# Soluções Numéricas p/ Equações Diferenciais

Classificação de equações diferenciais:

- ordinárias = só tem uma variável independente:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = F(t)$$

- parciais = tem mais de uma variável independente:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mu N) = 0$$

São classificadas ainda quanto ao grau e ordem:

- ordem = nível da derivada mais alta
- grau = potencia da derivada mais alta

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mu N) = D\frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$$

↳ 2ª ordem, 1º grau

Quanto a homogeneidade:

- homogeneas = não aparecem as variáveis independentes explicitamente
- não-homogêneas = contem explicitamente as var. indepte.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = 3t^2 \qquad\qquad \frac{\partial N}{\partial t} = D\frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$$

não homogenea — homogênea

Quanto a linearidade:

- linear = a variável dependente e suas derivadas só aparecem em termos de 1º grau e não há produtos delas.
- não-linear = termos de 2º grau ou maior ou produtos da var e suas derivadas:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial u v}{\partial x} = 0 \quad \text{linear}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{é não-linear}$$

No caso da atmosfera:

- eq da conservação e termodinâmica = parcial, 1ª ordem, 1º grau, homogêneas, lineares

- eq de Momento (Navier-Stokes): parcial, 1ª ordem, 1º grau, homogenea, não-linear => caos

Para resolver uma equação diferencial é preciso de condições de contorno. As C.C. podem ser de vários tipos e depende de qual problema estamos resolvendo.

Por exemplo, se: $\frac{dN}{dt} = F(t)$, podemos calcular N(t) se soubermos $N_0 = N(t=0)$. Essa CC, em apenas um dos limites de t, é uma condição inicial e o problema é um problema de valor inicial.

Quando sabemos a solução nas duas extremidades do domínio, temos um problema de valor de contorno.

---

Ex:
$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

precisamos de $u(x, t=0)$ e $u(0,t)$ e $u(L,t)$

$\begin{cases} \text{prob. C.I em } t \\ \text{prob. C.C. em } x \end{cases}$ (NUDGING DO BRAMS)

---

Como resolver uma equação complicada como:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla\cdot(\vec{v}N) + \nabla\cdot(\vec{v}'N') = D\nabla^2 N + \sum R_n$$

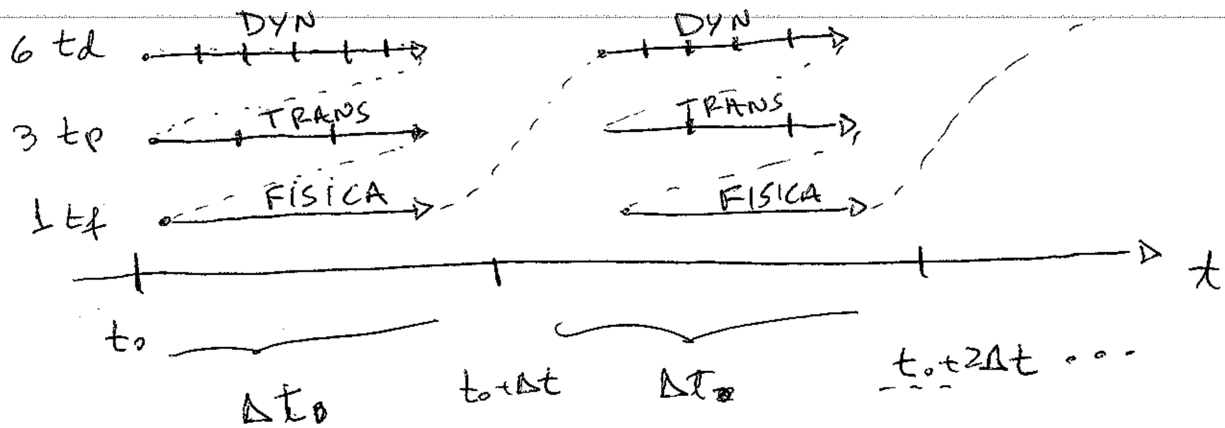
Numa mesma equação para calcular $N(x,y,z,t)$, ou seja p/ $\partial N/\partial t$, temos $u, v, w$, $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial z$, $R_n$, etc...

E em um modelo c/ vários processos diferentes acontecendo ao mesmo tempo?

Separação de Operadores

O que se faz usualmente é resolver separadamente cada um dos processos. Por exemplo, um modelo trata: dinâmica, transporte e física.

Cada processo é resolvido sequencialmente em um intervalo de tempo comum, mas cada processo pode ter seu passo de tempo (Time-step)




Os campos atualizados por um processo são usados como ponto de partida para o próximo processo. Isso se chama "Time splitting" ou "operator splitting". e é usado porque os computadores atuais não conseguem resolver todas as EDP acopladas ao mesmo tempo.

Ex BRAMS

$\Delta x \sim 100$ Km

$N_x \sim 35$

$$\begin{cases} \Delta T_{dyn} = 120\,s \ (2\,min) \\ \Delta T_{convec} = 1200\,s \ (20\,min) \\ \Delta T_{rad} = 1800\,s \ (30\,min) \end{cases}$$

# Eq de Advecção e Difusão



Vamos resolver a equação da continuidade, na verdade só a parte de difusão e advecção, aplicando o conceito de "operator-split".

A equação completa para $N(x,y,z,t)$ é

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla\cdot(\vec{v}N) = \nabla\cdot(\rho K \nabla N) + \sum R_n$$

é separado em 3 EDP de duas dimensões para $(t,x)$, $(t,y)$ e $(t,z)$ e 1 EDO apenas no tempo:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial N}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x}(uN) - \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\rho K_x \dfrac{\partial N/\rho}{\partial x}\right) = 0 \\ \dfrac{\partial N}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial y}(vN) - \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\rho K_y \dfrac{\partial}{\partial y}(N/\rho)\right) = 0 \\ \dfrac{\partial N}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial y}(wN) - \dfrac{\partial}{\partial z}\left(\rho K_z \dfrac{\partial}{\partial z}(N/\rho)\right) = 0 \\ \dfrac{\partial N}{\partial t} = \sum R_n \end{cases}$$

advection diffusion

external sources & sinks.

Resolver essas equações sequencialmente é uma aproximação da solução completa! E é muito usada nos modelos atmosféricos. Este método particular de "operator splitting" é chamado método dos intervalos fracionários.

Existem modelos que trocam a ordem em $x, y, z$ entre os intervalos $\Rightarrow$ esquemas c/ troca de direção.

Em modelos como o global isso é ainda mais decomposto:

1º $\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(uN)$ transporte

2º $\frac{\partial N}{\partial t} = +\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho K_x \frac{\partial N/\rho}{\partial x}\right)$ difusão

3º $\frac{\partial N}{\partial t} = \sum R_n$ fontes e sumidouros

É mais fácil de resolver mas é menos preciso.

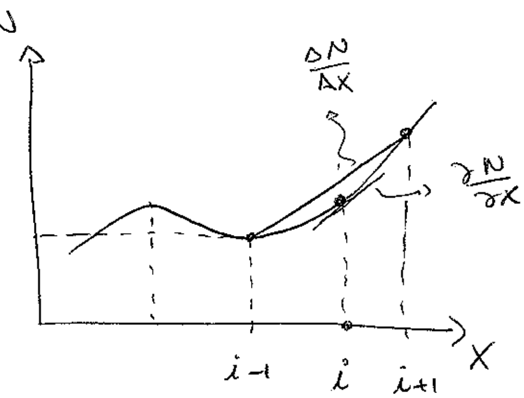
---

## Diferenças Finitas

OK, separamos as variáveis independentes, mas ainda temos uma EDP contínua. Para resolvê-las numericamente ainda temos que discretizar.

Um dos métodos é diferenças finitas!

Temos uma função contínua $N(x)$ e derivadas contínuas $\partial N/\partial x$ e vamos calculá-los apenas em alguns pontos:




$N(X) \Rightarrow N(i) = N(X_i)$

$X \in \mathbb{R} \Rightarrow X_i$

$$\frac{\partial N}{\partial X} = \lim_{\Delta X \to 0} \frac{\Delta N}{\Delta X} = \frac{N_{i+1} - N_{i-1}}{X_{i+1} - X_{i-1}}$$

Essa é uma diferença centrada. Podíamos ter estimado a derivada com uma diferença atrasada ou avançada também:

$$\sim \frac{N_{i+1} - N_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (\text{avançada}) \qquad \sim \frac{N_i - N_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (\text{atrasada})$$

Mas de onde vem essa aproximação? Como N e suas derivadas são contínuas, então podemos fazer uma expansão em série de Taylor:

① $$N(x+\Delta x) = N(x) + \Delta x \frac{\partial N(x)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} + \cdots$$

② $$N(x-\Delta x) = N(x) - \Delta x \frac{\partial N}{\partial x}(x) + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 N}{\partial x^3}$$

Se o espaçamento na grade for uniforme, ou seja: se $|+\Delta x| = |-\Delta x|$, então:

Soma

$$N(x+\Delta x) + N(x-\Delta x) = 2N(x) + \Delta x^2 \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{1}{12} \Delta x^4 \frac{\partial^4 N}{\partial x^4} + \cdots$$

Rearrumando, temos:

$$\boxed{\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} = \frac{N(x+\Delta x) - 2N(x) + N(x-\Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)}$$

$$\mathcal{O}(\Delta x^2) = \frac{-1}{12} \Delta x^2 \frac{\partial^4 N}{\partial x^4} - \cdots$$

é o erro no truncamento da série de Taylor

Se subtraímos ① e ②, temos:

$$N(x+\Delta x) - N(x-\Delta x) = 2\Delta x \frac{\partial N}{\partial x}(x) + \frac{1}{3}\Delta x^3 \frac{\partial^3 N}{\partial x^3}(x) + \cdots$$

Reorganizando, temos:

$$\boxed{\frac{\partial N}{\partial x}(x) = \frac{N(x+\Delta x) - N(x-\Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)}$$

o erro no truncamento $\mathcal{O}(\Delta x^2) = -\frac{1}{6}\Delta x^2 \frac{\partial^3 N}{\partial x^3} - \cdots$

Se os termos em $\Delta x^2$ e superiores são desprezíveis, então a expressão p/ a 1ª derivada em diferenças finitas fica:

$$\boxed{\frac{\partial N}{\partial x} \approx \frac{N_{i+1} - N_{i-1}}{2\Delta x}}$$

é a aproximação de diferença centrada de segunda ordem p/ a 1ª derivada de $N(x)$

Se usamos apenas os primeiros dois termos da equação ① ou ②, temos:

① $$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{N(x+\Delta x) - N(x)}{\Delta x} + \frac{1}{2}\Delta x \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \cdots$$

② $$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{N(x) - N(x-\Delta x)}{\Delta x} - \underbrace{\frac{1}{2}\Delta x \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}}_{\mathcal{O}(\Delta x)} + \cdots$$

são aproximações de primeira ordem em diferenças avançadas ou atrasadas.

Seja uma derivada m-ésima $\partial^m N / \partial x^m$ de $N(x)$, podemos calculá-la usando $q$ pontos da grade, mas precisamos de pelo menos $q \geq m+1$!

Em geral, a maior ordem da aproximação que se pode conseguir é $q-m$ (odd) ou $q-m+1$ ($m$ é par).

Exemplos

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{N_i - N_{i-1}}{\Delta x} \quad \text{1º ordem, atrasado}$$

$$= \frac{N_{i+1} - N_{i-1}}{2\Delta x} \quad \text{2º ordem, centrada}$$

$$= \frac{-2N_{i-1} - 3N_i + 6N_{i+1} - N_{i+2}}{6\Delta x} \quad \text{3º ordem, adiantado}$$

$$= \frac{N_{i-2} - 8N_{i-1} + 8N_{i+1} - N_{i+2}}{12\Delta x} \quad \text{4º ordem, centrado}$$

Critérios

Uma solução numérica para uma equação diferencial reproduz a solução analítica apenas se vários critérios forem satisfeitos.

① Convergência: a expressão em diferenças finitas deve convergir para forma diferencial; no mesmo sentido do teorema central do limite:

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta N}{\Delta x} = \frac{\partial N}{\partial x} \overset{ex.}{=} \lim_{\Delta x \to} \frac{N_{i+1} - N_{i-1}}{2\Delta x}$$

É preciso esta convergência p/ que a aproximação seja acurada.

(2) consistência: Como vimos, ao fazer a expansão em série de Taylor e discretizar jogamos fora termos de alta-ordem ... Para a aproximação ser consistente, o erro no truncamento deve ir para zero:

Ex: $\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{N_{i+1} - N_{i-1}}{2\Delta x} +$ ~~[illegible]~~ então $\lim_{\Delta x \to 0} |O(\Delta x^2)| = 0$

$\Rightarrow$ OBS = se (1) então (2) e vice-versa

(3) ordem da aproximação

É ~~[illegible]~~ a menor potência em $\Delta$ deixada de fora na expansão de Taylor. É preciso que a aproximação seja da mesma ordem em todas as variáveis.

(4) Convergência geral

Além de que as expressões em D.F. convergem para as diferenciais, precisamos que a solução numérica convirja p/ a solução analítica:

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \to 0} |N(x,t) - N_{x,t}| = 0$$

Queremos que a solução seja convergente mas, no caso da atmosfera, não conhecemos $N(x,t)$ e temos como avaliar isto facilmente.

## (5) Stabilidade numérica

A diferença entre a solução exata e a numérica não deve crescer com o tempo:

$$\lim_{t \to \infty} |N(x,t) - N_{\Delta x, \Delta t}| < C = \text{cte}$$

Normalmente depende do passo de tempo $\Delta t$.

- incondicionalmente estável = a sol. é estável $\forall \Delta t$
- condicionalmente estável = a sol. é estável apenas $\Delta t <$ lim
- incondicionalmente instável = a sol. não é estável $\forall \Delta t$

Se há convergência geral e se as aproximações das derivadas forem convergentes e consistentes então a solução é estável (pode ser cond.)

Solução da eq de advec-difusão

Ao resolver a eq de advecção-difusão temos que discretizar no Tempo e no espaço e queremos encontrar o valor da variável em $t+1$.

Há várias maneiras de fazer a discretização que levam à esquemas conceitualmente diferentes na solução numérica.

explícito: calcula-se $N_{t+1}$ em função apenas dos valores pré-calculados em $N_t$, $N_{t-1}$, ...

implícito: calcula-se $N_{t+1}$ com os valores desconhecidos em $t+1$.

semi-implícito: calcula-se $N_{t+1}$, com base tanto em $t+1$, quanto em $t$, $t-1$, ...

Exemplo: $\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\mu N)$

- implícito

$$\frac{N^{i}_{t+1} - N^{i}_{t}}{\Delta t} = -\frac{(\mu N)^{i+1}_{t+1} - (\mu N)^{i-1}_{t+1}}{2\Delta x}$$

solução mais complex
$N^{i}_{t+1} \leftarrow N^{i+1}_{t+1}$ e $N^{i-1}_{t+1}$

- explícito

$$\frac{N^{i}_{t+1} - N^{i}_{t}}{\Delta t} = -\frac{(\mu N)^{i+1}_{t} - (\mu N)^{i-1}_{t}}{2\Delta x}$$

solução é trivial

Em $\boxed{\text{geral,}}$ temos que:

$\left\{\begin{array}{l}\text{explícito}\\ \text{semi-implícito}\end{array}\right. \Rightarrow$ condicionalmente estáveis

implícito $\Rightarrow \left\{\begin{array}{l}\text{condicionalmente}\\ \underline{\text{in}}\text{condicionalmente}\end{array}\right.$ estáveis

O critério de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy determina qual é o espaçamento de grade máximo para haver estabilidade na equação de difusão:

$$\Delta t < \frac{\Delta x_{min}}{|v_{max}|} \quad \text{(só advecção)}$$

$$\Delta t < \frac{\Delta x^2_{min}}{|K_{max}|}$$

Ou seja, dependendo do espaçamento espacial, há um limite para o espaçamento no tempo.

Ex:

$$\left\{\begin{array}{ll}\Delta x = 5\,km & \\ v_{max} = 20\,m/s & \Rightarrow \Delta t < 250\,s \\ \Delta z = 100\,m & \\ w_{max} = 1\,m/s & \Rightarrow \Delta t < 100\,s\end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{ll}K_{vert} = 50\,m^2/s & \\ \Delta z = 100\,m & \Rightarrow \Delta t < 200\,s \\ & \\ K_{horiz} = 2500\,m^2/s & \\ \Delta x = 5\,km & \Rightarrow \Delta t < 10000\,s\end{array}\right.$$

É mais fácil a solução da eq de difusão ficar <u>instável</u> na vertical do que na horizontal

Discretização

Uma das maneiras de discretizar a eq A.D., provavelmente como vocês fizeram no exercício, é:

$$\frac{N_{t+1}^{i} - N_{t}^{i}}{\Delta t} = - \frac{(uN)_{t}^{i+1} - (uN)_{t}^{i-1}}{2 \Delta x} + \cancel{(kN)_{t}^{i+1}}$$

$$+ K \frac{N_{t}^{i+1} - 2 N_{t}^{i} + N_{t}^{i-1}}{\Delta x^2}$$

A solução é simples, basta isolar o termo único em $N_{t+1}^{i}$:

$$N_{t+1}^{i} = N_{t}^{i} - \frac{\Delta t}{2 \Delta x} \left( (uN)_{t}^{i+1} - (uN)_{t}^{i-1} \right)$$

$$+ K \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left( N_{t}^{i+1} - 2 N_{t}^{i} + N_{t}^{i-1} \right)$$

explícito

Com apenas 1-loop em $i = 1, i_{max}$ resolvemos todo o problema! É de 1ª ordem avançada no tempo e de 2ª ordem centrado no espaço.

O problema é que esta solução é:

- condicionalmente estável — apenas p/ K pequeno
- incondicionalmente instável — p/ K=0 ou K grande

Uma outra maneira é resolver implicitamente:

$$\frac{N_{t+1}^{i} - N_t^{i}}{\Delta t} = -\frac{(uN)_{t+1}^{i+1} - (uN)_{t+1}^{i-1}}{2\Delta x} + K\,\frac{N_{t+1}^{i+1} - 2N_{t+1}^{i} + N_{t+1}^{i-1}}{\Delta x^2}$$

Agora há mais termos em $t+1$, e em diferentes posições da grade horizontal:

$$\left\{\left(\frac{K}{\Delta x^2} - \frac{u_{i+1}}{2\Delta x}\right)\Delta t\right\} N_{t+1}^{i+1} - \left\{1 + \frac{2K\,\Delta t}{\Delta x^2}\right\} N_{t+1}^{i}$$

$$\left\{\left(\frac{K}{\Delta x^2} + \frac{u_{i-1}}{2\Delta x}\right)\Delta t\right\} N_{t+1}^{i-1} = -N_t^{i}$$

Definindo:

$$A_i = -\Delta t\left(\frac{K}{\Delta x^2} + \frac{u}{2\Delta x}\right)_{i-1}$$

$$B_i = \left(1 + \frac{2K}{\Delta x^2}\Delta t\right)_i$$

$$C_i = -\left(\frac{K}{\Delta x^2} - \frac{u}{2\Delta x}\right)_{i+1}\Delta t$$

Temos:

$$A_i N_{t+1}^{i-1} + B_i N_{t+1}^{i} + C_i N_{t+1}^{i} = N_t^{i}$$

Essa é uma equação matricial:

$$
\begin{pmatrix}
B_1 & C_1 & 0 & \cdots & & & \\
A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \cdots & & \\
0 & A_3 & B_3 & C_3 & & & \\
\vdots & 0 & & \ddots & & & \\
\vdots & \vdots & & & A_{M-1} & B_{M-1} & C_{M-1} \\
 & & & & 0 & A_M & B_M
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
N^1 \\ N^2 \\ \vdots \\ N^M
\end{pmatrix}_{t+1}
=
\begin{pmatrix}
N^1 \\ N^2 \\ \vdots \\ N^M
\end{pmatrix}_{t}
$$

O é quase isso... o problema é só na parte de cima e de baixo, isto é, em $i=1$ e $i=M$. Nos limites do domínio, precisamos de condições de contorno.

$\overline{u'N'}$ = fluxo = $K \frac{\partial N}{\partial x}$ não vale na interface, pois não podemos calcular $\partial N / \partial x$ ... Temos que usar o fluxo diretamente:

$\Rightarrow$ ou seja, $\left.\frac{\partial}{\partial x}(\text{Fluxo})\right|_{i=1} \cong \left(\left. K \frac{\partial N}{\partial x}\right|_{i+1} - \left.\text{Fluxo}\right|_{i}\right) / \Delta x$

Se fizermos isso, aparece um termo a mais do lado direito:

$$
\begin{pmatrix}
N^1_t - \frac{2\Delta t}{\Delta x} F_{\text{superf}}(t) \\
N^2_t \\
\vdots \\
N^M_t - \frac{2\Delta t}{\Delta x} F_{\text{TOPO}}(t)
\end{pmatrix}
$$