

Capítulo 1

Esquema de diferenças finitas e a equação do Oscilador Harmônico

Embora a maior parte dos Modelos Atmosféricos (MA) seja resolvida por uma série de equações diferenciais parciais (EDP), em algumas formulações, a solução numérica de equações diferenciais ordinárias (EDO) é uma importante parte do procedimento computacional. Por exemplo, em modelos espectrais as EDP governantes podem ser reduzidas a uma série de EDO, pela expansão dos coeficientes em variáveis dependentes. A série de EDO pode também ser obtida se um método Lagrangiano for usado (em que os pontos computacionais movem-se com um fluido).

Primeiramente serão definidos alguns esquemas normalmente utilizados e, a seguir, será investigada a solução numérica, quando esses esquemas, são aplicados em uma EDO (no caso, será exemplificado com a equação do oscilador harmônico).

1. Definição de alguns esquemas

Esquemas usados para termos com derivadas temporais, dentro de equações primitivas, são relativamente simples, usualmente de segunda, e às vezes, de primeira ordem de precisão. Existem algumas razões para isso:

a) O senso geral mostra que, a construção de esquemas que tem alta precisão não são muito bem sucedidos quando são utilizados para resolver EDO. No entanto, isto está em contraste com a experiência, quando esquemas de alta precisão usados para resolver EDO, como o método de Runge-Kutta (ver apêndice), podem ser extremamente bem sucedidos. Existe uma razão básica para essa diferença. Em EDO, a equação e as condições iniciais são simples, o que requer uma solução exata, e deste modo o erro da solução numérica é apenas devido a escolha inadequada do esquema. Com as EDP, o erro da solução numérica é devido tanto a escolha inadequada do esquema quanto de informações insuficientes sobre as condições iniciais.

b) Outra razão para não se usar esquemas de alta precisão para aproximações de derivadas temporais é devido ao “time step” pequeno requerido, para manter a estabilidade, o que pode ocasionar outros erros, por exemplo, na diferenciação espacial, que são muito maiores que os devido à diferenciação temporal. Deste modo o esforço computacional é melhor gasto em reduzir esses e outros erros, do que em aumentar a acurácia da diferenciação temporal. Para definir alguns esquemas, será considerada a seguinte equação:

$$\frac{dU}{dt} = f(U, t), \quad U=U(t) \quad (1.1)$$

sendo a variável independente t o tempo.

Dividindo o eixo do tempo em segmentos de igual comprimento (figura 1), será denotado por $U^{(n)}$ o valor aproximado de U no tempo $n\Delta t$ e considerado que os valores $U^{(n)}, U^{(n-1)}, \dots$ são conhecidos. A seguir, será construído um esquema computacional para o cálculo aproximado do valor de $U^{(n+1)}$. Existem algumas possibilidades:

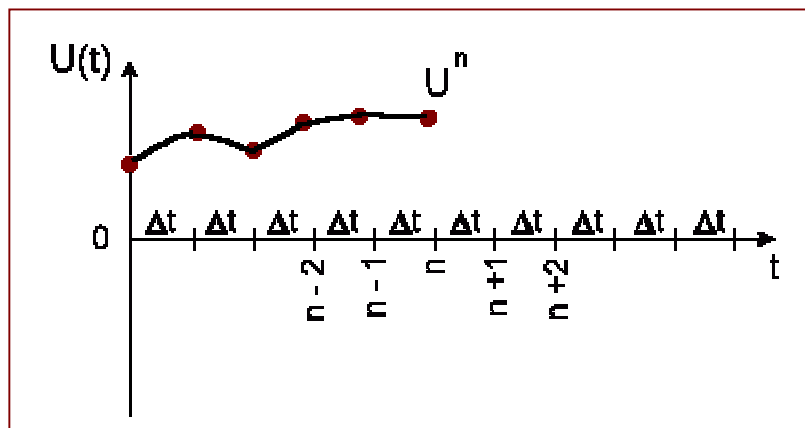


Figura 1

A) Esquema de 2 níveis: esses esquemas relacionam valores de variáveis dependentes em dois níveis de tempo: n e n + 1. Somente o esquema de dois níveis pode ser usado para avançar a integração no primeiro passo de tempo, quando a condição inicial é avaliada. Cada um dos esquemas será aproximado para a fórmula exata:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(U, t) dt \quad (1.2)$$

Primeiramente, serão listados esquemas que não usam um procedimento iterativo:

A1) Esquema de Euler (ou avançado):

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n)} \quad (1.3)$$

sendo:

$$f^{(n)} \equiv f(U^{(n)}, n\Delta t)$$

O erro de truncamento desse esquema é o de primeira ordem, representado por $O(\Delta t)$. Para o integrando em (1.2) toma-se como valor constante, aquele dado pelo limite inferior do intervalo temporal. Deste modo, f em (1.3) é não centrado no tempo, e o esquema é dito “**não – centrado.**” Em geral, esquemas não centrados apresentam primeira ordem de precisão, e esquemas centrados simples apresentam segunda ordem de precisão.

A2) Esquema atrasado:

Será considerado agora, como valor constante de f , o limite superior do intervalo temporal, obtendo-se então:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n+1)} \quad (1.4)$$

Se, como aqui, o valor de f dependente de $U^{(n+1)}$ aparecer na equação diferencial, o esquema é chamado **implícito**. Para uma EDO, isso pode ser simplesmente resolvido com uma equação diferencial para um dado valor de $U^{(n+1)}$. Mas para uma EDP, isto pode requerer resolver uma série de equações simultâneas, com uma equação para cada ponto de grade da “região computacional”. Se o valor de f dependente de $U^{(n+1)}$ não aparecer na equação diferencial, o esquema é chamado **explícito**. O erro de truncamento de (1.4) é $O(\Delta t)$.

A3) Esquema trapezoidal:

Aproximando f em (1.2) por uma média de valores do início e fim do intervalo temporal, obtêm-se o esquema trapezoidal:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} \frac{1}{2} \Delta t (f^{(n)} + f^{(n+1)}) \quad (1.5)$$

Esse também é um esquema *implícito*, mas o erro de truncamento é $O[(\Delta t)^2]$.

Para aumentar a precisão, ou por outras razões, pode-se também construir esquemas iterativos. Dois esquemas que serão definidos são construídos do mesmo jeito que (1.4) e (1.5), exceto que o procedimento iterativo é usado para tornar o esquema explícito.

A4) Esquema de Matsuno (ou Euler – atrasado):

Com esse esquema o passo no tempo é feito primeiro usando o esquema de Euler; o valor de U obtido para o tempo $n+1$ é então usado para aproximar $f^{(n+1)}$, e esse valor aproximado $f^{(n+1)*}$ é usado para fazer o passo atrasado, assim:

$$\begin{aligned} U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n)}, \\ U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n+1)*} \end{aligned} \quad (1.6)$$

sendo:

$$f^{(n+1)*} \equiv f(U^{(n+1)*}, (n+1) \Delta t).$$

Esse é um esquema *explícito*, de primeira ordem de precisão.

A5) Esquema de Heun:

Aqui, da mesma maneira, uma aproximação é construída para um esquema trapezoidal:

$$\begin{aligned} U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + \Delta t f^{(n)}, \\ U^{(n+1)} &= U^{(n)} \frac{1}{2} \Delta t (f^{(n)} + f^{(n+1)*}) \end{aligned} \quad (1.7)$$

Deste modo, este também é um esquema *explícito*, no entanto, de segunda ordem de precisão.

B) Esquema de 3 níveis: Exceto no primeiro passo, pode-se armazenar o valor de $U^{(n-1)}$ e construir esquemas tendo a vantagem dessa informação adicional. Esses são esquemas de três níveis, e podem ser aproximados pela fórmula:

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} + \int_{(n-1)\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(U, t) dt \quad (1.8)$$

ou se pode usar o valor adicional $U^{(n-1)}$ para melhorar a aproximação de f em (1.2).

B1) Esquema Leapfrog:

Uma maneira simples de fazer uma avaliação da integral em (1.8) é tomar um valor constante para f , como sendo igual a média do intervalo $2\Delta t$:

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} + 2 \Delta t \cdot f^{(n)} \quad (1.9)$$

O erro de truncamento é $O[(\Delta t)^2]$. Este é, provavelmente, o esquema mais usado em modelos atmosféricos, e também é chamado “relação de meio ponto” ou “step-over”.

B2) Esquema Adams - Bashforth:

O esquema que é usualmente chamado de Adams – Bashforth nas ciências atmosféricas, é de fato, uma versão simplificada do esquema original de Adams – Bashforth, de quarta ordem de precisão. A versão simplificada é obtida quando f em (1.2) é aproximado por um valor obtido do centro do intervalo Δt , por uma extrapolação linear, usando valores $f^{(n-1)}$ e $f^{(n)}$, dando:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \Delta t \left(\frac{3}{2} f^{(n)} - \frac{1}{2} f^{(n-1)} \right) \quad (1.10)$$

esse também é um esquema de segunda ordem.

2. Propriedades de esquemas aplicados a Equação do Oscilador

A estabilidade e outras importantes propriedades da equação diferencial temporal definidas na seção 1, dependem da forma da função $f(U, t)$. Desta maneira, para discutir essas propriedades, deve-se reescrever essa função. Para aplicações em ciências atmosféricas, é interessante considerar um caso em particular:

$$f \equiv i \omega U,$$

e a equação:

$$\frac{dU}{dt} = i \omega U, U=U(t) \quad (2.1)$$

A equação (2.1) é chamada “Equação do Oscilador”. Como U é considerado complexo, então (2.1) é representado por um sistema de duas equações; o parâmetro ω é real e, é chamado frequência.

Como exemplo, pode-se tomar o componente harmônico

$$u(x,t) = \text{Re}[u(t) e^{ikx}],$$

que é a solução da equação de onda linear

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ com } c = \text{cte.}$$

contanto que:

$$\frac{dU}{dt} + i KcU=0$$

Essa EDO reduz-se a (2.1) substituindo $\omega = -Kc$.

Um outro exemplo simples que pode ser considerado são os termos de aceleração e Coriolis da componente horizontal da equação de movimento da atmosfera, isto é:

$$\frac{du}{dt} = f v \text{ e}$$

$$\frac{dv}{dt} = -f u ;$$

Definindo:

$$U \equiv u + iv$$

Pode-se reescrever essas duas equações como:

$$\frac{dU}{dt} = f U i$$

essa também reduz-se a (2.1), se substituir $\omega = -f$.

Desde que esses são os mais importantes tipos de movimento de onda, esperar-se que os resultados obtidos do estudo de (2.1) possam ser mais gerais.

A solução geral de (2.1) é:

$$U(t) = U(0) e^{i\omega t}$$

Ou para valores discretos ($t = n \Delta t$),

$$U(n \Delta t) = U(0) e^{i\omega n \Delta t} \quad (2.2)$$

Desta maneira, considerando a equação em um plano complexo, esse argumento de rotação dado por $\omega\Delta t$ em cada passo de tempo Δt , não altera a amplitude. As propriedades de vários esquemas, quando aplicados a (2.1) serão analisadas usando o método de *Von Neumann*. Esse método, como será visto, envolve a definição da variável λ dada por:

$$U^{(n+1)} \equiv \lambda U^{(n)} \quad (2.3)$$

e definindo λ

$$\lambda \equiv |\lambda| e^{i\theta} \quad (2.4)$$

e a solução numérica, pode formalmente ser escrita como:

$$U^{(n)} = |\lambda|^n U^{(0)} e^{in\theta} \quad (2.5)$$

Sendo que, θ representa a mudança em argumento (ou mudança de fase) da solução numérica de cada passo de tempo. Como sabe-se que a amplitude da solução verdadeira não muda, considera-se $|\lambda| \leq 1$ para a estabilidade.

Considerando isso e a equação (2.5) tem-se o seguinte esquema:

Instável, se	$ \lambda > 1$
Neutro, se	$ \lambda = 1$
Dissipativo, se	$ \lambda < 1$

É também necessário comparar a mudança de fase da solução numérica para cada passo de tempo, θ , considerando a solução verdadeira, $\omega \Delta t$. A razão dessa mudança, $\theta/(\omega\Delta t)$, é a mudança de fase relativa da solução numérica. Obviamente, se pode chegar ao seguinte esquema:

Acelerado, se	$\theta/(\omega\Delta t) > 1$
Não altera a velocidade de fase	$\theta/(\omega\Delta t) = 1$
Desacelerado, se	$\theta/(\omega\Delta t) < 1$

Considerando a precisão, conseqüentemente, é desejável ter ambos, o fator de amplificação e a velocidade de fase relativa, unidos. Exceção para isso, são os chamados “modos computacionais”, que podem aparecer como soluções falsas superpostas a solução física. Essas soluções, que não aparecem como verdadeiras, nos passos de tempo e espaço, aproximam-se de zero. Se cada solução existente tiver, cada uma, outro valor de fator de amplificação (desde que eles não se aproximem da solução

verdadeira), é desejável amplitudes menores possível, ou seja, fator de amplificação menor que 1.

A seguir, serão discutidas as propriedades dos esquemas apresentados na seção anterior:

Esquemas de dois níveis:

Os três esquemas de dois níveis podem ser descritos como uma equação simples de diferenças finitas:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)}) \quad (2.6)$$

que requer a equação de consistência:

$$\alpha + \beta = 1$$

Obviamente, $\alpha = 1$ e $\beta = 0$ para o esquema de Euler, $\alpha = 0$ e $\beta = 1$ para o esquema atrasado e $\alpha = \frac{1}{2}$ e $\beta = \frac{1}{2}$ para o esquema trapezoidal.

Aplicando-se na equação do oscilador, tem-se:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + i \omega t (\alpha U^{(n)} + \beta U^{(n+1)}) \quad (2.7)$$

Para avaliar o valor de λ é necessário resolver a equação para $U^{(n+1)}$, definindo então:

$$p \equiv \omega \Delta t \quad (2.8)$$

obtendo:

$$U^{(n+1)} = \frac{1+i\alpha p}{1-i\beta p} U^{(n)} \quad (2.9)$$

Deste modo,

$$\lambda = \frac{1+i\alpha p}{1-i\beta p}$$

ou,

$$\lambda = \frac{1}{1-i\beta^2 p^2} (1-\alpha\beta p^2 + i p)$$

Substituindo α e β pode-se investigar os efeitos dos esquemas em particular:

Para o esquema de Euler tem-se:

$$\lambda = 1 + i p \quad (2.11)$$

Para o esquema atrasado:

$$\lambda = \frac{1}{1+p^2}(1+ip) \quad (2.12)$$

Para o esquema trapezoidal:

$$\lambda = \frac{1}{1+\frac{1}{4}p^2}\left(1-\frac{1}{4}p^2+ip\right) \quad (2.13)$$

Para testar a estabilidade é necessário conhecer o $|\lambda|$, desde que o módulo da razão dos dois números complexos seja igual a razão dos dois módulos, obtêm-se o valor de $|\lambda|$ diretamente de (2.10).

Para o esquema de Euler:

$$|\lambda| = (1+p^2)^{1/2} \quad (2.14)$$

e deste modo o esquema de Euler é sempre *instável*. É interessante notar que, se Δt é escolhido para tornar p relativamente pequeno, tem-se:

$$|\lambda| = 1 + \frac{1}{2}p^2 + \dots \quad (2.15)$$

Isto mostra que, $|\lambda| = 1 + O[(\Delta t)^2]$, isto é, $|\lambda| - 1$ é a menor ordem de magnitude permitida pela condição de Von Neumann, para a estabilidade. Todavia, a experiência mostra que o uso indiscriminado da equação de Euler para a solução de equações atmosféricas conduz a amplificação numa taxa inaceitável.

Para o esquema atrasado tem-se:

$$|\lambda| = (1+p^2)^{-1/2} \quad (2.16)$$

e deste modo o esquema de Backward é *estável*, para qualquer Δt . Ou seja, esse é um esquema *incondicionalmente estável*.

Para o esquema trapezoidal:

$$|\lambda| = 1 \quad (2.17)$$

que é considerado um esquema *neutro*. A amplitude da solução numérica permanece constante, tendo, então, solução igual a solução analítica.

Os esquemas de dois níveis podem ser descritos como uma equação simples (como 2.6), e deste modo:

$$\begin{aligned} U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n)} \\ U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)*}) \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\alpha + \beta = 1$$

agora, $\alpha = 0$ e $\beta = 1$, para o esquema de Matsuno, e $\alpha = \frac{1}{2}$ e $\beta = \frac{1}{2}$ para o esquema de Heun.

Aplicando para a equação do oscilador (2.8):

$$\begin{aligned} U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + i\omega\Delta t U^{(n)} \\ U^{(n+1)} &= U^{(n)} + i\omega\Delta t (\alpha U^{(n)} + \beta U^{(n+1)*}) \end{aligned} \quad (2.19)$$

eliminando $U^{(n+1)*}$, e usando (2.8), obtêm-se:

$$U^{(n+1)} = (1 - \beta p^2 + ip) U^{(n)}$$

e deste modo,

$$\lambda = 1 - \beta p^2 + ip^2 \quad (2.20)$$

Substituindo os valores apropriados de β obtêm-se os valores de λ para os dois esquemas:

Para o esquema de Matsuno:

$$\lambda = 1 - p^2 + ip \quad (2.21)$$

Para o esquema de Heun:

$$\lambda = 1 - \frac{1}{2} p^2 + ip \quad (2.22)$$

Para testar a estabilidade é avaliado $|\lambda|$.

Para o esquema de Matsuno:

$$|\lambda| = (1 - p^2 + p^4)^{1/2} \quad (2.23)$$

então, esquema de Matsuno é estável se $|p| \leq 1$, em outras palavras, Δt tem que ser suficientemente pequeno para que:

$$\Delta t \leq 1/|\omega| \quad (2.24)$$

O esquema de Matsuno deste modo, é **condicionalmente estável**.

Para o esquema de Heun (2.22) dá:

$$|\lambda| = (1 + \frac{1}{4} p^4)^{1/2} \quad (2.25)$$

que é maior que a unidade, e então esse esquema é **instável**, como o de Euler. Para p pequeno tem-se:

$$|\lambda| = 1 + \frac{1}{8} p^4 + \dots \quad (2.26)$$

que é, $|\lambda| = 1 + 0 [(\Delta t)^4]$. Esta instabilidade é muito fraca.

É também interessante considerar a mudança de fase por unidade de passo de tempo, θ , e a mudança de fase relativa por passo de tempo, $\theta/\omega\Delta t$.

Usando a notação:

$$\lambda \equiv \lambda_{re} + i \lambda_{im} \quad (2.27)$$

e usando (2.4):

$$\theta = \arctan \lambda_{im}/\lambda_{re} \quad (2.28)$$

ou

$$\theta/p = 1/p \arctan \lambda_{im}/\lambda_{re} \quad (2.29)$$

Para os esquemas de Euler e atrasado, usando (2.11) e (2.12) obtêm-se:

$$\theta/p = 1/p \arctan p \quad (2.30)$$

Desde que o lado direito seja menor que a unidade, vê-se que os dois esquemas estão desacelerando. Para $p=1$, têm-se $\theta/p = \pi/4$.

Em outros casos, o efeito não é tão óbvio. Para o esquema de Matsuno, por ex, (2.21) têm-se:

$$\theta/p = 1/p \arctan (p/1-p^2) \quad (2.31)$$

E aqui não é óbvio que o lado direito é maior ou menor que a unidade.

B) Esquema de 3 níveis: Considerando o esquema Leapfrog (1.9) aplicado a equação do oscilador sem tem:

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} + i 2 \omega \Delta t U^{(n)} \quad (2.32)$$

De acordo com (2.3) tem-se:

$$U^{(n)} = \lambda U^{(n-1)}, U^{(n+1)} = \lambda^2 U^{(n-1)} \quad (2.33)$$

Quando essas relações são substituídas em (2.32) obtêm-se:

$$\lambda^2 - 2 i p \lambda - 1 = 0$$

a equação de segundo grau para λ tem as seguintes soluções:

$$\lambda_1 = (1-p^2)^{1/2} + ip \text{ e } \lambda_2 = -(1-p^2)^{1/2} + ip \quad (2.34)$$

desde modo, são duas soluções da forma $U^{(n+1)} = \lambda U^{(n)}$.

Se a solução $U^{(n+1)} = \lambda U^{(n)}$ representar a aproximação da solução verdadeira, então $\lambda \rightarrow 1$ quando $\Delta t \rightarrow 0$. Para os valores em (2.34), quando $p \equiv \omega \Delta t \rightarrow 0$, $\lambda_1 \rightarrow 1$. Todavia,

ao mesmo tempo $\lambda_2 \rightarrow -1$. Portanto, soluções associadas com λ_1 são usualmente chamadas *modos físicos*, porque resolvem equações que descrevem processos físicos. Soluções associadas com λ_2 não são aproximações da solução verdadeira e são chamadas *modos computacionais*.

O problema com esquemas com três ou mais níveis é que esses requerem mais de uma condição inicial para iniciar os cálculos. Nesse caso, uma simples condição inicial física ($U^{(0)}$) pode não ser suficiente. Então, além da condição física inicial, esquema de três níveis requerem uma condição inicial computacional ($U^{(1)}$). Esse valor não pode ser calculado por um esquema de três níveis, e pode, todavia, ser calculado usando um esquema de dois níveis.

Para clarificar esta situação pode se considerar o caso em que $\omega=0$, que resulta na equação:

$$\frac{dU}{dt} = 0 \quad (2.35)$$

sendo a solução verdadeira

$$U = \text{constante} \quad (2.36)$$

Aplicando ao esquema Leapfrog a (2.35), tem-se:

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} \quad (2.37)$$

Para a condição física inicial $U^{(0)}$, consideram-se duas escolhas de $U^{(1)}$.

a) Suponha o cálculo de $U^{(1)}$ feito para dar a solução verdadeira $U^{(0)}$, em (2.37) tem-se então:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)},$$

Ou, desde que $p=0$

$$U^{(n+1)} = \lambda_1 U^{(n)}$$

Deste modo, a solução numérica é igual a solução verdadeira (2.36) e consiste no *modo físico*.

b) Supondo o cálculo de $U^{(1)}$ sendo $U^{(1)} = -U^{(0)}$, obtendo então para qualquer n:

$$U^{(n+1)} = -U^{(n)}, \text{ ou}$$

$$U^{(n+1)} = \lambda_2^2 U^{(n)}$$

que consiste no *modo computacional*.

Em geral, desde que (2.31) é uma equação linear, sua solução sempre é uma combinação das duas soluções:

$$\begin{aligned} U_1^{(n)} &= \lambda_1^{(n)} U_1^{(0)}, \\ U_2^{(n)} &= \lambda_2^{(n)} U_2^{(0)}, \end{aligned}$$

que pode ser escrita como:

$$U^{(n)} = a \lambda_1^{(n)} U_1^{(0)} + b \lambda_2^{(n)} U_2^{(0)} \quad (2.38)$$

onde a e b são constantes. Essa solução satisfaz a condição inicial do modo computacional e físico, ou seja:

$$\begin{aligned} U^{(0)} &= a U_1^{(0)} + b U_2^{(0)}, \\ U^{(1)} &= a \lambda_1 U_1^{(0)} + b \lambda_2 U_2^{(0)}. \end{aligned}$$

Essas equações podem ser resolvidas para $a U_1^{(0)}$ e $b U_2^{(0)}$, e os resultados substituídos em (2.38) e desta maneira as amplitudes dos modos físico e computacional são proporcionais, ou seja:

$$|U^{(1)} - \lambda_2 U^{(0)}| \text{ e } |U^{(1)} - \lambda_1 U^{(0)}|.$$

Para analisar a estabilidade em vista de (2.38), é conveniente considerar três casos em especial.

1) $|p| < 1$. Em (2.34) $1-p^2$ é positivo, e obtêm-se:

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1 \quad (2.40)$$

Deste modo, ambos os modos são *estáveis e neutros*. Para a mudança de fase, usando (2.28):

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \arctan(p/(1-p^2)^{1/2}) \\ \theta_2 &= \arctan(-p/(1-p^2)^{1/2}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

Neste ponto, é interessante considerar θ como função de p , especialmente quando $p \rightarrow 0$.

Inicialmente, considera-se o caso de $p > 0$. Desde que ambos os modos $\lambda_{im} = |\lambda| \sin\theta = p$, tem-se que $0 < \theta < \pi$. Considerando os sinais de λ_{re} , encontra-se $0 < \theta_1 < \pi/2$ e $\pi/2 < \theta_2 < \pi$. Para ilustrar esse resultado, as mudanças de fase (2.41) serão apresentadas na figura 2.

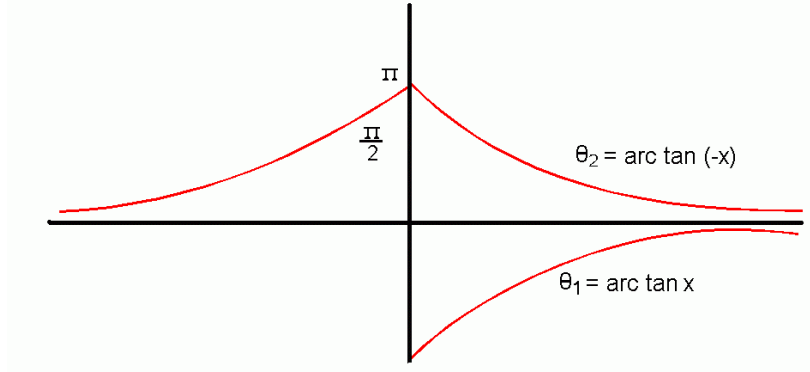


Figura 2

Pode-se ver, que, para todos os valores de p $\theta_2 = \pi - \theta_1$, e especificamente, quando $p \rightarrow 0$, $\theta_1 \rightarrow p$, então $\theta_2 \rightarrow \pi - p$. Deste modo, para pequenos Δt o modo físico se aproxima da solução verdadeira, e o modo computacional é completamente diferente. Para o caso de $p < 0$, obtêm-se $\theta_2 = -\pi - \theta_1$.

2) $|p|=1$. Limitando-se ao caso de $|p|<1$. Em (2.34) os valores de λ são iguais:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \lambda_2 = ip. \\ |\lambda_1| &= |\lambda_2| = 1.\end{aligned}\tag{2.42}$$

Deste modo, ambos os modos são **neutros**.

3) $|p|>1$. Em (2.34) ambos os valores de λ tem somente parte imaginária:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= i(p+(p^2-1)^{1/2}) \\ \lambda_2 &= i(p-(p^2-1)^{1/2})\end{aligned}$$

onde as expressões em parênteses são reais, e desta maneira:

$$\begin{aligned}|\lambda_1| &= |(p+(p^2-1)^{1/2})| \\ |\lambda_2| &= |(p-(p^2-1)^{1/2})|\end{aligned}$$

Então, para $p > 1$ têm-se $|\lambda_1| > 1$, e para $|p| < -1$ têm-se $|\lambda_2| > 1$. Logo, para $|p|>1$ o esquema Leapfrog é **instável**.

Finalmente, considerando a estabilidade para o esquema Adams Bashforth (1.10) e aplicando à equação do oscilador, têm-se:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + i \omega \Delta t \left(\frac{3}{2} U^{(n)} - \frac{1}{2} U^{(n-1)} \right)\tag{2.43}$$

E substituindo as relações em (2.33):

$$\lambda_2 - \left(1 + i \frac{3}{2} p\right) \lambda + i \frac{1}{2} p = 0$$

que, naturalmente, nos leva a duas soluções:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{3}{2} p + \left(1 - \frac{9}{4} p^2 \right) + ip \right)^{1/2} \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{3}{2} p - \left(1 - \frac{9}{4} p^2 \right) + ip \right)^{1/2}\end{aligned}\quad (2.44)$$

Deste modo, quando $p \rightarrow 0$, $\lambda_1 \rightarrow 1$ e $\lambda_2 = 0$, e a solução associada a λ_1 representa o *modo físico* enquanto que a solução associada a λ_2 representa o *modo computacional*.

3. Propriedades de esquemas aplicados a Equação de fricção

Pode-se considerar também, as propriedades dos esquemas definidos no item 1 quando aplicadas a equação de fricção:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\kappa U, \quad U=U(t) \text{ e } \kappa > 0. \quad (3.1)$$

sendo κ o coeficiente de difusão.

Se definir $U = u + iv$, ele descreve o efeito de fricção proporcional ao vetor velocidade, tal como muitas é vezes assumido em movimentos próximos a superfície.

Como outro exemplo, têm-se a equação de transferência de calor:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial u^2}{\partial x^2}, \quad \sigma > 0,$$

e na forma de um simples componente harmônico:

$$u(x,t) = \text{Re} [U(t) e^{ikx}],$$

obtendo:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\sigma k^2 U,$$

que é equivalente a (3.1) se substituir $\kappa = \sigma k^2$.

A solução geral de (3.1) é:

$$U(t) = U(0) e^{-\kappa t} \quad (3.2)$$

Deste modo, tanto a parte real quanto a parte imaginária de U decrescem exponencialmente com o tempo.

As propriedades dos esquemas aplicados a (3.1) podem novamente ser analisadas usando o Método de Von Neumann. Considerando primeiro, esquemas de dois níveis não-iterativos (2.6) e aplicando a equação de fricção, vem que:

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} - \kappa (\alpha U^{(n)} + \beta U^{(n+1)}) \quad (3.3)$$

onde $K = k \Delta t$.

rearranjando os termos em (3.3), obtêm-se:

$$U^{(n+1)} = \frac{1 - \alpha K}{1 + \beta K} U^{(n)}. \quad (3.5)$$

Para o esquema de Euler, $\alpha = 1$ e $\beta = 0$, e deste modo em (3.5) observa-se que o esquema de Euler é estável se $|1 - K| \leq 1$, isto é, se

$$0 < K \leq 2 \quad (3.6)$$

Deste modo, pode-se notar que o critério de estabilidade de um esquema em particular não tem que ser o mesmo quando aplicado a diferentes equações.

Para o esquema atrasado, $\alpha = 0$ e $\beta = 1$; ele é sempre estável para $K > 0$.

Para o esquema trapezoidal, $\alpha = \frac{1}{2}$ e $\beta = \frac{1}{2}$ e a solução, novamente, é estável se $K > 0$.

Considerando o esquema iterativo de dois níveis (2.18) obtêm-se:

$$U^{(n+1)} = (1 - k + \beta K^2) U^{(n)} \quad (3.7)$$

Logo, tanto o esquema de Matsuno quanto o de Heun são estáveis para valores suficientemente pequenos de K .

Considerando o esquema Leapfrog e aplicando a (3.1):

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} - 2 \Delta t U^{(n)}. \quad (3.8)$$

E a equação para o fator de amplificação é:

$$\lambda^2 - 2 K \lambda - 1 = 0,$$

que dá as soluções:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= -K + \sqrt{1 + K^2} \\ \lambda_2 &= -K - \sqrt{1 + K^2},\end{aligned}\tag{3.9}$$

sendo $K \rightarrow 0$ e $\lambda_1 \rightarrow 1$ e $\lambda_2 \rightarrow -1$, deste modo, a solução associada a λ_1 novamente representa o *modo físico* e λ_2 o *modo computacional*. Para $K > 0$, isto é, para o caso de uma integração avançada no tempo, têm-se $\lambda_2 < -1$, e o modo computacional é sempre instável. Ele muda de sinal de um passo de tempo para o outro, e sua magnitude aumenta. Essa amplificação não é desprezível, e o esquema Leapfrog não é adequado para uma integração numérica da equação de fricção.

Finalmente, para o esquema Adams – Bashforth, vem que:

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{2} K \pm \sqrt{1 - K + \frac{9}{4} K^2} \right),\tag{3.10}$$

esse esquema é estável para valores suficientemente pequenos de K .

No apêndice 2 é apresentado um resumo dos vários métodos e suas propriedades.

Bibliografia:

Mesinger, F. and A. Arakawa, 1976: Numerical Methods used in Atmospheric Models. GARP – WMO, 76 pp.

Haltiner, G. J. and R. T. Williams, 1971: Numerical Prediction and Dynamic Meteorology – Jonh Wiley & Sons, 477 pp.

Exercícios:

Os exercícios resolvidos no “*excel*” apresentam a resolução da equação do oscilador para os esquemas de dois níveis: Euler, Trapezoidal, Backward e três níveis Leapfrog (nesse caso o primeiro passo de tempo é construído usando o esquema Euler de dois níveis).

A equação a ser resolvida foi:

$$\frac{dq}{dt} = i\omega q$$

que, separando em parte real e imaginária:

$$\frac{dq_r}{dt} = -\omega q_i \quad (1)$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \omega q_r \quad (2)$$

É necessário resolver as duas equações:

Para o esquema de Euler e utilizando (2.6) têm-se:

$$q_r^{(n+1)} = q_r^{(n)} - \Delta t \omega q_i^{(n)}$$

$$q_i^{(n+1)} = q_i^{(n)} + \Delta t \omega q_r^{(n)}$$

Para o esquema de atrasado e utilizando (2.6) têm-se:

$$q_r^{(n+1)} = (q_r^{(n)} - \Delta t \omega q_i^{(n)}) / (1 + \Delta t^2 \omega^2)$$

$$q_i^{(n+1)} = (q_i^{(n)} + \Delta t \omega q_r^{(n)}) / (1 + \Delta t^2 \omega^2)$$

Para o esquema trapezoidal e utilizando (2.6) têm-se:

$$q_r^{(n+1)} = (q_r^{(n)} (1 - (\Delta t^2 \omega^2)/4) - \Delta t \omega q_i^{(n)}) / (1 + (\Delta t^2 \omega^2)/4)$$

$$q_i^{(n+1)} = (q_i^{(n)} (1 - (\Delta t^2 \omega^2)/4) + \Delta t \omega q_r^{(n)}) / (1 + (\Delta t^2 \omega^2)/4)$$

Para o esquema Leapfrog (2.32) têm-se:

$$q_r^{(n+1)} = (q_r^{(n-1)} + 2 \Delta t (-\omega q_i^{(n)}))$$

$$q_i^{(n+1)} = (q_i^{(n-1)} + 2 \Delta t (\omega q_r^{(n)}))$$