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 diferencias parciais que governam os movimentos na atmosfera serão o foco, mas também serão analisados os novos conceitos e novos métodos.

Modelo Numérico da Atmosfera

- ✓ 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-Lagrangeanos.
- ✓ Conservação de massa local.
- ✓ Esquemas explícitos versus semi-implícitos.
- ✓ Métodos semi-implícitos.

Consistência

O FDE é consistente com o PDE se, no limite $\Delta x \to 0$ e $\Delta t \to 0$, o FDE coincidir com o PDE.
Obviamente, esse é um requisito básico que o FDE deve atender se suas soluções forem boas aproximações das soluções do PDE.

A consistência é bastante simples de verificar:

- Substitua u em vez de U no FDE.
- Avalie todos os termos usando uma expansão da série de Taylor centrada no ponto $(x_j t_n)$.
- Subtraia o PDE do FDE.

Se a diferença (erro de truncamento local) for para zero como $\Delta x \to 0$ e $\Delta t \to 0$, então o FDE é consistente com o PDE.

Erro de truncamento e Consistência

Vamos verificar a consistência do esquema a montante para a equação de advecção.
Primeiro, considere a expansão da série Taylor:

$$\left.\begin{aligned} u_j^{n+1} &= \left(u + u_t\Delta t + \tfrac{1}{2}u_{tt}\Delta t^2 + \cdots\right)_j^n \\ u_{j-1}^n &= \left(u - u_x\Delta x + \tfrac{1}{2}u_{xx}\Delta x^2 - \cdots\right)_j^n \end{aligned}\right\}$$

$$\begin{cases} u_j^{n+1} - u_j^n = \left(u_t\Delta t + \dfrac{1}{2}u_{tt}\Delta t^2 + \cdots\right)_j^n \\ u_{j-1}^n - u_j^n = \left(-u_x\Delta x + \dfrac{1}{2}u_{xx}\Delta t^2 + \cdots\right)_j^n \end{cases}$$

Nós substituímos isso no FDE e obtemos

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + c\,\frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

$$\left(u_t + \tfrac{1}{2}u_{tt}\Delta t + \cdots\right)_j^n + c\left(u_x - \tfrac{1}{2}u_{xx}\Delta x + \cdots\right)_j^n \simeq 0$$

Subtrair o PDE resulta no erro de truncamento local:

$$\tau = \left(\frac{u_{tt}}{2}\right)\Delta t - \left(\frac{cu_{xx}}{2}\right)\Delta x + \text{H.O.T.} = O(\Delta t) + O(\Delta x)$$

Erro de truncamento e Consistência

Novamente, o erro de truncamento local é:

$$\tau = \left(\frac{u_{tt}}{2}\right)\Delta t - \left(\frac{cu_{xx}}{2}\right)\Delta x + \mathrm{H.O.T.} = O(\Delta t) + O(\Delta x)$$

Claramente, quando $\Delta x \to 0$ e $\Delta t \to 0$, temos $\tau \to 0$. Portanto, o FDE é consistente.

Observe que os erros de truncamento de tempo e espaço são de primeira ordem, porque as diferenças finitas não estão centradas tanto no espaço quanto no tempo.

Erros de truncamento para diferenças centralizadas são de segunda ordem.

Portanto, em geral, diferenças centralizadas são mais precisas do que diferenças não centradas.

# # #

Erros de truncamento são um fator crucial para determinar a precisão da previsão no NWP.

Convergência e Estabilidade

A segunda questão levantada acima foi **se a solução do FDE converge para a solução do PDE.**

Isto é, se deixarmos $\Delta x \to 0$ e $\Delta t \to 0$, de modo que $j\Delta x \to x$ e $n\Delta t \to t$, portanto, $U(j\Delta x, n\Delta t) \Rightarrow u(x,t)$?

Isso é claramente importante **e pode ser respondido considerando outro problema, o da estabilidade computacional.**

Considere novamente a equação de advecção

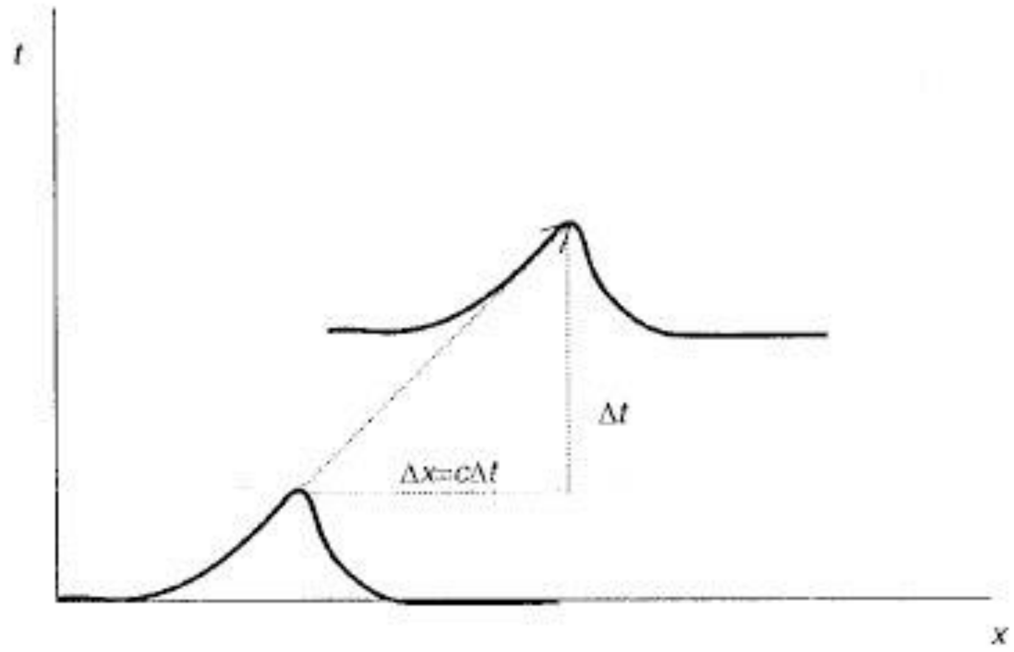
$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0\,,$$

que tem a solução $u(x,t) = u(x+ct,0)$

A forma da solução u (x, 0) se translada ao longo do eixo x com velocidade c (veja a Figura abaixo).

Convergência e Estabilidade

A forma da solução u (x, 0) se translada ao longo do eixo x com velocidade c (veja a Figura abaixo).



Esquema da solução da equação de advecção (para c> 0).

Convergência e Estabilidade

O FDE para o esquema upstream pode ser escrito como

$$U_j^{n+1} = (1-\mu)U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

onde

$$\mu \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x}$$

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + c\frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

é o número Courant (ou número Lewy).

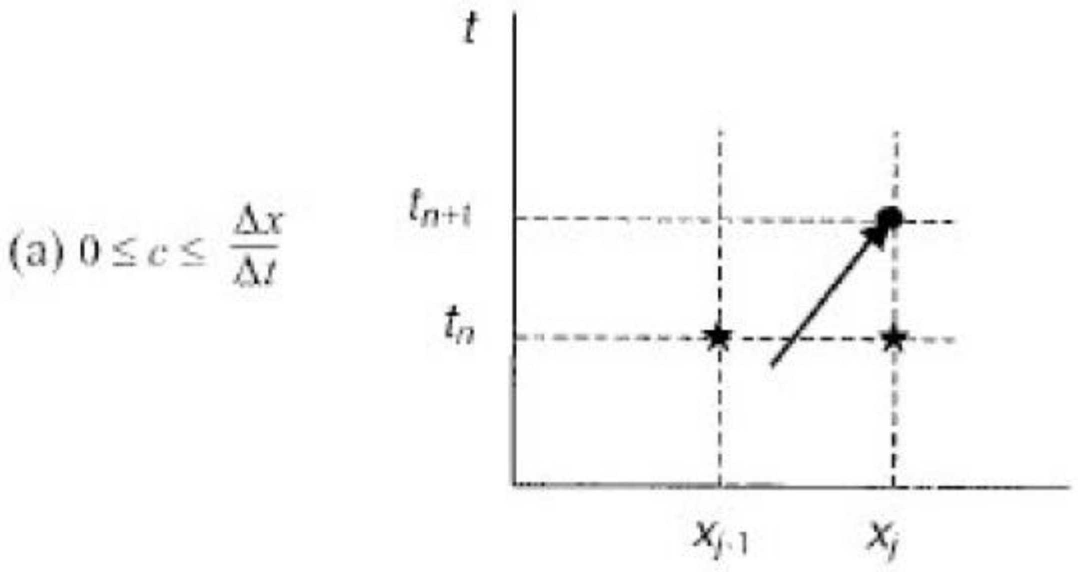
Vamos supor que $0 \leq \mu \leq 1$.

Então a solução FDE no novo nível de tempo U_j^{n+1} é **interpolada** entre os valores U_j^n e U_{j-1}^n.

Nesse caso, o esquema de advecção funciona da maneira que deveria, porque a verdadeira solução está entre esses valores (U_j^{n+1} e U_j^n).

Convergência e Estabilidade

$$\mu \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x}$$



$$U_j^{n+1} = (1-\mu)U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

Esquema da relação entre $\Delta x, \Delta t$ e c levando à interpolação da solução no nível de tempo $n+1$.

$$0 < \mu \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x} < 1$$

Convergência e Estabilidade

$$0 < \mu = \frac{c\Delta t}{\Delta x} < 1$$

No entanto, ***suponha que esta condição não seja satisfeita***, de modo que

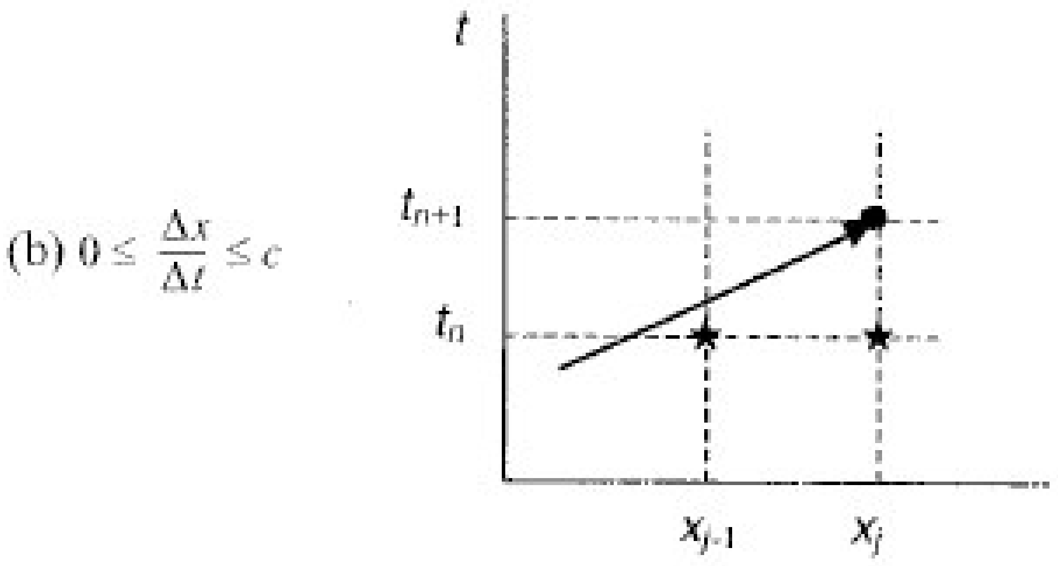
$$\mu = \frac{c\Delta t}{\Delta x} > 1 \qquad\qquad \mu = \frac{c\Delta t}{\Delta x} < 0\,.$$

Então, a parcela que chega ao ponto x_j no tempo t_{n+1} vem de algum lugar fora do intervalo $(x_j - 1, x_j)$ no tempo t_n.

Lembre-se de que $\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ é uma aproximação linear de $\frac{du}{dt} = 0$

Então os valores de U_j^{n+1} devem ser extrapolada dos valores U_j^n e U_{j-1}^n.

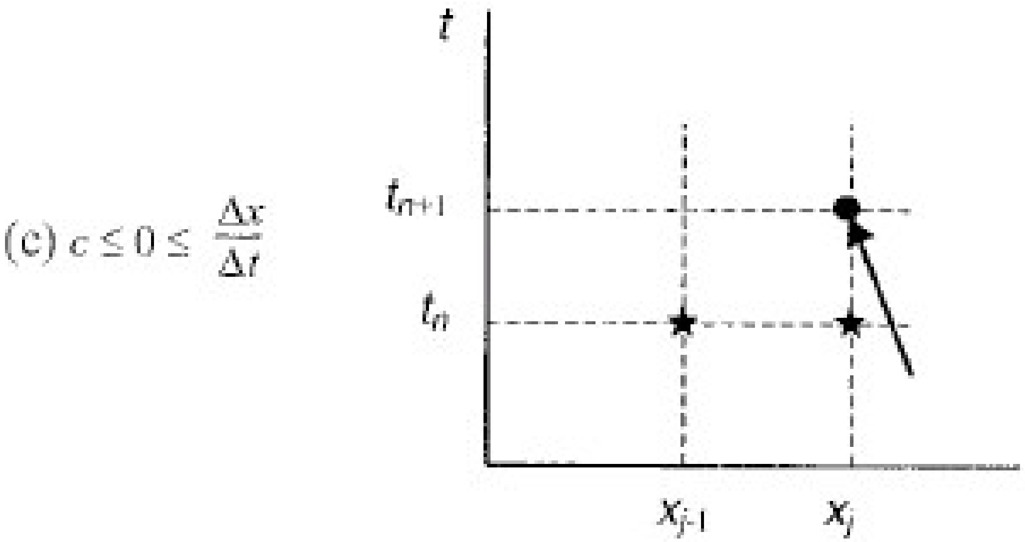
Convergência e Estabilidade



Esquema da relação entre $\Delta x, \Delta t$ e c liderando à extrapolação da solução no nível de tempo $n + 1$.

$$\mu \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x} > 1$$

Convergência e Estabilidade



Esquema da relação entre $\Delta x, \Delta t$ *e* c liderando à **extraploação da solução** no nível de tempo $n + 1$.

$$\mu \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x} < 0$$

Convergência e Estabilidade

O ***problema com a extrapolação é que o máximo valor absoluto da solução U_j^n aumenta a cada intervalo de tempo***.

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = -c\frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{\Delta x}$$

$$U_j^{n+1} - U_j^n = -c\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(U_j^n - U_{j-1}^n\right)$$

$$\mu = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n - c\frac{\Delta t}{\Delta x}U_j^n + c\frac{\Delta t}{\Delta x}U_{j-1}^n$$

$$U_j^{n+1} = \left(1 - c\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)U_j^n + c\frac{\Delta t}{\Delta x}U_{j-1}^n$$

$$U_j^{n+1} = (1-\mu)U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

Convergência e Estabilidade

O ***problema com a extrapolação*** ***é que o máximo valor absoluto da*** ***solução U_j^n*** ***aumenta a cada intervalo de tempo***.

Tomando valores absolutos do FDE, obtemos

$$U_j^{n+1} = (1-\mu)U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

$$\left|U_j^{n+1}\right| \leq \left|U_j^n\right||1-\mu| + \left|U_{j-1}^{n}\right||\mu|$$

$$\mu = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Agora definindo $\Upsilon^{n+1} = max_j\left|U_j^n\right|$, $\Upsilon^{n+2} = max_j\left|U_j^{n+1}\right|$ tem-se:

$$max_j\left|U_j^{n+1}\right| \leq max_j\left|U_j^n\right||1-\mu| + max_j\left|U_{j-1}^n\right||\mu|$$

$$\Upsilon^{n+2} \leq \Upsilon^{n+1}|1-\mu| + \Upsilon^{n+1}|\mu|$$

$$\Upsilon^{n+1}\Upsilon^{1} \leq \Upsilon^{n}\Upsilon^{1}|1-\mu| + \Upsilon^{n}\Upsilon^{1}|\mu|$$

$$\Upsilon^{n+1} \leq \Upsilon^{n}|1-\mu| + \Upsilon^{n}|\mu|$$

$$\Upsilon^{n+1} \leq \{|1-\mu| + |\mu|\}\Upsilon^{n}$$

Convergência e Estabilidade

$$U_j^{n+1} = (1-\mu)U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

$$\mu = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$\Upsilon^{n+1} \le \{|1-\mu| + |\mu|\}\Upsilon^n$$

e $\Upsilon^{n+1} \le \Upsilon^n$se e somente se $0 \le \mu \le 1$.

Se a condição $0 \le \mu \le 1$ não for satisfeita, a solução não é limitada e cresce com n.

Se deixarmos $\Delta x \to 0, \Delta t \to 0$ com μ = const., Isso só piorará as coisas, porque então $n \to \infty$.

Na prática, **se a condição $0 \le \mu \le 1$ não for satisfeita**, o FDE explode em alguns intervalos de tempo.

Convergência e Estabilidade

Exercício prático:

Use o modelo simples SLAM para explorar o fenômeno da instabilidade computacional.

$$U_j^{n+1} = (1-\mu)U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

$$\mu = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

- Escolha Δt pequeno e faça uma integração completa.
- Aumente Δt e observe a solução do modelo "explodir".
- Para experimento numérico, determine aproximadamente o valor máximo de Δt que produz integrações estáveis.
- Relacione este máximo com o número Courant. O que isso implica sobre a velocidade máxima de fase do sistema?

Estabilidade Computacional

Agora definimos estabilidade computacional.

Definição: Um FDE é computacionalmente estável se a solução do FDE em um tempo fixo $t = \mathrm{n}\Delta t$ é limitado como $\Delta t \to 0$.

$$\mu = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Observe que com nΔt fixo, Δt->0 implica $n \to \infty$

Iremos derivar uma condição de estabilidade que envolve o Courant Number.

A condição no número de Courant é geralmente conhecida como critério **Courant-Friedrichs-Lewy** ou simplesmente a condição **CFL**.

# # #

Lembre-se da história de Courant, Friedrichs e Lewy em Göttingen.

Estabilidade Computacional

Agora podemos afirmar o teorema fundamental de Lax-Richtmyer:

Dado um problema de valor inicial linear corretamente proposto e um esquema de diferenças finitas que satisfaça a condição de consistência, então a estabilidade do FDE é a condição necessária e suficiente para a convergência.

$$Estabilidade <=> Convergencia$$

Para sistemas consistentes

Este teorema nos permite estabelecer convergência examinando as questões mais fáceis de consistência e estabilidade.

Estamos interessados na convergência não porque queremos deixar $\Delta x, \Delta t \to 0$, mas porque queremos ter certeza de que os erros $u(j\Delta x, n\Delta t) - U_j^n$ sejam aceitavelmente pequenos.

Definição $u(j\Delta x, n\Delta t) - U_j^n$ é o erro de truncamento global.

Estabilidade Computacional

Exemplo: Usamos o critério do método máximo para estudar a condição de estabilidade da equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Uma aproximação FDE (esquema FTCS) é dada por

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

(a verificação da consistência FDE é imediata).
Nota: Uma vez que as diferenças são centradas no espaço, mas avançadas no tempo, o erro de truncamento é de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço

$$\tau = O(\Delta t) + O(\Delta x)^2 .$$

Podemos escrever o FDE na forma de equação

$$U_j^{n+1} = \mu U_{j+1}^n + (1 - 2\mu) U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

$$\mu = \sigma \Delta t / \Delta x^2 .$$

Estabilidade Computacional

Novamente

$$U_j^{n+1} = \mu U_{j+1}^n + (1 - 2\mu) U_j^n + \mu U_{j-1}^n$$

Se tomarmos valores absolutos, e deixarmos $\Upsilon^n = max_j \left| U_j^n \right|$

$$\Upsilon^{n+1} \le \{|\mu| + |1 - 2\mu| + |\mu|\}\Upsilon^n$$

$$\{|1 - 2\mu|\} \le 2|\mu|$$

Assim, obtemos a condição

$$\left\{\left|\frac{1}{2} - \mu\right|\right\} \le |\mu|$$

$$0 \le \mu \le 1/2$$

$$0 \le \mu \le 1/2$$

para garantir que a solução permaneça limitada como $n \to \infty$.
Essa é a condição necessária para a estabilidade do FDE.
# # #
Infelizmente, o critério do máximo só pode ser aplicado em poucos casos.

Na maioria dos FDEs, alguns coeficientes das equações são negativos e o critério não pode ser aplicado.

Precisamos de um método mais poderoso de estabelecer estabilidade.

O Método de von Neumann

Outro critério de estabilidade com uma aplicação muito mais ampla é o critério de estabilidade de von Neumann.
Assumimos que podemos expandir a solução do FDE em um conjunto apropriado de autofunções.
Para simplificar, assumimos uma expansão para a série Fourier:

$$U(x,t) = \sum_k Z_k(t) e^{ikx} \qquad U_j^n = \sum_k Z_k^n e^{ikj\Delta x}$$

A variável de espaço x e o número de onda k podem ser multidimensionais, $x = (x_1, x_2, x_3)$ e $k = (k_1, k_2, k_3)$

mas, para simplificar, consideraremos o caso escalar. Nós definimos $x_j = j\Delta x$, $t_n = n\Delta t$

Definimos o número de onda para a série Fourier: $p = k\Delta x$

Então a expansão de Fourier é

$$U_j^n = \sum_p Z_p^n e^{ipj} \qquad (\text{Note: } kx = kj\Delta x = pj)$$

O Método de von Neumann

$$U_j^n = \sum_p Z_p^n e^{ipj} \qquad \text{(Note: } kx = kj\Delta x = pj\text{)}$$

Quando substituímos esta expansão de Fourier em um FDE linear, obtemos um sistema de equações

$$Z_p^{n+1} = \rho_p Z_p^n \qquad \rho_p = e^{ipj}$$

Aqui ρ_P é um fator de amplificação que, aplicado ao p-ésimo componente de Fourier da solução no tempo $\mathrm{n}\Delta t$, o avança para o tempo $(\mathrm{n}+1)\Delta t$; ρ_P depende de p, Δt e Δx.

Se conhecermos as condições iniciais

$$U_j^0 = \sum_p Z_p^0 e^{ipj}$$

então a solução do FDE é (lembre-se do aviso sobre sobrescritos)

$$Z_p^n = \rho_p^n Z_p^0$$

Portanto, a estabilidade é garantida se o fator ρ^n for limitado para todo $\mathrm{p} = k\Delta x$ quando $\Delta t \to 0$ e $n \to \infty$

Portanto, devemos ter $|\rho_P| < \mu$ para todo $\mathrm{p} = k\Delta x$ como $n \to \infty$.

Consistência (?exatidão?) e Estabilidade da solução

- **Se o erro de truncamento do esquema de diferença finita se aproxima de zero**, quando $\Delta t \rightarrow 0$, então, o esquema é coerente.
- Para um problema de valor inicial, a coerência não é suficiente para garantir que um esquema numérico vá convergir para as soluções corretas quando $\Delta t \rightarrow 0$ (e $\Delta x \rightarrow 0$).
- O teorema equivalência de Lax, diz que para os estados ser consistente **no método linear**, a estabilidade é a **condição necessária e suficiente para a convergência**.
- Para resolver um problema de valor inicial o **erro round_off** e de **truncamento**, irá acumular com cada passo de tempo, e a solução aproximada às vezes vai **divergir da solução correta**. Se o passo de tempo Δt é pequeno o erro a cada intervalo de tempo deve ser pequeno e deve se acumular mais lentamente.
- No entanto, algumas vezes, a solução numérica irá rapidamente divergir da solução correta, caso em que o método numérico é dito ser Instável.

Paulo Yoshio Kubota

Análise de Estabilidade EDO linear

Assume-se que a solução para a eq. 7 tem a forma $y^n = A^n e^{ik}$ e substitua no Esquema Avançado Eq. 9

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\lambda y \qquad (7)$$

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\Delta t} = -\lambda y^n \qquad (7)$$

$$y^{n+1} = (1 - \lambda \Delta t) y^n \qquad (9)$$

$$A^{n+1} e^{ik} = (1 - \lambda \Delta t) A^n e^{ik} \qquad (10)$$

$$A^n A e^{ik} = A^n e^{ik} (1 - \lambda \Delta t) \qquad (11)$$

$$A = (1 - \lambda \Delta t) \qquad (12)$$

A é chamado de fator de amplificação. Então $|A| \leq 1$

$$\boxed{|1 - \lambda \Delta t| \leq 1}$$

$$\boxed{\begin{aligned} 1 - \lambda \Delta t &\leq 1 \\ -\lambda \Delta t &\leq 1 - 1 \\ -\lambda \Delta t &\leq 0 \\ \Delta t &\geq 0 \end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} 1 - \lambda \Delta t &\geq -1 \\ -\lambda \Delta t &\geq -1 - 1 \\ -\Delta t &\geq \frac{-2}{\lambda} \\ \Delta t &\leq \frac{2}{\lambda} \end{aligned}}$$

Paulo Yoshio Kubota

Análise de Estabilidade EDO linear

Assume-se que a solução para a eq. 7 tem a forma $y^n \approx A^n$ e substitua no Esquema Avançado Eq. 9

$$A = (1 - \lambda \Delta t) \qquad (12)$$

O sistema é estável, se

$$\boxed{\Delta t \geq 0} \longleftarrow \boxed{|1 - \lambda \Delta t| \leq 1} \longrightarrow \boxed{\Delta t \leq \frac{2}{\lambda}}$$

N.B. **Para uma equação não linear**, a análise de estabilidade da forma linearizada da equação não linear é uma **condição necessária, mas não é suficiente**.

Métodos de diferenças finitas.

```
MODULE Class_NumericalScheme
  IMPLICIT NONE
  PRIVATE
  INTEGER, PUBLIC      , PARAMETER :: r8=8
  INTEGER, PUBLIC      , PARAMETER :: r4=4

  REAL (KIND=r8)                    :: dt
  REAL (KIND=r8)                    :: lambda
  INTEGER              , PARAMETER :: UnitData=1
  INTEGER              , PARAMETER :: UnitCtl=2
  CHARACTER (LEN=400)               :: FileName
  LOGICAL                           :: CtrlWriteDataFile
  PUBLIC :: InitNumericalScheme
  PUBLIC :: SchemeForward
  PUBLIC :: SchemeUpdate
  PUBLIC :: SchemeWriteData
  PUBLIC :: SchemeWriteCtl
  PUBLIC :: AnaliticFunction

CONTAINS

 SUBROUTINE InitNumericalScheme(dt_in,lambda_in)
   IMPLICIT NONE
  REAL (KIND=r8) :: dt_in
  REAL (KIND=r8) :: lambda_in
  FileName=''
  dt=dt_in
  lambda=lambda_in
  FileName='EDOL'
  CtrlWriteDataFile=.TRUE.
 END SUBROUTINE InitNumericalScheme
```

```
FUNCTION SchemeForward(yc)  RESULT(yp)
   IMPLICIT NONE
   ! Utilizando a diferenciacao forward
   !
   ! y(n+1) - y(n)
   !--------------- = lambda * y(n) ; onde lambda > 0
   !      dt
   !
   REAL (KIND=r8), INTENT (IN   ) :: yc
   REAL (KIND=r8) :: yp

   yp =  yc -lambda*dt*yc

 END FUNCTION SchemeForward

 FUNCTION SchemeUpdate(y_in)  RESULT (y_out)
   IMPLICIT NONE
   REAL (KIND=r8), INTENT(IN) :: y_in
   REAL (KIND=r8)             :: y_out
   y_out=y_in
 END FUNCTION SchemeUpdate


 FUNCTION AnaliticFunction(y0,tn)  RESULT (y_out)
   IMPLICIT NONE
   REAL (KIND=r8), INTENT (IN) :: y0
   INTEGER      ,  INTENT (IN) :: tn

   REAL (KIND=r8)             :: y_out
   y_out=y0*exp(-lambda*tn*dt)
 END FUNCTION AnaliticFunction
```

Métodos de diferenças finitas.

```
FUNCTION SchemeWriteData(irec,y_in,ya)  RESULT (ok)
    IMPLICIT NONE
    INTEGER   , INTENT (INOUT) :: irec
    REAL (KIND=r8), INTENT (IN) :: y_in
    REAL (KIND=r8), INTENT (IN) :: ya
    INTEGER              :: ok
    INTEGER              :: lrec
    REAL (KIND=r4)       :: Yout
    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(y_in,KIND=r4)
    irec=irec+1
    WRITE(UnitData,rec=irec) Yout
    irec=irec+1
    WRITE(UnitData,rec=irec) REAL (ya,KIND=r4)
    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,'(A   )')'xdef  1 linear -48.00 1'
   WRITE (UnitCtl,'(A   )')'ydef  1 linear  -1.27 1'
   WRITE (UnitCtl,'(A6,I6,A25)')'tdef  ',nrec,' linear  00z01jan0001 1hr'
   WRITE (UnitCtl,'(A20 )')'zdef  1 levels 1000 '
   WRITE (UnitCtl,'(A)')'vars 2'
   WRITE (UnitCtl,'(A)')'yc 0 99 resultado da edol yc'
   WRITE (UnitCtl,'(A)')'ya 0 99 funcao analitica'
   WRITE (UnitCtl,'(A)')'endvars'
   CLOSE (UnitCtl,STATUS='KEEP')
   CLOSE (UnitData,STATUS='KEEP')

   ok=0
 END FUNCTION SchemeWriteCtl

END MODULE Class_NumericalScheme
```

Paulo Yoshio Kubota

Métodos de diferenças finitas.

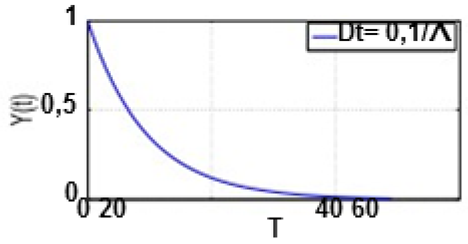
```
PROGRAM MAIN
 USE Class_NumericalScheme, Only :r8, InitNumericalScheme, SchemeForward, SchemeUpdate,&
                                    SchemeWriteCtl, SchemeWriteData, AnaliticFunction
 IMPLICIT NONE
 REAL (KIND=r8) :: yn
 REAL (KIND=r8) :: yc
 REAL (KIND=r8) :: yp
 REAL (KIND=r8) :: ya

 REAL (KIND=r8), PARAMETER :: lambda=0.1 ![1/s]
 REAL (KIND=r8), PARAMETER ::  y0=1.0_r8
 INTEGER      , PARAMETER ::  nrec=200
 REAL(KIND=r8) :: dt=1.5/lambda
 INTEGER       :: test
 INTEGER       :: irec
 INTEGER       :: tn

 CALL Init()
 yc=y0
irec=0
 DO tn=0,nrec
    yp=SchemeForward(yc)
    ya=AnaliticFunction(y0,tn)
    test=SchemeWriteData(irec,yc,ya)
    yn=SchemeUpdate(yc)
    yc=SchemeUpdate(yp)
 END DO
 test=SchemeWriteCtl(nrec)

CONTAINS

  SUBROUTINE Init()
    IMPLICIT NONE
    CALL InitNumericalScheme(dt,lambda)
  END SUBROUTINE Init
END PROGRAM MAIN
```

Paulo Yoshio Kubota

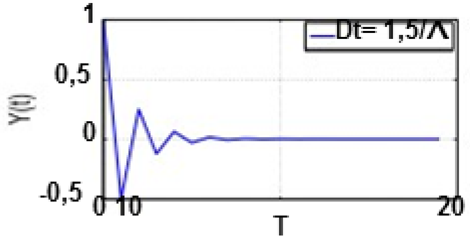
Métodos de diferenças finitas.

Há três possibilidade para a solução numérica ou seja $y^{n+1} = (1 - \lambda\Delta t)y^n$ depende a escolha de Δt

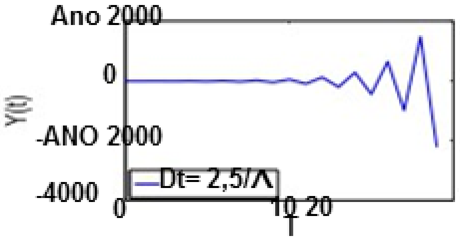
I) Se $\Delta t < \frac{1}{\lambda}$, então $0 < (1 - \lambda\Delta t) < 1$, A solução numérica é uma função decrescente com o tempo



II) Se $\frac{1}{\lambda} < \Delta t < \frac{2}{\lambda}$, A solução numérica diminui a magnitude mas oscila no sinal O sistema é estável , mas não consistente.



(III) se $\Delta t > \frac{2}{\lambda}$ então, $(1 - \lambda\Delta t) < -1$,. A solução oscila no Sinal e aumenta em magnitude com o passar do tempo. O método é Instável para as grandes passo de tempo.



Paulo Yoshio Kubota

Métodos de diferenças finitas.

A restrição de Δt para garantir a estabilidade pode por vezes *ser removido* pela escolha do método numérico. ex. usando o esquema atrasado.

$$\frac{dy}{dt} = -\lambda y$$

$$\frac{y^n - y^{n-1}}{\Delta t} = -\lambda y^n$$

$$A^n - A^{n-1} = -\lambda \Delta t A^n$$

$$A^n - A^n A^{-1} = -\lambda \Delta t A^n$$

$$1 - A^{-1} = -\lambda \Delta t$$

$$A^{-1} = 1 + \lambda \Delta t$$

$$A = \frac{1}{1 + \lambda \Delta t}$$

O sistema é estável, se $|A| \leq 1$

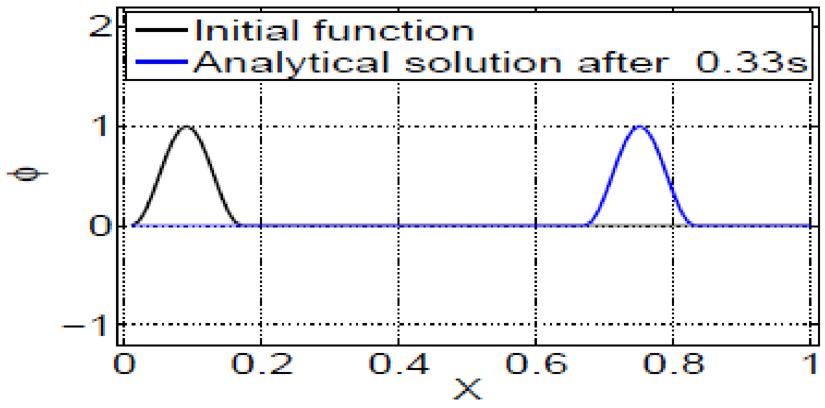
$$|A| = \left|\frac{1}{1 + \lambda \Delta t}\right| \leq 1$$

Exemplo: Equações diferenciais Parciais

Considere uma equação de Advecção Linear em uma dimensão

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \qquad (10)$$

Onde u é a velocidade constante, o domínio é $0 \le x \le 1$, com condição de fronteira periódicas $\phi(x,0) = \phi(1,t)$, E a condição inicial é dada como $\phi(x,0) = F(x)$. Por exemplo $F(x) = \sin^2(x)$



A solução analítica é

$$\boldsymbol{\phi(x,0) = F(x - u * t).}$$

A função inicial é advectada com velocidade u, e a forma é preservada.

Métodos de diferenças finitas.

```fortran
MODULE Class_Fields
  IMPLICIT NONE
  PRIVATE
  INTEGER, PUBLIC      , PARAMETER  :: r8=8
  INTEGER, PUBLIC      , PARAMETER  :: r4=4
  REAL (KIND=r8),PUBLIC ,ALLOCATABLE :: PHI_P(:)
  REAL (KIND=r8),PUBLIC ,ALLOCATABLE :: PHI_A(:)
  REAL (KIND=r8),PUBLIC ,ALLOCATABLE :: PHI_C(:)
  REAL (KIND=r8),PUBLIC ,ALLOCATABLE :: PHI_M(:)
  REAL (KIND=r8),PUBLIC              :: Uvel
  INTEGER       ,PUBLIC              :: iMax
  PUBLIC :: Init_Class_Fields
CONTAINS
!---------------------------------------------------------------------------------------
  SUBROUTINE Init_Class_Fields(xdim,Uvel0)
    IMPLICIT NONE
    INTEGER      , INTENT (IN   ) :: xdim
    REAL (KIND=r8), INTENT (IN   ):: Uvel0
    iMax=xdim
    Uvel=Uvel0
    ALLOCATE (PHI_A(-1:iMax+2))
    ALLOCATE (PHI_P(-1:iMax+2))
    ALLOCATE (PHI_C(-1:iMax+2))
    ALLOCATE (PHI_M(-1:iMax+2))
  END SUBROUTINE Init_Class_Fields
!---------------------------------------------------------------------------------------
END MODULE Class_Fields
```

```fortran
MODULE Class_NumericalMethod
  USE Class_Fields, Only : PHI_A,PHI_P,PHI_C,PHI_M,Uvel,iMax
  IMPLICIT NONE
  PRIVATE
  INTEGER, PUBLIC      , PARAMETER :: r8=8
  INTEGER, PUBLIC      , PARAMETER :: r4=4
  REAL (KIND=r8) :: Dt
  REAL (KIND=r8) :: Dx

  PUBLIC :: InitNumericalScheme
  PUBLIC :: SchemeForward
  PUBLIC :: SchemeUpdate
  PUBLIC :: SchemeUpStream
  PUBLIC :: AnaliticFunction

CONTAINS
!---------------------------------------------------------------------------------------
  SUBROUTINE InitNumericalScheme(dt_in,dx_in)
    IMPLICIT NONE
    REAL (KIND=r8), INTENT (IN   ) :: dt_in
    REAL (KIND=r8), INTENT (IN   ) :: dx_in
    INTEGER :: i
    REAL (KIND=r8) :: x
    Dt=dt_in
    Dx=dx_in
    x=0.0
    DO i=1,iMax
       PHI_C(i)= sin(x)*sin(x)
       x =  (6*i)* DX
    END DO
    PHI_M=PHI_C
    PHI_P=PHI_C
  END SUBROUTINE InitNumericalScheme
```

Paulo Yoshio Kubota

Métodos de diferenças finitas.

```fortran
FUNCTION AnaliticFunction(tn)  RESULT (ok)
   IMPLICIT NONE
   INTEGER,      INTENT (IN) :: tn
   INTEGER       :: j,ok
   REAL (KIND=r8) :: x
   ok=1
   x=0.0
   DO j=1,iMax
      PHI_A(j)=(sin(x - Uvel*tn*(dt))**2)
      x =  (6*j)* DX
   END DO
   ok=0
END FUNCTION AnaliticFunction

!-----------------------------------------------------------------------------------------------
FUNCTION SchemeForward()  RESULT(ok)
   IMPLICIT NONE
   ! Utilizando a diferenciacao forward
   !
   ! F(j,n+1) - F(j,n)       F(j+1,n) - F(j,n)
   !-------------------- + u -------------------- = 0
   !      dt                    dx
   !
   INTEGER :: ok
   INTEGER :: j
   DO j=1,iMax
      PHI_P(j) = PHI_C(j) - (Uvel*Dt/Dx)*(PHI_C(j+1)-PHI_C(j))
   END DO
   CALL UpdateBoundaryLayer()
END FUNCTION SchemeForward
```

```fortran
!-----------------------------------------------------------------------------------------------
FUNCTION SchemeUpStream()  RESULT(ok)
   IMPLICIT NONE
   ! Utilizando a diferenciacao forward no tempo e
   ! backward no espaco (upstream)
   !
   ! F(j,n+1) - F(j,n)       F(j,n) - F(j-1,n)
   !-------------------- + u -------------------- = 0
   !      dt                    dx
   !
   INTEGER :: ok
   INTEGER :: j
   DO j=1,iMax
      PHI_P(j) = PHI_C(j) - (Uvel*Dt/Dx)*(PHI_C(j)-PHI_C(j-1))
   END DO
   CALL UpdateBoundaryLayer()
END FUNCTION SchemeUpStream
!-----------------------------------------------------------------------------------------------
SUBROUTINE UpdateBoundaryLayer()
   IMPLICIT NONE
   PHI_P(0         )    =  PHI_P(iMax )
   PHI_P(-1        )    =  PHI_P(iMax-1)
   PHI_P(imax+1 )    =  PHI_P(1)
   PHI_P(iMax+2 )    =  PHI_P(2)
END  SUBROUTINE UpdateBoundaryLayer
!-----------------------------------------------------------------------------------------------
FUNCTION SchemeUpdate()  RESULT (ok)
   IMPLICIT NONE
   INTEGER :: ok
   PHI_M=PHI_C
   PHI_C=PHI_P
   ok=0
END FUNCTION SchemeUpdate
!-----------------------------------------------------------------------------------------------
END MODULE Class_NumericalMethod
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

Métodos de diferenças finitas.

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
MODULE Class_WritetoGrads
 USE Class_Fields, Only: PHI_A,PHI_P,PHI_C,PHI_M,Uvel,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='AdvecLinearConceitual1D'
  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)
  ok=1
   CtrlWriteDataFile=.FALSE.
   Yout=REAL(PHI_C(1:iMax),KIND=r4)
   irec=irec+1
   WRITE(UnitData,rec=irec)Yout
   Yout=REAL(PHI_A(1:iMax),KIND=r4)
   irec=irec+1
   WRITE(UnitData,rec=irec)Yout
  ok=0
 END FUNCTION SchemeWriteData

 FUNCTION SchemeWriteCtl(nrec)  RESULT (ok)
   IMPLICIT NONE
   INTEGER, INTENT (IN) :: nrec
   INTEGER              :: ok
   ok=1
  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,I8,A18   )')'xdef  ',iMax,' linear 0.00 0.001'
   WRITE (UnitCtl,'(A              )')'ydef  1 linear  -1.27 1'
   WRITE (UnitCtl,'(A6,I6,A25   )')'tdef  ',nrec,' linear  00z01jan0001 1hr'
   WRITE (UnitCtl,'(A20          )')'zdef  1 levels 1000 '
   WRITE (UnitCtl,'(A         )')'vars 2'
   WRITE (UnitCtl,'(A         )')'phic 0 99 resultado da edol yc'
   WRITE (UnitCtl,'(A         )')'phia 0 99 solucao analitica ya'
   WRITE (UnitCtl,'(A         )')'endvars'
   CLOSE (UnitCtl,STATUS='KEEP')
   CLOSE (UnitData,STATUS='KEEP')
   ok=0
 END FUNCTION SchemeWriteCtl
END MODULE Class_WritetoGrads
```

Paulo Yoshio Kubota

Métodos de diferenças finitas.

```
PROGRAM Main
 USE Class_Fields, Only:Init_Class_Fields
 USE Class_NumericalMethod, Only : InitNumericalScheme, &
        SchemeForward,  SchemeUpdate, SchemeUpStream,&
        AnaliticFunction
 USE Class_WritetoGrads, Only :InitClass_WritetoGrads, &
                               SchemeWriteData, SchemeWriteCtl
 IMPLICIT NONE
 INTEGER             , PARAMETER  :: r8=8
 INTEGER             , PARAMETER  :: r4=4
 INTEGER             , PARAMETER :: xdim=100
 REAL (KIND=r8)       , PARAMETER :: LX=1.0
 REAL (KIND=r8)       , PARAMETER :: Uvel0=10.0!m/s
 REAL (KIND=r8)       , PARAMETER :: dx=LX/xdim   !m
 REAL (KIND=r8)       , PARAMETER :: dt=0.1*dx/Uvel0   !s       !
c*Dt/Dx < 1
!                                                        ! =>  Dt <
dx/Uvel0
 INTEGER           , PARAMETER :: ninteraction=20000
 CALL Init()
 CALL run()

CONTAINS

 SUBROUTINE Init()
  IMPLICIT NONE
  CALL Init_Class_Fields(xdim,Uvel0)
  CALL InitNumericalScheme(dt,dx)
  CALL InitClass_WritetoGrads
 END SUBROUTINE Init
```

```
SUBROUTINE Run()
   IMPLICIT NONE
   INTEGER :: test,tn,irec
   irec=0
   DO tn=0,ninteraction
      test=SchemeUpStream()
      test=AnaliticFunction(tn)
      test=SchemeWriteData(irec)
      test=SchemeUpdate()
   END DO
   test=SchemeWriteCtl(ninteraction)
 END SUBROUTINE Run

 SUBROUTINE Finalize()
   IMPLICIT NONE

 END SUBROUTINE Finalize

END PROGRAM Main
```

Esquemas com diferenças centradas no espaço de quarta ordem:

$$\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(\Delta x)^2 + O[(\Delta x)^4]$$

O Quociente é de segunda ordem de acurácia. É formado considerando a diferença de valores de u_j em um ponto de grade distante do ponto central. Simularmente um quociente pode ser construído considerando a diferença de dois pontos distante do ponto central. Susbstituindo Δx por $2\Delta x$

$$\frac{u_{j+2} - u_{j-2}}{4\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{4}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(\Delta x)^2 + O[(\Delta x)^4]$$

O Quociente é de segunda ordem de acurácia. Mas os coeficientes são grandes. Outra aproximação consistente para a derivada espacial pode ser construída pelo combinação linear das duas equações acima. A combinação para o termo de segunda ordem no erro de truncamento é cancelada

$$\frac{4}{3}\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} - \frac{1}{3}\frac{u_{j+2} - u_{j-2}}{4\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + O[(\Delta x)^4]$$

Métodos de diferenças finitas.

Esquemas com diferenças centradas no espaço de quarta ordem:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{4}{3}\frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2\Delta x} - \frac{1}{3}\frac{u_{j+2}-u_{j-2}}{4\Delta x} - O[(\Delta x)^4]$$

Por Exemplo: Resolvendo a equação de advecção linear

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c\frac{\partial u}{\partial x}$$

Na solução analítica o estado inicial de propaga no espaço com velocidade de fase constante c sem mudança de forma. A solução numérica, entretanto, ficará atrasada em relação a analítica e dispersa. A alta ordem de acurácia o atraso será menor (a diferença de fase será menor).

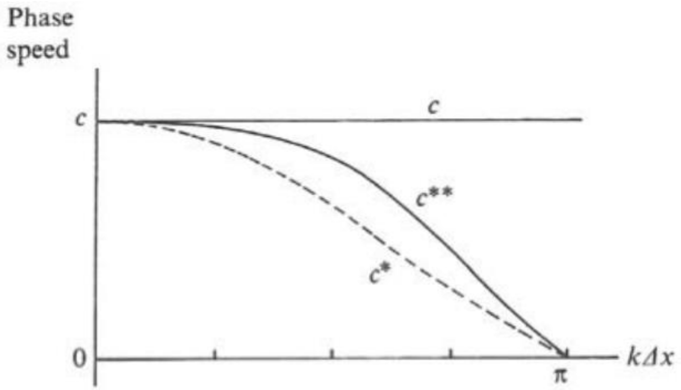
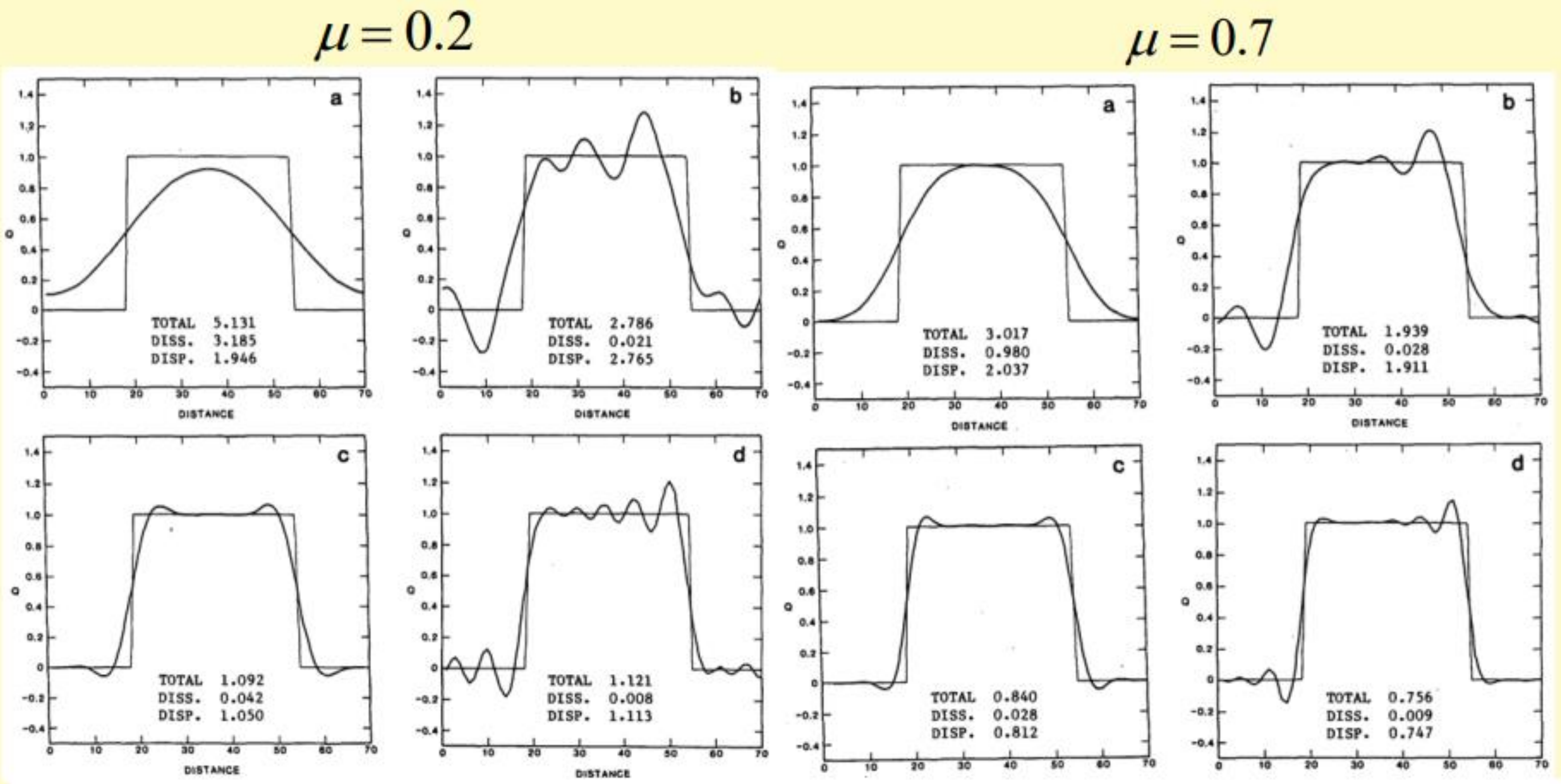


Figure 4.1 Phase speed for the linear advection equation, c, and for the corresponding differential-difference equations with second order (c^*) and with fourth order (c^{**}) centered space differencing.

Métodos de diferenças finitas.

O Aumento da ordem de acurácia não resolve o problema de dispersão que envolve a solução numérica (Takacs,1985)



Numerical solutions for (a) 1st-order scheme, (b) 2nd-order scheme, (c) 3rd-order scheme, and (d) 4th-order scheme, after two complete translations

Exercício 1

Resolva numericamente a equação de advecção utilizando a acurácia de quarta ordem na discretização espacial e compare com a solução de segunda ordem. Considere $\mu = \frac{c\Delta x}{\Delta t} = 0.2$ e $\mu = \frac{c\Delta x}{\Delta t} = 0.7$. Como condição inicial use uma onda quadrada.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c\frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{4}{3}\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} - \frac{1}{3}\frac{u_{j+2} - u_{j-2}}{4\Delta x} - O[(\Delta x)^4]$$