



UNIVERSIDADE  
ESTADUAL DE LONDRINA

---

ELIAS BORGES DA SILVA

**MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO MULTISTÁGIOS  
ATRAVÉS DOS APROXIMANTES DE PADÉ**

---

Londrina

2018

ELIAS BORGES DA SILVA

**MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO MULTISTÁGIOS  
ATRAVÉS DOS APROXIMANTES DE PADÉ**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

Orientadora: Profa. Dra. Neyva Maria Lopes Romeiro

Londrina

2018

**Catálogo elaborado pela Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central da  
Universidade Estadual de Londrina**

**Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)**

S232c	<p>Borges da Silva, Elias. Método de Discretização Multiestágios Através dos Aproximantes de Padé/ Elias Borges da Silva – Londrina, 2018. 92 f. : il.</p> <p>Orientadora: Neyva Maria Lopes Romeiro. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, 2018.</p> <p>Inclui Bibliografia.</p> <p>1. Método Multiestágios - Teses. 2. Equações Diferenciais Parciais - Teses. 3. Soluções Numéricas - Teses. I. Maria Lopes Romeiro, Neyva. II. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional. III. Título.</p> <p style="text-align: right;">519.681-7</p>
-------	---

ELIAS BORGES DA SILVA

# **MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO MULTISTÁGIOS ATRAVÉS DOS APROXIMANTES DE PADÉ**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

## **BANCA EXAMINADORA**

---

Profª. Dra. Neyva Maria Lopes Romeiro  
Universidade Estadual de Londrina

---

Prof. Dr. Paulo Laerte Natti  
Universidade Estadual de Londrina

---

Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer  
Universidade Estadual de Campinas

Londrina, 25 de abril de 2018.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus por me guiar sempre em minhas decisões.

À minha mãe, Diomar Borges da Silva, por sempre acreditar em minha capacidade, pelo seu amor incondicional e por aceitar minha ausência durante momentos preciosos.

À minha orientadora, Neyva Maria Lopes Romeiro, pela confiança em mim demonstrada, pela sua imensa dedicação e por todas suas sugestões que contribuíram para a realização deste trabalho.

À minha namorada, Tamires Souza de Almeida, pelo companheirismo, apoio, compreensão, paciência, amizade, amor e por sua importância em minha vida.

A todos os meus colegas e amigos do PGMAC pelas horas de estudos e pela ajuda mútua durante todo o curso.

Aos professores Paulo Laerte Natti e Eliandro Rodrigues Cirilo pelos esclarecimentos e sugestões.

*Nas grandes batalhas da vida, o primeiro passo  
para a vitória é o desejo de vencer.*

*Mahatma Gandhi*

SILVA, Elias Borges. **Método de discretização multiestágios através dos aproximantes de Padé**. 2018. 92. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2018.

## RESUMO

Este trabalho tem como objetivo apresentar um estudo dos métodos numéricos de alta ordem multiestágios através dos aproximantes de Padé. O estudo ficou concentrado nos métodos implícitos de ordens dois e quatro. Na abordagem do método multiestágio utiliza-se a discretização na variável temporal. Foram realizados testes com a equação de difusão, com a equação de Maxwell-Cattaneo e com o modelo predador-presa Lotka-Volterra logístico. As soluções geradas foram comparadas com as suas respectivas soluções exatas e também com as soluções aproximadas de métodos tradicionais encontrados na literatura. Os resultados obtidos com os testes mostraram ser satisfatórios em relação à ordem de convergência, quando utilizado os métodos multiestágios com aproximantes de Padé.

**Palavras-chave:** Diferenças Finitas. Crank-Nicolson. Sistema Predador-Presa. Lotka-Volterra. Equação de Difusão.

SILVA, Elias Borges. **Multistage discretization method through Padé approximations**. 2018. 92. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2018.

### ABSTRACT

This paper aims to presents a study of the numerical high order multistage methods through Padé approximations. The study focused on the implicit methods of orders two and four. In the multistage approach, the discretization in the time variable is used. We performed tests with the diffusion equation, with the Maxwell-Cattaneo equation and with the logistic Lotka-Volterra predator-prey model. The generated solutions were compared with their respective exact solutions and also with the approximate solutions of traditional methods found in the literature. The results obtained with the tests showed to be satisfactory in relation to the order of convergence when using multistage methods with Padé approximations.

**Keywords:** Finite Difference. Crank-Nicolson. Predator-Prey System. Lotka-Volterra. Diffusion Equation.

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS</b>	<b>18</b>
2.1	APROXIMAÇÕES DAS DERIVADAS POR DIFERENÇAS FINITAS . . . . .	20
2.2	APROXIMANTES DE PADÉ . . . . .	22
<b>3</b>	<b>MODELOS MATEMÁTICOS</b>	<b>27</b>
3.1	EQUAÇÃO DE DIFUSÃO . . . . .	27
3.2	EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO . . . . .	27
3.3	SISTEMA DE EQUAÇÕES DE REAÇÃO-CONVECÇÃO-DIFUSÃO COM RE- TARDO . . . . .	28
3.4	MODELO PREDADOR-PRESA EXPONENCIAL . . . . .	30
3.5	MODELO PREDADOR-PRESA LOTKA-VOLTERRA LOGÍSTICO . . . . .	31
<b>4</b>	<b>ABORDAGEM DO MÉTODO MULTIESTÁGIO COM APROXIMANTES DE PADÉ</b>	<b>32</b>
4.1	MÉTODO MULTIESTÁGIO EXPLÍCITO . . . . .	32
4.1.1	Método Explícito de Segunda Ordem . . . . .	33
4.1.2	Método Explícito de Quarta Ordem . . . . .	34
4.2	MÉTODO MULTIESTÁGIO IMPLÍCITO . . . . .	35
4.2.1	Método Implícito de Segunda Ordem . . . . .	35
4.2.2	Método Implícito de Quarta Ordem . . . . .	39
<b>5</b>	<b>DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES</b>	<b>42</b>
5.1	DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO . . . . .	42
5.1.1	Método multiestágio $R_{1,1}$ . . . . .	42
5.1.2	Método multiestágio $R_{2,2}$ . . . . .	43
5.2	DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO . . . . .	44
5.2.1	Método multiestágio com o aproximante de Padé $R_{1,1}$ . . . . .	45
5.2.2	Método de Crank-Nicolson . . . . .	50
5.2.3	Método explícito . . . . .	50
5.2.4	Método multiestágio com o aproximante de Padé $R_{2,2}$ . . . . .	51
5.3	DISCRETIZAÇÃO DO MODELO PREDADOR-PRESA EXPONENCIAL . . . . .	56
5.4	DISCRETIZAÇÃO DO MODELO PREDADOR-PRESA LOTKA-VOLTERRA LO- GÍSTICO . . . . .	57
5.4.1	Método multiestágio com o aproximante $R_{1,1}$ . . . . .	58

5.4.2	Método multiestágio com o aproximante $R_{2,2}$ . . . . .	61
<b>6</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS</b>	<b>69</b>
6.1	EQUAÇÃO DE DIFUSÃO . . . . .	69
6.1.1	Teste 1 - Equação de Difusão . . . . .	69
6.1.2	Teste 2 - Equação de Difusão . . . . .	73
6.2	EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO . . . . .	74
6.2.1	Teste 1 - Equação de Maxwell-Cattaneo para $\tau < \tau_c = (2\pi)^{-2}$ . . .	75
6.2.2	Teste 2 - Equação de Maxwell-Cattaneo para $\tau = \tau_c$ . . . . .	78
6.2.3	Teste 3 - Equação de Maxwell-Cattaneo para $\tau > \tau_c$ . . . . .	78
6.3	MODELO PREDADOR-PRESA LOTKA-VOLTERRA LOGÍSTICO . . . . .	79
<b>7</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>82</b>
<b>A</b>	<b>ESTABILIDADE DE MÉTODOS MULTIESTÁGIOS COM APROXIMANTES DE PADÉ</b>	<b>83</b>
A.1	ESTABILIDADE COM EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS ACOPLADAS	85
<b>B</b>	<b>DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO PELO MÉTODO MULTIESTÁGIO COM O APROXIMANTE DE PADÉ <math>R_{2,2}</math></b>	<b>87</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>89</b>

## LISTA DE FIGURAS

2.1	Esquema de uma malha cartesiana uniforme . . . . .	18
2.2	discretizações: a) estruturada, b) não-estruturada . . . . .	19
4.1	Esquema de uma malha unidimensional uniforme . . . . .	32
4.2	Esquema de uma malha unidimensional uniforme com Padé $R_{2,0}$ . . . . .	33
4.3	Esquema de uma malha unidimensional uniforme com Padé $R_{1,1}$ , considerando a derivada segunda . . . . .	37
4.4	Esquema de uma malha unidimensional uniforme com Padé $R_{2,2}$ . . . . .	39
5.1	Estêncil da discretização no ponto $(i, k)$ do método multiestágio $R_{1,1}$ . . . . .	46
5.2	Estêncil da discretização no ponto $(i, k + 1)$ do método multiestágio $R_{1,1}$ . . . . .	48
5.3	Estêncil da discretização do método de Crank-Nicolson . . . . .	50
5.4	Estêncil da discretização do método explícito . . . . .	51
5.5	Estêncil da discretização do primeiro estágio do método multiestágio $R_{2,2}$ . . . . .	52
5.6	Estêncil da discretização do segundo estágio do método multiestágio $R_{2,2}$ . . . . .	52
5.7	Estêncil da discretização do terceiro estágio do método multiestágio $R_{2,2}$ . . . . .	53
5.8	Estêncil da discretização do quarto estágio do método multiestágio $R_{2,2}$ . . . . .	54
5.9	Fluxograma da discretização da equação de Maxwell-Cattaneo para a primeira derivada . . . . .	56
6.1	Soluções numéricas da equação de difusão pelo método de Crank-Nicolson e pelos aproximantes de Padé $R_{1,1}$ e $R_{2,2}$ , com $M_t = 200$ , comparadas com a solução analítica . . . . .	70
6.2	Erro absoluto entre a solução analítica e as soluções dos métodos explícito, $R_{1,1}$ , $R_{2,2}$ , Crank-Nicolson, com $M_t = 200$ e $M_x = 14$ , comparado com a solução analítica . . . . .	71
6.3	Soluções numéricas de Maxwell-Cattaneo pelos métodos explícito, $R_{1,1}$ e $R_{2,2}$ com $M_t = 200$ , $M_x = 20$ , comparadas com a solução analítica . . . . .	76
6.4	Erro absoluto entre os métodos multiestágios $R_{1,1}$ e $R_{2,2}$ considerando $M_x = 32$ . . . . .	77
6.5	Comportamento das densidades quando utilizado o modelo logístico pelo método de multiestágio . . . . .	81
6.6	Modelo predador-presa logístico: a) densidade inicial, b) densidade com tempo, $t=80$ , c) evolução das populações ao longo do tempo . . . . .	81

## LISTA DE TABELAS

2.1	Aproximantes de Padé da função exponencial . . . . .	25
2.2	Valores aproximados de $e$ obtidos a partir dos aproximantes de Padé . . . . .	25
6.1	Solução analítica e soluções dos métodos Crank-Nicolson, Padé $R_{1,1}$ , Padé $R_{2,2}$ e explícito com $M_t = 200$ , $M_x = 14$ e $t_f = 0.5$ . . . . .	70
6.2	Erro dos métodos Crank-Nicolson, Padé $R_{1,1}$ , Padé $R_{2,2}$ e explícito com $M_t = 200$ e $M_x = 14$ . . . . .	71
6.3	Erro absoluto considerando os métodos Crank-Nicolson, Padé $R_{1,1}$ e Padé $R_{2,2}$ com $M_t = 200$ . . . . .	72
6.4	Soluções analítica, dos métodos Crank-Nicolson, Padé $R_{1,1}$ e Padé $R_{2,2}$ com $M_t = 200$ e $M_x = 17$ . . . . .	73
6.5	Erro absoluto entre Crank-Nicolson, Padé $R_{1,1}$ e Padé $R_{2,2}$ com $M_t = 300$ . . . . .	74
6.6	Soluções analítica e pelos métodos Crank-Nicolson, Padé $R_{1,1}$ e Padé $R_{2,2}$ com $M_t = 200$ , $M_x = 20$ , $t_f = 0.5$ e $It = 600$ . . . . .	75
6.7	Erro absoluto entre os métodos explícito, Padé $R_{1,1}$ e Padé $R_{2,2}$ e a solução analítica com $M_t = 200$ . . . . .	77
6.8	Erro absoluto entre os métodos explícito, Padé $R_{1,1}$ e Padé $R_{2,2}$ e a solução analítica com $M_t = 200$ . . . . .	78
6.9	Parâmetros do modelo Lotka-Volterra logístico . . . . .	80

## LISTA DE ABREVIATURAS

**ETL** erro de truncamento local

**EDO** equação diferencial ordinária

**EDP** equação diferencial parcial

**inf** valor fora da região de estabilidade

**PVI** problema de valor inicial

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\Delta x$  espaçamento da malha em  $x$

$\Delta y$  espaçamento da malha em  $y$

$R_e$  número de Reynolds

$1D$  unidimensional

$2D$  bidimensional

$M_x$  partição do espaço em  $x$

$M_t$  partição do tempo em  $t$

$S_1$  população de presas

$S_2$  população de predadores

$D_1$  taxa de difusão de presas

$D_2$  taxa de difusão de predadores

$a_1$  taxa de natalidade das presas

$a_2$  taxa de natalidade dos predadores

$b_1$  taxa de saturação da presa

$c_1$  coeficiente de interação das presas

$c_2$  coeficiente de interação dos predadores

$t_f$  tempo final

## 1 INTRODUÇÃO

Estudos sobre o movimento dos fluidos vêm sendo desenvolvidos desde a Idade Antiga. Os antigos egípcios em 2500 a.C. determinavam as horas do dia por meio do gnômon, um instrumento que servia para a medição do tempo gasto na irrigação dos campos. Inicialmente, os estudos envolvendo o comportamento dos fluidos eram apenas experimental. Mais tarde, com Euler, começaram-se os estudos com uma metodologia matemática [1].

Uma substância no estado líquido ou gasoso é denominada fluido. Leonard Euler foi quem primeiro deduziu as equações do movimento de fluidos, as chamadas equações de Euler. Porém, as descrições matemáticas do comportamento dos fluidos ganharam força apenas no século XIX, na forma das equações de Navier-Stokes, a partir dos trabalhos pioneiros dos franceses Claude Navier (1822), Simeon Poisson (1829) e do inglês George Stokes (1845) [2, 3, 4, 5].

A ciência que estuda o comportamento dos fluidos em repouso (estática) ou em movimento (dinâmica) e das leis que regem esse comportamento é chamada de mecânica dos fluidos. Essa ciência, também chamada de dinâmica dos fluidos, desempenha um papel importante em projetos de sistemas de engenharias e transporte de fluidos [6, 7, 8].

A modelagem matemática das aplicações é obtida através de equações diferenciais parciais (EDPs). As EDPs são bases para muitos modelos físicos, químicos, fenômenos biológicos, com suas aplicações se estendendo a diversos campos de pesquisa. Neste contexto, tendo em vista que muitos destes modelos não possuem soluções exatas, torna-se essencial a obtenção de uma aproximação da solução das equações diferenciais parciais, com o objetivo de avaliar os modelos matemáticos. [9].

Na natureza encontram-se muitos comportamentos que podem ser formulados em termos de equações diferenciais, por exemplo, trajetórias balísticas e de satélites artificiais, estudo de redes elétricas, curvaturas de vigas, estabilidade de aviões, teoria das vibrações, reações químicas, entre outros [10].

As EDPs parabólicas são adequadas para descrever fenômenos difusivos, enquanto que as EDPs hiperbólicas modelam fenômenos ondulatórios. Um exemplo de equação parabólica é a equação do calor ou de difusão de calor, a qual determina a distribuição da temperatura em um meio. A equação da onda é um exemplo de uma equação hiperbólica.

A difusão, na equação diferencial, pode ser definida como o processo pelo qual uma substância no fluido se move aleatoriamente a partir de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração, de maneira a homogeneizar a concentração estudada por unidade de espaço. Em 1855 foram propostas leis para a difusão de um soluto em um solvente, surgindo assim a primeira Lei de Fick, homenagem ao médico e fisiologista alemão Adolf Fick (1829-1901).

O sistema de equações que modela matematicamente o comportamento da

dispersão (ou difusão) de populações envolvendo competições entre si, ou seja, interação entre as populações ou interações externas, é chamado sistema de equações de reação-difusão [11].

Em um sistema de reação-difusão, as interações entre as populações podem levar um tempo até que a reação aconteça. Este tempo é definido como sendo o tempo de retardo ou *delay*, que pode ser incluído em um modelo descrito por equações diferenciais sob diferentes fatores, dependendo da área de aplicação. Por exemplo, em biologia e biomecânica o *delay* pode estar associado ao fato da velocidade da resposta neural dos tecidos vivos ser finita. Na dinâmica populacional pode representar um período de gestação ou maturação. Na teoria de controle, o tempo de retardo, geralmente, resulta da finitude da velocidade de processamento do sinal e da taxa de processos tecnológicos [12]. Estudos associados ao tempo de retardo foram abordados por Maxwell [13] e Cattaneo [14] produzindo as chamadas equações de Maxwell-Cattaneo.

Equações que descrevem a dinâmica de populações de mais de uma espécie surgiram com o modelo de Lotka-Volterra, quando em 1926, Vitor Volterra modelou um sistema predador-presa no qual a população de presa possuía alimento em abundância, enquanto que a fonte de alimento da população de predador era somente a presa. Pouco antes, mas de forma independente, em 1925, Alfred Lotka estudou um modelo similar envolvendo interação entre duas espécies, porém em termos de reações químicas. Desta forma, o sistema envolvendo espécies em competição descrito por meio de equações diferenciais ficou conhecido como modelo Lotka-Volterra [15].

Os modelos Lotka-Volterra logístico e exponencial, as equações de Maxwell-Cattaneo e difusão são casos particulares do sistema de equações de reação-difusão com retardo. Todos utilizados como exemplos de teste para este trabalho.

Sobrinho et al. [16] estudaram sistemas predador-presa envolvendo duas espécies, além de verificar a estabilidade dos sistemas. Também analisaram diferentes situações possíveis para modelos Lotka-Volterra. O modelo logístico foi utilizado como exemplo para testes.

Donea e Huerta [17] investigaram a técnica de alta ordem com aproximantes de Padé para aproximar equações diferenciais em regime transiente. O trabalho foi desenvolvido para modelos envolvendo somente a derivada de primeira ordem. Foram realizados testes em exemplos numéricos e os resultados obtidos mostraram que os métodos de alta ordem permitem um grosso refinamento no tempo para alcançar uma dada precisão quando comparados com métodos tradicionais de segunda ordem.

Venutelli [18] aplicou a técnica com Padé na geração de modelos de fluxos descontínuos em canais abertos. Os modelos resultantes produziram uma nítida estrutura que vai de encontro com a solução dos problemas testes, obtidas através de experiências e ensaios, em canais com e sem atrito.

Belkić e Belkić [19] introduziram o método com os aproximantes de Padé para otimizar a espectroscopia de ressonância magnética e ressonância magnética em imagem

no diagnóstico precoce de câncer.

Vazquez-Leal e Guerrero [20] obtiveram uma solução numérica aproximada de um modelo de evolução do hábito de fumar na Espanha. Eles conseguiram aumentar o domínio de convergência do modelo, utilizando os métodos multiestágios com os aproximantes de Padé.

Ladeia [21] aplicou os métodos multiestágios de segunda e quarta ordens no domínio temporal da equação de Burgues 1D. Verificou-se que o método multiestágio com o aproximante de Padé  $R_{2,2}$  amenizou as oscilações das soluções numéricas quando no domínio espacial foram utilizados métodos de elementos finitos.

Os métodos multiestágios podem ser divididos em métodos explícitos e implícitos. Usualmente os métodos implícitos encontram-se adicionados aos métodos de diferenças finitas, para aumentar a velocidade da convergência dos resultados. Com o intuito de melhorar a convergência da solução numérica nas aproximações das derivadas contendo termos temporais, será utilizada a discretização pelos métodos de alta ordem de multiestágios através dos aproximantes de Padé. Para a aproximação das derivadas com termos espaciais será utilizada a discretização no contexto das diferenças finitas.

Aplica-se, portanto, o método de alta ordem nas equações de difusão e de Maxwell-Cattaneo, comparados com as suas respectivas soluções analíticas. Também, utilizam-se soluções aproximadas de métodos tradicionais encontrados na literatura. Por fim, o método foi utilizado para encontrar uma solução para os modelos predador-presa Lotka-Volterra e logístico.

O presente trabalho encontra-se dividido da seguinte forma: no Capítulo 2, é feita uma explanação sobre os métodos numéricos mais comuns encontrados na literatura, com enfoque nos métodos de diferenças finitas. Ainda nesse capítulo definem-se os aproximantes de Padé. No Capítulo 3, apresentam-se os modelos matemáticos que serão abordados no trabalho. Na sequência, no capítulo 4, serão descritos os métodos de alta ordem multiestágios através dos aproximantes de Padé, adicionados às equações de diferenças finitas. No Capítulo 5 faz-se a discretização das equações objetos de estudo através da técnica com multiestágios. Os resultados numéricos obtidos estão organizados no Capítulo 6. No apêndice do trabalho fazem-se considerações com respeito a três itens da pesquisa que são estabilidade, consistência e convergência do método. Porém, aqui não serão realizados estudos aprofundados desses aspectos, por não ser esse o objetivo central do trabalho.

## 2 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Equações diferenciais possuem soluções analíticas em casos especiais, para uma modelagem mais complexa, faz-se necessário aproximar as soluções por meio de métodos numéricos. Tais procedimentos resultam em um sistema de equações algébricas, com um conjunto finito de variáveis no espaço e no tempo. A esse processo dá-se o nome de discretização. A maneira de obter as equações algébricas caracteriza o método numérico.

Dada uma equação diferencial é preciso escolher de forma adequada um método de discretização, de tal forma que o mesmo resulte em uma equação de diferenças estável e consistente [10, 22]. Na literatura, destacam-se os métodos de diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. A convergência das soluções numéricas encontra-se relacionada com a consistência e a estabilidade da equação discretizada [23].

Dado um problema diferencial, para realizar a discretização em seu domínio de soluções, substituem-se as derivadas existentes na equação diferencial por valores discretos. Inicialmente gera-se uma malha, ou seja, uma representação do domínio geométrico do problema, dividindo-o em finitos subdomínios, chamados de nós, elementos, volumes, etc.

Por simplicidade, pode-se utilizar, na geração de malhas, um sistema de coordenadas cartesianas (discretização cartesiana). Porém, para se adequar melhor à geometria de problemas reais, pode-se utilizar outros sistemas, como os sistemas de coordenadas esféricas, cilíndricas, generalizadas [2, 10, 24]. A distância entre os nós é chamada passos ou estágios da malha, como ilustrado no esquema apresentado na figura 2.1.

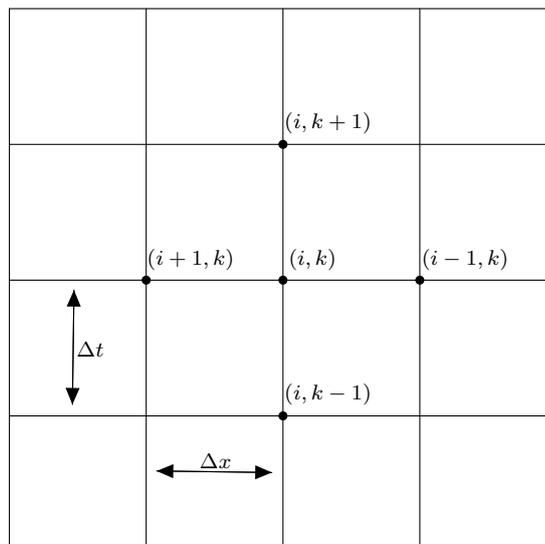


Figura 2.1: Esquema de uma malha cartesiana uniforme

A discretização coincidente com a fronteira não necessita ser, obrigatoriamente, obtida por um sistema de coordenadas. Mas, se assim for feito, diz-se que a discretização resultante é estruturada, uma vez que cada nó interno tem sempre o mesmo número de

nós vizinhos e a numeração dos mesmos tem uma sequência natural. Caso contrário, diz-se que a discretização é não-estruturada. A figura 2.2 mostra a diferença entre uma discretização estruturada e uma discretização não-estruturada [24].

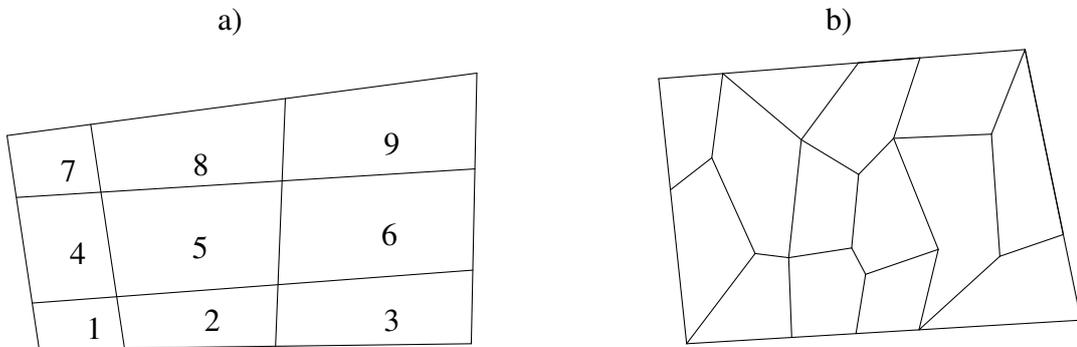


Figura 2.2: discretizações: a) estruturada, b) não-estruturada

Existem vantagens e desvantagens em cada uma das discretizações. Apesar do método de diferenças finitas ser aplicado a qualquer tipo de malha, com o sistema de coordenadas apropriado, neste trabalho, a ênfase será dada ao estudo de malhas estruturadas.

Se os passos da malha forem todos iguais, a malha diz-se uniforme, caso contrário a malha diz-se não uniforme. Nesse trabalho serão consideradas apenas malhas uniformes. A diferença entre a equação discretizada e a exata é chamada de erro de truncamento local (ETL).

Os métodos numéricos determinam aproximações para a solução de equações diferenciais nos diferentes nós da malha. Conforme o espaçamento tende a zero, espera-se a convergência das soluções aproximadas para a solução exata. Também, deve-se observar que quanto menor o espaçamento da malha, maior será o número de operações, realizados no cálculo da solução aproximada, influenciando o custo computacional do método. Desta forma, um método numérico pode resolver um problema em poucos segundos ou minutos em um computador pessoal, mas por outro lado, existem códigos que podem levar muitas horas em supercomputadores [9].

Existem duas grandes classes dos métodos numéricos, os métodos de estágio único, que são os métodos que determinam o valor de um nó da malha dependendo apenas do nó anterior e os métodos multiestágios, que são os métodos que determinam o valor de um nó da malha através de vários passos anteriores. Os métodos multiestágios podem ser divididos em métodos explícitos e métodos implícitos. Usualmente estudam-se os métodos implícitos multiestágios adicionados aos métodos de elementos finitos, para aumentar a velocidade de convergência de seus resultados [17, 25].

Neste contexto, este trabalho pretende avaliar a utilização dos métodos multiestágios, utilizando os aproximantes de Padé, através das aproximações das derivadas por diferenças finitas. Dessa forma, apresentam-se os conceitos referentes às aproximações das

derivadas por diferenças finitas e dos aproximantes de Padé.

## 2.1 APROXIMAÇÕES DAS DERIVADAS POR DIFERENÇAS FINITAS

A ideia geral do método de diferenças finitas é a discretização do domínio e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações discretas que requerem apenas um conjunto finito de valores da função [10]. Assim, considera-se a malha no plano  $(x, t)$ , onde  $x_0$  e  $t_0$  são números reais quaisquer e  $\Delta x$ ,  $\Delta t$  são números positivos, sendo o conjunto de pontos

$$x_{i,k} = (x_i, t_k) = (x_0 + i\Delta x, t_0 + k\Delta t), \quad i, k = 1, 2, \dots, N \quad (2.1)$$

com espaçamento  $\Delta x$  em  $x$  e  $\Delta t$  em  $t$  como apresentado na figura 2.1.

Nos pontos  $(i, k)$  da malha serão calculadas aproximações para uma função  $S(x, t)$  e suas derivadas, considerando que  $S(x, t)$  possua derivada até a ordem  $(i+1)$  na variável  $x$  e  $(k+1)$  na variável  $t$  [10]. Desta forma, utilizando a expansão em série de Taylor em  $S(x, t)$  nos pontos  $(i+1, k)$ ,  $(i, k+1)$  e utilizando a notação para a derivada de  $S$  no ponto  $(i, k)$ ,

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k \quad (2.2)$$

tem-se que

$$S_{i+1}^k = S_i^k + \Delta x \left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_i^k + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_i^k + \dots + \frac{\Delta x^n}{n!} \left. \frac{\partial^n S}{\partial x^n} \right|_i^k + \dots \quad (2.3)$$

e

$$S_i^{k+1} = S_i^k + \Delta t \left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k + \frac{\Delta t^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \right|_i^k + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \left. \frac{\partial^n S}{\partial t^n} \right|_i^k + \dots \quad (2.4)$$

Isolando a derivada primeira de (2.3), tem-se

$$\left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_i^k = \frac{S_{i+1}^k - S_i^k}{\Delta x} - ETL, \quad (2.5)$$

sendo

$$ETL = \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_i^k + \dots \quad (2.6)$$

com ETL de primeira ordem, isto é, erro de ordem  $O(\Delta x)$ . Ainda, pode-se dizer que a equação (2.5) é uma aproximação por diferenças finitas do tipo progressiva ou para frente na variável  $x$ , com erro de ordem  $O(\Delta x)$ .

Obtém-se expressão similar para a variável  $t$ , isolando a derivada primeira de

(2.4), cuja fórmula progressiva com erro  $O(\Delta t)$  é dada por

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k = \frac{S_i^{k+1} - S_i^k}{\Delta t} - O(\Delta t). \quad (2.7)$$

Substituindo  $\Delta x$  por  $-\Delta x$  e  $\Delta t$  por  $-\Delta t$ , em (2.3) e (2.4), respectivamente, obtêm-se as fórmulas de diferença regressiva, com seus respectivos erros, nas variáveis  $x$  e  $t$ ,

$$\left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_i^k = \frac{S_i^k - S_{i-1}^k}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (2.8)$$

e

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k = \frac{S_i^k - S_i^{k-1}}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (2.9)$$

Fazendo  $n = 2$  em (2.3) e (2.4), têm-se as chamadas fórmulas de diferenças centrais, para as derivadas primeiras, com seus respectivos erros, nas variáveis  $x$  e  $t$ ,

$$\left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_i^k = \frac{S_{i+1}^k - S_{i-1}^k}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (2.10)$$

e

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k = \frac{S_i^{k+1} - S_i^{k-1}}{2\Delta t} + O(\Delta t^2). \quad (2.11)$$

Sendo  $n = 3$  e considerando  $\Delta x$  e  $-\Delta t$  em (2.3) e (2.4), obtêm-se as aproximações por diferenças finitas do tipo central com erro de ordem  $O(\Delta x^2)$  e  $O(\Delta t^2)$  para as derivadas segundas, nas variáveis  $x$  e  $t$ , respectivamente,

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_i^k = \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (2.12)$$

e

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \right|_i^k = \frac{S_i^{k+1} - 2S_i^k + S_i^{k-1}}{\Delta t^2} + O(\Delta t^2). \quad (2.13)$$

Obtidas as aproximações (2.5)-(2.13), para as derivadas parciais, apresenta-se a teoria referente aos aproximantes de Padé, que será utilizada como uma ferramenta adicional neste trabalho. Assim, com o intuito de melhorar a convergência da solução numérica, nas discretizações dos termos temporais de (2.7) e (2.13), serão utilizados métodos de alta ordem resultantes dos aproximantes de Padé.

## 2.2 APROXIMANTES DE PADÉ

A metodologia para obter representações aproximadas de uma função por funções racionais, apresentada por Henri Padé em 1892, e conhecida como aproximantes de Padé, se tornou de grande importância em várias áreas de pesquisa [25, 26, 27]. As expansões dos aproximantes de Padé são, geralmente, superiores às expansões de Taylor, pois, além de convergirem mais rapidamente, também estendem as regiões de convergência definidas pelo raio de convergência da série de Taylor [17, 26, 28].

Definem-se os aproximantes de Padé como sendo funções racionais, ou seja, quocientes de dois polinômios, que representam uma expansão do tipo,

$$\sum_{n=0}^N f_n h^n, \quad (2.14)$$

onde  $N$  é um número qualquer e  $f_n$  são os coeficientes de informação.

Os polinômios das funções racionais representados pelos números inteiros  $L$  e  $M$ , graus do numerador e do denominador, respectivamente, são denotados por  $R_{L,M}$ . Desta forma, os aproximantes de Padé  $R_{L,M}$ , associados a uma função  $f(h)$ , têm a forma,

$$P_L(h) = p_0 + p_1 h + p_2 h^2 + \dots + p_L h^L, \quad L \geq 0 \quad (2.15)$$

$$Q_M(h) = q_0 + q_1 h + q_2 h^2 + \dots + q_M h^M, \quad M \geq 0. \quad (2.16)$$

Seja ainda, sem perda de generalidade, e por simplicidade,  $q_0 = 1$  e a condição dada por

$$f(h) - \frac{P_L(h)}{Q_M(h)} = O(h^{L+M+1}), \quad (2.17)$$

sendo a ordem do erro ao aproximar  $f(h)$  pelo aproximante de Padé  $R_{L,M} = P_L(h)/Q_M(h)$  de grau  $h^{L+M+1}$ . Isolando o termo  $P_L(h)$  na equação (2.17) tem-se

$$P_L(h) = f(h)Q_M(h) + O(h^{L+M+1}) \quad (2.18)$$

e, supondo que  $f$  tenha a expansão em série de Maclaurin, dada por

$$f(h) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n h^n, \quad (2.19)$$

então através de um sistema de equações, pode-se determinar os valores de  $p_L$  e  $q_M$ , em (2.15) e (2.16), em termos de coeficientes de  $f_n$ . De fato, de (2.18) e (2.19), tem-se

$$\sum_{n=0}^L p_n(h) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n h^n \sum_{n=0}^M q_n(h) + O(h^{L+M+1}), \quad (2.20)$$

ou, ainda,

$$p_0 + p_1 h + p_2 h^2 + \cdots + p_L h^L = (f_0 + f_1 h + f_2 h^2 + \cdots)(1 + q_1 h + q_2 h^2 + \cdots + q_M h^M) + O(h^{L+M+1}). \quad (2.21)$$

Desenvolvendo o lado direito de (2.21) até a ordem  $h^{L+M+1}$  tem-se,

$$\begin{aligned} p_0 + p_1 h + p_2 h^2 + \dots + p_L h^L &= (f_0 + f_1 h + f_2 h^2 + \cdots + f_L h^L) \\ &\quad + (f_0 q_1 h + f_1 q_1 h^2 + \cdots + f_L q_1 h^{L+1}) \\ &\quad + \cdots + (f_0 q_M h^M + \cdots + f_L q_M h^{L+M}) \end{aligned} \quad (2.22)$$

e, comparando os termos de mesma potência em  $h$ , encontra-se o sistema de  $(L + M + 1)$  equações algébricas para os coeficientes de  $p_L$  e  $q_M$  em termos de  $f_n$ , ou seja

$$\begin{aligned} p_0 &= f_0 \\ p_1 &= f_1 + f_0 q_1 \\ p_2 &= f_2 + f_1 q_1 + f_0 q_2 \\ &\vdots \\ p_L &= f_L + f_{L-1} q_1 + \cdots + f_0 q_L \\ 0 &= f_{L+1} + f_L q_1 + \cdots + f_{L-M+1} q_M \\ 0 &= f_{L+2} + f_{L+1} q_1 + \cdots + f_{L-M+2} q_M \\ &\vdots \\ 0 &= f_{L+M} + f_{L+M-1} q_1 + \cdots + f_L q_M. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Para que o sistema (2.23) possa determinar os coeficientes de  $p$  e  $q$  em termos de  $f$ , deve-se ter pelo menos  $(L + M + 1)$  informações disponíveis da expansão de Maclaurin (2.19), logo faz-se necessário que  $(L + M + 1) \leq N$ .

Para simplificar a notação, define-se que

$$p_{L+1} = p_{L+2} = \cdots = p_N = 0 \quad (2.24)$$

e

$$q_{M+1} = q_{M+2} = \cdots = q_N = 0, \quad (2.25)$$

podendo, assim, representar os coeficientes de  $h^k$  na expressão (2.21), como sendo

$$p_k = \sum_{n=0}^k f_n q_{k-n}, \quad k = 0, 1, \dots, N, \quad (2.26)$$

onde a função racional para a aproximação de Padé resulta da solução de  $N + 1$  equações lineares nas  $N + 1$  incógnitas  $p_0, p_1, \dots, p_L, q_1, \dots, q_M$ .

Para exemplificar o procedimento descrito sobre os aproximantes de Padé, apresenta-se o desenvolvimento do aproximante de grau 2, isto é, considerando  $L = 1$  e  $M = 1$ . Faz-se necessário escolher  $p_0, p_1, q_1$ , de modo que os coeficientes de  $h^k$  para  $k = 0, 1, 2$  sejam nulos, assim,

$$p_0 + p_1 h = (f_0 + f_1 h + f_2 h + \dots)(1 + q_1 h). \quad (2.27)$$

Considerando a função exponencial  $f(h) = e^h$  e lembrando que  $f$  é obtida pela expansão em série de Maclaurin, tem-se que,

$$f(h) = 1 + h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{3!} + \dots + \frac{h^n}{n!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!}, \quad (2.28)$$

resultando em,

$$f_n = 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.29)$$

logo a equação (2.27) torna-se,

$$p_0 + p_1 h = \left(1 + h + \frac{h^2}{2} + \dots\right)(1 + q_1 h). \quad (2.30)$$

Desenvolvendo o lado direito de (2.30), segue que,

$$p_0 + p_1 h = 1 + q_1 h + h + q_1 h^2 + \frac{h}{2} + q_1 \frac{h^2}{2} + \dots, \quad (2.31)$$

reordenando os termos de (2.31) tem-se,

$$p_0 + p_1 h = 1 + (1 + q_1)h + \left(\frac{1}{2} + q_1\right)h^2 + \dots. \quad (2.32)$$

Comparando os termos de mesma potência em (2.32), resulta no sistema

$$\begin{aligned} p_0 &= 1 \\ p_1 &= 1 + q_1 \\ 0 &= \frac{1}{2} + q_1, \end{aligned} \quad (2.33)$$

consequentemente  $q_1 = -\frac{1}{2}$ ,  $p_1 = \frac{1}{2}$  e  $p_0 = 1$  e, portanto, tem-se a função racional

$$R_{1,1} = \frac{P_1(h)}{Q_1(h)} = \frac{1 + h/2}{1 - h/2}. \quad (2.34)$$

Utilizando a mesma linha de raciocínio e a definição dos aproximantes de Padé, pode-se encontrar todos os aproximantes para a função exponencial. A tabela 2.1 apresenta os aproximantes de Padé, para  $M = 0, 1, 2$  e  $L = 0, 1, 2, 3$ .

Tabela 2.1: Aproximantes de Padé da função exponencial

$R_{L,M}$	$M = 0$	$M = 1$	$M = 2$
$L = 0$	1	$\frac{1}{1-h}$	$\frac{2}{2-2h+h^2}$
$L = 1$	$1+h$	$\frac{2+h}{2-h}$	$\frac{6+2h}{6-4h+h^2}$
$L = 2$	$\frac{2+2h+h^2}{2}$	$\frac{6+4h+h^2}{6-2h}$	$\frac{12+6h+h^2}{12-6h+h^2}$
$L = 3$	$\frac{6+6h+3h^2+h^3}{6}$	$\frac{24+18h+6h^2+h^3}{24-6h}$	$\frac{60+36h+9h^2+h^3}{60-24h+3h^2}$

Fonte: Arquivo do Autor

Substituindo  $h = 1$  na tabela 2.1, observa-se na tabela 2.2 que ao aumentar a ordem do aproximante de Padé, ou seja, quanto maior os valores de  $L$  e de  $M$ , melhor será a aproximação de  $R_{L,M}$  para o número transcendental  $e = 2,71828\dots$

Tabela 2.2: Valores aproximados de  $e$  obtidos a partir dos aproximantes de Padé

$R_{L,M}$	$M = 0$	$M = 1$	$M = 2$	$M = 3$
$L = 0$	<b>1</b>		2	3
$L = 1$	2	<b>3</b>	2,66666...	2,72727...
$L = 2$	2,5	2,75	<b>2,71428...</b>	2,71875...
$L = 3$	2,66666...	2,72222...	2,71794...	<b>2,71830...</b>

Fonte: Arquivo do Autor

Pode-se verificar ainda, na tabela 2.2, que o erro entre o aproximante de Padé

e o número  $e$  são menores quando os valores de  $L = M$  aumentam, em relação aos demais valores de mesma ordem, ou seja, em relação aos valores de  $L < M$  ou  $L > M$ . Consequentemente, os aproximantes de Padé  $R_{L,M}$  obtidos quando  $L = M$ , resultam em melhores aproximações.

Uma consequência da construção dos aproximantes de Padé é formulada como teorema.

**Teorema 2.1.** *Se existir o aproximante de Padé  $R_{L,M}$ , então ele será único.*

A demonstração pode ser obtida em [26].

### 3 MODELOS MATEMÁTICOS

Neste capítulo são apresentadas as equações que descrevem os modelos matemáticos, objetos de estudo deste trabalho. A primeira equação refere-se à equação de difusão em uma dimensão. Na sequência descrevem-se a equação de Maxwell-Cattaneo e o modelo predador-presa exponencial, e por fim, o sistema de equações predador-presa Lotka-Volterra logístico. Todas as equações são formas simplificadas do sistema de equações de reação-convecção-difusão com retardo que foi deduzido, porém, os testes numéricos foram realizados com algumas de suas formas simplificadas.

#### 3.1 EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

Considere a equação de difusão 1D, dada por,

$$\frac{\partial S}{\partial t} - D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0, \quad (3.1)$$

onde,  $t$ , é o tempo,  $x$ , o espaço,  $S(x, t)$ , representa a densidade da população (no contexto deste trabalho) e  $D$  é o coeficiente de difusão.

As condições iniciais e de contorno para (3.1) são dadas por

$$S(x, t_0) = S(x), \quad x \in (x_0, x_f) \quad \text{e} \quad (3.2)$$

$$S(x_0, t) = S(x_f, t) = 0, \quad t > 0, \quad (3.3)$$

onde  $x_0$  e  $x_f$  são os valores inicial e final do espaço respectivamente e  $t_0$  é o tempo inicial.

#### 3.2 EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO

A equação de Maxwell-Cattaneo [29] é descrita por

$$\frac{\partial S}{\partial t} - D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = 0, \quad (3.4)$$

onde  $S(x, t)$  representa a densidade populacional da espécie,  $t$  e  $x$  representam as variáveis temporal e espacial, respectivamente, e  $\tau$  é o termo que descreve o tempo de retardo funcional.

Consideram-se as seguintes condições iniciais e de fronteira,

$$S(x, t_0) = S(x), \quad S_t(x, t_0) = S^0, \quad x \in (x_0, x_f) \quad \text{e} \quad (3.5)$$

$$S(x_0, t) = S(x_f, t) = 0, \quad t > 0, \quad (3.6)$$

sendo  $S(x)$  uma função e  $S^0$  uma constante.

### 3.3 SISTEMA DE EQUAÇÕES DE REAÇÃO-CONVECÇÃO-DIFUSÃO COM RETARDO

Neste tópico faz-se a dedução do sistema de equações de reação-convecção-difusão com retardo, envolvendo diversas populações. O sistema descreve fenômenos de difusão e retardo, envolvendo populações que se encontram sob a influência de um campo de velocidades  $v$ , como por exemplo, peixes em um rio, plantas em oceanos, mosquitos na atmosfera, entre outros. Considere-se inicialmente a equação de reação-convecção-difusão dada por [30]

$$\frac{\partial S_j}{\partial t} = -\frac{\partial J_j}{\partial x} - \frac{\partial (S_j v)}{\partial x} + F_j(S_j), \quad (3.7)$$

onde  $J = -D\nabla S_j$  é a primeira lei de Fick e  $F_j(S_j)$  refere-se aos termos fontes das populações.

Na equação (3.7), entende-se que a taxa de variação da densidade das populações  $S_j$ , onde  $j$  representa a quantidade de populações envolvidas no modelo ao longo do tempo  $t$ , é igual à taxa do seu fluxo no espaço  $x$ , e da influência do fluido nas populações, mais as interações/reações externas.

Para qualquer interação com as populações, tem-se uma reação instantânea da mesma, porém, essa situação na prática não acontece, pois sempre vai existir um tempo para que a população reaja à qualquer tipo de interação, a esse tempo dá-se o nome de retardo.

A partir do interesse em contornar o problema da reação instantânea, utilizam-se as ideias de Maxwell e de Cattaneo. James Clerk Maxwell [13], em 1867, notou que uma tensão de cisalhamento inicial em um gás diluído, como por exemplo o ar, quando não suportado por um movimento de cisalhamento subjacente, decaía com um tempo de relaxação  $\tau = \frac{\eta}{p}$ , onde  $\eta$  é a viscosidade e  $p$  é a pressão [31].

Aproximadamente um século depois, Carlo Cattaneo [14] argumentou que a lei de Fourier para condução de calor deveria ser modificada de forma semelhante à proposta de Maxwell, a fim de evitar o fluxo de calor supersônico implicado por uma lei de transporte parabólica [31]. Para realizar tal modificação Cattaneo sugeriu uma abordagem considerando a equação de Fourier,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \theta, \quad (3.8)$$

onde  $\theta$  é a temperatura.

A equação (3.8) não é compatível com os princípios da relatividade, pois assume velocidade infinita na propagação de calor, o que é fisicamente inadmissível. Foi considerada, por outro lado, a equação hiperbólica de condução de calor [32],

$$\frac{1}{C^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} + \frac{1}{\alpha} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla^2 \theta, \quad (3.9)$$

que tem sido exaustivamente utilizada por ser compatível com a teoria da relatividade, no sentido de que reconhece a velocidade finita da condução do calor. A equação (3.9) é similar à forma de Maxwell, pois é uma equação de onda que permite uma gama de fenômenos tais como, reflexão, refração, difração, ressonância e "shock waves" [33].

Pode-se igualmente argumentar que um fluxo de calor, da forma

$$J_j = -D_j \nabla S_j, \quad (3.10)$$

quando não suportado por um gradiente de temperatura, decai com um microscópico tempo  $\tau$ , como o de Maxwell [31, 34], ou seja,

$$\tau_j \frac{\partial J_j}{\partial t} + J_j = -D_j \frac{\partial S_j}{\partial x}. \quad (3.11)$$

A equação (3.11) pode descrever também o comportamento da variação da densidade de uma população ao longo do espaço,  $x$ , onde esta variação acontece segundo a primeira lei de Fick, acrescentada do termo de retardo. Portanto, sempre existe um tempo entre a interação com a população e sua reação/resposta à essa interação.

Neste contexto, faz-se o acoplamento das equações (3.7) e (3.11) a fim de obter um tempo para a resposta funcional da população  $S$ , quando exposta a uma interação  $F$ . Apresenta-se na sequência o acoplamento de forma detalhada.

Diferenciando (3.7) em relação a  $t$ , obtém-se

$$\frac{\partial^2 S_j}{\partial t^2} = -\frac{\partial^2 J_j}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 (S_j v)}{\partial x \partial t} + \frac{\partial F_i(S_i)}{\partial S_j} \frac{\partial S_j}{\partial t}. \quad (3.12)$$

Diferenciando (3.11) em relação a  $x$ ,

$$\tau_j \frac{\partial^2 J_j}{\partial t \partial x} + \frac{\partial J_j}{\partial x} = -D_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial x^2}. \quad (3.13)$$

Multiplicando (3.12) por  $\tau_j$ , obtém-se o sistema de equações

$$\begin{cases} \tau_j \frac{\partial^2 J_j}{\partial x \partial t} = \tau_j \frac{\partial F_j(S_j)}{\partial S_j} \frac{\partial S_j}{\partial t} - \tau_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial t^2} - \tau_j \frac{\partial^2 (S_j v)}{\partial x \partial t} \\ \tau_j \frac{\partial^2 J_j}{\partial t \partial x} = -D_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial x^2} - \frac{\partial J_j}{\partial x}. \end{cases} \quad (3.14)$$

Igualando as equações do sistema (3.14) tem-se,

$$-\tau_j \frac{\partial F_j(S_j)}{\partial S_j} \frac{\partial S_j}{\partial t} + \tau_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial t^2} + \tau_j \frac{\partial^2 (S_j v)}{\partial x \partial t} = D_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial x^2} + \frac{\partial J_j}{\partial x}. \quad (3.15)$$

Substituindo o segundo termo da soma do lado esquerdo de (3.7) em (3.15),

$$-\tau_j \frac{\partial F_j(S_j)}{\partial S_j} \frac{\partial S_j}{\partial t} + \tau_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial t^2} + \tau_j \frac{\partial^2 (S_j v)}{\partial x \partial t} = D_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial x^2} - \frac{\partial S_j}{\partial t} - \frac{\partial (S_j v)}{\partial x} + F_j(S_j), \quad (3.16)$$

assim, reordenando os termos de (3.16), tem-se a equação de reação-convecção-difusão com retardo, com efeitos difusivos, convectivos, devido ao meio fluido, além do retardo, dada por

$$\tau_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial t^2} + \tau_j \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial x} (S_j v) \right) + \left[ 1 - \tau_j \frac{\partial F_j(S_j)}{\partial S_j} \right] \frac{\partial S_j}{\partial t} = -\frac{\partial (S_j v)}{\partial x} + D_j \frac{\partial^2 S_j}{\partial x^2} + F_j(S_j). \quad (3.17)$$

Considera-se para (3.17), as condições iniciais e de fronteira dadas por

$$\begin{aligned} S_j(x, 0) &= S_j(x), & \frac{\partial S_j}{\partial t}(x, 0) &= S_j^0, & x &\in (0, Lx) \\ S_j(0, t) &= S_j(Lx, t) = 0, & t &> 0, \end{aligned}$$

sendo  $S_j(x)$  uma função e  $S_j^0$  uma constante.

Para o modelo (3.17) são assumidas as seguintes hipóteses:

- H1** os coeficientes de difusão,  $D_j$ , das espécies, são desacoplados, isto é, os processos de difusão da presa e do predador não influenciam um ao outro, e portanto, os  $D_j$  não estão diretamente relacionados;
- H2** o ambiente é homogêneo;
- H3** a região de interação entre as espécies é considerada limitada, ou seja, o espaço,  $x$ , é limitado;
- H4** da mesma forma que acontece com os  $D_j$ , os termos de relaxação,  $\tau_j$ , independem um do outro;
- H5** considera-se, do ponto de vista de populações, apenas o subsistema de presas e predadores;
- H6** a única fonte de energia do predador é a biomassa da presa.

Como uma motivação da teoria apresentada pelos métodos de discretização multiestágios através dos aproximantes de Padé e de modelos que representam fenômenos de difusão e retardo, envolvendo populações, apresentam-se dois modelos que podem ser obtidos de (3.17).

### 3.4 MODELO PREDADOR-PRESA EXPONENCIAL

Considerando em (3.17) uma única espécie,  $v = 0$  e  $F(S) = k_1 S$  (ou um crescimento Malthusiano), obtém-se o modelo com termo fonte do tipo exponencial dado por,

$$\tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + (1 - \tau k_1) \frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + k_1 S, \quad (3.18)$$

onde  $k_1$  é uma constante.

As condições iniciais e de contorno são dadas por,

$$S(x, 0) = S(x), \quad S_t(0, t) = 0, \quad (3.19)$$

$$S(t, 0) = S(t, L) = S^0 \quad (3.20)$$

sendo  $S(x)$  uma função e  $S_0$  uma constante.

### 3.5 MODELO PREDADOR-PRESA LOTKA-VOLTERRA LOGÍSTICO

Ao considerar na equação (3.17),  $\tau_j = v = 0$ , uma presa,  $S_1$ , e um predador,  $S_2$ , obtém-se o modelo modificado predador-presa Lotka-Volterra logístico [16, 35, 36, 37],

$$\begin{cases} \frac{\partial S_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} + F_1(S_1, S_2) \\ \frac{\partial S_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} + F_2(S_1, S_2), \end{cases} \quad (3.21)$$

onde  $S_1$  e  $S_2$ , representam as densidades populacionais da presa e do predador, respectivamente,  $D_1$  e  $D_2$  são os coeficientes de difusão e,  $F_1(S_1, S_2)$  e  $F_2(S_1, S_2)$  são os termos fontes.

As condições iniciais e de contorno são dadas por,

$$S_j(x, 0) = S_j(x), \quad x \in (0, Lx), \quad (3.22)$$

$$S_j(0, t) = S_j(Lx, t) = 0, \quad t > 0. \quad (3.23)$$

## 4 ABORDAGEM DO MÉTODO MULTISTÁGIO COM APROXIMANTES DE PADÉ

A técnica multistágio, utilizando os aproximantes de Padé, é uma das técnicas utilizadas no processo de discretização do termo temporal. Desta forma, faz-se uma abordagem, considerando uma malha unidimensional uniforme, descrita no esquema apresentado na figura 4.1, na qual a abordagem é dividida em métodos explícitos e implícitos.

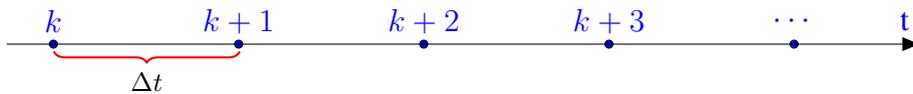


Figura 4.1: Esquema de uma malha unidimensional uniforme

Por simplicidade, e considerando que a teoria a ser abordada neste capítulo refere-se a discretização do termo temporal, será utilizada a letra  $u = u(t)$  para representar uma solução no tempo. Lembrando que a letra  $S = S(x, t)$  é utilizada para descrever a solução da densidade de população em função do espaço e do tempo.

### 4.1 MÉTODO MULTISTÁGIO EXPLÍCITO

Sendo  $u^k$  uma solução no tempo  $k\Delta t$ , pode-se supor que  $u^{k+1}$  seja uma solução no tempo  $(k+1)\Delta t$ , aproximada pela expansão de Taylor a partir de  $u^k$ , assim,

$$\begin{aligned}
 u^{k+1} &= u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^k + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial t^3} u^k + \dots \\
 &= \left( 1 + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial t^3} \dots \right) u^k \\
 &= \exp\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right) u^k.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Observe que a solução de  $u$  no nível de tempo  $(k+1)$ , obtida em (4.1), é aproximada pelo produto da função (operador) exponencial por sua solução no nível de tempo  $k$ .

Como a função exponencial pode ser aproximada por aproximantes de Padé, faz-se a substituição da exponencial pelo aproximante  $R_{L,M}$ , produzindo assim uma aproximação de alta ordem [38]. Desta forma, apresentam-se os detalhes de como se obter os métodos de alta ordem, para as discretizações temporais de primeira e de segunda ordens, tendo em vista que estas derivadas aparecem nas equações utilizadas no trabalho.

### 4.1.1 Método Explícito de Segunda Ordem

Considere-se a aproximação de Taylor para  $u^{k+1}$  de ordem dois,

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^k + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k. \quad (4.2)$$

A fim de evitar a derivada de segunda ordem, pode-se fatorar (4.2) obtendo,

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( 1 + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \right) u^k. \quad (4.3)$$

Chamando a segunda soma do lado direito de (4.3) de  $u^{k+\frac{1}{2}}$  tem-se,

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}}. \quad (4.4)$$

A definição do termo  $u^{k+\frac{1}{2}}$  pode ser entendida no contexto de diferenças finitas, considerando uma malha unidimensional, agora com o nível de tempo  $(k + \frac{1}{2})$ , representada na figura 4.2

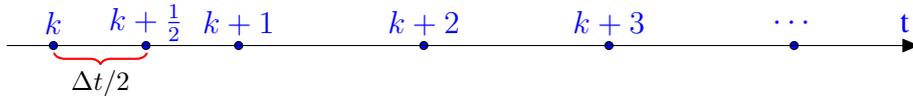


Figura 4.2: Esquema de uma malha unidimensional uniforme com Padé  $R_{2,0}$

Foi incluído um nível de tempo dentro da malha no ponto médio entre os níveis  $k$  e  $k + 1$ . Esse novo estágio no tempo é denotado por  $u^{k+\frac{1}{2}}$ . Neste contexto, aplicando diferença progressiva,

$$\frac{\partial}{\partial t} u^k \simeq \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2}. \quad (4.5)$$

Isolando o termo  $u^{k+\frac{1}{2}}$ , tem-se

$$u^{k+\frac{1}{2}} \simeq u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^k. \quad (4.6)$$

Dessa forma obtém-se um esquema descrito por dois estágios explícitos, equações (4.4) e (4.6). Os estágios utilizados na discretização possuem a forma,

$$\begin{cases} u^{k+\frac{1}{2}} = u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^k \\ u^{k+1} = u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (4.7)$$

A partir do sistema (4.7) é possível fazer o processo inverso e chegar na defi-

nição do Padé  $R_{2,0}$ , estabelecendo assim uma relação entre o método de alta ordem e os aproximantes. De fato, acoplando as equações de (4.7) tem-se

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^k \right), \quad (4.8)$$

logo

$$u^{k+1} \simeq \left( 1 + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) u^k, \quad (4.9)$$

e, substituindo  $\Delta t(\partial/\partial t)$  por  $h$ , tem-se

$$u^{k+1} \simeq \left( 1 + h + \frac{h^2}{2} \right) u^k. \quad (4.10)$$

Verifica-se de (4.10), que o termo  $1 + h + h^2/2$  representa o aproximante  $R_{2,0}$ , como descrito na tabela 2.1, logo

$$u^{k+1} \simeq (R_{2,0}) u^k. \quad (4.11)$$

Similarmente, pode-se construir os métodos explícitos de qualquer ordem, como por exemplo, o método de quarta ordem.

#### 4.1.2 Método Explícito de Quarta Ordem

Fazendo o truncamento de (4.2) na quarta potência, obtém-se

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^k + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial t^3} u^k + \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{\partial^4}{\partial t^4} u^k. \quad (4.12)$$

Fatorando (4.12) produz-se um método de quatro estágio da seguinte forma

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial}{\partial t} u^k \right) \right) \right). \quad (4.13)$$

Chamando o termo  $(u^k + \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial}{\partial t} u^k)$  da equação (4.13) de  $u^{k+\frac{1}{4}}$ , tem-se

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{4}} \right) \right), \quad (4.14)$$

nomeando em (4.14) o termo  $(u^k + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{4}})$  de  $u^{k+\frac{1}{3}}$ ,

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{3}} \right), \quad (4.15)$$

finalmente, substituindo o termo  $\left(u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{3}}\right)$  da equação (4.15) por  $u^{k+\frac{1}{2}}$ , tem-se

$$u^{k+1} \simeq u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}}, \quad (4.16)$$

produzindo assim o método de quarta ordem explícito, descrito por quatro estágios,

$$\left\{ \begin{array}{l} u^{k+\frac{1}{4}} = u^k + \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial}{\partial t} u^k \\ u^{k+\frac{1}{3}} = u^k + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{4}} \\ u^{k+\frac{1}{2}} = u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{3}} \\ u^{k+1} = u^k + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}}. \end{array} \right. \quad (4.17)$$

Os aproximantes de Padé  $R_{L,0}$ , localizados na primeira linha da tabela 2.1, são totalmente explícitos. De um modo geral, os métodos explícitos são obtidos quando  $L < M$ . O método multiestágio explícito de quarta ordem possui a mesma estabilidade e precisão do clássico método de Runge-Kutta [17].

## 4.2 MÉTODO MULTIESTÁGIO IMPLÍCITO

Devido ao fato dos aproximantes  $R_{L,M}$ , com  $L = M$ , serem os que se aproximam mais rapidamente do valor de  $\exp(1)$ , quando comparado com os outros aproximantes de mesma ordem, como pode ser verificado na Tabela 2.2, apresentam-se os aproximantes de segunda e quarta ordem descritos por  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , respectivamente, os quais serão a base das discretizações a serem apresentadas.

Os modelos a serem discretizados são obtidos através de simplificações da equação (3.17), sendo em alguns casos necessário a discretização do termo que envolve a segunda derivada no tempo. Em função disto, e como a proposta do trabalho é a de apresentar métodos multiestágios, faz-se necessário deduzir os estágios para os métodos  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  envolvendo a segunda derivada.

### 4.2.1 Método Implícito de Segunda Ordem

Os aproximantes de Padé  $R_{L,M}$  com  $M \leq L$ , produzem um método de discretização implícito [17]. Assim, quando  $L = 1$  e  $M = 1$  produzem-se um método de segunda ordem implícito.

ABORDAGEM DA PRIMEIRA DERIVADA NO TEMPO

Na seção 4.1.1, introduziu-se o conceito de um nível intermediário no tempo. Considerando os níveis  $k$  e  $(k+1)$  e, utilizando as ideias do método de Crank-Nicolson, pode-se obter as aproximações para a primeira derivada no tempo, sendo

$$\frac{\partial}{\partial t} u^k \simeq \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} \simeq \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2}. \quad (4.19)$$

Isolando os termos  $u^{k+\frac{1}{2}}$  e  $u^{k+1}$ , em (4.19) e (4.18) respectivamente, tem-se uma discretização para o método  $R_{1,1}$  dada por dois estágios,

$$\begin{cases} u^{k+\frac{1}{2}} = u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^k & \text{(primeiro estágio)} \\ u^{k+1} = u^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}} & \text{(segundo estágio).} \end{cases} \quad (4.20)$$

Por outro lado, como no método explícito, pode-se fazer a relação dos estágios da discretização do método implícito com os aproximantes de Padé. Considera-se o aproximante de Padé  $R_{1,1}$  que representa uma aproximação da função exponencial. Sendo  $u^{k+1}$  escrito na forma,

$$u^{k+1} = R_{1,1} u^k, \quad (4.21)$$

e, considerando a função racional que representa o aproximante  $R_{1,1}$ , dado na tabela 2.1, tem-se

$$u^{k+1} = \left( \frac{1 + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t}}{1 - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t}} \right) u^k, \quad (4.22)$$

ou ainda,

$$u^{k+1} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} = \left( 1 + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \right) u^k. \quad (4.23)$$

Denotando o termo do lado direito de (4.23) por  $u^{k+\frac{1}{2}}$ , ou seja, escrevendo

$$u^{k+\frac{1}{2}} = \left( 1 + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \right) u^k, \quad (4.24)$$

e, substituindo (4.24) na equação (4.23), tem-se

$$u^{k+1} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} = u^{k+\frac{1}{2}}. \quad (4.25)$$

Isolando o termo  $u^{k+1}$ , na equação (4.25), tem-se

$$u^{k+1} = u^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1}, \quad (4.26)$$

que é exatamente o segundo estágio como apresentado em (4.20) e  $u^{k+\frac{1}{2}}$  em (4.24) é o primeiro estágio de (4.20). Ou seja, de fato, o aproximante de Padé  $R_{1,1}$  está relacionado com o método multiestágio implícito de segunda ordem.

#### ABORDAGEM PARA A DERIVADA SEGUNDA NO TEMPO

Quando EDPs possuem derivada segunda no tempo, a abordagem da discretização sofre alterações. Considerando o esquema de malha dado pela figura 4.2, é preciso acrescentar o ponto  $(k - \frac{1}{2})$  pelo fato da derivada segunda ser aproximada por diferenças centrais. Dessa forma, acrescentando o nível de tempo  $(k - \frac{1}{2})$  e  $(k + 1)$ , tem-se o novo esquema representado na figura 4.3.

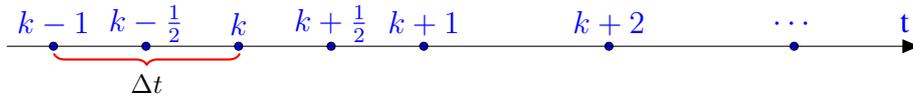


Figura 4.3: Esquema de uma malha unidimensional uniforme com Padé  $R_{1,1}$ , considerando a derivada segunda

Uma aproximação para a primeira derivada temporal é dada por,

$$\frac{\partial}{\partial t} u^k = \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \quad (4.27)$$

obtendo assim, a aproximação da derivada segunda dada por,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \right) \quad (4.28)$$

ou ainda,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k = \frac{2}{\Delta t} \left( \frac{\partial u^{k+\frac{1}{2}}}{\partial t} - \frac{\partial u^k}{\partial t} \right). \quad (4.29)$$

Aplicam-se diferenças finitas regressivas nos níveis de tempo  $(k + \frac{1}{2})$  e  $k$ , no contexto da figura 4.3, obtendo,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k = \frac{2}{\Delta t} \left[ \left( \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \right) - \left( \frac{u^k - u^{k-\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \right) \right], \quad (4.30)$$

e simplificando, tem-se,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k = \frac{4u^{k+\frac{1}{2}} - 8u^k + 4u^{k-\frac{1}{2}}}{\Delta t^2}. \quad (4.31)$$

Considerando agora a discretização no nível de tempo  $(k + 1)$ , e sabendo que a primeira derivada temporal pode ser aproximada por,

$$\frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} = \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \quad (4.32)$$

tem-se, assim, a aproximação da derivada segunda no tempo, dada por,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \right) \quad (4.33)$$

ou ainda,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+1} = \frac{2}{\Delta t} \left( \frac{\partial u^{k+1}}{\partial t} - \frac{\partial u^{k+\frac{1}{2}}}{\partial t} \right) \quad (4.34)$$

e, considerando o esquema da figura 4.3, aplica-se diferença finita regressiva em  $(k + 1)$  e  $(k + \frac{1}{2})$ , obtendo,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+1} = \frac{2}{\Delta t} \left[ 2 \left( \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) - 2 \left( \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t} \right) \right], \quad (4.35)$$

que na forma simplificada tem-se,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+1} = \frac{4u^{k+1} - 8u^{k+\frac{1}{2}} + 4u^k}{\Delta t^2}. \quad (4.36)$$

Isolando o termo  $u^{k+\frac{1}{2}}$  na equação (4.31) e isolando o termo  $u^{k+1}$  na equação (4.36), têm-se os dois estágios da discretização para  $R_{1,1}$ , envolvendo a derivada segunda,

$$\begin{cases} u^{k+\frac{1}{2}} = 2u^k + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k - u^{k-\frac{1}{2}} & \text{(primeiro estágio)} \\ u^{k+1} = 2u^{k+\frac{1}{2}} - u^k + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+1} & \text{(segundo estágio).} \end{cases} \quad (4.37)$$

### 4.2.2 Método Implícito de Quarta Ordem

A ideia do método implícito de quarta ordem surge da aproximação do nível de tempo  $(k + 1)$  através do nível de tempo  $k$ , por série de Taylor, fazendo seu truncamento no termo de ordem quatro, resultando em quatro estágios envolvendo cinco níveis, como ilustrado no esquema apresentado na figura 4.4,

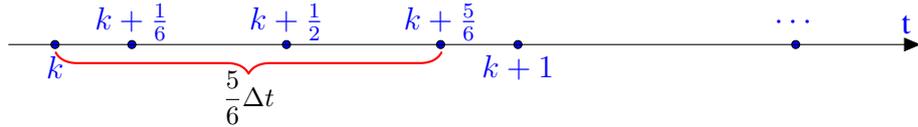


Figura 4.4: Esquema de uma malha unidimensional uniforme com Padé  $R_{2,2}$

#### ABORDAGEM PARA A DERIVADA PRIMEIRA NO TEMPO

Considerando o esquema da figura 4.4, obtêm-se as aproximações para as derivadas em  $k$ ,  $(k + \frac{1}{6})$ ,  $(k + \frac{5}{6})$  e  $(k + 1)$ , como apresentadas em (4.38)-(4.41),

$$\frac{\partial}{\partial t} u^k \simeq \frac{u^{k+\frac{1}{6}} - u^k}{\Delta t/6} \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{6}} \simeq \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{5}{6}} \simeq \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} \simeq \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6}, \quad (4.41)$$

o que produz quatro estágios temporais, sendo dois explícitos e dois implícitos,

$$\left\{ \begin{array}{l} u^{k+\frac{1}{6}} = u^k + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial}{\partial t} u^k \quad (\text{primeiro estágio}), \\ u^{k+\frac{1}{2}} = u^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{6}} \quad (\text{segundo estágio}), \\ u^{k+\frac{5}{6}} = u^{k+1} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} \quad (\text{terceiro estágio}), \\ u^{k+1} = u^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{5}{6}} \quad (\text{quarto estágio}). \end{array} \right. \quad (4.42)$$

ABORDAGEM PARA A DERIVADA SEGUNDA NO TEMPO

Considerando a figura 4.4 e a equação (4.38), obtém-se a aproximação para a segunda derivada no nível de tempo  $k$ ,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k &\simeq \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{u^{k+\frac{1}{6}} - u^k}{\Delta t/6} \right) \\
 &\simeq \frac{6}{\Delta t} \left[ \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{6}} - \frac{\partial}{\partial t} u^k \right] \\
 &\simeq \frac{6}{\Delta t} \left[ \left( \frac{u^{k+\frac{1}{6}} - u^k}{\Delta t/6} \right) - \left( \frac{u^k - u^{k-\frac{1}{6}}}{\Delta t/6} \right) \right] \\
 &\simeq \frac{u^{k+\frac{1}{6}} - 2u^k + u^{k-\frac{1}{6}}}{(\Delta t/6)^2}.
 \end{aligned} \tag{4.43}$$

A aproximação para a derivada segunda no estágio de tempo  $(k + \frac{1}{6})$ ,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+\frac{1}{6}} &\simeq \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \right) \\
 &\simeq \frac{2}{\Delta t} \left[ \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}} - \frac{\partial}{\partial t} u^k \right] \\
 &\simeq \frac{2}{\Delta t} \left[ \left( \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \right) - \left( \frac{u^k - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \right) \right] \\
 &\simeq \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - 2u^k + u^{k-\frac{1}{2}}}{(\Delta t/2)^2}.
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

Para o estágio de tempo  $(k + \frac{5}{6})$  tem-se,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+\frac{5}{6}} &\simeq \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \right] \\
 &\simeq \frac{2}{\Delta t} \left[ \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} - \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{1}{2}} \right] \\
 &\simeq \frac{2}{\Delta t} \left[ \left( \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \right) - \left( \frac{u^{k+\frac{1}{2}} - u^k}{\Delta t/2} \right) \right] \\
 &\simeq \frac{u^{k+1} - 2u^{k+\frac{1}{2}} + u^k}{(\Delta t/2)^2} \text{ e,}
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

para  $(k + 1)$ ,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+1} &\simeq \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} \right] \\
&\simeq \frac{6}{\Delta t} \left[ \frac{\partial}{\partial t} u^{k+1} - \frac{\partial}{\partial t} u^{k+\frac{5}{6}} \right] \\
&\simeq \frac{6}{\Delta t} \left[ \left( \frac{u^{k+1} - u^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} \right) - \left( \frac{u^{k+\frac{5}{6}} - u^{k+\frac{4}{6}}}{\Delta t/6} \right) \right] \\
&\simeq \frac{u^{k+1} - 2u^{k+\frac{5}{6}} + u^{k+\frac{4}{6}}}{(\Delta t/6)^2}.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

As equações (4.43)-(4.46) produzem os quatro estgios do mtodo de quarta ordem,  $R_{2,2}$  para a derivada segunda, como apresentado de forma resumida em (4.47),

$$\left\{ \begin{array}{l}
u^{k+\frac{1}{6}} = 2u^k - u^{k-\frac{1}{6}} + \left( \frac{\Delta t}{6} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^k \quad (\text{primeiro estgio}) \\
u^{k+\frac{1}{2}} = 2u^k - u^{k-\frac{1}{2}} + \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+\frac{1}{6}} \quad (\text{segundo estgio}) \\
u^{k+\frac{5}{6}} = \frac{1}{2}u^{k+1} + \frac{1}{2}u^{k+\frac{2}{3}} - \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{6} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+1} \quad (\text{terceiro estgio}) \\
u^{k+1} = 2u^{k+\frac{1}{2}} - u^k + \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u^{k+\frac{5}{6}} \quad (\text{quarto estgio}).
\end{array} \right. \tag{4.47}$$

A soluo no ponto de malha  $(k + 1)$   aproximada atravs das solues obtidas nos dois estgios explcitos e nos dois estgios implcitos de (4.47). Abordagens similares podem ser obtidas para os demais aproximantes  $R_{L,M}$ ,  $L = M$ . Em [17], tm-se os estgios envolvendo a primeira derivada de  $R_{3,3}$ .

Os mtodos implcitos multiestgios so de ordem  $2k$  [39]. Donea e Huerta [17] mostraram que os aproximantes  $R_{L,M}$ , para  $L = M$ , so condicionalmente estveis, quando aplicados s equaes de conveco-difuso.

Para validar a abordagem apresentada, faz-se a discretizao da equao de difuso, da equao de Maxwell-Cattaneo, dos modelos exponencial e Lotka-Volterra logstico. Tais modelos so formas simplificadas do sistema de equaes de reao-conveco-difuso com retardo.

## 5 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

Neste capítulo faz-se a discretização das formas simplificadas do sistema de equações de reação-convecção-difusão com retardo (3.17). Utilizam-se esquemas multiestágios implícitos de alta ordem, envolvendo os aproximantes de Padé. Como os modelos a serem discretizados envolvem tanta a variável temporal quanto a espacial, utiliza-se  $S(x, t)$  para representar as respectivas soluções.

Como uma alternativa para validar as discretizações apresentadas no capítulo 4, inicialmente aborda-se a equação de difusão, (3.1), na sequência a equação de Maxwell-Cattaneo, (3.4), pois ambas possuem soluções analíticas [2, 10, 18, 29].

A equação de Maxwell-Cattaneo surgiu da necessidade de validar a teoria desenvolvida para os estágios envolvendo a derivada segunda no tempo para  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , apresentadas nas equações (4.37) e (4.47), respectivamente, e pelo fato de não ter encontrado na literatura tal abordagem. Assim, serão utilizados os métodos explícito, multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  e Crank-Nicolson para avaliar a teoria apresentada nos capítulos 2-4.

### 5.1 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

Considere-se a equação de difusão (3.1), cuja discretização é obtida através dos métodos multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ .

#### 5.1.1 Método multiestágio $R_{1,1}$

De acordo com a abordagem dada em (4.20) obtêm-se os dois estágios da discretização da equação (3.1), representados por

$$\begin{cases} S_i^{k+\frac{1}{2}} = S_i^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^k \\ S_i^{k+1} = S_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (5.1)$$

De (3.1), tem-se que

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2},$$

que, ao ser substituído em (5.1), considerando os níveis de tempo  $k$  e  $(k + 1)$ , e as respectivas aproximações da segunda derivada espacial, equação (2.12), resulta em

$$\begin{cases} S_i^{k+\frac{1}{2}} = S_i^k + \frac{\Delta t}{2} D \left( \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2} \right) \\ S_i^{k+1} = S_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} D \left( \frac{S_{i+1}^{k+1} - 2S_i^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right). \end{cases} \quad (5.2)$$

Reordenando os termos de (5.2) têm-se os dois estágios da discretização do método  $R_{1,1}$ , dados por

$$\begin{cases} S_i^{k+\frac{1}{2}} = (1 - 2\rho) S_i^k + \rho (S_{i+1}^k + S_{i-1}^k) & \text{(primeiro estágio)} \\ S_i^{k+1} = \frac{1}{1 + 2\rho} \left[ S_i^{k+\frac{1}{2}} + \rho (S_{i+1}^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}) \right] & \text{(segundo estágio),} \end{cases} \quad (5.3)$$

onde  $\rho = \frac{D}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ .

### 5.1.2 Método multiestágio $R_{2,2}$

De acordo com a abordagem dada em (4.42), obtêm-se os quatro estágios da discretização da equação (3.1), representados por

$$\begin{cases} S_i^{k+\frac{1}{6}} = S_i^k + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^k \\ S_i^{k+\frac{1}{2}} = S_i^k + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{6}} \\ S_i^{k+\frac{5}{6}} = S_i^{k+1} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+1} \\ S_i^{k+1} = S_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{5}{6}}. \end{cases} \quad (5.4)$$

Substituindo a equação (3.1) na equação (5.4) nos níveis de tempo  $k$ ,  $(k + \frac{5}{6})$  e  $(k + 1)$  e aproximando a segunda derivada espacial, resulta em

$$\left\{ \begin{array}{l} S_i^{k+\frac{1}{6}} = S_i^k + \frac{\Delta t}{6} D \left( \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2} \right) \\ S_i^{k+\frac{1}{2}} = S_i^k + \frac{\Delta t}{2} D \left( \frac{S_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2S_i^{k+\frac{1}{6}} + S_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2} \right) \\ S_i^{k+\frac{5}{6}} = S_i^{k+1} - \frac{\Delta t}{6} D \left( \frac{S_{i+1}^{k+1} - 2S_i^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right) \\ S_i^{k+1} = S_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} D \left( \frac{S_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2S_i^{k+\frac{5}{6}} + S_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2} \right). \end{array} \right. \quad (5.5)$$

Reordenando os termos de (5.5) obtêm-se os quatro estágios da discretização do método  $R_{2,2}$ , dados por

$$\left\{ \begin{array}{l} S_i^{k+\frac{1}{6}} = \left(1 - \frac{2}{3}\rho\right) S_i^k + \frac{\rho}{3} (S_{i+1}^k + S_{i-1}^k) \quad (\text{primeiro estágio}) \\ S_i^{k+\frac{1}{2}} = S_i^k + \rho \left( S_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2S_i^{k+\frac{1}{6}} + S_{i-1}^{k+\frac{1}{6}} \right) \quad (\text{segundo estágio}) \\ S_i^{k+\frac{5}{6}} = \left(1 + \frac{2}{3}\rho\right) S_i^{k+1} - \frac{\rho}{3} (S_{i+1}^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}) \quad (\text{terceiro estágio}) \\ S_i^{k+1} = S_i^{k+\frac{1}{2}} - 2\rho S_i^{k+\frac{5}{6}} + \rho \left( S_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} + S_{i-1}^{k+\frac{5}{6}} \right) \quad (\text{quarto estágio}). \end{array} \right. \quad (5.6)$$

Durante os testes com a equação de difusão utilizam-se também os métodos de Crank-Nicolson e explícito, cujas discretizações serão omitidas nessa seção, mas podem ser encontradas em [40].

## 5.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO

A importância da equação de Maxwell-Cattaneo está no fato de conter uma derivada segunda no tempo. Na literatura não foi encontrada abordagem da técnica com Padé nessa condição. Dessa forma, foi proposta uma abordagem da aplicação das técnicas multiestágios com os aproximantes de Padé  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ .

### 5.2.1 Método multiestágio com o aproximante de Padé $R_{1,1}$

Considerando a equação (3.4), a aproximação para as derivadas temporais são obtidas utilizando o procedimento descrito nas seções 4.2.1 e 4.2.2.

A discretização em um ponto  $(i, k)$  da equação (3.4) é representada por

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k - D \left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_i^k + \tau \left. \frac{\partial S}{\partial t^2} \right|_i^k = 0. \quad (5.7)$$

Sabe-se que a aproximação progressiva para a primeira derivada no tempo, via a teoria do aproximante de Padé  $R_{1,1}$ , é dada por (4.18), ou ainda,

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_i^k = \frac{S_i^{k+\frac{1}{2}} - S_i^k}{\Delta t/2} \quad (5.8)$$

e a aproximação da derivada segunda no tempo, (4.31),

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \right|_i^k = \frac{4S_i^{k+\frac{1}{2}} - 8S_i^k + 4S_i^{k-\frac{1}{2}}}{\Delta t^2}. \quad (5.9)$$

No termo espacial aplica-se diferença central,

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_i^k = \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2}. \quad (5.10)$$

Substituindo as equações (5.8), (5.9) e (5.10) na equação (5.7),

$$\frac{S_i^{k+\frac{1}{2}} - S_i^k}{\Delta t/2} - D \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2} + \tau \frac{4S_i^{k+\frac{1}{2}} - 8S_i^k + 4S_i^{k-\frac{1}{2}}}{\Delta t^2} = 0, \quad (5.11)$$

reordenando os termos, tem-se

$$\left( \frac{2}{\Delta t} + \frac{4\tau}{\Delta t^2} \right) S_i^{k+\frac{1}{2}} - \left( \frac{2}{\Delta t} + \frac{8\tau}{\Delta t^2} - D \frac{2}{\Delta x^2} \right) S_i^k = D \left( \frac{S_{i+1}^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2} \right) - \frac{4\tau}{\Delta t^2} S_i^{k-\frac{1}{2}} \quad (5.12)$$

e, simplificando os termos,

$$\left( 1 + \frac{\Delta t}{2\tau} \right) S_i^{k+\frac{1}{2}} = \left( \frac{\Delta t}{2\tau} - \frac{D \Delta t^2}{2\tau \Delta x^2} + 2 \right) S_i^k - \frac{D \Delta t^2}{4\tau \Delta x^2} (S_{i+1}^k + S_{i-1}^k) + S_i^{k-\frac{1}{2}} \quad (5.13)$$

e, isolando  $(S_i^{k+\frac{1}{2}})$ , obtém-se o primeiro estágio da discretização, dado por

$$S_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\psi_i} \left( \phi_i S_i^k - \rho_{exp} (S_{i+1}^k + S_{i-1}^k) + S_i^{k-\frac{1}{2}} \right), \quad (5.14)$$

onde

$$\begin{aligned}
 \psi_i &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \\
 \rho_{exp} &= \frac{D \Delta t^2}{4\tau \Delta x^2} \\
 \phi_i &= \left(\frac{\Delta t}{2\tau} + 2 - \frac{\rho_1}{2}\right) \\
 \rho_1 &= \frac{D \Delta t^2}{\tau \Delta x^2}.
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

A equação obtida em (5.14) pode ser interpretada no extêncil apresentado na figura 5.1,

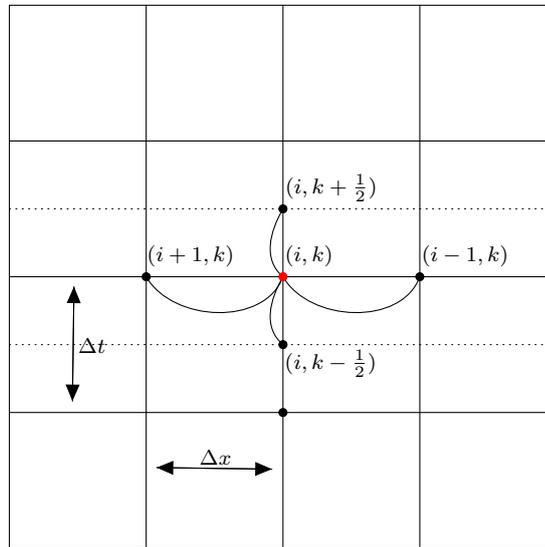


Figura 5.1: Estêncil da discretização no ponto  $(i, k)$  do método multistágio  $R_{1,1}$

Portanto na discretização pelo método multistágio com o aproximante de Padé  $R_{1,1}$  são utilizadas diferenças progressivas no tempo. As derivadas no espaço são aproximadas por diferenças centradas. O método, quando discretizado no ponto de malha  $(i, k)$  depende, em sua forma de recorrência, dos pontos  $(i+1, k)$ ,  $(i-1, k)$ ,  $(i, k+1/2)$  e  $(i, k-1/2)$ , como mostra a figura 5.1. O primeiro estágio da discretização produz um sistema linear explícito, que precisará ser resolvido para gerar a solução numérica no nível de tempo  $(k + \frac{1}{2})$ .

Considerando agora a discretização no ponto  $(i, k + 1)$ ,

$$\frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+1} - D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_i^{k+1} + \tau \frac{\partial S}{\partial t^2} \Big|_i^{k+1} = 0, \quad (5.16)$$

então, a aproximação para a primeira derivada regressiva no tempo é dada por (4.19),

$$\frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+1} = \frac{S_i^{k+1} - S_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \quad (5.17)$$

e a aproximação para a derivada segunda é dada por (4.36),

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \Big|_i^{k+1} = \frac{4S_i^{k+1} - 8S_i^{k+\frac{1}{2}} + 4S_i^k}{\Delta t^2}. \quad (5.18)$$

No termo espacial aplica-se novamente diferença central,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_i^{k+1} = \frac{S_{i+1}^{k+1} - 2S_i^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}. \quad (5.19)$$

Substituindo as equações (5.17), (5.18) e (5.19) na equação (5.16),

$$\frac{S_i^{k+1} - S_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} + \tau \frac{4S_i^{k+1} - 8S_i^{k+\frac{1}{2}} + 4S_i^k}{\Delta t^2} - D \frac{S_{i+1}^{k+1} - 2S_i^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} = 0, \quad (5.20)$$

e reordenando os termos tem-se,

$$\left( \frac{2}{\Delta t} + \frac{4\tau}{\Delta t^2} + \frac{2D}{\Delta x^2} \right) S_i^{k+1} - \left( \frac{2}{\Delta t} + \frac{8\tau}{\Delta t^2} \right) S_i^{k+\frac{1}{2}} = D \left( \frac{S_{i+1}^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right) - \frac{4\tau}{\Delta t^2} S_i^k. \quad (5.21)$$

Simplificando a equação (5.21) tem-se

$$\left( \Delta t + 2\tau + D \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \right) S_i^{k+1} = (\Delta t + 4\tau) S_i^{k+\frac{1}{2}} + D \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \left( \frac{S_{i+1}^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{2} \right) - 2\tau S_i^k \quad (5.22)$$

e isolando o termo  $(S_i^{k+1})$ , obtém-se o segundo estágio da discretização,

$$S_i^{k+1} = \psi_{i+1} \left( \phi_{i+1} S_i^{k+\frac{1}{2}} + \rho_2 (S_{i+1}^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}) - 2\tau S_i^k \right), \quad (5.23)$$

onde

$$\begin{aligned}
\rho_2 &= \frac{D \Delta t^2}{2 \Delta x^2} \\
\psi_{i+1} &= \frac{1}{\Delta t + 2\tau + D\gamma^2} \\
\phi_{i+1} &= (\Delta t + 4\tau).
\end{aligned} \tag{5.24}$$

A equação obtida em (5.23) pode ser interpretada no extêncil apresentado na figura 5.2.

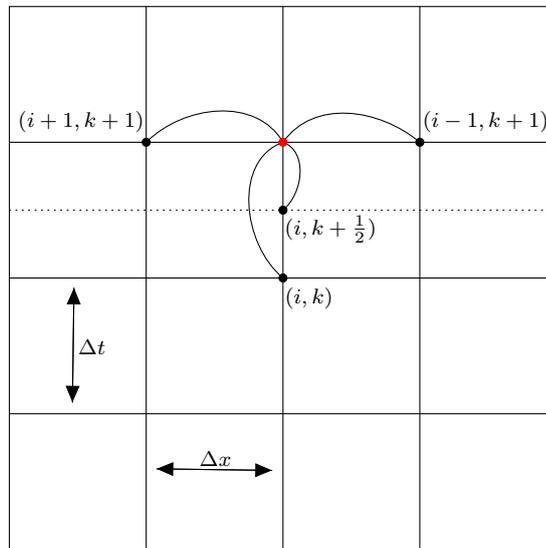


Figura 5.2: Estêncil da discretização no ponto  $(i, k + 1)$  do método multiestágio  $R_{1,1}$

No segundo estágio, a derivada primeira foi aproximada por diferenças regressivas, enquanto que a derivada segunda foi aproximada por diferenças centradas. O método discretizado no ponto de malha  $(i, k + 1)$  depende, em sua forma de recorrência, dos pontos  $(i, k)$ ,  $(i + 1, k + 1)$ ,  $(i - 1, k + 1)$  e  $(i, k + 1/2)$ , como mostra a figura 5.2. Produzindo um sistema linear implícito para gerar a solução numérica no nível de tempo  $(k + 1)$ . As equações (5.14) e (5.23) são os dois estágios que serão implementados, conforme mostra o algoritmo 1.

Além do método multiestágio com o aproximante de Padé  $R_{1,1}$ , fazem-se as discretizações pelos métodos de Crank-Nicolson, explícito e multiestágio através do aproximante de Padé  $R_{2,2}$ . Nos apêndices B e C têm-se os detalhes de cada uma das discretizações.

---

**Algoritmo 1: SOLUÇÃO NUMÉRICA PELO MÉTODO PADÉ  $R_{1,1}$** 


---

**Entrada:**  $inter, nt, nx$

- 1 **início**
- 2    Condição inicial
- 3    **para**  $i = 1$  **até**  $(nx)$  **faça**
- 4        calcule a condição inicial no primeiro estágio do tempo
- 5        **se**  $\tau < \tau_c$  **ou**  $\tau > \tau_c$  **ou**  $\tau = \tau_c$  **então**
- 6            calcule a condição inicial do segundo estágio do tempo
- 7        **fim**
- 8    **fim**
- 9    Condição de contorno
- 10   **para**  $k = 1$  **até**  $(nt)$  **faça**
- 11        considere zero nas fronteiras
- 12    **fim**
- 13    Cálculo numérico
- 14    **para**  $itr = 1$  **até**  $(inter)$  **faça**
- 15        **para**  $k = 1$  **até**  $(nt - 1)$  **faça**
- 16            **para**  $i = 2$  **até**  $(nx - 1)$  **faça**
- 17                encontre a solução no estágio de tempo  $(k + \frac{1}{2})$ , utilizando a discretização dada em (5.14)
- 18            **fim**
- 19        **fim**
- 20        **para**  $k = 1$  **até**  $(nt - 1)$  **faça**
- 21            **para**  $i = 2$  **até**  $(nx - 1)$  **faça**
- 22                encontre a solução no estágio de tempo  $k$ , utilizando a discretização dada em (5.23)
- 23            **fim**
- 24        **fim**
- 25    **fim**
- 26 **fim**
- 27 **retorna** *plote a solução do método  $R_{1,1}$  para a equação de Maxwell-Cattaneo*

---

## 5.2.2 Método de Crank-Nicolson

Nesta seção foi realizada a discretização básica do método de Crank-Nicolson, a versão completa encontra-se no apêndice C. O método é a combinação do método de Euler explícito em  $k$  e do método de Euler implícito em  $(k + 1)$ , onde a discretização é feita por diferenças centradas no espaço, obtendo

$$\frac{S_i^{k+1} - S_i^k}{\Delta t/2} + \tau \frac{S_i^{k+1} - S_i^k + S_i^{k-1}}{\Delta t^2/2} = D \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2} + D \frac{S_{i+1}^{k+1} - 2S_i^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}. \quad (5.25)$$

Reorganizando os termos de (5.25) tem-se o extêncil da discretização como apresentado na figura 5.3,

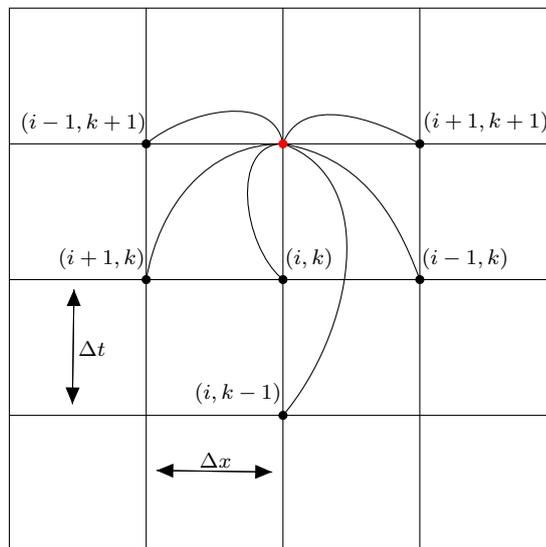


Figura 5.3: Estêncil da discretização do método de Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson quando discretizado, para encontrar a solução no ponto de malha  $(i, k + 1)$ , é preciso conhecer previamente a solução nos pontos  $(i, k)$ ,  $(i, k - 1)$ ,  $(i + 1, k)$ ,  $(i - 1, k)$ ,  $(i + 1, k + 1)$  e  $(i - 1, k + 1)$ , como mostra a figura 5.3.

## 5.2.3 Método explícito

A discretização do método explícito é dada por

$$\frac{S_i^{k+1} - S_i^k}{\Delta t} + \tau \frac{S_i^{k+1} - 2S_i^k + S_i^{k-1}}{\Delta t^2} = D \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2}. \quad (5.26)$$

Na implementação da equação (5.26), procura-se a solução no ponto de malha  $(i, k + 1)$  conhecendo previamente as soluções nos pontos  $(i, k)$ ,  $(i, k - 1)$ ,  $(i + 1, k)$  e  $(i - 1, k)$ ,

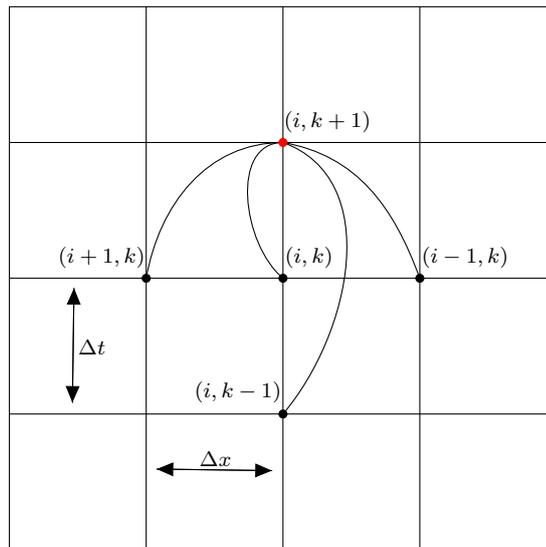


Figura 5.4: Estêncil da discretização do método explícito

conforme mostra a figura 5.4, produzindo assim, um método que será totalmente explícito.

#### 5.2.4 Método multiestágio com o aproximante de Padé $R_{2,2}$

A equação de Maxwell-Cattaneo quando discretizada através do método  $R_{2,2}$  produz quatro estágios, como em (4.47). No primeiro estágio, utiliza-se o método de diferenças progressivas para aproximar a primeira derivada temporal. A derivada segunda é aproximada por diferenças centradas com o apoio dos pontos  $(i, k + \frac{1}{6})$  e  $(i, k - \frac{1}{6})$ , resultando em

$$\frac{S_i^{k+\frac{1}{6}} - S_i^k}{\Delta t/6} + \tau \frac{S_i^{k+\frac{1}{6}} - 2S_i^k + S_i^{k-\frac{1}{6}}}{(\Delta t/6)^2} = D \frac{S_{i+1}^k - 2S_i^k + S_{i-1}^k}{\Delta x^2}, \quad (5.27)$$

o que produz um estágio explícito, no qual, ao ser discretizado no ponto de malha  $(i, k)$ , necessita-se dos valores conhecidos nos nós  $(i, k + \frac{1}{6})$ ,  $(i, k - \frac{1}{6})$ ,  $(i - 1, k)$  e  $(i + 1, k)$ , conforme mostra a figura 5.5.

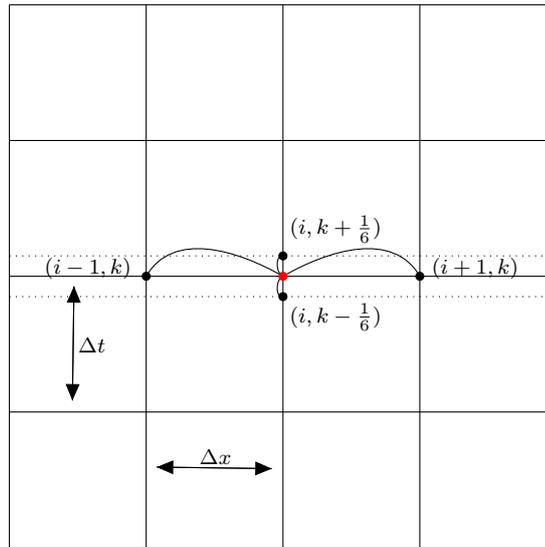


Figura 5.5: Estêncil da discretização do primeiro estágio do método multiestágio  $R_{2,2}$

No segundo estágio, utilizam-se diferenças centradas para aproximar a derivada primeira no tempo e as derivadas segundas no tempo e no espaço,

$$\frac{S_i^{k+\frac{1}{2}} - S_i^k}{\Delta t/2} + \tau \frac{S_i^{k+\frac{1}{2}} - 2S_i^k + S_i^{k-\frac{1}{2}}}{(\Delta t/2)^2} = D \frac{S_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2S_i^{k+\frac{1}{6}} + S_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2}, \quad (5.28)$$

produzindo um estágio explícito, no qual ao ser discretizado no ponto de malha  $(i, k + \frac{1}{6})$  necessita-se dos valores conhecidos nos nós  $(i, k)$ ,  $(i, k + \frac{1}{2})$ ,  $(i, k - \frac{1}{2})$ ,  $(i-1, k + \frac{1}{6})$  e  $(i+1, k + \frac{1}{6})$ , conforme mostra a figura 5.6.

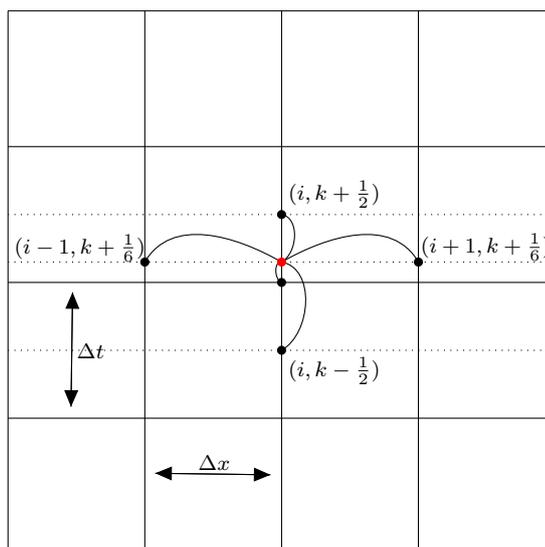


Figura 5.6: Estêncil da discretização do segundo estágio do método multiestágio  $R_{2,2}$

No terceiro estágio, utiliza-se diferença centrada para aproximar a derivada primeira no tempo,

$$\frac{S_i^{k+1} - S_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} + \tau \frac{S_i^{k+1} - 2S_i^{k+\frac{1}{2}} + S_i^k}{(\Delta t/2)^2} = D \frac{S_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2S_i^{k+\frac{5}{6}} + S_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2}, \quad (5.29)$$

o que produz um estágio implícito, no qual ao ser discretizado no ponto de malha  $(i, k + \frac{5}{6})$  necessita-se dos valores conhecidos nos nós  $(i, k)$ ,  $(i, k+1)$ ,  $(i, k + \frac{1}{2})$ ,  $(i-1, k + \frac{5}{6})$  e  $(i+1, k + \frac{5}{6})$ , conforme mostra a figura 5.7.

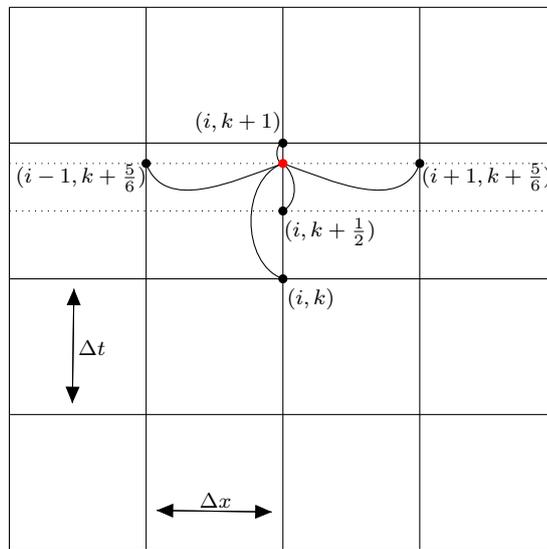


Figura 5.7: Estêncil da discretização do terceiro estágio do método multiestágio  $R_{2,2}$

No quarto estágio, a derivada primeira no tempo é aproximada por diferença regressiva, produzindo um estágio implícito,

$$\frac{S_i^{k+1} - S_i^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} + \tau \frac{S_i^{k+1} - 2S_i^{k+\frac{5}{6}} + S_i^{k+\frac{4}{6}}}{\Delta t^2} = D \frac{S_{i+1}^{k+1} - 2S_i^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}, \quad (5.30)$$

o que produz um estágio implícito, no qual ao ser discretizado no ponto de malha  $(i, k + 1)$  necessita-se dos valores conhecidos nos nós  $(i + 1, k + 1)$ ,  $(i - 1, k + 1)$ ,  $(i, k + \frac{5}{6})$  e  $(i, k + \frac{4}{6})$ , conforme mostra a figura 5.8.

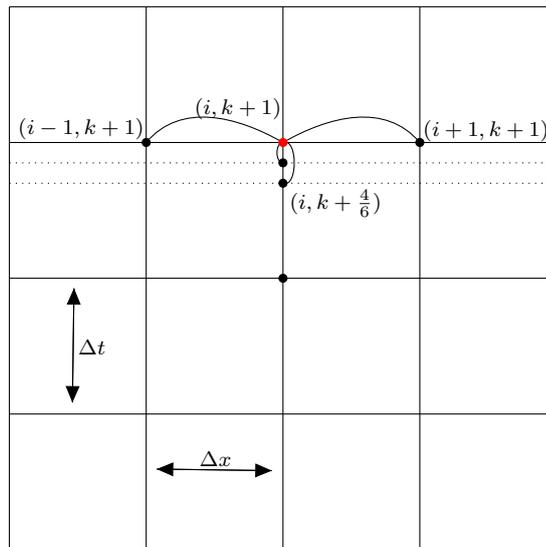


Figura 5.8: Estêncil da discretização do quarto estágio do método multiestágio  $R_{2,2}$

Resumindo, nos quatro métodos,  $R_{1,1}$ ,  $R_{2,2}$ , explícito e Crank-Nicolson, as derivadas de segunda ordem são aproximadas por diferenças finitas centradas. A derivada primeira no tempo é discretizada de diferentes formas dependendo do estágio temporal. Nos primeiro e último estágios são utilizados os métodos de diferenças finitas progressivas e regressivas, respectivamente. Nos estágios restantes faz-se o uso do método das diferenças finitas centradas.

Dessa forma, têm-se os métodos multiestágios com os aproximantes de Padé  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  com estágios explícitos e também estágios implícitos, o método explícito é totalmente explícito e o método de Crank-Nicolson implícito. A figura 5.9 mostra um fluxograma da discretização da equação de Maxwell-Cattaneo para a derivada de primeira ordem. Os detalhes da discretização encontram-se nos apêndices B e C do trabalho. A implementação será construída conforme o algoritmo 2.

---

**Algoritmo 2: SOLUÇÃO NUMÉRICA PELO MÉTODO PADÉ  $R_{2,2}$** 


---

**Entrada:**  $inter, nt, nx$

- 1 **início**
- 2    Condição inicial
- 3    **para**  $i = 1$  **até**  $(nx)$  **faça**
- 4        calcule a condição inicial no primeiro estágio do tempo
- 5        **se**  $\tau < \tau_c$  **ou**  $\tau > \tau_c$  **ou**  $\tau = \tau_c$  **então**
- 6            calcule a condição inicial do segundo estágio do tempo
- 7        **fim**
- 8    **fim**
- 9    Condição de contorno
- 10   **para**  $k = 1$  **até**  $(nt)$  **faça**
- 11        considere zero nas fronteiras
- 12    **fim**
- 13    Cálculo numérico
- 14    **para**  $itr = 1$  **até**  $(inter)$  **faça**
- 15        **para**  $k = 1$  **até**  $(nt - 1)$  **faça**
- 16            **para**  $i = 2$  **até**  $(nx - 1)$  **faça**
- 17                encontre as soluções nos estágios de tempo  $(k + \frac{1}{6})$  e  $(k + \frac{1}{2})$  utilizando as discretizações dadas em (5.27) e (5.28) respectivamente
- 18            **fim**
- 19        **fim**
- 20        **para**  $k = 1$  **até**  $(nt - 1)$  **faça**
- 21            **para**  $i = 2$  **até**  $(nx - 1)$  **faça**
- 22                encontre a solução no estágio de tempo  $(k + \frac{5}{6})$  e  $(k + 1)$ , utilizando as discretizações dadas em (5.30) e (5.29) respectivamente
- 23            **fim**
- 24        **fim**
- 25    **fim**
- 26 **fim**
- 27 **retorna** *plote a solução do método  $R_{2,2}$  para a equação de Maxwell-Cattaneo*

---

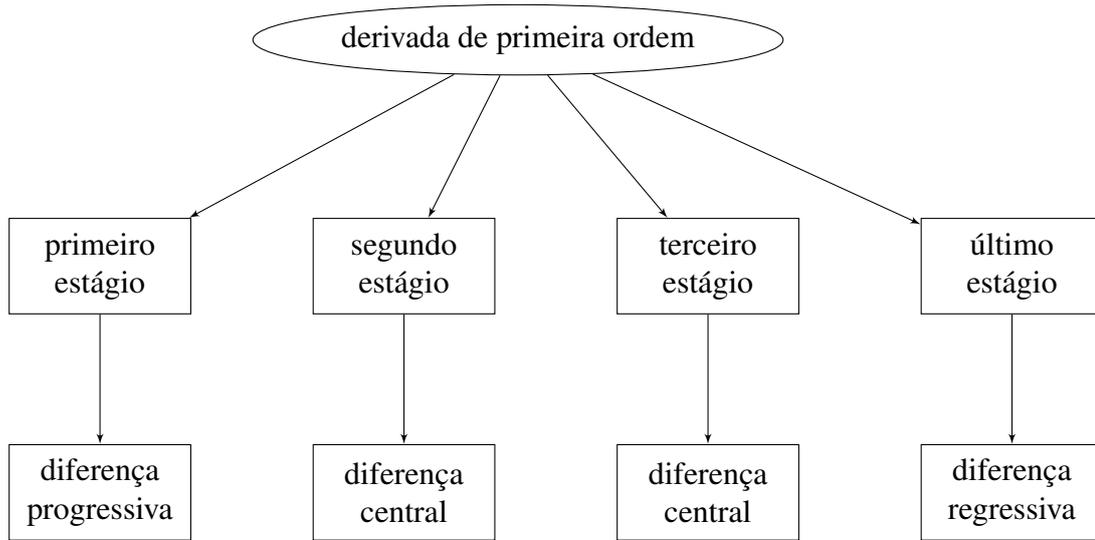


Figura 5.9: Fluxograma da discretização da equação de Maxwell-Cattaneo para a primeira derivada

### 5.3 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO PREDADOR-PRESA EXPONENCIAL

Para o modelo predador-presa exponencial dado em (3.18), obtém-se a discretização considerando apenas o método multiestágio de segunda ordem  $R_{1,1}$ . Assim, isolando a derivada segunda no tempo em (3.18), tem-se

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = \frac{1}{\tau} \left( -[1 - \tau k_1] \frac{\partial S}{\partial t} + D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + k_1 S \right) \quad (5.31)$$

e substituindo (5.31) nos dois estágios de  $R_{1,1}$  para a segunda derivada temporal, dados em (4.37),

$$\begin{cases} S_i^{k+\frac{1}{2}} = 2S_i^k + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{1}{\tau} \left( -[1 - \tau k_1] \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^k + D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_i^k + k_1 S^k \right) - S^{k-\frac{1}{2}} \\ S_i^{k+1} = 2S_i^{k+\frac{1}{2}} - S_i^k + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{1}{\tau} \left( -[1 - \tau k_1] \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} + D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} + k_1 S^{k+\frac{1}{2}} \right), \end{cases} \quad (5.32)$$

onde  $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_i^k$  e  $\frac{\partial S}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}}$  são dadas em (2.12), considerando os níveis de tempo  $k$  e  $(k+1)$ .

Observe que,

$$S_i^k = \frac{S_i^{k+\frac{1}{2}} + S_i^{k-\frac{1}{2}}}{2}, \quad (5.33)$$

desta forma, o termo  $S_i^{k-\frac{1}{2}}$  em (5.32) pode ser substituído por

$$S_i^{k-\frac{1}{2}} = 2S_i^k - S_i^{k+\frac{1}{2}}, \quad (5.34)$$

resultando, depois de uma reorganização dos termos, nos dois estágios da discretização,

$$\begin{cases} S_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{A_1} \left( B_1 S_i^k + \frac{D\delta}{4\tau} (S_{i+1}^k + S_{i-1}^k) \right) & \text{(primeiro estágio)} \quad \text{e} \\ S_i^{k+1} = \frac{1}{A_2} \left( B_2 S_i^{k+\frac{1}{2}} - S_i^k + \frac{D\delta}{4\tau} (S_{i+1}^{k+1} + S_{i-1}^{k+1}) \right) & \text{(segundo estágio)}, \end{cases} \quad (5.35)$$

onde

$$\delta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (5.36)$$

$$A_1 = \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{1}{\tau} - k_1 \right) \quad (5.37)$$

$$B_1 = \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\tau} - \frac{1}{2} \Delta t k_1 - \frac{1}{2} \frac{D\delta}{\tau} + \frac{1}{4} \frac{\Delta t^2 k_1}{\tau} \quad (5.38)$$

$$A_2 = 1 + \frac{1}{8} \frac{\Delta t^2}{\tau} - \frac{1}{8} \Delta t^2 k_1 + \frac{1}{2} \frac{D\delta}{\tau} - \frac{1}{4} \frac{\Delta t^2 k_1}{\tau} \quad (5.39)$$

$$B_2 = 2 + \frac{1}{8} \frac{\Delta t^2}{\tau} - \frac{1}{8} \Delta t^2 k_1. \quad (5.40)$$

Para obter a discretização do modelo predador-presa exponencial para o método  $R_{2,2}$ , utilizam-se os quatro estágios descritos em (4.42) e reorganizam-se as equações resultantes.

#### 5.4 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO PREDADOR-PRESA LOTKA-VOLTERRA LOGÍSTICO

Considera-se em (3.21)  $v = \tau_j = 0$ ,  $F_1(S_1, S_2) = a_1 S_1 - b_1 S_1^2 - c_1 S_1 S_2$  e  $F_2(S_1, S_2) = c_2 S_1 S_2 - a_2 S_2$  obtendo assim, o modelo logístico,

$$\begin{cases} \frac{\partial S_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} + a_1 S_1 - b_1 S_1^2 - c_1 S_1 S_2 \\ \frac{\partial S_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} + c_2 S_1 S_2 - a_2 S_2, \end{cases} \quad (5.41)$$

e faz-se a discretização com o método multiestágio de segunda e quarta ordens.

### 5.4.1 Método multiestágio com o aproximante $R_{1,1}$

Dada a equação referente à presa,  $S_1$ , do modelo logístico,

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} + a_1 S_1 - b_1 S_1^2 - c_1 S_1 S_2 \quad (5.42)$$

e, considerando o ponto de malha  $(i, k)$ , tem-se que

$$\left. \frac{\partial S_1}{\partial t} \right|_i^k = D_1 \left. \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \right|_i^k + a_1 (S_1)_i^k - b_1 (S_1)_i^k - c_1 (S_1)_i^k (S_2)_i^k. \quad (5.43)$$

De (5.8) e (5.10) segue que

$$\frac{(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_1)_i^k}{\Delta t/2} = D_1 \frac{(S_1)_{i-1}^k - 2(S_1)_i^k + (S_1)_{i+1}^k}{\Delta x^2} + a_1 (S_1)_i^k - b_1 (S_1)_i^k - c_1 (S_1)_i^k (S_2)_i^k, \quad (5.44)$$

reordenando os termos, obtém-se o primeiro estágio da discretização,

$$(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} = \Pi_i (S_1)_i^k + \frac{D_1 \delta}{2} ((S_1)_{i-1}^k + (S_1)_{i+1}^k) - \frac{b_1 \Delta t}{2} (S_1)_i^k, \quad (5.45)$$

onde

$$\Pi_i = \left( 1 - D_1 \delta - \frac{c_1 \Delta t}{2} (S_2)_i^k + \frac{a_1 \Delta t}{2} \right) \quad \text{e} \quad (5.46)$$

$$\delta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \quad (5.47)$$

Fazendo a discretização de (5.42) no ponto de malha  $(i, k + 1)$ ,

$$\left. \frac{\partial S_1}{\partial t} \right|_i^{k+1} = D_1 \left. \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \right|_i^{k+1} + a_1 (S_1)_i^{k+1} - b_1 (S_1)_i^{k+1} - c_1 (S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1} \quad (5.48)$$

e, de (5.17) e (5.19), tem-se que

$$\begin{aligned} \frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} - 2(S_1)_i^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \\ &\quad + a_1 (S_1)_i^{k+1} - b_1 (S_1)_i^{k+1} - c_1 (S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

A equação de diferenças (5.49) produz um sistema não linear para ser resol-

vido em cada passo do tempo. Como os métodos empregados são implícitos, e também para evitar a resolução de um sistema não linear, lineariza-se o termo  $(S_1^2)_i^{k+1}$ , aplicando a expansão da série de Taylor [41],

$$\begin{aligned}
(S_1^2)_i^{k+1} &= (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial S_1^2}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} \\
&= (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} + (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \Delta t \frac{\partial (S_1)}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} \\
&= (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} + (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \Delta t \left( \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \right) \\
&= (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} + 2(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \left( (S_1)_{i+1}^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \right) \\
&= 2(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} (S_1)_{i+1}^{k+1} - (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Substituindo (5.50) em (5.49) segue que,

$$\begin{aligned}
\frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} - 2(S_1)_i^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + a_1 (S_1)_i^{k+1} \\
&\quad - b_1 \left( 2(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} (S_1)_{i+1}^{k+1} - (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} \right) - c_1 (S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1}
\end{aligned} \tag{5.51}$$

e, reordenando e simplificando (5.51), tem-se,

$$(S_1)_i^{k+1} = \frac{1}{\Lambda_i} \left( \frac{2}{\Delta t} (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + b_1 (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} + \epsilon_1 \left( (S_1)_{i+1}^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1} \right) \right), \tag{5.52}$$

onde

$$\Lambda_i = \left( \frac{2}{\Delta t} + \frac{2D_1}{\Delta x^2} - a_1 + 2b_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + c_1 (S_2)_i^{k+1} \right) \tag{5.53}$$

$$\epsilon_1 = \frac{D_1}{\Delta x^2}. \tag{5.54}$$

Considere-se agora a equação,

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} + c_2 S_1 S_2 - a_2 S_2 \tag{5.55}$$

e o ponto de malha  $(i, k)$ ,

$$\left. \frac{\partial S_2}{\partial t} \right|_i^k = D_2 \left. \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} \right|_i^k + c_2(S_1)_i^k (S_2)_i^k - a_2(S_2)_i^k, \quad (5.56)$$

considerando as aproximações para as derivadas segue que,

$$\frac{(S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_2)_i^k}{\Delta t/2} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^k - 2(S_2)_i^k + (S_2)_{i-1}^k}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^k (S_2)_i^k - a_2(S_2)_i^k, \quad (5.57)$$

reordenando os termos, tem-se

$$\frac{2}{\Delta t} (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} = \left( \frac{2}{\Delta t} - \frac{2D_2}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^k - a_2 \right) (S_2)_i^k + D_2 \left( \frac{(S_2)_{i+1}^k + (S_2)_{i-1}^k}{\Delta x^2} \right), \quad (5.58)$$

isolando o termo  $(S_2)_i^{k+\frac{1}{2}}$  em (5.58), tem-se o primeiro estágio da equação (5.55), dado por

$$(S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} = \Pi_{i+1} (S_2)_i^k + \epsilon_2 ((S_2)_{i+1}^k + (S_2)_{i-1}^k), \quad (5.59)$$

onde

$$\Pi_{i+1} = \left( 1 - D_2 \delta + \frac{c_2 \Delta t}{2} (S_1)_i^k - \frac{a_2 \Delta t}{2} \right) \quad \text{e} \quad (5.60)$$

$$\epsilon_2 = \frac{D_2 \delta}{2}. \quad (5.61)$$

Fazendo a discretização de (5.55) no ponto de malha  $(i, k + 1)$ ,

$$\left. \frac{\partial S_2}{\partial t} \right|_i^{k+1} = D_2 \left. \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} \right|_i^{k+1} + c_2(S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1} - a_2(S_2)_i^{k+1}, \quad (5.62)$$

de (5.17) e (5.19), tem-se que

$$\frac{(S_2)_i^{k+1} - (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+1} - 2(S_2)_i^{k+1} + (S_2)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1} - a_2(S_2)_i^{k+1} \quad (5.63)$$

e reordenando os termos de (5.63), segue que

$$\frac{2}{\Delta t} (S_2)_i^{k+1} + \frac{2D_2}{\Delta x^2} (S_2)_i^{k+1} - c_2(S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1} + a_2(S_2)_i^{k+1} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+1} + (S_2)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta t} (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}}. \quad (5.64)$$

Simplificando (5.64) e isolando o termo  $(S_2)_i^{k+1}$ , tem-se o segundo estágio da discretização da equação (5.55),

$$(S_2)_i^{k+1} = \frac{1}{\Lambda_{i+1}} \left[ \epsilon_2 \left( (S_2)_{i+1}^{k+1} + (S_2)_{i-1}^{k+1} \right) + (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} \right], \quad (5.65)$$

onde

$$\Lambda_{i+1} = \left( 1 + D_2 \delta - \frac{c_2 \Delta t}{2} (S_1)_i^{k+1} + \frac{a_2 \Delta t}{2} \right) \quad \text{e} \quad (5.66)$$

$$\epsilon_2 = \frac{D_2 \delta}{2}. \quad (5.67)$$

Para implementar as equações de diferenças (5.65) e (5.59) consideram-se como condições iniciais os valores no nível de tempo  $k$  e como incógnitas o nível de tempo  $(k+1)$ . Portanto, foram gerados dois sistemas lineares, um explícito e outro implícito, resolvido pelo método iterativo de Gauss-Seidel.

#### 5.4.2 Método multiestágio com o aproximante $R_{2,2}$

Seguindo os passos da abordagem para o método Padé  $R_{2,2}$  aplicado à equação (5.42) no ponto de malha  $(i, k)$ , tem-se

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} \Big|_i^k = D_1 \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \Big|_i^k + a_1 (S_1)_i^k - b_1 (S_1^2)_i^k - c_1 (S_1)_i^k (S_2)_i^k \quad (5.68)$$

e, de (4.38), segue que

$$\frac{(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} - (S_1)_i^k}{\Delta t/6} = D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^k - 2(S_1)_i^k + (S_1)_{i-1}^k}{\Delta x^2} + a_1 (S_1)_i^k - b_1 (S_1^2)_i^k - c_1 (S_1)_i^k (S_2)_i^k. \quad (5.69)$$

Colocando em evidência o termo  $(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}}$  obtém-se

$$\begin{aligned} (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} &= (S_1)_i^k + \frac{D_1}{6} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left( (S_1)_{i+1}^k + (S_1)_{i-1}^k \right) - \frac{D_1}{3} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (S_1)_i^k \\ &\quad + \frac{a_1 \Delta t}{6} (S_1)_i^k - \frac{b_1 \Delta t}{6} (S_1^2)_i^k - \frac{c_1 \Delta t}{6} (S_1)_i^k (S_2)_i^k \end{aligned} \quad (5.70)$$

e reorganizando os termos, segue que

$$(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} = \Gamma_i (S_1)_i^k + \frac{D_1 \delta}{6} \delta \left( (S_1)_{i+1}^k + (S_1)_{i-1}^k \right) - \frac{b_1 \Delta t}{6} (S_1^2)_i^k, \quad (5.71)$$

onde

$$\Gamma_i = \left( 1 - \frac{D_1 \delta}{3} + \frac{a_1 \Delta t}{6} - \frac{c_1 \Delta t}{6} (S_2)_i^k \right). \quad (5.72)$$

Considerando o ponto  $(i, k + \frac{1}{6})$ , tem-se

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{6}} = D_1 \frac{\partial S_1}{\partial x^2} \Big|_i^{k+\frac{1}{6}} + a_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} - b_1 (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{6}} - c_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} \quad (5.73)$$

e substituindo as derivadas, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_1)_i^k}{\Delta t/2} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2} + a_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} \\ &\quad - b_1 (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{6}} - c_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} \end{aligned} \quad (5.74)$$

ou, ainda,

$$\begin{aligned} \frac{2}{\Delta t} (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} &= \frac{2}{\Delta t} (S_1)_i^k + D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2} - \frac{2D_1}{\Delta x^2} (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} \\ &\quad + a_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} - b_1 (S_1^2)_i^{k+\frac{1}{6}} - c_1 (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}}, \end{aligned} \quad (5.75)$$

o que produz o segundo estágio da discretização,

$$(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} = (S_1)_i^k + \Gamma_{i+\frac{1}{6}} (S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} + D_1 \delta \left( \frac{(S_1)_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{2} \right), \quad (5.76)$$

onde

$$\Gamma_{i+\frac{1}{6}} = \left( \frac{a_1 \Delta t}{2} - D_1 \delta - \frac{b_1 \Delta t}{2} (S_1)_i^k - \frac{c_1 \Delta t}{2} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} \right). \quad (5.77)$$

Considerando o ponto  $(i, k + \frac{5}{6})$ , tem-se

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{5}{6}} = D_1 \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \Big|_i^{k+\frac{5}{6}} + a_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} - b_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} - c_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} \quad (5.78)$$

e fazendo a substituição das derivadas de (5.78),

$$\begin{aligned} \frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2} + a_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \\ &\quad - b_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} - c_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}}, \end{aligned} \quad (5.79)$$

linearizando o termo  $(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}$ , tem-se

$$\begin{aligned} (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} &= (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + \Delta t \frac{\partial S_1}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} \\ &= (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + 2(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \Delta t \frac{\partial S_1}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{1}{2}} \\ &= (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + 2(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \Delta t \left( \frac{(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_1)_i^k}{\Delta t/2} \right) \\ &= (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + 4(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} \left( (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_1)_i^k \right) \\ &= (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + 4(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} U_i^{k+\frac{5}{6}}, \end{aligned} \quad (5.80)$$

onde

$$U_i^{k+\frac{5}{6}} = (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_1)_i^k. \quad (5.81)$$

Substituindo (5.80) na equação (5.79), vem

$$\begin{aligned} \frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2} + a_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \\ &\quad - b_1[(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + 4(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} U_i^{k+\frac{5}{6}}] - c_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}}, \end{aligned} \quad (5.82)$$

ou, ainda,

$$\begin{aligned} \frac{2}{\Delta t}(S_1)_i^{k+1} &= \frac{2}{\Delta t}(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} - \frac{2D_1}{\Delta x^2}(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} + D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2} + a_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \\ &\quad - b_1(S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} - 4b_1(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}U_i^{k+\frac{5}{6}} - c_1(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}}. \end{aligned} \quad (5.83)$$

Reordenando os termos, obtém-se o terceiro estágio da discretização,

$$\begin{aligned} (S_1)_i^{k+1} &= (S_1)_i^{k+\frac{1}{2}} + \Gamma_{i+\frac{5}{6}}(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} + \frac{D_1\delta}{2} \left( (S_1)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} + (S_1)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}} \right) \\ &\quad - \frac{e\Delta t}{2}(S_1^2)_i^{k+\frac{1}{2}} - 2b_1\Delta t(S_1)_i^{k+\frac{1}{2}}U_i^{k+\frac{5}{6}}, \end{aligned} \quad (5.84)$$

onde

$$\Gamma_{i+\frac{5}{6}} = \left( \frac{a_1\Delta t}{2} - D_1\delta - \frac{c_1\Delta t}{2}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} \right). \quad (5.85)$$

Considerando o ponto  $(i, k + 1)$ , tem-se

$$\left. \frac{\partial S_1}{\partial t} \right|_i^{k+1} = D_1 \left. \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \right|_i^{k+1} + a_1(S_1)_i^{k+1} - b_1(S_1^2)_i^{k+1} - c_1(S_1)_i^{k+1}(S_2)_i^{k+1} \quad (5.86)$$

e substituindo as aproximações das derivadas,

$$\begin{aligned} \frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} - 2(S_1)_i^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + a_1(S_1)_i^{k+1} \\ &\quad - b_1(S_1^2)_i^{k+1} - c_1(S_1)_i^{k+1}(S_2)_i^{k+1}. \end{aligned} \quad (5.87)$$

Linearizando o termo  $(S_1^2)_i^{k+1}$ , tem-se

$$\begin{aligned}
(S_1^2)_i^{k+1} &\simeq (S_1^2)_i^{k+\frac{5}{6}} + \frac{\Delta t}{6} \left. \frac{\partial S_1^2}{\partial t} \right|_i^{k+\frac{5}{6}} \\
&\simeq (S_1^2)_i^{k+\frac{5}{6}} + \frac{\Delta t}{3} (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \left. \frac{\partial S_1}{\partial t} \right|_i^{k+\frac{5}{6}} \\
&\simeq (S_1^2)_i^{k+\frac{5}{6}} + \frac{\Delta t}{3} (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \left( \frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} \right) \\
&\simeq (S_1^2)_i^{k+\frac{5}{6}} + 2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} U_i^{k+1},
\end{aligned} \tag{5.88}$$

onde

$$U_i^{k+1} = (S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}. \tag{5.89}$$

Substituindo (5.88) na equação (5.87), obtém-se

$$\begin{aligned}
\frac{(S_1)_i^{k+1} - (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} &= D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} - 2(S_1)_i^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + a_1 (S_1)_i^{k+1} \\
&\quad - b_1 [(S_1^2)_i^{k+\frac{5}{6}} + 2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} U_i^{k+1}] - c_1 (S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1},
\end{aligned} \tag{5.90}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
&D_1 \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} - b_1 (S_1^2)_i^{k+\frac{5}{6}} - 2b_1 (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} U_i^{k+1} + \frac{6}{\Delta t} (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \\
&= \frac{6}{\Delta t} (S_1)_i^{k+1} + \frac{2D_1}{\Delta x^2} (S_1)_i^{k+1} - a_1 (S_1)_i^{k+1} + c_1 (S_1)_i^{k+1} (S_2)_i^{k+1}.
\end{aligned} \tag{5.91}$$

Reordenando os termos,

$$(S_1)_i^{k+1} = \frac{1}{V} \left[ \Gamma_{i+1} (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} + D_1 \left( \frac{(S_1)_{i+1}^{k+1} + (S_1)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right) \right], \tag{5.92}$$

onde

$$\Gamma_{i+1} = \left( \frac{6}{\Delta t} - 2b_1 U_i^{k+1} - b_1 (S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} \right) \quad \text{e} \tag{5.93}$$

$$V = \left( \frac{6}{\Delta t} + \frac{2D_1}{\Delta x^2} - a_1 + c_1 (S_2)_i^{k+1} \right). \tag{5.94}$$

Logo, tem-se que as equações (5.71) e (5.76) produzem os dois estágios explícitos e as equações (5.84) e (5.92) produzem os dois estágios implícitos do método  $R_{2,2}$ .

Considere-se agora, a equação (5.55). Fazendo a discretização no ponto de malha  $(i, k)$ , tem-se

$$\left. \frac{\partial S_2}{\partial t} \right|_i^k = D_2 \left. \frac{\partial^2 S_2}{\partial t^2} \right|_i^k + c_2(S_1)_i^k (S_2)_i^k - a_2(S_2)_i^k \quad (5.95)$$

e, substituindo as aproximações das derivadas,

$$\frac{(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} - (S_2)_i^k}{\Delta t/6} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^k - 2(S_2)_i^k + (S_2)_{i-1}^k}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^k (S_2)_i^k - a_2(S_2)_i^k \quad (5.96)$$

ou, ainda,

$$\frac{6}{\Delta t} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} = \frac{6}{\Delta t} (S_2)_i^k - \frac{2D_2}{\Delta x^2} (S_2)_i^k + c_2(S_1)_i^k (S_2)_i^k + D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^k + (S_2)_{i-1}^k}{\Delta x^2} - a_2(S_2)_i^k. \quad (5.97)$$

Reordenando os termos de (5.97), obtém-se o primeiro estágio da discretização,

$$(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} = P(S_2)_i^k + D_2 \delta \frac{(S_2)_{i+1}^k + (S_2)_{i-1}^k}{6}, \quad (5.98)$$

onde

$$P = \left( 1 - \frac{D_2}{3} \delta + \frac{c_2 \Delta t}{6} (S_1)_i^k - \frac{a_2 \Delta t}{6} \right). \quad (5.99)$$

Considerando o ponto de malha  $(i, k + \frac{1}{6})$ , tem-se

$$\left. \frac{\partial S_2}{\partial t} \right|_i^{k+\frac{1}{6}} = D_2 \left. \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} \right|_i^{k+\frac{1}{6}} + c_2(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} - a_2(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} \quad (5.100)$$

e, utilizando diferenças finitas centrais na derivada espacial,

$$\frac{(S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} - (S_2)_i^k}{\Delta t/2} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} + (S_2)_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} - a_2(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}}, \quad (5.101)$$

ou ainda,

$$\frac{2}{\Delta t} (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{2}{\Delta t} (S_2)_i^k - \frac{2D_2}{\Delta x^2} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} + c_2(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} (S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} - a_2(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} + D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} + (S_2)_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2} \quad (5.102)$$

e assim obtém-se o segundo estágio da discretização,

$$(S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} = (S_2)_i^k + Q(S_2)_i^{k+\frac{1}{6}} + D_2\delta \left( \frac{(S_2)_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} + (S_2)_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{2} \right), \quad (5.103)$$

onde

$$Q = \left( \frac{c_2\Delta t}{2}(S_1)_i^{k+\frac{1}{6}} - D_2\delta - \frac{a_2\Delta t}{2} \right). \quad (5.104)$$

Considerando o ponto de malha  $(i, k + \frac{5}{6})$ ,

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} \Big|_i^{k+\frac{5}{6}} = D_2 \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} \Big|_i^{k+\frac{5}{6}} + c_2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} - a_2(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} \quad (5.105)$$

e substituindo as aproximações das derivadas,

$$\frac{(S_2)_i^{k+1} - (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} + (S_2)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} - a_2(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}}, \quad (5.106)$$

ou ainda,

$$\frac{2}{\Delta t}(S_2)_i^{k+1} = \frac{2}{\Delta t}(S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} - \frac{2D_2}{\Delta x^2}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} + c_2(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} - a_2(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} + D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} + (S_2)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2} \quad (5.107)$$

e reordenando os termos, tem-se,

$$(S_2)_i^{k+1} = (S_2)_i^{k+\frac{1}{2}} + R(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} + D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} + (S_2)_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2}, \quad (5.108)$$

onde

$$R = \left( \frac{c_2\Delta t}{2}(S_1)_i^{k+\frac{5}{6}} - D_2\delta - \frac{a_2\Delta t}{2} \right). \quad (5.109)$$

Considerando o ponto de malha  $(i, k + 1)$ ,

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} \Big|_i^{k+1} = D_2 \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} \Big|_i^{k+1} + c_2(S_1)_i^{k+1}(S_2)_i^{k+1} - a_2(S_2)_i^{k+1}, \quad (5.110)$$

aplicando diferenças centrais na derivada espacial, vem

$$\frac{(S_2)_i^{k+1} - (S_2)_i^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} = D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+1} - 2(S_2)_i^{k+1} + (S_2)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + c_2(S_1)_i^{k+1}(S_2)_i^{k+1} - a_2(S_2)_i^{k+1} \quad (5.111)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \frac{6}{\Delta t}(S_2)_i^{k+1} - \frac{6}{\Delta t}(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} &= -\frac{2D_2}{\Delta x^2}(S_2)_i^{k+1} + c_2(S_1)_i^{k+1}(S_2)_i^{k+1} \\ &\quad - a_2(S_2)_i^{k+1} + D_2 \frac{(S_2)_{i+1}^{k+1} + (S_2)_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (5.112)$$

Reordenando os termos,

$$(S_2)_i^{k+\frac{5}{6}} = T(S_2)_i^{k+1} - D_2\delta \frac{(S_2)_{i+1}^{k+1} + (S_2)_{i-1}^{k+1}}{6}, \quad (5.113)$$

onde

$$T = \left( 1 + \frac{D_2}{3}\delta - \frac{c_2\Delta t}{6}(S_1)_i^{k+1} + \frac{a_2\Delta t}{6} \right). \quad (5.114)$$

Portanto, as equações (5.98) e (5.103) produzem os dois estágios explícitos do método e as equações (5.108) e (5.111) produzem os dois estágios implícitos do método  $R_{2,2}$ .

## 6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são feitos testes com as equações de difusão e Maxwell-Cattaneo, com o intuito de verificar a eficácia do método multiestágio através dos aproximantes de Padé. Também encontra-se uma solução numérica para o modelo predador-presa Lotka-Volterra logístico.

### 6.1 EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

Considere-se a equação de difusão 1D, dada por

$$\frac{\partial S}{\partial t} - D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0, \quad (x, t) \in (0, 1) \times (0, t_f), \quad (6.1)$$

com condições iniciais e de contorno,

$$\begin{aligned} S(x, 0) &= 100 \operatorname{sen}(\pi x) & x \in (0, 1) \\ S(0, t) &= S(1, t) = 0 & t > 0 \end{aligned} \quad (6.2)$$

e solução analítica  $S_A(x, t)$  [10],

$$S_A(x, t) = 100 e^{-\pi^2 t} \operatorname{sen}(\pi x). \quad (6.3)$$

Apresentam-se nas subseções 6.1.1 e 6.1.2 os resultados encontrados para a equação (6.1) em sua forma discretizada sob os métodos numéricos, explícito, multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  e Crank-Nicolson, a fim de validar as técnicas desenvolvidas no capítulo 4.

#### 6.1.1 Teste 1 - Equação de Difusão

Para o primeiro teste aplicado à equação de difusão fixam-se os seguintes parâmetros:

- A** - número de partições do tempo,  $M_t = 200$ ;
- B** - número de iterações,  $I_t = 600$ ;
- C** - espaçamento no tempo,  $\Delta t = 0.0025$ ;
- D** - coeficiente de difusão,  $D = 1$ ,

onde pode-se observar que, para o método explícito no critério de estabilidade de von Neumann [10, 42],  $0 \leq \rho = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$ . Desta forma para tempo final  $t_f = 0.5$  e  $M_x = 14$ , tem-se o valor máximo de partições antes do método explícito sair da região de estabilidade  $\rho =$

Tabela 6.1: Solução analítica e soluções dos métodos Crank-Nicolson, Padé  $R_{1,1}$ , Padé  $R_{2,2}$  e explícito com  $M_t = 200$ ,  $M_x = 14$  e  $t_f = 0.5$

$x$	Solução Analítica	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$	Crank-Nicolson
0	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.2	0.44841	0.43052	0.44405	0.44860	0.45766
0.4	0.70116	0.67319	0.69435	0.70145	0.71563
0.5	0.71919	0.69050	0.71220	0.71949	0.73403
0.6	0.70116	0.67319	0.69435	0.70145	0.71563
0.8	0.44841	0.43052	0.44405	0.44860	0.45766
1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Fonte: Autor

0.49. Assim, apresentam-se na tabela 6.1 a solução analítica (6.3) e as soluções numéricas dos métodos explícito, Crank-Nicolson,  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  para diferentes valores de  $x$ .

Analisando a tabela 6.1 verifica-se que, para  $M_x = 14$ , as soluções dos métodos multietágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  encontram-se mais próximas da solução analítica. Ainda, pelo fato de  $\rho$  estar próximo de 0.5, valor que delimita a região de estabilidade da equação de difusão, a solução do método explícito apresenta erros maiores do que as soluções dos métodos multietágios, porém menores do que o método de Crank-Nicolson.

As soluções, tabela 6.1, podem ser observadas na figura 6.1, onde verifica-se a similaridade entre todas as soluções.

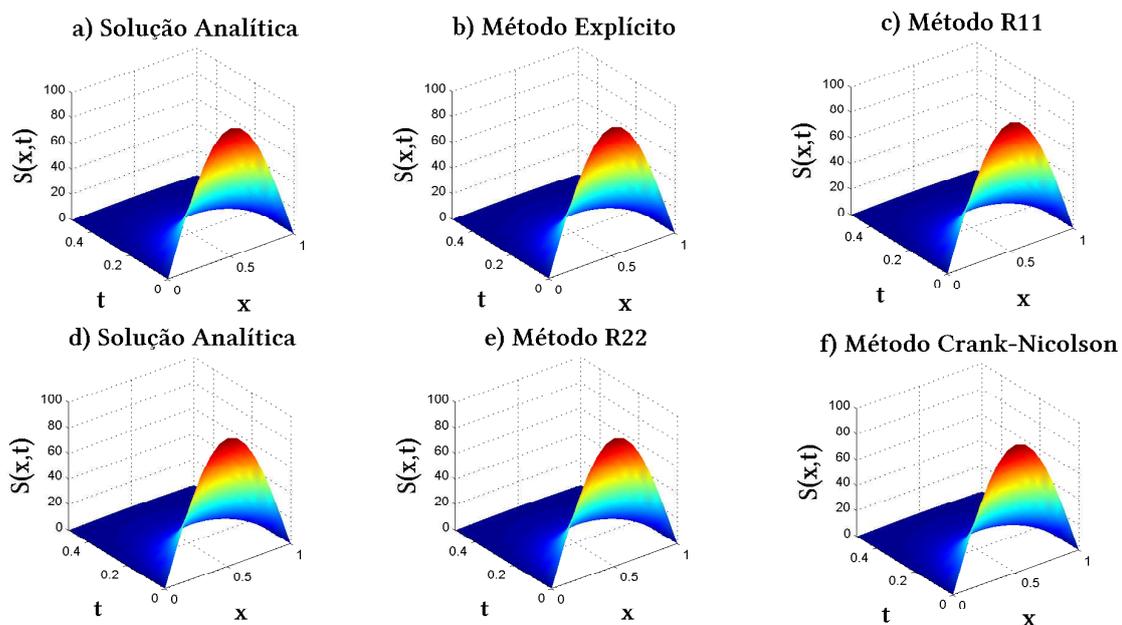


Figura 6.1: Soluções numéricas da equação de difusão pelo método de Crank-Nicolson e pelos aproximantes de Padé  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , com  $M_t = 200$ , comparadas com a solução analítica

Como uma forma de avaliar os resultados obtidos na tabela 6.1 e ilustrados na figura 6.1, apresentam-se os erros absolutos, na tabela 6.2, dos métodos explícito, multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  e Crank-Nicolson, quando comparados com a solução analítica.

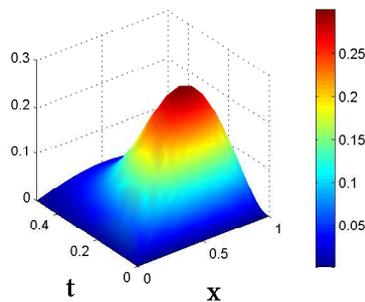
Tabela 6.2: Erro dos métodos Crank-Nicolson, Padé  $R_{1,1}$ , Padé  $R_{2,2}$  e explícito com  $M_t = 200$  e  $M_x = 14$

$x$	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$	Crank-Nicolson
0	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.2	0.01789	0.00436	0.00019	0.00925
0.4	0.02797	0.00681	0.00029	0.01447
0.5	0.02869	0.00699	0.00030	0.01484
0.6	0.02797	0.00681	0.00029	0.01447
0.8	0.01789	0.00436	0.00019	0.00925
1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

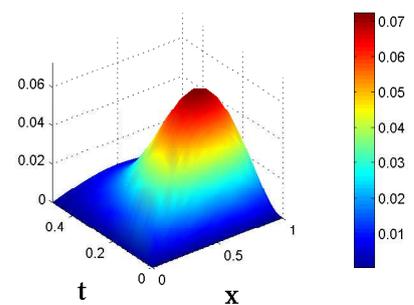
Fonte: Autor

Observa-se na tabela 6.2 que os métodos multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  resultam em ordem de erros menores do que os métodos de Crank-Nicolson e explícito. O método  $R_{2,2}$ , ainda apresenta um erro menor, da ordem de  $10^{-3}$ , conforme mostra a figura 6.2, ficando evidente que o método multiestágio Padé  $R_{2,2}$  apresenta resultados mais satisfatórios.

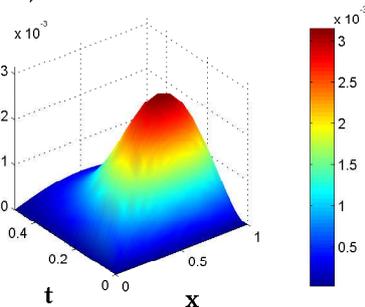
a) Erro absoluto Explícito



b) Erro absoluto R11



c) Erro absoluto R22



d) Erro absoluto Crank-Nicolson

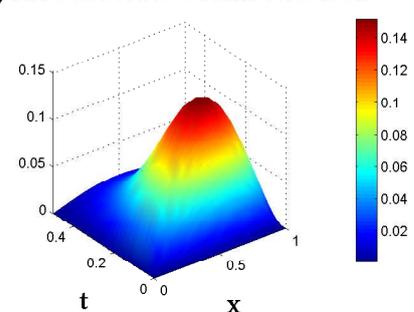


Figura 6.2: Erro absoluto entre a solução analítica e as soluções dos métodos explícito,  $R_{1,1}$ ,  $R_{2,2}$ , Crank-Nicolson, com  $M_t = 200$  e  $M_x = 14$ , comparado com a solução analítica

Cabe ainda ressaltar que as soluções apresentadas encontram-se dentro da região de estabilidade da equação de difusão para o método explícito, que é dada por  $0 \leq \rho \leq 0.5$  pelo critério de von Neumann [10, 22]. Como o objetivo principal deste trabalho é apresentar as discretizações dos métodos  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , será avaliada a região de estabilidade para casos particulares, alterando os valores de  $\rho$ , apresentando os valores dos erros absolutos dos métodos explícito,  $R_{1,1}$ ,  $R_{2,2}$  e Crank-Nicolson para  $M_t = 200$ , e variando os valores de  $M_x$ , o que acarreta em valores diferentes para  $\rho$ , como apresentado na tabela 6.3.

Tabela 6.3: Erro absoluto considerando os métodos Crank-Nicolson, Padé  $R_{1,1}$  e Padé  $R_{2,2}$  com  $M_t = 200$

$M_x$	$\rho$	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$	Crank-Nicolson
14	0.49	0.30220	0.07270	0.00316	0.15258
15	0.56	inf	0.09223	<b>0.01674</b>	0.13194
17	0.72	inf	0.12220	0.04650	0.10240
20	1.00	inf	0.15196	0.07876	0.00496
21	1.10	inf	inf	0.08277	0.06657
23	1.32	inf	inf	0.09424	0.05521
24	1.44	inf	inf	inf	0.05067
30	2.25	inf	inf	inf	0.03176
40	4.00	inf	inf	inf	<b>0.01700</b>

Fonte: Autor

Estuda-se o comportamento dos valores na tabela 6.3, a medida que os valores de  $M_x$  aumentam, ou seja, com o refinamento da malha. Como o método de Crank-Nicolson é incondicionalmente estável, foi possível verificar valores do erro para uma variação maior de  $M_x$ , o mesmo não foi possível para  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , lembrando que ambos possuem estágios explícitos.

Através dos resultados apresentados na tabela 6.3, pode-se afirmar que, para os valores de  $M_t = 200$  e 600 iterações, a avaliação da região de estabilidade para os métodos  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , encontram-se na faixa de  $0 \leq \rho < 1$  e  $0 \leq \rho < 1.5$ , respectivamente. Também pode-se observar que mesmo o método de Crank-Nicolson sendo incondicionalmente estável, pelo critério de von Neumann, o mesmo precisou de  $M_x = 40$ , para atingir um erro equivalente ao método  $R_{2,2}$  para  $M_x = 15$ . Cabe ressaltar que o símbolo inf representa valores nos quais as soluções dos métodos oscilam, ou seja, tais métodos saem de suas regiões de estabilidade.

Contudo, o método  $R_{2,2}$  apresentou resultados mais satisfatórios. Esses parâmetros foram escolhidos por estarem dentro da região de interesse de comparação entre os métodos utilizados. No teste 2 faz-se um refinamento no tempo e avaliam-se as regiões de estabilidade dos métodos explícito,  $R_{1,1}$ ,  $R_{2,2}$  e Crank-Nicolson.

### 6.1.2 Teste 2 - Equação de Difusão

As soluções para o teste 2, aplicado à equação de difusão (6.1), são ilustradas considerando refinamentos em  $M_x$  e fixados os parâmetros:

**A** -  $M_t = 300$ ;

**B** -  $It = 900$ ;

**C** -  $\Delta t = 0.00167$

A tabela 6.4 apresenta as soluções da equação (6.1) para cada um dos métodos, para os parâmetros fixados e, quando utilizado  $M_x = 17$ , que é o maior valor antes do método explícito sair da sua região de estabilidade.

Tabela 6.4: Soluções analítica, dos métodos Crank-Nicolson, Padé  $R_{1,1}$  e Padé  $R_{2,2}$  com  $M_t = 200$  e  $M_x = 17$

$x$	Solução Analítica	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$	Crank-Nicolson
0	0.00000	0.00000	0.00000	0.0000	0.00000
0.18	0.25980	0.25294	0.25818	0.25944	0.26344
0.35	0.57392	0.55876	0.57034	0.57422	0.58197
0.53	0.71612	0.69720	0.71165	0.71649	0.72616
0.76	0.57392	0.55876	0.57034	0.57422	0.58917
0.94	0.25980	0.25294	0.25818	0.25944	0.26344
1.00	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Fonte: Autor

Observando a tabela 6.4 verifica-se em seus valores um comportamento similar em relação ao teste 1, ou seja, para o método de Crank-Nicolson o erro diminui conforme refina-se o domínio espacial e os métodos multiestágios continuam com os seus erros menores.

Avaliado o desempenho dos métodos, faz-se uma nova abordagem de seus resultados onde fixado o valor de  $M_t$ , variam-se os valores de  $M_x$ , e apresentam-se na tabela 6.5 os resultados dos erros absolutos dos métodos Crank-Nicolson,  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  em relação à solução analítica.

A tabela 6.5 apresenta os erros para diferentes valores das partições  $M_x$ . Observe que foi preciso utilizar 18 partições no espaço com o  $R_{2,2}$ , para conseguir o mesmo erro de 52 partições quando utilizado o método de Crank-Nicolson, para  $M_t = 300$ . Por outro lado, a região de convergência do método de Crank-Nicolson se estende para refinamentos maiores do que os outros dois métodos. Nota-se também que, para a equação de difusão, a região de estabilidade do  $R_{2,2}$  é maior do que a região de estabilidade no caso do  $R_{1,1}$ .

Tabela 6.5: Erro absoluto entre Crank-Nicolson, Padé  $R_{1,1}$  e Padé  $R_{2,2}$  com  $M_t = 300$ 

$M_x$	$\rho$	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$	Crank-Nicolson
17	0.48	0.19824	0.04645	0.00386	0.10346
18	0.54	inf	0.05801	<b>0.00747</b>	0.09258
20	0.67	inf	0.07583	0.02527	0.07483
22	0.81	inf	0.08902	0.03844	0.06170
24	0.96	inf	0.09905	0.04845	0.05171
26	1.13	inf	inf	0.05625	0.04394
28	1.31	inf	inf	0.06243	0.03777
30	1.50	inf	inf	inf	0.03280
32	1.71	inf	inf	inf	0.02872
52	4.51	inf	inf	inf	<b>0.00733</b>

Fonte: Autor

Por meio dos resultados apresentados nas tabelas 6.3 e 6.5, pode-se verificar que os métodos multiestágios apresentam resultados satisfatórios para valores de  $M_x$  com pequenos refinamentos. Também, com um refinamento mais grosseiro no tempo, isto é, com  $M_t = 200$ , tabela 6.3, os resultados dos métodos multiestágios ainda são mais precisos do que o método de Crank-Nicolson utilizando  $M_t = 300$ .

Verificado o desenvolvimento das discretizações por aproximantes de Padé utilizando multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  para a equação de difusão, faz-se a mesma avaliação para a equação de Maxwell-Cattaneo. Os resultados numéricos são comparados com a solução analítica conhecida.

## 6.2 EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO

Considere-se a equação de Maxwell-Cattaneo, descrita por

$$\frac{\partial S}{\partial t} - D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = 0, \quad (x, t) \in (0, 1) \times (0, \infty). \quad (6.4)$$

Para avaliar o comportamento dos métodos serão utilizadas as condições iniciais e de fronteiras dadas por

$$\begin{aligned} S(x, 0) &= \text{sen}(\pi x), & S_t(x, 0) &= 0, & x &\in (0, 1) \\ S(0, t) &= S(1, t) = 0, & t &> 0, \end{aligned}$$

cuja solução analítica é [29]

$$S(x, t) = \exp\left(\frac{-t}{2\tau}\right) \operatorname{sen}(\pi x) \begin{cases} \cosh(\omega t) + \frac{\operatorname{senh}(\omega t)}{\sqrt{\Delta}}, & \tau < \tau_c \\ 1 + \frac{t}{2\tau}, & \tau = \tau_c \\ \cos(\omega t) + \frac{\operatorname{sen}(\omega t)}{\sqrt{|\Delta|}}, & \tau > \tau_c \end{cases} \quad (6.5)$$

onde  $\omega = (2\tau)^{-1} \sqrt{|\Delta|}$  e  $\Delta = 1 - 4\pi^2\tau$ . A equação (6.4) admite um valor crítico para o *delay* temporal denominado  $\tau_c = (2\pi)^{-2}$  [29]. Desta forma, para os testes a serem apresentados, o valor crítico para o *delay* será analisado em função de  $\tau$ , isto é, considerando  $\tau_c < \tau$ ,  $\tau_c = \tau$  e  $\tau_c > \tau$ . Ainda, para os testes serão utilizados,  $\rho_1 = \frac{D}{\tau} \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$ ,  $\rho_{exp} = \frac{D}{4\tau} \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$  e  $\rho_6 = \frac{D}{36\tau} \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$ .

### 6.2.1 Teste 1 - Equação de Maxwell-Cattaneo para $\tau < \tau_c = (2\pi)^{-2}$

Dados os parâmetros,

**A** -  $M_t = 200$ ;

**B** -  $It = 600$ ;

**C** -  $\Delta t = 0.0025$ ,

e considerando  $M_x = 20$ ,  $D = 1$ , tempo final,  $t_f = 0.5$ ,  $\tau = 0.0012665$ , apresentam-se na tabela 6.6 os valores da solução analítica e os valores das soluções discretizadas dos métodos explícitos (5.20),  $R_{1,1}$  (5.26) e  $R_{2,2}$  (5.27)-(5.28).

Tabela 6.6: Soluções analítica e pelos métodos Crank-Nicolson, Padé  $R_{1,1}$  e Padé  $R_{2,2}$  com  $M_t = 200$ ,  $M_x = 20$ ,  $t_f = 0.5$  e  $It = 600$

$x$	Solução Analítica	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$
0.0	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.1	0.00222	0.00201	0.00214	0.00206
0.2	0.00423	0.00382	0.00408	0.00393
0.3	0.00582	0.00526	0.00561	0.00540
0.4	0.00684	0.00619	0.00659	0.00635
0.5	0.00719	0.00651	0.00693	0.00668
0.6	0.00684	0.00619	0.00659	0.00635
0.7	0.00582	0.00526	0.00561	0.00540
0.8	0.00423	0.00382	0.00408	0.00393
0.9	0.00222	0.00201	0.00214	0.00206
1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Fonte: Autor

Pelos dados apresentados na tabela 6.6 pode-se observar, que para  $\rho_{exp} = 0.49$ , todos os métodos encontram-se dentro da região de estabilidade. Ainda,  $M_x = 20$  refere-se ao valor máximo antes do método explícito sair da região de estabilidade para a equação

de Maxwell-Cattaneo. Verifica-se também que a solução do método  $R_{1,1}$ , para os parâmetros utilizados, foi a que mais se aproximou da solução analítica.

Para ilustrar os resultados apresentados na tabela 6.6, tem-se a figura 6.3 que mostra as soluções analíticas e numéricas, considerando intervalo de tempo  $[0, 0.5]$ ,  $M_t = 200$  e  $M_x = 20$ . Verifica-se que os erros obtidos entre as soluções numéricas de cada método em comparação com a solução analítica são imperceptíveis. Isto ocorre devido ao fato de todos os métodos estarem dentro da região de estabilidade.

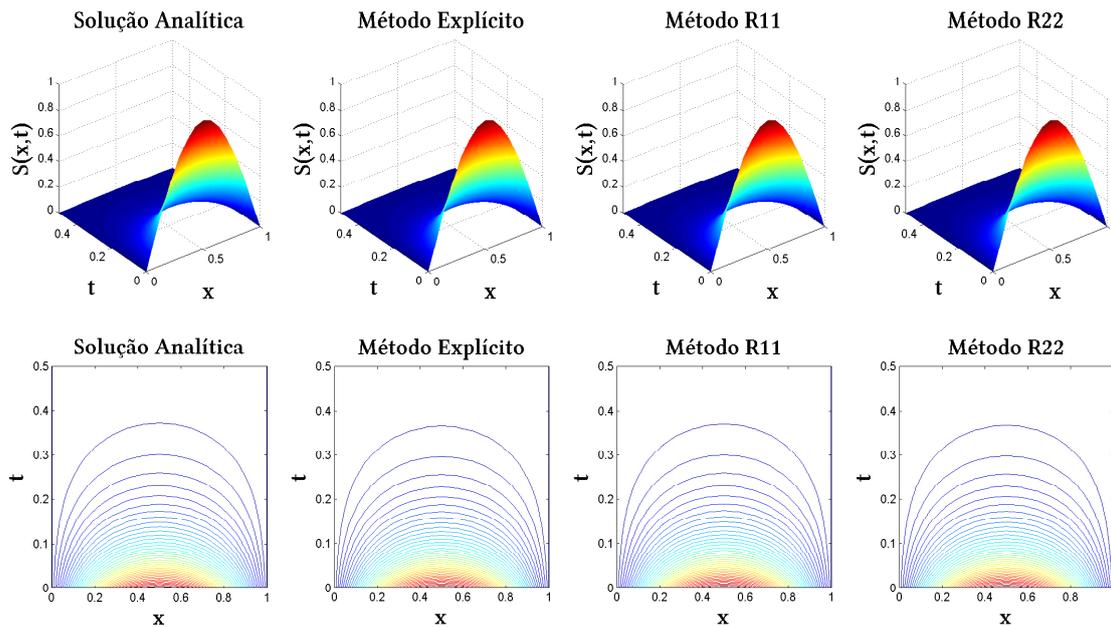


Figura 6.3: Soluções numéricas de Maxwell-Cattaneo pelos métodos explícito,  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  com  $M_t = 200$ ,  $M_x = 20$ , comparadas com a solução analítica

Fazendo um refinamento espacial, tabela 6.7, ou seja, aumentando o valor de  $M_x$  e considerando os parâmetros citados, é possível avaliar de forma qualitativa, com mais precisão onde os métodos deixam de ser estáveis.

Ainda, na tabela 6.7 observam-se os experimentos realizados para diferentes valores de  $M_x$ . O parâmetro  $\rho_{exp} = 0.5$ , que depende de  $\tau$ , é o valor limite da região de convergência do método explícito, enquanto que, para os valores de  $\rho_{exp}$  próximos de 1.3 e de 2.5, resultam valores limites para as regiões de convergência dos métodos  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , respectivamente.

Tabela 6.7: Erro absoluto entre os métodos explícito, Padé  $R_{1,1}$  e Padé  $R_{2,2}$  e a solução analítica com  $M_t = 200$

$M_x$	$\rho_{exp}$	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$
20	0.49	0.00292	0.00362	0.00412
21	0.55	inf	0.00359	0.00409
30	1.11	inf	0.00350	0.00405
32	1.26	inf	0.00741	0.00406
33	1.34	inf	inf	0.00404
34	1.43	inf	inf	0.00404
45	2.50	inf	inf	0.00402
46	2.61	inf	inf	inf
47	2.73	inf	inf	inf

Fonte: Autor

Apresenta-se na figura 6.4 uma comparação para todos os tempos do erro absoluto entre os métodos  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , confirmando, tabela 6.7, que dentro da região de estabilidade do método  $R_{1,1}$  o erro é menor do que o erro do método  $R_{2,2}$ . Apesar dos valores dos métodos explícito,  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  estarem muito próximos, o método  $R_{2,2}$  possui a vantagem de ter uma região de estabilidade maior.

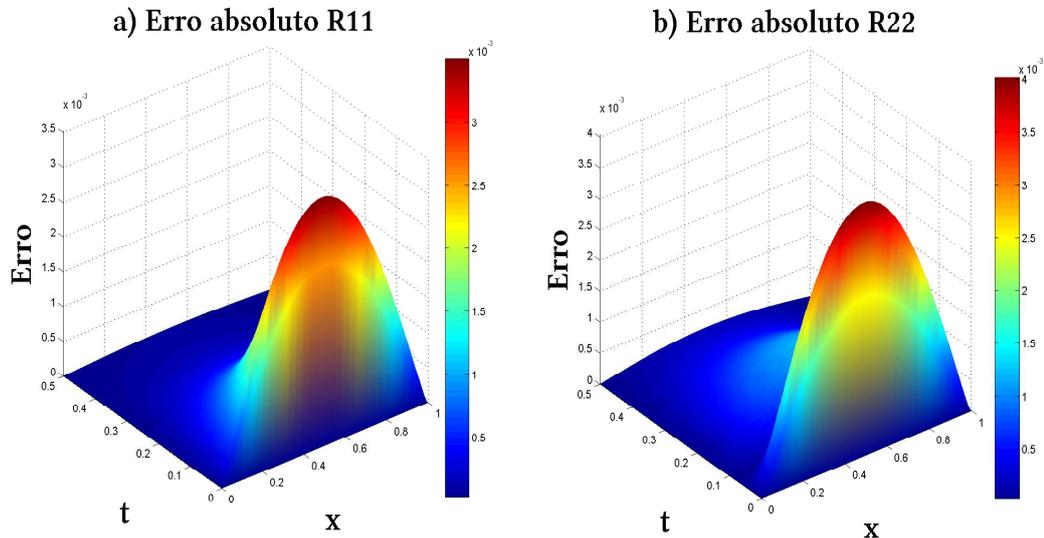


Figura 6.4: Erro absoluto entre os métodos multiestágios  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  considerando  $M_x = 32$

Como uma alternativa para avaliar de forma qualitativa o *delay*,  $\tau$ , no teste 2 serão analisados o erro e a região de estabilidade para o valor de  $\tau = \tau_c$ , que é o ponto crítico da equação (6.7) [29].

### 6.2.2 Teste 2 - Equação de Maxwell-Cattaneo para $\tau = \tau_c$

Dados os parâmetros,

**A** -  $M_t = 200$ ;

**B** -  $It = 900$ ;

**C** -  $\Delta t = 0.0025$ ,

e, considerando  $t_f = 0.5$ ,  $D = 1$ ,  $\tau = (2\pi)^{-2} \simeq 0.0253$  e um refinamento espacial, tabela 6.8, é possível avaliar, de forma qualitativa, com mais precisão, onde os métodos saem da região de estabilidade.

Tabela 6.8: Erro absoluto entre os métodos explícito, Padé  $R_{1,1}$  e Padé  $R_{2,2}$  e a solução analítica com  $M_t = 200$

$Mx$	$\rho$	$\rho_{exp}$	$\rho_6$	Explícito	$R_{1,1}$	$R_{2,2}$
15	0.06	0.01388	0.00154	0.00697	0.00954	0.04452
30	0.22	0.05552	0.00617	0.00610	0.00861	0.04387
60	0.89	0.22207	0.02467	0.00588	0.00837	0.04364
65	1.04	0.26062	0.02896	0.00587	0.00840	0.04362
67	1.11	0.27690	0.03077	inf	0.00836	0.04362
70	1.21	0.30226	0.03358	inf	0.00835	0.04363
80	1.58	0.39478	0.04387	inf	0.00834	0.04361
85	1.78	0.44567	0.04952	inf	inf	0.04360
90	2.00	0.49965	0.05552	inf	inf	0.04360
100	2.47	0.61685	0.06854	inf	inf	0.04360
120	3.55	0.88826	0.09870	inf	inf	0.04359
125	3.86	0.96383	0.10709	inf	inf	0.04358
130	4.17	1.04250	0.11583	inf	inf	inf

Fonte: Autor

Observa-se, tabela 6.8, que para  $\tau = \tau_c$  houve uma perda da região de estabilidade dos métodos, em relação aos valores avaliados para  $\tau < \tau_c$ , apresentados na tabela 6.7, evidenciando a influência de  $\tau$ .

### 6.2.3 Teste 3 - Equação de Maxwell-Cattaneo para $\tau > \tau_c$

Dados os parâmetros

**A** -  $M_t = 200$ ;

**B** -  $It = 900$ ;

**C** -  $\Delta t = 0.0025$ ,

e, considerando  $t_f = 0.5$ ,  $D = 1$ ,  $\tau = \frac{1}{0.005}\tau_c \simeq 5.06$ ,  $M_x = 160$ , o que corresponde a  $\rho_{exp} = 0.00789$ , exige-se um refinamento espacial elevado. Por exemplo, para que no método explícito, cuja discretização é apresentada em (5.26), se tenha  $\rho_{exp} \leq 0.5$ , é necessário que o valor de  $M_x$  esteja próximo de 1270. Portanto, para este caso, o valor de  $\tau$  não irá influenciar substancialmente na solução dos métodos.

Como aplicação da teoria do método multiestágio através dos aproximantes de Padé apresenta-se a solução numérica do modelo logístico.

### 6.3 MODELO PREDADOR-PRESA LOTKA-VOLTERRA LOGÍSTICO

Considere-se novamente o sistema predador-presa Lotka-Volterra logístico [16], dado por,

$$\begin{cases} \frac{\partial S_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} + a_1 S_1 - b_1 S_1^2 - c_1 S_1 S_2 \\ \frac{\partial S_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2} + c_2 S_1 S_2 - a_2 S_2 \\ S_j(x, 0) = S_j(x), \quad x \in (0, 10), \\ S_j(0, t) = S_j(Lx, t) = 0, \quad t > 0, \quad j = 1, 2, \end{cases} \quad (6.6)$$

onde  $F_1(S_1, S_2)$  é uma função que fornece o número de presas no decorrer do tempo e  $F_2(S_1, S_2)$ , indica o número de predadores em função do tempo. A taxa de variação da população de presa é dada pelo seu crescimento natural,  $a_1 S_1$ , menos sua captura por predadores,  $c_1 S_1 S_2$ , o número de interações entre predador e presa será dado por  $S_1 S_2$  e  $b_1 (S_1)^2$  é o termo de saturação logística, enquanto que a taxa de variação da população de predadores é dada pelo seu crescimento na presença de presas para consumo, ou seja,  $c_2 S_1 S_2$ , que é a taxa de encontros com presas, menos o decréscimo causado pela ausência de presas,  $-a_2 S_2$ , com  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b_1$ ,  $c_1$  e  $c_2$  sendo constantes positivas.

Em [43], o modelo logístico considera a variação da densidade populacional somente no tempo, enquanto o sistema (3.17), além de considerar a variação populacional no tempo, também considera a variação espacial (densidade).

Considera-se os parâmetros dados pela tabela 6.9.

Tabela 6.9: Parâmetros do modelo Lotka-Volterra logístico

Variáveis	Presa (j=1)	Predador (j=2)
coeficiente de difusão ( $D_j$ )	$5 \times 10^{-2}$	$5 \times 10^{-2}$
coeficiente de interação ( $c_j$ )	0.5	0.5
taxa de natalidade ( $a_j$ )	1.0	0.75
coeficiente de saturação ( $b_j$ )	0.5	-
espaçamento no espaço ( $\Delta x$ )	$10^{-1}$	$10^{-1}$
espaçamento no tempo ( $\Delta t$ )	$10^{-4}$	$10^{-4}$
retardo no tempo ( $\tau_j$ )	0	0

Fonte: Arquivo do Autor

As populações iniciais para o modelo são dadas por

$$S_1(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } 3.5 \leq x \leq 4.5 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad \text{e} \quad S_2(x, 0) = \begin{cases} 0.5 & \text{se } 5.5 \leq x \leq 6.5 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (6.7)$$

e as condições de contorno utilizadas são

$$S_1(0, t) = S_1(1, t) = S_2(0, t) = S_2(1, t) = 0. \quad (6.8)$$

Durante a predação pode acontecer do predador não encontrar a presa, por algum motivo, levando à extinção da população de predador e, como consequência, a população da presa atingir a saturação ambiental.

Com o intuito de avaliar o comportamento das densidades das populações no modelo logístico em conjunto com a teoria desenvolvida neste trabalho, apresenta-se a solução numérica utilizando o método multiestágio  $R_{1,1}$  (4.20), Considerando  $M_t = 200$ ,  $t_f = 25$ ,  $M_x = 160$ , conforme mostra a figura 6.5.

No modelo (6.6) os coeficientes  $D_1$  e  $D_2$  de difusão são ambos diferentes de zero, por este motivo era esperado haver interação, depois de um certo período de tempo entre as espécies, o que de fato ocorreu. As figuras 6.5 e 6.6 das densidades das populações mostram que ocorreu o efeito esperado da predação, ou seja, no decorrer do tempo, os predadores encontraram as presas e não entraram em extinção. Na figura 6.6 a), as densidades das populações encontram-se no estado inicial  $t = 0$ .

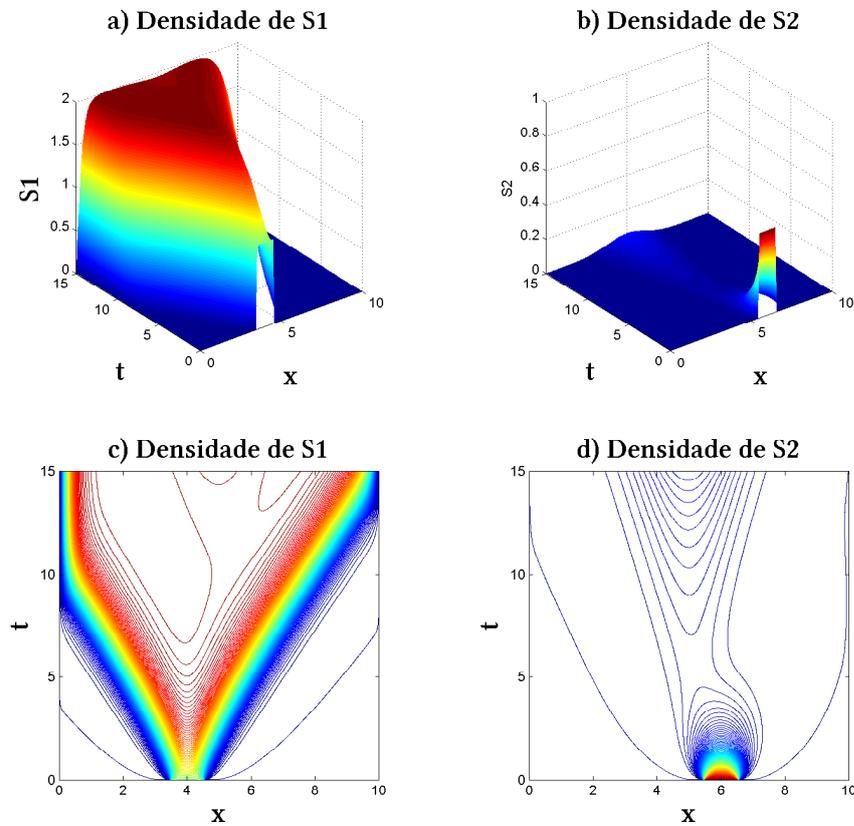


Figura 6.5: Comportamento das densidades quando utilizado o modelo logístico pelo método de multiestágio

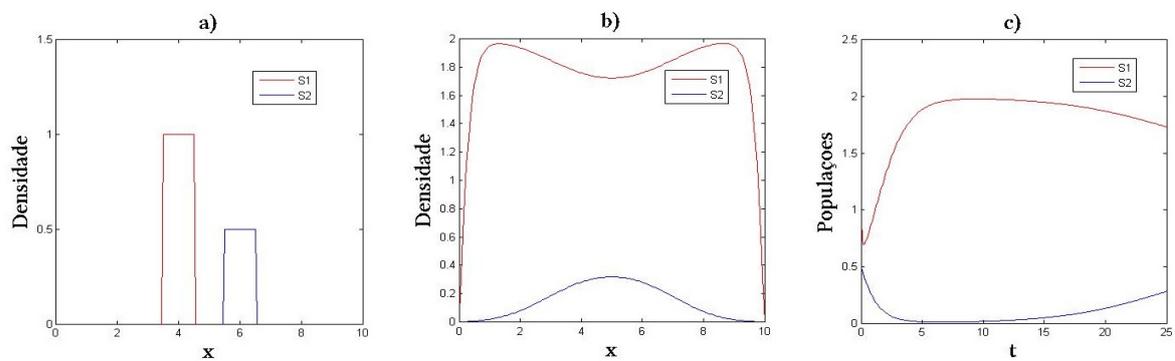


Figura 6.6: Modelo predador-presa logístico: a) densidade inicial, b) densidade com tempo,  $t=80$ , c) evolução das populações ao longo do tempo

## 7 CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentou-se o método multiestágio de alta ordem através dos aproximantes de Padé no contexto das diferenças finitas. Foi analisada a eficácia do método em problemas transientes quando comparados com o método de Crank-Nicolson e o método de Euler explícito. Uma análise preliminar das técnicas de ordens dois e quatro foi realizada na equação de difusão e logo após aplicou-se o esquema multiestágio com os aproximantes  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  na equação de Maxwell-Cattaneo.

O método de alta ordem de multiestágio implícito com aproximantes de Padé mostrou-se eficiente em problemas transientes de difusão, considerando o custo por estágios de tempo quando comparado aos métodos tradicionais de segunda ordem.

No teste realizado com a equação de difusão, foi possível concluir que de fato, a ordem de convergência dos esquemas com  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ , quando dentro de seus respectivos domínios de estabilidade, é superior ao método de Crank-Nicolson. Não foi necessário, para os dois métodos multiestágios, um refinamento maior do espaço para conseguir a mesma ordem de convergência do método de Crank-Nicolson. Porém, através de simulações numéricas, constatou-se que tanto o método implícito de segunda ordem,  $R_{1,1}$ , quanto o de quarta ordem,  $R_{2,2}$ , ambos possuem regiões de estabilidade menores do que o método de Crank-Nicolson.

No teste realizado com a equação de Maxwell-Cattaneo, durante a discretização surgiu a necessidade de propor uma abordagem do método multiestágio para a derivada de segunda ordem. Não foi encontrada na literatura tal abordagem, o que justifica a falta de referências. Isto se constitui num aspecto original desta dissertação. Contudo, pode-se dizer que para a equação de Maxwell-Cattaneo, pela análise feita, o método de Padé possui uma região de convergência maior do que o método explícito, com valores de erro absoluto entre os métodos praticamente iguais.

No modelo Lotka-Volterra logístico foi aplicado o esquema multiestágio com o aproximante de Padé  $R_{1,1}$ . A solução do modelo condiz com o comportamento qualitativo de um sistema predador-presa. Os resultados obtidos foram de acordo com o que se esperava.

Verificou-se também nos testes realizados que a região de estabilidade do esquema com  $R_{2,2}$  é maior do que a região de estabilidade do esquema com  $R_{1,1}$ . O esforço computacional não foi analisado por não apresentar diferenças significativas entre os métodos analisados. Portanto, nos casos analisados, ficou evidente que os métodos multiestágios através dos aproximantes de Padé  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  não precisaram de um refinamento maior no espaço para alcançar uma dada precisão, quando comparados com o método de Crank-Nicolson.

Como sugestão para trabalhos futuros, pode-se analisar com detalhes as regiões de estabilidade e a convergência dos métodos de segunda ordem,  $R_{1,1}$  e quarta ordem,  $R_{2,2}$ , utilizando o critério de Von Neumann. Além de aplicar os métodos multiestágios no modelo exponencial e no sistema predador-presa de reação-convecção-difusão com retardo.

## A ESTABILIDADE DE MÉTODOS MULTISTÁGIOS COM APROXIMANTES DE PADÉ

Ao estudar um problema de valor inicial (PVI) é fundamental analisar se o problema está bem posto, ou seja, saber primeiramente se existe uma solução para o problema e se a solução é única. Além disso, é importante avaliar a sensibilidade da solução, quando pequenas perturbações são aplicadas nas condições iniciais. Para responder a estas questões é necessário conhecer antes algumas definições.

Considere a EDO de primeira ordem dada por

$$\frac{dy}{dx} = y'(x) = f(x, y), \quad (\text{A.1})$$

com condição inicial

$$y(x_0) = y_0$$

onde  $x_0$  é uma constante e  $y_0$  é o valor inicial de  $y(x)$  em  $x = x_0$ .

**Definição A.1.** Uma função  $f(x, y)$  definida em um domínio  $D \subset \mathbb{R}^{n+1}$  diz-se localmente lipschitziana em  $y$  se para qualquer conjunto fechado e limitado  $U \subset D$  existe uma constante  $k$  tal que

$$|f(x, y) - f(x, z)| \leq k|y - z|$$

para  $(x, y), (x, z) \in U$ .

O seguinte resultado estabelece a existência e a unicidade de solução para determinados problemas de valor inicial.

**Teorema A.2** (Picard-Lindelöf). *Se  $f(x, y)$  é contínua em  $D$  e localmente lipschitziana com respeito a  $y$  em  $D$ , então para qualquer  $(x_0, y_0) \in D$ , existe uma única solução  $y_0 = y(x, x_0, y_0)$  de (A.1), passando através de  $(x_0, y_0)$ .*

A demonstração pode ser obtida em [44].

Para resolver numericamente (A.1), considere um domínio discreto com  $n+1$  pontos, e defina uma sequência de pontos  $y_n$ , na qual espera-se ser convergente para  $y(x)$ , com espaçamento fixo igual a  $\Delta x$ . Assim, reescrevendo (A.1) tem-se

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{dx} = y'_i(x) = f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ y_i(x_0) = (y_0)_i. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Ao realizar a discretização é possível definir fórmulas de interpolação de Newton. As conhecidas regra de Simpson e a regra trapezoidal são exemplos de tais fórmulas. Para os métodos multistágios a fórmula genérica é dada por [45]

$$y_{n+1} = \alpha_1 y_n + \cdots + \alpha_k y_{n-k+1} + \Delta x [\beta_0 y'_{n+1} + \cdots + \beta_k y'_{n-k+1}] \quad (\text{A.3})$$

note que quando  $(\beta = 0)$  tem-se a forma explícita e a forma implícita para  $(\beta \neq 0)$ .

A estabilidade de um método numérico refere-se ao comportamento da diferença entre a solução exata e a sequência de aproximações nos  $n$  pontos do domínio quando  $n \rightarrow \infty$ . Para analisar a estabilidade numérica de (A.3) é preciso antes conhecer os conceitos de convergência e consistência.

Convergência refere-se à capacidade de um método para aproximar a solução de uma equação diferencial com qualquer precisão necessária, quando tomados estágios pequenos. O teorema de equivalência de Lax apresenta condições para a convergência de um esquema de diferenças finitas.

**Teorema A.3.** *Para um esquema de diferenças finitas consistente de um PVI bem-posto, a estabilidade é condição necessária e suficiente para a convergência.*

A demonstração pode ser encontrada em [46].

Considere a equação teste de Dahlquist [45]

$$y' = Ay \quad (\text{A.4})$$

onde  $A$  é uma matriz constante, com autovalores complexos distintos,  $\lambda_j$ . Utilizando uma integração com estágios de tamanho  $\Delta x$ , obtém-se a equação de diferenças [18],

$$y_{n+1} = R(z)y_n \quad (\text{A.5})$$

onde  $z = \lambda \Delta x$ .

Nesse contexto, é pertinente mencionar a definição de Richtmer and Morton [47].

**Definição A.4.**  $R(z)$  é chamada função estabilidade ou fator de amplificação do esquema.

A função estabilidade satisfaz as seguintes condições [48]:

**Proposição A.5.**  $\forall z \in \mathbb{C}^-$  tem-se que

$$|R(z)| \leq 1$$

e ainda, se  $z = ib, b \in \mathbb{R}$ ,

$$|R(z)| = 1.$$

Os detalhes podem ser encontrados em [49]. Como consequência, tem-se o resultado [50]:

**Definição A.6.** Um método multiestágio é  $\mathcal{A}$ -estável se

$$|R(z)| < 1$$

para  $Re(z) < 0$ .

Dessa forma, como consequência, os esquemas Padé diagonais são sempre estáveis [48, 51]. De uma maneira geral, Hairer e Wanner [52] mostraram o seguinte teorema

**Teorema A.7.** Um aproximante de Padé  $R_{L,M}$  é  $\mathcal{A}$ -estável se satisfaz a condição

$$M - 2 \leq L \leq M \iff R_{L,M}$$

é  $\mathcal{A}$ -estável.

A definição A.8 diz qual será a região de  $\mathcal{A}$ -estabilidade dos aproximantes de Padé [50].

**Definição A.8.** A região de  $\mathcal{A}$ -estabilidade de um método multiestágio é dada pelo conjunto

$$\Omega = \{z \in \mathbb{C}; |R(z)| < 1\}.$$

O conceito de  $\mathcal{A}$ -estabilidade pode ser modificado a fim de permitir métodos com alta precisão. Widlund [53] foi quem introduziu a seguinte definição

**Definição A.9.** Um método multiestágio é  $\mathcal{A}(\alpha)$ -estável,  $\alpha \in (0, \pi/2)$ , se todas as soluções de (A.3) tendem a zero com  $n \rightarrow \infty$  quando o método é aplicado à  $y' = \lambda y$  para  $\Delta x > 0$  fixado, onde  $\lambda$  é uma constante complexa que pertence ao conjunto

$$S_\alpha = \{z : |\arg(-z)| < \alpha, \quad z \neq 0\}$$

Um método é  $\mathcal{A}(\pi/2)$  estável se é  $\mathcal{A}(\alpha)$ -estável para todo  $\alpha \in (0, \pi/2)$ .

## A.1 ESTABILIDADE COM EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS ACOPLADAS

Todos os conceitos abordados até agora são aplicados em EDOs. Porém, a mesma teoria pode ser utilizada para o tratamento de equações diferenciais parciais. Para isso, é preciso considerar uma EDP como um sistema acoplado de EDOs, que dependem de apenas uma variável. Por exemplo, considere a equação de advecção linear dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \tag{A.6}$$

que possui discretização espacial centrada,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (\text{A.7})$$

o que produz um sistema com  $n - 1$  EDOs da forma

$$\frac{du_1}{dt} = -\frac{u_2 - u_0}{2\Delta x} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{du_2}{dt} = -\frac{u_3 - u_1}{2\Delta x} \quad (\text{A.9})$$

$$\vdots \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{du_{n-1}}{dt} = -\frac{u_n - u_{n-2}}{2\Delta x}. \quad (\text{A.11})$$

Obtendo um sistema de equações diferenciais ordinárias, que pode ser resolvido, por exemplo, através de métodos multiestágios.

## B DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MAXWELL-CATTANEO PELO MÉTODO MULTIESTÁGIO COM O APROXIMANTE DE PADÉ $R_{2,2}$

Para o primeiro estágio considere a equação (5.27),

$$\frac{u_i^{k+\frac{1}{2}} - u_i^k}{\Delta t/2} + \frac{u_i^{k+\frac{1}{2}} - 2u_i^k + u_i^{k-\frac{1}{2}}}{(\Delta t/2)^2} = \frac{u_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2u_i^{k+\frac{1}{6}} + u_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2}, \quad (\text{B.1})$$

colocando o termo  $u_i^{k+\frac{1}{6}}$  em evidência tem-se,

$$u_i^{k+\frac{1}{6}} = \frac{\left(6\Delta t + 72\tau - 2\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) u_i^k + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} (u_{i+1}^k + u_{i-1}^k) - 36\tau u_i^{k-\frac{1}{6}}}{6\Delta t + 36\tau}. \quad (\text{B.2})$$

Para o segundo estágio, considere a equação (5.28),

$$\frac{u_i^{k+\frac{1}{2}} - u_i^k}{\Delta t/2} + \frac{u_i^{k+\frac{1}{2}} - 2u_i^k + u_i^{k-\frac{1}{2}}}{(\Delta t/2)^2} = \frac{u_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2u_i^{k+\frac{1}{6}} + u_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}}{\Delta x^2}, \quad (\text{B.3})$$

colocando o termo  $u_i^{k+\frac{1}{2}}$  em evidência tem-se

$$u_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{(\Delta t + 4\tau)u_i^k - 2\tau u_i^{k-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} \left(u_{i+1}^{k+\frac{1}{6}} - 2u_i^{k+\frac{1}{6}} + u_{i-1}^{k+\frac{1}{6}}\right)}{\Delta t + 2\tau}. \quad (\text{B.4})$$

Para o terceiro estágio, considere a equação (5.29),

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} + \frac{u_i^{k+\frac{1}{2}} - 2u_i^k + u_i^{k-\frac{1}{2}}}{(\Delta t/2)^2} = \frac{u_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2u_i^{k+\frac{5}{6}} + u_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta x^2}, \quad (\text{B.5})$$

colocando o termo  $u_i^{k+1}$  em evidência tem-se

$$u_i^{k+1} = \frac{(\Delta t - 2\tau)u_i^k + 4\tau u_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} \left(u_{i+1}^{k+\frac{5}{6}} - 2u_i^{k+\frac{5}{6}} + u_{i-1}^{k+\frac{5}{6}}\right)}{\Delta t + 2\tau}. \quad (\text{B.6})$$

Para o quarto estágio, considere a equação (5.30)

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^{k+\frac{5}{6}}}{\Delta t/6} + \frac{u_i^{k+1} - 2u_i^{k+\frac{5}{6}} + u_i^{k+\frac{4}{6}}}{\Delta t^2} = \frac{u_{i+1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2}, \quad (\text{B.7})$$

colocando o termo  $u_i^{k+\frac{5}{6}}$  em evidência tem-se

$$u_i^{k+\frac{5}{6}} = \frac{\left(\Delta t + 6\tau + \frac{\Delta t^2}{3\Delta x^2}\right) u_i^{k+1} + 3\tau u_i^{k+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t^2}{6\Delta x^2} (u_{i+1}^{k+1} + u_{i-1}^{k+1})}{\Delta t + 9\tau}, \quad (\text{B.8})$$

obtendo, assim, os quatro estágios do método.

**REFERÊNCIAS**

- [1] G. Mokhtar. *General History of Africa*, volume II. United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization, Place de Fontenoy, Paris, 1981.
- [2] A. O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. Edusp, São Paulo, SP, 2000.
- [3] S. D. Poisson. Mémoire sur les Équations générales de l'Équilibre et du mouvement des corps solides Élastiques et des fluids. *Journal de l'École Polytechnique*, 13, 1829.
- [4] C. L. M. H. *Mémoires de l'Académie des Sciences de l'Institut de France*. Académie des sciences, Paris, 6nd edition.
- [5] G. G. Stokes. On the theory of the internal friction of fluids in motion and of the equilibrium and motion of elastic solids. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 8:287–319, 1845.
- [6] A. Ç. Yunus and J. M. Cimbala. *Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications*. The McGrdw-Hill Companies, New York, NY, 2006.
- [7] R. W. Fox; P. J. Pritchard and A. T. McDonald. *Introduction to fluid mechanics*. John Wiley & Sons, New Jersey, 7nd edition, 2010.
- [8] F. Brunetti. *Mecânica dos Fluidos*. Pearson Prentice Hall Brasil, Rio de Janeiro, RJ, 2005.
- [9] J. Qin. The new alternating direction implicit difference methods for solving three-dimensional parabolic equations. *Applied Mathematical Modelling*, 34:890–897, April 2010.
- [10] J. A. Cuminato and M. M. Junior. *Discretização de Equações Diferenciais Parciais: Técnicas de Diferenças Finitas*. SBM, Rio de Janeiro, RJ, 2013.
- [11] D. Kuzmin. A guide to numerical methods for transport equations. In *University Erlangen-Nuremberg*, Erlangen, 2010.
- [12] A. D. Polyanin and V. G. Sorokin. Nonlinear delay reaction–diffusion equations: Traveling-wave solutions in elementary functions. *Applied Mathematics Letters*, 46:38–43, August 2015.
- [13] J. C. Maxwell. On the dynamical theory of gases. *Royal Society*, 157:49–88, 1867.

- [14] M. C. Cattaneo. Sur une forme de l'Équation de la chaleur Éliminat le paradoxe d'une propagation instantanéé. *Comptes Rendus De L'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, 247:431–433, 1958.
- [15] A. Skvortsov; B. Ristic and A. Kamenev. Predicting population extinction from early observations of the lotka–volterra system. *Applied Mathematics and Computation*, 320: 371–379, March 2018.
- [16] A. S. O. Sobrinho; C. F. Oliveira; C. M. Kita; E. R. T. Natti and P. L. Natti. Modelagem matemática e estabilidade de sistemas predador-presa. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 37, April 2015.
- [17] B. Roig J. Donea and A. Huerta. High-order accurate time-stepping schemes for convection-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 182:249–275, February 2000.
- [18] M. Venutelli. Time-stepping padé–petrov–galerkin models for hydraulic jump simulation. *Mathematics and computers in simulation*, 66:585–604, 2004.
- [19] D. Belkić and K. Belkić. Decisive role of mathematical methods in early cancer diagnostics: optimized padé-based magnetic resonance spectroscopy. *Journal of Mathematical Chemistry*, 42:1–35, July 2007.
- [20] H. Vazquez-Leal and F. Guerrero. Application of series method with padé and laplace-padé resummation methods to solve a model for the evolution of smoking habit in spain. *Computational and Applied Mathematics*, 33:181–192, 2013.
- [21] C. A. Ladeia; N. M. L. Romeiro; P. L. Natti and E. R. Cirilo. Formulações semi-discretas para a equação 1d de burgers. *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 14 (3):319–331, July 2013.
- [22] W. C. Boyce and R. C. DiPrima. *Elementary differential Equations and Boundary Value Problems*. John Wiley & Sons, Inc, Rensselaer Polytechnic Institute, 1995.
- [23] J. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluids Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin, 3rd edition, 2002.
- [24] C. R. Maliska. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas*. LTC, São Paulo, 1995.
- [25] C. A. Ladeia. *Formulação Semi-Discreta Aplicada as Equações 1D de Convecção-Difusão-Reação e de Burgues*. Ma. dissertação, Universidade Estadual de Londrina, March 2012.

- [26] M. C. K. Aguilhera-Navarro; V. C. Aguilhera-Navarro; R. C. Ferreira and N. Teramon. Os aproximantes de padé. *Matemática Universitária*, (26/27):49–66, June 1999.
- [27] T. S. Blyth and M. F. Janowitz. *Essentials of Padé Approximant*. Academic Press, New York, 1975.
- [28] C. A. Ladeia and N. M. L. Romeiro. Numerical solutions of the 1d convection–diffusion–reaction and the burgers equation using implicit multi-stage and finite element methods. In C. Constanda, B.E.J. Bodmann, and H. F. C. Velho, editors, *Integral Methods in Science and Engineering*, chapter 15, pages 205–216. Springer New York, 2013.
- [29] R. E. Mickens and P. M. Jordan. A positivity-preserving nonstandard finite difference scheme for the damped wave equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 20(5):639–649, September 2004.
- [30] Y. M. Ali and L. C. Zhang. Relativistic moving heat source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48:2741–2758, June 2005.
- [31] F. J. Uribe; Wm. G. Hoover and C. G. Hoover. Maxwell and cattaneo’s time-delay ideas applied to shockwaves and the rayleigh-bénard problem. *Computational Methods in Science and Technology*, 19:5–12, January 2013.
- [32] Y. Taitel. On the parabolic, hyperbolic and discrete formulation of the heat conduction equation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:369–371, February 1972.
- [33] D. D. Joseph and L. Preziosi. Heat waves. *Reviews of Modern Physics*, 61:41–73, 1989.
- [34] F. Ekoue; A. Fouache d’Halloy; D. Gigon; G Plantamp and E. Zajdman. Maxwell-cattaneo regularization of heat equation. *International Journal of Physical and Mathematical Sciences*, 7:772–775, 2013.
- [35] S. A. Levin. Dispersion and population interactions. *The American Naturalist*, 108(960):207–228, 1974.
- [36] J. G. Skellam. Random dispersal in theoretical populations. *Biometrika*, 38(1/2):196–218, 1951.
- [37] R. S. Cantrell; C. Cosner and Y. Lou. Evolution of dispersal and the ideal free distribution. *Mathematical Biosciences and Engineering*, 7:17–36, 2010.
- [38] J. H. Argyris; L. E. Vaz and K. J. Willam. Higher order methods for transient diffusion analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 12:243–278, 1977.

- [39] D. E. Amundsen and O. Bruno. Time stepping via one-dimensional padé approximation. *Journal of Scientific Computing*, 30:83–115, January 2007.
- [40] C. M. Oishi; J. A. Cuminato and D. E. Stewart. Stability analysis of crank–nicolson and euler schemes for time-dependent diffusion equations. *BIT Numerical Mathematics*, 55: 487–513, June 2015.
- [41] G. D. Smith, editor. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Oxford University Press, New York, 1985.
- [42] R. L. Burden and J. D. Faires. *Numerical Analysis*. Cengage Learning, Boston, 9nd edition.
- [43] J. Organista. *Modelagem e simulações numéricas das equações reativa-convectiva-difusiva com retardo para um sistema predador-presa*. Ph. D. dissertation, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2018.
- [44] J. K. Hale. *Ordinary differential equations*, volume 1. Krieger Publishing Company, Malabar, Flórida, 1969.
- [45] G. G. Dahlquist. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics*, 3:27–43, 1963.
- [46] P. D. Lax and R. D. Richtmyer. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 9:267–293, 1956.
- [47] R. D. Richtmyer and K. W. Morton. *Difference Methods for Initial-Value Problems*. Interscience Publishers, New York, 2nd edition, .
- [48] H. Barucq; M. Duruflé and M. N’Diaye. High-order padé and singly diagonally runge-kutta schemes for linear odes, application to wave propagation problems. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 34:760–798, March 2018.
- [49] R. D. Richtmyer and K. W. Morton. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Willey & Sons, New York, 2nd edition, .
- [50] B. L. Ehle. A-stable methods and padé approximations to the exponential. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 4:671–680, June 1973.
- [51] G. Birkoff and R. S. Varga. Discretization errors for well-set cauchy problems. *Studies in Applied Mathematics*, 44:1–23, 1965.
- [52] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations II, stiff and differential-algebraic problems*. Springer, 2nd edition, 1996.
- [53] O. B. Widlund. A note on unconditionally stable linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics*, 7:65–70, March 1967.