Volume 45, 2012

Editado por

Célia A. Zorzo Barcelos Universidade Federal de Uberlândia - UFU Uberlândia, MG, Brasil

Eliana X.L. de Andrade Universidade Estadual Paulista - UNESP São José do Rio Preto, SP, Brasil

Maurílio Boaventura

Universidade Estadual Paulista - UNESP São José do Rio Preto, SP, Brasil

Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

 $\boldsymbol{2012}$

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em Latex (compatível com o Miktex versão 2.7), as figuras em eps e deve ter entre 80 e 150 páginas. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de exercícios de verificação de aprendizagem ao final de cada capítulo.

> Veja todos os títulos publicados nesta série na página http://www.sbmac.org.br/notas.php

Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

2012

TÓPICOS DE ANÁLISE FUNCIONAL NA COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Carlos A. de Moura demoura@ime.uerj.br

Departamento de Matemática Aplicada Instituto de Matemática e Estatística Universidade do Estado do Rio de Janeiro

> Denise Burgarelli burgarelli@ufmg.br

Departamento de Matemática Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG

JYVYC

Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil 2012 Coordenação Editorial: Elbert Einstein Nehrer Macau

Coordenação Editorial da Série: Eliana Xavier Linhares de Andrade

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2012 by Carlos A. de Moura e Denise Burgarelli. Direitos reservados, 2012 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

Catalogação elaborada pela Biblioteca do IBILCE/UNESP Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner

de Moura, Carlos A. Tópicos de Análise Funcional na Computação Científica
São Carlos, SP: SBMAC, 2012, 88 p., 20.5 cm
(Notas em Matemática Aplicada; v. 45)
e-ISBN 978-85-8215-005-4
1. Análise Funcional. 2. Computação Científica.
3. Equivalência de Lax. 4. Operadores pseudo-diferenciais.
5. Malha adaptativa. 6. Espalhamento Inverso.
7. Regularização 8. Grafos.
I. de Moura, Carlos A. II. Burgarelli, Denise. III. Título. IV. Série
CDD - 51

Esta é uma republicação em formato de e-book do livro original do mesmo título publicado em 2010 nesta mesma série pela SBMAC.

Ao meu esposo Luiz e ao meu filho Henrique,

Denise

Aos alunos e alunas, de ontem e hoje, com quem muito aprendemos,

Moura

Agradecimentos

Agradecemos ao Comitê responsável o apoio recebido para divulgar nosso trabalho no CNMAC.

Se continuarmos a citar todos os que contribuíram, de tão grande, a lista nos forçará a reduzir o texto. Assim, recebam todos os não citados nosso reconhecimento.

Conteúdo

	Pro	logo	11
1	Equ	ivalencia de Lax	
	e fa	lsa convergencia	13
	1.1	Introdução	13
	1.2	Compatibilidade (<i>ou consistência</i>)	14
	1.3	Estabilidade	15
	1.4	A falsa convergência	16
2	Cor	nparacao entre normas	19
	2.1	Introdução	19
	2.2	A Função Estabilidade	20
		2.2.1 Observações finais	23
	2.3	O Truque de Nitsche	24
3	\mathbf{Esq}	uemas nao conservativos e <i>chopp-off</i>	29
	3.1	Introdução	29
	3.2	Generalizando a equação de BBM	30
	3.3	"Chopp-off" – detalhes técnicos	32
4	Cor	npacidade Problemas Inversos, Regularizacao	35
	4.1	Introdução	35
	4.2	A regularização de Tykhonov	36
	4.3	O índice de estabilidade	38
	4.4	Um exemplo: espalhamento inverso unidimensional	39
5	Cor	m arraexemplos~ imes~a proximacoes	43
	5.1	Introdução	43
	5.2	Uma releitura	43
		5.2.1 Sensoriamento remoto	46

9

б	Operadores pseudodiferenciais o
0	condições do contorno transparentes
	6.1 Introdução definição e notaçãos
	6.2 A acuação das endas (unidimensional)
	0.2 A equação das ondas (unidimensional)
	b.3 A equação das ondas (no \mathbb{R}^n , $n \ge 2$)
	6.4 Conclusoes
7	Malha adaptativa Grafo de Folhas Autonomas
	7.1 Motivação
	7.2 Estrutura de dados \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots
	7.2.1 Introdução
	7.2.2 Estrutura da malha adaptativa
	7.2.3 Refinamento da malha
	7.2.4 Desrefinamento da malha
	7.2.5 Ordenação da malha pela curva de Hilbert
	7.2.6 Generalização do domínio
	7.2.7 Domínio tridimensional
	7.2.8 Células triangulares
	Apendice: exerc cios
	Bibliogra a

10

Prólogo

Deduzir relações em espaços – métricos, normados, topológicos – compostos de funções numéricas, ou mesmo a valores vetoriais, este o cerne da área matemática englobada pelo título de **Análise Funcional**. O principal objetivo de tais relações originalmente era a aplicação a problemas na teoria das equações diferenciais. Olhar as funções de um determinado conjunto como formando pontos de um espaço com propriedades semelhantes às da reta, do plano ou do espaço físico tridimensional foi o importante salto para estruturar o Cálculo das Variações. Só bem mais tarde foi iniciado o emprego da AF no contexto dos métodos numéricos: quando começou a tomar corpo uma teoria mais estruturada, por se configurar a necessidade de empregar mais substância do que o mero "fazendo a malha tender a zero" a fim de garantir a convergência de esquemas computacionais.

Uma visão superficial comumente explica as possibilidades da **Computação Científica** no seu atual estágio apenas como uma consequência do avanço dos equipamentos computacionais desenvolvidos a partir do final da segunda guerra. Tal avaliação despreza um ponto fundamental: resultados computacionais apenas podem ser considerados significativos, ter significado real, à medida que possam exibir um respaldo teórico, garantindo o nível dos erros embutidos. E a obtenção dessas estimativas de erro se fez mais rapidamente – em alguns casos, somente se consegue – ao se lançar mão do poderoso suporte de ferramentas da Análise Funcional.

O objetivo do presente texto é ilustrar algumas das interações entre a Análise Funcional e o carro-chefe da Computação Científica, a Análise Numérica, se bem que atualmente não se possa mais separar a segunda Análise da primeira. Os exemplos escolhidos têm, evidentemente, certo viés dos autores, não estando de forma alguma implícita a afirmação de que a importância desses supera a de muitos outros, não incluídos. Talvez até a escolha se justifique didaticamente, por exibirem maior simplicidade. Existe porém um elo entre eles: cada capítulo visa ou enfatizar um determinado ponto ou apresentar uma abordagem distinta para um tópico que, na nossa visão, é mal compreendido ou equivocadamente apresentado.

No Capítulo I se aponta uma fonte de erro encontrada justamente ao se buscar uma condição "desejável", a da estabilidade incondicional em algoritmos numéricos para a solução de equações diferenciais. O Capítulo II, ao mesmo tempo em que apresenta uma consequência de um fato básico – a equivalência entre normas nos espaços de dimensão finita – chama a atenção para que, na análise de métodos computacionais, pode ser necessário caminhar no sentido aparentemente menos natural, de uma topologia mais fina para uma menos fina, o truque de Nitsche auxiliando nesse trajeto.

No terceiro capítulo enfatiza-se não ser apenas a precisão o que se espera de um esquema numérico, sendo também indispensáveis certas informações qualitativas. A técnica de truncamento¹ aí exposta às vezes contorna a inexistência da propriedade de preservar limitações.

No capítulo seguinte discutem-se os problemas inversos, a sua tradicional instabilidade, a técnica de Tykhonov para contorná-la, observando-se finalmente que também existem fenômenos em cujos modelos a estabilidade pode ocorrer.

O quinto capítulo mostra como um exemplo – antes, um contraexemplo – pode ter diferentes interpretações quando usado no contexto teórico ou numérico, tendo em vista que nesse último os vínculos de situações reais, práticas, podem alterar a interpretação dos dados, ou antes, das consequências destes.

Os operadores pseudo-diferenciais são o objetivo do capítulo VI, ilustrando como um conceito aparentemente destinado à pura generalização teórica pode vir a se tornar um instrumento indispensável em aplicações práticas. A discussão no último capítulo mostra um outro tópico que à primeira vista parece mostrar apenas uma indiossincrasia matemática, a curva de Hilbert. Longe de ser um mero exercício de generalização, mostramos como este exemplo apresenta uma aplicação poderosa.

Na direção do conteúdo das presentes notas, tem-se de no mínimo citar o livro pioneiro – e clássico – de Lothar Collatz [13] e, em língua portuguesa, com o mesmo espírito voltado para aplicações, o texto [37]. Também escrito visando a utilização "fora" da própria AF, e muito mais abrangente, é [48]. Tanto [50] quanto [55] contêm bem mais do que os tópicos explícitos de AF aqui mencionados, ambos em português e com um tratamento bem completo.

Rio de Janeiro e Belo Horizonte, 30 de abril de 2010

 $^{1}\mathit{chopp-off}$

Capítulo 1

Equivalência de Lax e falsa convergência

1.1 Introdução

Uma análise superficial da heurística para a simulação de equações diferenciais por meio de algum método de discretização pode sugerir: basta à malha utilizada pelo esquema numérico ser suficientemente fina para se poder garantir que ele gera aproximações satisfatórias. Mas isto pode não ocorrer, havendo casos em que malhas mais grosseiras conduzem a soluções numéricas mais precisas, seu refinamento levando à deterioração dos resultados. Este fato passou a ser compreendido a partir de um teorema seminal no estudo de aproximações numéricas das equações diferenciais parciais – **edp's** – deduzido por Courant, Friedrichs e Lewy em [15], onde foi introduzida a chamada **condição CFL**, cf. [23], pp.160-ff.

No contexto de edp's lineares a peça que resume a teoria das aproximações numéricas foi condensada no

Teorema da Equivalência de Lax: Um esquema numérico para um problema misto bem-posto associado a uma edp linear, sendo compatível, será convergente se e só se for estável.

Das três condições que figuram nesse teorema, claro que o interesse central repousa na convergência, aparentando as outras duas serem meros instrumentos técnicos. Vamos então justificá-las, esclarecendo o papel que desempenham.

1.2 Compatibilidade (ou consistência)

Tradicionalmente, nossa literatura se refere a essa condição importando do inglês a tradução **consistência**, mas preferimos a opção **compatibilidade**, que expressa melhor seu conteúdo, cf. nota *in* [23], pp.162.

A fim de simular uma dada equação diferencial, um esquema discreto substitui operadores contínuos por discretizações escolhidas a partir de dados da equação específica. É natural que se busquem condições para assegurar a **compatibilidade** nessa escolha. Um critério justificado pela teoria é o de exigir que os vínculos impostos às soluções aproximadas sejam satisfeitos **aproximadamente** pelas soluções exatas. Esta seria a primeira condição a verificar, o mínimo a exigir, ou *sine qua non*. Sua formulação é conveniente uma vez que impõe vínculos a ser satisfeitos pela solução exata, sobre a qual se deve necessariamente dispor de informações teóricas – ou deduzi-las.

Consideraremos equações diferenciais parciais de evolução, assim pelo menos duas variáveis independentes devem ser discretizadas, definindo-se os parâmetros, por exemplo, $\Delta t = \Delta x$. A família de operadores discretos associadas a esses parâmetros, $\mathbf{B}(\Delta x, \Delta t)$, gera os vínculos que definem as aproximações e que – para a compatibilidade – devem ser satisfeitos pelas soluções exatas. Condições típicas são, para alguma norma $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$,

$$\lim_{\Delta x,\Delta t\to 0} \left\| \left[\frac{\mathbf{B}(\Delta x,\Delta t) - I}{\Delta t} - L \right] u(t) \right\|_{\mathcal{X}} = 0, \quad \forall t \in [0,T], \quad (1.2.1)$$

sendo I o operador identidade e tendo a equação considerada a forma

$$\begin{bmatrix} d/dt \ u(t) = L \ u \ (t) \\ u(0) = \phi \end{bmatrix},$$
(1.2.2)

para $u \in C^1(0,T;\mathcal{X})$ e um operador diferencial $L : X \to \mathcal{X}$ definido em X, subespaço denso de \mathcal{X} . No caso de problema misto, o espaço \mathcal{X} incorpora as condições de contorno exigidas.

A condição (1.2.1) pode ser satisfeita, independentemente de relações entre os parâmetros Δt , Δx ; neste caso se diz que o esquema é **incondicionalmente compatível**. Para determinados esquemas, restrições sobre a taxa

Estabilidade

de convergência dos limites $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ podem ter de ser impostas, sendo tais esquemas denominados **condicionalmente** compatíveis. Muitas vezes essas restrições é que garantem que propriedades da equação foram *herdadas* corretamente pelo esquema numérico, por exemplo, ser compatível com a velocidade de transmissão de sinais, cf. [19].

Em (1.2.1), o valor do qual se calcula a norma no primeiro membro é definido como o **erro de truncamento** do esquema em estudo, uma função de Δt , Δx . Deve-se ter, quando $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$, sua convergência para zero. A ordem dessa convergência expressa uma avaliação **local**, não garantindo, sozinha, que o esquema gere soluções numéricas que de fato aproximem a solução real. Em outras palavras, que tal estimativa, ou outra semelhante, se verifique **globalmente**.

1.3 Estabilidade

Consideremos um algoritmo proposto com o objetivo de gerar aproximações $\mathbf{U}^n := U_j^n$ para os valores $u_j^n := u(x_j, t^n)$ da solução exata de (1.2.2) sobre o reticulado

$$\{ (x_{j}, t^{n}) := (j\Delta x, n\Delta t) \mid 0 \leq n < N, j \in \mathbb{Z} \subset \mathbb{Z} \},\$$

sendo que $N = N(\Delta t, T)$ e $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(D, \Delta x)$, onde D é o domínio das funções que compõem o espaço \mathcal{X} . Suponhamos que ele evolua¹ seqüencialmente de acordo com

$$\begin{array}{ll} U_j^0 & := \phi(j \,\Delta x) & j \in \mathcal{Z} \subset \mathbb{Z} \\ \mathbf{U}^{n+1} & := \mathbf{B}(\Delta x, \Delta t) \,\mathbf{U}^n & 0 \le n < N \end{array} ,$$
 (1.3.3)

denotando $\,{\bf B}\,$ a já mencionada família de operadores de diferenças finitas.

O operador solução de (2.2.2) define um semigrupo de operadores e as potências de **B** vão gerar aproximações para traços desse semigrupo. Com isso queremos dizer que, sendo $\mathcal{E}(t)\phi := u(t)$, $t \in [0,T]$ esse semigrupo, desejamos construir, para determinados valores \tilde{t} , aproximações para $u(\tilde{t}) = \mathcal{E}(\tilde{t})\phi$ por meio de

$$\mathcal{B}(\Delta x, \Delta t, \ell) := [\mathbf{B}((\Delta x)_{\ell}, (\Delta t)_{\ell})]^{n_{\ell}}.$$
(1.3.4)

 $^{^1\}mathrm{Este}$ é um algoritmo **explícito** mas as considerações que apresentamos se aplicam igualmente ao caso **implícito**.

Esse raciocínio mostra ser natural a exigência da **condição de estabilidade**: potências arbitrárias de **B** devem se manter limitadas. Mais precisamente, a família \mathcal{B} definida em (1.3.4) deve ser uniformemente limitada para todos os valores dos parâmetros aí mencionados.

Esta é uma condição global e que só envolve o esquema de aproximação. A hipótese da convergência permite demonstrar a limitação uniforme, lançando mão do Teorema de Banach-Steinhaus, cf. [23].

Nos casos de equações não lineares, não cobertos pelo resultado de Lax, busca-se também este tipo de limitação: o instrumental a utilizar são os teoremas de compacidade, os quais garantem a existência de uma subsequência convergente. Prova-se em seguida que o limite dessa subsequência satisfaz a equação. Quando se tem unicidade, pode-se demonstrar ser toda a sequência convergente, a partir de um raciocínio conhecido:

Dada qualquer subsequência das aproximações construídas, por ser limitada, ela admite uma subsequência convergente. Esta vai convergir para a solução – que sabemos única – da equação e, assim, conclui-se a convergência da sequência construída.

Observe a importância prática desse resultado: na implementação efetiva de um algoritmo de aproximação, são geradas porções finitas de subsequências e se utilizam critérios de parada. É indispensável, pois, estarmos seguros de que os valores escolhidos estão convergindo para a solução, não existindo o risco de se ter tomado uma subsequência *errada*. (É nesse contexto a discussão da próxima seção.)

1.4 A falsa convergência

É conhecido o fato de ser o esquema de Du Fort-Frankel para a equação de difusão do calor **incondicionalmente** estável, cf. [18], Cap.XI, pp.109-ff. Uma vez que inexistem restrições entre os parâmetros de discretização Δx , Δt , é natural avaliarmos como positiva esta característica do método. Recordemos a definição desse esquema: para

$$u_t = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}, \qquad (1.4.5)$$

definem-se as (candidatas a) aproximações por

$$\frac{U_{j}^{n+1} - U_{j}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{U_{j+1}^{n} - (U_{j}^{n+1} + U_{j}^{n-1}) + U_{j-1}^{n}}{(\Delta x)^{2}} .$$
(1.4.6)

16

A falsa convergência

Pode-se pensar no método de Du Fort-Frankel como uma tentativa de salvar o esquema **pula-carniça**², sabidamente instável, por meio da estratégia de substituir o valor de $2U_{j}^{n}$, presente na discretização simétrica da derivada segunda, pela média aritmética dada pela soma entre parênteses em (1.4.6). Ocorre que essa estratégia provoca algumas dificuldades, às vezes pouco percebidas, como veremos.

A expansão de Taylor nos indica ser o erro de truncamento de (1.4.6)dado por

$$e(\Delta x, \Delta t; x_j, t^n) = \mathcal{O}(x_j; (\Delta x)^2) + \mathcal{O}(t^n; (\Delta t)^2) + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \left[\mathcal{O}(x_j; (\Delta x)^2) + \sigma u_{tt}(x_j, t^n)\right],$$

para qualquer solução de (1.4.5). Conclui-se daí ser o esquema condicionalmente compatível, necessitando impor a seguinte restrição:

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \to 0} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) = 0.$$
 (1.4.7)

Suponhamos que, em vez de ser satisfeita a condição (1.4.7), tenhamos

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \to 0} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right) = \alpha \neq 0.$$

Assim, o esquema vai gerar uma sequência convergente para a solução de

$$\alpha \ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \ = \ \sigma \ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \ - \ \frac{\partial u}{\partial t} \ , \ t > 0 \ , \ x \ \in \ \mathbb{I} \!\!R \ , \tag{1.4.8}$$

-a chamada equação do telégrafo-uma vez que é com essa equação que o esquema apresentará compatibilidade.

Por outro lado, se supusermos que não se verifica a hipótese

$$\Delta t / \Delta x \rightarrow \infty$$
,

teremos subsequências de $\{\Delta t, \Delta x\}$ convergentes, seja α o correspondente limite. A limitação expressa por (1.3.4) assegura então a convergência das soluções numéricas associadas para soluções de (1.4.8). Sendo a condição (1.4.7) um vínculo **assintótico**, não é tarefa simples, em qualquer implementação numérica, garantir seja ela satisfeita, cf. [22]. Trata-se de uma situação muito distinta, por exemplo, daquela em que se tem uma restrição

 $^{^2} leap{-} frog$

da forma $\Delta t/\Delta x \leq \gamma$, ou $\Delta t/(\Delta x)^2 \leq \gamma$, para alguma constante γ : nesses casos temos vínculos sobre os parâmetros que podem ser monitorados pelo programa computacional.

É situação rotineira, a partir de aplicativos numéricos garantirmos se os elementos de uma sequência gerada estão próximos, deduzindo-se daí ser ela convergente. Esses valores que acionaram a "*chave*" são então tomados como **aproximações para o limite**. Este é justamente um dos **critérios de parada** na implementação de algoritmos que envolvem iterações.

Em resumo: por ser a estabilidade incondicional, buscando resolver numericamente (1.4.5), podemos gerar "soluções" cuja convergência é garantida, mas cujo limite satisfaz (1.4.8). É a esse fenômeno que nos referimos como **falsa convergência**. Lembramos aqui a observação anterior sobre independer a condição de estabilidade da equação, ser ela um vínculo estritamente ligado ao esquema numérico. Aí reside a causa desse comportamento que acabamos de discutir.

Capítulo 2

Comparação entre normas

2.1 Introdução

Verifica-se que, em certos contextos, um dado conjunto de funções é inserido num determinado espaço normado, enquanto em outros é uma norma diferente que mede as distâncias para esse mesmo conjunto. O iniciante ou desavisado pode ser conduzido a concluir que a escolha dessas normas é feita de forma um tanto arbitrária, muitas vezes por conveniência operacional. Ocorre que cada problema ou modelo sempre tem vínculos que lhe são essenciais. São justamente esses vínculos que determinam os critérios **naturais** – e coerentes – para introduzir normas nos espaços considerados. De fato, pode mesmo se ter de trabalhar com uma norma que não é a mais simples ou operacional, não é a menos trabalhosa, enfim¹. Torna-se então necessário dispor de resultados que estabeleçam uma relação entre a norma com a qual temos de operar e aquela que permite obter estimativas mais direta ou facilmente.

Enfatizamos que, na justificativa teórica de métodos numéricos, etapa indispensável para gerar estratégias corretas de implementação, não basta chegar a estimativas genéricas do tipo

 $||u||_a \leq C ||f||_b$,

 $^{^1 \}rm Por exemplo, em alguns modelos na Mecânica, as derivadas espaciais de certas funções estão associadas a <math display="inline">tensões,$ grandezas fundamentais nessa modelagem, o que indica a necessidade de considerar normas que envolvam tais derivadas.

para algum par de normas, mas se necessita:

- quantificar da forma a mais precisa possível a constante C;
- proceder a uma coerente escolha das normas utilizadas.

Discutiremos neste capítulo duas ferramentas importantes para aplicação na teoria de métodos numéricos. Elas permitem obter comparações entre diferentes normas e, como veremos, atuam em sentidos opostos. São essas técnicas a **função estabilidade** e o **truque de Nitsche**.

2.2 A Função Estabilidade

Fundamental na dedução de resultados de convergência para algoritmos numéricos aplicados a equações diferenciais é obter estimativas *a priori*, deduzidas a partir da definição do esquema de aproximação e da equação considerada. Para determinados problemas, pelo menos alguns termos propiciam estimativas que não satisfazem de imediato tal objetivo. Deve-se então buscar métodos para refinar as estimativas obtidas, sendo uma das ferramentas usadas a função estabilidade. A seguinte aplicação, extraída de [26], ilustra o emprego desse instrumento.

Associado à inequação variacional evolutiva, definida para $t \in [0, T]$,

$$\rho \langle \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \mid v - \dot{u} \rangle + a_e \langle \frac{\partial u}{\partial x} \mid \frac{\partial}{\partial x} (v - \dot{u}) \rangle + k_e u(1)(v - \dot{u})(1)
+ a_v \langle \frac{\partial \dot{u}}{\partial x} \mid \frac{\partial}{\partial x} (v - \dot{u}) \rangle + k_v \dot{u}(1)(v - \dot{u})(1) + J(u; v)$$

$$(2.2.1)$$

$$(2.2.1)$$

$$(2.2.1)$$

considera-se o problema de valor inicial 2 :

Determine T > 0 e $u \in \mathcal{L}(0,T; H^1(0,1))$ tais que

(IVE)
$$\begin{bmatrix} u \ satisfaça \ (2.2.1), \ t \in [0,T] \\ u(0) = 0 \\ \dot{u}(0) = 0 \end{bmatrix}$$
 (2.2.2)

20

²A inequação já incorpora as condições de contorno.

Nas expressões acima, ρ , a_e , k_e , a_v , k_v , são constantes positivas conhecidas; J é um funcional convexo, contínuo mas não diferenciável em $H^1(0,1)$; $\mathcal{L}(0,T;H^1(0,1))$ é um espaço de funções vetoriais a ser caracterizado; $\langle \cdot | \cdot \rangle$ denota o produto interno em $L^2(0,1)$; e, finalmente,

$$v \in H^1(0,1) \mapsto \langle f \mid v \rangle + F(t) v(0)$$

define um funcional linear limitado sobre $H^1(0,1)$, denotado por L.

O algoritmo apresentado e discutido em [26], destinado a construir aproximações numéricas para soluções da (IVE) acima, se compõe dos seguintes passos.

- Regularizar (2.2.1), ou seja, substituir J por aproximações diferenciáveis J_{ϵ} , de forma que, em vez da inequação variacional, se passe a trabalhar com uma família de equações variacionais;
- Introduzir espaços de elementos finitos que forneçam aproximações para $H^1(0,1)$, os quais se vai
- Acoplar a um esquema de diferenças finitas que discretize a variável temporal.

Esse procedimento conduz à construção de soluções numéricas da (2.2.1) conforme a descrição a seguir, sendo U^n funções em espaços V_h de elementos finitos convenientemente definidos, associados a uma discretização espacial parametrizada por $h \downarrow 0$ e cuja união é densa em $H^1(0,1)$. Será mais cômodo denotar o parâmetro Δt da discretização temporal por k. Observe o abuso de notação: não estará explícita a dependência de U^n relativamente a h e k nem ϵ . Objetiva-se seja cada U^n , $0 \leq n \leq N := T/k$, uma aproximação para u(nk).

Uma das definições propostas e analisadas em [26] para o algoritmo de discretização temporal é do tipo **preditor-corretor**:

Inicializar com

$$U^0 := 0, \quad U^1 := 0.$$

Para $n \geq 1$, denotando por $A_e(\cdot; \cdot)$ a forma bilinear associada à adição da segunda e terceira parcelas em (2.2.1), e analogamente para $A_v(\cdot; \cdot)$ com as duas parcelas seguintes, caracterizar U^{n+1} por

$$\begin{array}{l} \rho \langle \partial_t^2 U^n | w \rangle + A_e(U^n; w) + A_v(\delta_t U^n; w) \\ + \langle \Psi_\epsilon(U^{n-1}, U^n) | w \rangle = \langle L^n | w \rangle_1, \ \forall w \in V^h \end{array} \right] .$$

$$(2.2.3)$$

Empregamos a convenção de confundir $L^n\,$ com sua representação de Riesz em $\,H^1(0,1)$; denotamos por $\,\Psi_\epsilon\,$ o termo regularizador quando calculado com o valor "provisório" de $\,U^{n+1}\,$ gerado pelo preditor; e usamos a notação padronizada de diferenças finitas

$$\begin{array}{rcl} \partial_t U^n &:= & (\ U^{n+1} - \ U^n)/k \ , \\ \delta_t U^n &:= & (U^{n+1} - U^{n-1})/2k \ = & (\partial_t U^{n-1} + \partial_t U^n)/2 \ , \\ \partial_t^2 U^n &:= & (U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1})/k^2 \ = & (\partial_t U^{n-1} - \partial_t U^n)/k. \end{array}$$

Denotando as normas $\|\cdot\|_0 \equiv \|\cdot\|_{L^2} \|\cdot\|_1 \equiv \|\cdot\|_{H^1}$, a atribuição de $w := \delta_t U^n$ em (2.2.3) conduz a

$$\rho(\|\partial_t U^n\|_0^2 - \|\partial_t U^{n-1}\|_0^2) + kA_e(U^n; \delta_t U^n) + kA_v(\delta_t U^n; \delta_t U^n) \\ = k\langle L^n \mid \delta_t U^n \rangle_1 - k\langle \Psi_\epsilon(U^{n-1}, U^n) \mid \delta_t U^n \rangle \Big].$$
(2.2.4)

Observamos que as formas bilineares A_e , A_v são coercivas e limitadas, de modo que valem, para qualquer delas, desigualdades da forma

$$\alpha \|w\|_1^2 \ \le \ A(w;w) \ \le \ \Lambda \|w\|_1^2 \ , \quad \Lambda \ge \alpha > 0 \ , \ \forall w \in H^1(0,1).$$

Essas estimativas, juntamente com o fato de serem as Ψ_ϵ e suas primeiras derivadas uniformemente limitadas, garantem, a partir de (2.2.4), para uma certa constante B>0 e conveniente $\gamma>0$, a relação

$$\begin{array}{l} \rho(\|\partial_t U^n\|_0^2 - \|\partial_t U^{n-1}\|_0^2) + 2k\alpha_v \|\delta_t U^n\|_1^2 + A_e(U^n; U^{n+1} - U^{n-1}) \\ \leq k \left\{ \gamma \|\delta_t U^n\|_1^2 + B(1 + \|U^n\|_1^2)/\gamma \right\} \end{array} \right] \ .$$

Toma-se agora un inteiro $1\leq L\leq N$, soma-se essa última relação para $1\leq n\leq L$, obtendo-se então, uma vez que $U^1~=~U^0~=~0$,

$$\rho \|\partial_t U^L\|_0^2 + 2k\alpha_v \sum_{n=1}^L \|\delta_t U^n\|_1^2 + A_e(U^L; U^{L+1}) \\ \leq \gamma \sum_{n=1}^L k \|\delta_t U^n\|_1^2 + B(T + \sum_{n=1}^L k \|U^n\|_1^2) / \gamma$$

$$(2.2.5)$$

A observação de que vale $U^{L+1} = k \partial_t U^L$ e a escolha de $\gamma = \alpha_v$ permitem deduzir de (2.2.5) a desigualdade

$$\rho \|\partial_t U^L\|_0^2 + k\alpha_v \sum_{n=1}^L \|\delta_t U^n\|_1^2 + \alpha_e \|U^L\|_1^2
\leq B(T + \sum_{n=1}^L k \|U^n\|_1^2) / \alpha_v + k\sqrt{\Lambda_e} \|U^L\|_1 \cdot \sqrt{\Lambda_e} \|\partial_t U^L\|_1 \quad \left]. \quad (2.2.6)$$

É a última parcela que origina a presente discussão. Na limitação

$$k\sqrt{\Lambda_e}\|U^L\|_1 \cdot \sqrt{\Lambda_e}\|\partial_t U^L\|_1 \le \alpha_e \|U^L\|_1^2/2 + (k\Lambda_e\|\partial_t U^L\|_1)^2/2\alpha_e$$

a primeira parcela do segundo membro tem a norma "correta", pois é possível sua comparação com o último termo do primeiro membro em (2.2.6). Já a outra parcela exibe uma norma pouco "conveniente" para a estimativa, na forma como a desenvolvemos. Observe ser natural a norma $\|\partial_t U^n\|_0$ na presença de $\|U^n\|_1$, uma vez que se espera, em qualquer aproximação, uma estimativa menos precisa para a derivada do que para a função. O abuso de notação encobre o fato que se revela fundamental: a dependência com relação aos parâmetros de discretização.

Recordemos que $U^n = U_h^n \in V_h$, tendo cada um dos espaços V_h uma dimensão finita d_h e, portanto, todas as normas que sobre ele se definam são necessariamente equivalentes. Conforme mencionado em [23], pp. 51, constantes S(h) que satisfaçam

$$||v||_1 \leq S(h) ||v||_0 , \quad \forall v \in V_h ,$$

permitem definir a **função estabilidade** do par $(\|\cdot\|_1; \|\cdot\|_0)$ relativamente aos espaços V_h . Assim, deduzimos que

$$(k\Lambda_e \|\partial_t U^L\|_1)^2 / 2\alpha_e \leq (S(h)k\Lambda_e \|\partial_t U^L\|_0)^2 / 2\alpha_e ,$$

de modo que, garantindo a validade da restrição

$$k S(h) \leq \sqrt{p \alpha_e} / \beta_e , \qquad (2.2.7)$$

dita condição de Courant-Friedrichs-Lewy, podemos deduzir:

$$\rho \|\partial_t U^L\|_0^2 + k\alpha_v \sum_{n=1}^L \|\delta_t U^n\|_1^2 + \alpha_e \|U^L\|_1^2 \\ \leq \tilde{B} \left(T + \sum_{n=1}^L k \|U^n\|_1^2 \right) \quad (2.2.8)$$

Esta última desigualdade permite concluir para a sequência construída uma limitação uniforme relativamente aos parâmetros h, k, ϵ e cada T fixo, de modo a garantir, a partir de argumentos de compacidade, a existência de uma subsequência convergente. Vale também a convergência das simulações das derivadas, cf. detalhes em [26].

2.2.1 Observações finais

- A convergência de apenas uma subsequência de cada uma das sequências de aproximação construídas, fato a princípio inconveniente nos experimentos numéricos, já a discutimos no Cap. 1.
- A condição (2.2.7) exige algumas considerações. Inicialmente notamos que $\lim_{h\to 0} S(h) = \infty$, o que se deduz a seguir por contradição.

Suponha que se tivesse uma limitação $S(h) \leq C$, para alguma constante positiva. Como se pode construir, para qualquer elemento $\omega \in H^1(0,1)$, uma sequência³ $\{\omega_h\}$ para a qual se tem

$$\lim_{h\to 0} \|\omega_h - \omega\|_1 = 0,$$

se concluiria que

$$\|\omega\|_1 < C\|\omega\|_0.$$

Isto é impossível, visto ser $\omega \in H^1(0,1)$ arbitrário e C fixa.

Outra questão é a **taxa de convergência** de S(h), cujo conhecimento é necessário para se poder garantir (2.2.7). É evidente que informações sobre esses dados vão depender do espaço V_h utilizado. Pode-se nos casos mais usuais obter $S(h) = \mathcal{O}(h)$ ou $S(h) = \mathcal{O}(h^p)$.

• Finalmente, devemos chamar a atenção para o fato de ser explícito relativamente ao termo A_e o esquema analisado. Fosse ele implícito, as estimativas que procuramos seriam obtidas sem ter de recorrer à função estabilidade.

2.3 O Truque de Nitsche

Observamos na seção anterior ser natural obter uma aproximação mais grosseira para a derivada do que a que se constrói para a própria função. Em outras palavras, espera-se que uma estimativa para o erro usando a norma H^1 seja mais fraca que uma outra que se baseie na norma L^2 . Foi Joachim Nitsche [52] quem desenvolveu uma técnica – a qual passou para a literatura com a denominação de "truque" – que serve justamente para gerar uma estimativa no L^2 , mais forte, baseada em uma outra, para a mesma aproximação mas com a norma H^1 , mais fraca, portanto. É uma espécie de técnica de "boot-strap". Na exposição que segue adotaremos o caminho já trilhado em [18].

Consideremos o problema de Sturm-Liouville

$$\begin{array}{ccc} -\frac{d}{dx} \left(p(x) du/dx \right) + q(x) u = f(x) , & x \in [0,\pi] \\ u(0) &= a \\ u'(\pi) &= b \end{array} \right] , \qquad (2.3.9)$$

³A rigor, **família**; esta observação também se aplica às U^n .

para o qual não há perda de generalidade se tomarmos como nula a condição de contorno dita essencial, a = 0; e, da mesma forma, para a condição natural, b = 0.

Serão impostas, além de condições de integrabilidade para $\ p$, $\ p'$, q , a hipótese de eliticidade

$$p(x) \ge \alpha > 0, x \in [0,\pi]$$

e, ainda,

$$q(x) \geq 0, x \in [0,\pi].$$

Elas nos permitem afirmar ser este um **problema bem-posto**, no sentido de Hadamard. Introduzindo o espaço

$$H_E^1 \equiv H_E^1(0,\pi) := \{ u \in H^1(0,\pi) ; u(0) = 0 \},\$$

(2.3.9) tem a seguinte formulação variacional:

Determinar $u \in H^1_E$ que satisfaça

$$\langle pu' \mid v' \rangle + \langle qu \mid v \rangle = \langle f \mid v \rangle, \ \forall v \in H^1_E.$$
 (2.3.10)

Indicamos com a notação $\langle \cdot | \cdot \rangle$ o produto interno em $L^2(0,\pi)$ e observamos que, em não sendo nula a condição natural, seria ela incorporada ao funcional linear do segundo membro. Simplificará a notação denotarmos a forma bilinear do primeiro membro por $\Lambda(\cdot; \cdot)$, de modo que (2.3.10) se reescreve como

$$\Lambda(u\,;\,v) = \langle f \mid v \rangle \,, \,\,\forall v \in H^1_E \,. \tag{2.3.11}$$

Da eliticidade decorre que a forma bilinear $\Lambda\,$ define um produto interno sobre $\,H^1_E\,$ e, portanto, uma norma $\,\|\cdot\|_E$, valendo

$$||v||_{H^1} \leq C ||v||_E, \ \forall v \in H^1_E.$$

As hipóteses adicionais

$$p', q \in L^{\infty}$$

permitem deduzir que $\|\cdot\|_E$ e $\|\cdot\|_{H^1}$ são equivalentes. Implicam também mais precisas informações sobre a dependência da solução relativamente a um dos dados do problema – já sabíamos ser ela contínua como função da ação externa f. Tem-se:

$$\|u''\|_{L^2}^2 \le C \|f\|_{L^2}^2 . \tag{2.3.12}$$

Utilizaremos agora aproximações numéricas construídas com base no método conhecido como de **Galerkin** e o emprego de elementos finitos. São elas definidas como solução da mesma equação (2.3.10), agora formulada nos espaços de aproximação S_h :

$$\langle pu'_h | v'_h \rangle + \langle qu_h | v_h \rangle = \langle f | v_h \rangle, \quad \forall v_h \in S_h.$$
(2.3.13)

Aqui tomaremos os espaços S_h formados por funções contínuas seccionalmente lineares em uma malha composta por subintervalos de $[0, \pi]$ cujos comprimentos não ultrapassam h > 0. É fundamental o seguinte fato:

Teorema (erro na interpolação) Para toda $v \in H^2(0,\pi)$, sua interpolatriz v_h no espaço S_h satisfaz

$$||v - v_h||_{L^2} \le \frac{h^2}{\pi^2} ||v''||_{L^2},$$
 (2.3.14)

$$||v' - v'_h||_{L^2} \le \frac{h}{\pi} ||v''||_{L^2}.$$
 (2.3.15)

Obtemos, a partir desse resultado e de outras estimativas, agora consideradas clássicas, o

Teorema (estimativa para o método de Galerkin). A solução de (2.3.13) difere da solução de (2.3.10) por, no máximo,

$$||e_h||_{H^1} := ||u - u_h||_{H^1} \le C_1 h ||f||_{L^2}.$$
 (2.3.16)

É a comparação desses dois teoremas, ou seja, de (2.3.14), (2.3.15) e (2.3.16), que nos induz de modo natural a questionar a possibilidade de uma estimativa de erro da ordem

$$||u - u_h||_{L^2} \le C_0 h^2 ||f||_{L^2}.$$
(2.3.17)

A resposta afirmativa é dada pelo truque de Nitsche.

Da mesma forma como na avaliação da consistência de um esquema numérico de diferenças finitas, consideramos a equação

$$\Lambda(z; v) = \langle e_h | v \rangle, \ \forall v \in H^1_E, \qquad (2.3.18)$$

cujo segundo membro é definido pelo erro que procuramos avaliar. Sua norma $L^2\,$ goza da relação

$$||e_h||_{L^2}^2 = \Lambda(z; e_h),$$

como se verifica pela escolha de $v := e_h$ naquela equação.

Observamos agora que o método de Galerkin define as soluções aproximadas justamente como a projeção ortogonal da solução exata sobre os espaços de aproximação S_h . Mas essa projeção é tomada relativamente ao produto interno associado à forma bilinear Λ , o que implica

$$\Lambda(v_h ; e_h) = 0 , \quad \forall v_h \in S_h .$$

Decorre então, por subtração, que

$$||e_h||_{L^2}^2 = \Lambda(z - v_h; e_h), \forall v_h \in S_h, \forall v \in H_E^1.$$

Desta relação se deduz a desigualdade

$$\|e_h\|_{L^2}^2 \leq \|z - v_h\|_E \cdot \|e_h\|_E \leq \|z - v_h\|_E \cdot C_E h \|u''\|_{L^2},$$

sendo natural a escolha de $\,v_h$ como a solução aproximada de (2.3.18), do que se obtém

$$\|e_h\|_{L^2}^2 \leq \|z-z_h\|_E \cdot C_E h \|u''\|_{L^2} \leq C_E^2 h^2 \|z''\|_{L^2} \|u''\|_{L^2}$$

A estimativa (2.3.12) aplicada duas vezes no segundo membro implica a relação

$$||e_h||_{L^2}^2 \leq C h^2 ||f||_{L^2} ||e_h||_{L^2},$$

ou seja, para uma certa constante $~\tilde{C}$, obtemos

$$||e_h||_{L^2} \leq \tilde{C} h^2$$
.

Concluímos assim ser válida (2.3.17).

Comparação entre normas

Capítulo 3

Esquemas não conservativos e "*chopp-off*"

3.1 Introdução

Idealmente os esquemas numéricos herdariam as propriedades das equações que eles se propõem a simular. Por exemplo, no estudo de equações associadas a leis de conservação, é comum a escolha dos chamados esquemas conservativos. Caracterizam-se estes por gerarem aproximações que apresentam as mesmas propriedades de conservação – ou ao menos uma discretização dessas. Ocorrem contudo situações em que ou não se consegue trabalhar com esquemas com tais características, ou não são esses esquemas viáveis, ou convenientes. Por exemplo, existem restrições intrínsecas ao nível de precisão de esquemas lineares monótonos, cf. [45], Teor. 16.1 (Godunov). Mas são, muitas vezes, justamente essas propriedades da equação que permitem deduzir as chamadas estimativas a priori, fundamentais, por exemplo, para demonstrações de resultados de correspondentes estimativas satisfeitas pelas soluções numéricas, essas necessárias para deduzir a convergência e avaliar o erro teórico.

Quando os esquemas escolhidos não preservam propriedades presentes na equação, e a partir das quais são obtidas estimativas, torna-se necessário contornar a impossibilidade de imitar, no caso discreto, os passos da variável contínua. Uma técnica que serve a esse propósito é a de "chopp-off", utilizada em [27] e que expomos a seguir.

3.2 Generalizando a equação de BBM

Uma alternativa à equação de Korteweg-deVries

 $u_t + u_x + uu_x + u_{xxx} = 0$

como modelo para a propagação unidirecional de ondas longas em um canal é a chamada equação de Benjamin-Bona-Mahony

$$u_t + u_x + uu_x - u_{xxt} = 0. (3.2.1)$$

Consideraremos uma generalização de (3.2.1), qual seja,

$$u_t + \frac{\partial}{\partial x} f(u) - \delta u_{xxt} = g(x,t) , \quad \delta > 0 .$$
 (3.2.2)

Observemos inicialmente que, no lugar da abordagem variacional, ou fraca, como em (2.2.1), impusemos a formulação pontual, ou forte. Trata-se, de fato, de uma questão cultural considerarmos esta formulação como a mais natural, e sempre a buscarmos, por julgá-la a mais simples. Ocorre geralmente na modelagem de fenômenos físicos a utilização de princípios de conservação – de energia, de momentum, de massa, etc. – e estes são expressos de forma global. A apresentação de equações pontuais requer então o artifício já padronizado – o que nos leva a considerá-lo mais natural – da passagem ao limite para regiões de medida arbitrariamente pequena. Este, sim, é um artifício matemático, enquanto o que geralmente se toma como um mero truque é a abordagem de passar da formulação pontual para a global.

Suponhamos que as soluções u(x,t) de (3.2.2) que buscamos sejam funções definidas no retângulo $[0,1] \times [0,T]$, onde satisfazem a **condição de periodicidade**

$$u(0,t) = u(1,t), t \in [0,T],$$
 (3.2.3)

sendo sua regularidade definida posteriormente. Dada qualquer função vque satisfaça idênticas condições de contorno e regularidade que u, tem-se que, para cada $t \in [0,T]$, (3.2.2) quando acoplada a (3.2.3) implica

$$\langle u_t \mid v \rangle + \delta \langle (u_t)_x \mid v_x \rangle = \langle f(u) \mid v_x \rangle + \langle g \mid v \rangle, \qquad (3.2.4)$$

sendo novamente $\langle \cdot | \cdot \rangle$ a notação do produto interno em $L^2(0,1)$. Por sua vez, se (3.2.4) se verificar para **qualquer** elemento de um conjunto "suficientemente grande" de funções v, se deduz ser (3.2.2) satisfeita por u, para **qualquer** ponto $x \in [0,1]$.

Para $~\delta>0~$ fixo, denotamos por

$$(z \mid w)_1 := \langle z \mid w \rangle + \delta \langle z_x \mid w_x \rangle$$

que é um produto interno equivalente ao de $\ H^1(0,1)$. Reescrevemos então (3.2.4) como

$$(u_t \mid v)_1 = \langle f(u) \mid v_x \rangle + \langle g \mid v \rangle.$$
(3.2.5)

Considerando o subespaço de funções periódicas de $H^1(0,1)$

$$H_p^1 := \{ w \in H^1(0,1) \mid w(0) = w(1) \},\$$

o problema proposto é, para uma dada $u_0 \in H_p^1$:

$$BBM_{g} \begin{bmatrix} Determinar, em algum espaço de funções vetoriais \\ \mathcal{L} := \mathcal{L}(0, T; H_{p}^{1}), função(ções) \ u \in \mathcal{L} \\ que satisfaça(m) \ (3.2.5), \forall \ v \in H_{p}^{1}, \ t \in [0, T] \ qtp \\ e a condição inicial \end{bmatrix}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \ \forall x \in [0,1].$$
 (3.2.6)

A identidade que segue desempenha um papel fundamental no desenvolvimento da teoria desse problema.

mento da teoria desse problema. Sendo $\,F(s)\,:=\,\int_0^s f(\tau)d\tau\,$ e sendo $\,v\,\in\,H^1_p$, tem-se:

$$\langle f(v) | v_x \rangle = \int_0^1 f(v(x)) v'(x) dx = \int_0^1 \frac{d}{ds} F(v(s)) ds$$

= $F(v(s))]_0^1 = \int_0^{v(x)} f(s) ds \Big]_{x=0}^1 = 0.$ (3.2.7)

Assim, para $t \in [0,T]$, a atribuição em (3.2.5) d
e $\, v := \, u(\cdot,t) \, = \, {\rm solução}$ de ${\rm BBM}_g$ implica

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}(\ u\mid u)_1\ (t)\ =\ \langle\ g\mid u\ \rangle\ (t)\ ,$$

identidade da qual resulta, por integração,

$$||u||_{H^1}^2(t) \leq ||u_0||_{H^1}^2 + \int_0^t \left[||g||_{L^2}^2 + ||u||_{L^2}^2 \right](\tau) d\tau .$$

Como o primeiro membro majora $||u||_{L^2}^2(t)$, à resultante relação se aplica a desigualdade de Gronwall para concluir o seguinte

Teorema. Existe no máximo uma solução do problema BBM_g . Tal solução satisfaz a estimativa

$$\|u(\cdot,t)\|_{H^1} \le C, \ t \in [0,T], \qquad (3.2.8)$$

sendo

$$C = C (||u_0||_{H^1}, ||g||_{\mathcal{L}^2}, T).$$

Mais uma notação foi introduzida¹, $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2} := \|\cdot\|_{L^2(0,T;L^2)}$.

Um eficiente tratamento numérico deste problema em [27] envolveu um algoritmo preditor-corretor na variável temporal, acoplado a um esquema de elementos finitos espacial. Esta é uma estratégia que reduz a solução de uma equação diferencial não linear à resolução de sistemas de equações algébricas lineares. O preço da redução é um desacoplamento na avaliação do termo não linear. Este desacoplamento impede que se obtenha uma identidade semelhante a (3.2.7), que elimina a influência do crescimento de f. Para garantir então a estabilidade desse esquema numérico é que se lança mão da chamada técnica de "chopp-off"².

3.3 "Chopp-off" – detalhes técnicos

A unicidade e a limitação para qualquer solução de ${\rm BBM}_g$ expressas no Teorema da seção anterior nos permitem considerar como limitados os termos não lineares f, apesar de geralmente, em situações reais, não serem eles sujeitos a limitações. Mas é importante ter em mente que as cotas que lhes vamos impor dependem de cada problema. Este fato deve ser considerado em qualquer implementação dos algoritmos numéricos que se queira coerente com o embasamento teórico.

Sendo C a constante em (3.2.8), consideremos o truncamento de f dado,

 $^{^1\}mathrm{A}$ notação também procura enfatizar que a dependência de $\ C$ com relação a $\ T$ não é apenas por intermédio da norma de $\ g$. É claro que se deve fazer a correspondente hipótese de limitação de $\ g$ nessa norma.

 $^{^{2}}$ Uma possível expressão do vernáculo seria **truncamento**. Preferimos evitá-la, uma vez que ela já conduz a alguma confusão por ser empregada tanto para o erro associado à pura eliminação de dígitos na representação de um real, em oposição ao **arredondamento** – *rounding* –, como para traduzir "*truncation error*".

por exemplo, como $f_C := f \cdot \psi_C$, onde ψ_C é definida por

$$\psi_{C}(x) := \begin{bmatrix} 1 & |x| \leq C \\ \exp\left[\frac{e^{\{1/(C-|x|)\}}}{|x|-2C}\right] & C < |x| < 2C \\ 0 & 2C \leq |x| \end{bmatrix}$$

Seja u_C a solução de BMM_g com f_C no lugar de f. Como u_C satisfaz a mesma limitação que u, já que esta só depende de $\{T, u_0, g\}$, tem-se que $f(u_C) = f_C(u_C)$ e, portanto, u_C é solução também de (3.2.5)-(3.2.6), com o termo não linear original. A unicidade nos dá então que u_C é a solução procurada do problema. Consequentemente nossos algoritmos podem sempre se limitar a termos não lineares **truncados**.

Para tornar mais claro o ponto discutido, em particular o desacoplamento mencionado, descrevemos agora o algoritmo preditor-corretor mencionado. Seja $\mathcal{S}_h^{\ell,r}$, cf. [23], pp. 181-ff, um espaço de funções de classe C^r que coincidem com algum polinômio de grau inferior a ℓ em cada um dos intervalos – de comprimentos majorados por h– os quais compõem uma partição finita de [0,1]. Define-se o algoritmo, para cada partição uniforme de [0,T], denotando

$$t_0 := 0, t_1 := k, t_2 := 2k, \dots, t_N = Nk = T,$$

e definindo as aproximações $U_n \in \mathcal{S}_h^{\ell,r}$ para $u(\cdot, t_n)$ por:

 $\begin{array}{l} \operatorname{Passo 0} \\ (U^0 \mid w)_1 \ = \ (u_0 \mid w)_1 \\ \\ \operatorname{Pr\acute{e}-passo } n \ , \ 1 \ \leq \ n \ \leq \ N \\ \\ \left(\frac{\hat{U}^n - U^{n-1}}{k} \mid w \right)_1 \ = \ \langle \ f(U^{n-1}) \mid w_x \ \rangle + \langle g_{n-1/2} \mid w \rangle \\ \\ \\ \operatorname{Passo } n \ , \ 1 \ \leq \ n \ \leq \ N \\ \\ \left(\frac{U^n - U^{n-1}}{k} \mid w \right)_1 \ = \ \langle \ f(\frac{\hat{U}^n + U^{n-1}}{k}) \mid w_x \ \rangle \ + \ \langle g_{n-1/2} \mid w \rangle \end{array} \right] \\ \end{array}$

O resultado teórico, confirmado em experimentos computacionais, a que se chega afirma que a família de aproximações U_n geradas por esse algoritmo:

- É incondicionalmente estável.
- Exibe convergência quadrática relativamente ao parâmetro k de discretização temporal.
- Apresenta convergência ótima com referência à discretização espacial; ou seja, a ordem do erro em termos de h é a mesma que a do erro da interpolação ou da projeção ortogonal sobre $S_h^{\ell,r}$.

Capítulo 4

Compacidade – Problemas Inversos, Regularização

4.1 Introdução

O conceito de **compacidade** se revelou de fundamental interesse e importância na obtenção de resultados tanto teóricos como numéricos para equações diferenciais, equações integrais e inequações variacionais, conforme ilustrado, por exemplo, nas seções 2.2, 1.3. Por outro lado, o fato básico de ser sempre compacto o produto de um operador compacto por qualquer operador limitado traz como consequência a necessidade de um tratamento especial para uma grande parcela dos chamados **problemas inversos**. Estando esses, em geral, associados à inversão de um operador compacto em espaços de dimensão infinita, os operadores essenciais no seu tratamento são necessariamente descontínuos, o que conduz a um **problema mal-posto**, no sentido de Hadamard, cf. [21]. Uma das abordagens mais bem sucedidas nessa direção foi a **técnica de regularização**¹ de Tykhonov [70, 71], ver também [72, 39].

Uma pergunta natural se pode formular relativamente à descontinuidade de problemas inversos, cf. [24]: fossem outras as normas, nos espaços de saída e de chegada, não se poderia ter a continuidade dos operadores envolvidos? E, em caso positivo, teria sentido – e qual – a escolha de tais normas? Uma resposta foi descoberta por P. Knabner, que em [43] intro-

 $^{^1 \}mathrm{Observe}$ que este termo se refere também a outra técnica, ver seção 2.2.

duziu o conceito de problemas essencialmente mal-postos. Estudando o problema inverso de Stefan descrito a seguir, ele concluiu que, relativamente a qualquer par de normas relacionadas (naturalmente) às de Sobolev, tal problema é sempre mal-posto. O problema mencionado é o de determinar, a partir de funções dadas u e s, as funções ϕ e f determinadas pelos vínculos expressos em

$$\begin{array}{ll} \partial_t u - \alpha \ \partial_x^2 u &= 0 & 0 \le x \le s(t) \\ \partial_x u(0,t) &= \phi(t) & t \ge 0 \\ u(x,0) &= f(x) & 0 \le x \le b = s(0) \\ -\dot{s}(t) &= \partial_x u(s(t),t) \end{array} \right] .$$
(4.1.1)

4.2 A regularização de Tykhonov

A técnica chamada de regularização de Tykhonov objetiva evitar funções altamente oscilatórias que, apesar de distantes dos dados a determinar, geram imagens, via operador compacto, próximas das imagens desses dados, mesmo sendo os últimos suficientemente regulares. Assim, aproximações numéricas para o operador inverso podem conduzir a resultados que mascaram a real solução. Exporemos a seguir esse método aplicado ao problema tratado originalmente por Tykhonov. Vale a pena mencionar ter sido ele também obtido de forma independente por D.L. Phillips, cujo artigo [54] foi publicado um ano antes de [70, 71].

Consideramos a equação integral de Fredholm de 1^a espécie

$$\int_{a}^{b} K(x,y) f(y) dy = g(x) , \quad c \le x \le d , \qquad (4.2.2)$$

que é escrita A f = g, com o operador

$$A : C^1[a,b] \to L^2[c,d]$$

sendo contínuo o **núcleo** K. A norma $\|\cdot\|_\infty$ será utilizada no domínio de A, denotado então por X.

Uma técnica numérica constrói aproximações via **mínimos quadrados**, isto é, minimiza o funcional

$$\Lambda_g(f) := \|Af - g\|_2^2 = \int_c^d |(Af - g)(x)|^2 dx$$
Essa técnica é refinada pelo método de Tykhonov, o qual introduz, com pesos integráveis e positivos p e q, um funcional regularizador $\Omega(f)$ definido por

$$\Omega(f) := \int_a^b \left[p(x) |f'(x)|^2 + q(x) |f(x)|^2 \right] dx ,$$

para em seguida minimizar

$$\Phi_g(\alpha; f) := \Lambda_g(f) + \alpha \Omega(f) ,$$

onde $\alpha > 0$ é um parâmetro a ser escolhido. Verifica-se ser compacto o conjunto $M_{\beta} := \{ f \in X \mid \Omega(f) \leq \beta^2 \}$, para $\beta > 0$ arbitrário. E é nesse compacto que se minimiza $\Phi_q(\alpha; f)$.

Observemos inicialmente que, na prática, em vez de dispormos dos dados exatos \hat{g} temos de trabalhar com os dados corrompidos, ou aproximados g_{ϵ} . Vamos supor:

• são válidas, para a família de dados aproximados, estimativas do tipo

$$\|g_{\epsilon} - \hat{g}\| \le \epsilon ; \qquad (4.2.3)$$

• o problema de minimização acima descrito tem sempre solução única, isto é, existem e são univocamente caracterizadas as ditas soluções regularizadas

$$f_{\epsilon} := \min_{f \in M_{\beta}} \Phi_{g_{\epsilon}}(\alpha; f) . \qquad (4.2.4)$$

Demonstra-se então o seguinte

Teorema. Denotemos por \hat{f} a solução exata do problema (associada aos dados exatos \hat{g}). Supondo

ser A biunívoco,

que valem as hipóteses correspondentes a (4.2.3), (4.2.4)

e que foram escolhidos parâmetros $\alpha = \alpha(\epsilon)$ para os quais se podem determinar constantes positivas C_1 , C_2 satisfazendo

$$C_1 \epsilon^2 \leq \alpha \leq C_2 \epsilon^2$$
,

tem-se que

$$\lim_{\epsilon \to 0} \| f_{\epsilon} - \hat{f} \|_{\infty} = 0.$$

Demonstração Deduz-se, para qualquer solução aproximada f_ϵ , a estimativa

$$\begin{split} \|Af_{\epsilon} - g_{\epsilon}\|^2 + \alpha \Omega(\hat{f}) &\leq \|A\hat{f} - g_{\epsilon}\|^2 + \alpha \Omega(\hat{f}) = \\ &= \|\hat{g} - g_{\epsilon}\|^2 + \alpha \Omega(\hat{f}) \leq \epsilon^2 + \alpha \Omega(\hat{f}) \\ &\leq \epsilon^2 + C_2 \epsilon^2 \Omega(\hat{f}) \,. \end{split}$$

Concluímos, a partir da penúltima desigualdade, que

$$\alpha \Omega(f_{\epsilon}) \leq \epsilon^2 + \alpha \Omega(\hat{f}) \leq \frac{\alpha}{C_1} + \alpha \Omega(\hat{f}) , \qquad (4.2.5)$$

enquanto da última segue que

$$||Af_{\epsilon} - \hat{g}|| = ||Af_{\epsilon} - g_{\epsilon} + g_{\epsilon} - \hat{g}|| \le \epsilon (1 + C_2 \Omega(\hat{f}))^{1/2} .$$
(4.2.6)

A desigual dade (4.2.5) garante que as $f_\epsilon\,$ pertencem a um conjunto limitado de H^1 , logo a um compacto de $C^0\,$ munido da norma do sup. Portanto, essa família possui uma subsequência uniformemente convergente. Pergunta-se:

$$f_{\epsilon} \rightarrow \hat{f}$$
?

Este o objetivo de demonstrarmos (4.2.6). Se uma subsequência qualquer de f_{ϵ} for escolhida, provaremos que ela contém uma subsequência que necessariamente converge para \hat{f} . Daí se conclui que toda a família f_{ϵ} converge para \hat{f} .

De fato, se para uma dada subsequência $f_{\epsilon'}$ se tiver $f_{\epsilon'}\to\phi$, pela continuidade de Ae por (4.2.6) se obtém

$$|| A\phi - \hat{g} || = \lim_{\epsilon'} || Af_{\epsilon}' - \hat{g} || = 0.$$

Mas, sendo A biunívoco, segue que $\phi = \hat{f}$.

4.3 O índice de estabilidade

Para contornar as características dos problemas inversos que dificultam seu tratamento computacional é indispensável "*ajudar*" os resultados gerais mediante o emprego de tantas informações quantas forem disponíveis, em

38

cada problema específico. De qualquer forma, muitos dos parâmetros introduzidos nas técnicas utilizadas têm componentes um tanto aleatórios², sendo sempre necessário algum ajuste. Não se consegue evitar uma certa *"tentativa-e-erro*".

Um veio recentemente descoberto indica uma abordagem mais sistemática, mais precisa para a inversão, uma vez que exibe uma quantificação do nível de estabilidade de cada problema. É o conceito de **índice de estabilidade**, introduzido em [35]. Esse número é calculado a partir dos dados do problema e indica o nível de estabilidade da inversão em uma dada vizinhança desses dados. Para valores suficientemente pequenos de tal parâmetro os correspondentes potenciais variam muito pouco, podendo-se identificar todos eles a um único potencial. Por outro lado, se o índice ultrapassar um certo limiar, pode-se assegurar ser a inversão nessa vizinhança um procedimento **instável**. Neste caso, não é possível, identificar univocamente o potencial a partir dos dados disponíveis.

Apesar de originalmente definido esse conceito para o espalhamento inverso com energia fixa, ele pode ser utilizado em diferentes tipos de problemas inversos, sendo esta certamente uma rica fonte de aplicações.

4.4 Um exemplo: espalhamento inverso unidimensional

Os problemas ditos de **espalhamento** podem ser descritos sucintamente como o estudo de operadores – ou seja, de relações – entre o comportamento de ondas antes e após sofrer a influência de um obstáculo, dito **potencial**. Quando é conhecido esse potencial e se deseja detalhar sua atuação, temos o chamado **problema direto**. Diz-se que o **problema inverso** é aquele em que se quer determinar esse potencial – ou algumas informações sobre ele – a partir de dados gerados na transformação das ondas gerada pela sua influência.

Discutiremos, no caso estacionário, o espalhamento unidimensional associado ao **operador de Schrödinger**

$$H_p u := -u'' + p u , \qquad (4.4.7)$$

²De fato, estamos nos referindo a não serem fixos esses parâmetros, independentemente dos dados do problema. Ao contrário, devem ser calibrados, "*afinados*" a estes, cf. [46, 49]. Convém mencionar a utilização de métodos estocásticos acoplados à técnica de regularização, cf. [35].

atuando em toda a reta, onde o potencial p deve satisfazer condições de integrabilidade e decaimento no infinito de forma a garantir:

Atuando em $L^2(I\!\!R)$, o operador H_p tem seu espectro contínuo ocupando toda a semi-reta $I\!\!R^+$, com multiplicidade2, podendo existir um conjunto finito de autovalores λ_j , todos negativos.

A cada ponto $k^2\,$ no espectro contínuo se pode associar um espaço bidimensional de **autofunções generalizadas** $\,u(x;k)$, definidas como soluções de

$$-u'' + p u = k^2 u, (4.4.8)$$

as quais não pertencem a $L^2(\mathbb{R})$, mas são limitadas. Sua propriedade básica no presente contexto é o comportamento assintótico: demonstra-se a existência de quatro coeficientes,

$$A_{\pm} = A_{\pm}(u) , \ B_{\pm} = B_{\pm}(u) ,$$

para os quais se verifica que

$$\lim_{x \to \pm \infty} \left[u(x,k) - (A_{\pm}e^{ikx} + B_{\pm}e^{-ikx}) \right] = 0.$$
 (4.4.9)

Tem-se portanto que as soluções de (4.4.8) se comportam, para $|x| \sim \infty$, como as soluções da equação livre

$$u'' + k^2 u = 0 ,$$

conhecidas como ondas planas. Tais soluções se denominam ondas de partida (ou, respectivamente, de chegada) conforme se aproximem (ou se afastem) da origem a partir de (ou para) $\pm \infty$. Assim, os coeficientes assintóticos A_- , B_+ estão associados às ondas de chegada, enquanto A_+ , B_- às ondas de partida.

Demonstra-se, para cada potencial na família acima descrita, a existência de uma relação linear entre esses coeficientes. Ou seja, para cada k está definida uma matriz $2~\times~2$, chamada **matriz de espalhamento**, ou matrizS, que satisfaz³

$$S\left(\begin{array}{c}A_{-}\\B_{+}\end{array}\right) = \left(\begin{array}{c}A_{+}\\B_{-}\end{array}\right) \,. \tag{4.4.10}$$

 $^{^{3}\}mathrm{Claro}$ que a matriz $S~=~S_{p}~$ depende apenas do parâmetro~k, e não das particulares soluções~u .

No presente contexto os problemas direto e inverso são definidos pelas transformações

$$p \mapsto S , \quad S \mapsto p , \qquad (4.4.11)$$

respectivamente. Propriedades da matriz S garantem que ela fica completamente caracterizada a partir de um de seus elementos, por exemplo, s_{12} , conhecido como o **coeficiente de reflexão**. Trata-se portanto de considerar (4.4.11) com $r := s_{12}$ substituindo S.

Os dois resultados a seguir, cf.[16], garantem a estabilidade para os problemas direto e inverso nessa formulação, dispensando-se portanto a regularização no seu tratamento numérico, ver [17, 11, 12]. O primeiro teorema introduz no espaço de potenciais uma norma que envolve tanto a função como seus dois primeiros momentos. Já o segundo resultado trabalha com uma norma associada à transformada de Fourier do coeficiente de reflexão e ao primeiro momento dessa transformada.

Teorema (estabilidade do problema direto) Seja \mathcal{P} o conjunto das funções reais seccionalmente contínuas p(x), definidas na reta, nulas em alguma semi-reta { $x \leq \alpha$ } e tais que

$$p(x) = \mathbf{o}(x^{-2}) \ se \ x \sim +\infty \ ;$$

o correspondente operador de Schrödinger – definido em (4.4.7) – tenha espectro pontual vazio.

Munindo $\,\mathcal{P}\,$ da norma

$$||p|| := ||p||_{\infty} + \int_{\mathbb{R}} [1+|x|] |p(x)|dx + \sup_{\mathbb{R}} (x^{2}|p(x)|)]$$

o operador (direto) de \mathcal{P} em $L^2(\mathbb{R})$ é contínuo.

Teorema (estabilidade do problema inverso) Denotemos por \mathcal{R} o conjunto das funções complexas contínuas r(k), definidas na reta, cujas transformadas de Fourier F são absolutamente contínuas, sendo suas derivadas limitadas e satisfazendo

$$\int_{\alpha}^{\infty} (1 + |t|) |F'(t)| dt \leq C_{\alpha} < \infty, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R},$$
$$F'(t) = \mathbf{o}(|t|^{-3}), \quad |t| \sim \infty.$$

Suponhamos ainda para r as hipóteses:

$$r(k) = \mathcal{O}(1/|k|), \quad |k| \sim \infty;$$

$$|r(k)| < 1$$
, $k \neq 0$; $|r(0)| = 1 \implies r(0) = -1$.

Munindo então \mathcal{R} da distância associada à norma

$$||r|| := ||F'||_{\infty} + \int_{I\!\!R} [1+|t|] |F'(t)| dt$$

e \mathcal{P} da métrica da convergência uniforme sobre compactos, o operador (inverso) de \mathcal{R} em \mathcal{P} é contínuo.

Objetivamos com a apresentação desses resultados chamar a atenção para o fato de que não se tem necessariamente instabilidade nos problemas inversos. Nessa direção, resultados mais recentes para esse mesmo problema foram obtidos em [51] e [36], devendo-se citar também [66] e [67].

Capítulo 5

$Contraexemplos \times a proximações$

5.1 Introdução

Na compreensão das estruturas matemáticas, um lugar especial está reservado à construção e exibição de contraexemplos, cf. [33, 59, 41, 56, 31, 61]. Estes, num certo sentido, dão a palavra final, encerrando dúvidas originadas de conjecturas ou da necessidade de determinados resultados. Mas, no contexto de métodos numéricos, os contra-exemplos necessitam ser usados com discernimento adicional: é indispensável ter em mente que com os algoritmos computacionais apenas se consegue **simular** situações ou problemas da teoria matemática. É que praticamente todos aqueles entes originados da teoria ou da modelagem matemática com os quais lidamos computacionalmente são apenas **aproximados**, desde a reta real aos conceitos definidos por processos limite. Esta é uma conseqüência de ser necessariamente finito – em termos de tempo de execução e de volume de dados empregados – qualquer procedimento computacional.

5.2 Uma releitura

Consideremos o problema da interpolação numérica dos valores de uma função real f definida em um intervalo [a, b]. Supondo conhecidos os valores $f(x_i)$ nos N+1 pontos de $X = X_N := \{x_1, x_2, \ldots, x_{N+1}\}$, sabe-se existir um único polinômio $p = p_X$ de grau N, dito interpolador

de f em X, tal que

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N+1.$$

À pergunta: usando-se esse instrumento, a interpolação polinomial, e tomando-se mais e mais pontos para o conjunto X, ou seja, conhecendo-se mais valores de f, melhora-se o nível da informação sobre aqueles valores desconhecidos no complemento de X? Em termos mais precisos, como se comporta o **erro da interpolação**

$$e(x) := |p(x) - f(x)|, \quad x \neq x_i$$
?

Há pouco mais de cem anos, Runge deu uma resposta taxativa, ao exibir, cf. [57], a função

$$R(x) := \frac{1}{1 + 25 x^2}$$

que, interpolada nos 2N+1 pontos do conjunto

$$\mathcal{X}_N := \{ 0, \pm 1/N, \pm 2/N, \dots, \pm 1 \mp 1/N, \pm 1 \},$$

gera um polinômio cujo erro associado satisfaz

$$\max_{-1 \le x \le 1} e_N(x) \to \infty \quad \text{se } N \to \infty .$$

Segue o gráfico de $\,R\,$ e dos correspondentes polinômios interpoladores de grau5e15.

O aprofundamento do estudo do erro e(x) na interpolação permite quantificá-lo em termos do grau do polinômio, da distribuição dos pontos e da regularidade das derivadas da função interpolada. Este resultado se revelou básico no desenvolvimento da teoria do método dos elementos finitos (M E F), cf. [25]. Com este método, baseado na interpolação polinomial, se pode obter precisão extremamente elevada, apesar de ser um prognóstico desanimador para a técnica de interpolação a leitura sugerida, à primeira vista, pelo exemplo de Runge. Assim, deve-se enfatizar a importância das informações sobre o comportamento assintótico do erro na interpolação como fundamental para o desenvolvimento de um instrumento alternativo, no caso, o MEF.

Um ponto que desejamos salientar neste capítulo é que as restrições práticas de problemas reais podem forçar os parâmetros presentes nos algoritmos numéricos – que, na teoria, devem ser tomados "suficientemente grandes" – a ficarem restritos a valores não tão elevados. De fato, é comum ocorrer mesmo a impossibilidade de serem eles tomados acima de um dado patamar,

44



Figura 5.1: Exemplo de Runge – interpolações

devido a vínculos reais, conforme ilustramos na subseção que segue.

O outro tópico que enfatizamos está ligado a fórmulas explícitas. Na cultura matemática, a busca de fórmulas fechadas e a sensação um tanto disseminada de que sua obtenção, em um dado problema, é o que se necessita para "resolvê-lo" conduziu:

 à quase onipresença, em textos didáticos ou de pesquisa, da equivocada afirmação de que "como não existe¹ uma fórmula fechada para esse tipo de problema, tem-se de recorrer a soluções calculadas com o emprego de computadores";

 $^{^1\}mathrm{Deveria}$ ser usada a expressão: "não se conseguiu".

à decorrente necessidade de se mostrar que algoritmos numéricos obtidos diretamente de algumas fórmulas explícitas podem ser computacionalmente desastrosos. Estamos nos referindo, por exemplo, à fórmula de Cramer (com o cálculo dos determinantes via definição), cf.[60], ou à obtenção dos autovalores de uma matriz via solução da equação característica, cf. [20], ou ainda à utilização direta da fórmula de Gram-Schmidt, cf. [23].

Reforçando essa linha de discussão, apresentamos, na segunda subseção, um exemplo de uma situação em que foi possível transformar uma fórmula explícita em um algoritmo numérico operacional. Retornamos aí ao problema de espalhamento inverso introduzido na Seção 4.4.

5.2.1 Sensoriamento remoto

Indispensável para as pesquisas em Meteorologia são informações sobre o estado termodinâmico da atmosfera em diferentes locais. Nos dias atuais estas são obtidas principalmente por intermédio das técnicas de sensoriamento remoto: medições radiométricas efetuadas por satélites artificiais, portadores de um instrumental tecnológico de sofisticação crescente, seguidas do processamento matemático-computacional desses dados *em terra*. A modelagem matemática do sistema conduz à chamada equação integral de transferência radiativa, que tem a forma de (4.2.2), cf. [32]. O conjunto das medidas geradas necessita, por assim dizer, de uma decodificação afim de dar a conhecer os dados que realmente interessam, por exemplo, temperatura e umidade na camada atmosférica.

Uma técnica de tratamento numérico consiste em aproximar (4.2.2) por um sistema linear de equações algébricas, a partir de alguma discretização associada a convenientes regularizações dessas equações integrais. Observe que cada equação corresponde a um ponto da malha gerada a partir da órbita do satélite e do alcance de seu instrumental, cf. [32].

Do ponto de vista teórico, em (4.2.2) é **conhecida** a função g, ou seja, estão disponíveis informações numéricas sobre ela em todo o seu domínio. Na prática, no caso particular deste problema, temos acesso apenas a um número finito de (medidas aproximadas de seus) valores $g(x_{\nu})$, para um conjunto de pontos { x_{ν} , $\nu = 1, \ldots, K$ }. E este parâmetro K é um dado espectral do equipamento empregado, o número de freqüências em que atua o sistema de rádio. Está portanto *a priori* fixado, bem limitado –

46

na prática nem chegando à ordem de dezenas: por exemplo, [32] menciona $K\ =\ 12$.

As conclusões obtidas com alguns dos algoritmos examinados em [32], particularmente com a implementação de uma alternativa aí proposta, fornecem um exemplo de que se pode chegar a significativos resultados numéricos mesmo às vezes sujeitos a fortes limitações nos parâmetros, os quais gostaríamos de ter "mais próximos do ∞ ".

5.2.2 Fórmula explícita = algoritmo numérico?

Mencionamos acima a inconveniência, melhor dizendo, impossibilidade, de utilizar a fórmula de Cramer como um algoritmo para solução de sistemas de equações algébricas lineares. Nesta subseção retomaremos o problema de espalhamento inverso e empregaremos justamente essa mesma fórmula – a qual motivou a construção de um algoritmo computacional que se revelou eficiente ou, ao menos, satisfatório – conforme descrito em [17], na versão seqüencial, sendo a sua implementação em paralelo exposta em [12].

Verifica-se que a matriz de espalhamento mencionada na Seção 4.4 é caracterizada por um de seus elementos, por exemplo, r(k), o chamado **coeficiente de reflexão**. A partir dele constrói-se uma equação integral do tipo Fredholm, a **equação de Marčenko**, qual seja,

$$K(x,y) + \int_{x}^{\infty} \omega(t+y)K(x,t)dt + \omega(x+y) = 0, \quad y \ge 0, \quad (5.2.1)$$

cujo núcleo é a transformada de Fourier

$$\omega(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(k) e^{ikt} dt$$

e de cuja solução se obtém o potencial por meio da expressão

$$q(x) = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx} K(x,x) . \qquad (5.2.2)$$

As dificuldades computacionais incorporadas ao considerar esse procedimento como um algoritmo numérico podem ser contornadas por intermédio da observação de que: sendo o coeficiente de reflexão uma função racional com L polos no semiplano inferior, { ρ_1, \ldots, ρ_L }, pode-se concluir ter K a forma

$$K(x,y) = \sum_{j=1}^{L} f_j(x) e^{i\rho_j y}.$$

Daí decorre terem os coeficientes $\ f_{j} \$ de satisfazer o sistema linear de equações algébricas

$$f_{j}(x) - \nu_{j} \sum_{m=1}^{L} \frac{e^{i(\rho_{j} + \rho_{m})x}}{\rho_{j} + \rho_{m}} f_{m}(x) = -i \nu_{j} e^{i\rho_{j}x} , \quad j = 1, \dots, L , \qquad (5.2.3)$$

onde ν_i denota o resíduo do coeficiente de reflexão r no polo ρ_i . A esse sistema aplica-se a regra de Cramer e a expressão (5.2.2), para concluir que

$$q(x) = -2 \frac{d^2}{dx^2} \ln \det[I - A(x)], \qquad (5.2.4)$$

onde A é a matriz do sistema (5.2.3), I a matriz identidade. O passo final do algoritmo é aproximar um coeficiente de reflexão dado por um elemento da família dos coeficientes de reflexão expressos por funções racionais, conforme descrito em [17].

Estudos posteriores desse sistema e sua implementação em paralelo foram conduzidos em [11], onde em particular se desenvolveu um eficiente método para a **transformada rápida de Fourier**, ver também [12].

Alguns detalhes na dedução do algoritmo que descrevemos foram eliminados ou simplificados. É importante contudo mencionar que não é a expressão (5.2.4) que se implementa para chegar ao valor do potencial, mas se resolve efetivamente um sistema que tem a mesma matriz de coeficientes que (5.2.3) e cujas incógnitas são as derivadas dos coeficientes $f'_j(x)$, uma vez que o potencial é obtido a partir de

$$\frac{d}{dx} K(x,x) = \sum_{j=1}^{L} \{ f'_j(x) + i\rho_j \} e^{i\rho_j x} .$$

Capítulo 6

Operadores pseudodiferenciais e condições de contorno transparentes

6.1 Introdução – definição e notações

Consideremos o operador **transformada de Fourier** \mathcal{F} atuando no espaço \mathcal{S} de funções complexas, definidas na reta real, infinitamente deriváveis e rapidamente decrescentes¹:

$$\begin{array}{ccccc} \mathcal{F} : & \mathcal{S} \to & \mathcal{S} \\ & \phi \mapsto & \mathcal{F}\phi : & \mathbb{R} \to & \mathbb{C} \\ & & t \mapsto & [\mathcal{F}\phi](t) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \phi(x) \, e^{-ixt} \, dx \end{array} \right].$$

$$(6.1.1)$$

Sabe-se, e este foi um dos fatos que impulsionaram a pesquisa sobre es
se operador, que se verifica a relação $\,$

$$\left[\mathcal{F} \, d\phi/dx\right](t) = (it) \cdot \left[\mathcal{F} \, \phi\right](t) \tag{6.1.2}$$

ou

$$\mathcal{F} \circ D = \mathbf{M} \circ \mathcal{F}, \qquad (6.1.3)$$

 $^{^{1}\}mathrm{Espaço}$ de Schwartz, ver, p.ex., [23], pp. 129.

50 Operadores pseudodiferenciais e condições de contorno transparentes

onde D := d/dx e

Dado um polinômio $p(\lambda) := \sum_{i=1}^{n} a_i \lambda^i$, a ele está associado o operador diferencial $p(D) : \mathcal{S} \to \mathcal{S}$

de forma que (6.1.3) conduz a

$$\mathcal{F} \circ p(D) = p(\mathbf{M}) \circ \mathcal{F},$$

ou seja,

$$\mathcal{F}\left[p(D)\phi\right](t) = p(it) \cdot \left[\mathcal{F}\phi\right](t) . \tag{6.1.4}$$

Se considerarmos, com $\ L\ :=\ p(D)$, a equação diferencial

$$L u = f$$
, (6.1.5)

(6.1.4) implica a equivalência entre (6.1.5) e

$$p(it) \cdot [\mathcal{F}u](t) = [\mathcal{F}f](t) ,$$

donde se obtém que

$$u = \mathcal{F}^{-1} \left[\frac{\left[\mathcal{F} f \right](t)}{p(it)} \right] \,,$$

desde que o quociente do segundo membro pertença
a $~\mathcal{S}$, uma condição que certamente deve exigir que o pol
inômio~p~não pos
sua zeros no eixo imaginário.

Voltemos à expressão (6.1.2), considerando agora o operador

$$\begin{array}{cccc} \mathbf{P} & : & \mathcal{S} \to & \mathcal{S} \\ & & \psi \mapsto & \mathbf{P}\psi : & I\!\!R \to & \mathcal{C} \\ & & t \mapsto & [\mathbf{P}\psi](t) := i|t| \ \psi(t) \end{array} \right] \quad ,$$

o qual induz um outro operador em $~\mathcal{S}$, a saber:

$$\Psi : \quad \begin{array}{ccc} \mathcal{S} \to & \mathcal{S} \\ f \to & \Psi f := \mathcal{F}^{-1}[\mathbf{P}(\mathcal{F}f)] \end{array} \right] .$$
 (6.1.6)

Que se pode deduzir sobre o operador definido em (6.1.6)? Primeiro, observemos que, como

$$i|t| \int_{I\!\!R} f(x) e^{-ixt} dx = \begin{bmatrix} (it) \int_{I\!\!R} f(x) e^{-ixt} dx, & t \ge 0\\ (-it) \int_{I\!\!R} f(x) e^{-ixt} dx, & t \le 0 \end{bmatrix},$$

segue de (6.1.2) que

$$\left[\mathbf{P} \left(\mathcal{F} f \right) \right] (t) = \mathbf{sgn}(t) \left[\left(\mathcal{F} f' \right) \right] (t) ,$$

onde $\,{\bf sgn}\,$ é a função sinal

$$\mathbf{sgn}(t) := \begin{bmatrix} t/|t|, & t \neq 0\\ 0, & t = 0 \end{bmatrix}$$

Voltemos outra vez a (6.1.6). Se, na definição de Ψ , substituirmos **P** por **M**, obteremos (6.1.3), isto é, uma forma alternativa para expressar o operador diferencial D. O que distingue essa maneira de definir esse operador da forma como é ele tradicionalmente introduzido? Esta definição é feita de uma forma **global**, enquanto estamos mais habituados a ser ele apresentado **localmente** – pois trata-se de um operador **pontual**. Já Ψ foi introduzido globalmente, sendo um operador que não possui uma definição pontual.

Por outro lado, o que se necessita para caracterizar, para conhecer Ψ ? Verifica-se que basta apenas o conhecimento da função $t \mapsto i|t|$ ou, em outras palavras: esta função **carrega** toda a informação sobre o operador Ψ , podendo assim *representá-lo*. Por isso é ela chamada de seu **símbolo**.

Observe que na definição de ${\bf P}\,$ e, portanto de ${\bf \Psi}$, poderia ter sido escolhida outra função no lugar de $\,i|t|\,$, sob convenientes restrições. Cada uma das funções escolhidas ρ daria origem a um operador ${\bf \Psi}_{\rho}$ tendo ρ por seu símbolo. A expressão que corresponde a (6.1.6) é então

$$[\Psi_{\rho} f](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ixt} \rho(t) \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-its} f(s) ds \right] dt .$$
 (6.1.7)

Os operadores Ψ_{ρ} assim construídos são denominados **operadores pseudo**diferenciais.

Em resumo: quando, em (6.1.6), o operador Ψ é definido como o produto por um polinômio, a expressão (6.1.7) dá origem a um operador diferencial; quando se toma o produto por outro tipo de funções – em uma classe que se deve tornar precisa – (6.1.7) define um operador pseudodiferencial, ver [68, 29].

6.2 A equação das ondas (unidimensional)

Muitos são os fenômenos modelados matematicamente por meio de sistemas diferenciais que operam sobre funções com domínio não limitado. É o caso de problemas de espalhamento, de detecção geofísica, sensoriamento remoto, entre outros. Na resolução numérica desses problemas, é comum o algoritmo ser desenhado para simular um domínio limitado, criando-se então uma **fronteira artificial**. Assim, é necessário introduzir condições de contorno também artificiais, e estas ficam sujeitas a um vínculo natural, o de não interferir no estado do sistema em estudo. Ilustraremos inicialmente essa situação conforme encontrada no contexto da equação unidimensional de propagação de ondas – equação de d'Alembert –, apesar de serem mais genuínas as dificuldades que desejamos ilustrar no caso de dimensões superiores, o qual expomos em seguida, cf. [34].

Dependendo das condições de contorno impostas na fronteira artificial, uma onda gerada numericamente será **refletida**, vindo a *mascarar*, no domínio considerado, a simulação do estado do sistema sob análise: o esquema computacional utilizado pode então apresentar convergência não para a solução que se está buscando, mas para alguma outra função. Trata-se de uma situação semelhante àquela em que, tendo-se a **consistência** apenas **condicional** de um esquema que se sabe **incondicionalmente estável** – geram-se subsequências **convergentes**, e são assim obtidas soluções numéricas que não tendem para a verdadeira solução do sistema em estudo, conforme descrito no Capítulo 2.

A simulação computacional exige então buscar condições de contorno que não *perturbem* o problema, que não impliquem em reflexões das ondas de volta para dentro do domínio. Tais condições são chamadas de **transparentes**, ou **absorventes**.

Fixemos as idéias considerando na semi-reta $\{x > 0\}$ o sistema

$$\partial^{2} u/\partial t^{2} - \partial^{2} u/\partial x^{2} = f \qquad \substack{x > 0 \\ t > 0} \\ u(x,0) = U_{0}(x) \\ u_{t}(x,0) = V_{0}(x) \\ u(0,t) = 0 \qquad t > 0 \end{bmatrix} .$$
 (6.2.8)

Deduziu d'Alembert, a partir da fatoração do operador

$$\Box := \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\right),$$

que as soluções desse sistema têm a forma²

$$u(x,t) = \psi(x+t) + \phi(x-t) ,$$

ou seja, são a soma de ondas estacionárias que viajam para a esquerda ou para a direita. Elas estão denotadas na Fig. $6.1~{\rm por}$

 $^{^2 \}rm Normalizadas$ as constantes, a velocidade de propagação se torna igual a 1.



Figura 6.1 – Ondas estacionárias unidimensionais

 $\theta_+(x,t) \ := \ \phi(x-t) \ , \ \ \theta_-(x,t) \ := \ \phi(x+t),$ satisfazendo

$$(\partial/\partial t \mp \partial/\partial x) \ \theta_{\pm}(x,t) = 0$$
.

Suponhamos que, para soluções numéricas, nos restringiremos ao intervalo[0,L], comL>0. Exigir que não haja reflexão na fronteira artificial $\{\ x\ =\ L\ \}$ equivale portanto a impor a restrição

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\right) u = 0 \quad \left[\begin{array}{c} x = L\\ t > 0 \end{array}\right]$$
(6.2.9)

Por compatibilidade, devemos exigir, no problema original, as hipóteses

$$\begin{array}{ll} f(x,t) &= 0\\ U_0(x) &= 0\\ V_0(x) &= 0 \end{array} \end{array} \right] \begin{array}{l} x \ge L\\ t > 0 \end{array} .$$
 (6.2.10)

Assim, não teremos, no ponto $\,x\,=\,L$, ondas viajando para a esquerda e originadas à sua direita.

Verifica-se que as ondas calculadas por meio de qualquer esquema convergente associado a (6.2.8) desaparecem, ao chegarem à fronteira artificialmente criada, não afetando aquelas que são geradas pelos vínculos impostos ao problema teórico, conforme ilustrado na Fig. 6.2.





Figura 6.2 – Típica solução numérica de (6.2.8) com o emprego da condição de contorno transparente (6.2.9)

6.3 A equação das ondas (no \mathbb{R}^n , $n \ge 2$)

Examinemos agora o que ocorre para dimensões superiores, já sendo suficiente a análise do caso $\,n\,=\,2:$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f \qquad t > 0$$

$$\begin{array}{c} u(x,y,0) = & U_0(x,y) \\ u_t(x,y,0) = & U_1(x,y) \end{array} \right] \qquad t = 0$$
(6.3.11)

para $x\,,~y~\in {I\!\!R}^2$.

O domínio de trabalho computacional será o quadrado $\Omega:=[-L,\ L]^2$ e, de forma análoga ao caso unidimensional, ver (6.2.10), faremos hipóteses adicionais sobre o meio residente no seu complementar $I\!\!R^2 \backslash \Omega$, o qual já supusemos homogêneo e isotrópico:

$$\begin{array}{cccc} U_0(x,y) &= U_1(x,y) &= 0 \\ f(x,y,t) &= 0 \end{array} \right] \quad x \,, \ y \; \in \; I\!\!R^2 \backslash \Omega \;.$$
 (6.3.12)

Quais as condições a impor na fronteira de Ω , ou seja nos quatro segmentos { $x = \pm L$, $-L \le y \le L$ } e { $y = \pm L$, $-L \le x \le L$ } ?

Fixemos a atenção em qualquer ponto sobre o segmento x=L: devemos exigir que, por esse ponto, nenhuma onda penetre na região Ω , como previamente, no caso unidimensional. Mas agora não há apenas um sentido (numa dada direção) a controlar, pois as ondas planas podem viajar em todas as direções definidas no planoxy. Este fato nos conduz portanto a uma infinidade de condições de contorno.

A equação das ondas (no $I\!\!R^n$, $n \ge 2$)

Uma idéia natural: somá-las todas. Para isso, impomos a hipótese

$$u(x, y, t) = 0$$
 para $t < 0$

e, assim, podemos introduzir a transformada de Fourier da função $\,\,u\,\,$ relativamente às duas variáveis $\,y\,,\,t:$

$$\hat{u}(x,\xi,\omega) = (\mathcal{F}_{y,t} u) (x,\xi,\omega) := \frac{1}{2\pi} \int \int u(x,y,t) e^{i(t,y)\cdot(\xi,\omega)} dy dt$$

A equação (6.3.11) implica, para esta nova variável e, graças à condição (6.3.12) imposta relativamente a $\,f$, para $\,x\geq L$, a relação

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{u} = (\xi^2 - \omega^2) \hat{u} ,$$

ou

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial x} - \sqrt{\xi^2 - \omega^2} \right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\xi^2 - \omega^2} \right) \right] \hat{u} = 0$$

As ondas que se dirigem para a esquerda satisfazem

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{u} = -\sqrt{\xi^2 - \omega^2} \hat{u} ,$$

de forma que é justamente essa a condição de contorno a ser imposta no segmento {x = L} a fim de evitar, nessa porção da fronteira, a reflexão de ondas de volta para o interior da região Ω .

Para formular essa condição em termos da função u = u(x, y, t) necessitamos inverter a transformada de Fourier, do que resulta

$$\left[\left(\mathcal{F}_{y,t} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \hat{u} \right]_{x=L} = \left(\mathcal{F}_{y,t} \right)^{-1} \left[-\sqrt{\xi^2 - \omega^2} \hat{u} \right] \Big|_{x=L} ,$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x, y, t) \Big|_{x=L} = \left(\mathcal{F}_{y,t} \right)^{-1} \left[-\sqrt{\xi^2 - \omega^2} \left(\mathcal{F}_{y,t} u \right) \right] (x, y, t) \Big|_{x=L} . \quad (6.3.13)$$

No segundo membro de (6.3.13) temos a versão bidimensional do operador pseudodiferencial Ψ introduzido em (6.1.6), ou melhor, Ψ_{ρ} em (6.1.7), onde no lugar de $\rho = \rho(\cdot)$ se tem $\rho(\xi, \omega) = -\sqrt{\xi^2 - \omega^2}$. Podemos portanto escrever a condição de contorno a que chegamos na forma

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x, y, t) = \left[\Psi_{\rho} u \right](x, y, t) , \begin{bmatrix} x = L \\ -L \leq y \leq L \\ t > 0 \end{bmatrix}$$

6.4 Conclusões

Observemos inicialmente que a definição dos operadores pseudo-diferenciais, conforme apresentada na Seção 8.1, sugere ser ela apenas **mera generalização** de um conceito, melhor dizendo, de um operador, este sim, introduzido com vistas a – ou exigido por – aplicações práticas. O exemplo discutido nas duas seções anteriores objetiva mostrar a falsidade de tal avaliação. Ele enfatiza ser extremamente natural e necessária, dentro do contexto de efetiva **implementação numérica**, a teoria dos operadores pseudodiferenciais.

Deve-se notar que uma modificação profunda é introduzida no sistema diferencial em estudo, junto com as condições de contorno transparentes: passa-se a trabalhar com vínculos, restrições **não locais**. Esta é uma conseqüência de atuarem os operadores Ψ_{ρ} para valores arbitrários, tanto da variável y como para os de t, no futuro e no passado.

Finalmente: em termos práticos, como lidar computacionalmente com esses operadores, essas novas condições de contorno? Existe toda uma vertente de pesquisa nessa direção, a qual não se pretende abordar no presente texto, citando apenas alguns trabalhos representativos: [34, 30, 58, 44, 38, 69].

Capítulo 7

Malha adaptativa – Grafo de Folhas Autônomas

7.1 Motivação

Muitos problemas de valor inicial e de contorno para equações diferenciais parciais dependentes do tempo envolvem estruturas de pequena escala que se desenvolvem, se propagam, decaem ou desaparecem à medida que a solução evolui. Exemplos incluem camadas limites em fluidos viscosos, ondas de choque e zonas de reação em processos de combustão. Como a localização, a duração e a natureza dessas estruturas não é em geral conhecida *a priori*, a solução numérica desses problemas pode se tornar muito difícil. O uso de uma malha uniforme de pontos para discretizar o problema diferencial não é adequado nestes casos, pois não leva em conta a diferença de escalas dos fenômenos envolvidos. Isso faz com que o custo computacional seja muito alto, pois a malha uniforme deve ter um número muito grande de pontos. Procedimentos adaptativos que evoluem com a solução oferecem uma alternativa robusta, confiável e eficiente (ver, por exemplo, [2]).

O uso de refinamento adaptativo para obter malhas adequadas à representação de equações diferenciais parciais discretizadas tem sido objeto de intensa pesquisa desde o final da década de 1970, ver, por exemplo, [1], [2], [3]), [4], [28], [42], [53], [63], [64], [65].

Uma estrutura frequentemente utilizada para construir submalhas mais refinadas a partir de malhas menos refinadas consiste de uma árvore de refinamentos. A partir de uma malha dada inicialmente, representada pela raiz de uma árvore, criam-se nodos filhos dessa raiz, que são as representações das submalhas, com um grau de refinamento maior que a malha inicial. Descreve-se agora uma estrutura de dados para representar uma malha de pontos em que se exploram certas propriedades de grafos. Essas propriedades são usadas para se obter uma ferramenta eficiente para a construção de uma malha não uniforme de pontos. Essa estrutura de dados foi primeiramente descrita em [6] e chamada de Grafo de Folhas Autônomas, ou ALG (*Autonomous Leaves Graph*) em [7] e [62]. Para a ordenação dos pontos da malha usa-se uma modificação da curva de Hilbert desenvolvida em [6].

7.2 Estrutura de dados

7.2.1 Introdução

A simulação computacional de um processo físico por meio de equações diferenciais envolve quatro níveis de representação: inicialmente, o problema físico é modelado por um sistema de equações diferenciais com condições de contorno apropriadas. A seguir, é formulada uma discretização do espaço e do tempo e busca-se uma solução numérica aproximada, ou seja, um problema diferencial é substituído por um problema algébrico com um número finito de variáveis. A discretização do espaço e do tempo requer a existência de relações topológicas e geométricas entre as células componentes do domínio que foi discretizado. Num terceiro nível, essas relações são representadas por meio de um grafo. As operações combinatórias efetuadas sobre as componentes desse grafo constituem as estratégias de resolução do problema discretizado, traduzido para este nível. O grafo serve como um diagrama dos registros de memória alocados pelo computador para armazenar as quantidades numéricas envolvidas na resolução do problema algébrico. A estrutura de dados constituída por campos de memória alocados dinamicamente e referenciados por apontadores, assim como os algoritmos utilizados na manipulação das informações constituem o programa de computador que é o quarto nível de representação do problema físico inicial.

7.2.2 Estrutura da malha adaptativa

Considere inicialmente um domínio bidimensional formado pelo quadrado unitário. Dividindo este quadrado em quatro quadrados iguais obtêm-se quatro células, como se pode ver na Figura 7.1. Escolhem-se quatro pontos no interior deste quadrado,

$$\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right).$$

Cada ponto escolhido é o centro de uma determinada célula. Podem estes pontos ser representados por vértices de um grafo orientado, de acordo com a Figura 7.1. Cada um destes quatros vértices (em preto, na figura) aponta (por meio de setas, na figura, representando as arestas do grafo) para quatro direções: cima, baixo, direita e esquerda, que por convenção serão chamadas respectivamente de norte, sul, leste, oeste. O quadrado que fica na posição de cima e à direita será chamado



Figura 7.1:

de quadrado nordeste, e os demais, no sentido horário, serão chamados respectivamente de quadrados sudeste, sudoeste e noroeste. Para que as setas que não apontam para vértices do quadrado façam sentido, criam-se quatro vértices adicionais (em branco, na Figura 7.2) que serão apontados pelas setas remanescentes dos vértices pretos, e serão denominados vértices brancos.



Figura 7.2:

Além disso, cada vértice branco vai apontar também para os vértices pretos que apontam para ele. Existe ainda uma terceira seta (geralmente chamada de ponteiro nulo) em cada vértice branco que aponta para um vértice especial, o vértice terra. Veja o esquema completo na Figura 7.3.

Para que as figuras se tornem menos carregadas substitui-se cada ligação dupla de arestas por uma ligação simples, sempre que não houver possibilidade de confusão, (conforme a Figura 7.4).

Do ponto de vista mais concreto da estrutura de dados usada pelo programa, os vértices pretos vão representar os pontos centrais das células do quadrado unitário. Cada vértice preto armazena suas coordenadas espaciais e outras informações que serão explicitadas mais adiante. De cada vértice preto partem quatro ponteiros para outros vértices (pretos ou brancos). De cada vértice branco partem três ponteiros, dois destes ponteiros apontam para vértices pretos e o terceiro ponteiro



Figura 7.3: Figura 7.4:

aponta para um vértice branco ou para um vértice terra.

7.2.3 Refinamento da malha

Inicialmente será construído um exemplo para ilustrar o refinamento do quadrado unitário.

Considere quatro quadrados de lados de tamanho 1/2 como na Figura 7.1. As coordenadas dos centros dos quadrados são: $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}), (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}), (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}), (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}).$

A seguir, escolha um dos quatro quadrados para ser subdividido em quatro quadrados de lados de tamanho 1/4. No exemplo da Figura 7.5 foi escolhido o quadrado noroeste para ser subdividido. Agora, existem 4+3=7 quadrados (células) (veja o exemplo da Figura 7.5).



Figura 7.5:

O quadrado de centro $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ será substituído por quatro quadrados de centros

$$\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{8}, \frac{3}{4} - \frac{1}{8}\right), \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8}, \frac{3}{4} - \frac{1}{8}\right), \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{8}, \frac{3}{4} + \frac{1}{8}\right), \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8}, \frac{3}{4} + \frac{1}{8}\right).$$

Pode-se continuar o processo subdividindo-se em quatro o quadrado de lado 1/4 como na Figura 7.5, e obtendo-se agora 4 + 3 + 3 = 11 quadrados.

Estrutura de dados

Generalizando, cada quadrado de centro (a, b) e lado c que for subdividido como descrito acima é substituído por quatro quadrados de centros

$$\left(a-\frac{c}{4},b-\frac{c}{4}\right),\left(a-\frac{c}{4},a+\frac{b}{4}\right),\left(a+\frac{c}{4},a+\frac{b}{4}\right),\left(a+\frac{c}{4},a-\frac{c}{4}\right).$$

Esse processo de subdivisão do domínio tem o nome de refinamento da malha. Cabe ressaltar que esse refinamento não é necessariamente uniforme, e portanto permite que apenas determinadas regiões do quadrado unitário sejam subdivididas.

Desta forma, generalizando o processo descrito, em k etapas, o quadrado unitário é dividido em M = 4 + 3k células quadradas q_j , j = 1, ..., M. O tamanho dos lados é sempre representado por uma fração do tipo $(1/2)^{n_j}$, onde n_j é um inteiro positivo.

Descreve-se agora a estrutura de dados correspondente aos refinamentos obtidos anteriormente.

Por convenção, as células de uma malha inicial, composta de quatro células iguais, estão no nível 1 de profundidade no refinamento. Uma célula de nível n de profundidade ao ser refinada é substituída por 4 células de nível (n+1) de profundidade. Cabe ressaltar que o nível de profundidade de uma determinada célula no refinamento está relacionado com o tamanho do lado desta célula. Uma célula que possui o tamanho do seu lado igual a $1/2^n$ tem nível n de profundidade no refinamento.

Em cada etapa do refinamento um vértice é substituído por um grafo com quatro vértices, como se pode ver na Figura 7.6. Nesta figura, o número 2 que acompanha o grafo indica o nível de profundidade do vértice no processo de refinamento.



Figura 7.6:

No processo de refinamento, quando quatro vértices com o mesmo nível de profundidade, v_1, v_2, v_3, v_4 , são originados de um mesmo vértice v_p , diz-se que estes

vértices pertencem a um mesmo cacho e v_p é o vértice pai.

Representa-se a malha da Figura 7.5(a) pelo grafo da Figura 7.7. É importante salientar que no processo de refinamento, além de se acrescentarem à estrutura de dados mais 3 vértices pretos, criam-se também 4 vértices brancos do mesmo nível de profundidade dos vértices pretos criados.



Figura 7.7:

O grafo da Figura 7.8 é obtido refinando a célula de nível 2 que está na posição sudeste da malha da Figura 7.5(a).



Figura 7.8:

Figura 7.9:

Refinando a célula que é representada pelo vértice de nível 1 na posição nordeste do grafo da Figura 7.8 gera-se um novo grafo, como se pode ver na Figura 7.9. Observe que a estrutura de grafo é formada por árvores (vértices brancos), cujas folhas são os vértices pretos. Vértices pretos são ligados entre si apenas se são do

Estrutura de dados

mesmo nível. Cada árvore é isolada da outra por vértices pretos.

Convém observar que, no grafo da Figura 7.9, dois vértices brancos de mesmo nível aparecem ligados por um caminho de comprimento igual a 1. É possível simplificar este último grafo, eliminando esses dois vértices brancos, obtendo o grafo da Figura 7.10.



Figura 7.10:

A importância deste último procedimento é clara: o processo de simplificação do grafo é necessário para que o algoritmo de busca dos vizinhos de um vértice preto funcione corretamente. Esse algoritmo consiste apenas em encontrar ou o vizinho imediato de cada vértice preto, caso esse vizinho seja um vértice preto também, ou então, caso esse vizinho seja um vértice branco, os vértices-folha da árvore gerada por este vértice branco.

Uma das grandes vantagens do processo de refinamento descrito é que a cada refinamento apenas perturbações locais são feitas.

7.2.4 Desrefinamento da malha

Descrevem-se agora as etapas necessárias para eliminar pontos da malha.

Primeiramente, os pontos a serem eliminados da malha devem, em cada etapa do desrefinamento, pertencer ao mesmo *cacho*. Um exemplo pode ser visto na Figura 7.11.

Em cada fase do processo de desrefinamento, quatro vértices são transformados em um único vértice. Assim, o *cacho* marcado na Figura 7.11 é substituído por um vértice, como se pode ver na Figura 7.12. .

Para que 4 vértices possam ser desrefinados, eles precisam satisfazer alguns critérios:



Figura 7.11:



Figura 7.12:

• precisam estar no mesmo nível de profundidade.

• precisam ser vértices originados do mesmo vértice pai, para garantir que a configuração anterior da malha possa ser recuperada após os refinamentos e desre-finamentos.

As etapas necessárias para o desrefinamento são:

• transformação do vértice, que está na posição nordeste em relação aos 4 vértices, no vértice resultante do desrefinamento. Denota-se este vértice por v_r .

• preenchimento dos novos dados do vértice resultante, como, por exemplo, as suas coordenadas espaciais, seu nível e outras informações de acordo com o problema a ser resolvido.

- ligação do vértice resultante com seus vizinhos.
- ligação dos vértices vizinhos com o vértice resultante.
- liberação da área de memória dos vértices que passam a não existir.

A ligação do vértice resultante do des refinamento, v_r , com os vértices vizinhos é feita através da criação de quatro novos vértices brancos. Estes vértices brancos criados estão no mesmo nível de profundidade do *cacho* des refinado. Pode-se ver este esquema na Figura 7.13.

No processo de desrefinamento um dos ponteiros de cada um dos quatro vértices brancos criados aponta para o vértice resultante v_r e os outros dois ponteiros apontam para os vértices vizinhos do *cacho* desrefinado.



Figura 7.13:

Para cada configuração de vértices vizinhos do vértice resultante, v_r , uma estratégia diferente é adotada.

Exemplificam-se estas estratégias, denotando por v_b um dos vértices brancos criados no processo de desrefinamento e por v_v um vértice vizinho ao *cacho* desrefinado, adjacente agora ao vértice v_b .

Quando v_v for vértice branco e do mesmo nível de profundidade do vértice v_b , após a ligação do vértice v_r com o vizinho do vértice v_v , uma simplificação é feita para eliminar os vértices v_v e v_b . Este esquema pode ser visto na Figura 7.14(a).



Figura 7.14:

Quando v_v for vértice branco e de nível diferente do vértice v_b , mantém-se o vértice criado v_b , e ele fará a ligação do vértice resultante, v_r , com a estrutura da malha desrefinada. Este esquema pode ser visto na Figura 7.14(b).

Quando o vértice v_v for vértice preto e de nível diferente do vértice v_r , mantém-se o vértice branco criado, v_b , e este fará a ligação do vértice resultante v_r com o vértice v_v . Este esquema pode ser visto na Figura 7.14(c).

Quando o vértice v_v for vértice preto e do mesmo nível do vértice v_r , eliminase o vértice branco criado, v_b , e o vértice v_r é conectado diretamente ao vértice v_v . Este esquema pode ser visto na Figura 7.14(d).

Adotando as estratégias anteriores, a Figura 7.13 se transforma na Figura 7.15.



Figura 7.15:

No processo de desrefinamento visa-se restaurar a estrutura da malha anterior ao refinamento feito, ou seja, que os cachos se fundam para recriar o vértice que os gerou.

Da mesma forma que no refinamento, no processo de desrefinamento apenas perturbações locais são feitas.

7.2.5 Ordenação da malha pela curva de Hilbert

Em cada um dos vértices pretos da estrutura descrita anteriormente, existe um ponteiro extra que é utilizado para se criar uma ordenação total dos vértices pretos já existentes. Assim, começando-se do primeiro vértice, existe uma lista duplamente encadeada ligando todos os vértices pretos da estrutura.

Cada vez que um refinamento é feito, os quatros vértices pretos gerados são inseridos na lista encadeada. Assim, como a modificação na lista é local, um algoritmo baseado na construção da curva de Hilbert é usado para se ordenar totalmente os vértices.

Primeiramente, descreve-se a construção da curva de Hilbert. Ver, por exemplo, [73]. Essa curva é o limite de uma sequência de curvas $H_1, H_2, H_3, ...$, definidas a seguir. A Figura 7.16 mostra H_1, H_2, H_3 , os três primeiros passos sucessivos da construção.



Figura 7.16:

Estrutura de dados

Na etapa i + 1, a curva H_{i+1} é definida recursivamente pela composição de quatro instâncias de H_i com metade do tamanho rotacionadas apropriadamente e por três linhas adicionais conectando as quatro H_i 's. A curva H_i é chamada curva de Hilbert de ordem i.

Mais precisamente, sejam A, B, C, D os procedimentos de desenho das quatro partes da curva H_{i+1} orientadas conforme a curva é percorrida. Então surge o seguinte esquema recursivo:

$$\downarrow \stackrel{\longleftarrow}{\longrightarrow} A: D \leftarrow A \downarrow A \rightarrow B$$
$$\uparrow \stackrel{\longrightarrow}{\longrightarrow} B: C \uparrow B \rightarrow B \downarrow A$$
$$\stackrel{\longleftarrow}{\longrightarrow} C: B \rightarrow C \uparrow C \leftarrow D$$
$$\uparrow \stackrel{\longleftarrow}{\longleftarrow} D: A \downarrow D \leftarrow D \uparrow C$$

O significado das setas é claro: na primeira linha do esquema, por exemplo, quando o trecho da curva tiver a forma $\downarrow \stackrel{\longleftarrow}{\longrightarrow}$, ele será substituído na etapa seguninte pelo trecho de curva $D \leftarrow A \downarrow A \rightarrow B$. Assim, o novo trecho vai ser formado por um trecho $D : \uparrow_{\longleftarrow} \downarrow$, por uma seta \leftarrow , por um trecho $A : \downarrow \stackrel{\longleftarrow}{\longrightarrow}$, por uma seta \downarrow , por um trecho $A : \downarrow \stackrel{\longleftarrow}{\longrightarrow}$, Por uma seta \downarrow , por um trecho $B : \uparrow \stackrel{\longrightarrow}{\longrightarrow} \downarrow$. A Figura 7.17 mostra o esquema resultante



Figura 7.17:

Denotando por h o comprimento de uma linha unitária da curva em uma dada etapa, o procedimento recursivo correspondente ao esquema A fica da seguinte forma:

```
\begin{array}{l} {\rm A}({\rm i:inteiro});\\ {\rm se}\ (i>0)\\ D(i-1);\ x=x-h;\ plot;\\ A(i-1);\ y=y-h;\ plot;\\ A(i-1);\ x=x+h;\ plot;\\ B(i-1);\\ \end{array}
```

Nos outros casos, quando o trecho da curva tiver as formas $B : \uparrow \xrightarrow{\longrightarrow} \downarrow, C : \overleftarrow{\longrightarrow} \uparrow, D : \uparrow \leftarrow \downarrow$, basta seguir a receita preconizada pelas regras $B, C \in D$ correspondentes.

Adota-se a estratégia da curva de Hilbert para ligar os vértices pretos de uma malha refinada uniformemente, como se pode ver nas figuras 7.18, 7.19 e 7.20.



Descreve-se agora a estratégia desenvolvida em [6] para ordenar os vértices pretos de uma malha não uniformemente refinada.

Acompanhando-se a curva formada pelas arestas que conectam cada vértice preto a seu sucessor, obtém-se uma curva semelhante às curvas geradas nas etapas da construção da curva de Hilbert. A diferença é que, no processo de construção da curva de Hilbert, ela é refinada uniformemente em cada etapa. Isto é, as regiões (células) percorridas por todas as arestas da etapa anterior são subdivididas na etapa seguinte. No algoritmo modificado, desenvolvido em [6], os refinamentos não ocorrem necessariamente em todos as arestas, quando se passa de uma etapa para a outra. Em consequência, diferentes níveis de refinamento podem ocorrer numa mesma etapa. O nível de refinamento da curva em um certo trecho acompanha o nível de refinamento das regiões da malha correspondentes àquele trecho. Um exemplo pode ser visto na Figura 7.21.

Estrutura de dados



Figura 7.21:

A curva de Hilbert possui a seguinte propriedade: em cada etapa da sua construção, um arco de comprimento muito grande fica contido em uma região de pequena área.

Esta propriedade da curva de Hilbert foi uma das motivações para a sua escolha na ordenação dos vértices pretos. Numa dada etapa da construção da curva de Hilbert, efetua-se a seguinte construção: divide-se a curva em k trechos e se marcam as k regiões do quadrado unitário correspondentes a esses trechos. Assim, o quadrado unitário fica dividido em k subdomínios com fronteiras entre si. Estas fronteiras não tendem a aumentar rapidamente em comprimento à medida que o refinamento prossegue. Ou seja, em cada etapa da curva de Hilbert as células vzinhas de uma mesma região tendem a aumentar em número e a se "compactar", formando regiões com interface relativamente pequena (em relação ao número de células). Essa propriedade tem consequências práticas interessantes, pois permite que se divida o quadrado unitário em subdomínios com aproximadamente o mesmo número de células. Ademais, a interface entre os pares de subdomínios não resulta muito grande. Isso é importante no contexto de processamento distribuído.

7.2.6 Generalização do domínio

Discute-se agora como domínios diferentes de um quadrado podem ser construídos. A idéia é criar mais um bit de informação em cada célula. Esse bit irá indicar se uma determinada célula está ativada ou desativada. Uma célula desativada não faz parte do domínio bidimensional. Assim, o conjunto das células ativadas é uma aproximação tão precisa quanto se queira da região do domínio. Deve-se notar que essa partição pode ter vários níveis diferentes de refinamento, de acordo com a complexidade do domínio.



Figura 7.22:

Considere, por exemplo, o domínio formado por uma coroa circular de raio externo r = 0.5 e raio interno r = 0.25. Como exemplo de um refinamento bastante grosseiro, particiona-se este domínio com células quadradas de lados não menores do que 0.125, visto na Figura 7.22. A curva de Hilbert modificada associada à malha do domínio considerado é mostrada em linha pontilhada. Observe que nesta Figura, só os vértices em preto pertencem ao domínio. Naturalmente pode-se refinar mais o domínio e considerar uma partição com células menores, e portanto pode-se obter uma representação geométrica tão precisa quanto se queira.

7.2.7 Domínio tridimensional

Nesta seção descreve-se brevemente como a estrutura de dados bidimensional pode ser estendida para três dimensões [6]. O domínio tridimensional considerado agora é o cubo unitário. Inicialmente o cubo unitário contém oito células cúbicas de arestas com comprimento $\frac{1}{2}$. Veja a parte esquerda da Figura 7.24, com os oito centros das células correspondentes. O grafo associado a esse conjunto inicial de oito células pode ser visto no diagrama em linhas grossas da Figura 7.23. Além disso, cada um desses oito vértices tem seis arestas, correspondentes às direções de cima, baixo, esquerda, direita, frente e trás. De maneira análoga à estrutura bidimensional, devem existir seis vértices auxiliares (os vértices terra). Cada vértice terra é ligado por arestas aos quatro vértices de cada face correspondente, conforme se pode ver na Figura 7.23. Daqui em diante, a descrição da estrutura para suportar refinamentos segue os mesmos moldes da estrutura ALG descrita. Isto é, para se refinar uma célula da malha, substitui-se o vértice correspondente por um grafo análogo ao da Figura 7.23, que passa a ser conectado de maneira apropriada.



Figura 7.23:



Figura 7.24:

A curva de Hilbert modificada também pode ser estendida para três dimensões. A parte direita da Figura 7.24 mostra a primeira etapa dessa construção. Assim, todas as técnicas de ordenação total das células do domínio podem ser utilizadas para se compor a matriz de coeficientes do sistema algébrico linear associado à discretização de um problema diferencial.

7.2.8 Células triangulares

A estrutura de dados ALG pode também representar células triangulares contidas no quadrado unitário [6]. Tem-se na Figura 7.25 três etapas de sucessivos refinamentos do quadrado unitário. Uma curva análoga à curva de Hilbert modificada também pode ser construída para se enumerar as células triangulares, conforme se pode ver nessa mesma figura.



Figura 7.25:

Células triangulares têm aplicações para elementos finitos, uma vez que se adotam frequentemente malhas triangulares para a simulação computacional de equações diferenciais para essa técnica. Observa-se que, aplicando-se a extensão do procedimento proposto neste trabalho ao caso de malhas triangulares, não ocorrem ângulos próximos de zero com o decorrer do refinamento (ver Figura 7.25). Observa-se que a malha pode também ser não uniforme. Nota-se também que haveria a implicação do uso de formulações para elementos finitos não conformes.
Apêndice: exercícios

Ex. 1 (Cap.1) Verifique como o Teorema da Limitação Uniforme (de Banach-Steinhaus) implica uma das afirmações do Teorema da Equivalência de Lax.

Ex. 2 (Cap.1) Verifique as afirmações mencionadas relativamente aos esquemas de DuFort-Fraenkel e pula-carniça.

Ex. 3 (Cap.1) Verifique computacionalmente como o esquema de Euler

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = \sigma \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

diverge para valores da discretização que desobedecem a condição CFL. (Esses testes podem ser conduzidos até com o Excel ou um equivalente *freeware*.)

Ex. 1 (Cap.2) Demonstre com cuidado o fato de valer para a função estabilidade S(h) \to ∞ se h \to 0 .

Ex. 2 (Cap.2) Na seção 2.3 se afirma serem equivalentes as normas $||\cdot||_1$ e $||\cdot||_E$. Demonstre esse fato.

Ex. 1 (Cap.3) Verifique que Ψ_C é função infinitamente derivável.

Ex. 2 (Cap.3) Demonstre que as funções $f \cdot \Psi_C$ possuem a regularidade de f e podem aproximá-la em diferentes normas, conforme a escolha de C.

Ex. 1 (Cap.4) Demonstre a compacidade do conjunto $\ M_{\beta} \$ definido na seção 4.2.

Ex. 2 (Cap.4) Supondo ser válida (4.4.9), demonstre a existência da matriz de espalhamento descrita pela condição (4.4.10).

Ex. 3 (Cap.4) Calcule o número de operações aritméticas exigidas para resolver um sistema linear de equações algébricas por meio da regra de Cramer, supondo que os determinantes são todos obtidos calculando a soma de todos os produtos dos elementos (um de cada linha e coluna) multiplicados por +1 ou menos -1 (ou seja, a definição mais conhecida). Quanto tempo exigem essas operações para sistemas de ordem 10? E 100? E 1000? (Procure na web a velocidade de processamento dos 500 computadores mais rápidos atualmente e use essa informação.)

Ex. 1 (Cap.5) Repensando o exemplo de Runge: computacionalmente, as funções polinomiais e as racionais são as mais simples com que lidamos, no sentido de só envolverem operações algébricas (adição e multiplicação). Por que escolheu Runge uma função racional em lugar de polinomial?

74

Bibliografia

- Babuska, I., Rheinboldt, W.C., Error estimates for adaptive finite element computations; SIAM J. Numer. Anal.; 15, 4, (1978) 736-754.
- [2] Babuska, I., Gago, J.P.S.R., Kelly, D.W., Zienkiewicz, C., A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method: part II -Adaptive mesh refinement, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **19**, (1982) 1621-1656.
- [3] Bell, J., Berger, M., Saltzman, J., Welcome, M., Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws; SIAM J. Sci. Comput.; 15, 1, (1994), 127-138.
- [4] Berger, M., Oliger, J., Adaptive methods for hyperbolic partial differential equations, J. Comput. Phys., 53, (1984) 484-512.
- [5] Braz, Guilherme Ude; Burgarelli, D.; Biezuner, R J. Cálculo de autovalores do Laplaciano via Refinamento de Malha Adaptativo. Seção de posters, CNMAC XXVIII, 2005.
- [6] Burgarelli, D., "Modelagem computacional e simulação numérica adaptativa de equações diferenciais evolutivas aplicadas a um problema termoacústico", Tese de doutorado, PUC-Rio, (1998)
- [7] Burgarelli, D.; Kischinhevsky, M.; Biezuner, R.J; A new adaptive mesh refinement strategy for numerically solving evolutionaty PDE's, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 196 (2006) 115-131.
- Burgarelli, D., Kischinhevsky, M., Paes Leme, P.J., Parallel numerical solution of partial differential equations with adaptive mesh refinement; CNMAC97-Gramado (1997)
- [9] Burgarelli,D., Kischinhevsky,M., Paes Leme,P.J., Silveira,O.T., Refinamento de malha adaptativa em paralelo, (C₃AD) (Colloquia em Computação Científica de Alto Desempenho); Rio de Janeiro; RJ (1995)
- [10] D. Burgarelli, M. Kischinhevsky, Efficient numerical simulation of a simplified thermoacoustic engine with new adaptive mesh refinement tools, *Computational Methods in Engineering'99, XX CILAMCE*, São Paulo, SP (1999).

- M. Campos-Pareja. Um Algoritmo Paralelo para as Equações de Marčenko em Espalhamento Inverso Unidimensional. Tese D.Sc., IM/UFRJ, 1992.
- [12] M. Campos-Pareja, C.A. de Moura. A Parallel Scheme for Inverse Scattering. In Proceedings of the 6th SIAM Conference on Parallel Processing in Scientific Computing, volume 2, pages 529–533, Norfolk, USA, Março, 1993.
- [13] L. Collatz. Functional Analysis and Numerical Mathematics. Academic Press, New York, 1966.
- [14] Costa, Fabricio Nunes da ; Burgarelli, D. ; Biezuner, R. J. . Refinamento de Malha Adaptativa Ordenada por uma curva de Hilbert tridimensional, seção de posters, CNMAC XXVIII, 2005.
- [15] R. Courant, K.O. Friedrichs, H. Lewy. Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematisches Physik. Math. Ann., 100:32–74, 1928.
- [16] C.A. de Moura. Stability of the Direct and Inverse Problems in One-Dimensional Scattering Theory. Rev. Bras. Fis., 7(1):139–169, 1977.
- [17] C.A. de Moura. An Approximation Scheme for One-Dimensional Inverse Scattering. Rev. Bras. Fis., 11(4):887–898, 1981.
- [18] C.A. de Moura. Métodos Numéricos e Assintóticos em Equações Diferenciais, volume 1, 126+vi pp. III Escola de Matemática Aplicada – Dinâmica e Estabilidade em Mecânica, LCC/CNPq, Rio, 1982.
- [19] C.A. de Moura. Análise Numérica × Análise Teórica. Bol. Soc. Catar. Matem., 2:3–14, 1983.
- [20] C.A. de Moura. Apontamentos de Álgebra Linear Computacional. Universidade de Brasília, Monografias de Matemática – Ensino e Extensão, Vol. 2, Brasília, 1984.
- [21] C.A. de Moura. Tratamento Numérico de Problemas Inversos. In S B M A C / L N C C, editor, Reuniões em Matemática Aplicada e Computação Científica, 8^a Escola de Matemática Aplicada – Problemas Inversos: Aplicações à Acústica, Geofísica e Mecânica, volume 7, pages 35+v pp., Rio, 1988. 1^a Edição: 25^o Sem. Bras. Análise, INPE, S. Paulo, pp.261-296, 1987.
- [22] C.A. de Moura. DES: an Explicit, Really Quadratic 2-level Scheme for the Diffusion Equation. *Jour. Comp. Inf.*, 3(1):99–115, 1993.
- [23] C.A. de Moura. Análise Funcional para Aplicações Posologia. Ed. Ciência Moderna, Rio de Janeiro, 2002.
- [24] C.A. de Moura. Observações sobre a Continuidade ou não dos Problemas Inversos. Anais do IX CNMAC, Sessão em Homenagem ao 60⁰ aniversário do Prof. L.A.Medeiros, pp.8-13, Brasília, Agosto, 1986.
- [25] C.A. de Moura. Análise Numérica do Método dos Elementos Finitos. In Anais do 2º Curso de Mecânica Teórica e Aplicada, pages 273–288, LCC/CNPq, Rio de Janeiro, RJ, Jul., 1984.
- [26] C.A. de Moura, R.A. Feijoo, M.A. Raupp. Numerical Simulation of the Motion of a Pile Thrust into the Soil. *Rev. Bras. Fis.*, 9(3):645–677, 1979.

Bibliografia

- [27] C.A. de Moura, M.A. Raupp, J.C. Barbetta. Numerical Study of an Equation Related to Water Propagation. Bol. Soc. Bras. Mat., 10(1):57–69, 1979.
- [28] De Oliveira, P., On the caracterization of finite differences optimal meshes, Journal of Computational and Applied Mathematics, 36, (1991), 137-148
- [29] J.J. Duistermaat. Fourier Integral Operators. Courant Institute Lecture Notes, New York, 1973.
- [30] B. Engquist, A. Majda. Absorbing Boundary Conditions for the Numerical Simulation of Waves. *Math. Comp.*, 31(139):629–651, 1977.
- [31] John Erik Fornæss, Berit Stensønes. Lectures on counterexamples in several complex variables. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1987. 247 pp.
- [32] M.E. Ferreira. Algoritmos em três dimensões para a Inferência de Perfis de Temperatura e de Umidade a partir de Radiâncias Obtidas pelo Satélite VAS. Tese D.Sc., INPE, S.J. dos Campos, SP, 1986.
- [33] Bernard R. Gelbaum, John M.H. Olmsted. Counterexamples in analysis. Holden-Day, San Francisco, USA, 1964. xxiv, 194 pp.
- [34] M.J. Grote. Nonreflecting boundary conditions for time dependent wave propagation. Research Report 2000-04, Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich, Suíça, Abril 2000, in Artificial Boundary Conditions, with Applications to Computational Fluid Dynamics, L.Tourrette (ed.), Nova Science Publ. Inc., N.York.
- [35] S. Gutman, A.G. Ramm, W. Scheid. Inverse scattering by the stability index method. J. Inv. Ill-Posed Problems, 10(5):487–5024, 2002.
- [36] M. Hitrik. Properties of the Scattering Transform on the Real Line. Jour. Math. An. Appl., 258:223–243, 2001.
- [37] C.S. Hönig. Análise Funcional e Aplicações. EDUSP, São Paulo, 1970.
- [38] R. Huan, L.L. Thompson. Implementation of Exact non-reflecting Boundary Conditions in the Finite Element Method for the Time-dependent Wave Equation. Comp. Meth. Appl. Mech. Engin., 187:137–159, 2000.
- [39] S.I. Kabanikhin, A. Lorenzi. *Identification Problems of Wave Phenomena* - *Theory and Numbers.* VSP, Utrecht, 1999.
- [40] S.I. Kabanikhin, A. Lorenzi. Identification Problems of Wave Phenomena - Theory and Numbers. VSP, Utrecht, 1999.
- [41] S. M. Khaleelulla. Counterexamples in topological vector spaces. Springer-Verlag Lecture notes in mathematics 936, Berlin; New York, 1982. xxiii, 313 pp.
- [42] Khokhlov,A.M. Fully threaded tree algorithms for adaptive refinement fluid dynamics simulations, J.Comput. Phys., 143, (1998), 519-543.
- [43] P. Knabner. Das Inverse Stefan Problem ein Vergleich Verschiedener Fragestellungen. Tese Dr.rerNat., Universität Berlin, 1980.

- [44] M.J. Krote, J.B. Keller. Non-reflecting boundary conditions for elastic waves. SIAM J. Appl. Math., 60:803–ff, 2000.
- [45] R.J. LeVeque. Numerical Methods for Conservation Laws. Birkhäuser, Basel, 1990.
- [46] M. Lukaschewisch *et al.* Tykhonov Regularization for Electrical Impedance Tomography on Unbounded Domains. *Inv. Probl.*, 19(3):31–54, 2003.
- [47] Martins, M. A.; Valle, R. M.; Olivieira, L. S.; Burgarelli, D. . Error estimation and adaptivity for finite-volume methods on unstructured triangular meshes: elliptic heat transfer problems. *Numerical Heat Transfer Part B* -*Fundamentals*, 42, 2002, 1-24.
- [48] J. Mason. Methods of Functional Analysis for Applications in Solid Mechanics. Studies in Applied Mechanics 9, Elsevier, Amsterdam, 1985.
- [49] P.J. McCarthy et al. Direct Analytic Model of the L-curve for Tykhonov Regularization Parameter Selection. Inv. Probl., 19(3):585–610, 2003.
- [50] L.A. Medeiros, M. Milla-Miranda. Espaços de Sobolev Introdução aos Problemas Elíticos não Homogêneos. Instituto de Matemática, UFRJ, Rio de Janeiro, 2000.
- [51] A. Melin. Operator Methods for Inverse Scattering on the Real Line. Comm. P.D.E., 10:677–766, 1985.
- [52] J. Nitsche. L_{∞} -convergence of Finite Element Galerkin Approximations for Parabolic Problems. *RAIRO Num. Anal.*, 13:31–54, 1979.
- [53] Oliger, J., Zhu, X., Stability and error estimation for component adaptive grid methods, *Applied Numerical Mathematics*, 20, (1996), 407-426.
- [54] D.L. Phillips. A technique for the numerical solution of integral equations of the first kind. Jour. ACM, 9:84–97, 1962.
- [55] D.P. Pombo Jr. Introdução à Análise Funcional, 2^a ed.. EdUFF, Niterói, 2010.
- [56] Joseph P. Romano, Andrew F. Siegel. Counterexamples in probability and statistics. Wadsworth & Brooks/Cole Advanced Books & Software; Statistics/probability series, Monterey, Calif., 1986. xxiv, 303 pp.
- [57] C. Runge. Über die Darstellungwillkürlicher Funktionen und die Interpolation zwischen äquidistantent Ordinaten. Z. Math. Phys., 46:224–243, 1901.
- [58] I.L. Sofronov. Artificial Boundary Conditions of Absolute Transparency for two- and three-dimensional External Time-dependent Scattering Problems. *Europ. J. Appl. Math.*, 9:561–ff, 1998.
- [59] Lynn A. Steen Jr., J. Arthur Seebach. *Counterexamples in topology*. Holt, Rinehart and Winston, New York, USA, 1970. xiii, 210 pp.
- [60] G.W. Stewart. Afternotes on Numerical Analysis. SIAM, Philadelphia, USA, 1996. xii, 200 pp.

- [61] Jordan M. Stoyanov. Counterexamples in probability. Wiley Series in probability and mathematical statistics, Chichester, New York, 1987. 247 pp.
- [62] Unfer, T.; Boeuf, J-P.; Rogier, F.; Thivet, F. Multi-scale gas discharge simulations using asynchronous adaptive mesh refinement. Computer Physics Communications, 181 (2010), 247–258.
- [63] Rheinboldt,W.C., On a theory of mesh-refinement processes; SIAM J. Numer. Anal., 17, 6, (1980), 766-778.
- [64] Rivara, M.C.; Mesh refinement processes based on the generalized bisection of simplices; SIAM J. Numer. Anal., 21, 3, (1984), 604-612
- [65] Rivara,M.C., Local modification of meshes for adaptive and/or multigrid finite-element methods, *Journal of Computational and Applied Mathematics*; 36, (1991), 79-89
- [66] W.W. Symes. Numerical Stability in an Inverse Scattering Problem. SIAM J. Numer. Anal., 17:707–732, 1980.
- [67] W.W. Symes. *Erratum* to numerical Stability in an Inverse Scattering Problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 18:751–752, 1981.
- [68] F. Trèves. Introduction to Pseudodifferential and Fourier Integral Operators, volume 1,2. Plenum Press, New York, 1980.
- [69] S.V. Tsynkov. Numerical Solutions of Problems in Unbounded Domains a review. Appl. Num. Math., 60:803–ff, 2000.
- [70] A.N. Tykhonov. Regularization of incorrectly posed problems. Sov. Math. Dokladay, 4:1624–1627, 1963.
- [71] A.N. Tykhonov. Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. Sov. Math. Dokladay, 4:1035–1038, 1963.
- [72] A.N. Tykhonov, V.Ya Arsenin. Solution of Ill-posed Problems. Wiley, New York, 1977.
- [73] Wirth,N.; "Algorithms + data structures =programs"; Prentice-Hall,Inc. (1976)

Índice remissivo

Índice

algoritmo explícito, 15 algoritmo numérico, 20 algoritmo preditor-corretor, 32 Análise Funcional, 11 Análise Numérica, 11 Apêndice, 73 apontadores, 58 artificial, fronteira, 51 árvore de refinamentos, 57 assintótico, coeficiente, 40 assintótico, comportamento, 40 autofunção generalizada, 40 Autonomous Leaves Graph, 58 autovalor, 46 autovalores, 40

Banach-Steinhaus, Teorema de, 16 BBM, equação de, 30 Benjamin-Bona-Mahony, equação de, 30 boot-strap, 24

Cálculo das Variações, 11 células triangulares, 71 calor, equação de difusão do, 16 chopp-off, técnica de, 29 coeficiente assintótico, 40 coeficiente de reflexão , 41, 47 coeficiente de reflexão , 41 compacidade, 16, 23, 35 compatibilidade condicional, 15 comportamento assintótico, 40 Computação Científica, 11 condição absorvente, 52 condição CFL, 13 condição de contorno, 14, 20 condição de contorno artificial, 52 condição de contorno essencial, 25 condição de contorno natural, 25 condição de eliticidade, 25 condição transparente, 52 convergência uniforme sobre compactos, 42Courant, R., 13 Courant-Friedrichs-Lewy, condição de, 23Cramer, fórmula de, 46 critério de parada, 18 cubo unitário, 70 curva de Hilbert, 66

d'Alembert, 52 d'Alembert, equação de, 52 D.L. Phillips, 36 dados corrompidos, 37 definição global, 51 definição pontual, 51 dependência contínua dos dados, 25 desigualdade de Gronwall, 32 Desrefinamento da malha, 63 determinante, 46 diferencial, equação, 20, 50 diferencial, operador, 50 difusão, equação de, 16 Du Fort-Frankel, esquema de, 16

elementos finitos, 21, 26, 72 equação característica, 46 equação de d'Alembert, 52 equação de BBM, 30 equação de Benjamin-Bona-Mahony, 30 equação de difusão do calor, 16 equação de Marčenko, 47 equação de propagação de ondas, 52 equação diferencial, 11, 20, 50 equação do telégrafo, 17 equação integral de Fredholm, 36 equação integral de transferência radiativa. 46 erro da interpolação, 44 erro de truncamento, 15 erro local, 15 espaço de Schwartz, 49 espalhamento, 51 espalhamento inverso, 39 espalhamento, matriz de, 40 espectro contínuo, 40 esquema compatível, 13 esquema conservativo, 29 esquema consistente, 14, 52 esquema convergente, 13, 52 esquema de diferenças finitas, 21 esquema de Du Fort-Frankel, 16 esquema estável, 13, 52 esquema monótono, 29 esquema pula-carniça, 17 esquema leap-frog, 17 estabilidade, 41 estabilidade, índice de, 38 estacionária, onda, 52 estimativa a priori, 20 Estrutura de dados, 58 Exercícios, 73

fórmula de Cramer, 46 fórmula explícita, 45 fórmula fechada, 45 falsa convergência, 13 Folhas Autônomas, 57 forma bilinear, 21 forma bilinear coerciva, 22 forma coerciva, 22 formulação fraca, 30 formulação forte, 30 formulação pontual, 30 Fourier, transformada de, 41, 49 Fourier, transformada rápida de, 48 Fredholm, equação integral de, 36 Friedrichs, K.O., 13 fronteira artificial, 51 função estabilidade, 19, 20, 23 funcional convexo, 21 funcional linear limitado, 21

Galerkin, método de, 26 geofísica, 51 Grafo, 57 Grafo de Folhas Autônomas, 58 grafo orientado, 58 Gronwall, desigualdade de, 32

Hadamard, 25, 35

índice de estabilidade, 38 inequação variacional evolutiva, 20 instável, procedimento, 39 interpolação polinomial, 43

Knabner, P., 35

Lax, Teorema da Equivalência de, 13 leap-frog, esquema, 17 lei de conservação, 29 Lewy, H., 13 lista encadeada, 66

método de Galerkin, 26 método dos elementos finitos, 44 mínimos quadrados, 36 Malha adaptativa, 57 Marčenko, equação de, 47 matriz S, 41 matriz de espalhamento, 40 meteorologia, 46 momento, 41 multiplicidade, 40

núcleo, 36 Nitsche, truque de, 20 normas equivalentes, 23

Índice remissivo

onda estacionária, 52 onda refletida, 52 ondas de chegada, 40 ondas de partida, 40 ondas planas, 40 ondas, equação de propagação de, 52 operador de Schrödinger, 39 operador diferencial, 50 operador pseudodiferencial, 49

P. Knabner, 35 peso na minimização, 37 Phillips, D.L., 36 polinômio interpolador, 43 potencial, 39 preditor-corretor, 21, 32 problema bem-posto, 25 problema de Stefan, 36 problema de Sturm-Liouville, 24 problema de valor inicial, 20 problema essencialmente mal-posto, 36 problema inverso, 35 procedimento instável, 39 Procedimentos adaptativos, 57 profundidade do vértice, 61 profundidade no refinamento, 61 pseudodiferencial, operador, 49 pula-carniça, esquema, 17

Refinamento da malha, 60 reflexão, coeficiente de, 41 regularização, 21 regularização, técnica de, 35 Runge, 44

símbolo, 51 Schrödinger, operador de, 39 Schwartz, espaço de, 49 semigrupo de operadores, 15 sensoriamento remoto, 46 solução regularizada, 37 Stefan, problema de, 36 Sturm-Liouville, problema de, 24

técnica de regularização, 35

técnica de regularização de Tykhonov, 35 técnica de *chopp-off*, 29 taxa de convergência, 24 tensão mecânica, 19 Teorema da Equivalência de Lax, 13 Teorema de Banach-Steinhaus, 16 transformada de Fourier, 41, 49 transformada rápida de Fourier, 48 truncamento, 32 truque de Nitsche, 20 Tykhonov, 35 Tykhonov, técnica de regularização, 35

vértice pai, 62

Índice remissivo

NOTAS EM MATEMÁTICA APLICADA

Arquivos em pdf disponíveis em http://www.sbmac.org.br/notas.php

- 1. Restauração de Imagens com Aplicações em Biologia e Engenharia Geraldo Cidade, Antônio Silva Neto e Nilson Costa Roberty
- 2. Fundamentos, Potencialidades e Aplicações de Algoritmos Evolutivos Leandro dos Santos Coelho
- 3. Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas Edson Wendlander
- 4. Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Parciais Maria Cristina de Castro Cunha e Maria Amélia Novais Schleicher
- 5. Modelagem em Biomatemática Joyce da Silva Bevilacqua, Marat Rafikov e Cláudia de Lello Courtouke Guedes
- 6. Métodos de Otimização Randômica: algoritmos genéticos e "simulated annealing"

Sezimária F. Pereira Saramago

- 7. "Matemática Aplicada à Fisiologia e Epidemiologia" H.M. Yang, R. Sampaio e A. Sri Ranga
- 8. Uma Introdução à Computação Quântica Renato Portugal, Carlile Campos Lavor, Luiz Mariano Carvalho e Nelson Maculan
- 9. Aplicações de Análise Fatorial de Correspondências para Análise de Dados Homero Chaib Filho
- 10. Modelos Matemáticos baseados em autômatos celulares para Geoprocessamento

Marilton Sanchotene de Aguiar, Fábia Amorim da Costa, Graçaliz Pereira Dimuro e Antônio Carlos da Rocha Costa

- Computabilidade: os limites da Computação Regivan H. N. Santiago e Benjamín R. C. Bedregal
- 12. Modelagem Multiescala em Materiais e Estruturas Fernando Rochinha e Alexandre Madureira

- 13. Modelagem em Biomatemática (Coraci Malta ed.)
 - 1 "Modelagem matemática do comportamento elétrico de neurônios e algumas aplicações"
 - Reynaldo D. Pinto
 - 2 "Redes complexas e aplicações nas Ciências" José Carlos M. Mombach
 - 3 "Possíveis níveis de complexidade na modelagem de sistemas biológicos" Henrique L. Lenzi, Waldemiro de Souza Romanha e Marcelo Pelajo- Machado
- 14. A lógica na construção dos argumentos Angela Cruz e José Eduardo de Almeida Moura
- Modelagem Matemática e Simulação Numérica em Dinâmica dos Fluidos Valdemir G. Ferreira, Hélio A. Navarro, Magda K. Kaibara
- 16. Introdução ao Tratamento da Informação nos Ensinos Fundamental e Médio Marcilia Andrade Campos, Paulo Figueiredo Lima
- 17. Teoria dos Conjuntos Fuzzy com Aplicações Rosana Sueli da Motta Jafelice, Laércio Carvalho de Barros, Rodney Carlos Bassanezi
- 18. Introdução à Construção de Modelos de Otimização Linear e Inteira Socorro Rangel
- Observar e Pensar, antes de Modelar Flavio Shigeo Yamamoto, Sérgio Alves, Edson P. Marques Filho, Amauri P. de Oliveira
- 20. Frações Contínuas: Propriedades e Aplicações Eliana Xavier Linhares de Andrade, Cleonice Fátima Bracciali
- Uma Introdução à Teoria de Códigos Carlile Campos Lavor, Marcelo Muniz Silva Alves, Rogério Monteiro de Siqueira, Sueli Irene Rodrigues Costa
- 22. Análise e Processamento de Sinais Rubens Sampaio, Edson Cataldo, Alexandre de Souza Brandão
- 23. Introdução aos Métodos Discretos de Análise Numérica de EDO e EDP David Soares Pinto Júnior
- 24. Representações Computacionais de Grafos Lílian Markenzon, Oswaldo Vernet
- 25. Ondas Oceânicas de Superfície Leandro Farina

86

- 26. Técnicas de Modelagem de Processos Epidêmicos e Evolucionários Domingos Alves, Henrique Fabrício Gagliardi 27. Introdução à teoria espectral de grafos com aplicações Nair Maria Maia de Abreu, Renata Raposo Del-Vecchio, Cybele Tavares Maia Vinagre e Dragan Stevanović 28. Modelagem e convexidade Eduardo Cursi e Rubens Sampaio 29. Modelagem matemática em finanças quantitativas em tempo discreto Max Oliveira de Souza e Jorge Zubelli 30. Programação não linear em dois níveis: aplicação em Engenharia Mecânica Ana Friedlander e Eduardo Fancello 31. Funções simétricas e aplicações em Combinatória José Plinio de Oliveira Santos e Robson da Silva 32. Semigrupos aplicados a sistemas dissipativos em EDP Carlos Raposo da Cunha 33. Introdução à Simulação Estocástica para Atuária e Finanças Usando R Hélio Côrtes Vieira, Alejandro C. Frery e Luciano Vereda 34. Modelos de Sustentabilidade nas Paisagens Amazônicas Alagáveis Maurício Vieira Kritz, Jaqueline Maria da Silva e Cláudia Mazza 35. Uma Introdução à Dinâmica Estocástica de Populações Leonardo Paulo Maia 36. Geometria de Algoritmos Numéricos Gregorio Malajovich 37. Equações Diferenciais, Teorema do Resíduo e as Transformadas Integrais Edmundo Capelas de Oliveira e Jayme Vaz Júnior 38. Métodos Matemáticos e Computacionais em Música Paulo Cezar Carvalho,Luiz Velho, Marcelo Cicconet e Sergio Krakowski 39. Métodos para Problemas Inversos de Grande Porte Fermín S. Viloche Bazán e Leonardo Silveira Borges
- 40. TerraME : Suporte a Modelagem Ambiental Multi-Escalas Integrada a Bancos de Dados Geográficos Tiago Garcia de Senna Carneiro e Gilberto Camara
- 41. Técnicas de Inteligência Computacional Inspiradas na Natureza Aplicações em Problemas Inversos em Transferência Radiativa
 - Antônio J. Silva Neto e José Carlos Becceneri

42. Avanços em Métodos de Krylov para Solução de Sistemas Lineares de Grande Porte

Luiz Mariano Carvalho e Serge Gratton

43. Uma Abordagem para Modelagem de Dados com o Uso de Sistemas Neuro-Fuzzy: Aplicações Geoespaciais

Luiz Carlos Benini e Messias Meneguette Jr

44. Construções Concretas e Geometria Dinâmica: Abordagens Interligadas para o Estudo de Cônicas

Angela Rocha dos Santos

88