{aligned}$$

pois, $l_0^T \bar{u}_j = u_x(x_0, y_j, t)$ e $l_N^T \bar{u}_j = u_x(x_N, y_j, t)$, e pelas condições de fronteira (4.9)

$$u_x(x_0, y_j, t) = \frac{1}{c} u_t(x_0, y_j, t) \quad \text{e} \quad u_x(x_N, y_j, t) = -\frac{1}{c} u_t(x_N, y_j, t) .$$

Aqui, D_1 , D_2 e C são como na equação (3.47). Dessa forma, a aproximação completa da segunda derivada em relação a x é dada por,

$$\hat{u}_{xx} = \frac{1}{c} (I \otimes C) \hat{u}_t + (I \otimes D_1 D_2) \hat{u} \quad (4.10)$$

com $\hat{u} \doteq [\bar{u}_1^T, \bar{u}_2^T, \dots, \bar{u}_N^T]^T$.

Utilizando o mesmo procedimento para a aproximação da segunda derivada em relação a y , fixando cada x_j e introduzindo a notação $\check{u}_j = [u(x_j, y_0, t), \dots, u(x_j, y_N, t)]^T$, para $0 \leq j \leq N$, temos que

$$\check{u}_{j,yy} = \frac{1}{c} C \check{u}_{j,t} + D_1 D_2 \check{u}_j.$$

Portanto temos que,

$$\begin{aligned} \check{u}_{yy} &= [\check{u}_{0,yy}^T, \dots, \check{u}_{N,yy}^T]^T \\ &= \frac{1}{c} (I \otimes C) \check{u}_t + (I \otimes D_1 D_2) \check{u}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Aplicando uma matriz permutação apropriada (veja proposição A.3), para reorganizar as variáveis \check{u}_{yy} obtemos:

$$\hat{u}_{yy} = \frac{1}{c} (C \otimes I) \hat{u}_t + (D_1 D_2 \otimes I) \hat{u} \quad (4.12)$$

De (4.10) e (4.12) obtemos o seguinte sistema de EDO's de segunda ordem:

$$\hat{u}_{tt} = c(C \otimes I + I \otimes C) \hat{u}_t + c^2 (D_1 D_2 \otimes I + I \otimes D_1 D_2) \hat{u} \quad (4.13)$$

Transformando (4.13) em um sistema de EDO's de primeira ordem, obtemos o seguinte modelo semi discreto para o problema de propagação de ondas 2D:

$$\begin{cases} V_t = M_1 V, \\ V(0) = [\hat{f}, O]^T \end{cases}, \quad \text{com } M_1 = \begin{bmatrix} O & I \\ c^2 \hat{D} & c \hat{C} \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{u}_t \end{bmatrix}, \quad (4.14)$$

em que

$$\hat{f} \doteq [f(x_0, y_0), \dots, f(x_N, y_0), \dots, f(x_0, y_N), \dots, f(x_N, y_N)]^T,$$

$$\hat{D} = (I \otimes D_1 D_2 + D_1 D_2 \otimes I), \quad \hat{C} = (I \otimes C + C \otimes I).$$

Observação 4.1 *Diferente do método pseudo espectral proposto, que determina o deslocamento u a cada passo do tempo, os modelos bidimensionais de Jackiewicz e Renault [19], como no caso unidimensional, também determinam aproximações para as derivadas u_t , u_x e u_y , conforme descrito pelos sistemas (3.48) e (3.51).*

A próxima proposição, apresenta uma relação entre os autovalores das matrizes M_1 , descrita pelo sistema semi discreto (4.14) e A_1 , descrita pelo sistema semi discreto (3.76). Observe que a dimensão da matriz M_1 é muito menor que a dimensão da matriz A_1 . Enquanto a dimensão da matriz M_1 é $2(N+1)^2$, a dimensão de A_1 é $2(N+1)(N-1) + (N+1)^2$. A figura 4.5 (esquerda) apresenta o espectro e os ϵ -pseudo espectros da matriz M_1 .

Proposição 4.2 *O espectro da matriz M_1 definida pelo sistema 4.14 satisfaz:*

$$\wedge(A_1) = \wedge(M_1) \cup \{0\}.$$

Demonstração: Usando a propriedade do produto kronecker:

$$AC \otimes BD = (A \otimes B)(C \otimes D),$$

veja a proposição A.2 no apêndice A, podemos escrever M_1 da seguinte forma:

$$M_1 = \begin{bmatrix} I & O & O \\ C \otimes I + I \otimes C & c^2(D_1 \otimes I) & c^2(I \otimes D_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O & I \\ D_2 \otimes I & O \\ I \otimes D_2 & O \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Por outro lado,

$$A_1 = \begin{bmatrix} O & I \\ D_2 \otimes I & O \\ I \otimes D_2 & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & O & O \\ C \otimes I + I \otimes C & c^2(D_1 \otimes I) & c^2(I \otimes D_1) \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

Portanto, utilizando a propriedade 4.6 utilizada na prova da proposição 4.1: o espectro não nulo de duas matrizes A, B satisfaz $\wedge(AB) = \wedge(BA)$, segue o resultado. \square

4.2.2 Método 2: Condições de fronteira absorventes de segunda ordem

Neste caso o problema é modelado por

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2(u_{xx} + u_{yy}), & 0 < x, y < 1, \quad t > 0 \\ u(x, y, 0) = f(x, y), \quad u_t(x, y, 0) = 0, & \text{Condições Iniciais.} \end{cases} \quad (4.17)$$

com as condições de fronteira

$$\begin{cases} u_{tt} = c u_{xt} + \frac{c^2}{2} u_{yy}, & x = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \\ u_{tt} = -c u_{xt} + \frac{c^2}{2} u_{yy}, & x = 1, \quad 0 \leq y \leq 1, \\ u_{tt} = c u_{yt} + \frac{c^2}{2} u_{xx}, & y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \\ u_{tt} = -c u_{yt} + \frac{c^2}{2} u_{xx}, & y = 1, \quad 0 \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (4.18)$$

Neste método, resolvemos o problema (4.8) sujeito as condições de fronteira (4.18). E como em cada um dos cantos (x_0, y_0) , (x_N, y_0) , (x_0, y_N) e (x_N, y_N) , as condições de fronteira (4.18) são aplicadas duas vezes, para incluir estas equações no esquema numérico, vamos utilizar a média:

$$\begin{cases} u_{tt} = \frac{c}{2}(u_{xt} + u_{yt}) + \frac{c^2}{4}(u_{xx} + u_{yy}) & x = 0, y = 0, \\ u_{tt} = \frac{c}{2}(u_{yt} - u_{xt}) + \frac{c^2}{4}(u_{xx} + u_{yy}) & x = 1, y = 0, \\ u_{tt} = \frac{c}{2}(u_{xt} - u_{yt}) + \frac{c^2}{4}(u_{xx} + u_{yy}) & x = 0, y = 1, \\ u_{tt} = -\frac{c}{2}(u_{xt} + u_{yt}) + \frac{c^2}{4}(u_{xx} + u_{yy}) & x = 1, y = 1, \end{cases} \quad (4.19)$$

A incorporação das condições de fronteira de segunda ordem, no modelo bidimensional é mais complicada. Por esta razão, vamos apresentar a aproximação das derivadas parciais das incógnitas nos pontos da malha (x_j, y_0) , $0 \leq j \leq N$ (que incluem os vértices $(0,0)$ e $(1,0)$). Antes disso, lembramos que o vetor de incógnitas é

$$\hat{u} = [\bar{u}_0^T, \dots, \bar{u}_N^T]^T, \quad \text{com} \quad \bar{u}_j = [u(x_0, y_j, t), \dots, u(x_N, y_j, t)]^T, \quad 0 \leq j \leq N,$$

e que as derivadas de primeira e segunda ordem da função u , usando a matriz de diferenciação de Chebyshev D , nos pontos da malha satisfaz aproximadamente

$$\begin{aligned} \hat{u}_x &= (I \otimes D)\hat{u}, & \tilde{u}_y &= (D \otimes I)\hat{u}, \\ \hat{u}_{xx} &= (I \otimes D^2)\hat{u}, & \hat{u}_{yy} &= (D^2 \otimes I)\hat{u}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Agora observamos que para incorporar as condições de fronteira que incluem ao mesmo tempo os vértices $(0,0)$ e $(1,0)$, devemos discretizar as derivadas parciais do conjunto de equações

$$\bar{u}_{0,tt} = \begin{bmatrix} \frac{c}{2}[u_{xt}(x_0, y_0, t) + u_{yt}(x_0, y_0, t)] + \frac{c^2}{4}[u_{xx}(x_0, y_0, t) + u_{yy}(x_0, y_0, t)] \\ c u_{yt}(x_1, y_0, t) + \frac{c^2}{2}u_{xx}(x_1, y_0, t) \\ \vdots \\ c u_{yt}(x_{N-1}, y_0, t) + \frac{c^2}{2}u_{xx}(x_{N-1}, y_0, t) \\ \frac{c}{2}[u_{yt}(x_N, y_0, t) - u_{xt}(x_N, y_0, t)] + \frac{c^2}{4}[u_{xx}(x_N, y_0, t) + u_{yy}(x_N, y_0, t)] \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

em que

$$\bar{u}_{0,tt} \doteq [u_{tt}(x_0, y_0, t), u_{tt}(x_1, y_0, t), \dots, u_{tt}(x_N, y_0, t)]^T.$$

Para facilitar a notação tomamos $M = N + 1$. Usando os resultados (4.20), o conjunto de equações (4.21) torna-se:

$$\bar{u}_{0,tt} = c \begin{bmatrix} \frac{1}{2}e_1^T(D \otimes I + I \otimes D) \\ e_2^T(D \otimes I) \\ \vdots \\ e_{M-1}^T(D \otimes I) \\ \frac{1}{2}e_M^T(D \otimes I - I \otimes D) \end{bmatrix} \hat{u}_t + c^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{4}e_1^T(D^2 \otimes I + I \otimes D^2) \\ \frac{1}{2}e_2^T(I \otimes D^2) \\ \vdots \\ \frac{1}{2}e_{M-1}^T(I \otimes D^2) \\ \frac{c^2}{4}e_M^T(D^2 \otimes I + I \otimes D^2) \end{bmatrix} \hat{u}. \quad (4.22)$$

Aqui, e_k , $1 \leq k \leq M^2$, denota o k -ésimo vetor coluna da matriz identidade de ordem M^2 .

Utilizando o mesmo procedimento para $u_{j,tt}$ com $j = 1, \dots, N-1$, obtemos:

$$\bar{u}_{j,tt} = c \begin{bmatrix} e_{Mj+1}^T(I \otimes D) \\ 0_{1 \times M^2} \\ \vdots \\ 0_{1 \times M^2} \\ -e_{M(j+1)}^T(I \otimes D) \end{bmatrix} \hat{u}_t + c^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{2}e_{Mj+1}^T(D^2 \otimes I) \\ e_{Mj+2}^T(I \otimes D^2 + D^2 \otimes I) \\ \vdots \\ e_{M(j+1)-1}^T(I \otimes D^2 + D^2 \otimes I) \\ \frac{1}{2}e_{M(j+1)}^T(D^2 \otimes I) \end{bmatrix} \hat{u}, \quad (4.23)$$

e para $j = N$,

$$\bar{u}_{N,tt} = c \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}e_{M^2-M+1}^T(D \otimes I - I \otimes D) \\ -e_{M^2-M+2}^T(D \otimes I) \\ \vdots \\ -e_{M^2-1}^T(D \otimes I) \\ -\frac{1}{2}e_{M^2}^T(D \otimes I + I \otimes D) \end{bmatrix} \hat{u}_t + c^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{4}e_{M^2-M+1}^T(D^2 \otimes I + I \otimes D^2) \\ \frac{1}{2}e_{M^2-M+2}^T(I \otimes D^2) \\ \vdots \\ \frac{1}{2}e_{M^2-1}^T(I \otimes D^2) \\ \frac{1}{4}e_{M^2}^T(D^2 \otimes I + I \otimes D^2) \end{bmatrix} \hat{u} \quad (4.24)$$

Denotando $U(t)$ como uma aproximação para o vetor $[\bar{u}_{0,tt}, \bar{u}_{1,tt}, \dots, \bar{u}_{N,tt}]^T$ e usando as equações (4.22), (4.23) e (4.24), o método pseudo espectral de Chebyshev leva ao sistema de EDO's semi discreto de segunda ordem:

$$U_{tt} - c\hat{F} U_t - c^2\hat{G} U = 0. \quad (4.25)$$

com

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} F_0 \\ \vdots \\ F_N \end{bmatrix}, \quad \hat{G} = \begin{bmatrix} G_0 \\ \vdots \\ G_N \end{bmatrix}$$

em que $F_j, G_j \in \mathbb{R}^{M \times M^2}$ são descritas implicitamente nas equações (4.22), (4.23) e (4.24). Introduzindo $V(t) = [U(t), U_t(t)]^T$, o sistema de segunda ordem (4.25) pode ser reescrito como um sistema de primeira ordem da forma:

$$\begin{cases} V_t = M_2 V \\ V(0) = [\hat{f}, 0_{1 \times M^2}]^T \end{cases}, \quad \text{com } M_2 = \begin{bmatrix} 0 & I \\ c\hat{F} & c^2\hat{G} \end{bmatrix}, \quad (4.26)$$

com $\hat{f} = [f(x_0, y_0), \dots, f(x_N, y_0), \dots, f(x_0, y_N), \dots, f(x_N, y_N)]^T$.

4.2.3 Considerações sobre estabilidade numérica dos métodos 2D

Analogamente ao caso 1D, vamos analisar a escolha do tamanho de passo Δt que assegura a estabilidade numérica dos métodos 2D propostos. Para tanto, foram estimados o raio espectral das matrizes M_1 e M_2 e verificado que os autovalores de maior valor absoluto dessas matrizes são reais. Neste caso, as estimativas para o tamanho de passo são mais precisas que no caso unidimensional e obtidas através da fórmula:

$$\Delta t_{\max} = \frac{2.78}{r(M_i)}, \quad i = 1, 2. \quad (4.27)$$

em que 2.78 é o ponto de intersecção da região de estabilidade do método RK4 com o semi-eixo negativo x (veja seção 2.1.1). Os valores Δt_{\max} apresentados na tabela 4.2 garantem a estabilidade segundo autovalores para os métodos 1 e 2. Observe que pela proposição 4.2, os tamanhos de passo Δt obtidos para M_1 , através de (4.27), são também válidos para A_1 do método de Jackiewicz e Renault [19]. Outra observação que deve ser feita é que o método 2 apresenta a vantagem de exigir um tamanho de passo menos restritivo do que aquele do método 1.

$N + 1$	Δt_{\max} : Método 1	Δt_{\max} : Método 2
8	0.05175	0.11527
16	0.01154	0.02546
32	0.00271	0.00598
64	0.0004	0.0015

Tabela 4.2: Tamanho de passo Δt máximo que garante a estabilidade segundo autovalores, para diferentes dimensões $N + 1$, para as matrizes M_1 e M_2 .

O espectro e os ϵ -pseudo espectros das matrizes M_1 e M_2 são apresentados na figura 4.5, esquerda e direita, respectivamente. Uma análise de estabilidade segundo Lax também foi desenvolvida através da localização do ϵ -pseudo espectro das matrizes no plano complexo para vários valores de ϵ . A conclusão foi que com Δt_{\max} descrito na tabela e ϵ suficientemente pequeno, o ϵ -pseudo espectro localiza-se dentro da região de estabilidade do método **RK4**, verificando com isso que os métodos 2D propostos são também Lax estáveis. As ilustrações gráficas são desconsideradas por não serem tão informativas quanto aquelas do caso 1D (veja fig. 4.1) devido a presença de outliers reais (autovalores muito grandes que fogem do padrão).

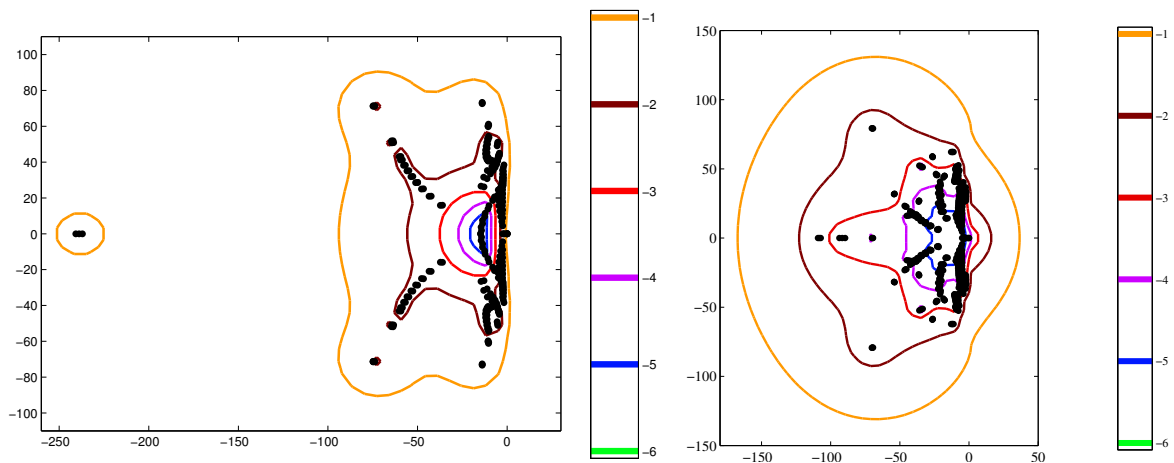


Figura 4.5: Espectro e ϵ - pseudo espectros da matriz M_1 e M_2 com $\epsilon = 10^{-6}, 10^{-5}, \dots, 10^{-1}$ e $N + 1 = 16$.

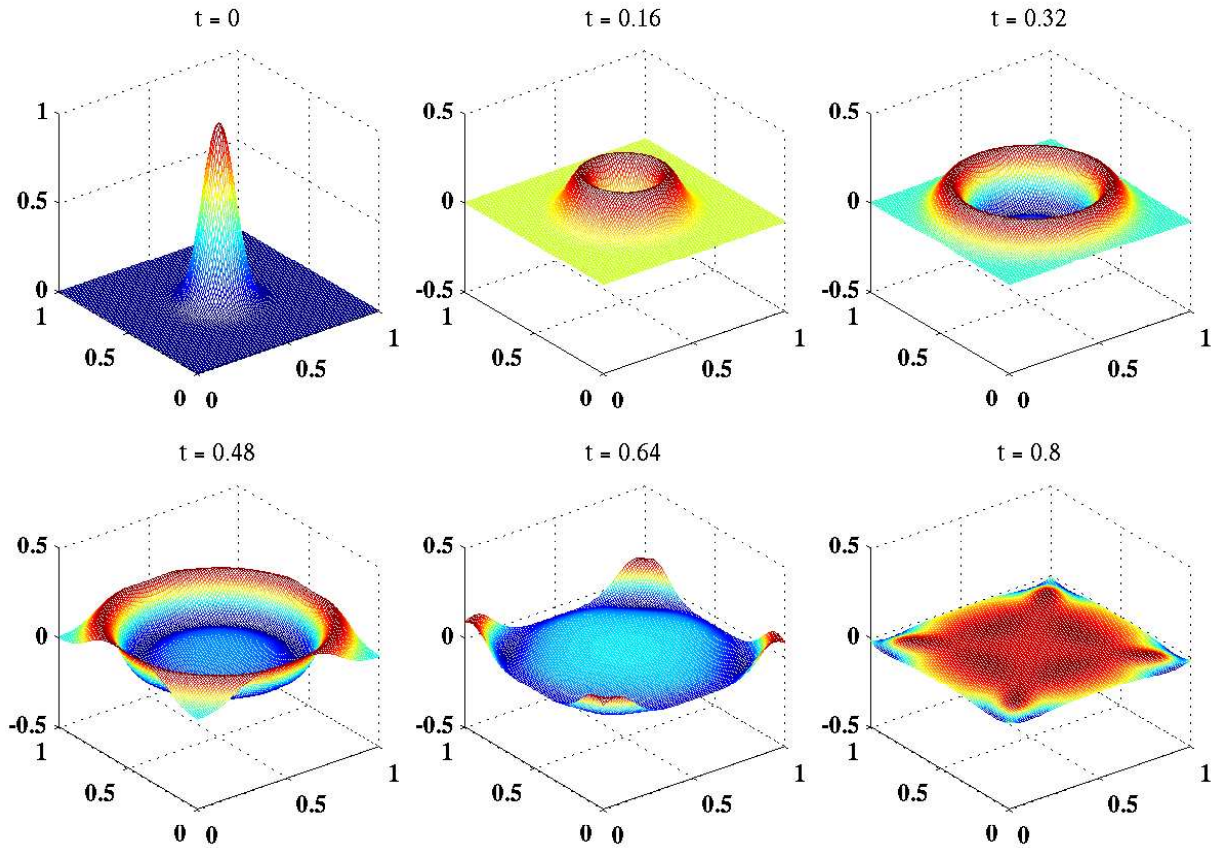


Figura 4.6: Solução aproximada para o problema bidimensional (4.8) através do método 1.

4.2.4 Exemplo numérico

Para testar os métodos propostos para o problema bidimensional (4.8), escolhemos $c = 1$, $N + 1 = 32$, $\Delta t = 0.002$ (para o método 1) e $\Delta t = 0.005$ (para o método 2), no intervalo de tempo $[0, 0.8]$ e a condições inicial

$$u(x, y, 0) = f(x, y) \equiv \exp(-100(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2), \quad 0 < x, y < 1.$$

Os resultados numéricos obtidos pelo método 1, são apresentados na figura 4.6. Observe que nesse caso, diferente do caso unidimensional, as condições de fronteira (4.9) não eliminam completamente as reflexões, conforme apresentado pela tabela 3.3, na seção 3.5.1. Já para o método 2, os resultados são apresentados na figura 4.7, e pelo fato de serem usadas condições de fronteira absorventes de segunda ordem, espera-se que o método 2 obtenha resultados mais precisos.

Entretanto, é importante enfatizar que não podemos comparar de maneira precisa os erros entre os métodos 1 e 2, já que a solução exata para o problema (4.8) sujeito as condições de fronteira de primeira ordem (4.9) e segunda ordem (4.18) não é conhecida. Para contornar esta dificuldade, assumiremos que o método pseudo espectral proposto baseado em condições de segunda ordem é capaz de calcular a solução exata do problema desde que N seja suficientemente grande. Enfatizamos que esta é uma hipótese plausível por causa da alta precisão atingida através da matriz de diferenciação de Chebyshev (veja prop. 1.6). Baseados neste argumento, daqui em

diante consideraremos como a solução “exata” do problema, aquela obtida pelo método 2 com $N + 1 = 80$.

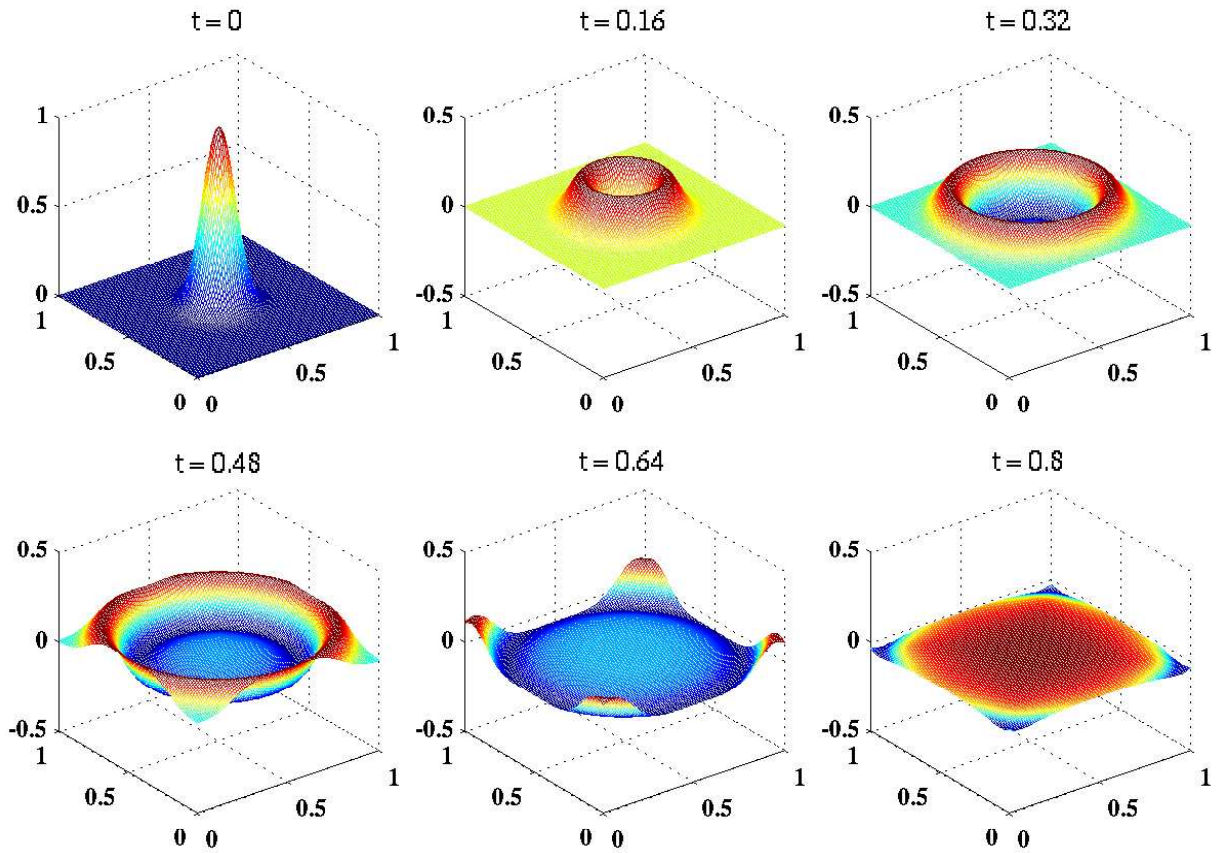


Figura 4.7: Solução aproximada para o problema bidimensional (4.8), através do método 2.

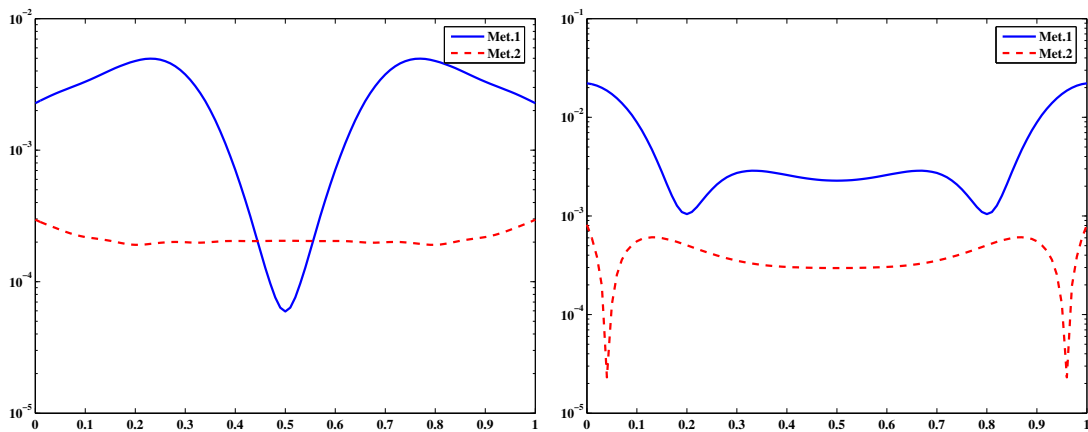


Figura 4.8: Comparação entre o erro das soluções obtidas pelos métodos 1 e 2, com $y = 0.5$ (esquerda) e $y = 1$ (direita).

A precisão dos métodos pseudo espectrais para o problema de propagação de ondas bidimen-

sional é ilustrada através das figuras 4.8 e 4.9. Para ilustrar a precisão dos métodos usaremos $u_{\text{ex}}(x, y, t)$ para denotar a solução “exata” e $\hat{u}(x, y, t)$ para denotar a solução obtida pelos métodos 1 e 2 respectivamente, com $N = 31$, e definimos o erro através de

$$E(x, y, t) = |u_{\text{ex}}(x, y, t) - \hat{u}(x, y, t)|$$

com x e y variando em uma malha de 100 pontos igualmente espaçados em ambas as direções, no instante de tempo $t = 0.8$. Os valores das funções nessa malha foram calculados através de um processo de interpolação bidimensional usando a função MATLAB [37] *interp2.m*. Na figura 4.8 à esquerda fixamos $y = 0.5$ e apresentamos o erro na variável x . Enquanto, à direita fixamos $y = 1$.

Na figura 4.9 apresentamos o erro $E(x, y, t)$ em todo o domínio Ω . A superioridade do método 2 em relação ao método 1 é evidente nesta figura.

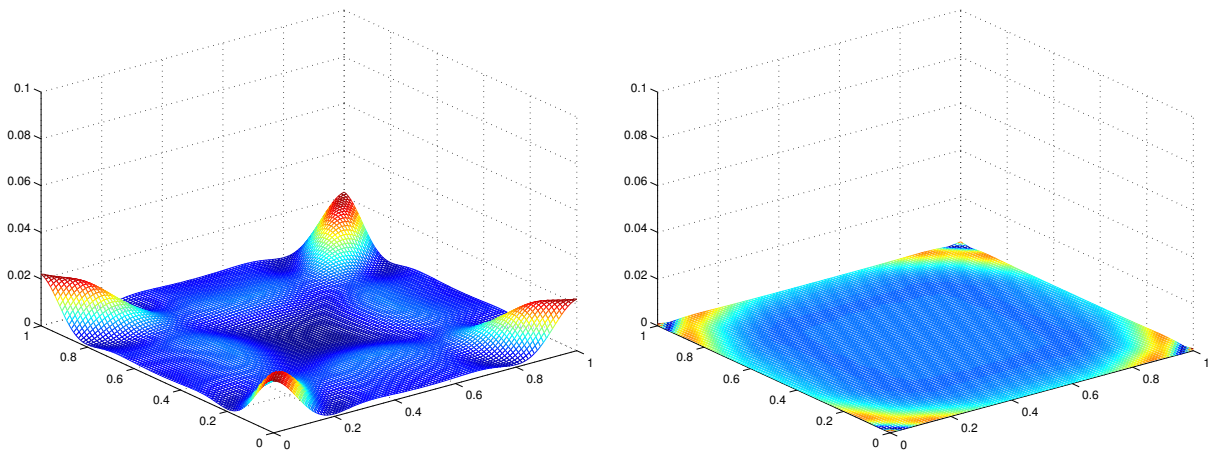


Figura 4.9: Erro entre a solução aproximada e a solução “exata”, através do método 1 (esquerda) e através do método 2 (direita).

Para obter soluções aproximadas mais precisas, ou seja, diminuir reflexões indesejadas, faz-se necessário incorporar condições de fronteira mais sofisticadas. Mas vale ressaltar que as condições de fronteira absorventes de ordens maiores tornam-se cada vez mais difíceis de serem incorporadas.

Conclusões Finais

Temos apresentado uma análise espectral de métodos pseudo espectrais de Chebyshev para a simulação numérica de fenômenos de propagação de ondas. A principal vantagem dos métodos pseudo espectrais está na simplicidade de seu esquema, bem como na alta precisão da aproximação das derivadas espaciais através da matriz de diferenciação de Chebyshev. A estabilidade do método das linhas é garantida através da análise pseudo espectral do operador ou da matriz envolvida.

A análise pseudo espectral faz-se necessária para prever o comportamento do operador evolução $\exp(t\mathcal{A})$, já que os operadores \mathcal{A} associados ao problema de propagação de ondas são fortemente não normais. Nesse caso, a análise espectral pode ser insuficiente pois o espectro torna-se muito sensível a pequenas perturbações.

A análise espectral resultou na descrição de fórmulas fechadas para o auto sistema do operador associado ao problema de propagação de ondas unidimensional, que generaliza resultados de Driscoll e Trefethen [9]. E em uma revisão de um método pseudo espectral descrito em [19] que permitiu:

- a. Mostrar a falsidade de uma conclusão nesse trabalho a respeito das matrizes associadas a dois modelos semidiscretos.
- b. Apresentar um método pseudo espectral de Chebyshev para o problema com praticamente as mesmas características de estabilidade dos métodos propostos em [19]. Além disso, o método proposto tem a vantagem de determinar a solução a cada passo de tempo, o que evita a perda de precisão.

Outra contribuição, surge nas seções 3.1.1 e 3.5.1, nas quais apresentamos a importância da escolha das condições de fronteira, que diminuam ou até mesmo evitem reflexões indesejadas. Para o modelo unidimensional incorporamos as condições de fronteira transparentes e então as reflexões indesejadas foram completamente eliminadas. Entretanto, para o modelo bidimensional as mesmas condições de fronteira são absorventes. Resultados preliminares do trabalho podem ser encontrados em [5, 6].

Na teoria apresentada nos capítulos 1 e 2 foram introduzidas as ferramentas e resultados necessários para garantir a eficiência dos métodos descritos no capítulo 3 e dos métodos propostos no capítulo 4. A revisão dos métodos descritos em [9, 19] foram essenciais para o desenvolvimento do método pseudo espectral de Chebyshev proposto, no capítulo 4. A qualidade dos resultados do método foram convenientemente ilustrados através de simulações numéricas. Além disso, apresentamos resultados numéricos para o modelo bidimensional, com condições de fronteira absorventes de primeira e de segunda ordem. Os dois esquemas foram comparados e conforme o esperado, soluções numéricas mais precisas foram obtidas com a imposição de condições de fronteira de segunda ordem.

Como indicação para trabalhos futuros propomos:

- i. A análise espectral do operador associado ao problema bidimensional, visto que esse resultado não aparece na literatura.
- ii. A análise de estabilidade do método das linhas dos sistemas semi discretos, já que a estabilidade numérica foi descrita no capítulo 4.
- iii. O desenvolvimento de métodos pseudo espectrais para o modelo bidimensional com outras metodologias para eliminar as reflexões indesejadas.

Apêndice A

Produto Kronecker

Nesta seção apresentaremos de maneira sucinta a definição e algumas propriedades do produto Kronecker entre duas matrizes. O leitor que queira aprofundar seu estudo, bem como detalhes das demonstrações omitidas, pode dirigir-se a [21]. A noção de produto Kronecker e suas propriedades são pré-requisitos para as seções 1.3, 3.5.2 e 4.2.

O produto Kronecker é uma operação entre matrizes,

$$\otimes : \mathcal{C}^{m \times l} \times \mathcal{C}^{n \times k} \longrightarrow \mathcal{C}^{mn \times lk}$$

Definição A.1 Se $A \in \mathcal{C}^{m \times m}$, $B \in \mathcal{C}^{n \times n}$ então o produto Kronecker de A e B , denotado por $A \otimes B$ é definido pela matriz,

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1m}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2m}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mm}B \end{bmatrix} = [a_{ij}B]_{i,j=1}^m \in \mathcal{C}^{mn \times mn}$$

Por exemplo,

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad B = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

então

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} 1a & 1b & 2a & 2b \\ 1c & 1d & 2c & 2d \\ 3a & 3b & 4a & 4b \\ 3c & 3d & 4c & 4d \end{bmatrix}$$

As seguintes propriedades são conseqüências imediatas da definição A.1.

Propriedades A.1 Seja $A \in \mathcal{C}^{m \times m}$. Então,

i. $I_n \otimes A = \text{diag}(A, A, \dots, A)$.

ii.

$$A \otimes I_n = \begin{bmatrix} a_{11}I_n & a_{12}I_n & \cdots & a_{1m}I_n \\ a_{21}I_n & a_{22}I_n & \cdots & a_{2m}I_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}I_n & a_{m2}I_n & \cdots & a_{mm}I_n \end{bmatrix}$$

$$\text{iii. } I_m \otimes I_n = I_{mn}.$$

Com I_n representando a matriz identidade de ordem n e diag denota uma matriz diagonal por blocos.

Proposição A.1 Se as ordens das matrizes envolvidas são tais que todas as operações são definidas. Então,

$$\text{i. } \text{Se } \mu \in \mathbb{R} \text{ ou } \mathbb{C}, (\mu A) \otimes B = A \otimes (\mu B) = \mu(A \otimes B).$$

$$\text{ii. } ((A + B) \otimes C) = (A \otimes C) + (B \otimes C).$$

$$\text{iii. } A \otimes (B + C) = (A \otimes B) + (A \otimes C).$$

$$\text{iv. } A \otimes (B \otimes C) = (A \otimes B) \otimes C.$$

$$\text{v. } (A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T.$$

Proposição A.2 Se $A, C \in \mathcal{C}^{m \times m}$ e $B, D \in \mathcal{C}^{n \times n}$ então $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$.

Demonstração: Como $A \otimes B = [a_{ij}B]_{i,j=1}^m$, $C \otimes D = [c_{ij}D]_{i,j=1}^m$ então o ij -ésimo bloco de $(A \otimes B)(C \otimes D)$ é

$$F_{ij} = \sum_{k=1}^m (a_{ik}B)(c_{kj}D) = \sum_{k=1}^m (a_{ik}c_{kj})BD \text{ para } 0 \leq i, j \leq m.$$

Por outro lado, pela definição A.1 $AC \otimes BD = [\delta_{ij}BD]_{i,j=1}^m$ onde δ_{ij} é o ij -ésimo elemento de AC , dado por

$$\delta_{ij} = \sum_{k=1}^m a_{ik}c_{kj}.$$

Assim, $F_{ij} = \delta_{ij}BD$ para cada par i, j . E portanto, $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$. □

Corolário A.1 Se $A \in \mathcal{C}^{m \times m}$, $B \in \mathcal{C}^{n \times n}$ então,

$$\text{i. } A \otimes B = (A \otimes I_n)(I_m \otimes B) = (I_m \otimes B)(A \otimes I_n).$$

$$\text{ii. } (A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \text{ desde que } A^{-1} \text{ e } B^{-1} \text{ existam.}$$

Proposição A.3 Se $A \in \mathcal{C}^{m \times m}$ e $B \in \mathcal{C}^{n \times n}$ então existe uma matriz permutação $P \in \mathcal{R}^{mn \times mn}$ tal que $P^T(A \otimes B)P = B \otimes A$.

Demonstração: Observe que com uma mudança simultânea de linhas e colunas, a matriz $A \otimes I_n$ pode ser reduzida a matriz $I_n \otimes A$. Por exemplo,

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix},$$

então

$$A \otimes I_2 = \begin{bmatrix} a & 0 & b & 0 \\ 0 & a & 0 & b \\ c & 0 & d & 0 \\ 0 & c & 0 & d \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} a & 0 & b & 0 \\ c & 0 & d & 0 \\ 0 & a & 0 & b \\ 0 & c & 0 & d \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ c & d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & b \\ 0 & 0 & c & d \end{bmatrix} = I_2 \otimes A.$$

Assim, existe uma matriz permutação P tal que $P^T(A \otimes I_n)P = I_n \otimes A$. Da mesma forma, a mesma matriz P transforma $P^T(I_m \otimes B)P = B \otimes I_m$. Como $PP^T = I$, usando o corolário A.1 temos que

$$P^T(A \otimes B)P = P^T(A \otimes I_n)(I_m \otimes B)P = P^T(A \otimes I_n)PP^T(I_m \otimes B)P = (I_n \otimes A)(B \otimes I_m) = B \otimes A.$$

□

Lema A.1 Se $A \in \mathcal{C}^{m \times m}$ e $B \in \mathcal{C}^{n \times n}$ então $\det(A \otimes B) = [\det(A)]^n [\det(B)]^m$.

Demonstração: Do corolário A.1 temos que $A \otimes B = (A \otimes I_n)(I_m \otimes B)$. Com $I_m \otimes B = \text{diag}(B, B, \dots, B)$ e $P^T(A \otimes I_n)P = I_n \otimes A = \text{diag}(A, A, \dots, A)$. Como $\det(P) = 1$ temos que

$$\begin{aligned} \det(I_m \otimes B) &= \det(\text{diag}(B, B, \dots, B)) = [\det(B)]^m \\ \det(A \otimes I_n) &= \det(\text{diag}(A, A, \dots, A)) = [\det(A)]^n \end{aligned} \quad .$$

Portanto, $\det(A \otimes B) = [\det(A)]^n [\det(B)]^m$.

□

Apêndice B

Semigrupos de Operadores: Conceitos e resultados básicos

O objetivo desta seção é apresentar de maneira sucinta a definição e algumas propriedades da teoria de semigrupos de operadores. O leitor que queira aprofundar seu estudo, bem como detalhes das demonstrações omitidas, pode dirigir-se a [25]. A teoria de semigrupos a um parâmetro aparece em muitas áreas da matemática aplicada. Em geral, os semigrupos são associados a problemas de Cauchy:

$$\begin{cases} u_t(t) = Au(t) & t > 0 \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

onde \mathcal{A} é um operador linear em \mathcal{B} um espaço de Banach complexo. A solução formal de (B.1) é: $u(t) = T(t)u_0$ onde $T(t) = \exp(t\mathcal{A})$ e u_0 uma condição inicial. Se \mathcal{A} é um operador linear limitado, $\exp(t\mathcal{A})$ pode ser definido através da série:

$$\exp(t\mathcal{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{A})^n}{n!}.$$

A dificuldade surge quando \mathcal{A} é não limitado. Nesse caso o operador $\exp(t\mathcal{A})$ é definido através da teoria de semigrupos.

Definição B.1 *Um semigrupo a um parâmetro em \mathcal{B} é uma família de operadores lineares $T(t) : \mathcal{B} \mapsto \mathcal{B}$, onde t é um parâmetro real, não-negativo que satisfaz:*

- i. $T(0) = I$, onde I é o operador identidade em \mathcal{B} .*
- ii. Se $0 \leq s, t < \infty$ então $T(s)T(t) = T(s+t)$.*
- iii. A aplicação $(t, f) \mapsto T(t)f$ de $[0, \infty) \times \mathcal{B}$ em \mathcal{B} é contínua.*

O uso de semigrupos é apropriado se o operador \mathcal{A} independente do tempo. Muitos estudos envolvem a análise do comportamento assintótico de $T(t)f$ quando $t \rightarrow \infty$. Por outro lado, se a lei de evolução é uma aproximação de uma equação evolução não linear a análise de curtos períodos do comportamento, pode ser mais importante.

Observação B.1 *O parâmetro t , geralmente é interpretado como o tempo, no caso em que o semigrupo descreve a evolução de um sistema.*

Dizemos que $T(t)$ é um *semigrupo de classe C_0* , ou C_0 *semigrupo*, quando

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \|(T(t) - I)u\| = 0 \quad \forall u \in \mathcal{B}.$$

Definição B.2 O gerador infinitesimal A de um semigrupo $T(t)$ é definido por

$$Af = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{T(t)f - f}{t} \quad (\text{B.2})$$

onde A é um operador, $A : D(A) \mapsto \mathcal{B}$, com $D(A) = \{u \in \mathcal{B} : \text{o limite (B.2) exista}\}$.

Da definição B.2 segue que A é um operador linear e que $D(A)$ é um subespaço vetorial de \mathcal{B} . Além disso, obtemos dois resultados:

Lema B.1 O subespaço $D(A)$ é denso em \mathcal{B} e é invariante sobre $T(t)$, no sentido que $T(D(A)) \subseteq D(A) \forall t \geq 0$.

Demonstração: Se $u \in \mathcal{B}$ e

$$u_t = \int_0^t T(x)u dx$$

então

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(T(h) - I)u_t}{h} &= \lim_{h \rightarrow 0} h^{-1} \left\{ T(h) \int_0^t T(x)u dx - \int_0^t T(x)u dx \right\} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} h^{-1} \left\{ \int_0^{t+h} T(x)u dx - \int_0^t T(x)u dx \right\} \\ &= T(t)u - u \end{aligned}$$

Portanto $u_t \in D(A)$ e $Au_t = (T(t) - I)u$. Como $t^{-1}u_t \rightarrow u$ em norma quando $t \rightarrow 0$, segue que $\overline{D(A)} = \mathcal{B}$. □

Lema B.2 O gerador infinitesimal A de um semigrupo a um parâmetro $T(t)$ é um operador fechado.

Demonstração: Sejam

$$u_n \in D(A), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u \quad \text{e} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Au_n = v.$$

Vamos precisar do resultado auxiliar ¹: Se $u \in D(A)$ então

$$(T(t) - I)u = \int_0^t T(x)Audx.$$

Então,

$$\begin{aligned} (T(t) - I)u &= \lim_{n \rightarrow \infty} (T(t) - I)u_n \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^t T(x)Au_n dx \\ &= \int_0^t T(x)v dx \end{aligned}$$

Portanto,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{(T(t) - I)u}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} \int_0^t T(x)v dx = v.$$

Então $u \in D(A)$ e $Au = v$. □

¹A demonstração deste fato encontra-se em [8] e aqui será omitida.

Teorema B.1 *Seja $T(t)$ um C_0 semigrupo. Então existem constantes $w \geq 0$ e $M \geq 1$ tais que*

$$\|T(t)\| \leq M \exp(wt) \text{ para } 0 \leq t < \infty. \quad (\text{B.3})$$

Seja $T(t)$ um C_0 semigrupo. Do teorema B.1 segue que existem constantes $w \geq 0$ e $M \geq 1$ tais que (B.3) é válida. Se $w = 0$, $T(t)$ é limitado uniformemente. Além disso, se $M = 1$, $T(t)$ é um C_0 semigrupo de contrações.

Teorema B.2 (Hille Yosida) *Um operador linear \mathcal{A} não limitado é o gerador infinitesimal de um C_0 semigrupo de contrações $T(t)$, $t \geq 0$ se e somente se,*

- i. \mathcal{A} é fechado e $\overline{D(\mathcal{A})} = \mathcal{B}$.
- ii. O conjunto resolvente $\rho(\mathcal{A})$ contém \mathcal{R}^+ e para todo $z > 0$,

$$\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| \leq \frac{1}{z}. \quad (\text{B.4})$$

Corolário B.1 *Seja \mathcal{A} um gerador de um C_0 semigrupo de contrações $T(t)$. O conjunto resolvente de \mathcal{A} contém o semi plano direito, isto é, $\rho(\mathcal{A}) \supseteq \{z : \text{Re}(z) > 0\}$ e para tais z ,*

$$\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| \leq \frac{1}{\text{Re}(z)} \quad (\text{B.5})$$

Corolário B.2 *Um operador linear \mathcal{A} é o gerador infinitesimal de um C_0 semigrupo satisfazendo $\|T(t)\| \leq \exp(wt)$ se e somente se,*

- i. \mathcal{A} é fechado e $\overline{D(\mathcal{A})} = \mathcal{B}$.
- ii. O conjunto resolvente de \mathcal{A} , $\rho(\mathcal{A})$, contém o raio $\{\lambda : \text{Im}(z) = 0; z > w\}$ e para tais z ,

$$\|(z - \mathcal{A})^{-1}\| \leq \frac{1}{z - w} \quad (\text{B.6})$$

Se A é um gerador infinitesimal de um semigrupo de classe $C_0, T(t)$ o problema de Cauchy para A tem uma solução $u(t) = T(t)u_0$, para todo $u_0 \in D(A)$, conforme os próximos resultados.

Proposição B.1 *Seja A um operador linear densamente definido. Se $(\lambda I - A)$ existe para todo $\lambda \geq \lambda_0$ real e*

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{-1} \log \|(\lambda I - A)\| \leq 0.$$

Então o problema de valor inicial (B.1) tem uma solução para todo $u_0 \in D(A)$.

Proposição B.2 *Seja A um operador linear densamente definido em \mathcal{B} tal que $\rho(A) \neq \emptyset$. O problema de valor inicial (B.1) tem única solução $u(t)$ que é continuamente diferenciável em $[0, \infty)$ para todo $u_0 \in D(A)$ se e somente se A é o gerador infinitesimal de um C_0 semigrupo $T(t)$.*

Referências Bibliográficas

- [1] K. E. Atkinson, “An Introduction to Numerical Analysis”, Second Edition, John Wiley & Sons, New York, 1978.
- [2] F. S. V. Bazán, Chebyshev pseudospectral method for wave equation with absorbing boundary conditions that does not use a first order hyperbolic system, submitted to Applied Numerical Mathematics, 2007.
- [3] F. S. V. Bazán, Sensibilidade de autovalores em recuperação de dados exponenciais, *TEMA*, **2** (2000) 289-302.
- [4] R. L. Burden e J. D. Faires, “Análise Numérica”; Tradutor: Ricardo Lenzy Tombi, Revisor técnico: Leonardo Frein Melo. Pioneira Thomson Learning, São Paulo, 2003.
- [5] P. C. Calegari e F. S. V. Bazán, Análise espectral de um método pseudo espectral para propagação de ondas com condições de fronteira transparentes, submetido a TEMA, 2006.
- [6] P. C. Calegari e F. S. V. Bazán, Ondas Viajantes e Pseudo Espectro, *Anais do 64° SBA*, 2006.
- [7] R. W. Clayton and B. Engquist, Absorbing boundary conditions for wave equation migration, *Geophysics*, **45** (1980) 895-904.
- [8] E. B. Davies, “Spectral Theory”, Departament of mathematics, King’s College, London 2004.
- [9] T. A. Driscoll and L. N. Trefethen, Pseudospectra of the wave operator with an absorbing boundary, *Comp. Appl. Math.*, **69** (1996), 125-142.
- [10] B. Engquist and A. Madja, Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves, *Mathematics of Computation*, **31** (1977) 629-651.
- [11] L. Fox and I. B. Parker, “Chebyshev polynomials in numerical analysis”, Oxford University Press, Oxford 1968.
- [12] B. Fornberg, “A practical guide to pseudospectral methods”, Cambridge monographs on applied and computational mathematics, Cambridge University Press, 1998.
- [13] A. Gelb, Z. Jackiewicz and B. D. Welfert, Absorbing boundary conditions of the second order for the pseudospectral Chebyshev methods for Wave Propagation, *Journal of Scientific Computing*, **17** (2002) 501-512.

- [14] G. H. Golub and Ch. F. Van Loan, “Matrix Computations”, Third Edition, The Johns Hopkins University, London, 1996.
- [15] D. Gottlieb and S. A. Orzag, Numerical analysis of spectral methods: Theory and Applications, SIAM, Philadelphia, 1977.
- [16] S. Gottlieb, C. W. Shu and E. Tadmor, Strong stability-preserving high-order time discretization methods, *SIAM Review*, **43** (2001) 89-112.
- [17] L. Halpern and A. Rahmouni, “One way operators, absorbing boundary conditions and domain decomposition for wave propagation”, Modern Methods in Scientific Computing and Applications, 155-209. A. Bourliex et M.J.Gauder editeurs. Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [18] R. A. Horn and C. R. Johnson, “Matrix Analysis”, Cambridge University Press, Cambridge 1985.
- [19] Z. Jackiewicz and R. A. Renaut, A note on stability of pseudospectral methods for wave propagations, *Comp. Appl. Math.*, **143** (2002), 127-139.
- [20] E. Kreyszig, “Introductory Functional Analysis with Applications”, J. Wiley, New York 1989.
- [21] P. Lancaster and M. Tismenetsky, “The Theory of Matrices With Applications”, Second Edition, Academic Press, Inc., Orlando , 1985.
- [22] D. Levy and E. Tadmor, From semidiscrete to fully discrete: Stability of Runge-Kutta schemes by the energy method, *SIAM Review*, **40** (1998) 40-73.
- [23] J. C. Mason and D. C. Handscomb, “Chebyshev Polynomials”, Chapman & Hall, CRC Press Company, London 2002.
- [24] K. W. Morton and R. D. Richtmyer, “Difference Methods for Initial-Value Problems”, 2nd ed., John Wiley, New York, 1967.
- [25] A. Pazy, “Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations”, Springer, Berlin, 1983.
- [26] S. C. Reddy and L. N. Trefethen, Lax-stability of fully discrete spectral methods via stability regions and pseudo-eigenvalues, *Comput. Math Appl. Mech. Eng.*, **80**, (1990) 147-164.
- [27] S. C. Reddy and L. N. Trefethen, Stability of the method of lines, *Num. Math.*, **62** (1992), 235-267.
- [28] R. Renaut, Stability of a Chebyshev pseudospectral solution of the wave equation with absorbing boundaries, *J. Comp. and Appl. Math.*, **87** (1997) 243-259.
- [29] R. Renaut, Absorbing boundary conditions, difference operators and stability, *J. Comput. Phys.* 102 (1992) 236-251.
- [30] R. Renaut and J. Fröhlich, A pseudospectral Chebyshev method for 2-D wave equation with domain stretching and absorbing boundary conditions, *J. Comput. Phys.* 124 (1996) 324-336.

- [31] R. Renaut and J. Petersen, Stability of wide-angle absorbing boundary conditions for the wave equation, *Geophysics*. 54 (1989) 1153-1163.
- [32] J. C. Strikwerda, “Finite difference schemes and partial differential equations”, Wadsworth & Brooks, California, 1989.
- [33] E. Tadmor, The exponential accuracy of Fourier and Chebyshev differencing methods, *SIAM J. Numer. Anal.* Vol. 23, No. 1, February 1986.
- [34] E. Tadmor, From semidiscrete to fully discrete: Stability of Runge-Kutta schemes by the energy method. II, *Collected Lectures on the preservation of stability under discretization*, D. Estep and S. Tavener, editors SIAM, Philadelphia, 2002.
- [35] L. N. Trefethen, “Finite Difference and Spectral Methods for Ordinary and Partial Differential Equations”, Cornell University, 1996. Available at <http://web.comlab.ox.ac.uk/oucl/work/nick.trefethen/pdetext.html>
- [36] L. N. Trefethen, Lax-Stability vs. eigenvalue Stability of spectral methods, In. K. W. Morton, M. J. Baines, eds. *Numerical Methods in Fluid Dynamics III*.
- [37] L. N. Trefethen, “Spectral Methods in Matlab”, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2000.
- [38] L. N. Trefethen and M. Embree, “Spectra e Pseudospectra - The behavior of Nonnormal Matrices o Operators”, Princeton University Press, Princeton 2005.
- [39] L. N. Trefethen and L. Halpern, Well-posedness of one-way equations and absorbing boundary conditions, *Math. of Comp.*, **47** (1986) 421-435.
- [40] K. Veselić, On linear vibrational systems with one-dimensional damping, *Applicable Anal.*, **29** (1988) 1-18.
- [41] T. G. Wright, “Matlab codes and graphical user interfaces for computation of pseudospectra”, available at <http://www.comlab.ox.ac.uk/oucl/work/nick.trefethen>