*O método das interfaces imersas
para a solução da equação de
Poisson-Boltzmann*

Miguel Angel Rojas Meza
Dissertação de Mestrado

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Miguel Angel Rojas Meza

O método das interfaces imersas para a solução da equação de Poisson-Boltzmann

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. José Alberto Cuminato

USP – São Carlos
Julho de 2017

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M634o Meza, Miguel Angel Rojas
O método das interfaces imersas para a solução
da equação de Poisson-Boltzmann / Miguel Angel
Rojas Meza; orientador José Alberto Cuminato. -
São Carlos - SP, 2017.
70 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação
em Ciências de Computação e Matemática Computacional)
- Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, 2017.

1. Mecânica dos Fluidos e Aplicações.
2. Poisson-Boltzmann. 3. Método das Interfaces
Imersas. I. Cuminato, José Alberto, orient. II.
Título.

Miguel Angel Rojas Meza

**The immersed interface method for the solution of the
Poisson-Boltzmann equation**

Master dissertation submitted to the Instituto de
Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-
USP, in partial fulfillment of the requirements for the
degree of the Master Program in Computer Science
and Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. José Alberto Cuminato

USP – São Carlos
July 2017

*Este trabalho é dedicado às mulheres da minha vida,
avós, mãe, irmãs, tias e primas.
Em especial, a memória de Elvi e para meus amores Ly e Alicita.*

AGRADECIMENTOS

A Deus pelo dom da vida e da fé. A meus pais Miguel Angel Rojas V. e Leda Meza P. por todos os esforços que fizeram para eu poder conseguir estudar. Também a minhas irmãs Vianys e Merly. A meus familiares, em especial às minhas avós Lucila e Ana por tudo que elas fizeram na minha vida. À minha mulher Elaine Cristina pela força, amor, carinho e compreensão nos momentos difíceis e a minha filha Alicia Mariana por me fazer tentar melhorar a cada dia e fazer feliz com seu sorriso e todo o seu amor. Ao meu orientador Prof. Dr. José Alberto Cuminato pela colaboração, paciência e pelas chances dadas e ao Prof. Dr. Leandro Franco de Souza por me ajudar mais do que eu precisava. Aos meus amigos Rodolfo, Rogelio, Alfredo, Edwin, Miguel, John, Ruben, Henry pela ajuda e incentivo nos dias difíceis. Aos amigos e colegas do laboratório *Lmacc*, funcionários e professores do ICMC-USP, pela convivência, dicas e ajudas na pesquisa, menção especial para o Stevens, a Fran e o Milton que foram os que mais me ajudaram. Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico-CNPq pelo apoio financeiro. Finalmente a todos os que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho. Muchísimas Gracias!

“Transforme as pedras que você tropeça nas pedras de sua escada.”
(Sócrates)

RESUMO

M.A.R MEZA. **O método das interfaces imersas para a solução da equação de Poisson-Boltzmann.** 2017. 70 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2017.

A equação de Poisson-Boltzmann tem uma vasta gama de aplicações, desde a ciência coloidal e microfluídica até bioquímica e biofísica. O potencial elétrico na dupla camada elétrica leva a um potencial de força, em termos das equações de Navier-Stokes que é então usado para simular o fluxo resultante. Em escoamentos bifásicos uma simplificação desta equação é usada para se obter o campo de pressão.

O presente trabalho tem como principal objetivo estudar o problema de Poisson-Boltzmann com coeficiente constante e propor uma solução através da implementação do método das interfaces imersas utilizando diferenças finitas de altas ordens de precisão numérica.

Palavras-chave: Mecânica dos Fluidos e Aplicações, Poisson-Boltzmann, Método das Interfaces Imersas.

ABSTRACT

M.A.R MEZA. **The immersed interface method for the solution of the Poisson-Boltzmann equation.** 2017. 70 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2017.

The Poisson-Boltzmann equation has a wide range of applications, from colloidal and microfluidic science to biochemistry and biophysics. The electrical potential in electric double layer leads to a force potential in terms of the Navier-Stokes equations that is then used to simulate the resulting flow. In biphasic flows a simplification of this equation is used to obtain the pressure field.

The present study has as main objective to study the problem of Poisson-Boltzmann with constant coefficient and propose a solution through implementation of the immersed interfaces method using high order finite difference scheme and thus get high order numerical accuracy.

Keywords: Fluid Mechanics and Applications, Poisson-Boltzmann, Immersed Interfaces Method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Ilustração do domínio contendo uma interface imersa	22
Figura 2 – Solução para a equação de Poisson-Boltzmann em $2D$	25
Figura 3 – Ilustração da função $f(x)$ com descontinuidade em $x = \alpha$	32
Figura 4 – Ilustração da discretização do domínio na descontinuidade	34
Figura 5 – Ilustração da discretização explícita do domínio para o método de segunda ordem	44
Figura 6 – Ilustração do domínio contendo uma interface imersa circular	50
Figura 7 – Soluções de segunda ordem, $h=0.01$	54
Figura 8 – Erro de <i>segunda ordem</i> do exemplo 1	55
Figura 9 – Soluções de quarta ordem, $h=0.01$	55
Figura 10 – Erro de <i>quarta ordem</i> do exemplo 1	56
Figura 11 – Soluções de altas ordem, $h=0.01$	57
Figura 12 – Erro de <i>altas ordens em escala logarítmica</i> do exemplo 1	57
Figura 13 – Solução segunda ordem do exemplo 2	58
Figura 14 – Erro de <i>segunda ordem em escala logarítmica</i> do exemplo 2	59
Figura 15 – Solução quarta ordem do exemplo 2	60
Figura 16 – Erro de <i>quarta ordem em escala logarítmica</i> do exemplo 2	60
Figura 17 – Solução de alta ordem do exemplo 2	61
Figura 18 – Erro de <i>alta ordem em escala logarítmica</i> do exemplo 2	61
Figura 19 – Solução segunda ordem do exemplo 3	62
Figura 20 – Erro de <i>segunda ordem em escala logarítmica</i> do exemplo 3	63
Figura 21 – Solução quarta ordem do exemplo 3	63
Figura 22 – Erro de <i>quarta ordem em escala logarítmica</i> do exemplo 3	64
Figura 23 – Solução alta ordem do exemplo 3	65
Figura 24 – Erro de <i>alta ordem em escala logarítmica</i> do exemplo 3	65

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de segunda ordem, exemplo 1	54
Tabela 2 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de quarta ordem, exemplo 1	55
Tabela 3 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de alta ordem, exemplo 1	56
Tabela 4 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de segunda ordem para o exemplo 2	58
Tabela 5 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de quarta ordem para o exemplo 2	59
Tabela 6 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de alta ordem para o exemplo 2	60
Tabela 7 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de segunda ordem para o exemplo 3	62
Tabela 8 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de quarta ordem para o exemplo 3	64
Tabela 9 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de alta ordem para o exemplo 3	64

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
2	FORMULAÇÃO	23
2.1	Modelo matemático	23
3	METODOLOGIA	27
3.1	Interface Imersa	27
3.2	IIM clássico	28
3.3	Série de Taylor corrigida	30
3.3.1	<i>Diferenças Finitas Compactas</i>	30
3.3.2	<i>Esquema Compacto de Alta Ordem</i>	38
4	PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS	43
4.1	Esquemas Explícitos	43
4.1.1	<i>Diferenças de 2ª Ordem</i>	43
4.1.2	<i>Diferenças de 4ª Ordem</i>	45
4.1.3	<i>Diferenças de Alta Ordem</i>	48
4.2	Equação de Poisson 2D	49
4.2.1	<i>Condições de contorno do tipo Neumann</i>	51
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	53
5.1	MII em Poisson 1D	53
5.1.0.1	<i>Exemplo 1</i>	53
5.2	MII em problemas de Poisson em 2D	57
5.2.0.1	<i>Exemplo 2</i>	57
5.2.0.2	<i>Exemplo 3</i>	61
6	CONCLUSÕES	67
6.1	Trabalhos gerados	68
6.2	Trabalhos futuros	68
	REFERÊNCIAS	69

INTRODUÇÃO

As equações de Navier-Stokes modelam o escoamento de fluidos que podem ou não conter estruturas imersas. A solução numérica dessas equações pode ser realizada através de um método de projeção onde uma versão da equação de Poisson-Boltzmann é resolvida a cada passo de tempo para fazer o acoplamento entre as equações de continuidade e quantidade de movimento.

Devido à aplicabilidade em diversos campos, a equação de Poisson-Boltzmann é amplamente estudada. Uma boa revisão desses métodos pode ser encontrada em (LU *et al.*, 2008) e cabe destacar os métodos de elementos finitos com domínio irregular (CHEN; HOLST; XU, 2007) são muitas vezes utilizados para resolver a equação de Poisson-Boltzmann.

A principal dificuldade com os métodos de diferenças finitas para a solução da equação de Poisson-Boltzmann é capturar corretamente a geometria com as condições de contorno corretas na interface (CHEN; HOLST; XU, 2007). Alguns esforços para resolver este problema são propostos em (ZHOU; FEIG; WEI, 2008) e (GENG; YU; WEI, 2007). Estes autores foram os primeiros a implementar o salto da interface e os métodos de fronteira para a equação de Poisson-Boltzmann.

A interface também pode ser capturada com métodos de interface imersas, que para a equação de Poisson-Boltzmann só foram utilizados em geometrias simples em duas dimensões (ou três dimensões espaciais com simetria) (QIAO; LI; TANG, 2006). Matematicamente este tipo de problema leva a equações diferenciais, com dados e soluções com descontinuidades nas interfaces. Alguns métodos desenvolvidos para solução desta equação não funcionam devido às irregularidades.

O método conhecido por Método de Interface Imersa (MII) foi desenvolvido por Leveque e Li (LEVEQUE; LI, 1994) para melhorar a ordem de precisão do Método de Fronteira Imersa (PESKIN, 1972). Este método trata as equações com coeficientes descontínuos e são utilizados para resolver numericamente problemas de valor inicial e de contorno em domínios com geome-

Figura 1 – Ilustração do domínio contendo uma interface imersa $\partial\Omega_i$.

Fonte: Linnick e Fasel (2005).

trias irregulares e evita o uso da distribuição Delta de Dirac para definir o termo forçante. Para modelar as discontinuidades na interface, os coeficientes no cálculo das derivadas por diferenças finitas são modificados e termos de correção são adicionados e determinados dependendo do salto da função. Pode-se obter segunda ordem de precisão (LI; ITO, 2006) e, com a imposição das condições de contorno em situações onde a geometria do domínio não coincide com a malha computacional, como mostrado na Figura 1, é possível obter quarta ordem (LINNICK; FASEL, 2005).

Recentemente foram propostos métodos de elementos finitos imersos para algumas equações diferenciais parciais elípticas (JI; CHEN; LI, 2016). Também foi feito em (ZHU; ZHANG; LI, 2016) um método de volumes finitos para as condições de saltos não homogêneas e uma extensão da teoria de Poisson-Boltzmann (BEN-YAAKOV *et al.*, 2011), (ZHAO; HOU; LI, 2012) utiliza um polinômio auxiliar quadrático para um método de interface imersa de segunda ordem que resolve equações elípticas e um solucionador de interface imerso para a equação de Poisson (caso bidimensional). É proposto em (MARICHAL; CHATELAIN; WINCKELMANS, 2014) uma abordagem de interface imersa é feita utilizando uma metodologia de segunda ordem.

Na sequência deste texto apresentaremos o Capítulo 2, onde é descrita a formulação matemática referente ao problema que vai ser estudado, enquanto que no capítulo 3 explica-se o método das Interface Imersas e as duas metodologias implementadas no trabalho, detalhando-se as diferenças finitas explícitas e compactas que são utilizadas na discretização das equações. No capítulo 4 apresentaremos a versão da metodologia utilizada para resolver problemas bidimensionais. No capítulo 5 serão mostrados os resultados numéricos obtidos em uma e duas dimensões. E, por fim, no capítulo 6 são apresentados as conclusões e os trabalhos futuros.

FORMULAÇÃO

Neste capítulo é apresentada uma introdução de um problema elíptico unidimensional com coeficientes descontínuos apresentado no livro (LI; ITO, 2006), partindo de uma equação elíptica específica para obter o modelo mais geral que represente a equação de Poisson-Boltzmann.

2.1 Modelo matemático

Consideramos o modelo elíptico unidimensional, que pode modelar o deslocamento de uma corda elástica com duas extremidades fixas sob a influência de uma força externa, onde a variável β representa o coeficiente de tensão da superfície da corda

$$(\beta u_x)_x - \sigma u = f + v\delta(x - \alpha), \quad 0 < x, \alpha < 1, \quad (2.1)$$

com condições de contorno especificadas por $u(x)$ em $x = 0$ e $x = 1$. A função $\beta(x)$ admite descontinuidade em $x = \alpha$. O termo $\delta(x - \alpha)$ é a distribuição delta de Dirac que tem como função representar a interface. O método de interface imersa elimina a necessidade de usar uma aproximação para essa distribuição nas equações de diferenças. Para verificar essa característica do método faremos uma reformulação para o problema, onde será possível eliminar a distribuição delta de Dirac estabelecendo-se condições de salto e a constante v representará a magnitude do fluxo na interface.

Vamos denotar os valores limites com sinal “+”, quando $x > \alpha$ e sinal “−” quando $x < \alpha$. Definimos a condição do salto de uma função u no ponto α por

$$[u]_{x=\alpha} \equiv u(\alpha^+) - u(\alpha^-) \equiv \lim_{x \rightarrow \alpha^+} u(x) - \lim_{x \rightarrow \alpha^-} u(x) \equiv u^+ - u^-. \quad (2.2)$$

$$[u_x]_{x=\alpha} \equiv u_x(\alpha^+) - u_x(\alpha^-) \equiv \lim_{x \rightarrow \alpha^+} u_x(x) - \lim_{x \rightarrow \alpha^-} u_x(x) \equiv u_x^+ - u_x^-. \quad (2.3)$$

Integrando (2.1) entre $x = \alpha^-$ e $x = \alpha^+$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} ((\beta u_x)_x - \sigma u) dx &= \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} (f + v \delta(x - \alpha)) dx \Rightarrow \\ \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} (\beta u_x) dx - \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} \sigma u dx &= \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} f dx + \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} v \delta(x - \alpha) dx \Rightarrow \\ [\beta u_x]_{x=\alpha} &= \beta^+ u_x^+ - \beta^- u_x^- = v, \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde v é uma constante e para que todas as integrais possam existir, as funções f , σ e β devem cumprir as condições de quadrado integrável, continuidade e primeira derivada contínua respectivamente.

Tem-se também que

$$[u]_{x=\alpha} = \omega \Rightarrow u^+ - u^- = \omega, \quad (2.5)$$

onde ω é uma constante. Uma forma alternativa de escrever o problema (2.1) é requerer que $u(x)$ satisfaça a equação

$$(\beta u_x)_x - \sigma u = f, \quad 0 < x, \alpha < 1, \quad (0, \alpha) \cup (\alpha, 1). \quad (2.6)$$

Aplicando o conceito da condição de salto em (2.6), obtém-se

$$\begin{aligned} [(\beta u_x)_x - \sigma u] &= [f] \Rightarrow [(\beta u_x)_x] - [\sigma u] = [f] \Rightarrow \\ \beta_x^+ u_x^+ - \beta_x^- u_x^- + \beta^+ u_{xx}^+ - \beta^- u_{xx}^- - (\sigma^+ u^+ - \sigma^- u^-) &= [f] \Rightarrow \\ \beta^+ u_{xx}^+ &= \beta^- u_{xx}^- + \beta_x^- u_x^- - \beta_x^+ u_x^+ - (\sigma^- u^- - \sigma^+ u^+) + [f] \Rightarrow \\ u_{xx}^+ &= \frac{\beta^-}{\beta^+} u_{xx}^- + \frac{\beta^-}{\beta^+} u_x^- - \frac{\beta_x^+}{\beta^+} \left(\frac{\beta^-}{\beta^+} u_x^- + \frac{v}{\beta^+} \right) + \left(\frac{[\sigma] u^- + \omega \sigma^+}{\beta^+} + \frac{[f]}{\beta^+} \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Nas expressões (2.4), (2.5) e (2.7) vamos expressar os valores limites do lado positivo "+", em termos daqueles que estão do lado negativo "-", da seguinte forma

$$\begin{aligned} u^+ &= u^- + \omega, \\ u_x^+ &= \frac{\beta^-}{\beta^+} u_x^- + \frac{v}{\beta^+} \\ u_{xx}^+ &= \frac{\beta^-}{\beta^+} u_{xx}^- + \frac{\beta^-}{\beta^+} u_x^- - \frac{\beta_x^+ \beta^-}{(\beta^+)^2} u_x^- + \frac{\beta_x^+ v}{(\beta^+)^2} + \frac{[\sigma] u^-}{\beta^+} + \frac{\omega \sigma^+}{\beta^+} + \frac{[f]}{\beta^+}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Para simplificar o problema assumimos que $\sigma(x)$ e $f(x)$ são funções suaves e $\beta(x)$ é uma função constante por partes com salto finito em α . Assim tem-se $\sigma^+ = \sigma^-$, $\beta_x^+ = \beta_x^- = 0$ e $u^+ = u^-$, donde obtém-se

$$u^+ = u^-, \quad u_x^+ = \frac{\beta^-}{\beta^+} u_x^- + \frac{v}{\beta^+}, \quad u_{xx}^+ = \frac{\beta^-}{\beta^+} u_{xx}^-.$$

As expressões em (2.8) serão utilizados mais adiante para desenvolver o MII, pois carregam informações da Interface.

Por fim, consideramos um modelo bidimensional da equação (2.6), com $\sigma = 0$ e introduzindo o termo fonte $k^2 \sinh(u) + g$, que é não linear, e assim obtemos a equação de Poisson-Boltzmann

$$\nabla \cdot (\beta \nabla u) = k^2 \sinh(u) + g. \quad (2.9)$$

Na figura 2 temos a solução para esta equação no domínio retangular $\omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, onde já é possível perceber o tipo de decomposição em dois subdomínios que aparecerá em nossas aplicações.

Figura 2 – Solução para a equação (2.9) em 2D. Com domínio $[-1, 1] \times [-1, 1]$, com solução $u = \exp(xy)$, $\beta = x^2 + y^2$ e $k = 1$. Região azul está dentro de Ω e vermelha dentro de Ω^+ .

Fonte: Helgadóttir e Gibou (2011).

A equação (2.9) pode também descrever o potencial elétrico em uma solução, onde u é o potencial electrostático desconhecido, k é o inverso do comprimento de Debye-Hückel, β é o coeficiente de dielétrico e g é o termo fonte. Desta forma chegamos a equação que será objeto de nosso estudo mas precisamente o caso onde β é uma função constante (fixa ou por partes), com $k = 0$ e sendo que um dos dois subdomínios tem solução identicamente nula.

METODOLOGIA

Neste capítulo é apresentado o MII que captura com precisão as descontinuidades na solução, descreve-se os diferentes métodos de diferenças finitas utilizados nas equações e apresenta-se também a obtenção das ordens de precisão desejadas.

3.1 Interface Imersa

O método MII é uma modificação de um método de diferenças finitas tradicional para aumentar a precisão da solução quando houver descontinuidades nas equações envolvidas.

É de extrema importância para o MII ter conhecimento à priori das condições de salto, que podem ser obtidas a partir de informações físicas ou das equações governantes. Os métodos numéricos são modificados de acordo com as condições de salto apenas em pontos ou elementos da malha próximos ou sobre a interface, enquanto longe da interface adota-se a discretização padrão em diferenças ou elementos finitos. No presente caso, os detalhes utilizados na diferenciação, serão apresentados na próxima seção.

Um avanço significativo no MII foi proposto por (WIEGMANN; BUBE, 2000) que introduziram o método das interfaces imersas com salto explícito. Esses pesquisadores fizeram a simples, mas importante observação: técnicas de diferenças finitas falham quando aplicadas à funções não suaves, pois a expansão da série de Taylor em que as mesmas se baseiam são inválidas. Neste contexto, uma expansão em série de Taylor incluindo saltos é utilizada para obter aproximações de segunda ordem de precisão. Segundo (LINNICK; FASEL, 2005) a principal ideia do MII é que os esquemas de diferenças finitas nas interfaces imersas devem ser corrigidos para manter a precisão do método numérico. Além disso, segundo (LI; ITO, 2006) o MII é um método de interfaces imersas no qual as condições de salto são forçadas exata ou aproximadamente.

Existem vários tipos de problemas de interface dependendo da estrutura das equações

diferenciais, com coeficientes descontínuos ao longo da interface mas não nos termos fontes. A estrutura da interface pode ser fixa (não depender do tempo) ou móvel através do tempo quando há mais de uma interface.

3.2 IIM clássico

Este esquema adota aproximações de segunda ordem para discretizar a Equação (2.6) com $\sigma = 0$, abordagem feita por Li e Ito em (LI; ITO, 2006).

No método das interface imersas para o modelo geral unidimensional que representa a equação de Poisson-Boltzmann, as funções $\beta(x)$ e $f(x)$, podem ter um salto finito em $x = \alpha$. A solução admite um salto $[u] = \omega$ e ainda é possível impor condição de salto na sua primeira derivada, $[\beta u_x] = v$.

Para uma discretização uniforme do domínio, dada pelos pontos de malha x_i , para $i = 1, \dots, N$, $N > 0$, admite-se que x_j e x_{j+1} são pontos irregulares se $\alpha \in [x_j, x_{j+1})$, e x_i é regular se $i \neq j$. Para os pontos regulares adota-se o esquema de segunda ordem

$$\frac{\beta(x_{i-\frac{1}{2}})U_{i-1} - \beta(x_{i-\frac{1}{2}})U_i - \beta(x_{i+\frac{1}{2}})U_i + \beta(x_{i+\frac{1}{2}})U_{i+1}}{h^2} = f(x_i), \quad (3.1)$$

onde $h = x_{i+1} - x_i$ é o tamanho de malha. Para os pontos irregulares x_j e x_{j+1} tem-se, respectivamente,

$$\gamma_{j,1}U_{j-1} + \gamma_{j,2}U_j + \gamma_{j,3}U_{j+1} = f_j + C_j, \quad (3.2)$$

$$\gamma_{j+1,1}U_j + \gamma_{j+1,2}U_{j+1} + \gamma_{j+1,3}U_{j+2} = f_{j+1} + C_{j+1}. \quad (3.3)$$

Expandindo os termos $u(x_{j-1})$, $u(x_j)$, $u(x_{j+1})$ e $f(x_j)$ em torno da interface α , e em cada lado da interface adotando-se as relações de salto definidas em (2.8), para expressar as funções da expansão em termos de um lado em particular é possível obter o erro de truncamento local e assim conseguir os coeficientes que conduzem a segunda ordem de precisão. Vamos considerar a expansão de $u(x_{j-1})$, $u(x_j)$ e $u(x_{j+1})$ em torno de α , onde tem-se,

$$u(x_r) = u^-(\alpha) + (x_r - \alpha)u_x^-(\alpha) + \frac{1}{2}(x_r - \alpha)^2 u_{xx}^-(\alpha) + O((x_r - \alpha)^3), r = j-1, j. \quad (3.4)$$

$$u(x_{j+1}) = u^+(\alpha) + (x_{j+1} - \alpha)u_x^+(\alpha) + \frac{1}{2}(x_{j+1} - \alpha)^2 u_{xx}^+(\alpha) + O((x_r - \alpha)^3). \quad (3.5)$$

Utilizando as relações de salto (2.8) com $\sigma = 0$ e substituindo $u^+(\alpha)$, $u_x^+(\alpha)$ e $u_{xx}^+(\alpha)$ em (3.5), obtém-se:

$$\begin{aligned} u(x_{j+1}) = & u^-(\alpha) + \omega + \frac{\beta^-}{\beta^+}(x_{j+1} - \alpha)u_x^- + \frac{v}{\beta^+}(x_{j+1} - \alpha) \\ & + \frac{\beta^-}{2\beta^+}(x_{j+1} - \alpha)^2 u_{xx}^-(\alpha) + \frac{(x_{j+1} - \alpha)^2}{2\beta^+} \left(\beta_x^+ - \frac{\beta_x^+ \beta^-}{\beta^+} \right) u_x^-(\alpha) \\ & - \frac{(x_{j+1} - \alpha)^2 \beta_x^+ v}{2(\beta^+)^2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Agora determina-se as expressões que minimizam a magnitude do erro de truncamento local (ETL), através do método dos coeficientes indeterminados que é dado por:

$$T_j = \gamma_{j,1}u(x_{j-1}) + \gamma_{j,2}u(x_j) + \gamma_{j,3}u(x_{j+1}) - f(x_j) - C_j. \quad (3.7)$$

Substituindo as equações (3.4) e (3.6) na equação (3.7) do (ETL) temos

$$\begin{aligned} T_j = & [\gamma_{j,1} + \gamma_{j,2} + \gamma_{j,3}]u^-(\alpha) + [(x_{j-1} - \alpha)\gamma_{j,1} + (x_j - \alpha)\gamma_{j,2} \\ & + \left\{ \frac{\beta^-}{\beta^+}(x_{j+1} - \alpha) - \left(\frac{\beta_x^-}{\beta^+} - \frac{\beta^- \beta_x^+}{(\beta^+)^2} \right) \frac{(x_{j+1} - \alpha)^2}{2} \right\} \gamma_{j,3}]u_x^-(\alpha) \\ & + \left[\frac{(x_{j-1} - \alpha)^2}{2} \gamma_{j,1} + \frac{(x_j - \alpha)^2}{2} \gamma_{j,2} + \frac{(x_{j+1} - \alpha)^2 \beta^-}{2} \gamma_{j,3} \right] u_{xx}^-(\alpha) \\ & - f(\alpha) - O(h) - C_j + \gamma_{j,3} \left\{ \omega + (x_{j+1} - \alpha) \frac{v}{\beta^+} - \frac{\beta_x^+ v (x_{j-1} - \alpha)^2}{2(\beta^+)^2} \right\} \\ & + O(\max_{1 \leq k \leq 3} |\gamma_{j,k}| h^3). \end{aligned}$$

onde $\omega \equiv [u]_{x=\alpha}$, e $f_j = f(\alpha) + O(h)$. Assumindo que f é uma função suave, β uma função constante por partes com um salto finito em α e $\omega = 0$, obtém-se $\beta_x^+ = \beta_x^- = 0$ e $u^+ = u^-$. Com isto, os coeficientes $\gamma_{j,k}$, com $k = 1, 2, 3$, que conduzem à segunda ordem de precisão do método, são dados pela solução do sistema

$$\begin{cases} \gamma_{j,1} + \gamma_{j,2} + \gamma_{j,3} = 0 \\ (x_{j-1} - \alpha)\gamma_{j,1} + (x_j - \alpha)\gamma_{j,2} + \frac{\beta^-}{\beta^+}(x_{j+1} - \alpha)\gamma_{j,3} = 0 \\ \frac{1}{2}(x_{j-1} - \alpha)^2 \gamma_{j,1} + \frac{1}{2}(x_j - \alpha)^2 \gamma_{j,2} + \frac{\beta^-}{2\beta^+}(x_{j+1} - \alpha)^2 \gamma_{j,3} = \beta^- \end{cases} \quad (3.8)$$

e o termo de correção é

$$C_j = \gamma_{j,3}(x_{j+1} - \alpha) \frac{v}{\beta^+}. \quad (3.9)$$

De forma análoga, pode-se calcular os coeficientes $\gamma_{j+1,k}$, $k = 1, 2, 3$, para x_{j+1} através do sistema

$$\begin{cases} \gamma_{j+1,1} + \gamma_{j+1,2} + \gamma_{j+1,3} = 0 \\ \frac{\beta^+}{\beta^-}(x_{j-1} - \alpha)\gamma_{j+1,1} + (x_{j+1} - \alpha)\gamma_{j+1,2} + (x_{j+2} - \alpha)\gamma_{j+1,3} = 0 \\ \frac{\beta^+}{2\beta^-}(x_j - \alpha)^2 \gamma_{j+1,1} + \frac{1}{2}(x_{j+1} - \alpha)^2 \gamma_{j+1,2} + \frac{1}{2}(x_{j+2} - \alpha)^2 \gamma_{j+1,3} = \beta^+ \end{cases} \quad (3.10)$$

e o novo termo de correção é

$$C_{j+1} = \gamma_{j+1,1}(\alpha - x_j) \frac{v}{\beta^-}. \quad (3.11)$$

Assim o método tem o erro global de segunda ordem de precisão na norma infinita, se β é constante então resolvendo o sistema (3.8) voltamos ao esquema padrão de diferenças finitas de 3 pontos centrais com $\gamma_{j,1} = \gamma_{j,3} = \frac{\beta}{h^2}$ e $\gamma_{j,2} = \frac{-2\beta}{h^2}$, onde h é o tamanho da malha. Por último, se $v = 0$, então $C_j = C_{j+1} = 0$, nesse caso a descontinuidade em β afeta somente os coeficientes, mas não o lado direito. A análise da estabilidade deste método e dos casos mais gerais podem ser vistas em (HUANG; LI, 1999), neste artigo tem-se o Teorema 1 que garante a estabilidade do método aqui proposto e assim sua convergência de segunda ordem.

Teorema 1. [Assumindo que $\beta^+, \beta^- > 0$ com $\sigma \equiv 0$. Se $\beta_x^+ = \beta_x^- = 0$, então o sistema (3.8) tem única solução. Para problemas mais gerais é garantida uma única solução se h for suficientemente pequeno. O teorema também se aplica quando tem-se mais de um ponto irregular]

3.3 Série de Taylor corrigida

Considere uma função $f(x)$ com uma descontinuidade no ponto $x = x_\alpha$. Deseja-se utilizar a expansão em série de Taylor no ponto x_i para aproximar $f(x)$ no ponto x_{i+1} . Assume-se que $f(x)$ é analítica em todos os pontos do domínio $D = \{x | x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1}\}$ exceto no ponto x_α onde há um salto (descontinuidade) no valor da função e/ou suas derivadas. Se $x_i < x_\alpha$ a expansão em série de Taylor padrão envolvendo x_α não pode ser usada para aproximar $f(x_{i+1})$ a menos que um termo de correção J_α seja adicionado:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f^{(1)}(x_i)h + f^{(2)}(x_i)\frac{h^2}{2!} + \cdots + J_\alpha, \quad (3.12)$$

onde

$$J_\alpha = [f]_\alpha + [f^{(1)}]_\alpha(h^+) + \frac{1}{2!}[f^{(2)}]_\alpha(h^+)^2 + \cdots, \quad (3.13)$$

com $h = x_{i+1} - x_i$ e $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$.

O termo $[\phi]_\alpha$ representa o salto no valor da função em $x = x_\alpha$, isto é,

$$[\phi]_\alpha = \lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} \phi(x) - \lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} \phi(x), \quad (3.14)$$

assim, o termo $[f]_\alpha$ representa o salto no valor da função em $x = x_\alpha$, $[f^{(1)}]_\alpha$ representa o salto no valor da primeira derivada da função e assim por diante. A equação (3.12) é denominada *série de Taylor corrigida*. A prova da existência dessa expansão é dada por (WIEGMANN; BUBE, 2000). Considere-se o caso em que $x_i < x_\alpha$. Usando o termo de correção J_α pode-se agora, modificar qualquer método de diferenças finitas, e o método corrigido pelo salto irá manter a ordem de precisão do original quando o estêncil envolver uma singularidade/salto da função.

3.3.1 Diferenças Finitas Compactas

Uma aproximação de diferenças finitas compactas de quarta ordem para a segunda derivada, feita por Fasel e Linnick em (LINNICK; FASEL, 2005), pode ser escrita como

$$L_{i-1}^2 f_{i-1}^{(2)} + L_i^2 f_i^{(2)} + L_{i+1}^2 f_{i+1}^{(2)} = R_{i-1}^2 f_{i-1} + R_i^2 f_i + R_{i+1}^2 f_{i+1} + (L_i^2 J_{\alpha 2} - R_i^2 J_{\alpha 0}), \quad (3.15)$$

onde L_i^n e R_i^n são, respectivamente, os coeficientes dos lados esquerdo e direito da aproximação para a n -ésima derivada e $J_{\alpha n}$ são as expansões dos saltos em série de Taylor de $f^{(n)}$ no ponto $x = x_\alpha$.

Nestes dois esquemas, $I = i + 1$ se o salto ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, e neste caso $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$ e

$$J_{\alpha 0} = [f^{(0)}]_\alpha + (h^+)[f^{(1)}]_\alpha + \frac{(h^+)^2}{2!}[f^{(2)}]_\alpha + \frac{(h^+)^3}{3!}[f^{(3)}]_\alpha + \frac{(h^+)^4}{4!}[f^{(4)}]_\alpha + \frac{(h^+)^5}{5!}[f^{(5)}]_\alpha, \quad (3.16)$$

$$J_{\alpha 2} = [f^{(2)}]_\alpha + (h^+)[f^{(3)}]_\alpha + \frac{(h^+)^2}{2!}[f^{(4)}]_\alpha + \frac{(h^+)^3}{3!}[f^{(5)}]_\alpha. \quad (3.17)$$

Se o salto ocorre em $x_{i-1} < x_\alpha < x_i$, então $I = i - 1$ e neste caso $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$ e

$$J_{\alpha 0}^- = [f^{(0)}]_\alpha + (h^-)[f^{(1)}]_\alpha - \frac{(h^-)^2}{2!}[f^{(2)}]_\alpha + \frac{(h^-)^3}{3!}[f^{(3)}]_\alpha - \frac{(h^-)^4}{4!}[f^{(4)}]_\alpha + \frac{(h^-)^5}{5!}[f^{(5)}]_\alpha, \quad (3.18)$$

$$J_{\alpha 2}^- = [f^{(2)}]_\alpha + (h^-)[f^{(3)}]_\alpha - \frac{(h^-)^2}{2!}[f^{(4)}]_\alpha + \frac{(h^-)^3}{3!}[f^{(5)}]_\alpha. \quad (3.19)$$

Os saltos podem ser obtidos por

$$[f^{(n)}]_\alpha = f_+^{(n)} - f_-^{(n)}, \quad (3.20)$$

onde $f_+^{(n)}$ e $f_-^{(n)}$ podem ser obtidos pelas interpolações

$$f_+^{(n)} = c_{n\alpha+} f_\alpha + c_{n_{i+2}} f_{i+2} + c_{n_{i+3}} f_{i+3} + c_{n_{i+4}} f_{i+4} + c_{n_{i+5}} f_{i+5} + c_{n_{i+6}} f_{i+6},$$

$$f_-^{(n)} = c_{n\alpha-} f_\alpha + c_{n_{i-1}} f_{i-1} + c_{n_{i-2}} f_{i-2} + c_{n_{i-3}} f_{i-3} + c_{n_{i-4}} f_{i-4} + c_{n_{i-5}} f_{i-5}.$$

Note que, os pontos x_i e x_{i+1} foram evitados para contornar problemas de instabilidade. Os coeficientes c_n para calcular

$$f_\alpha^{(n)} = c_\alpha f_\alpha + c_i f_i + c_{i+1} f_{i+1} + c_{i+2} f_{i+2} + c_{i+3} f_{i+3} + c_{i+4} f_{i+4}, \quad (3.21)$$

são obtidos da resolução do sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & h_i & h_{i+1} & h_{i+2} & h_{i+3} & h_{i+4} \\ 0 & h_i^2 & h_{i+1}^2 & h_{i+2}^2 & h_{i+3}^2 & h_{i+4}^2 \\ 0 & h_i^3 & h_{i+1}^3 & h_{i+2}^3 & h_{i+3}^3 & h_{i+4}^3 \\ 0 & h_i^4 & h_{i+1}^4 & h_{i+2}^4 & h_{i+3}^4 & h_{i+4}^4 \\ 0 & h_i^5 & h_{i+1}^5 & h_{i+2}^5 & h_{i+3}^5 & h_{i+4}^5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_\alpha \\ c_i \\ c_{i+1} \\ c_{i+2} \\ c_{i+3} \\ c_{i+4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\delta_{n0} \\ 1\delta_{n1} \\ 2!\delta_{n2} \\ 3!\delta_{n3} \\ 4!\delta_{n4} \\ 5!\delta_{n5} \end{bmatrix}, \quad (3.22)$$

em que $h_i = x_i - x_\alpha$ e δ_{ij} é a função delta de Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}. \quad (3.23)$$

Desta forma a segunda derivada pode ser obtida a partir da relação

$$\frac{1}{12}f_{i-1}^{(2)} + \frac{10}{12}f_i^{(2)} + \frac{1}{12}f_{i+1}^{(2)} = \frac{1}{h^2}f_{i-1} - \frac{2}{h^2}f_i + \frac{1}{h^2}f_{i+1} + (L_I^2 J_{\alpha 2} - R_I^2 J_{\alpha 0}), \quad (3.24)$$

em que

$$L_I^2 = \frac{1}{12} \quad \text{e} \quad R_I^2 = \frac{1}{h^2} \quad \text{se} \quad I = i - 1 \quad \text{ou} \quad I = i + 1. \quad (3.25)$$

Figura 3 – Ilustração da função $f(x)$ com descontinuidade em $x = \alpha$.

Fonte: Linnick e Fasel (2005).

Em ambos os esquemas $J_{\alpha n}$ pode ser calculado pelas equações de (3.16) ou (3.18), dependendo do valor de I . O erro de truncamento local ETL que forma a quarta ordem de precisão é dado por

$$T_i \equiv -L_{i-1}^2 f_{i-1}^{(2)} - L_i^2 f_i^{(2)} - L_{i+1}^2 f_{i+1}^{(2)} + R_{i-1}^2 f_{i-1} + R_i^2 f_i + R_{i+1}^2 f_{i+1} + (L_i^2 J_{\alpha 2} - R_i^2 J_{\alpha 0}), \quad (3.26)$$

Calculam-se 4 expressões cada uma separadamente, para depois juntá-las e obter a expressão final

$$\begin{cases} T_i & \equiv I + II + III + IV, & \text{com} \\ I & = -L_{i-1}^2 f_{i-1}^{(2)} - L_i^2 f_i^{(2)} - L_{i+1}^2 f_{i+1}^{(2)}, \\ II & = R_{i-1}^2 f_{i-1} + R_i^2 f_i + R_{i+1}^2 f_{i+1}, \\ III & = L_i^2 J_{\alpha 2} \\ IV & = -R_i^2 J_{\alpha 0} \end{cases} \quad \text{e} \quad (3.27)$$

$$I = -\frac{1}{12} \left[2(f''(x_i) + \frac{h^2}{2!} f_i^{(4)} + \frac{h^4}{4!} f_i^{(6)} + \dots) \right] - \frac{10}{12} f''(x_i) + O(h^6), \Rightarrow$$

$$I = -f_i^{(2)} - \frac{h^2}{12} f_i^{(4)} - \frac{h^4}{288} f_i^{(6)} + O(h^6) \quad (3.28)$$

$$II = -\frac{1}{h^2} \left[2(f(x_i) + \frac{h^2}{2!} f_i^{(2)} + \frac{h^4}{4!} f_i^{(4)} + \frac{h^6}{6!} f_i^{(6)} + \dots) \right] - \frac{2}{h^2} f_i + O(h^6), \Rightarrow$$

$$II = f_i^{(2)} + \frac{h^2}{12} f_i^{(4)} + \frac{h^4}{360} f_i^{(6)} + O(h^6) \quad (3.29)$$

$$III = L_I^2 \{ (f_+^{(2)} - f_-^{(2)}) + (h^+) (f_+^{(3)} - f_-^{(3)}) + \frac{(h^+)^2}{2!} (f_+^{(4)} - f_-^{(4)}) + \frac{(h^+)^3}{3!} (f_+^{(5)} - f_-^{(5)}) \}.$$

Substituindo cada $f_+^{(n)}$ e $f_-^{(n)}$ pela sua interpolação correspondente obtida através de (3.22), tem-se

$$\begin{aligned} III = L_I^2 \{ & [(c_{2_{\alpha^+}} f_{\alpha} + c_{2_{i+2}} f_{i+2} + c_{2_{i+3}} f_{i+3} + c_{2_{i+4}} f_{i+4} + c_{2_{i+5}} f_{i+5} + c_{2_{i+6}} f_{i+6}) \\ & - (c_{2_{\alpha^-}} f_{\alpha} + c_{2_{i-1}} f_{i-1} + c_{2_{i-2}} f_{i-2} + c_{2_{i-3}} f_{i-3} + c_{2_{i-4}} f_{i-4} + c_{2_{i-5}} f_{i-5})] \\ & + (h^+) [(c_{3_{\alpha^+}} f_{\alpha} + c_{3_{i+2}} f_{i+2} + c_{3_{i+3}} f_{i+3} + c_{3_{i+4}} f_{i+4} + c_{3_{i+5}} f_{i+5} + c_{3_{i+6}} f_{i+6}) \\ & - (c_{3_{\alpha^-}} f_{\alpha} + c_{3_{i-1}} f_{i-1} + c_{3_{i-2}} f_{i-2} + c_{3_{i-3}} f_{i-3} + c_{3_{i-4}} f_{i-4} + c_{3_{i-5}} f_{i-5})] \\ & + \frac{(h^+)^2}{2!} [(c_{4_{\alpha^+}} f_{\alpha} + c_{4_{i+2}} f_{i+2} + c_{4_{i+3}} f_{i+3} + c_{4_{i+4}} f_{i+4} + c_{4_{i+5}} f_{i+5} + c_{4_{i+6}} f_{i+6}) \\ & - (c_{4_{\alpha^-}} f_{\alpha} + c_{4_{i-1}} f_{i-1} + c_{4_{i-2}} f_{i-2} + c_{4_{i-3}} f_{i-3} + c_{4_{i-4}} f_{i-4} + c_{4_{i-5}} f_{i-5})] \\ & + \frac{(h^+)^3}{3!} [(c_{5_{\alpha^+}} f_{\alpha} + c_{5_{i+2}} f_{i+2} + c_{5_{i+3}} f_{i+3} + c_{5_{i+4}} f_{i+4} + c_{5_{i+5}} f_{i+5} + c_{5_{i+6}} f_{i+6}) \\ & - (c_{5_{\alpha^-}} f_{\alpha} + c_{5_{i-1}} f_{i-1} + c_{5_{i-2}} f_{i-2} + c_{5_{i-3}} f_{i-3} + c_{5_{i-4}} f_{i-4} + c_{5_{i-5}} f_{i-5})] \}. \end{aligned}$$

Fazendo o desenvolvimento em series de Taylor para f_{i+k} e f_{i-k} ao redor de f_{α} , obtém-se as expressões

$$f_{i+k} = f_{\alpha} + h_{i+k} f'_i + \frac{h_{i+k}^2}{2!} f_i^{(2)} + \frac{h_{i+k}^3}{3!} f_i^{(3)} + \frac{h_{i+k}^4}{4!} f_i^{(4)} + \frac{h_{i+k}^5}{5!} f_i^{(5)} + O(h^6), \quad (3.30)$$

$$f_{i-k} = f_{\alpha} + h_{i-k} f'_i + \frac{h_{i-k}^2}{2!} f_i^{(2)} + \frac{h_{i-k}^3}{3!} f_i^{(3)} + \frac{h_{i-k}^4}{4!} f_i^{(4)} + \frac{h_{i-k}^5}{5!} f_i^{(5)} + O(h^6), \quad (3.31)$$

é considerada a seguinte notação para simplificar as contas

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{2_{\alpha^+}} + c_{3_{\alpha^+}} + c_{4_{\alpha^+}} + c_{5_{\alpha^+}} = T_1 \\ c_{2_{i+k}} + (h^+) c_{3_{i+k}} + \frac{(h^+)^2}{2!} c_{4_{i+k}} + \frac{(h^+)^3}{3!} c_{5_{i+k}} = T_k, \quad k = 2, \dots, 6 \\ c_{2_{\alpha^-}} + c_{3_{\alpha^-}} + c_{4_{\alpha^-}} + c_{5_{\alpha^-}} = P_1 \\ c_{2_{i-r}} + (h^+) c_{3_{i-r}} + \frac{(h^+)^2}{2!} c_{4_{i-r}} + \frac{(h^+)^3}{3!} c_{5_{i-r}} = P_{r+1}, \quad r = 1, \dots, 5 \end{array} \right. \quad (3.32)$$

Figura 4 – Ilustração da discretização do domínio na descontinuidade

Fonte: Linnick e Fasel (2005).

Substituindo (3.30), (3.31) e (3.32) na expressão (III) e reagrupando os coeficientes de cada uma das $f_i^{(n)}$ para obter a constante total de cada soma, tem-se

$$\begin{aligned}
 III = & L_I^2 \{ [(T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5 + T_6) - (P_1 + P_2 + P_3 + P_4 + P_5 + P_6)] f_\alpha \\
 & + f'_i [(T_2 \cdot h_{i+2} + T_3 \cdot h_{i+3} + T_4 \cdot h_{i+4} + T_5 \cdot h_{i+5} + T_6 \cdot h_{i+6}) \\
 & - (P_2 \cdot h_{i-1} + P_3 \cdot h_{i-2} + P_4 \cdot h_{i-3} + P_5 \cdot h_{i-4} + P_6 \cdot h_{i-5})] \\
 & + \frac{f_i^{(2)}}{2!} [(T_2 \cdot h_{i+2}^2 + T_3 \cdot h_{i+3}^2 + T_4 \cdot h_{i+4}^2 + T_5 \cdot h_{i+5}^2 + T_6 \cdot h_{i+6}^2) \\
 & - (P_2 \cdot h_{i-1}^2 + P_3 \cdot h_{i-2}^2 + P_4 \cdot h_{i-3}^2 + P_5 \cdot h_{i-4}^2 + P_6 \cdot h_{i-5}^2)] \\
 & + \frac{f_i^{(3)}}{3!} [(T_2 \cdot h_{i+2}^3 + T_3 \cdot h_{i+3}^3 + T_4 \cdot h_{i+4}^3 + T_5 \cdot h_{i+5}^3 + T_6 \cdot h_{i+6}^3) \\
 & - (P_2 \cdot h_{i-1}^3 + P_3 \cdot h_{i-2}^3 + P_4 \cdot h_{i-3}^3 + P_5 \cdot h_{i-4}^3 + P_6 \cdot h_{i-5}^3)] \\
 & + \frac{f_i^{(4)}}{4!} [(T_2 \cdot h_{i+2}^4 + T_3 \cdot h_{i+3}^4 + T_4 \cdot h_{i+4}^4 + T_5 \cdot h_{i+5}^4 + T_6 \cdot h_{i+6}^4) \\
 & - (P_2 \cdot h_{i-1}^4 + P_3 \cdot h_{i-2}^4 + P_4 \cdot h_{i-3}^4 + P_5 \cdot h_{i-4}^4 + P_6 \cdot h_{i-5}^4)] \\
 & + \frac{f_i^{(5)}}{5!} [(T_2 \cdot h_{i+2}^5 + T_3 \cdot h_{i+3}^5 + T_4 \cdot h_{i+4}^5 + T_5 \cdot h_{i+5}^5 + T_6 \cdot h_{i+6}^5) \\
 & - (P_2 \cdot h_{i-1}^5 + P_3 \cdot h_{i-2}^5 + P_4 \cdot h_{i-3}^5 + P_5 \cdot h_{i-4}^5 + P_6 \cdot h_{i-5}^5)] \\
 & + \frac{f_i^{(6)}}{6!} [(T_2 \cdot h_{i+2}^6 + T_3 \cdot h_{i+3}^6 + T_4 \cdot h_{i+4}^6 + T_5 \cdot h_{i+5}^6 + T_6 \cdot h_{i+6}^6) \\
 & - (P_2 \cdot h_{i-1}^6 + P_3 \cdot h_{i-2}^6 + P_4 \cdot h_{i-3}^6 + P_5 \cdot h_{i-4}^6 + P_6 \cdot h_{i-5}^6)] \}.
 \end{aligned}$$

Desenvolvendo cada uma das contas obtém-se

$$\begin{aligned}
T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5 + T_6 &= 0 \\
P_1 + P_2 + P_3 + P_4 + P_5 + P_6 &= 0 \\
T_2.h_{i+2} + T_3.h_{i+3} + T_4.h_{i+4} + T_5.h_{i+5} + T_6.h_{i+6} &= 0 \\
P_2.h_{i-1} + P_3.h_{i-2} + P_4.h_{i-3} + P_5.h_{i-4} + P_6.h_{i-5} &= 0 \\
T_2.h_{i+2}^2 + T_3.h_{i+3}^2 + T_4.h_{i+4}^2 + T_5.h_{i+5}^2 + T_6.h_{i+6}^2 &= 1 \\
P_2.h_{i-1}^2 + P_3.h_{i-2}^2 + P_4.h_{i-3}^2 + P_5.h_{i-4}^2 + P_6.h_{i-5}^2 &= 1 \\
T_2.h_{i+2}^3 + T_3.h_{i+3}^3 + T_4.h_{i+4}^3 + T_5.h_{i+5}^3 + T_6.h_{i+6}^3 &= h^+ \\
P_2.h_{i-1}^3 + P_3.h_{i-2}^3 + P_4.h_{i-3}^3 + P_5.h_{i-4}^3 + P_6.h_{i-5}^3 &= h^+ \\
T_2.h_{i+2}^4 + T_3.h_{i+3}^4 + T_4.h_{i+4}^4 + T_5.h_{i+5}^4 + T_6.h_{i+6}^4 &= \frac{(h^+)^2}{2!} \\
P_2.h_{i-1}^4 + P_3.h_{i-2}^4 + P_4.h_{i-3}^4 + P_5.h_{i-4}^4 + P_6.h_{i-5}^4 &= \frac{(h^+)^2}{2!} \\
T_2.h_{i+2}^5 + T_3.h_{i+3}^5 + T_4.h_{i+4}^5 + T_5.h_{i+5}^5 + T_6.h_{i+6}^5 &= \frac{(h^+)^3}{3!} \\
P_2.h_{i-1}^5 + P_3.h_{i-2}^5 + P_4.h_{i-3}^5 + P_5.h_{i-4}^5 + P_6.h_{i-5}^5 &= \frac{(h^+)^3}{3!} \\
T_2.h_{i+2}^6 + T_3.h_{i+3}^6 + T_4.h_{i+4}^6 + T_5.h_{i+5}^6 + T_6.h_{i+6}^6 &= -274h^4 - 225(h^3).h^+ - \frac{85.h^2.(h^+)^2}{2} \\
&\quad + \frac{5.h.(h^+)^3}{2} + \frac{5(h^+)^4}{6} \\
P_2.h_{i-1}^6 + P_3.h_{i-2}^6 + P_4.h_{i-3}^6 + P_5.h_{i-4}^6 + P_6.h_{i-5}^6 &= -1044h^4 + 580(h^3).h^+ - \frac{155.h^2.(h^+)^2}{2} \\
&\quad - \frac{10.h.(h^+)^3}{3} + \frac{5(h^+)^4}{6}
\end{aligned}$$

Substituindo cada soma pelo seu valor correspondente, tem-se

$$III = \frac{L_I^2 \cdot f_i^{(6)}}{6!} \{ 770h^4 - 805(h^3).h^+ + 35.h^2.(h^+)^2 + \frac{35.h.(h^+)^3}{6} \}. \quad (3.33)$$

Utiliza-se a mesma estratégia para calcular a última expressão do *ETL*, só que agora tem-se dois termos a mais no somatório

$$IV = -R_I^2 \cdot J_{\alpha 0} = -R_I^2 \cdot \sum_{k=0}^5 \frac{(h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_{\alpha},$$

Novamente utiliza-se as expressões do desenvolvimento de Taylor (3.30) e (3.31), e, também,

considera-se os seguintes novos coeficientes para simplificar as contas

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{0_{\alpha^+}} + c_{1_{\alpha^+}} + c_{2_{\alpha^+}} + c_{3_{\alpha^+}} + c_{4_{\alpha^+}} + c_{5_{\alpha^+}} = L_1 \\ c_{0_{i+k}} + (h^+)c_{1_{i+k}} + \frac{(h^+)^2}{2!}c_{2_{i+k}} + \frac{(h^+)^3}{3!}c_{3_{i+k}} \\ + \frac{(h^+)^4}{4!}c_{4_{i+k}} + \frac{(h^+)^5}{5!}c_{5_{i+k}} = L_k, \quad k = 2, \dots, 6 \\ c_{0_{\alpha^-}} + c_{1_{\alpha^-}} + c_{2_{\alpha^-}} + c_{3_{\alpha^-}} + c_{4_{\alpha^-}} + c_{5_{\alpha^-}} = R_1 \\ c_{0_{i-s}} + (h^+)c_{1_{i-s}} + \frac{(h^+)^2}{2!}c_{2_{i-s}} + \frac{(h^+)^3}{3!}c_{3_{i-s}} \\ + \frac{(h^+)^4}{4!}c_{4_{i-s}} + \frac{(h^+)^5}{5!}c_{5_{i-s}} = R_s, \quad s = 1, \dots, 5 \end{array} \right. \quad (3.34)$$

reagrupando de novo os coeficientes de cada uma das $f_i^{(n)}$ para obter a constante total de cada soma, tem-se

$$\begin{aligned} IV = & -R_7^2 \{ [(L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6) - (R_1 + R_2 + R_3 + R_4 + R_5 + R_6)] f_\alpha \\ & + f'_i [(L_2 \cdot h_{i+2} + L_3 \cdot h_{i+3} + L_4 \cdot h_{i+4} + L_5 \cdot h_{i+5} + L_6 \cdot h_{i+6}) \\ & - (R_2 \cdot h_{i-1} + R_3 \cdot h_{i-2} + R_4 \cdot h_{i-3} + R_5 \cdot h_{i-4} + R_6 \cdot h_{i-5})] \\ & + \frac{f_i^{(2)}}{2!} [(L_2 \cdot h_{i+2}^2 + L_3 \cdot h_{i+3}^2 + L_4 \cdot h_{i+4}^2 + L_5 \cdot h_{i+5}^2 + L_6 \cdot h_{i+6}^2) \\ & - (R_2 \cdot h_{i-1}^2 + R_3 \cdot h_{i-2}^2 + R_4 \cdot h_{i-3}^2 + R_5 \cdot h_{i-4}^2 + R_6 \cdot h_{i-5}^2)] \\ & + \frac{f_i^{(3)}}{3!} [(L_2 \cdot h_{i+2}^3 + L_3 \cdot h_{i+3}^3 + L_4 \cdot h_{i+4}^3 + L_5 \cdot h_{i+5}^3 + L_6 \cdot h_{i+6}^3) \\ & - (R_2 \cdot h_{i-1}^3 + R_3 \cdot h_{i-2}^3 + R_4 \cdot h_{i-3}^3 + R_5 \cdot h_{i-4}^3 + R_6 \cdot h_{i-5}^3)] \\ & + \frac{f_i^{(4)}}{4!} [(L_2 \cdot h_{i+2}^4 + L_3 \cdot h_{i+3}^4 + L_4 \cdot h_{i+4}^4 + L_5 \cdot h_{i+5}^4 + L_6 \cdot h_{i+6}^4) \\ & - (R_2 \cdot h_{i-1}^4 + R_3 \cdot h_{i-2}^4 + R_4 \cdot h_{i-3}^4 + R_5 \cdot h_{i-4}^4 + R_6 \cdot h_{i-5}^4)] \\ & + \frac{f_i^{(5)}}{5!} [(L_2 \cdot h_{i+2}^5 + L_3 \cdot h_{i+3}^5 + L_4 \cdot h_{i+4}^5 + L_5 \cdot h_{i+5}^5 + L_6 \cdot h_{i+6}^5) \\ & - (R_2 \cdot h_{i-1}^5 + R_3 \cdot h_{i-2}^5 + R_4 \cdot h_{i-3}^5 + R_5 \cdot h_{i-4}^5 + R_6 \cdot h_{i-5}^5)] \\ & + \frac{f_i^{(6)}}{6!} [(L_2 \cdot h_{i+2}^6 + L_3 \cdot h_{i+3}^6 + L_4 \cdot h_{i+4}^6 + L_5 \cdot h_{i+5}^6 + L_6 \cdot h_{i+6}^6) \\ & - (R_2 \cdot h_{i-1}^6 + R_3 \cdot h_{i-2}^6 + R_4 \cdot h_{i-3}^6 + R_5 \cdot h_{i-4}^6 + R_6 \cdot h_{i-5}^6)] \}. \end{aligned}$$

Desenvolvendo cada uma das novas contas obtém-se

$$\begin{aligned}
L_1 + L_2 + L_3 + L_4 + L_5 + L_6 &= 1 \\
R_1 + R_2 + R_3 + R_4 + R_5 + R_6 &= 1 \\
L_2.h_{i+2} + L_3.h_{i+3} + L_4.h_{i+4} + L_5.h_{i+5} + L_6.h_{i+6} &= h^+ \\
R_2.h_{i-1} + R_3.h_{i-2} + R_4.h_{i-3} + R_5.h_{i-4} + R_6.h_{i-5} &= h^+ \\
L_2.h_{i+2}^2 + L_3.h_{i+3}^2 + L_4.h_{i+4}^2 + L_5.h_{i+5}^2 + L_6.h_{i+6}^2 &= \frac{(h^+)^2}{2!} \\
R_2.h_{i-1}^2 + R_3.h_{i-2}^2 + R_4.h_{i-3}^2 + R_5.h_{i-4}^2 + R_6.h_{i-5}^2 &= \frac{(h^+)^2}{2!} \\
L_2.h_{i+2}^3 + L_3.h_{i+3}^3 + L_4.h_{i+4}^3 + L_5.h_{i+5}^3 + L_6.h_{i+6}^3 &= \frac{(h^+)^3}{3!} \\
R_2.h_{i-1}^3 + R_3.h_{i-2}^3 + R_4.h_{i-3}^3 + R_5.h_{i-4}^3 + R_6.h_{i-5}^3 &= \frac{(h^+)^3}{3!} \\
L_2.h_{i+2}^4 + L_3.h_{i+3}^4 + L_4.h_{i+4}^4 + L_5.h_{i+5}^4 + L_6.h_{i+6}^4 &= \frac{(h^+)^4}{4!} \\
R_2.h_{i-1}^4 + R_3.h_{i-2}^4 + R_4.h_{i-3}^4 + R_5.h_{i-4}^4 + R_6.h_{i-5}^4 &= \frac{(h^+)^4}{4!} \\
L_2.h_{i+2}^5 + L_3.h_{i+3}^5 + L_4.h_{i+4}^5 + L_5.h_{i+5}^5 + L_6.h_{i+6}^5 &= \frac{(h^+)^5}{5!} \\
R_2.h_{i-1}^5 + R_3.h_{i-2}^5 + R_4.h_{i-3}^5 + R_5.h_{i-4}^5 + R_6.h_{i-5}^5 &= \frac{(h^+)^5}{5!} \\
L_2.h_{i+2}^6 + L_3.h_{i+3}^6 + L_4.h_{i+4}^6 + L_5.h_{i+5}^6 + L_6.h_{i+6}^6 &= -\frac{h^+}{24}[-2880.h^5 - 3288(h^4).h^+ - 900.h^3.(h^+)^2 \\
&\quad + 85.(h^2).(h^+)^3 + 57.h.(h^+)^4 + 5.(h^+)^5] \\
R_2.h_{i-1}^6 + R_3.h_{i-2}^6 + R_4.h_{i-3}^6 + R_5.h_{i-4}^6 + R_6.h_{i-5}^6 &= -\frac{h^+}{24}[17280.h^5 - 12528(h^4).h^+ + 2320.h^3.(h^+)^2 \\
&\quad + 155.(h^2).(h^+)^3 - 76.h.(h^+)^4 + 5.(h^+)^5]
\end{aligned}$$

Substituindo cada nova soma por seu valor correspondente, tem-se

$$IV = -\frac{7.h.h^+.R_I^2.f_i^{(6)}}{24.6!}\{2880h^4 - 1320(h^3).h^+ + 460.h^2.(h^+)^2 + 10.h.(h^+)^3 - 19.(h^+)^4\}. \quad (3.35)$$

Agora são substituídas as expressões (3.28), (3.29), (3.33) e (3.35) no ETL (3.27)

$$T_i \equiv \left(\frac{-1}{128} + \frac{1}{360}\right).h^4 + \frac{1}{720}[L_I^2.(III) - R_I^2.(IV)]$$

Se $L_I^2 = \frac{1}{h^2}$, $R_I^2 = \frac{1}{12}$ e $h^+ = \beta.h$ com $0 < \beta \leq 1$, tem-se

$$T_i \equiv \left(\frac{-399.\beta^5 + 210.\beta^4 + 9625.\beta^3 - 27930.\beta^2 + 65310.\beta - 4584}{51840}\right).h^4 + O(h^6) \quad (3.36)$$

de forma análoga se faz o ETL para o ponto $I = i + 1$.

3.3.2 Esquema Compacto de Alta Ordem

Nós propomos um esquema de diferenças finitas compactas unidimensional de sétima ordem com cinco pontos será utilizado para aproximar numericamente a segunda derivada espacial, o esquema é dado por

$$2f_{i-1}^{(2)} + 11f_i^{(2)} + 2f_{i+1}^{(2)} = \frac{3}{4h^2}f_{i-2} + \frac{12}{h^2}f_{i-1} - \frac{51}{2h^2}f_i + \frac{12}{h^2}f_{i+1} + \frac{3}{4h^2}f_{i+2} + C_I, \quad (3.37)$$

com $C_I = (L_I^1 J_{\alpha 2}^* - R_I^1 J_{\alpha 0}^*) + (L_I^2 J_{\alpha 2} - R_I^2 J_{\alpha 0})$, em que

$$\begin{cases} L_I^1 = 0 & L_I^2 = 0 & R_I^1 = 0 & \text{e} & R_I^2 = \frac{3}{4h^2} & \text{se } I = i-1 \text{ ou } I = i+2, \\ L_I^1 = 0 & L_I^2 = 2 & R_I^1 = \frac{3}{4h^2} & \text{e} & R_I^2 = \frac{12}{h^2} & \text{se } I = i \text{ ou } I = i+1, \end{cases} \quad (3.38)$$

Nestes esquemas, o salto ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, então quando $I = i+1$ ou $I = i+2$, nestes casos $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$, definimos

$$J_{\alpha 0} = \sum_{k=0}^7 \frac{(h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (3.39)$$

$$J_{\alpha 2} = \sum_{k=2}^7 \frac{(h^+)^{k-2}}{(k-2)!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (3.40)$$

$$J_{\alpha 0}^* = \sum_{k=0}^7 \frac{(h+h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (3.41)$$

$$J_{\alpha 2}^* = \sum_{k=2}^7 \frac{(h+h^+)^{k-2}}{(k-2)!} [f^{(k)}]_\alpha. \quad (3.42)$$

quando $I = i$ ou $I = i-1$, nestes casos $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$ e

$$J_{\alpha 0} = \sum_{k=0}^7 (-1)^{k+1} \frac{(h^-)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (3.43)$$

$$J_{\alpha 2} = \sum_{k=2}^7 (-1)^{k+1} \frac{(h^-)^{k-2}}{(k-2)!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (3.44)$$

$$J_{\alpha 0}^* = \sum_{k=0}^7 (-1)^{k+1} \frac{(h+h^-)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (3.45)$$

$$J_{\alpha 2}^* = \sum_{k=2}^7 (-1)^{k+1} \frac{(h+h^-)^{k-2}}{(k-2)!} [f^{(k)}]_\alpha. \quad (3.46)$$

De novo os saltos podem ser obtidos por

$$[f^{(n)}]_\alpha = f_+^{(n)} - f_-^{(n)}, \quad (3.47)$$

em que $f_+^{(n)}$ e $f_-^{(n)}$ podem ser obtidos pelas interpolações

$$f_+^{(n)} = c_{n_\alpha} f_\alpha + c_{n_{i+2}} f_{i+2} + c_{n_{i+3}} f_{i+3} + c_{n_{i+4}} f_{i+4} + c_{n_{i+5}} f_{i+5} + c_{n_{i+6}} f_{i+6} + c_{n_{i+7}} f_{i+7} + c_{n_{i+8}} f_{i+8},$$

$$f_-^{(n)} = c_{n_\alpha} f_\alpha + c_{n_{i-1}} f_{i-1} + c_{n_{i-2}} f_{i-2} + c_{n_{i-3}} f_{i-3} + c_{n_{i-4}} f_{i-4} + c_{n_{i-5}} f_{i-5} + c_{n_{i-6}} f_{i-6} + c_{n_{i-7}} f_{i-7}.$$

Os novos coeficientes c_n para calcular

$$f_\alpha^{(n)} = c_\alpha f_\alpha + c_i f_i + c_{i+1} f_{i+1} + c_{i+2} f_{i+2} + c_{i+3} f_{i+3} + c_{i+4} f_{i+4} + c_{i+5} f_{i+5} + c_{i+6} f_{i+6}, \quad (3.48)$$

são obtidos da resolução do novo sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & h_i & h_{i+1} & h_{i+2} & h_{i+3} & h_{i+4} & h_{i+5} & h_{i+6} \\ 0 & h_i^2 & h_{i+1}^2 & h_{i+2}^2 & h_{i+3}^2 & h_{i+4}^2 & h_{i+5}^2 & h_{i+6}^2 \\ 0 & h_i^3 & h_{i+1}^3 & h_{i+2}^3 & h_{i+3}^3 & h_{i+4}^3 & h_{i+5}^3 & h_{i+6}^3 \\ 0 & h_i^4 & h_{i+1}^4 & h_{i+2}^4 & h_{i+3}^4 & h_{i+4}^4 & h_{i+5}^4 & h_{i+6}^4 \\ 0 & h_i^5 & h_{i+1}^5 & h_{i+2}^5 & h_{i+3}^5 & h_{i+4}^5 & h_{i+5}^5 & h_{i+6}^5 \\ 0 & h_i^6 & h_{i+1}^6 & h_{i+2}^6 & h_{i+3}^6 & h_{i+4}^6 & h_{i+5}^6 & h_{i+6}^6 \\ 0 & h_i^7 & h_{i+1}^7 & h_{i+2}^7 & h_{i+3}^7 & h_{i+4}^7 & h_{i+5}^7 & h_{i+6}^7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_\alpha \\ c_i \\ c_{i+1} \\ c_{i+2} \\ c_{i+3} \\ c_{i+4} \\ c_{i+5} \\ c_{i+6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\delta_{n0} \\ 1\delta_{n1} \\ 2!\delta_{n2} \\ 3!\delta_{n3} \\ 4!\delta_{n4} \\ 5!\delta_{n5} \\ 6!\delta_{n6} \\ 7!\delta_{n7} \end{bmatrix}, \quad (3.49)$$

em que $h_i = x_i - x_\alpha$ e δ_{ij} é a função delta de Kronecker.

Os termos dos saltos $J_{\alpha n}$ novamente podem ser calculado pelas equações de (3.39) ou (3.43), dependendo do valor de I só que agora deve-se aumentar duas linhas e duas colunas no esquema anterior para completar a submatriz de Vandermonde como pode-se ver em (3.49).

Agora é determinado o erro de truncamento

$$T_i = -2f_{i-1}^{(2)} - 11f_i^{(2)} - 2f_{i+1}^{(2)} + \frac{3}{4h^2}f_{i-2} + \frac{12}{h^2}f_{i-1} - \frac{51}{2h^2}f_i + \frac{12}{h^2}f_{i+1} + \frac{3}{4h^2}f_{i+2} + C_i, \quad (3.50)$$

$$\begin{cases} T_i & \equiv I + II + III, \\ I & = -2f_{i-1}^{(2)} - 11f_i^{(2)} - 2f_{i+1}^{(2)}, \\ II & = \frac{3}{4h^2}f_{i-2} + \frac{12}{h^2}f_{i-1} - \frac{51}{2h^2}f_i + \frac{12}{h^2}f_{i+1} + \frac{3}{4h^2}f_{i+2} \\ III & = C_i = -R_i^1 J_{\alpha 0}^* + L_i^2 J_{\alpha 2} - R_i^2 J_{\alpha 0} \end{cases} \quad \text{com} \quad (3.51)$$

$$I = -15f_i^{(2)} - 2h^2f_i^{(4)} - \frac{h^4}{6}f_i^{(6)} - \frac{h^6}{180}f_i^{(8)} + O(h^8), \quad (3.52)$$

$$II = 15f_i^{(2)} + 2h^2f_i^{(4)} + \frac{h^4}{6}f_i^{(6)} + \frac{17h^6}{1680}f_i^{(6)} + O(h^8) \quad (3.53)$$

Para calcular (III) são utilizadas as seguintes notações

$$J_{\alpha 0}^* = \sum_{s=1}^8 (l_s - r_s) f_\alpha + \sum_{k=1}^8 \sum_{m=1}^7 (l_{m+1} h_{i+m+1}^k - r_{m+1} h_{i-m}^k) \frac{f_i^{(k)}}{k!}, \quad (3.54)$$

$$J_{\alpha 2} = \sum_{s=1}^8 (T_s - P_s) f_{\alpha} + \sum_{k=1}^8 \sum_{m=1}^7 (T_{m+1} h_{i+m+1}^k - P_{m+1} h_{i-m}^k) \frac{f_i^{(k)}}{k!}, \quad (3.55)$$

$$J_{\alpha 0} = \sum_{s=1}^8 (L_s - R_s) f_{\alpha} + \sum_{k=1}^8 \sum_{m=1}^7 (L_{m+1} h_{i+m+1}^k - R_{m+1} h_{i-m}^k) \frac{f_i^{(k)}}{k!}, \quad (3.56)$$

onde

$$\begin{cases} l_1 = \sum_{q=0}^7 c_{q_{\alpha^+}}, \\ l_k = \sum_{q=0}^7 \frac{(h+h^+)^q}{q!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 8 \end{cases} \quad (3.57)$$

$$\begin{cases} r_1 = \sum_{q=0}^7 c_{q_{\alpha^-}}, \\ r_{s+1} = \sum_{q=0}^7 \frac{(h+h^+)^q}{q!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 7 \end{cases} \quad (3.58)$$

$$\begin{cases} T_1 = \sum_{q=2}^7 c_{q_{\alpha^+}}, \\ T_k = \sum_{q=2}^7 \frac{(h^+)^{q-2}}{(q-2)!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 8 \end{cases} \quad (3.59)$$

$$\begin{cases} P_1 = \sum_{q=2}^7 c_{q_{\alpha^-}}, \\ P_{s+1} = \sum_{q=2}^7 \frac{(h^+)^{q-2}}{(q-2)!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 7 \end{cases} \quad (3.60)$$

$$\begin{cases} L_1 = \sum_{q=0}^7 c_{q_{\alpha^+}}, \\ L_k = \sum_{q=0}^7 \frac{(h^+)^q}{q!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 8 \end{cases} \quad (3.61)$$

$$\begin{cases} R_1 = \sum_{q=0}^7 c_{q_{\alpha^-}}, \\ R_{s+1} = \sum_{q=0}^7 \frac{(h^+)^q}{q!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 7 \end{cases} \quad (3.62)$$

Estas fórmulas são equivalentes às (3.34) e (3.32), porém descritas de forma simplificada e com dois termos a mais em cada somatório, calculando cada uma das somas e substituindo em (III), tem-se

$$\begin{aligned} C_i = & -R_i^1 \sum_{m=1}^7 (l_{m+1} h_{i+m+1}^8 - r_{m+1} h_{i-m}^8) \frac{f_i^{(8)}}{8!} + L_i^2 \sum_{m=1}^7 (T_{m+1} h_{i+m+1}^8 - P_{m+1} h_{i-m}^8) \frac{f_i^{(8)}}{8!} \\ & - R_i^2 \sum_{m=1}^7 (L_{m+1} h_{i+m+1}^8 - R_{m+1} h_{i-m}^8) \frac{f_i^{(8)}}{8!} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_i = & (2.h^2.(56196.h^6 - 123984.h^5(h^+) + 61992.h^5 + 34965.h^4(h^+)^2 - 23310.h^4(h^+) \\
& - 23940.h^3(h^+)^3 + (29925.h^3(h^+)^2)/2 + (63.h^2(h^+)^5)/40 + 945.h^2(h^+)^4 \\
& - 441.h^2(h^+)^3 - (63.h(h^+)^6)/20 - 378.h(h^+)^5 + (777.h(h^+)^4)/8) \\
& - (h^+.(29030400.h^7 - 24935040.h^6(h^+) + 17589600.h^5(h^+) + 6632640.h^4(h^+)^3 \\
& - 17687040.h^4(h^+)^2 - 2898000.h^3(h^+)^4 + 6882750.h^3(h^+)^3 + 73.h^2(h^+)^6 \\
& + 551880.h^2(h^+)^5 - 1299984.h^2(h^+)^4 - 30.h(h^+)^7 - 50400.h(h^+)^6 + 119525.h(h^+)^5 \\
& + 3(h^+)^8 + 1800(h^+)^7 - 4291(h^+)^6))/960 - (159159.h(h^+)^6)/80 \\
& - (20402543.h^6(h^+))/60 + 810.h(h^+)^7 + 98700.h^7(h^+) + (7.h(h^+)^8)/40 \\
& - (481.h^8(h^+))/60 - (19924331.h^7)/60 - 899424.h^8 - (73.h^9)/60 + (4291(h^+)^7)/64 \\
& - (225(h^+)^8)/8 - (3(h^+)^9)/64 + (355327.h^2(h^+)^5)/20 - (249095.h^3(h^+)^4)/3 \\
& + (1133713.h^4(h^+)^3)/12 + (3769437.h^5(h^+)^2)/20 - (27111.h^2(h^+)^6)/4 \\
& + 26502.h^3(h^+)^5 + (172515.h^4(h^+)^4)/8 - 345576.h^5(h^+)^3 + (1330743.h^6(h^+)^2)/2 \\
& + (41.h^2(h^+)^7)/32 + (7.h^3(h^+)^6)/30 - (49.h^4(h^+)^5)/5 - (392.h^5(h^+)^4)/15 \\
& - (973.h^6(h^+)^3)/30 - (221.h^7(h^+)^2)/10 + ((h+h^+)^2.(46.h^7 + 254.h^6(h^+) \\
& + 1075680.h^6 + 583.h^5(h^+)^2 + 3674880.h^5(h^+) - 3972136.h^5 + 715.h^4(h^+)^3 \\
& + 3635640.h^4(h^+)^2 - 5716655.h^4(h^+) + 500.h^3(h^+)^4 + 1623600.h^3(h^+)^3 \\
& - 3065650.h^3(h^+)^2 + 196.h^2(h^+)^5 + 367200.h^2(h^+)^4 - 774970.h^2(h^+)^3 \\
& + 39.h(h^+)^6 + 41040.h(h^+)^5 - 93170.h(h^+)^4 + 3(h^+)^7 + 1800(h^+)^6 \\
& - 4291(h^+)^5))/60). \frac{f_i^{(8)}}{h^2.8!} \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_i = & ((3.h.(-48.h^8 - 240.h^7(h^+) - 82037760.h^7 - 336.h^6(h^+)^2 - 8789760.h^6(h^+) \\
& - 29257648.h^6 + 336.h^5(h^+)^3 + 102644640.h^5(h^+)^2 - 65530080.h^5(h^+) \\
& + 1680.h^4(h^+)^4 - 19622400.h^4(h^+)^3 - 11496240.h^4(h^+)^2 + 2688.h^3(h^+)^5 \\
& + 14653800.h^3(h^+)^4 - 10492160.h^3(h^+)^3 + 1008.h^2(h^+)^6 + 7333200.h^2(h^+)^5 \\
& - 17971870.h^2(h^+)^4 + 621.h(h^+)^7 + 17640.h(h^+)^6 + 322896.h(h^+)^5 \\
& + 102(h^+)^8 + 171360(h^+)^7 - 406385(h^+)^6))/320). \frac{f_i^{(8)}}{h^2.8!} \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$C_i = (K1.h^5 + K2.h^6 + K3.h^7)f_i^{(8)} + O(h^8), \quad (3.63)$$

substituindo as expressões (3.52), (3.53) e (4.31) em (3.50), obtém-se

$$T_i = (K1.h^5 + (K2 + \frac{23}{5040})h^6 + K3.h^7)f_i^{(8)} + O(h^8), \quad (3.64)$$

Então o esquema compacto da parte contínua da discretização dos pontos regulares é de sexta ordem mas multiplicado por coeficiente $23/5040$ e o termo de correção é de quinta ordem mas com um coeficiente $K1$ e o coeficiente de sexta ordem é $K2$, os quais são suficientemente pequenos.

De forma análoga pode-se obter o ETL para os pontos $I = i - 1$, $I = i + 1$ e $I = i + 2$. Para os pontos que ficam próximos à borda adota-se as seguintes discretizações

$$13f_1^{(2)} + 137f_2^{(2)} = \frac{9775f_1 - 20285f_2 + 11170f_3 - 550f_4 - 145f_5 + 35f_6}{60h^2} + O(h^5), \quad (3.65)$$

$$f_1^{(2)} + 12f_2^{(2)} + 3f_3^{(2)} = \frac{4834f_1 - 8424f_2 + 1890f_3 + 2320f_4 - 810f_5 + 216f_6 - 26f_7}{360h^2} + O(h^6), \quad (3.66)$$

$$f_N^{(2)} + 12f_{N-1}^{(2)} + 3f_{N-2}^{(2)} = \frac{4834f_N - 8424f_{N-1} + 1890f_{N-2} + 2320f_{N-3} - 810f_{N-4} + 216f_{N-5} - 26f_{N-6}}{360h^2}, \quad (3.67)$$

$$13f_N^{(2)} + 137f_{N-1}^{(2)} = \frac{9775f_N - 20285f_{N-1} + 11170f_{N-2} - 550f_{N-3} - 145f_{N-4} + 35f_{N-5}}{60h^2}. \quad (3.68)$$

PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS

Neste capítulo, são apresentados os métodos explícitos de diferenças finitas que serão utilizados para resolver a equação de Poisson em $2D$. Serão analisados também os erros de truncamentos dos 3 métodos, onde serão verificadas as suas respectivas ordens de convergência.

4.1 Esquemas Explícitos

Nesta seção serão apresentados os esquemas de diferenças finitas explícitos padrão que foram utilizados para discretizar a segunda derivada, os coeficientes da diferenciação dos diferentes esquemas foram obtidos através do artigo ([FORNBERG, 1988](#)) onde são apresentadas várias tabelas com diversos esquemas para a segunda derivada, onde variam-se os coeficientes de cada esquema dependendo da posição do pontos onde gera-se uma equação de diferenças finitas.

Diferentemente dos métodos compactos não será feita uma discretização no termo fonte e assim também não terá correção para este lado da discretização. Então aparecerá somente um termo de correção correspondente à diferença finita utilizada e este termo terá a mesma ordem de convergência que a discretização nos pontos regulares de cada método. Na figura 5 tem-se uma ilustração da discretização explícita utilizada para o método de segunda ordem.

4.1.1 Diferenças de 2ª Ordem

O método utilizado por ([MARICHAL; CHATELAIN; WINCKELMANS, 2014](#)) para obter segunda ordem de precisão para a segunda derivada é dado por

$$f_i^2 = R_{i-1}^2 f_{i-1} + R_i^2 f_i + R_{i+1}^2 f_{i+1} + C_I, \quad (4.1)$$

onde $R_{i-1}^2 = R_{i+1}^2 = \frac{1}{h^2}$, $R_i^2 = -\frac{2}{h^2}$ e $C_I = -R_I^2 J_{\alpha 0}$. Neste esquema, $I = i + 1$ se o salto

Figura 5 – Ilustração da discretização explícita do domínio para o método de segunda ordem.

Fonte: Marichal, Chatelain e Winckelmans (2014).

ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, e neste caso $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$ e

$$J_{\alpha 0} = [f^{(0)}]_\alpha + (h^+)[f^{(1)}]_\alpha + \frac{(h^+)^2}{2!}[f^{(2)}]_\alpha + \frac{(h^+)^3}{3!}[f^{(3)}]_\alpha. \quad (4.2)$$

Se o salto ocorre em $x_{i-1} < x_\alpha < x_i$, então $I = i - 1$ e neste caso $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$ e

$$J_{\alpha 0} = -[f^{(0)}]_\alpha + (h^-)[f^{(1)}]_\alpha - \frac{(h^-)^2}{2!}[f^{(2)}]_\alpha + \frac{(h^-)^3}{3!}[f^{(3)}]_\alpha. \quad (4.3)$$

Os saltos podem ser obtidos por

$$[f^{(n)}]_\alpha = f_+^{(n)} - f_-^{(n)}, \quad (4.4)$$

onde $f_+^{(n)}$ e $f_-^{(n)}$ podem ser obtidos pelas interpolações

$$\begin{aligned} f_+^{(n)} &= c_{n\alpha+} f_\alpha + c_{n_{i+2}} f_{i+2} + c_{n_{i+3}} f_{i+3} + c_{n_{i+4}} f_{i+4}, \\ f_-^{(n)} &= c_{n\alpha-} f_\alpha + c_{n_{i-1}} f_{i-1} + c_{n_{i-2}} f_{i-2} + c_{n_{i-3}} f_{i-3}. \end{aligned}$$

Os coeficientes c_n para calcular

$$f_\alpha^{(n)} = c_\alpha f_\alpha + c_i f_i + c_{i+1} f_{i+1} + c_{i+2} f_{i+2}, \quad (4.5)$$

são obtidos da resolução do sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & h_i & h_{i+1} & h_{i+2} \\ 0 & h_i^2 & h_{i+1}^2 & h_{i+2}^2 \\ 0 & h_i^3 & h_{i+1}^3 & h_{i+2}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_\alpha \\ c_i \\ c_{i+1} \\ c_{i+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0! \delta_{n0} \\ 1! \delta_{n1} \\ 2! \delta_{n2} \\ 3! \delta_{n3} \end{bmatrix}, \quad (4.6)$$

onde $h_i = x_i - x_\alpha$ e δ_{ij} é a função delta de Kronecker.

O ETL é dado por

$$T_i \equiv -f_i^{(2)} + R_{i-1}^2 f_{i-1} + R_i^2 f_i + R_{i+1}^2 f_{i+1} - R_I^2 J_{\alpha 0}, \quad (4.7)$$

onde o termo de correção do salto pode ser obtido à partir de

$$J_{\alpha 0} = \sum_{s=1}^4 (L_s - R_s) f_\alpha + \sum_{k=1}^4 \sum_{m=1}^3 (L_{m+1} h_{i+m+1}^k - R_{m+1} h_{i-m}^k) \frac{f_i^{(k)}}{k!}, \quad (4.8)$$

com

$$\begin{cases} L_1 = \sum_{q=0}^3 c_{q_{\alpha+}}, \\ L_k = \sum_{q=0}^3 \frac{(h^+)^q}{q!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 4 \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\begin{cases} R_1 = \sum_{q=0}^3 c_{q_{\alpha-}}, \\ R_{s+1} = \sum_{q=0}^3 \frac{(h^+)^q}{q!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 3 \end{cases} \quad (4.10)$$

Substituindo cada termo no ETL temos

$$\begin{aligned} T_i &= -f_i^{(2)} + \frac{1}{h^2} \left[2(f(x_i) + \frac{h^2}{2!} f_i^{(2)} + \frac{h^4}{24} f_i^{(4)}) \right] - \frac{2}{h^2} f(x_i) \\ &\quad - R_i^2 \sum_{m=1}^3 (L_{m+1} h_{i+m+1}^4 - R_{m+1} h_{i-m}^4) \frac{f_i^{(4)}}{4!} + O(h^4) \Rightarrow \end{aligned}$$

$$T_i = \frac{h^2}{12} f_i^{(4)} - R_i^2 \frac{30 \cdot h^3 \cdot h^+ \cdot f_i^{(4)}}{24} + O(h^4),$$

$$\text{Se } R_I^2 = \frac{1}{h^2} \text{ e } h^+ = \beta \cdot h \text{ com } 0 < \beta \leq 1,$$

$$T_i = \frac{(1 - 15\beta)h^2}{12} f_i^{(4)} + O(h^4) \quad (4.11)$$

A estabilidade deste método para o caso de Poisson com coeficientes constante por partes pode ser vista em (WIEGMANN; BUBE, 2000).

4.1.2 Diferenças de 4ª Ordem

Um esquema de diferenças finitas explícitas unidimensional de quarta ordem com cinco pontos será utilizado para aproximar numericamente a segunda derivada espacial, o esquema é dado por

$$f_i^{(2)} = -\frac{1}{12h^2} f_{i-2} + \frac{4}{3h^2} f_{i-1} - \frac{5}{2h^2} f_i + \frac{4}{3h^2} f_{i+1} - \frac{1}{12h^2} f_{i+2} + C_I, \quad (4.12)$$

com $C_I = -(R_I^1 J_{\alpha 0}^* + R_I^2 J_{\alpha 0})$, em que

$$\begin{cases} R_I^1 = 0 & \text{e } R_I^2 = \frac{4}{3h^2} & \text{se } I = i-1 \text{ ou } I = i+2, \\ R_I^1 = -\frac{1}{12h^2} & \text{e } R_I^2 = \frac{4}{3h^2} & \text{se } I = i \text{ ou } I = i+1, \end{cases} \quad (4.13)$$

Nestes esquemas o salto ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, então quando $I = i+1$ ou $I = i+2$, nestes casos $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$,

$$J_{\alpha 0} = \sum_{k=0}^5 \frac{(h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (4.14)$$

$$J_{\alpha 0}^* = \sum_{k=0}^5 \frac{(h+h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (4.15)$$

quando $I = i$ ou $I = i-1$, nestes casos $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$ e

$$J_{\alpha 0} = \sum_{k=0}^5 (-1)^{k+1} \frac{(h^-)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (4.16)$$

$$J_{\alpha 0}^* = \sum_{k=0}^5 (-1)^{k+1} \frac{(h+h^-)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha, \quad (4.17)$$

as interpolações para representar os termos $[f^{(n)}]_\alpha$ podem ser calculadas pelas fórmulas (3.21), onde os coeficientes de cada combinação linear é obtida a partir do sistema (3.22).

Para calcular o *ETL* considera-se as seguintes notações

$$J_{\alpha 0}^* = \sum_{s=1}^6 (l_s - r_s) f_\alpha + \sum_{k=1}^6 \sum_{m=1}^5 (l_{m+1} h_{i+m+1}^k - r_{m+1} h_{i-m}^k) \frac{f_i^{(k)}}{k!}, \quad (4.18)$$

$$J_{\alpha 0} = \sum_{s=1}^6 (L_s - R_s) f_\alpha + \sum_{k=1}^6 \sum_{m=1}^5 (L_{m+1} h_{i+m+1}^k - R_{m+1} h_{i-m}^k) \frac{f_i^{(k)}}{k!}, \quad (4.19)$$

onde

$$\begin{cases} l_1 = \sum_{q=0}^5 c_{q_{\alpha^+}}, \\ l_k = \sum_{q=0}^5 \frac{(h+h^+)^q}{q!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 6 \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\begin{cases} r_1 = \sum_{q=0}^5 c_{q_{\alpha^-}}, \\ r_{s+1} = \sum_{q=0}^5 \frac{(h+h^+)^q}{q!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 5 \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} L_1 = \sum_{q=0}^5 c_{q_{\alpha^+}}, \\ L_k = \sum_{q=0}^5 \frac{(h^+)^q}{q!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 6 \end{array} \right. \quad (4.22)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} R_1 = \sum_{q=0}^5 c_{q_{\alpha^-}}, \\ R_{s+1} = \sum_{q=0}^5 \frac{(h^+)^q}{q!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 5 \end{array} \right. \quad (4.23)$$

Desta forma

$$\begin{aligned} T_i &= -f_i^{(2)} - \frac{5f_i}{2h^2} - \frac{1}{12h^2} [2(f(x_i) + \frac{(2h)^2}{2!} f_i^{(2)} + \frac{(2h)^4}{24} f_i^{(4)} + \frac{(2h)^6}{720} f_i^{(6)})] \\ &\quad + \frac{4}{3h^2} [2(f(x_i) + \frac{h^2}{2!} f_i^{(2)} + \frac{h^4}{24} f_i^{(4)} + \frac{h^6}{720} f_i^{(6)})] + C_i + O(h^6) \Rightarrow \\ T_i &= -f_i^{(2)} - \frac{5f_i}{2h^2} - \frac{1}{6h^2} f_i - \frac{1}{3} f_i^{(2)} - \frac{h^2}{9} f_i^{(4)} - \frac{2h^4}{135} f_i^{(6)} \\ &\quad + \frac{8}{3h^2} f_i + \frac{4}{3} f_i^{(2)} + \frac{h^2}{9} f_i^{(4)} + \frac{h^4}{270} f_i^{(6)} \\ &\quad - R_i^1 \sum_{m=1}^5 (l_{m+1} h_{i+m+1}^6 - r_{m+1} h_{i-m}^6) \frac{f_i^{(6)}}{6!} \\ &\quad - R_i^2 \sum_{m=1}^5 (L_{m+1} h_{i+m+1}^6 - R_{m+1} h_{i-m}^6) \frac{f_i^{(6)}}{6!} + O(h^6) \Rightarrow \\ T_i &= \frac{h^4}{9} f_i^{(6)} - (-(-523152.h^5 - 137200.h^4.(h^+) + 280840.h^3.(h^+)^2 \\ &\quad - 67340.h^2.(h^+)^3 + 7350.h.(h^+)^4 + 1995.(h^+)^5)/(288.h)).f_i^{(6)} + O(h^6) \Rightarrow \\ T_i &= K.h^4.f_i^{(6)} + O(h^6) \end{aligned} \quad (4.24)$$

De forma análoga podem-se obter o *ETL* para os pontos $I = i - 1$, $I = i + 1$ e $I = i + 2$. Nos pontos que ficam próximos à borda utiliza-se as seguintes discretizações

$$f_1^{(2)} = \frac{50f_1 - 75f_2 - 20f_3 + 70f_4 - 30f_5 + 5f_6}{60h^2} + O(h^5), \quad (4.25)$$

$$f_N^{(2)} = \frac{50f_N - 75f_{N-1} - 20f_{N-2} + 70f_{N-3} - 30f_{N-4} + 5f_{N-5}}{60h^2} + O(h^5). \quad (4.26)$$

4.1.3 Diferenças de Alta Ordem

Para obtermos um esquema de sexta ordem vamos considerar a seguinte expressão

$$f_i^{(2)} = \frac{1}{90h^2}f_{i-3} - \frac{3}{20h^2}f_{i-2} + \frac{3}{2h^2}f_{i-1} - \frac{49}{18h^2}f_i + \frac{3}{2h^2}f_{i+1} - \frac{3}{20h^2}f_{i+2} + \frac{1}{90h^2}f_{i+3} + C_I, \quad (4.27)$$

com $C_I = -(R_I^1 J_{\alpha 0}^* + R_I^2 J_{\alpha 0} + R_I^3 J_{\alpha 0}^{**})$, onde

$$\left\{ \begin{array}{lll} R_I^1 = -\frac{3}{20h^2} & R_I^2 = \frac{3}{2h^2} & \text{e } R_I^3 = \frac{1}{90h^2} \quad \text{se } I = i \quad \text{ou } I = i+1, \\ R_I^1 = \frac{1}{90h^2} & R_I^2 = -\frac{3}{20h^2} & \text{e } R_I^3 = 0 \quad \text{se } I = i-1 \quad \text{ou } I = i+2, \\ R_I^1 = 0 & R_I^2 = \frac{1}{90h^2} & \text{e } R_I^3 = 0 \quad \text{se } I = i-2 \quad \text{ou } I = i+3. \end{array} \right. \quad (4.28)$$

Nestes esquemas, o salto ocorre em $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, então quando $I = i+1$, $I = i+2$ ou $I = i+3$, nestes casos $h^+ = x_{i+1} - x_\alpha$, definimos $J_{\alpha 0}^{**} = \sum_{k=0}^7 \frac{(2h+h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha$, sendo que os termos de correção $J_{\alpha 0}$ e $J_{\alpha 0}^*$ são os mesmo utilizados em (3.39).

Quando $I = i$, $I = i-1$ ou $I = i-2$, nestes casos $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$,

$$J_{\alpha 0}^{**} = \sum_{k=0}^7 (-1)^{k+1} \frac{(2h+h^+)^k}{k!} [f^{(k)}]_\alpha$$

e os outros dois termos de correção $J_{\alpha 0}$ e $J_{\alpha 0}^*$ serão os utilizados em (3.43). Cada uma das interpolações serão obtidas mediante o sistema (3.49).

Para calcular o *ETL* utilizam-se as fórmulas (3.54) e (3.56), e os coeficientes de cada somatórios serão os mesmo utilizados em (3.61), (3.62), (3.57) e (3.58). Desta forma o termo de correção deste método é dado por

$$\begin{aligned} C_i = & -R_i^1 \sum_{m=1}^7 (l_{m+1} h_{i+m+1}^8 - r_{m+1} h_{i-m}^8) \frac{f_i^{(8)}}{8!} + R_i^3 \sum_{m=1}^7 (L_{m+1}^* h_{i+m+1}^8 - R_{m+1}^* h_{i-m}^8) \frac{f_i^{(8)}}{8!} \\ & - R_i^2 \sum_{m=1}^7 (L_{m+1} h_{i+m+1}^8 - R_{m+1} h_{i-m}^8) \frac{f_i^{(8)}}{8!} \end{aligned}$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{l} L_1^* = \sum_{q=0}^7 c_{q_{\alpha^+}}, \\ L_k^* = \sum_{q=0}^7 \frac{(2h+h^+)^q}{q!} c_{q_{i+k}}, \quad k = 2, \dots, 8 \end{array} \right. \quad (4.29)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} R_1^* = \sum_{q=0}^7 c_{q_{\alpha^-}}, \\ R_{s+1}^* = \sum_{q=0}^7 \frac{(2h+h^+)^q}{q!} c_{q_{i-s}}, \quad s = 1, \dots, 7. \end{array} \right. \quad (4.30)$$

Substituindo cada uma das somas na expressão para o *ETL* temos

$$\begin{aligned}
 T_i = & 0.0018.h^6.f_i^{(8)} - (-(-687.h^8 - 747.h^7.(h^+) + 126171360.h^7 + 1911.h^6.(h^+)^2 \\
 & - 983283840.h^6.(h^+) + 48718201.h^6 + 4137.h^5.(h^+)^3 \\
 & + 463228920.h^5.(h^+)^2 + 93736650.h^5.(h^+) + 2205.h^4.(h^+)^4 \\
 & + 24696000.h^4.(h^+)^3 - 649620615.h^4.(h^+)^2 - 1113.h^3.(h^+)^5 \\
 & - 146538000.h^3.(h^+)^4 + 350061460.h^3.(h^+)^3 - 1911.h^2.(h^+)^6 \\
 & + 118409760.h^2.(h^+)^5 - 280542045.h^2.(h^+)^4 - 1701.h.(h^+)^7 \\
 & - 6136200.h.(h^+)^6 + 13930266.h.(h^+)^5 + 1470.(h^+)^8 \\
 & + 2469600.(h^+)^7 - 5856725.(h^+)^6)/(14400.h)) \frac{f_i^{(8)}}{8!} + O(h^8) \Rightarrow \\
 T_i = & (K1.h^5 + (0.0018 + K2).h^6 + K3.h^7)f_i^{(8)} + O(h^8). \quad (4.31)
 \end{aligned}$$

Novamente observa-se que o esquema explícito da parte contínua da discretização dos pontos regulares é de sexta ordem, multiplicado pelo coeficiente 0.0018 e o termo de correção é de quinta ordem com um coeficiente $K1$, o coeficiente de sexta ordem é $K2$ e o coeficiente de sétima ordem é $K3$, os quais são suficientemente pequenos. De forma análoga podem-se obter o *ETL* para os pontos $I = i - 2$, $I = i - 1$, $I = i + 1$, $I = i + 2$ e $I = i + 3$. Nos pontos que ficam próximos à borda utiliza-se as seguintes discretizações

$$f_j^{(2)} = \frac{469f_j}{90h^2} - \frac{223f_{j+1}}{10h^2} + \frac{879f_{j+2}}{20h^2} - \frac{949f_{j+3}}{18h^2} + \frac{41f_{j+4}}{h^2} - \frac{201f_{j+5}}{10h^2} + \frac{1019f_{j+6}}{180h^2} - \frac{7f_{j+7}}{10h^2}, \quad (4.32)$$

para $j = 1, 2$, o qual é de ordem $O(h^6)$, e para $M=N$, $N-1$, também de $O(h^6)$, a discretização

$$f_M^{(2)} = \frac{469f_M}{90h^2} - \frac{223f_{M-1}}{10h^2} + \frac{879f_{M-2}}{20h^2} - \frac{949f_{M-3}}{18h^2} + \frac{41f_{M-4}}{h^2} - \frac{201f_{M-5}}{10h^2} + \frac{1019f_{M-6}}{180h^2} - \frac{7f_{M-7}}{10h^2}. \quad (4.33)$$

4.2 Equação de Poisson 2D

Para a discretização da equação de Poisson 2D por diferenças finitas explícitas em pontos regulares utiliza-se os esquemas de segunda, quarta e oitava ordens que foram definidos na seção anterior. Para os pontos que ficam próximos à interface imersa, deve-se acrescentar termos de correção, então denota-se os esquemas da seguinte forma

$$f_{i,j}^{(2)} = R_{i,j}f_{i,j} + C_{i,j}, \quad (4.34)$$

onde $R_{i,j}$ serão os coeficientes de cada um dos 3 esquemas aplicados a cada uma das duas direções de forma separada.

The figure shows a 10x10 grid of points, each labeled with a number from 1 to 100. The points are arranged in a circular pattern, with the center point labeled 55. The grid is labeled with row and column indices from 0 to 9. The points are numbered in a spiral pattern starting from the center (55) and moving outwards.

Dependendo da posição do ponto será utilizado o estêncil em cada coordenada (i, j) e $C_{i,j}$ será o termo de correção de cada respectivo método em cada uma das duas direções, desta forma

$$J_{\alpha xJ} = R_I^{yy} J_{\alpha 0y},$$

$$J = \begin{cases} j-1, & \text{se } x_{j-1} < x_\alpha < x_j, \\ j+1, & \text{se } x_j < x_\alpha < x_{j+1} \end{cases}$$

Note que $I = I(j)$ e $J = J(i)$, ou seja, as correções são feitas separadamente para cada direção usando o procedimento unidimensional.

4.2.1 Condições de contorno do tipo Neumann

Nos casos em que o problema tem condições de contorno do tipo Neumann, o valor da função e de suas derivadas não poderão ser aproximados mediante a interpolação feita em (4.5), (3.21) e (3.48). Ao invés do valor da função na descontinuidade, agora o valor da derivada é conhecido. Antes tínhamos interpolações da forma

$$f_{\pm}^{(n)} = c_{n_{\alpha\pm}} f_{\alpha}^{\pm} + \sum_i c_{n_{\eta i}} f_{\eta i}, \quad (4.36)$$

em particular, para $n = 1$

$$f_{\pm}^{(1)} = c_{1_{\alpha\pm}} f_{\alpha}^{\pm} + \sum_i c_{1_{\eta i}} f_{\eta i}. \quad (4.37)$$

Isolando $f_{\alpha}^{\pm}$ temos

$$f_{\alpha}^{\pm} = \frac{1}{c_{1_{\alpha\pm}}} \left(f_{\pm}^{(1)} - \sum_i c_{1_{\eta i}} f_{\eta i} \right). \quad (4.38)$$

Por fim, substituindo (4.38) em (4.36), chega-se à expressão da aproximação para o caso de condições de contorno do tipo Neumann

$$f_{\pm}^{(n)} = \frac{c_{n_{\alpha\pm}}}{c_{1_{\alpha\pm}}} f_{\pm}^{(1)} + \sum_i \left(c_{n_{\eta i}} - \frac{c_{n_{\alpha\pm}} \cdot c_{1_{\eta i}}}{c_{1_{\alpha\pm}}} \right) f_{\eta i}. \quad (4.39)$$

RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com a aplicação do MII para a equação de Poisson unidimensional e bidimensional.

5.1 MII em Poisson 1D

5.1.0.1 Exemplo 1

Inicialmente são apresentados resultados obtidos da aplicação das metodologias no seguinte problema elíptico unidimensional

$$(\beta u_x)_x = f, \quad 0 < x < 1 \quad e \quad 0 < \alpha < 1, \quad u(0) = u(1) = 0. \quad (5.1)$$

$$\beta(x) = \begin{cases} 2, & \text{se } 0 \leq x \leq \alpha \\ 1/2, & \text{se } \alpha < x \leq 1 \end{cases}$$

$$f(x) = \begin{cases} -8 \cos(2x), & \text{se } 0 \leq x \leq \alpha \\ -2 \cos(2x - 2), & \text{se } \alpha < x \leq 1 \end{cases}$$

A solução exata do problema é dada por

$$u(x) = \begin{cases} \sin(2x), & \text{se } 0 \leq x \leq \alpha \\ \cos(2x - 2) - 1, & \text{se } \alpha < x \leq 1 \end{cases}.$$

Neste exemplo (5.1) de equação de Poisson unidimensional com coeficiente constante por partes, apresenta-se um salto em $\alpha = 0.44$ para a solução numérica da metodologia de Li e Ito e logo em seguida é resolvido o mesmo problema desta vez com a metodologia de

Figura 7 – Soluções de segunda ordem, $h=0.01$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Linnick e Fasel. Neste caso o salto ocorre em $\alpha = 0.56789$. Pode-se observar através da figura (7) que o Método de Interface Imersa captura com muita precisão esses saltos em cada uma das metodologias implementadas. Na tabela (1) e na análise de convergência ilustrada na figura (8) mostra-se a segunda ordem de convergência para estas metodologias.

Tabela 1 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de segunda ordem, exemplo 1

h	$\ U - u\ _{\infty} M1$	$r1$	$\ U - u\ _{\infty} M2$	$r2$
1/250	0.0000046		6.5864e-07	
1/500	0.0000011	2.0641e+00	1.6476e-07	1.9991e+00
1/1000	0.0000003	1.8744e+00	4.1196e-08	1.9998e+00
1/2000	7.12365e-08	2.0744e+00	1.0299e-08	2.0000e+00
1/4000	1.78228e-08	1.9989e+00	2.5747e-09	2.0001e+00
1/8000	4.51009e-09	1.9822e+00	6.4305e-10	2.0014e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Considerando novamente o exemplo (5.1) de equação de Poisson unidimensional com coeficiente constante por partes, resolvendo-se agora com a aplicação de diferenças finitas compactas e explícitas, ambas são baseadas na metodologia de *Linnick e Fasel*. O primeiro caso apresenta um salto em $\alpha = 0.768$ para a solução numérica de diferenciação compacta e logo em seguida é resolvido o mesmo problema com a metodologia explícita, neste caso o salto ocorre em $\alpha = 0.3456$. Pode-se observar através da figura (9) os resultados para cada uma das metodologias implementadas. Na tabela (2) e na análise ilustrada em (10) obtem-se a quarta ordem de convergência destas duas metodologias.

Figura 8 – Erro de *segunda ordem* do exemplo 1

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 2 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de quarta ordem, exemplo 1

h	$\ U - u\ _{\infty} M1$	$r1$	$\ U - u\ _{\infty} M2$	$r2$
1/30	1.3397e-08		2.7487e-08	
1/60	7.3803e-10	4.1820e+00	1.6839e-09	4.0289e+00
1/120	4.2753e-11	4.1096e+00	1.0570e-10	3.9938e+00
1/240	2.6369e-12	4.0191e+00	6.6243e-12	3.9961e+00
1/480	1.6162e-13	4.0282e+00	4.0319e-13	4.0382e+00
1/600	6.6419e-14	3.9852e+00	1.6415e-13	4.0272e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 9 – Soluções de quarta ordem, $h=0.01$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 10 – Erro de *quarta ordem* do exemplo 1

Fonte: Elaborada pelo autor.

Foram aplicadas, também, as metodologias de alta ordem no exemplo (5.1), onde novamente utilizou-se as diferenças finitas compactas e explícitas de *Linnick e Fasel*. O primeiro caso apresenta um salto em $\alpha = 0.12345$ para a solução numérica de diferenciação compacta e logo em seguida é resolvido o mesmo problema com a metodologia explícita, neste caso o salto ocorrendo em $\alpha = 0.8642$. Pode-se observar através da figura (11) novamente que o Método de Interface Imersa captura com muita precisão esses saltos de discontinuidades em cada uma das metodologias implementadas. Na tabela (3) e na análise ilustrada em (12) tem-se sétima ordem de convergência nas diferenças finitas compactas e é atingida oitava ordem na metodologia explícita. Em ambos casos tem-se super convergência, já que nosso intuito era apresentar as metodologias de sexta ordem. Desta forma foi verificada a aplicação de 6 metodologias diferentes para o problema unidimensional de Poisson com coeficiente constante por partes, então em uma dimensão foram alcançados todos os objetivos propostos no trabalho.

Tabela 3 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de alta ordem, exemplo 1

h	$\ U - u\ _{\infty} M1$	$r1$	$\ U - u\ _{\infty} M2$	$r2$
1/20	1.5544e-09		8.8023e-08	
1/40	1.4634e-11	6.7309e+00	4.0100e-10	7.7781e+00
1/50	3.1769e-12	6.8451e+00	6.8768e-11	7.9018e+00
1/60	9.0310e-13	6.8990e+00	1.6206e-11	7.9276e+00
1/80	1.2311e-13	6.9269e+00	1.6484e-12	7.9447e+00
1/100	2.5202e-14	7.1082e+00	2.7805e-13	7.9759e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 11 – Soluções de altas ordem, $h=0.01$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 12 – Erro de altas ordens em escala logarítmica do exemplo 1

Fonte: Elaborada pelo autor.

5.2 MII em problemas de Poisson em 2D

5.2.0.1 Exemplo 2

Considere, agora, a equação de Poisson 2D

$$\nabla \cdot (\beta \nabla u) = g \quad (5.2)$$

definida em um quadrado unitário, com valor $\beta = 1$ onde o termo fonte g e a solução exata f são dados por

$$g(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{se } (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 \leq 0.05123^2 \\ -4\pi^2 \sin(2\pi x) \cos(2\pi y), & \text{caso contrario,} \end{cases}$$

com solução $u(x,y) = 0.5 \sin(2\pi x) \cos(2\pi y)$, fora do círculo.

No exemplo (5.2) de equação de Poisson para o caso bidimensional tem-se dois subdomínios onde um deles é um círculo com centro no quadrado unitário sendo que a função vale zero dentro deste círculo. A solução numérica da metodologia explícita de *Linnick e Fasel* captura com muita precisão todo o salto que acontece na interface do círculo como pode-se observar através da figura (13). O erro do Método de Interface Imersa com a metodologia implementada é apresentada na tabela (4) e a análise de convergência é ilustrada em (14). Ambos indicam uma convergência de segunda ordem.

Figura 13 – Solução segunda ordem do exemplo 2

(a) Numérica com tamanho de malha $h=0.01$

(b) Erro = $1.6981e-04$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 4 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de segunda ordem para o exemplo 2

h	$\ U - u\ _\infty$	r
1/24	2.8969e-03	
1/48	7.3448e-04	1.9797e+00
1/72	3.2723e-04	1.9940e+00
1/120	1.1792e-04	1.9980e+00
1/192	4.6063e-05	2.0000e+00
1/216	3.6401e-05	1.9988e+00
1/240	2.9486e-05	1.9994e+00
1/288	2.0476e-05	2.0000e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Aplicando mais duas metodologias para resolver o exemplo (5.2) da equação de Poisson para o caso bidimensional. As soluções numéricas da metodologia explícita de *Linnick e Fasel*

Figura 14 – Erro de segunda ordem em escala logarítmica do exemplo 2

Fonte: Elaborada pelo autor.

novamente capturam com muita precisão todo o salto que acontece na interface do círculo, como podemos observar através das figuras (15a) e (17a). Também observa-se que os Métodos de Interfaces Imersas com estas duas metodologias implementadas apresentam quarta ordem de convergência como ilustra a tabela (5) e a análise feita no gráfico (16). Na figura da análise de convergência ilustrada em (18) e na tabela (6) é apresentada a super convergência de oitava ordem que foi obtida também para o caso unidimensional.

Tabela 5 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de quarta ordem para o exemplo 2

h	$\ U - u\ _\infty$	r
1/72	3.3281e-07	
1/96	1.0570e-07	3.9868e+00
1/120	4.3164e-08	4.0136e+00
1/144	2.0808e-08	4.0020e+00
1/168	1.1226e-08	4.0036e+00
1/192	6.5855e-09	3.9940e+00
1/216	4.1092e-09	4.0043e+00
1/240	2.6957e-09	4.0013e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 15 – Solução quarta ordem do exemplo 2

(a) Numérica com tamanho de malha $h=0.01$ (b) Erro = $8.9309\text{e-}08$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 16 – Erro de quarta ordem em escala logarítmica do exemplo 2

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 6 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de alta ordem para o exemplo 2

h	$\ U - u\ _{\infty}$	r
1/72	3.2961e-07	
1/96	1.5491e-08	7.5411e+00
1/120	1.6608e-09	7.7619e+00
1/144	2.8841e-10	7.8455e+00
1/168	6.8507e-11	7.8840e+00
1/192	2.0276e-11	7.8983e+00
1/216	7.0808e-12	7.8786e+00
1/240	2.7524e-12	8.0226e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 17 – Solução de alta ordem do exemplo 2

(a) Numérica com tamanho de malha $h=0.01$ (b) Erro = $1.2067e-09$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 18 – Erro de alta ordem em escala logarítmica do exemplo 2

Fonte: Elaborada pelo autor.

5.2.0.2 Exemplo 3

Considerando a equação de Poisson

$$\nabla \cdot (\beta \nabla u) = g \quad (5.3)$$

definida em um quadrado unitário, com valor $\beta = 1$ onde o termo fonte g e a solução exata f são dados por

$$g(x,y) = \begin{cases} 4\exp(-x^2 - y^2) \cdot ((x^2 + y^2) - 1), & \text{se } (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 \leq 0.25^2 \\ 0, & \text{caso contrario,} \end{cases}$$

com solução $u(x,y) = \exp(-x^2 - y^2)$, dentro do círculo.

Considerando o problema em duas dimensões em (5.3) também tem-se dois subdomínios onde um deles é um círculo com centro no quadrado unitário, mas desta vez a função vale zero fora do círculo. A solução numérica da metodologia explícita novamente captura com muita precisão todo o salto que acontece na interface do círculo como pode-se observar através da figura (19a). Observa-se também que o Método de Interface Imersa nesta metodologia implementada apresenta uma convergência de segunda ordem, conforme a tabela (7) e a análise de convergência ilustrado em (20).

Figura 19 – Solução segunda ordem do exemplo 3

(a) Numérica com tamanho de malha $h=1/102$

(b) Erro = $3.3793e-07$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 7 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de segunda ordem para o exemplo 3

h	$\ U - u\ _{\infty}$	r
1/62	8.8204e-07	
1/90	4.3085e-07	1.9225e+00
1/122	2.3765e-07	1.9557e+00
1/150	1.5815e-07	1.9712e+00
1/182	1.0777e-07	1.9835e+00
1/210	8.1060e-08	1.9901e+00
1/230	6.7646e-08	1.9886e+0
1/262	5.2203e-08	1.9893e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Aplicou-se as duas metodologias restantes para resolver o exemplo (5.3) de equação de Poisson para o caso bidimensional, as soluções numéricas da metodologia explícita de *Linnick e Fasel* novamente capturam com muita precisão todo o salto que acontece na interface do círculo como pode-se observar através das figuras (21a) e (23a). Pode-se observar que os Métodos de Interfaces Imersas com estas duas metodologias implementadas apresentam quarta ordem de

Figura 20 – Erro de segunda ordem em escala logarítmica do exemplo 3

Fonte: Elaborada pelo autor.

convergência como ilustra a tabela (8) e a análise feita no gráfico (22). Na figura da análise de convergência ilustrada em (24) e na tabela (9) é apresentada a super convergência de oitava ordem que foi obtida tanto no caso unidimensional como no caso bidimensional apresentado no exemplo anterior.

Também pode-se observar uma característica desta metodologia, que consegue suavizar o erro como pode-se observar nas figuras (13b), (15b), (17b), (19b), (21b) e (23b). Nos caso bidimensionais verificou-se que as interpolações estão funcionando nas duas direções para ambos os casos de dentro e de fora do círculo.

Figura 21 – Solução quarta ordem do exemplo 3

(a) Numérica com tamanho de malha $h=1/102$ (b) Erro = $6.7901e-11$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 8 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de quarta ordem para o exemplo 3

h	$\ U - u\ _\infty$	r
1/42	2.5463e-09	
1/62	4.8673e-10	4.2486e+00
1/82	1.5961e-10	3.9879e+00
1/102	6.7901e-11	3.9162e+00
1/122	3.3013e-11	4.0277e+00
1/142	1.8033e-11	3.9833e+00
1/162	1.0650e-11	3.9966e+00
1/210	3.7390e-12	4.0336e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 22 – Erro de quarta ordem em escala logarítmica do exemplo 3

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 9 – Erro cometido no cálculo da solução aproximada de alta ordem para o exemplo 3

h	$\ U - u\ _\infty$	r
1/66	2.9754e-13	
1/74	1.3300e-13	7.0375e+00
1/82	8.5368e-14	5.2404e+00
1/90	5.1015e-14	6.7207e+00
1/102	1.8763e-14	7.9915e+00

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 23 – Solução alta ordem do exemplo 3

(a) Numérica com tamanho de malha $h=1/102$ (b) Erro = $1.8763e-14$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 24 – Erro de *alta ordem em escala logarítmica* do exemplo 3

CONCLUSÕES

O objetivo inicial do presente trabalho era desenvolver um método de interface de alta ordem para a resolução numérica da equação de Poisson Boltzmann. O objetivo principal era resolver a versão deste problema no caso linear com coeficientes constantes por partes que é a equação que é utilizada quando resolve-se numericamente as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis multifásicos, adotando-se o método de projeção.

Primeiro foram resolvidos alguns problemas contínuos unidimensionais de segunda, quarta e sexta ordem para as versões compactas e explícitas para logo depois incorporar as modificações do salto na matriz do sistema que aparece em cada um das duas metodologias (*Li e Ito*) e (*Linnick e Fasel*) onde nós contribuimos fazendo os novos termos de correção para os métodos de alta ordem.

Feito isso, foi realizada uma abordagem em duas dimensões, inicialmente com problemas contínuos e em sequência foram introduzidas as correções dos pontos vizinhos para assim capturar o salto da função solução. Foi demonstrado que as interpolações adotadas funcionam para os problemas adotados em $2D$. Foram feitos esforços para analisar os erros de truncamentos de todos os métodos que foram implementados para assim ter uma melhor ideia de como fazer os métodos explícitos de alta ordem.

Podemos observar através dos resultados apresentados que os Métodos da Interfaces Imersas capturam com muita precisão o salto de descontinuidade e com as ordens de precisão implementadas.

6.1 Trabalhos gerados

Apresentados

1. ROJAS, M.; SOUZA, L; CUMINATO, J. O método das interfaces imersas para a solução da equação Poisson-Boltzmann. **Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional**, 2016.
2. ROJAS, M.; SOUZA, L; CUMINATO, J. Solução da equação de Poisson através do método das interfaces imersas de altas ordens. **Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional**, 2017.

Aceitos

1. ROJAS, M.; SOUZA, L; CUMINATO, J. O método das interfaces imersas para a solução da equação de Poisson 2D. **Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional**, 2017.
2. ROJAS, M.; SOUZA, L; CUMINATO, J. High-order Immersed Interface Method for 2D Poisson equation. **ABCM International Congress of Mechanical Engineering**, 2017.

6.2 Trabalhos futuros

Para futuros trabalhos pode-se estudar problemas com condições de contorno do tipo Robin e que tenham funções distintas de zero em ambas as partes dos subdomínios utilizando a linearidade do operador gradiente.

Pode-se realizar uma extensão do código para trabalhar com 3 dimensões e obter as altas ordens de precisão alcançadas em $1D$ e $2D$.

REFERÊNCIAS

BEN-YAAKOV, D.; ANDELMAN, D.; PODGORNIK, R.; HARRIES, D. Ion-specific hydration effects: Extending the poisson-boltzmann theory. **Current opinion in colloid & interface science**, Elsevier, v. 16, n. 6, p. 542–550, 2011. Citado na página [22](#).

CHEN, L.; HOLST, M. J.; XU, J. The finite element approximation of the nonlinear poisson-boltzmann equation. **SIAM journal on numerical analysis**, SIAM, v. 45, n. 6, p. 2298–2320, 2007. Citado na página [21](#).

FORNBERG, B. Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids. **Mathematics of computation**, v. 51, n. 184, p. 699–706, 1988. Citado na página [43](#).

GENG, W.; YU, S.; WEI, G. Treatment of charge singularities in implicit solvent models. **The Journal of chemical physics**, AIP Publishing, v. 127, n. 11, p. 114106, 2007. Citado na página [21](#).

HELGADÓTTIR, Á.; GIBOU, F. A poisson–boltzmann solver on irregular domains with neumann or robin boundary conditions on non-graded adaptive grid. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 230, n. 10, p. 3830–3848, 2011. Citado na página [25](#).

HUANG, H.; LI, Z. Convergence analysis of the immersed interface method. **IMA Journal of Numerical Analysis**, Oxford University Press, v. 19, n. 4, p. 583–608, 1999. Citado na página [29](#).

Jl, H.; CHEN, J.; LI, Z. Augmented immersed finite element methods for some elliptic partial differential equations. **International Journal of Computer Mathematics**, Taylor & Francis, v. 93, n. 3, p. 540–558, 2016. Citado na página [22](#).

LEVEQUE, R. J.; LI, Z. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, SIAM, v. 31, n. 4, p. 1019–1044, 1994. Citado na página [21](#).

LI, Z.; ITO, K. **The immersed interface method: numerical solutions of PDEs involving interfaces and irregular domains**. [S.l.]: Siam, 2006. v. 33. Citado nas páginas [22](#), [23](#), [27](#) e [28](#).

LINNICK, M. N.; FASEL, H. F. A high-order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains. **Journal of Computational Physics**, v. 204, p. 157–192, 2005. Citado nas páginas [22](#), [27](#), [30](#), [32](#) e [34](#).

LU, B.; ZHOU, Y.; HOLST, M.; MCCAMMON, J. Recent progress in numerical methods for the poisson-boltzmann equation in biophysical applications. **Commun Comput Phys**, v. 3, n. 5, p. 973–1009, 2008. Citado na página [21](#).

MARICHAL, Y.; CHATELAIN, P.; WINCKELMANS, G. An immersed interface solver for the 2-d unbounded poisson equation and its application to potential flow. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 96, p. 76–86, 2014. Citado nas páginas [22](#), [43](#) e [44](#).

PESKIN, C. S. Flow patterns around heart valves: a numerical method. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 10, n. 2, p. 252–271, 1972. Citado na página [21](#).

QIAO, Z.-h.; LI, Z.-l.; TANG, T. A finite difference scheme for solving the nonlinear poisson-boltzmann equation modeling charged spheres. **J. Comput. Math**, v. 24, n. 3, p. 252–264, 2006. Citado na página [21](#).

WIEGMANN, A.; BUBE, K. P. The explicit-jump immersed interface method: finite difference methods for PEDs with piecewise smooth solutions. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 37, p. 827–862, 2000. Citado nas páginas [27](#), [30](#) e [45](#).

ZHAO, J.; HOU, Y.; LI, Y. Immersed interface method for elliptic equations based on a piecewise second order polynomial. **Computers & Mathematics with Applications**, Elsevier, v. 63, n. 5, p. 957–965, 2012. Citado na página [22](#).

ZHOU, Y.; FEIG, M.; WEI, G.-W. Highly accurate biomolecular electrostatics in continuum dielectric environments. **Journal of Computational Chemistry**, Wiley Online Library, v. 29, n. 1, p. 87–97, 2008. Citado na página [21](#).

ZHU, L.; ZHANG, Z.; LI, Z. The immersed finite volume element method for some interface problems with nonhomogeneous jump conditions. **INTERNATIONAL JOURNAL OF NUMERICAL ANALYSIS AND MODELING**, ISCI-INST SCIENTIFIC COMPUTING & INFORMATION PO BOX 60632, UNIV ALBERTA POSTAL OUTLET,, EDMONTON, ALBERTA T6G 2G1, CANADA, v. 13, n. 3, p. 368–382, 2016. Citado na página [22](#).