CAPÍTULO II – ESQUEMAS DE DIFERENÇAS FINITAS EXPLÍCITOS, IMPLÍCITOS E ITERATIVOS

2.1 - Equação da difusão

Outra equação importante em Oceanografia é a da difusão (2.1), que representa o espalhamento de uma propriedade:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \qquad (2.1)$$

onde *t* é o tempo, *x* o espaço, f a propriedade que sofre difusão e D (>0) é o coeficiente de difusão.

Assim como a equação da advecção, também se pode aplicar o método das diferenças finitas na solução da equação (2.1). No exemplo abaixo, a solução adotada é avançada no tempo e centrada no espaço, de modo que a equação a diferenças finitas e a correspondente fórmula de recorrência são:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = D \frac{f_{j+1}^n - 2 f_j^n + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} \qquad (2.2)$$

$$f_j^{n+1} = f_j^n + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (f_{j+1}^n - 2 f_j^n + f_{j-1}^n) \qquad (2.3)$$

onde j corresponde ao índice no espaço e *n*, no tempo. A equação (2.3) pode ser representada através das matrizes fatu para f^n (variável atual) e fren para f^{n+1} (variável renovada) na forma que segue (ver Tabela 1.3)

$$fren(j) = fatu(j) + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left(fatu(j+1) - 2 \; fatu(j) + fatu(j-1) \right) \qquad (2.4)$$

Exemplo 02.01 – o programa exp02_01dif_explic.m representa a difusão de um sinal retangular na parte central de uma grade, com solução explícita (equação 2.2). A Figura 2.1 demonstra o resultado final deste programa.

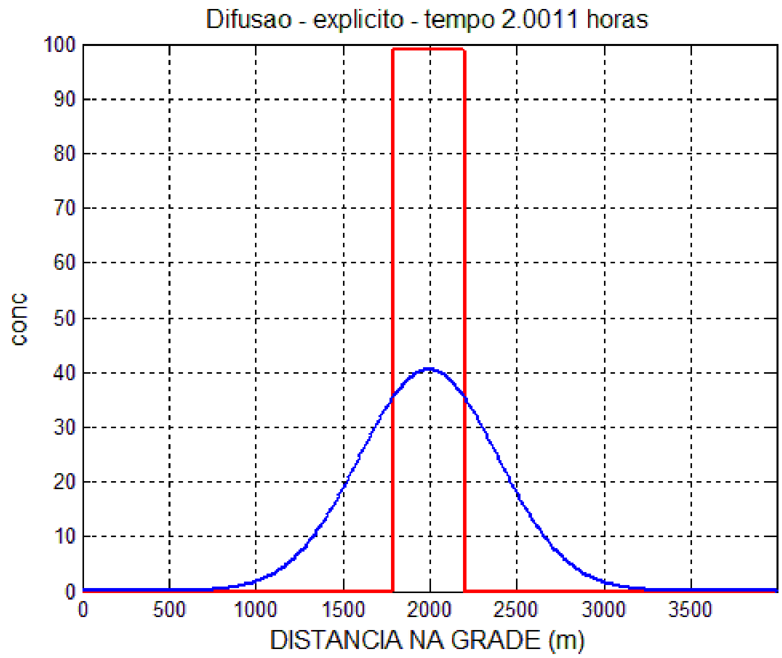

Fig. 2.1 – Resultado do modelo exp02_01dif_explic.m, com sinal retangular inicial na parte central da grade (em vermelho) e sua configuração final devido à difusão (em azul).

2.2 - Esquemas de diferenças finitas explícitos, implícitos e iterativos

Ao combinar diferenças finitas no espaço e no tempo, há cinco esquemas possíveis. O primeiro deles, o esquema explícito, é o que foi usado até o presente, nas equações da advecção e da difusão; nos esquemas explícitos, pode-se "explicitar" ou "isolar" uma solução em função de soluções em pontos de grade e instantes já determinados, pois as diferenças finitas no espaço não são referentes ao nível de tempo renovado. Exemplo de um esquema explícito para a equação da difusão se encontra na equação (2.2); e um exemplo para a advecção é dado a seguir, considerando diferenças finitas centradas no tempo e no espaço:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} + c\,\frac{f_{j+1}^{n} - f_{j-1}^{n}}{2\Delta x} = 0 \qquad (2.5)$$

O segundo esquema é o implícito; em esquemas implícitos não é possível explicitar ou isolar uma solução em função de soluções em pontos de grade e instantes já determinados, visto que as diferenças finitas no espaço são referentes ao nível de tempo renovado. Abaixo, exemplos de esquema implícito para as equações da advecção e da difusão:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} + c\,\frac{f_{j+1}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0 \qquad (2.6)$$

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} = D\,\frac{f_{j+1}^{n+1} - 2\ f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \qquad (2.7)$$

Note-se que as equações (2.6) e (2.7) são para f_j^{n+1}, mas nelas ainda não foi determinado f_{j+1}^{n+1}, e por isso os esquemas não são explícitos.

O terceiro esquema, o <u>semi-implícito</u>, consiste em combinar uma parte explícita e uma implícita, tirando uma média (ponderada, onde a soma dos pesos deve ser 1). Os exemplos a seguir são para as equações da advecção e da difusão (com médias considerando o mesmo peso, o que não é obrigatório):

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{c}{2}\left(\frac{f_{j+1}^{n} - f_{j-1}^{n}}{2\Delta x} + \frac{f_{j+1}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right) = 0 \qquad (2.8)$$

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{2}\left(\frac{f_{j+1}^{n} - 2 f_j^{n} + f_{j-1}^{n}}{\Delta x^2} + \frac{f_{j+1}^{n+1} - 2 f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right) \qquad (2.9)$$

O quarto tipo de esquema é chamado <u>pseudo-implícito</u>. Como exemplo, pode ser considerada a equação da difusão na forma

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2}\left(f_{j+1}^{n} - 2 f_j^{n} + f_{j-1}^{n}\right) \qquad (2.10)$$

Nesta equação, ao escrever

$$f_j^{n} = \frac{f_j^{n+1} + f_j^{n-1}}{2} \qquad (2.11)$$

a equação original se torna

$$f_j^{n+1} = f_j^{n-1} + \frac{2D\,\Delta t}{\Delta x^2}\left(f_{j+1}^{n} - f_j^{n-1} - f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n}\right) \qquad (2.12)$$

$$f_j^{n+1}\left(1+\frac{2D\ \Delta t}{\Delta x^2}\right) = f_j^{n-1} + \frac{2D\ \Delta t}{\Delta x^2}(f_{j+1}^{n} - f_j^{n-1} + f_{j-1}^{n}) \qquad (2.13)$$

Resultando o esquema de Du Fort – Frankel (1953)

$$f_j^{n+1} = \left[f_j^{n-1} + \frac{2D\ \Delta t}{\Delta x^2}(f_{j+1}^{n} - f_j^{n-1} + f_{j-1}^{n}) \right]\left(1+\frac{2D\ \Delta t}{\Delta x^2}\right)^{-1} \qquad (2.14)$$

(2.14) corresponde a uma equação que é implícita na formulação mas explícita na realização, daí o nome de pseudo-implícita.

Além dos esquemas descritos anteriormente, ainda há os esquemas iterativos, os quais calculam uma solução explícita provisória f_j^* e a utilizam em uma solução final f_j^{n+1}, sendo usados em esquemas explícitos avançados no tempo, como no exemplo abaixo para a equação da advecção:

$$\frac{f_j^* - f_j^n}{\Delta t} + c\,\frac{f_{j+1}^n - f_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0 \qquad (2.15)$$

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + c\,\frac{f_{j+1}^* - f_{j-1}^*}{2\Delta x} = 0 \qquad (2.16)$$

Podem também ser considerados esquemas iterativos com duas ou mais iterações.

2.3 – Solução de esquemas implícitos

Os esquemas implícitos (e semi-implícitos) não permitem explicitar a solução renovada f_j^{n+1} em função de soluções já conhecidas, sendo sempre da forma:

$$a_j f_{j-1}^{n+1} + b_j f_j^{n+1} + c_j f_{j+1}^{n+1} = d_j \qquad (2.17)$$

onde os coeficientes a_j, b_j, c_j e d_j são conhecidos.

A equação (2.17) corresponde a uma equação de três pontos, e uma maneira de solucionar esta equação consiste em transformá-la em equação de dois pontos, através do método de inversão de linha (Lindzen & Kuo, 1969). A equação de dois pontos tem a forma

$$f_j^{n+1} = s_j f_{j+1}^{n+1} + p_j \qquad (2.18)$$

ou seja,

$$f_{j-1}^{n+1} = s_{j-1} f_j^{n+1} + p_{j-1} \qquad (2.19)$$

Assim, substituindo-se (2.19) em (2.17), resulta:

$$a_j (s_{j-1} f_j^{n+1} + p_{j-1}) + b_j f_j^{n+1} + c_j f_{j+1}^{n+1} = d_j \qquad (2.20)$$

$$f_j^{n+1} = \frac{-c_j}{b_j + a_j s_{j-1}} f_{j+1}^{n+1} + \frac{d_j - a_j p_{j-1}}{b_j + a_j s_{j-1}} \qquad (2.21)$$

A equação (2.21) corresponde à (2.18), desde que:

$$s_j = \frac{-c_j}{b_j + a_j s_{j-1}} \qquad (2.22)$$

$$p_j = \frac{d_j - a_j p_{j-1}}{b_j + a_j s_{j-1}} \qquad (2.23)$$

Desta forma, para se encontrar a solução final, é necessário fazer duas varreduras de grade. A primeira é ascendente (j=2:1:jmax-1), para determinar s_j e p_j através de (2.22) e (2.23); a segunda varredura é descendente (j=jmax-1:-1:2), calculando-se f_j^{n+1} a partir (2.21); entretanto, deve-se notar que é preciso conhecer os valores de s_j, p_j e f_j^{n+1} nos contornos (j=1 e j=jmax).

Note-se que, ao invés de escrever a relação de dois pontos como em (2.18) e (2.19), se pode escrever esta relação como

$$f_{j+1}^{n+1} = s_{j+1} f_j^{n+1} + p_{j+1} \qquad (2.24)$$

e substituí-la em (2.17), o que permite desenvolvimento matemático similar, mas cujo resultado final conduz a varredura descendente para os coeficientes e ascendente para a solução renovada (Ramming & Kowalik, 1980).

Como exemplo da formulação acima, considere-se a solução da equação da difusão por esquema implícito:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} = D \frac{f_{j+1}^{n+1} - 2 f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \qquad (2.25)$$

que corresponde a:

$$f_{j-1}^{n+1}\left(\frac{-D}{\Delta x^2}\right)+f_j^{n+1}\left(\frac{1}{2\Delta t}+\frac{2D}{\Delta x^2}\right)+f_{j+1}^{n+1}\left(\frac{-D}{\Delta x^2}\right)=f_j^{n-1}\left(\frac{1}{2\Delta t}\right)$$

(2.26)

de modo que sua representação na forma (2.17) envolve os coeficientes:

$$a_j=\left(\frac{-D}{\Delta x^2}\right) \qquad b_j=\left(\frac{1}{2\Delta t}+\frac{2D}{\Delta x^2}\right)$$

$$c_j=\left(\frac{-D}{\Delta x^2}\right) \qquad d_j=f_j^{n-1}\left(\frac{1}{2\Delta t}\right) \qquad (2.27)$$

Esses coeficientes permitem obter os coeficientes da relação de dois pontos numa varredura de grade (ascendente), de forma que outra varredura (descendente) conduz à solução final da equação.

2.4 – Complementação

É importante observar que o conceito de uma diferença finita avançada, centrada ou retardada no tempo, quando inserida numa equação a diferenças finitas, depende dos demais termos da equação. Por exemplo, para a equação

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}=g(x,t) \qquad (2.28)$$

pode ser considerada uma solução <u>centrada no tempo</u> na forma

$$\frac{f_j^{n+1}-f_j^{n-1}}{2\ \Delta t}=g^n \qquad (2.29)$$

ou uma solução <u>avançada no tempo</u>

$$\frac{f_j^{n+1}-f_j^{n}}{\Delta t}=g^n \qquad (2.30)$$

e também uma solução <u>avançada no tempo</u> na forma

$$\frac{f_j^{n+1}-f_j^{n-1}}{2\ \Delta t}=g^{n-1} \qquad (2.31)$$

que é avançada no tempo com passo 2Δt.

Resta apenas explicar a utilidade dos esquemas implícitos e semi-implícitos. De fato, qual é sua utilidade, se os esquemas explícitos são muito mais fáceis de implementar ? A resposta é a seguinte: os esquemas explícitos são mais fáceis de programar, mas seu processamento requer passos de tempo pequenos para manter a estabilidade dos resultados. Em geral, para as mesmas grades, esquemas implícitos e semi-implícitos permitem o uso de passos de tempo bem maiores, o que representa uma grande vantagem, pois diminui o tempo total de processamento dos modelos. Isto será demonstrado no próximo capítulo.

Esquemas iterativos tem a vantagem da simplicidade de programação, mas requerem muito tempo de computador, pelo fato de resolverem mais equações.

Exercício 02.01 – desenvolver o programa exc02_01dif_pseudo.m para representar a difusão de um sinal retangular na parte central de uma grade, com solução pseudo-implícita (equação 2.14).

Exercício 02.02 – desenvolver o programa exc02_02dif_iter.m para representar a difusão de um sinal retangular na parte central de uma grade, com solução iterativa (equações similares a 2.15 e 2.16, mas para a difusão).

Exercício 02.03 – desenvolver o programa exc02_03dif_implic.m para representar a difusão de um sinal retangular na parte central de uma grade, com solução implícita (equações 2.25 a 2.27).

Exercício 02.04 – desenvolver o programa exc02_04adv_implic.m, para solução da advecção de um sinal retangular no meio de uma grade através de uma solução implícita centrada no tempo e no espaço (similar às equações 2.25 a 2.27 – mas para a advecção). A Figura 2.2 demonstra o resultado final do programa de advecção com solução implícita.

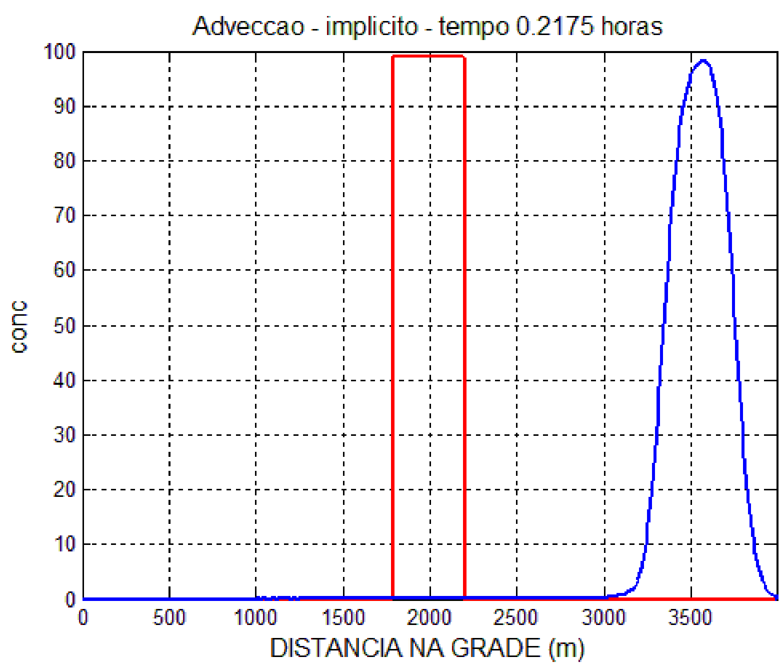

Fig. 2.2 – Resultado do modelo exc02_04adv_implic.m, com sinal retangular inicial na parte central da grade (em vermelho) e sua configuração final devido à advecção (em azul).