



# **Dinâmica 29/09/2023 a 29/09/2023**

## **Métodos de diferenças finitas.**

---

**MET-576-4**

**Modelagem Numérica da Atmosfera**

**Dr. Paulo Yoshio Kubota**

**Os métodos numéricos, formulação e parametrizações utilizados nos modelos atmosféricos serão descritos em detalhe.**

**3 Meses**  
**24 Aulas (2 horas cada)**

## **Dinâmica:**

**Métodos numéricos amplamente utilizados na solução numérica das equações diferenciais parciais que governam os movimentos na atmosfera serão o foco, mas também serão analisados os novos conceitos e novos métodos.**

- ✓ **Métodos de diferenças finitas.**
- ✓ **Acurácia.**
- ✓ **Consistência.**
- ✓ **Estabilidade.**
- ✓ **Convergência.**
- ✓ **Grades de Arakawa A, B, C e E.**
- ✓ **Domínio de influência e domínio de dependência.**
- ✓ **Dispersão numérica e dissipação.**
- ✓ **Definição de filtros monótono e positivo.**
- ✓ **Métodos espectrais.**
- ✓ **Métodos de volume finito.**
- ✓ **Métodos Semi-Lagrangianos.**
- ✓ **Conservação de massa local.**
- ✓ **Esquemas explícitos versus semi-implícitos.**
- ✓ **Métodos semi-implícitos.**



# **Esquema implícito: FTBS**



# Esquema implícito: FTBS

---

PDEs Parabólicas: Esquemas Explícitos

Resumo: Solução de EDPs Parabólicas por Esquemas Explícitos

Vantagens:

- cálculos muito fáceis,
- simplesmente fornece um passo à frente  $n+1$

Desvantagem:

- baixa precisão,  $O(\Delta t)$  em relação ao tempo
- sujeito a instabilidade; deve usar "pequenos"  $\Delta t'$
- requer muitos passos !!!



# Esquema implícito: FTBS

---

PDEs Parabólicas: Esquemas Implícitos Esquemas Implícitos para PDEs Parabólicas •

Expresso  $T_i^{n+1}$  termos de  $T_j^{n+1}$ ,  $T_i^n$ , e possivelmente também  $T_j^n$  (em que  $j = i - 1$  e  $i+1$  )

- Representa o domínio espacial e temporal. Para cada novo tempo, escreve  $m$  ( $n^\circ$  de nós interiores) equações e simultaneamente resolve para  $m$  valores desconhecidos (sistema com bandas).

# Esquema implícito: FTBS



**The 1-D Heat Equation:**  $\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$

*Simple Implicit Method. Substituting:*

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i-1}^{m+1} - 2T_i^{m+1} + T_{i+1}^{m+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad \text{Centered FDD}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{m+1} - T_i^m}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad \text{Backward FDD}$$

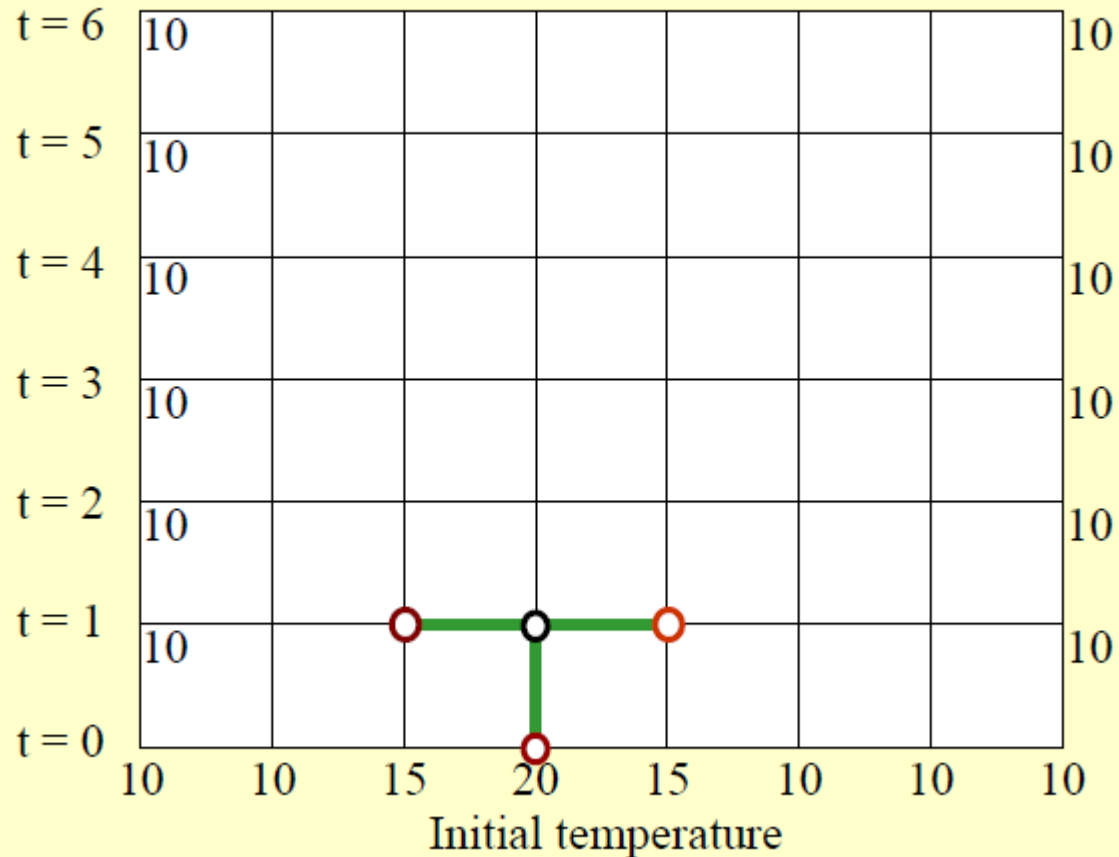
results in:  $-\lambda T_{i-1}^{m+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{m+1} - \lambda T_{i+1}^{m+1} = T_i^m$  with  $\lambda = k \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$

1. Requer I.C. para o caso em que  $m = 0$ : ou seja,  $T_i^m$  é dado para todo  $i$ .
2. Requer B.C.s para escrever  $n$  expressões.

# Esquema implícito: FTBS



## *Parabolic PDE's: Simple Implicit Method*



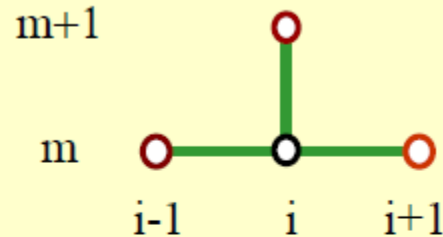
1. Requer I.C. para o caso em que  $m = 0$ : ou seja,  $T_i^m$  é dado para todo  $i$ .
2. Requer B.C.s para escrever  $n$  expressões.



# Esquema implícito: FTBS

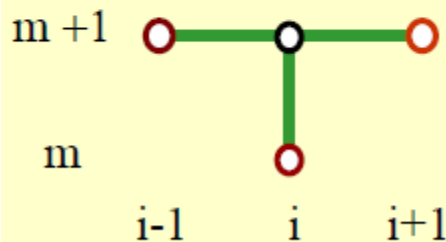


## Explicit Method



$$T_i^{m+1} = T_i^m + \lambda (T_{i+1}^m - 2T_i^m + T_{i-1}^m)$$

## Simple Implicit Method



$$T_i^m = -\lambda T_{i-1}^{m+1} + (1 + 2\lambda) T_i^{m+1} - \lambda T_{i+1}^{m+1}$$

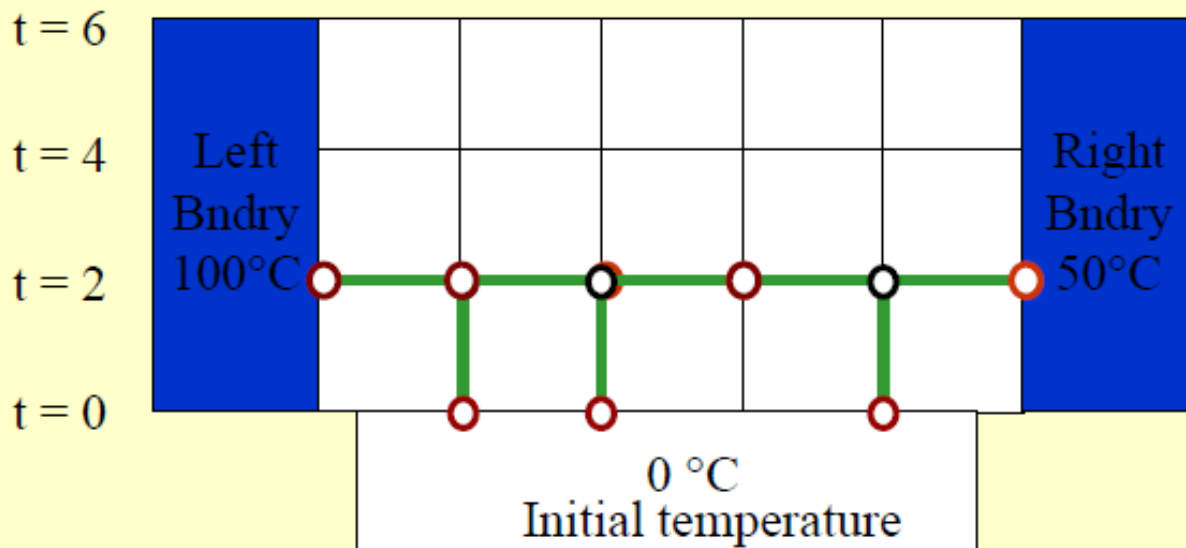
$$\text{with } \lambda = k \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \text{ for both}$$

1. Requer I.C. para o caso em que  $m = 0$ : ou seja,  $T_i^m$  é dado para todo  $i$ .
2. Requer B.C.s para escrever  $n$  expressões.

# Esquema implícito: FTBS

$$-\lambda T_{i-1}^{m+1} + (1+2\lambda)T_i^{m+1} - \lambda T_{i+1}^{m+1} = T_i^m \quad \text{with} \quad \lambda = k \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$$

## *Parabolic PDE's: Simple Implicit Method*



At the Left boundary:  $(1+2\lambda)T_1^{m+1} - \lambda T_2^{m+1} = T_1^m + \lambda T_0^{m+1}$

Away from boundary:  $-\lambda T_{i-1}^{m+1} + (1+2\lambda)T_i^{m+1} - \lambda T_{i+1}^{m+1} = T_i^m$

At the Right boundary:  $(1+2\lambda)T_i^{m+1} - \lambda T_{i-1}^{m+1} = T_i^m + \lambda T_{i+1}^{m+1}$

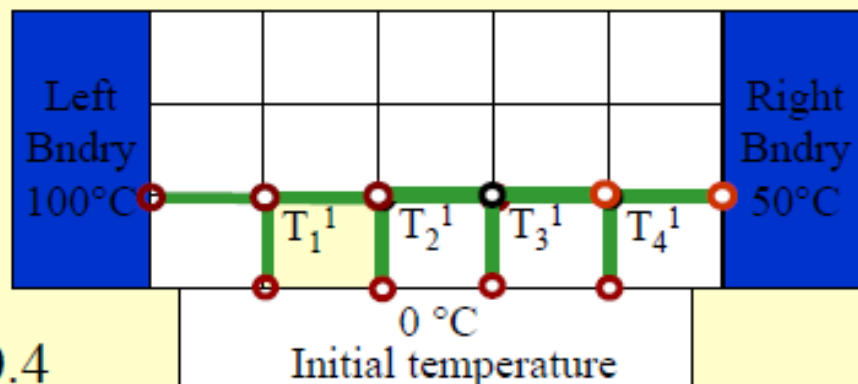
$m = 3; t = 6$

$m = 2; t = 4$

$m = 1; t = 2$

$m = 0; t = 0$

Let  $\lambda = 0.4$



$$\begin{bmatrix} 1.8 & -0.4 & 0 & 0 \\ -0.4 & 1.8 & -0.4 & 0 \\ 0 & -0.4 & 1.8 & -0.4 \\ 0 & 0 & -0.4 & 1.8 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_1^1 \\ T_2^1 \\ T_3^1 \\ T_4^1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 40 \\ 0 \\ 0 \\ 20 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} T_1^1 \\ T_2^1 \\ T_3^1 \\ T_4^1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 27.6 \\ 6.14 \\ 4.03 \\ 12.0 \end{Bmatrix}$$

At the Left boundary:  $(1+2\lambda)T_1^1 - \lambda T_2^1 = T_1^0 + \lambda T_0^1$

$$1.8 T_1^1 - 0.4 T_2^1 = 0 + 0.8 * 100 = 40$$

Away from boundary:  $-\lambda T_{i-1}^1 + (1+2\lambda)T_i^1 - \lambda T_{i+1}^1 = T_i^0$

$$-0.4 T_1^1 + 1.8 T_2^1 - 0.4 T_3^1 = 0 = 0$$

$$-0.4 T_2^1 + 1.8 T_3^1 - 0.4 T_4^1 = 0 = 0$$

At the Right boundary:  $(1+2\lambda)T_3^1 - \lambda T_2^1 = T_3^0 + \lambda T_4^1$

$$1.8 T_3^1 - 0.4 T_2^1 = 0 + 0.4 * 50 = 20$$

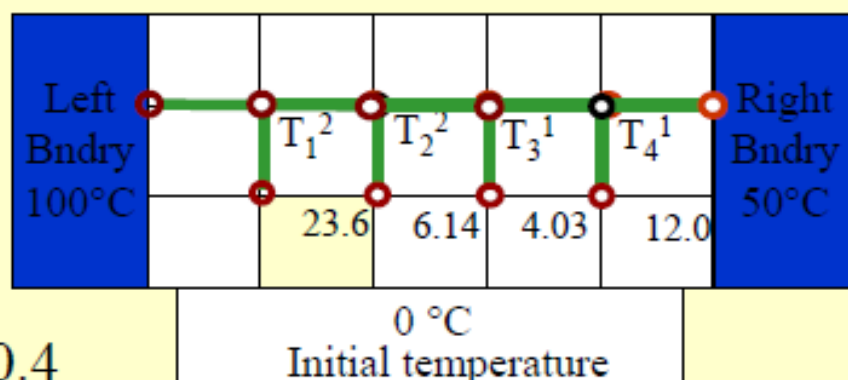
$m = 3; t = 6$

$m = 2; t = 4$

$m = 1; t = 2$

$m = 0; t = 0$

Let  $\lambda = 0.4$



$$\begin{bmatrix} 1.8 & -0.4 & 0 & 0 \\ -0.4 & 1.8 & -0.4 & 0 \\ 0 & -0.4 & 1.8 & -0.4 \\ 0 & 0 & -0.4 & 1.8 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_1^2 \\ T_2^2 \\ T_3^2 \\ T_4^2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 78.5 \\ 6.14 \\ 4.03 \\ 32.0 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} T_1^2 \\ T_2^2 \\ T_3^2 \\ T_4^2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 38.5 \\ 14.1 \\ 9.83 \\ 20.0 \end{Bmatrix}$$

At the Left boundary:  $(1+2\lambda)T_1^2 - \lambda T_2^2 = T_1^1 + \lambda T_0^2$

$$1.8 T_1^2 - 0.4 T_2^2 = 23.6 + 0.4 * 100 = 78.5$$

Away from boundary:  $-\lambda T_{i-1}^2 + (1+2\lambda)T_i^2 - \lambda T_{i+1}^2 = T_i^1$

$$-0.4 * T_1^2 + 1.8 * T_2^2 - 0.4 * T_3^2 = 6.14 = 6.14$$

$$-0.4 * T_2^2 + 1.8 * T_3^2 - 0.4 * T_4^2 = 4.03 = 4.03$$

At the Right boundary:  $(1+2\lambda)T_3^2 - \lambda T_4^2 = T_3^1 + \lambda T_4^2$

$$1.8 * T_3^2 - 0.4 * T_4^2 = 12.0 + 0.4 * 50 = 32.0$$



## **Analise de estabilidade**

# Esquema implícito: FTBS

A equação de advecção linear com discretização Backward no tempo e backward no espaço pode ser escrita como:

$$\boxed{\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} = 0} \quad (25)$$

$$\phi_j^{n+1} - \phi_j^n = -u \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1})$$

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1})$$

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - C(\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1})$$

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - C\phi_j^{n+1} + C\phi_{j-1}^{n+1}$$

$$\phi_j^{n+1} + C\phi_j^{n+1} = \phi_j^n + C\phi_{j-1}^{n+1}$$

$$(1 + C)\phi_j^{n+1} = \phi_j^n + C\phi_{j-1}^{n+1}$$

$$\boxed{\phi_j^{n+1} = \frac{1}{(1 + C)} (\phi_j^n + C\phi_{j-1}^{n+1})} \quad (26)$$

## Exercício: mostrar que o fator de amplificação no esquema BTBS

É incondicionalmente estável i.e.

$$|A|^2 = [1 + 2c(1 + c)(1 - \cos(k\Delta x))]^{-1}$$

$$\phi_j^{n+1} = \frac{1}{(1 + C)} (\phi_j^n + C\phi_{j-1}^{n+1}) \quad (27)$$

Substituindo  $\phi(x_j, t_n) = A^n e^{ikj\Delta x}$  Na eqn 26º temos.

$$A^{n+1} e^{ikj\Delta x} = \frac{1}{(1 + C)} (A^n e^{ikj\Delta x} + CA^{n+1} e^{ik(j+1)\Delta x})$$

$$A^n A e^{ikj\Delta x} = \frac{1}{(1 + C)} (A^n e^{ikj\Delta x} + CA^n A e^{ikj\Delta x} e^{ik\Delta x})$$

Cancelando os termo  $A^n e^{ikj\Delta x}$  .

$$\cancel{A^n A e^{ikj\Delta x}} = \frac{1}{(1 + C)} (\cancel{A^n e^{ikj\Delta x}} + C \cancel{A^n A e^{ikj\Delta x}} e^{ik\Delta x})$$

$$A = \frac{1}{(1 + C)} (1 + CA e^{ik\Delta x})$$

$$A = \frac{1}{(1+C)} (1 + CAe^{ik\Delta x})$$

$$(1+C)A = (1 + CAe^{ik\Delta x})$$

$$(1+C)A - CAe^{ik\Delta x} = 1$$

$$A(1+C - Ce^{ik\Delta x}) = 1$$

$$A = \frac{1}{(1+C - Ce^{ik\Delta x})}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1+C - Ce^{ik\Delta x})} \frac{1}{(1+C - Ce^{-ik\Delta x})}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1+C - Ce^{-ik\Delta x} + C + C^2 - C^2e^{-ik\Delta x} - Ce^{ik\Delta x} - C^2e^{ik\Delta x} + C^2e^{ik\Delta x - ik\Delta x})}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1+C - \textcolor{red}{C}e^{-ik\Delta x} + C + C^2 - \textcolor{red}{C}^2e^{-ik\Delta x} - \textcolor{blue}{C}e^{ik\Delta x} - \textcolor{blue}{C}^2e^{ik\Delta x} + C^2)}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1+2C+2C^2 - (C+C^2)\textcolor{red}{e}^{-ik\Delta x} - (C+C^2)\textcolor{blue}{e}^{ik\Delta x})}$$



$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2C + 2C^2 - (C + C^2)e^{-ik\Delta x} - (C + C^2)e^{ik\Delta x})}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2C + 2C^2 - (C + C^2)(e^{-ik\Delta x} + e^{ik\Delta x}))}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{\left(1 + 2C + 2C^2 - 2(C + C^2)\frac{(e^{-ik\Delta x} + e^{ik\Delta x})}{2}\right)}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2C + 2C^2 - 2(C + C^2)\cos(k\Delta x))}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2(C + C^2) - 2(C + C^2)\cos(k\Delta x))}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2(C + C^2)(1 - \cos(k\Delta x)))}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2C(1 + C)(1 - \cos(k\Delta x)))}$$

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2C(1 + C)(1 - \cos(k\Delta x)))}$$

Para qualquer numero de onda exceto para  $k=0$ ,  $(1 - \cos(k\Delta x)) > 0$

Então  $2C(1 + C) > 0$

Portanto

$$|A|^2 = \frac{1}{(1 + 2C(1 + C)(1 - \cos(k\Delta x)))} \leq 1$$

A discretização no tempo realizada pelo método implícito implícita, pode ser escrito na forma: Aqui o nosso método upwind torna-se :

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} = 0$$

Nós podemos escrever a equação como um sistema linear de equações acopladas:

$$\phi_j^{n+1} - \phi_j^n = -u \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1})$$

Defini-se  $C = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$

$$\phi_j^{n+1} - \phi_j^n = -C(\phi_j^{n+1} - \phi_{j-1}^{n+1})$$

$$\phi_j^{n+1} - \phi_j^n = -C\phi_j^{n+1} + C\phi_{j-1}^{n+1}$$

$$\phi_j^{n+1} + C\phi_j^{n+1} - C\phi_{j-1}^{n+1} = \phi_j^n$$

$$-C\phi_{j-1}^{n+1} + (1 + C)\phi_j^{n+1} = \phi_j^n$$

Em forma matricial, resolve-se para os pontos  $1, \dots, j-1$ , isto é:

$$\begin{pmatrix} 1+C & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -C \\ -C & 1+C & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -C & 1+C & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -C & 1+C & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -C & 1+C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -C & 1+C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^{n+1} \\ \phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \phi_4^{n+1} \\ \vdots \\ \phi_{j-2}^{n+1} \\ \phi_{j-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1^n \\ \phi_2^n \\ \phi_3^n \\ \phi_4^n \\ \vdots \\ \phi_{j-2}^n \\ \phi_{j-1}^n \end{pmatrix}$$

Isto requer a resolução de uma matriz isto torna o métodos implícitos geralmente mais caros do que os métodos explícitos. No entanto, a análise de estabilidade mostraria que esta discretização implícita é estável para qualquer escolha de  $C$ . (Mas não se deve confundir estabilidade com precisão. As soluções mais precisas com este método ainda deverá ter um  $C$  pequeno). Observe também que a forma da matriz vai mudar dependendo da escolha das condições de contorno.

# Exercício

- Resolver a equação advecção 1D numericamente no domínio  $0 \leq X \leq 1000M$ . Deixe  $\Delta x = 0,5 M$ . Presume-se que, para a velocidade de Advecção  $U = 1 \text{ m/s}$ . Deixe o estado inicial ser uma função passo . Para a condição limite use  $\phi(0,t) = 0$ .

$$\phi(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 40 \\ 10 & \text{for } 40 \leq x \leq 200 \\ 0 & \text{for } x > 200 \end{cases} .$$

Usando o esquema BTBS e mostrar soluções para  $T = 0S$   
 $T = 100^o -s$ ,  $T = 200S$   $T = 300S$  ,  $T = 800S$ .

1. Compare as soluções de 26º com  $c=1,0$  e  $c=3,0$

```

MODULE LinearSolve
  IMPLICIT NONE
  PRIVATE
  INTEGER, PARAMETER :: r8 = selected_real_kind(15, 307)
  INTEGER, PARAMETER :: r4 = selected_real_kind(6, 37)
  PUBLIC :: solve_tridiag
  CONTAINS
  subroutine solve_tridiag(a,b,c,d,x,n)
    implicit none
    !a - sub-diagonal (diagonal abaixo da diagonal principal)
    !b - diagonal principal
    !c - sup-diagonal (diagonal acima da diagonal principal)
    !d - parte à direita
    !x - resposta
    !n - número de equações
    integer, intent(in) :: n
    real (r8), dimension (n), intent (in ) :: a,b,c,d
    real (r8), dimension (n), intent (out) :: x
    real (r8), dimension (n) :: cp, dp
    real (r8) :: m
    integer :: i

    ! inicializar c-primo e d-primo
    cp(1) = c(1)/b(1)
    dp(1) = d(1)/b(1)

    ! resolver para vetores c-primo e d-primo
    do i = 2,n
      m = b(i)-cp(i-1)*a(i)
      cp(i) = c(i)/m
      dp(i) = (d(i)-dp(i-1)*a(i))/m
    enddo

    ! inicializar x
    x(n) = dp(n)

    ! resolver para x a partir de vetores c-primo e d-primo
    do i = n-1, 1, -1
      x(i) = dp(i)-cp(i)*x(i+1)
    end do
  end subroutine solve_tridiag
END MODULE LinearSolve

```

```

MODULE Class_Fields
  IMPLICIT NONE
  PRIVATE
  INTEGER, PARAMETER :: r8 = selected_real_kind(15, 307)
  INTEGER, PARAMETER :: r4 = selected_real_kind(6, 37)
  REAL (KIND=r8), PUBLIC, ALLOCATABLE :: A0 (:)
  REAL (KIND=r8), PUBLIC, ALLOCATABLE :: A (:)
  REAL (KIND=r8), PUBLIC, ALLOCATABLE :: Anew(:)
  REAL (KIND=r8), PUBLIC, ALLOCATABLE :: AA (:,:)
  REAL (KIND=r8), PUBLIC, ALLOCATABLE :: B (:)
  REAL (KIND=r8), PUBLIC, ALLOCATABLE :: X (:)
  INTEGER , PUBLIC :: ilo
  INTEGER , PUBLIC :: ihi
  INTEGER , PUBLIC :: iMax
  PUBLIC :: Init_Class_Fields

  CONTAINS

  SUBROUTINE Init_Class_Fields(nx,dx, coef_C )
    IMPLICIT NONE
    INTEGER , INTENT (IN ) :: nx
    REAL (KIND=r8) , INTENT (IN ) :: dx
    REAL (KIND=r8) , INTENT (IN ) :: coef_C
    REAL (KIND=r8) :: coord_X(0:nx)
    INTEGER :: i
    iMax=nx
    ALLOCATE (A0 (0:iMax) )
    ALLOCATE (A (0:iMax) )
    ALLOCATE (Anew (0:iMax) )
    ALLOCATE (AA (0:iMax+1,0:iMax+1))
    ALLOCATE (B (0:iMax) )
    ALLOCATE (X (0:iMax) )

    !# python is zero-based. We are assuming periodic BCs, so
    !# points 0 and N-1 are the same. Set some integer indices to
    !# allow us to easily access points 1 through N-1. Point 0
    !# won't be explicitly updated, but rather filled by the BC
    !# routine.

```

```

ilo = 1
ihi = iMax-1
DO i=0,iMax
  coord_X(i) = REAL(i,KIND=r8)*dx
END DO
!
! initialize the data -- tophat
!
DO i=0,iMax
  IF(coord_X(i) >= 0.333_r8 .and. coord_X(i) <= 0.666_r8)
THEN
  A0(i) = COS(0.50_r8 - coord_X(i))
  ELSE
  A0(i) = 0.0_r8
  END IF
END DO
A=A0
AA=0.0_r8
!
! "" we don't explicitly update point 0, since it is identical
! to N-1, so fill it here ""
A(0) = A(ihi)

```

```

!
! 
$$\frac{a(t+1,i) - a(t,i)}{Dt} = -U \frac{a(t+1,i) - a(t+1,i-1)}{Dx}$$

!
!
!
! 
$$a(t+1,i) - a(t,i) = -U \frac{Dt}{Dx} [a(t+1,i) - a(t+1,i-1)]$$

!
!
!
!
!
! 
$$a(t+1,i) - a(t,i) = -C [a(t+1,i) - a(t+1,i-1)]$$

!
!
!
!

```

```

!
!  $a(t+1,i) - a(t,i) = -Ca(t+1,i) + Ca(t+1,i-1)$ 
!
!  $a(t+1,i) + Ca(t+1,i) - Ca(t+1,i-1) = a(t,i)$ 
!
!  $-C a(t+1,i-1) + (1 + C) a(t+1,i) = a(t,i)$ 
!
!  $-C a(t+1, 0) + (1 + C) a(t+1,1) = a(t,1)$ 
!  $-C a(t+1, 1) + (1 + C) a(t+1,2) = a(t,2)$ 
!  $-C a(t+1, 2) + (1 + C) a(t+1,3) = a(t,3)$ 
!  $-C a(t+1, 3) + (1 + C) a(t+1,4) = a(t,4)$ 
!  $-C a(t+1,i-1) + (1 + C) a(t+1,i) = a(t,i)$ 
!
! 
$$\begin{bmatrix} (1+C) & 0 & -C \\ -C & (1+C) & 0 \\ 0 & -C & (1+C) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(t+1,1) \\ a(t+1,2) \\ a(t+1,i-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a(t,1) \\ a(t,2) \\ a(t,i) \end{bmatrix}$$

!
!  $A X = B$ 
!

```

```

!# create the matrix
!# loop over rows [ilo,ihi] and construct the matrix. This will
!# be almost bidiagonal, but with the upper right entry also
!# nonzero.
!
AA(0,ihi) = 1.0_r8 + coef_C
AA(0,ilo) = -coef_C
DO i=ilo,ihi
  AA(i,i+1) = 0.0_r8
  AA(i,i) = 1.0_r8 + coef_C
  AA(i,i-1) = -coef_C
END DO
AA(nx,ihi) = 1.0_r8 + coef_C
AA(nx,ilo) = -coef_C
END SUBROUTINE Init_Class_Fields
END MODULE Class_Fields

```

**MODULE** Class\_WritetoGradsUSE Class\_Fields, **Only**: Anew,A,iMax**IMPLICIT NONE****PRIVATE****INTEGER, PUBLIC** , **PARAMETER** :: r8=8**INTEGER, PUBLIC** , **PARAMETER** :: r4=4**INTEGER** , **PARAMETER** :: UnitData=1**INTEGER** , **PARAMETER** :: UnitCtl=2**CHARACTER** (LEN=400) :: FileName**LOGICAL** :: CtrlWriteDataFile**PUBLIC** :: SchemeWriteCtl**PUBLIC** :: SchemeWriteData**PUBLIC** :: InitClass\_WritetoGrads**CONTAINS****SUBROUTINE** InitClass\_WritetoGrads()**IMPLICIT NONE**

FileName=""

FileName='ImplicitLinearAdvection1D'

CtrlWriteDataFile=.TRUE.

**END SUBROUTINE** InitClass\_WritetoGrads**FUNCTION** SchemeWriteData(irec) **RESULT** (ok)**IMPLICIT NONE****INTEGER** , **INTENT** (INOUT) :: irec**INTEGER** :: ok**INTEGER** :: lrec**REAL** (KIND=r4) :: Yout(iMax)**INQUIRE** (IOLENGTH=lrec) Yout**IF**(CtrlWriteDataFile) **OPEN** (UnitData,**FILE**=TRIM(FileName)//'.bin', &**FORM**='UNFORMATTED', **ACCESS**='DIRECT',**STATUS**='UNKNOWN',&**ACTION**='WRITE',**RECL**=lrec)

CtrlWriteDataFile=.FALSE.

Yout=**REAL**(A(1:iMax),**KIND**=r4)

lrec=lrec+1

**WRITE**(UnitData,**rec**=lrec)Yout

ok=0

**END FUNCTION** SchemeWriteData**FUNCTION** SchemeWriteCtl(nrec) **RESULT**(ok)**IMPLICIT NONE****INTEGER, INTENT** (IN) :: nrec**INTEGER** :: ok**OPEN** (UnitCtl,**FILE**=TRIM(FileName)//'.ctl', &**FORM**='FORMATTED',**ACCESS**='SEQUENTIAL', &**STATUS**='UNKNOWN',**ACTION**='WRITE')**WRITE** (UnitCtl,'(A6,A )')'dset ^',TRIM(FileName)//'.bin'**WRITE** (UnitCtl,'(A )')'title EDO'**WRITE** (UnitCtl,'(A )')'undef -9999.9'**WRITE** (UnitCtl,'(A6,l8,A18 )')'xdef ',iMax,' linear 0.00 0.001'**WRITE** (UnitCtl,'(A )')'ydef 1 linear -1.27 1'**WRITE** (UnitCtl,'(A6,l6,A25 )')'tdef ',nrec,' linear

00z01jan0001 1hr'

**WRITE** (UnitCtl,'(A20 )')'zdef 1 levels 1000 '**WRITE** (UnitCtl,'(A )')'vars 1'**WRITE** (UnitCtl,'(A )')'A 0 99 resultado da edol yc'**WRITE** (UnitCtl,'(A )')'endvars'**CLOSE** (UnitCtl,**STATUS**='KEEP')**CLOSE** (UnitData,**STATUS**='KEEP')

ok=0

**END FUNCTION** SchemeWriteCtl**END MODULE** Class\_WritetoGrads



**END SUBROUTINE Init**

**irec=0**

**DO** i=1,ninteraction

**! create the RHS -- this holds all entries except for a[0]**

```

B (ilo:ihi) = A(ilo:ihi)
    ! tridag(a,b,c,d,nn)
    ! PRINT*,A
    ! PRINT*, " ! tridag(a,b,c,d,nn)tridag(a,b,c,d,nn)"
    Anew (ilo:ihi) = 0.0_r8
test=SchemeWriteData(irec)

```

```
CALL solve_tridiag( a_sub_diagonal(ilo:ihi), &
                    b_pri_diagonal(ilo:ihi), &
                    c_sup_diagonal(ilo:ihi), &
                    B                    (ilo:ihi), &
                    Anew                 (ilo:ihi), &
                    nx-1                 )
```

$$\begin{aligned} \text{Anew}(\text{ihi}+1) &= \text{Anew}(\text{ihi}) \\ \text{A}(\text{ilo}:\text{ihi}+1) &= \text{Anew}(\text{ilo}:\text{ihi}+1) \end{aligned}$$
$$\begin{aligned} A(i_{lo}+2) &= A(i_{hi}) \\ A(i_{lo}+1) &= A(i_{hi}-1) \\ A(i_{lo}) &= A(i_{hi}-2) \end{aligned}$$

```
END DO ! t += dt
test=SchemeWriteCtl(ninteraction)
```

**END SUBROUTINE Run**

[illegible]

## SUBROUTINE Finalize()

```

END SUBROUTINE Finalize
END PROGRAM Main

```

# Exercício de difusão

🔴 Resolver numericamente o problema de difusão que tem sido discutido na seção anterior usando o esquema de diferença finitas para a derivada temporal. Use uma resolução espacial de  $\Delta x = 10^{-2}$  m e Coeficiente de difusão  $K = 2,9 \times 10^{-5}$ . Integrar para pelo menos

Para 6 horas (cerca de 25000 segundos), e mostrar as soluções para  $T = 1$  Hora,  $T = 2$  Horas,  $T = 3$  Horas,  $T = 4$  Horas,  $T = 5$  Horas, e  $T = 6$  Horas. Comparar a solução com o Uma análise Fourier (retenção 1000 componentes). Escolha o passo de tempo sendo de tal ordem que o sistema seja estável. Deixe o primeiro setup em temperatura de 1m haste longa dada.

```
x=0.0
DO i=1,iMax
  IF(x >= 0.0 .and. x < 0.5) THEN
    PHI_C(i)= 273.15 + 2*X
  ELSE IF(x > 0.5 .and. x < 1.0) THEN
    PHI_C(i)= 273.15 + 2.0 - 2*X
  END IF
  x = (i)* DX
END DO
```

Ambas as extremidades são mantidos na mesma temperatura  
 $T_0 = 273.15K$ .



## Esquemas Implícitos para PDEs Parabólicas

O Esquema Crank-Nicholson é centrado no tempo e no espaço.

Método Crank-Nicolson (CN) (Método Implícito) Fornece precisão de 2ª ordem no espaço e no tempo. Média da 2ª derivada no espaço para  $t^{m+1}$  e  $t^{m+1}$ .

Tem boas propriedades de estabilidade e precisão.

Tem precisão de segunda ordem e incondicionalmente estável.

Duas formas do esquema de Crank-Nicholson para o esquema de advecção são comumente usadas:

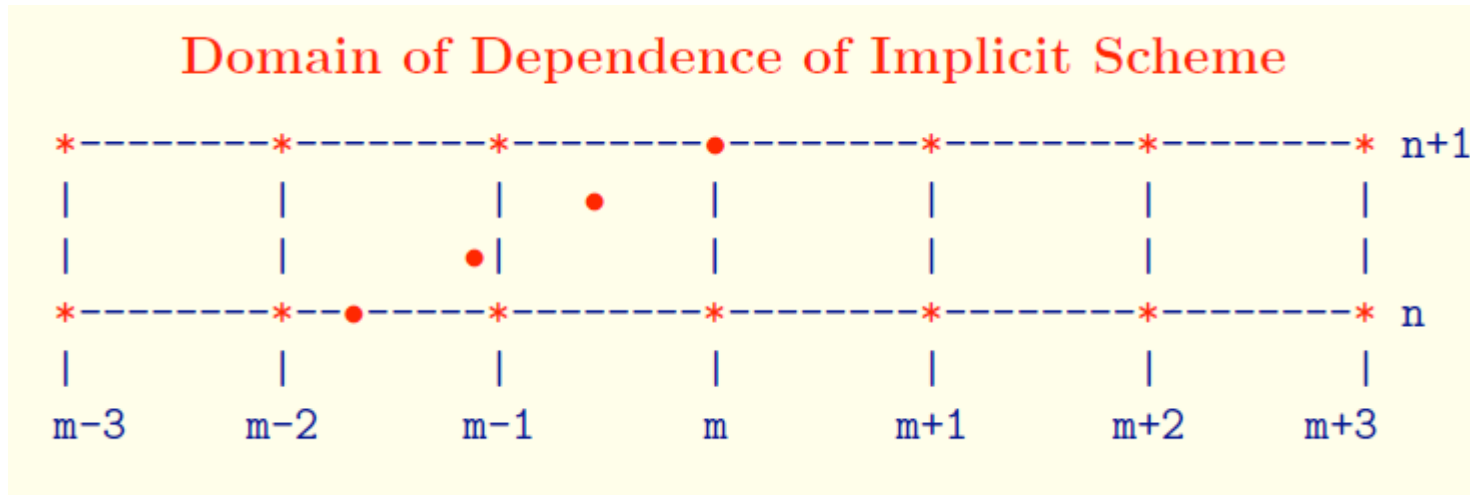


O Esquema C-N de quatro pontos:

$$\frac{1}{2} \left[ \frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{\Delta t} + \frac{U_{m+1}^{n+1} - U_{m-1}^n}{\Delta t} \right] + \frac{c}{2} \left[ \frac{U_{m+1}^{n+1} - U_m^{n+1}}{\Delta x} + \frac{U_{m+1}^n - U_m^n}{\Delta x} \right] = 0$$

O Esquema C-N de seis pontos:

$$\frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{\Delta t} + \frac{c}{2} \left[ \frac{U_{m+1}^{n+1} - U_{m-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{U_{m+1}^n - U_m^n}{2\Delta x} \right] = 0$$



A linha com bolinhas (●) representa uma trajetória de parcela.

O valor no ponto  $m\Delta x$  no tempo  $(n + 1)\Delta t$  **depende de todos os pontos indicados por asteriscos vermelhos (\*)**.

Assim, o domínio computacional de dependência envolve o domínio físico de dependência.

Esta é uma **condição necessária para um esquema estável**.



Todos os esquemas implícitos também têm uma **desvantagem significativa**.

Como  $U_m^{n+1}$  aparece nos lados esquerdo e direito, a solução para  $U_m^{n+1}$  **requer a solução de um sistema de equações**.

Se envolver apenas **sistemas tridiagonais**, isso não é um obstáculo, pois existem **métodos rápidos para resolvê-los**.

Existem também métodos, como passos fracionários (com cada direção espacial resolvida sucessivamente), onde uma dimensão do espaço é considerada de cada vez.

Esses esquemas chamados **ADI (alternating direction implicit)** permitem grandes passos de tempo sem um grande custo computacional adicional.



## Esquemas Implícitos para PDEs Parabólicas

Método Crank-Nicolson (CN) (Método Implícito) Fornece precisão de 2ª ordem no espaço e no tempo. Média da 2ª derivada no espaço para  $t^{m+1}$  e  $t^m$ .

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{T_{i-1}^m - 2T_i^m + T_{i+1}^m}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i-1}^{m+1} - 2T_i^{m+1} + T_{i+1}^{m+1}}{(\Delta x)^2} \right] + O(\Delta x)^2$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{m+1} - T_i^m}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (\text{central difference in time now})$$

$$-\lambda T_{i-1}^{m+1} + 2(1 + \lambda)T_i^{m+1} - \lambda T_{i+1}^{m+1} = \lambda T_{i-1}^m + 2(1 - \lambda)T_i^m - \lambda T_{i+1}^m$$

Requer I.C. para o caso em que  $m = 0$ :  $T_i^0$  valor dado,  $f(x)$

Requer BC's para escrever a expressão para  $T_0^{m+1}$  &  $T_{i+1}^{m+1}$





Exercício:

Método Crank-Nicolson (CN).

Requer I.C. para o caso em que  $m = 0$ :  $T_i^0$  valor dado,  $f(x)$   
 Requer BC's para escrever a expressão para  $T_0^{m+1}$  &  $T_{i+1}^{m+1}$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{T_{i-1}^m - 2T_i^m + T_{i+1}^m}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i-1}^{m+1} - 2T_i^{m+1} + T_{i+1}^{m+1}}{(\Delta x)^2} \right] + O(\Delta x)^2$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{m+1} - T_i^m}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (\text{central difference in time now})$$

$$-\lambda T_{i-1}^{m+1} + 2(1 + \lambda)T_i^{m+1} - \lambda T_{i+1}^{m+1} = \lambda T_{i-1}^m + 2(1 - \lambda)T_i^m - \lambda T_{i+1}^m$$

$$2T_i^{n+1} - 2T_i^n = \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} (T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n + T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1})$$

$$2T_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} (T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}) = \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} (T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n) + 2T_i^n$$

$$2T_i^{n+1} + 2\frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i-1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i+1}^{n+1} = 2T_i^n - 2\frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i-1}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i+1}^n$$

$$-\frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i-1}^{n+1} + \left(2 + 2\frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x}\right) T_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i+1}^{n+1} = \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i-1}^n + \left(2 - 2\frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x}\right) T_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i+1}^n$$



$$-\frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i-1}^{n+1} + \left(2 + 2 \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x}\right) T_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i+1}^{n+1} = \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i-1}^n + \left(2 - 2 \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x}\right) T_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta x} T_{i+1}^n$$

$$-\lambda T_{i-1}^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_i^{n+1} - \lambda T_{i+1}^{n+1} = \lambda T_{i-1}^n + 2(1 - \lambda) T_i^n + \lambda T_{i+1}^n$$

Exercício:

Método Crank-Nicolson (CN).

$$-\lambda T_{i-1}^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_i^{n+1} - \lambda T_{i+1}^{n+1} = \lambda T_{i-1}^n + 2(1 - \lambda) T_i^n + \lambda T_{i+1}^n$$

$$i = 1 \Rightarrow -\lambda T_0^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_1^{n+1} - \lambda T_2^{n+1} = \lambda T_0^n + 2(1 - \lambda) T_1^n + \lambda T_2^n$$

$$i = 2 \Rightarrow -\lambda T_1^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_2^{n+1} - \lambda T_3^{n+1} = \lambda T_1^n + 2(1 - \lambda) T_2^n + \lambda T_3^n$$

$$i = 3 \Rightarrow -\lambda T_2^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_3^{n+1} - \lambda T_4^{n+1} = \lambda T_2^n + 2(1 - \lambda) T_3^n + \lambda T_4^n$$

$$i = 4 \Rightarrow -\lambda T_3^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_4^{n+1} - \lambda T_5^{n+1} = \lambda T_3^n + 2(1 - \lambda) T_4^n + \lambda T_5^n$$

$$i = 5 \Rightarrow -\lambda T_4^{n+1} + 2(1 + \lambda) T_5^{n+1} - \lambda T_6^{n+1} = \lambda T_4^n + 2(1 - \lambda) T_5^n + \lambda T_6^n$$

$$[A][X] = [B]$$



Exercício:

Método Crank-Nicolson (CN).

$$-\lambda T_{i-1}^{n+1} + 2(1 + \lambda)T_i^{n+1} - \lambda T_{i+1}^{n+1} = \lambda T_{i-1}^n + 2(1 - \lambda)T_i^n + \lambda T_{i+1}^n$$

$$i = 1 \Rightarrow -\lambda T_0^{n+1} + 2(1 + \lambda)T_1^{n+1} - \lambda T_2^{n+1} = \lambda T_0^n + 2(1 - \lambda)T_1^n + \lambda T_2^n$$

$$i = 2 \Rightarrow -\lambda T_1^{n+1} + 2(1 + \lambda)T_2^{n+1} - \lambda T_3^{n+1} = \lambda T_1^n + 2(1 - \lambda)T_2^n + \lambda T_3^n$$

$$i = 3 \Rightarrow -\lambda T_2^{n+1} + 2(1 + \lambda)T_3^{n+1} - \lambda T_4^{n+1} = \lambda T_2^n + 2(1 - \lambda)T_3^n + \lambda T_4^n$$

$$i = 4 \Rightarrow -\lambda T_3^{n+1} + 2(1 + \lambda)T_4^{n+1} - \lambda T_5^{n+1} = \lambda T_3^n + 2(1 - \lambda)T_4^n + \lambda T_5^n$$

$$i = 5 \Rightarrow -\lambda T_4^{n+1} + 2(1 + \lambda)T_5^{n+1} - \lambda T_6^{n+1} = \lambda T_4^n + 2(1 - \lambda)T_5^n + \lambda T_6^n$$

$$\begin{bmatrix} 2(1 + \lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda \\ -\lambda & 2(1 + \lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 2(1 + \lambda) & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 2(1 + \lambda) & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1 + \lambda) & -\lambda \\ -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1 + \lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{n+1} \\ T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ T_4^{n+1} \\ T_5^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda T_{-1}^n + 2(1 - \lambda)T_0^n + \lambda T_1^n \\ \lambda T_0^n + 2(1 - \lambda)T_1^n + \lambda T_2^n \\ \lambda T_1^n + 2(1 - \lambda)T_2^n + \lambda T_3^n \\ \lambda T_2^n + 2(1 - \lambda)T_3^n + \lambda T_4^n \\ \lambda T_3^n + 2(1 - \lambda)T_4^n + \lambda T_5^n \\ \lambda T_4^n + 2(1 - \lambda)T_5^n + \lambda T_6^n \end{bmatrix}$$



Exercício:

Método Crank-Nicolson (CN).

$$\begin{bmatrix} 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda \\ -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda \\ -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{n+1} \\ T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ T_4^{n+1} \\ T_{i+1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda T_{-1}^n + 2(1-\lambda)T_0^n + \lambda T_1^n \\ \lambda T_0^n + 2(1-\lambda)T_1^n + \lambda T_2^n \\ \lambda T_1^n + 2(1-\lambda)T_2^n + \lambda T_3^n \\ \lambda T_2^n + 2(1-\lambda)T_3^n + \lambda T_4^n \\ \lambda T_3^n + 2(1-\lambda)T_4^n + \lambda T_5^n \\ \lambda T_4^n + 2(1-\lambda)T_5^n + \lambda T_6^n \\ \lambda T_{i-1}^n + 2(1-\lambda)T_i^n + \lambda T_{i+1}^n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda \\ -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda \\ -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{n+1} \\ T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ T_4^{n+1} \\ T_{i+1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & 0 & 0 & \lambda \\ \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda \\ \lambda & 0 & 0 & 0 & \lambda & 2(1-\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^n \\ T_1^n \\ T_2^n \\ T_3^n \\ T_4^n \\ T_{i+1}^n \end{bmatrix}$$

Simbolicamente, a equação pode ser escrita

$$M_1 U_i^{n+1} = M_2 U_i^n$$



Exercício:  
Método Crank-Nicolson (CN).

Simbolicamente, a equação pode ser escrita

$$M_1 U_i^{n+1} = M_2 U_i^n$$

A solução formal disso é trivial:

$$U_i^{n+1} = M_1^{-1} M_2 U_i^n$$

No entanto, isso **requer a inversão de uma matriz  $M \times M$** . **Existem maneiras muito melhores de resolver isso.**

A matriz  **$M_1$  é tri-diagonal periódica**. Existem muito **métodos numéricos eficientes de inverter um sistema com tal matriz.**



Exercício:  
Método Crank-Nicolson (CN).

O **problema não periódico**, com dados  $U_0^n$  e  $U_M^n$ , resulta em uma matriz ligeiramente diferente, mas também tri-diagonal.

**Se os termos não lineares são tratados implicitamente**, devemos resolver um sistema algébrico não linear a cada passo de tempo.

**Isso normalmente é impraticável.**

**A possibilidade de usar um passo de tempo com um número de Courant muito maior que 1 em um esquema implícito não garante que obteremos resultados precisos e econômico computacionalmente.**

O **esquema implícito mantém a estabilidade** retardando as soluções, de modo que as ondas satisfaçam a condição CFL.



Exercício:  
Método Crank-Nicolson (CN).

Por esta razão, esquemas implícitos são úteis para aqueles modos que são muito rápidos, mas de pouca importância meteorológica.

Em Estudos futuros, consideraremos esquemas nos quais os termos da onda gravitacional são implícitos enquanto os termos restantes são explícitos.

Esses esquemas semi-implícitos são de importância crucial na **NWP moderna**.



Exercício:

Método Crank-Nicolson (CN).

$$\begin{bmatrix} 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda \\ -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) & -\lambda \\ -\lambda & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2(1+\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{n+1} \\ T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ T_4^{n+1} \\ T_{i+1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & 0 & 0 & \lambda \\ \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 2(1-\lambda) & \lambda \\ \lambda & 0 & 0 & 0 & \lambda & 2(1-\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^n \\ T_1^n \\ T_2^n \\ T_3^n \\ T_4^n \\ T_{i+1}^n \end{bmatrix}$$

$$M_1 U_i^{n+1} = M_2 U_i^n$$

$$U_i^{n+1} = M_1^{-1} M_2 U_i^n$$