

---

Universidade Estadual de Campinas  
Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica  
Departamento de Matemática Aplicada

---

**Otimização numérica para a solução de modelos  
diferenciais com assimilação de dados no interior  
do domínio**

**Fedor Pisnitchenko\***

Doutorado em Matemática Aplicada - Campinas - SP

**Orientador:** Prof. Dr. José Mario Martínez

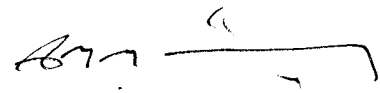
**Co-Orientadora:** Profa. Dra. Sandra Augusta Santos

\* Este trabalho teve apoio financeiro da FAPESP (processo 03-09938-0)

# Otimização numérica para a solução de modelos diferenciais com assimilação de dados no interior do domínio

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por **Fedor Pisnitchenko** e aprovada pela comissão julgadora.

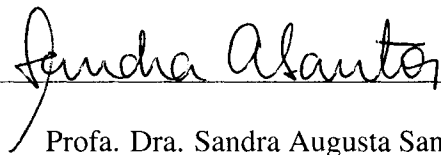
Campinas, 26 de Setembro de 2008.



---

Prof. Dr. José Mario Martínez

Orientador



---

Profa. Dra. Sandra Augusta Santos

Co-Orientadora

Banca Examinadora

Prof. Dr. José Mario Martínez (IMECC - UNICAMP)

Profa. Dra. Maria Cristina de Castro Cunha (IMECC - UNICAMP)

Prof. Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho (INPE)

Prof. Dr. Jin Yun Yuan (UFPR)

Prof. Dr. Ricardo Caetano Azevedo Biloti (IMECC - UNICAMP)

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Unicamp, para obtenção do Título de DOUTOR em Matemática Aplicada.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP  
Bibliotecária: Maria Júlia Milani Rodrigues – CRB8a 2116**

Pisnitchenko, Fedor

P675o Otimização numérica para a solução de modelos diferenciais com assimilação de dados no interior do domínio / Fedor Pisnitchenko -- Campinas, [S.P. :s.n.], 2008.

Orientadores : José Mario Martínez ; Sandra Augusta Santos

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Otimização. 2. Programação não-linear. 3. Análise numérica. 4. Equações diferenciais parciais. I. Martínez, José Mario. II. Santos, Sandra Augusta. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. IV. Título.

Título em inglês: Numerical optimization for solving differential models using inner domain data assimilation.

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Optimization. 2. Nonlinear programming. 3. Numerical analysis. 4. Partial differential equation.

Área de concentração: Otimização

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Prof. Dr. José Mario Martínez (IMECC-UNICAMP)

Profa. Dra. Maria Cristina de Castro Cunha (IMECC-UNICAMP)

Prof. Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho (INPE)

Prof. Dr. Jin Yun Yuan (UFPR)

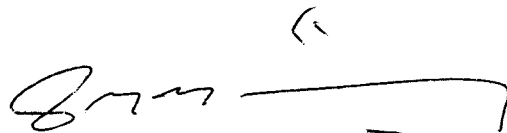
Prof. Dr. Ricardo Caetano Azevedo Biloti (IMECC-UNICAMP)

Data da defesa: 26/09/2008

Programa de pós-graduação: Doutorado em Matemática Aplicada

**Tese de Doutorado defendida em 26 de setembro de 2008 e aprovada**

**Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.**



---

**Prof. (a). Dr (a). JOSÉ MARIO MARTINEZ**



---

**Prof. (a). Dr (a). MARIA CRISTINA DE CASTRO CUNHA**



---

**Prof. (a). Dr (a). HAROLDO FRAGA DE CAMPOS VELHO**

---

**Prof. (a). Dr (a). JIN YUN YUAN**



---

**Prof. (a) Dr. (a) RICARDO CAETANO AZEVEDO BILOTI**

# Agradecimentos

Agradeço:

Ao professor Mário Martínez, pela orientação, idéias e questionamentos.

À professora Sandra Santos, pela co-orientação do trabalho, pela dedicação e pelas incontáveis vezes que me ajudou.

Ao meu pai, Igor Pisnitchenko, pela ajuda e colaboração no meu trabalho, e, acima de tudo, pelo apoio e incentivo.

Ao professor René Laprise, da Universidade de Montreal, pelas discussões construtivas, que ajudaram a entender melhor o problema.

Aos membros da banca, pelas sugestões e correções da tese.

Aos funcionários do IMECC, que sempre me ajudaram quando precisei.

À Momoe, pela ajuda, apoio e carinho.

Aos meus colegas, pela torcida.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

# Resumo

Em ciência e engenharia existe uma vasta classe de problemas que consistem em resolver um sistema de equações diferenciais parciais para encontrar as variáveis (como velocidade, temperatura, deslocamento, etc), dada a informação de decisão necessária (como domínio, condições iniciais e de contorno, etc). Entretanto, para os problemas reais são muito comuns situações em que a informação de decisão seja incompleta e contenha erros, e, por outro lado, exista alguma informação sobre as variáveis de estado, obtida de uma outra simulação ou de algum tipo de observação (dados observados).

Uma forma natural de resolver esse tipo de problema, utilizando toda a informação de decisão, é interpretá-lo como um problema de otimização. Ou seja, minimizar alguma função objetivo escolhida como a distância entre os dados observados e as variáveis de estado, sujeito à discretização do sistema.

Neste trabalho propomos um método Quase-Newton para resolver o problema EDP-restrito utilizando como modelos a equação unidimensional de Rossby-Obukhov e a equação de Korteweg-de Vries. Um aspecto muito importante do método é não ter restrição de estabilidade para escolha dos passos na discretização das equações diferenciais. Um outro é poder utilizar passos maiores, em comparação com os métodos tradicionais evolutivos como diferenças finitas.

Foi realizado um grande número de testes computacionais. Os resultados obtidos foram muito promissores, mostrando a robustez do método e a possibilidade de resolver problemas de grande porte.

# Abstract

In science and engineering there is a wide class of problems that consist in solving a system of partial differential equations to find variables (such as velocity, temperature, displacement, etc.), given the necessary decision information (such as domain, initial and boundary conditions, etc.). However, it is very common for real problems that the decision information is incomplete and contains errors. On the other hand, there is some additional information about state variables, which come from other simulation or some kind of observations (observed data).

A natural way to solve this kind of problem, using all the decision information, is to interpret it as an optimization problem. That is, minimize an objective function chosen such as distance between the observed data and the state variables, subject to the system discretization.

In this work, we propose a Quasi-Newton method to solve the PDE-constrained problem using as models the unidimensional Rossby-Obukhov and Korteweg-de Vries equations. A very important aspect of the method is that there is no stability restriction for the stepsize in the differential equations discretization. Another aspect is to be able to use stepsizes larger than the ones used in traditional evolutive methods such as finite differences.

A large number of computational test was performed. The results were promising and showed the robustness of the method and its ability to solve large scale problems.

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>iv</b>
<b>Resumo</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Método de diferenças finitas</b>	<b>4</b>
2.1 Esquemas de diferenças finitas . . . . .	4
2.2 Convergência, consistência e estabilidade . . . . .	7
2.3 Análise de estabilidade . . . . .	12
2.4 Solução numérica . . . . .	16
<b>3 Modelos com dados no interior do domínio</b>	<b>21</b>
3.1 Modelos de previsão de tempo regionais e globais . . . . .	21
3.2 Formulação numérica do problema regional: abordagem tradicional . . . . .	23
3.3 Modelo experimental . . . . .	24
3.3.1 Equação de Rossby-Obukhov unidimensional . . . . .	25
3.3.2 Equação de Korteweg-de Vries . . . . .	27
<b>4 Abordagem usando otimização para resolução de modelos com dados no interior do domínio</b>	<b>29</b>
4.1 Formulação do problema de otimização . . . . .	30
4.2 Problema de modelagem regional e otimização . . . . .	33
4.2.1 Algoritmo . . . . .	35
4.3 Otimização e o critério de estabilidade . . . . .	38



<b>5</b>	<b>Discretização das equações de Rossby-Obukhov e de KdV</b>	<b>41</b>
5.1	Discretização da equação de Rossby-Obukhov unidimensional . . . . .	41
5.1.1	Esquema centrado no tempo e centrado no espaço . . . . .	42
5.1.2	Esquema atrasado no tempo e centrado no espaço . . . . .	46
5.1.3	Esquema Crank-Nicolson . . . . .	49
5.2	Discretização da equação de KdV . . . . .	53
5.2.1	Esquema explícito linear . . . . .	54
5.2.2	Esquema implícito linear . . . . .	54
5.2.3	Esquema implícito não-linear . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Solução numérica do modelo experimental: abordagem tradicional versus otimização</b>	<b>60</b>
6.1	Equação de Rossby-Obukhov . . . . .	60
6.1.1	Experimento 1 . . . . .	61
6.1.2	Experimento 2 . . . . .	66
6.2	Korteweg-de Vries . . . . .	70
6.2.1	Experimento 3 . . . . .	72
<b>7</b>	<b>Conclusões e considerações finais</b>	<b>81</b>
	<b>Referências</b>	<b>83</b>

# Lista de Figuras

2.1	Discretização do domínio por meio de uma malha uniforme. . . . .	5
2.2	Solução exata da equação de calor para $x \in [0, 1]$ e $0 \leq t \leq 3$ , com condição inicial $u(x, 0) = \text{sen}(\pi x)$ e condição de contorno $u(0, t) = u(1, t) = 0$ . . . . .	16
2.3	Solução numérica instável da equação de calor, usando esquema avançado no tempo e centrado no espaço, com $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ . . . . .	18
2.4	Solução numérica estável da equação de calor, usando esquema avançado no tempo e centrado no espaço, com $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 0.4$ . . . . .	19
2.5	Solução numérica instável da equação de calor, usando esquema centrado no tempo e centrado no espaço, com $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1.0$ . . . . .	20
2.6	Solução numérica instável da equação de calor, usando esquema centrado no tempo e centrado no espaço, com $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 0.1$ . . . . .	20
3.1	Gráfico da solução da equação de Rossby-Obukhov unidimensional no domínio $[0, L]$ para $t = 0$ . . . . .	26
3.2	Gráfico da solução da equação de KdV para $t = 0$ : sóliton com $\gamma = 2$ e $b = a$ (à esquerda); onda cnoidal com $\gamma = 2$ , $m = 0.995$ e $b = a$ (à direita). . . . .	27
4.1	Solução de $y'' = 0$ : problema de contorno (à esquerda) e interpolação por quadrados mínimos (à direita). . . . .	30
4.2	Solução analítica de $\epsilon x'' = -xx'$ , $\epsilon = 0.05$ com $x(0) = -1$ e $x(1)$ variando próximo de 1. . . . .	31
4.3	Solução de $\epsilon x'' = -xx'$ , $\epsilon = 0.05$ com $x(0) = -1$ e $x(1) = 1$ e dados perturbados. . . . .	32
4.4	Solução numérica de $\epsilon x'' = -xx'$ , $\epsilon = 0.05$ com contorno perturbado. . . . .	32
4.5	Solução, usando otimização, de $\epsilon x'' = -xx'$ , $\epsilon = 0.05$ com dados no interior do domínio. . . . .	34

4.6	Solução numérica da equação de calor usando otimização para esquema avançado no tempo e centrado no espaço. $\Delta x = 0.5$ , $a = 0.1$ . . . . .	38
4.7	Solução numérica da equação de calor, usando otimização para esquema centrado no tempo e centrado no espaço. $\Delta x = 0.5$ , $a = 0.1$ . . . . .	39
5.1	Solução numérica da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas com $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1$ ( $\Delta x = 60 \text{ km}$ e $\Delta t = 2000 \text{ s}$ ). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. . . . .	45
5.2	Instabilidade na solução numérica da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas provocada por uma pequena violação do critério de estabilidade $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1.003$ ( $\Delta x = 60 \text{ km}$ e $\Delta t = 2006 \text{ s}$ ). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. . . . .	46
5.3	Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas com $\Delta x = 60 \text{ km}$ fixo e com $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.9$ (primeiro gráfico), $0.7$ (segundo) e $0.5$ (terceiro). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. . . . .	47
5.4	Característica da equação de onda $v_t(x, t) + bv_{xx}(x, t) = 0$ e a aproximação da solução pelo esquema <i>upwind</i> em relação à escolha do critério $b \frac{\Delta t}{\Delta x}$ . . . . .	48
5.5	Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas com $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.5$ fixo e com $\Delta x = 40 \text{ km}$ (primeiro gráfico), $20 \text{ km}$ (segundo) e $10 \text{ km}$ (terceiro). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. . . . .	49
5.6	Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas com $\Delta x = 10 \text{ km}$ fixo e com $\Delta t = 100 \text{ s}$ (primeiro gráfico), $\Delta t = 50 \text{ s}$ (segundo) e $\Delta t = 10 \text{ s}$ (terceiro). Esquema atrasado no tempo e centrado no espaço. . . . .	50
5.7	Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas com $\Delta t = 400 \text{ s}$ fixo e com $\Delta x = 40 \text{ km}$ (primeiro gráfico), $\Delta x = 20 \text{ km}$ (segundo) e $\Delta x = 10 \text{ km}$ (terceiro). Esquema Crank-Nicolson. . . . .	52
5.8	Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante $t = 96$ horas com $\Delta x = 10 \text{ km}$ fixo e com $\Delta t = 800 \text{ s}$ (primeiro gráfico), $\Delta t = 400 \text{ s}$ (segundo) e $\Delta t = 200 \text{ s}$ (terceiro). Esquema Crank-Nicolson. . . . .	53

5.9	Soluções numéricas da equação de KdV no instante $t = 0.5$ com $\Delta x = 0.05$ , $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ (acima) e $\Delta x = 0.02$ , $\Delta t = 3.1 \times 10^{-6}$ (abaixo). Esquema explícito linear. . . . .	56
5.10	Soluções numéricas da equação de KdV no instante $t = 0.5$ com $\Delta t = 10^{-5}$ e $\Delta x = 0.05$ (acima), $\Delta x = 0.02$ (abaixo). Esquema implícito linear. . . . .	57
5.11	Soluções numéricas da equação de KdV no instante $t = 0.5$ com $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ e $\Delta x = 0.05$ (acima), $\Delta x = 0.02$ (abaixo). Esquema implícito não-linear. . . . .	58
6.1	EXPERIMENTO 1. Dados globais para a equação de Rossby-Obukhov em $t = 0$ .	61
6.2	EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha: $\Delta x = 10 \text{ km}$ , $\Delta t = 333 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro). Tempo de CPU=0.13 s. . . . .	62
6.3	EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema Crank-Nicolson. Malha: $\Delta x = 10 \text{ km}$ , $\Delta t = 200 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro). Tempo de CPU=0.44 s. . . . .	63
6.4	EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM DE OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha: $\Delta x = 100 \text{ km}$ , $\Delta t = 3600 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro). Tempo de CPU=0.63 s. . . . .	64
6.5	EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema Crank-Nicolson. Malha: $\Delta x = 50 \text{ km}$ , $\Delta t = 1800 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro). Tempo de CPU=2.9 s. . . . .	65
6.6	EXPERIMENTO 2. Dados globais para a equação de Rossby-Obukhov em $t = 0$ .	67
6.7	EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha: $\Delta x = 10 \text{ km}$ , $\Delta t = 333 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro). Tempo de CPU=0.14 s. . . . .	68
6.8	EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema Crank-Nicolson. Malha: $\Delta x = 10 \text{ km}$ , $\Delta t = 200 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro). Tempo de CPU=0.48 s. . . . .	69

6.9	EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha: $\Delta x = 100 \text{ km}$ , $\Delta t = 3600 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 96$ horas, considerando apenas os dados globais. Tempo de CPU=0.64 s. . . . .	70
6.10	EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha: $\Delta x = 70 \text{ km}$ , $\Delta t = 2333 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro), considerando os dados globais e o contorno. Tempo de CPU=1.91 s. . . . .	71
6.11	EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema Crank-Nicolson. Malha: $\Delta x = 50 \text{ km}$ , $\Delta t = 1800 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro), considerando os dados globais e o contorno. Tempo de CPU=2.86 s. . . . .	72
6.12	EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha: $\Delta x = 70 \text{ km}$ , $\Delta t = 2333 \text{ s}$ . Solução no tempo $t = 24$ horas (primeiro gráfico), $t = 48$ horas (segundo) e $t = 96$ horas (terceiro), considerando apenas o contorno. Tempo de CPU=1.71 s. . . . .	73
6.13	EXPERIMENTO 3. Dados globais para equação de KdV. Onda cnoidal. . . . .	74
6.14	EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM TRADICIONAL. Onda cnoidal. Esquema implícito linear. Malha: $\Delta x = 0.02$ , $\Delta t = 0.0002$ . Solução no tempo $t = 0.1$ (primeiro gráfico), $t = 0.5$ (segundo) e $t = 5$ (terceiro). Tempo de CPU=74.9 s. . . . .	75
6.15	EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Onda cnoidal. Esquema implícito não-linear. Malha: $\Delta x = 0.2$ , $\Delta t = 0.005$ . Solução no tempo $t = 1$ (primeiro gráfico), $t = 3$ (segundo) e $t = 5$ (terceiro). Tempo de CPU=15.0 s. . . . .	76
6.16	EXPERIMENTO 3.. Dados globais para equação de KdV. Sóliton. . . . .	77
6.17	EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM TRADICIONAL. Sóliton. Esquema implícito linear. Malha: $\Delta x = 0.02$ , $\Delta t = 0.0002$ . Solução no tempo $t = 0.1$ (primeiro gráfico), $t = 0.3$ (segundo) e $t = 0.5$ (terceiro). Tempo de CPU=19.1 s. . . . .	78
6.18	EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Sóliton. Esquema implícito não-linear. Malha: $\Delta x = 0.2$ , $\Delta t = 0.0025$ . Solução no tempo $t = 0.1$ (primeiro gráfico), $t = 0.3$ (segundo) e $t = 0.5$ (terceiro). Tempo de CPU=14.9 s. . . . .	79

# Capítulo 1

## Introdução

Resolver um modelo de simulação de fenômenos físicos, em geral, consiste em resolver um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) para encontrar as *variáveis de estado* (como velocidade, temperatura, deslocamento, etc), dada a informação de decisão necessária (como domínio, coeficientes, condições iniciais e de contorno, etc). Entretanto, para os problemas reais são muito comuns situações em que a informação de decisão seja incompleta e contenha erros, e, por outro lado, exista alguma informação sobre as variáveis de estado, obtida de um outro modelo ou de algum tipo de observação.

É o caso dos modelos numéricos utilizados para previsão de tempo e de clima, nos quais, os chamados modelos regionais são resolvidos numericamente utilizando as condições iniciais e de contorno inexatas. Como consequência, a solução do modelo acumula o erro relacionado com a imprecisão da informação de decisão. Porém, existe uma informação adicional, obtida por um outro modelo (global), que não é utilizada por completo. Na prática, as condições de contorno são obtidas interpolando linearmente a solução do modelo global apenas na fronteira, desconsiderando informação presente no interior do domínio regional. Com isso, mesmo tendo dados iniciais de boa qualidade, o impacto do erro causado pela imprecisão do modelo global na condição de contorno pode se tornar significativo, como é mostrado nos trabalhos [8] e [9].

Neste trabalho propomos um método de otimização cujo objetivo é resolver o modelo com a informação sobre o seu comportamento no interior do domínio. A principal contribuição da nossa pesquisa é observar e mostrar por meio de experimentos numéricos que, na nossa formulação, a discretização da equação diferencial não precisa obedecer o critério de estabilidade. Em função disso a dimensão do problema numérico com formulação por otimização é drasticamente menor que a formulação tradicional, mantendo a mesma precisão na solução.

Dentro da problemática geral da previsão de tempo destaca-se um problema muito importante, chamado de assimilação de dados – procedimento utilizado para preparar a condição inicial do modelo, – no qual o uso de algoritmos de otimização tem sido considerado por muitos autores. Métodos modernos de abordagem por otimização são discutidos no survey de Rabier [33].

Um dos principais e fundamentais artigos em que aparece a aplicação da teoria de otimização para assimilação de dados, e que apresentou alguns algoritmos para a realização desse método, é o artigo de Le Dimet e Talagrand [20], que se baseia na idéia de formulação do problema contínuo usando métodos variacionais apresentada por Sasaki ([35, 36]).

A idéia geral da abordagem por otimização é sempre encontrar a solução de um dado modelo que é mais próxima aos dados observados. Em [20], os autores discutem, dentre outros métodos, o uso da metodologia do Lagrangiano Aumentado para resolver o problema de minimização associado. Através de métodos de Lagrangiano Aumentado, o problema original é resolvido como uma sequência de problemas de otimização irrestritos, em que a função objetivo inclui informação sobre as restrições. Essa abordagem é muito adequada para otimização, em geral, para problemas de grande escala em que a informação da Jacobiana é mal estruturada e, portanto, as técnicas de esparsidade para resolução de sistemas lineares são difíceis de serem empregadas. A principal desvantagem do método de Lagrangiano Aumentado é que a velocidade final de convergência costuma ser fraca, apesar de técnicas de aceleração terem sido recentemente introduzidas [5, 11]. Entretanto, técnicas de aceleração são baseadas considerando diretamente as condições de otimalidade do sistema e podem ser usadas em casos em que a esparsidade pode ser aproveitada. Em muitos problemas de otimização, o sistema não-linear proveniente das condições KKT é bem estruturado e a aplicação dos métodos de Newton e Quase-Newton para sua resolução se torna bastante vantajosa [27].

No artigo de Le Dimet e Talagrand, uma diferente abordagem por otimização irrestrita é introduzida, que pode ser formulada como encontrar as condições inicial e de contorno que fazem com que a solução do modelo do EDP seja a mais próxima dos dados observados. Dessa maneira, a função objetivo do problema tem apenas as condições inicial e de contorno como variáveis independentes, sendo portanto a dimensão do domínio muito menor. Efetivamente essa é a abordagem utilizada hoje em dia em técnicas de assimilação de dados chamadas 4D-Var ([23, 24, 25, 33, 41, 42]). Porém, computar a função objetivo envolve a solução do sistema

de EDPs e as derivadas com respeito as variáveis independentes são, na maioria dos casos, necessárias para sua minimização. Felizmente, a técnica baseada no Sistema Adjunto ([10, 12, 15, 41]), que envolve a resolução da forma linearizada do modelo após computar as variáveis de estado, pode ser usada para computar o gradiente. Essa técnica é muito utilizada em problemas de controle e é, geralmente, eficiente. Além disso, inspirou o chamado Modo Reverso para diferenciação automática de funções em geral, atualmente usadas em pacotes de Diferenciação Automática (AD) ([4, 14]). Em seu survey, Le Dimet e Talagrand mencionaram a possibilidade de introdução de imprecisão devido as diferenças entre a forma contínua e a discretizada do modelo, e que essa imprecisão pode ser removida usando técnicas Adjuntas diretamente na discretização do modelo, como fazem os pacotes AD. No nosso contexto, a desvantagem dessa técnica está na necessidade de resolver o modelo completamente para cada avaliação de função objetivo, dadas as condições inicial e de contorno, o que, além de ser computacionalmente caro, requer uma técnica EDP que seja estável.

A nossa proposta, aplicada no contexto de assimilação de dados na meteorologia (ver [32]), possibilita encontrar a solução ótima do modelo em relação aos dados observados com a velocidade compatível com uma única evolução direta do modelo.

No Capítulo 2 descrevemos o método de diferenças finitas para resolução de EDPs e introduzimos os critérios de consistência, convergência e a estabilidade, e como é condicionada a escolha de passos para um esquema em relação as suas propriedades de estabilidade. Exibimos alguns exemplos usando a equação de calor para melhor entender o conceito de estabilidade.

No Capítulo 3 explicamos o problema matemático de modelagem regional, como ele surge em previsão de tempo e formulamos um modelo experimental simples que será utilizado para testar a nossa proposta.

A técnica de otimização para resolver os modelos diferenciais é introduzida no Capítulo 4, usando como referência a formulação do modelo regional. Também é discutida a interpretação do critério de estabilidade na abordagem por otimização.

No Capítulo 5 discretizamos as equações de Rossby-Obukhov utilizadas no modelo experimental e no Capítulo 6 apresentamos experimentos para validar a nova formulação de resolução dos modelos. O texto é concluído com as conclusões e considerações finais no Capítulo 7.



# Capítulo 2

## Método de diferenças finitas

Neste capítulo é introduzido o método de diferenças finitas para resolução de equações diferenciais parciais. Primeiramente é mostrado como são construídos os esquemas usando as equações de diferenças. Em seguida, são definidos os conceitos de convergência, consistência e estabilidade. Por fim, são apresentados alguns exemplos numéricos, para ilustrar o comportamento da estabilidade na prática.

### 2.1 Esquemas de diferenças finitas

Para descrever o método de diferenças finitas consideremos a forma geral de uma EDP definida no plano  $(x, t)$ ,

$$\mathcal{L}v = f, \tag{2.1}$$

onde  $\mathcal{L}$  é um operador diferencial, que pode ser linear ou não-linear,  $v$  é a variável independente e  $f$  é o termo não homogêneo.

Começamos a discussão sobre os esquemas de diferenças finitas definindo a discretização do domínio, criando uma malha (consideraremos sempre a malha uniforme) no plano  $(x, t)$  como é mostrado na Figura 2.1. Para referência aos pontos na malha, denotamos  $x_n = n\Delta x$  e  $t_k = k\Delta t$ , para inteiros arbitrários  $n$  e  $k$ . Sobre a malha definimos a função discreta  $u$ , denotando por  $u_n^k$  o valor da função no ponto  $(x_n, t_k)$  como a aproximação para a função contínua  $v$  nos pontos respectivos da malha, ou seja,

$$u_n^k \approx v(x_n, t_k) = v_n^k. \tag{2.2}$$

Também usaremos a notação  $v_n^k$  para a função contínua  $v$ , calculada em  $(x_n, t_k)$ .

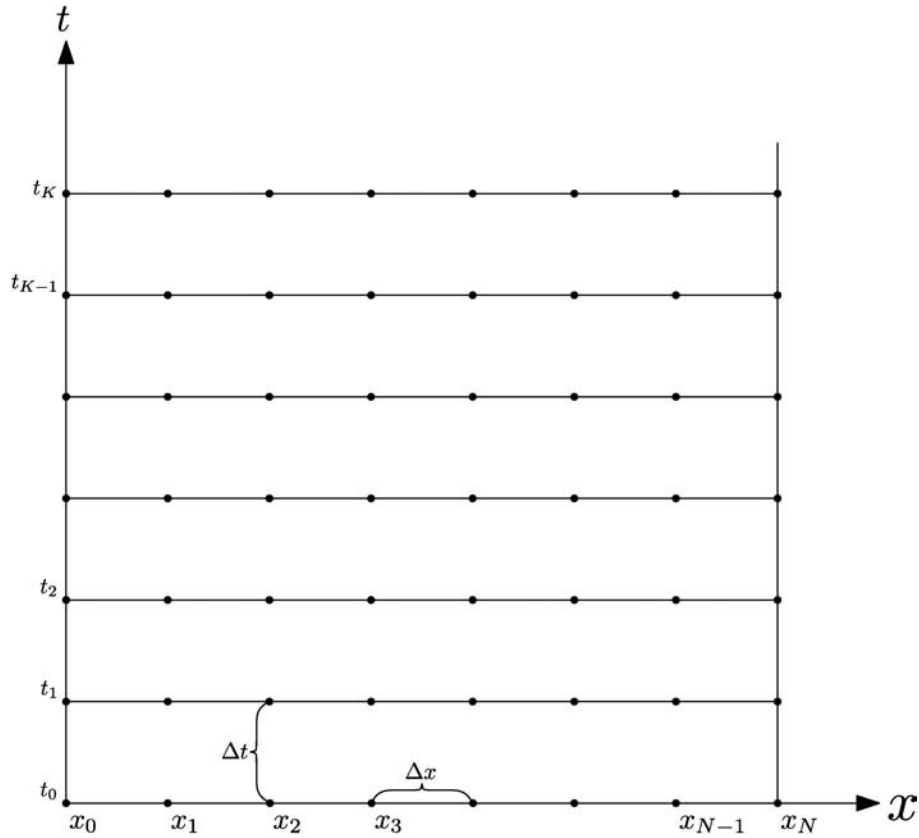


Figura 2.1: Discretização do domínio por meio de uma malha uniforme.

A idéia fundamental de esquemas de diferenças finitas consiste em aproximar a EDP na forma discreta, substituindo as derivadas por diferenças finitas. Antes vejamos como as derivadas podem ser aproximadas usando as relações de diferenças.

Para construir as relações de diferenças, observemos a expansão em série de Taylor de  $v(x_n, t_{k+1})$  em torno do ponto  $(x_n, t_k)$ :

$$v(x_n, t_{k+1}) = v(x_n, t_k) + \frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) \frac{\Delta t}{1!} + \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(x_n, \tau) \frac{\Delta t^2}{2!}, \quad \tau \in (t_k, t_{k+1}). \quad (2.3)$$

Rearranjando os termos, temos:

$$\frac{v(x_n, t_{k+1}) - v(x_n, t_k)}{\Delta t} = \frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) + \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(x_n, \tau), \quad \tau \in (t_k, t_{k+1}). \quad (2.4)$$

Portanto, temos que a derivada primeira no ponto  $(x_n, t_k)$  pode ser escrita em relação aos valores de  $v$  nos pontos da malha mais um termo de erro:

$$\frac{v(x_n, t_{k+1}) - v(x_n, t_k)}{\Delta t} = \frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta t), \quad (2.5)$$

onde  $\mathcal{O}$  é definido da seguinte forma: se  $f(x) = \mathcal{O}(x^p)$  para todo  $x \in S$ , então existe uma constante  $A$  tal que  $|f(x)| \leq A|x^p|$  para todo  $x \in S$ . O coeficiente  $p$  define a ordem de precisão do erro. A relação (2.5) é chamada de diferença *avançada* no tempo de ordem 1.

De modo semelhante, expandindo  $v(x_n, t_{k-1})$  em série de Taylor em torno do ponto  $(x_n, t_k)$

$$v(x_n, t_{k-1}) = v(x_n, t_k) - \frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) \frac{\Delta t}{1!} + \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(x_n, \tau) \frac{\Delta t^2}{2!}, \quad \tau \in (t_k, t_{k+1}). \quad (2.6)$$

obtemos a relação de diferença *atrasada* no tempo com erro de ordem 1:

$$\frac{v(x_n, t_k) - v(x_n, t_{k-1})}{\Delta t} = \frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta t), \quad (2.7)$$

E por fim, subtraindo (2.6) de (2.3), mas considerando também o termo de terceira ordem na expansão em ambos os casos, obtemos a diferença *centrada* no espaço de ordem 2

$$\frac{v(x_n, t_{k+1}) - v(x_n, t_{k-1})}{2\Delta t} = \frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (2.8)$$

Usando a série de Taylor podemos mostrar que são válidas as seguintes relações para derivadas espaciais:

$$\frac{v(x_{n+1}, t_k) - v(x_n, t_k)}{\Delta x} = \frac{\partial v}{\partial x}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (2.9)$$

$$\frac{v(x_n, t_k) - v(x_{n-1}, t_k)}{\Delta x} = \frac{\partial v}{\partial x}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (2.10)$$

$$\frac{v(x_{n+1}, t_k) - v(x_{n-1}, t_k)}{2\Delta x} = \frac{\partial v}{\partial x}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (2.11)$$

$$\frac{v(x_{n+1}, t_k) - 2v(x_n, t_k) + v(x_{n-1}, t_k)}{\Delta x^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (2.12)$$

$$\frac{v(x_{n+2}, t_k) - 2v(x_{n+1}, t_k) + 2v(x_{n-1}, t_k) - v(x_{n-2}, t_k)}{2\Delta x^3} = \frac{\partial^3 v}{\partial x^3}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.13)$$

A *aproximação de derivada por diferenças finitas* é obtida substituindo  $v(x_n, t_k)$  por sua aproximação  $u_n^k$  discreta na relação de diferenças e eliminando o termo de erro  $\mathcal{O}$ . A precisão da aproximação é dada pela ordem de erro.

Na Tabela 2.1 estão expostas as aproximações obtidas das relações de diferenças (2.5), (2.7)-(2.13).

Através da discretização do domínio e da utilização das relações de diferenças, podemos construir um esquema numérico para aproximar a solução de uma EDP. Denotamos o esquema de diferenças finitas relacionado com (2.1) como

$$L_{\Delta x, \Delta t} u = G_{\Delta x, \Delta t} f, \quad (2.14)$$

onde  $L_{\Delta x, \Delta t}$  é o operador de diferenças e  $G_{\Delta x, \Delta t} f$  é a aproximação de  $f$  nos pontos da malha.

Tabela 2.1: Aproximações de derivadas por diferenças finitas.

Aproximação	Erro	Tipo
$\frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) \approx \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\Delta t}$	$\mathcal{O}(\Delta t)$	avançada
$\frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) \approx \frac{u_n^k - u_n^{k-1}}{\Delta t}$	$\mathcal{O}(\Delta t)$	atrasada
$\frac{\partial v}{\partial t}(x_n, t_k) \approx \frac{u_n^{k+1} - u_n^{k-1}}{2\Delta t}$	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	centrada
$\frac{\partial v}{\partial x}(x_n, t_k) \approx \frac{u_{n+1}^k - u_n^k}{\Delta x}$	$\mathcal{O}(\Delta x)$	avançada
$\frac{\partial v}{\partial x}(x_n, t_k) \approx \frac{u_n^k - u_{n-1}^k}{\Delta x}$	$\mathcal{O}(\Delta x)$	atrasada
$\frac{\partial v}{\partial x}(x_n, t_k) \approx \frac{u_{n+1}^k - u_{n-1}^k}{2\Delta x}$	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	centrada
$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x_n, t_k) \approx \frac{u_{n+1}^k - 2u_n^k + u_{n-1}^k}{\Delta x^2}$	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	centrada
$\frac{\partial^3 v}{\partial x^3}(x_n, t_k) \approx \frac{u_{n+2}^k - 2u_{n+1}^k + 2u_{n-1}^k - u_{n-2}^k}{2\Delta x^3}$	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	centrada

## 2.2 Convergência, consistência e estabilidade

O método de diferenças finitas é uma forma de obter soluções aproximadas para equações diferenciais. Entretanto, o que é realmente necessário é que a solução do esquema de diferenças finitas possa aproximar a solução da equação diferencial com qualquer precisão desejável, ou seja, há necessidade de definir um tipo de *convergência* da solução de esquema de diferenças finitas para a solução de equação diferencial. A definição formal da propriedade de convergência é dada a seguir.

**Definição 2.1.** Dizemos que o esquema numérico  $L_{\Delta x, \Delta t} u = G_{\Delta x, \Delta t} f$  que aproxima a equação diferencial  $\mathcal{L}v = f$  é convergente, se  $u_n^k$  converge para  $v(x, t)$  quando  $(n\Delta x, k\Delta t) \rightarrow (x, t)$  com  $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ .

Antes de prosseguir vamos mostrar um exemplo de convergência de um esquema numérico

para a equação de calor

$$v_t - av_{xx} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (2.15)$$

**Exemplo 2.1.** Consideremos o esquema avançado no tempo e centrado no espaço para a equação de calor (2.15)

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\Delta t} - a \frac{u_{n+1}^k - 2u_n^k + u_{n-1}^k}{\Delta x^2} = 0. \quad (2.16)$$

Queremos mostrar que o esquema, com condição inicial apropriada, é convergente aplicando a definição 2.1.

Seja  $v = v(x, t)$  a solução exata da equação (2.15). Expandindo a função  $v$  em série de Taylor em  $t$  e em  $x$  em torno do ponto  $(x_n, t_k)$  obtemos

$$\begin{aligned} v_n^{k+1} &= v(x_n, t_k) + \Delta t v_t(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \\ v_{n\pm 1}^k &= v(x_n, t_k) \pm \Delta x v_x(x_n, t_k) + \frac{1}{2} \Delta x^2 v_{xx}(x_n, t_k) \pm \frac{1}{3!} \Delta x^3 v_{xxx}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x^4). \end{aligned}$$

Inserindo os valores de  $v$  no esquema (2.16),

$$\frac{v_n^{k+1} - v_n^k}{\Delta t} - a \frac{v_{n+1}^k - 2v_n^k + v_{n-1}^k}{\Delta x^2} = \underbrace{v_t(x_n, t_k) - av_{xx}(x_n, t_k)}_{=0} + \mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2),$$

e isolando  $v_n^{k+1}$  no lado esquerdo, vemos que  $v_n^k = v(x_n, t_k)$  satisfaz

$$v_n^{k+1} = \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) v_n^k + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (v_{n+1}^k + v_{n-1}^k) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2). \quad (2.17)$$

Denotando

$$z_n^k = u_n^k - v(x_n, t_k), \quad (2.18)$$

e subtraindo  $u_n^{k+1}$  de  $v_n^{k+1}$ , usando (2.16) e (2.17), obtemos

$$z_n^{k+1} = \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) z_n^k + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (z_{n+1}^k + z_{n-1}^k) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2). \quad (2.19)$$

Se  $0 < a\Delta t/\Delta x^2 \leq 1/2$ , os coeficientes do lado direito da equação (2.19) são não-negativos e

$$|z_n^{k+1}| \leq \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) |z_n^k| + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (|z_{n+1}^k| + |z_{n-1}^k|) + A(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2),$$

onde  $A$  é a constante associada com o termo  $\mathcal{O}$ . Definindo  $Z^k = \sup_n |z_n^k|$  e tomando o supremo sobre  $k$  dos dois lados da expressão temos

$$Z^{k+1} \leq Z^k + A(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2). \quad (2.20)$$

Aplicando (2.20) repetidamente obtemos

$$\begin{aligned}
Z^{k+1} &\leq Z^k + A(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2) \\
&\leq Z^{k-1} + 2A(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2) \\
&\vdots \\
&\leq Z^0 + (k+1)A(\Delta t^2 + \Delta t \Delta x^2).
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Assim como, por hipótese, a condição inicial é apropriada, temos que  $Z^0 = 0$  e  $|u_n^{k+1} - v(x_{n+1}, t_k)| \leq Z^{k+1}$ . Finalmente, se  $(x_n, t_{k+1}) \rightarrow (x, t)$  então

$$|u_n^{k+1} - v(x_{n+1}, t_k)| \leq \underbrace{(k+1)\Delta t}_{=t_{k+1} \rightarrow t} A(\Delta t + \Delta x^2) \rightarrow 0, \quad \text{quando } \Delta x, \Delta t \rightarrow 0. \tag{2.22}$$

Como podemos ver, para todo  $x$  e  $t$  no domínio da equação, quando  $(x_n, t_k) \rightarrow (x, t)$  com  $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ , tem-se que  $u_n^k$  converge para  $v(x, t)$ . Portanto, o esquema avançado no tempo e centrado no espaço (2.16) é convergente.

É importante observar que, durante a demonstração, assumimos que  $0 < a\Delta t/\Delta x^2 \leq 1/2$ . Dessa forma, na demonstração, a convergência está condicionada ao passo no tempo satisfazer o critério  $\Delta t \leq \Delta x^2/2a$ .

A demonstração de convergência no exemplo 2.1 é relativamente simples, mas é um caso isolado. Em geral, a demonstração direta é uma tarefa não trivial. Como exemplo, podemos observar o esquema centrado no espaço e centrado no tempo (chamada também de *leapfrog*), da equação de calor,

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^{k-1}}{2\Delta t} - a \frac{u_{n+1}^k - 2u_n^k + u_{n-1}^k}{\Delta x^2} = 0. \tag{2.23}$$

Seguindo o mesmo raciocínio do exemplo 2.1 chegamos à expressão

$$z_n^{k+1} = 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (z_{n+1}^k - 2z_n^k + z_{n-1}^k) + z_n^{k-1} + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2). \tag{2.24}$$

A partir daqui, não é possível seguir o mesmo caminho do exemplo anterior, pois não temos como simplificar a expressão para obter algo do tipo (2.20). Se simplesmente aplicarmos o módulo e tomarmos o supremo sobre  $k$  nos dois lados da equação (2.19) obtém-se uma desigualdade de recorrência não homogênea

$$Z^{k+1} \leq 8a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} Z^k + Z^{k-1} + A(\Delta t^3 + \Delta t \Delta x^2), \tag{2.25}$$

cuja solução é bastante complexa. Além disso, mesmo que a relação (2.25) seja resolvida, a convergência do esquema (2.23) não seria obtida, pois esse esquema é não convergente, como veremos mais à frente, no exemplo 2.3.

Como vimos, devido à sua complexidade, a definição de convergência por si só não é muito útil para analisar a convergência de um esquema numérico. No entanto, há dois conceitos relacionados que, em geral, são mais simples de serem verificados: *consistência* e *estabilidade*.

Definimos, primeiramente, o conceito de consistência.

**Definição 2.2.** Dizemos que o esquema  $L_{\Delta x, \Delta t} u = G_{\Delta x, \Delta t} f$  é consistente com a equação diferencial  $\mathcal{L}v = f$  no ponto  $(x, t)$ , se para qualquer função suave  $\phi = \phi(x, t)$

$$[(\mathcal{L}\phi - f) - (L_{\Delta x, \Delta t}\phi - G_{\Delta x, \Delta t}f)](x_n, t_k) \rightarrow 0,$$

quando  $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$  e  $(x_n, t_k) \rightarrow (x, t)$ .

Referimos ao valor  $[(\mathcal{L}\phi - f) - (L_{\Delta x, \Delta t}\phi - G_{\Delta x, \Delta t}f)](x_n, t_k)$  como *erro de truncamento* e dizemos que o esquema é de ordem  $p$  no espaço e de ordem  $q$  no tempo (ou, simplesmente, de ordem  $(p, q)$ ) se

$$[(\mathcal{L}\phi - f) - (L_{\Delta x, \Delta t}\phi - G_{\Delta x, \Delta t}f)](x_n, t_k) = \mathcal{O}(\Delta x^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q).$$

**Exemplo 2.2.** Analisaremos a consistência do esquema centrado no tempo e centrado no espaço (2.23) da equação de calor (2.15). O operador diferencial  $\mathcal{L}$ , da equação (2.15), é

$$\mathcal{L}\phi = \phi_t - a\phi_{xx}.$$

O operador de diferença  $L_{\Delta x, \Delta t}$  é dado por

$$L_{\Delta x, \Delta t}\phi = \frac{\phi_n^{k+1} - \phi_n^{k-1}}{2\Delta t} - a \frac{\phi_{n+1}^k - 2\phi_n^k + \phi_{n-1}^k}{\Delta x^2}.$$

Expandindo a função  $\phi$  em série de Taylor em  $t$  e em  $x$  em torno do ponto  $(x_n, t_k)$  temos

$$\phi_n^{k\pm 1} = \phi(x_n, t_k) \pm \Delta t \phi_t(x_n, t_k) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \phi_{tt}(x_n, t_k) \pm \frac{1}{3!} \Delta t^3 \phi_{ttt}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta t^4),$$

$$\begin{aligned} \phi_{n\pm 1}^k = \phi(x_n, t_k) &\pm \Delta x \phi_x(x_n, t_k) + \frac{1}{2} \Delta x^2 \phi_{xx}(x_n, t_k) \pm \frac{1}{3!} \Delta x^3 \phi_{xxx}(x_n, t_k) \\ &+ \frac{1}{4!} \Delta x^4 \phi_{xxxx}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta x^5). \end{aligned}$$

Substituindo as expressões no esquema obtemos

$$L_{\Delta x, \Delta t} \phi = \phi_t - a \phi_{xx} + \frac{1}{3!} \Delta t^2 \phi_{ttt} - \frac{1}{4!} a \Delta x^2 \phi_{xxxx} + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\Delta x^3).$$

Observando que o lado direito da equação de calor é igual a zero, concluímos que o esquema (2.23) é consistente com erro de truncamento  $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ , pois

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}\phi - L_{\Delta x, \Delta t}\phi)(x_n, t_k) &= \frac{1}{3!} \Delta t^2 \phi_{ttt}(x_n, t_k) - \frac{1}{4!} a \Delta x^2 \phi_{xxxx}(x_n, t_k) + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\Delta x^3) \\ &= \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \end{aligned}$$

Para introduzir o conceito de estabilidade observamos que se um esquema é convergente, ou seja, a aproximação discreta  $u$  converge para a solução analítica  $v$ , então  $u$  é limitado em algum sentido. Denotando

$$\mathbf{u}^k = (\dots, u_{-1}^k, u_0^k, u_1^k, \dots)^T,$$

introduzimos a seguinte definição de estabilidade.

**Definição 2.3.** Dizemos que o esquema numérico  $L_{\Delta x, \Delta t} u = 0$  é estável na norma  $\|\cdot\|$ , se existem  $\Delta x_0$  e  $\Delta t_0$  e um inteiro  $J \geq 0$  tais que para qualquer tempo  $T$  existe uma constante  $C_T$  satisfazendo

$$\|\mathbf{u}^k\| \leq C_T \sum_{j=0}^J \|\mathbf{u}^j\|, \quad (2.26)$$

para  $0 \leq k\Delta t \leq T$ ,  $0 < \Delta x \leq \Delta x_0$  e  $0 < \Delta t \leq \Delta t_0$ .

Podemos observar que a definição de estabilidade permite que a norma da solução aumente, mas esse aumento é limitado somente pelo tempo, ou seja, não depende da quantidade de passos no tempo.

Note que a definição de estabilidade 2.3 se refere ao esquema  $L_{\Delta x, \Delta t} u = 0$  do problema homogêneo  $\mathcal{L}v = 0$ . No entanto, pode ser facilmente mostrado que o esquema  $L_{\Delta x, \Delta t} u = G_{\Delta x, \Delta t} f$ , relacionado com o problema não homogêneo  $\mathcal{L}v = f$ , é estável se  $L_{\Delta x, \Delta t} u = 0$  é estável (ver Strikwerda [38]).

Para EDPs lineares, o resultado fundamental sobre a convergência é o Teorema de Equivalência de Lax.

**Teorema 2.1** (Teorema de Equivalência de Lax). *Um esquema de diferenças finitas consistente com uma equação diferencial parcial linear, para a qual o problema de valor inicial é bem posto, é convergente se, e somente se, é estável. (Ver [40])*



Para EDPs não-lineares o resultado de convergência, para casos mais restritos, é apresentado em vários trabalhos, como de Rosinger [34] e de López-Marcos e Sanz-Serna [26].

Outra forma de abordar a estabilidade não-linear é apresentada no livro de LeVeque [21]. Usando o conceito de *variação total*,

$$\text{TV}(\mathbf{u}^k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |u_{n+1}^k - u_n^k|, \quad (\text{variação total de } \mathbf{u}^k), \quad (2.27)$$

a estabilidade de variação total (*total variation stability*) é definida como limitação da variação total da solução discreta. A partir dessa definição é mostrada a convergência.

Em ambos os casos, linear e não-linear, a instabilidade pode ser tratada como o aumento não limitado do erro ao longo do tempo. Em geral, a instabilidade se manifesta como oscilações de alta frequência que crescem muito rapidamente a cada passo. Portanto, a estabilidade é crucial na elaboração dos esquemas de diferenças finitas.

## 2.3 Análise de estabilidade

Para EDPs lineares uma das formas de analisar a estabilidade é utilizar a análise de von Neumann que, através do uso da transformada de Fourier, fornece uma condição necessária e suficiente para estabilidade de um esquema de diferenças finitas.

Dado um vetor  $\mathbf{u} \in l_2$ , a transformada discreta de Fourier  $\hat{u}$  é definida unicamente como

$$\hat{u}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\xi} u_m, \quad (2.28)$$

onde  $\hat{u}$  é uma função de  $[-\pi, \pi]$  em  $\mathbb{R}$ . A transformada inversa é dada por

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{im\xi} \hat{u}(\xi) d\omega. \quad (2.29)$$

Um resultado importante relacionado com a transformada de Fourier é a Identidade de Parseval, que diz que a transformada de Fourier preserva a norma. Assim, se  $\mathbf{u} \in l_2$  e  $\hat{u}$  é transformada discreta de  $\mathbf{u}$  então

$$\|\hat{u}\|_2 = \|\mathbf{u}\|_2, \quad (2.30)$$

onde a primeira norma é norma em  $L_2$  e a segunda norma é em  $l_2$ .

Como exemplo, faremos a análise de estabilidade para os esquemas (2.16) e (2.23)

**Exemplo 2.3.** Consideremos o esquema avançado no tempo e centrado no espaço (2.16) reescrito da seguinte forma

$$u_n^{k+1} = a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{n-1}^k + \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) u_n^k + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{n+1}^k. \quad (2.31)$$

Tomando a transformada discreta de Fourier temos

$$\begin{aligned} \hat{u}^{k+1}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_n^{k+1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} \left( a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{n-1}^k + \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) u_n^k + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{n+1}^k \right) \\ &= a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_{n-1}^k + \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_n^k \\ &\quad + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_{n+1}^k \\ &= a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_{n-1}^k + \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) \hat{u}^k(\xi) \\ &\quad + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_{n+1}^k. \end{aligned}$$

Substituindo as variáveis  $m = n \pm 1$  nos somatórios da última expressão, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_{n\pm 1}^k &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i(m\mp 1)\xi} u_m^k \\ &= e^{\pm i\xi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\xi} u_m^k \\ &= e^{\pm i\xi} \hat{u}^k(\xi). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \hat{u}^{k+1}(\xi) &= a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} e^{-i\xi} \hat{u}^k(\xi) + \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) \hat{u}^k(\xi) + a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} e^{i\xi} \hat{u}^k(\xi) \\ &= \left[ a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (e^{-i\xi} + e^{i\xi}) + \left(1 - 2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) \right] \hat{u}^k(\xi) \\ &= \left(1 - 4a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \text{sen}^2 \frac{\xi}{2}\right) \hat{u}^k(\xi) \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$= g(\xi) \hat{u}^k(\xi), \quad (2.33)$$

onde

$$g(\xi) = 1 - 4a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \text{sen}^2 \frac{\xi}{2}. \quad (2.34)$$

A relação (2.33) mostra que avançar a solução um passo no tempo é equivalente a multiplicar a transformada de Fourier da solução pelo *fator de amplificação*  $g$ . Usando o resultado (2.33)  $k + 1$  vezes, chegamos à seguinte relação

$$\hat{u}^{k+1}(\xi) = g(\xi)^{k+1} \hat{u}^0(\xi). \quad (2.35)$$

Aplicando a norma e utilizando a Identidade Parseval nos dois lados da equação obtemos

$$\|\mathbf{u}^{k+1}\|_2 = |g(\xi)|^{k+1} \|\mathbf{u}^0\|_2. \quad (2.36)$$

Portanto, para que o esquema seja estável, a seguinte hipótese deve ser satisfeita

$$|g(\xi)| = \left| 1 - 4a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \text{sen}^2 \frac{\xi}{2} \right| \leq 1, \quad \forall \xi \in [-\pi, \pi],$$

ou

$$0 \leq 4a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \text{sen}^2 \frac{\xi}{2} \leq 2, \quad \forall \xi \in [-\pi, \pi].$$

Dado que

$$\max_{\xi \in [-\pi, \pi]} \text{sen}^2 \frac{\xi}{2} = 1,$$

temos a seguinte condição necessária e suficiente de estabilidade

$$0 \leq a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (2.37)$$

**Exemplo 2.4.** Consideremos agora o esquema centrado no tempo e centrado no espaço (2.23).

Reescrevendo na forma explícita

$$u_n^{k+1} = a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{n-1}^k - 2u_n^k + u_{n+1}^k) + u_n^{k-1} \quad (2.38)$$

e aplicando a transformada de Fourier, temos

$$\begin{aligned} \hat{u}^{k+1}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_n^{k+1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} \left( a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{n-1}^k - 2u_n^k + u_{n+1}^k) + u_n^{k-1} \right) \\ &= a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} (u_{n-1}^k - 2u_n^k + u_{n+1}^k) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\xi} u_n^{k-1} \\ &= a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (e^{-i\xi} - 2 + e^{i\xi}) \hat{u}^k(\xi) + \hat{u}^{k-1}(\xi). \end{aligned}$$

Logo,

$$\hat{u}^{k+1}(\xi) - a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (e^{-i\xi} - 2 + e^{i\xi}) \hat{u}^k(\xi) - \hat{u}^{k-1}(\xi) = 0, \quad (2.39)$$

que representa uma relação de recorrência de três termos em  $\hat{u}^k$ . Para resolvê-la, definimos  $\hat{u}^k = g^k$ , onde  $g^k$  é  $g$  na potência  $k$ . Então, após cancelar  $g^{k-1}$ , obtemos

$$g^2 - a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (e^{-i\xi} - 2 + e^{i\xi}) g - 1 = 0. \quad (2.40)$$

Como

$$e^{-i\xi} - 2 + e^{i\xi} = 2(\cos \xi - 1) = -4\text{sen}^2 \frac{\xi}{2},$$

as raízes da equação são dadas por

$$g_{\pm} = -2a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \text{sen}^2 \frac{\xi}{2} \pm \sqrt{4a^2 \frac{\Delta t^2}{\Delta x^4} \text{sen}^4 \frac{\xi}{2} + 1}. \quad (2.41)$$

Sendo  $g_+ \neq g_-$ , pois a expressão (2.41) é real, a solução para  $\hat{u}^{k+1}$  é dada por

$$\hat{u}^{k+1}(\xi) = A(\xi)g_+(\xi)^{k+1} + B(\xi)g_-(\xi)^{k+1}, \quad (2.42)$$

onde as funções  $A$  e  $B$  são determinadas pela condição inicial. Portanto, para que o esquema seja estável devemos ter

$$|g_{\pm}| \leq 1. \quad (2.43)$$

É fácil ver que isso implica em

$$a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 0, \quad (2.44)$$

ou seja, o esquema é instável para  $a \neq 0$ , e, pelo Teorema de Equivalência de Lax, não é convergente.

Os exemplos 2.2 e 2.4 mostram que no caso linear podemos, de forma relativamente simples, analisar a convergência do esquema de diferenças finitas usando os conceitos de consistência e estabilidade.

Para esquemas de diferenças finitas não-lineares a análise de von Neumann pode ser aplicada usando a forma localmente linearizada do esquema, pois o processo depende da linearidade. Outra condição de estabilidade bastante utilizada é garantir que a variação total (2.27) não aumente ao longo do tempo, ou seja,

$$TV(\mathbf{u}^{k+1}) \leq TV(\mathbf{u}^k). \quad (2.45)$$

Os métodos que satisfazem essa condição são chamados de TVD (*total variation diminishing*), ver Thomas [39], LeVeque [21] ou Laney [19].

## 2.4 Solução numérica

Nesta última seção resolveremos numericamente os dois esquemas para a equação de calor analisados na seção anterior para visualizar como se comporta na prática o conceito de estabilidade.

Consideremos o seguinte problema de valor inicial e de contorno para a equação de calor

$$\begin{aligned} v_t(x, t) - av_{xx}(x, t), \quad x \in (0, L), \quad t > 0, \\ v(x, 0) = \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad x \in [0, L], \\ v(0, t) = v(L, t) = 0, \quad t > 0. \end{aligned} \quad (2.46)$$

A solução exata para esse problema é

$$u(x, t) = \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-\frac{a\pi^2 t}{L^2}}, \quad (2.47)$$

cujo comportamento podemos visualizar na Figura 2.2.

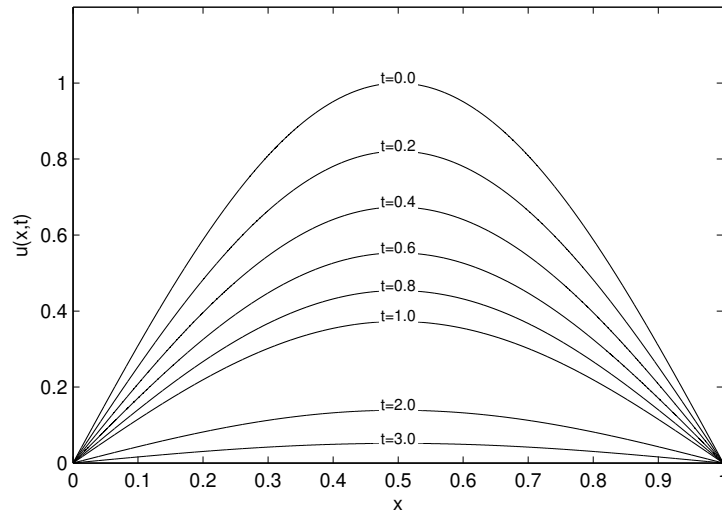


Figura 2.2: Solução exata da equação de calor para  $x \in [0, 1]$  e  $0 \leq t \leq 3$ , com condição inicial  $u(x, 0) = \text{sen}(\pi x)$  e condição de contorno  $u(0, t) = u(1, t) = 0$ .

### Esquema avançado no tempo e centrado no espaço

Seja  $\{x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1\}$  a discretização do intervalo  $[0, 1]$ . Usando o esquema avançado no tempo e centrado no espaço (2.16), a forma discretizada do problema (2.46) é dada por

$$\begin{aligned} u_n^{k+1} &= ru_{n-1}^k + (1 - 2r)u_n^k + ru_{n+1}^k, \quad n \in \{1, \dots, N-1\}, k \geq 0, \\ u_n^0 &= \text{sen}(\pi x_n), \quad n \in \{1, \dots, N-1\}, \\ u_0^k &= u_N^k = 0, \quad k > 0, \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde

$$r = a \frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \quad (2.49)$$

Definindo o vetor

$$\mathbf{u}^k = \begin{pmatrix} u_1^k \\ u_2^k \\ \vdots \\ u_{N-1}^k \end{pmatrix}, \quad k \geq 0, \quad (2.50)$$

o problema discreto (2.48) pode ser reescrito na forma matricial como

$$\mathbf{u}^{k+1} = P\mathbf{u}^k, \quad \forall k > 0, \quad (2.51)$$

com a matriz  $P$  dada por

$$P = \begin{pmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & & \\ & r & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & r \\ & & & r & 1-2r & r \\ 0 & \cdots & & r & 1-2r \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-1 \times N-1}. \quad (2.52)$$

No exemplo 2.3, mostramos que a condição de estabilidade para o esquema é  $r \leq 0.5$ . Tomando o coeficiente de condutividade  $a = 0.1$ , escolhemos  $\Delta x = 0.05$  e  $\Delta t = 0.025$  o que resulta em  $r = 1$ . Ou seja, a evolução do sistema (2.51) a partir de um certo momento deve começar a mostrar um comportamento instável. De fato, como pode ser visto na Figura 2.3, para  $t = 0.8$  a solução apresenta oscilações significativas.

Agora diminuiremos o passo no tempo  $\Delta t$  para 0.01, o que resulta em  $r = 0.4$ . Na Figura 2.4 podemos observar o comportamento estável da solução até tempo  $t = 3$ .

### Esquema centrado no tempo e centrado no espaço

O problema de valor inicial e de contorno discreto, usando o esquema centrado no tempo e

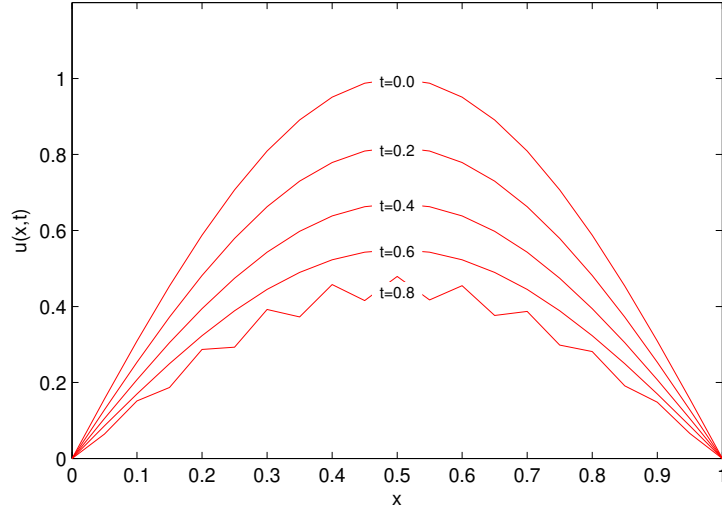


Figura 2.3: Solução numérica instável da equação de calor, usando esquema avançado no tempo e centrado no espaço, com  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ .

centrado no espaço, é dado por

$$\begin{aligned}
 u_n^{k+1} &= r(u_{n-1}^k - 2u_n^k + u_{n+1}^k) + u_n^{k-1}, & n \in \{1, \dots, N-1\}, k \geq 0, \\
 u_n^0 &= \text{sen}(\pi x_n), & n \in \{1, \dots, N-1\}, \\
 u_n^1 &= ru_{n-1}^0 + (1-2r)u_n^0 + ru_{n+1}^0, & n \in \{1, \dots, N-1\}, \\
 u_0^k &= u_N^k = 0, & k > 0.
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

Note que para o esquema de três passos precisamos dos dois primeiros níveis de tempo para resolver o problema. Nesse caso, utilizaremos o esquema anterior para calcular  $\hat{u}^1$ . O sistema linear correspondente é

$$\mathbf{u}^{k+1} = P\mathbf{u}^k + \mathbf{u}^{k-1}, \quad \forall k > 1, \tag{2.54}$$

onde a matriz  $P$  é dada por

$$P = \begin{pmatrix} -2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ r & -2r & r & & \\ & r & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & r \\ & & & r & -2r & r \\ 0 & \cdots & & r & -2r \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-1 \times N-1}. \tag{2.55}$$

A seguir apresentamos a evolução numérica do sistema (2.54) para  $r = 1$  e  $r = 0.1$ .

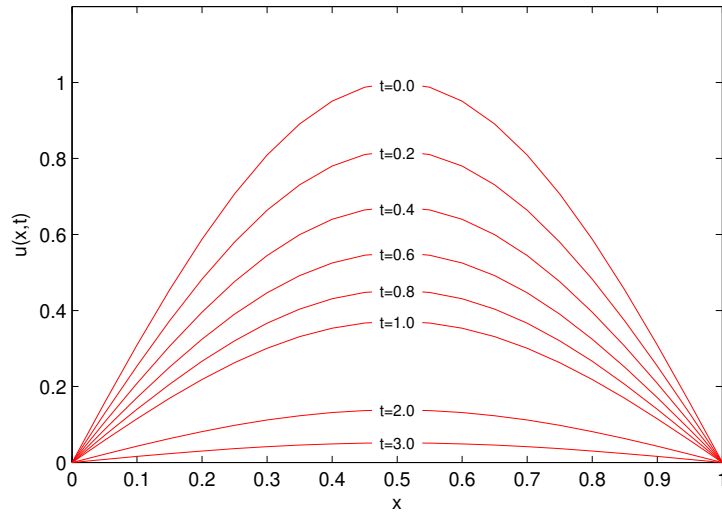


Figura 2.4: Solução numérica estável da equação de calor, usando esquema avançado no tempo e centrado no espaço, com  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 0.4$ .

Como podemos ver, a solução numérica mostrada nas Figuras 2.5 e 2.6 tem um comportamento instável a partir de um período relativamente curto do tempo, o que corresponde ao resultado apresentado no exemplo 2.4.

Os testes apresentados nesta seção mostram a importância da estabilidade na solução numérica das equações diferenciais. É um fator que condiciona a escolha de esquema e malha adequados. Inclusive, como pode ser observado ao longo desse capítulo, nem sempre o esquema de maior precisão (neste caso, o esquema centrado no tempo e centrado no espaço) é a melhor escolha, pois o critério de estabilidade não é satisfeito qualquer que seja a malha.



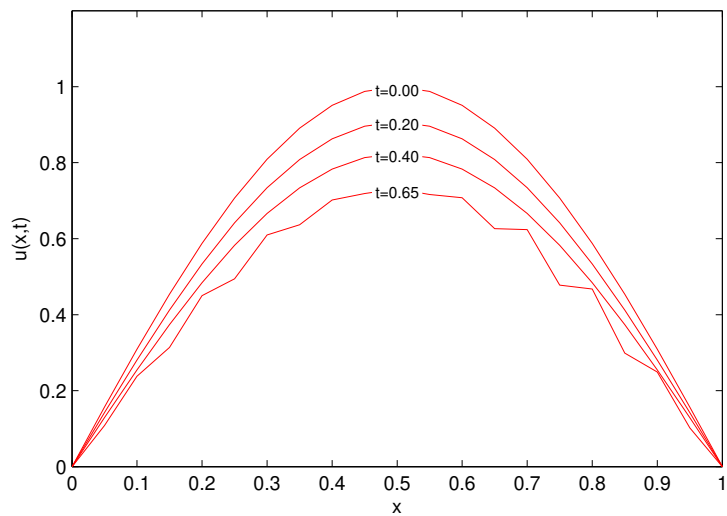


Figura 2.5: Solução numérica instável da equação de calor, usando esquema centrado no tempo e centrado no espaço, com  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1.0$ .

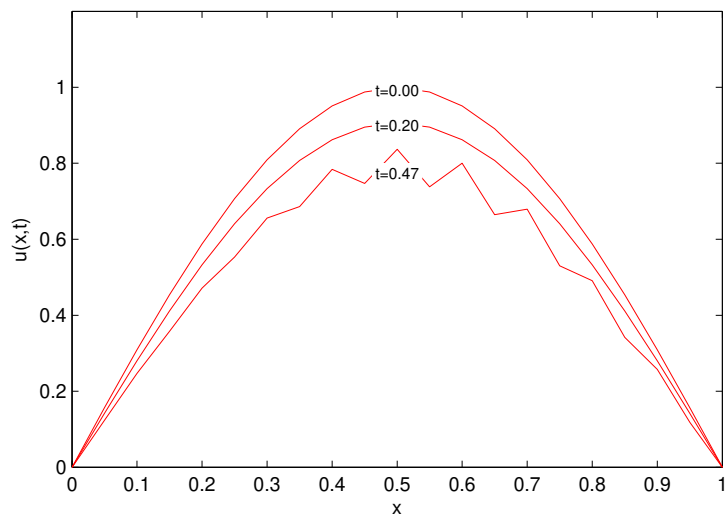


Figura 2.6: Solução numérica instável da equação de calor, usando esquema centrado no tempo e centrado no espaço, com  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 0.1$ .

# Capítulo 3

## Modelos com dados no interior do domínio

Neste capítulo, abordaremos sobre os modelos global e regional, como são construídos os modelos numéricos relacionados e qual é a problemática que surge no modelo regional. Em seguida, definiremos um modelo experimental, cujo objetivo é tentar simular o comportamento de um modelo regional, mas sendo bem simples do ponto de vista numérico.

### 3.1 Modelos de previsão de tempo regionais e globais

A previsão de tempo é um dos principais focos de estudo da meteorologia. O seu objetivo consiste em prever o estado da atmosfera para um tempo futuro. As previsões de tempo são feitas coletando-se dados sobre o estado atual da atmosfera (particularmente a temperatura, a pressão, a umidade e o vento) e, usando o conhecimento sobre os processos atmosféricos, determinando como a atmosfera evolui no futuro. Entretanto, a natureza não-linear da atmosfera e a compreensão incompleta dos processos implicam em que as previsões se tornam menos precisas à medida que o período da previsão aumenta.

Os modelos numéricos de previsão do tempo são simulações computacionais da atmosfera. Eles usam os dados coletados como ponto inicial e evoluem o estado da atmosfera para frente no tempo usando as equações da física e da dinâmica dos fluidos. As complexas equações que descrevem como muda o estado de um fluido com o tempo requerem supercomputadores para resolvê-las em um período de tempo aceitável.

Um modelo ideal, nos conceitos de hoje, seria o modelo com equações de Navier-Stokes no globo todo, com uma resolução alta e com uma descrição física o mais elaborada possível. Apesar de ser perfeitamente possível construir tal modelo na teoria, na prática ele teria pouca

utilidade, pois o tempo computacional necessário para resolvê-lo, mesmo utilizando supercomputadores modernos, seria bem maior que o tempo para o qual o modelo faria a previsão. É por esta razão que atualmente existem diferentes modelos com diferentes propósitos.

Há dois tipos de modelos de previsão de tempo que podem ser destacados: modelo global com uma descrição física mais simples e baixa resolução e modelo regional de mesoescala com uma descrição física mais complexa e alta resolução. O modelo global abrange o globo todo, mas descreve apenas a evolução dos processos lentos, com mais de 3 horas, e de escala grande, acima de 60 km. O modelo regional, por sua vez, compreende apenas uma região fechada com tamanho menor que a hemisfera e é utilizado para descrever a evolução dos processos mais rápidos (pequenos ciclones, tempestades, etc.), com menos de 3 horas, e escalas mesometeorológicas, entre 500 metros e 60 km. Como consequência das propriedades físicas e da resolução (o que computacionalmente implica no tamanho da malha) o custo computacional do modelo global é bem pequeno em relação ao modelo regional.

Os dois modelos são descritos por um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares. Para resolver o sistema que representa o modelo global precisamos apenas de condição inicial e de condições de contorno em cima e na superfície da Terra, pois o domínio é uma esfera. Por outro lado, para obter a solução do modelo regional precisamos também de condições de contorno laterais, pois o domínio, nesse caso, é uma região fechada. Na prática, as condições de contorno laterais para o modelo regional são obtidas do modelo global. Primeiro se obtém a solução nos pontos do modelo global perto da fronteira do modelo regional e, em seguida, faz-se a interpolação desses pontos na malha regional.

As condições de contorno do problema regional obtidas do modelo global não representam as estruturas de escala menor que o tamanho da rede do modelo global. De fato, o modelo global não identifica um fenômeno meteorológico local de raio menor que 30 quilômetros, pois o passo espacial é maior que o próprio fenômeno. Por outro lado, as partes dos espectros temporais e espaciais da solução regional que correspondem às estruturas maiores e os períodos temporais mais longos são piores que as do modelo global. Isso se deve ao fato de que o modelo regional não possui a informação sobre os fenômenos que ocorrem fora do seu domínio e por isso não consegue descrever bem as consequências desses fenômenos mesmo dentro do seu domínio.

Por exemplo, a oscilação da temperatura do mar perto da costa do Peru causa os fenômenos chamados El Niño e La Niña, que afetam significativamente as mudanças climáticas no Brasil.

Porém, o modelo regional do Brasil, que não contém no seu domínio a costa do Peru, não consegue reproduzir com confiabilidade a distinção entre El Niño e La Niña. A razão dessa inconsistência é a resolução grosseira do contorno do modelo regional no espaço e no tempo. Matematicamente, isto significa que a solução do problema de valor inicial e de contorno que representa o modelo regional é sensível aos erros no contorno [8, 9].

No entanto, existem dados da solução global que estão dentro do domínio do modelo regional e que não são aproveitados. Ou seja, existem dados que contêm informação adicional sobre os processos de tamanho planetário que não são usados pela abordagem tradicional de integração do modelo.

Introduzimos a seguir o problema discreto na forma como é formulado para previsão de tempo regional.

### **3.2 Formulação numérica do problema regional: abordagem tradicional**

Para poder resolver o modelo regional é necessário definir, além da condição inicial, a condição de contorno na fronteira do seu domínio para todo o período de tempo para o qual a previsão será realizada. Como já comentamos na seção anterior, os dados para o contorno são obtidos a partir do modelo global, cuja solução exata não conhecemos. Podemos, no entanto, obter a solução aproximada da sua formulação discreta:

$$\begin{aligned}\Delta_t\{\Psi\} &= F_d, \\ \Psi(x, 0) &= Y_{global}(x),\end{aligned}\tag{3.1}$$

onde  $\Delta_t$  é o operador discreto de evolução do modelo global,  $\Psi$  é vetor das funções prognósticas,  $F_d$  são forças externas discretas e  $Y_{global}$  é a condição inicial.

Supõe-se que a solução numérica de (3.1), dada por  $\Psi_{sol}$ , é suficientemente próxima à solução do modelo hipotético ideal que descreve exatamente os processos atmosféricos reais de grande escala.

A representação discreta do modelo regional, definido numa área fechada com fronteira  $S$ ,

pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\delta_t\{G\} &= F_{rd}, \\ G(x, 0) &= Y_{local}(x), \\ G(x, t) |_{x \in S} &= G_s(x, t),\end{aligned}\tag{3.2}$$

onde  $\delta_t$  é o operador discreto de evolução do modelo regional,  $G$  é o vetor das funções prognósticas,  $F_{rd}$  são forças externas discretas,  $Y_{local}$  é a condição inicial e  $G_s$  é a condição de contorno.

A abordagem tradicional para resolver (3.2) consiste em obter a condição de contorno  $G_s$  interpolando os dados necessários da solução global  $\Psi_{sol}$  na malha regional e, em seguida, aplicar um método numérico para resolver EDPs.

### 3.3 Modelo experimental

Os modelos reais de previsão de tempo e climáticos são sistemas de EDPs complexos em relação ao espaço tridimensional. A malha espacial para um modelo regional pode conter da ordem de  $400 \times 400 \times 100 = 16 * 10^6$  pontos e o número de passos no tempo, para uma previsão de 4 dias, é da ordem de  $4 * 10^3$ . Obviamente, esses valores variam de um modelo para outro, pois dependem de muitos fatores (método numérico para resolução de EDPs, tipo da malha, tipo de esquema de discretização, etc.). Apresentamos aqui os valores apenas como referência para ilustrar o tamanho de um problema real.

A intenção deste trabalho é abordar o problema discreto de previsão de tempo (3.2) ou qualquer outro problema com essas características, como um problema inverso e utilizar as ferramentas de otimização para resolvê-lo. O nosso objetivo é desenvolver um algoritmo eficiente e estudar o seu comportamento. Para esse fim usaremos um modelo experimental que simula as características dos modelos regionais reais, porém com uma descrição física simples e com dimensão numérica pequena. A seguir caracterizamos o modelo detalhadamente:

**Física:** o modelo é descrito apenas por uma equação unidimensional cuja solução analítica é conhecida.

**Discretização:** adotamos o método de diferenças finitas, que é frequentemente utilizado nos modelos atuais.

**Domínio:** tomamos como domínio do modelo uma área limitada e fechada contida no domínio da solução analítica.

**Dados globais:** construímos os dados globais usando a solução analítica em uma malha grossa no espaço-tempo.

**Condição inicial:** para o nosso modelo experimental, tomamos como condição inicial a solução analítica no instante inicial de tempo.

Observamos que os dados globais são obtidos da solução da mesma equação que é utilizada no modelo experimental, enquanto os modelos reais, global e regional, são descritos por sistemas de EDPs distintos. Entretanto, o fato de utilizar apenas uma equação para descrever o modelo não permite simular a mesma situação. No caso da condição inicial, obviamente, não é exata na realidade, mas é obtida através de um processo, conhecido como assimilação de dados, que produz uma boa aproximação do estado de atmosfera do instante a partir do qual o modelo é executado. Portanto, o erro relacionado com a condição inicial é significativamente menor que o erro relacionado com os dados globais. Assim como nossa atenção neste trabalho é voltada ao aproveitamento dos dados globais, tomamos como sendo exata a condição inicial.

A seguir introduzimos as equações que serão utilizadas nos nossos testes numéricos com o modelo experimental.

### 3.3.1 Equação de Rossby-Obukhov unidimensional

A equação de Rossby-Obukhov foi deduzida por Obukhov em 1949 [30]. O seu domínio é uma  $\beta$ -planície periódica, frequentemente usado em estudos teóricos da meteorologia. Uma  $\beta$ -planície periódica é basicamente um cilindro, ou seja, um retângulo no qual todas as soluções são periódicas em  $x$ , com dimensões  $L = 3 * 10^7 m$  na direção  $x$  e  $B = 4 * 10^6 m$  na direção  $y$ .

A equação de Rossby-Obukhov é uma equação de vorticidade potencial, que descreve a evolução das ondas de Rossby, responsáveis pela mudança de tempo. A sua expressão é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}[\nabla^2\psi - \frac{\psi}{l_0^2}] + J(\psi, \nabla^2\psi) + \beta\frac{\partial\psi}{\partial x} = 0, \quad (3.3)$$

onde  $\psi$  é a função corrente,  $f_0 = 10^{-4}s^{-1}$  é o parâmetro de Coriolis,  $c_0$  velocidade do som,  $\beta = df_0/dt = 1.6 \times 10^{-11} s^{-1}m^{-1}$  e  $l_0 = c_0/f_0 = 3 \times 10^6 m$  é escalar de Obukhov.

Definimos a função corrente como a função que satisfaz a seguinte propriedade

$$U = -\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$V = \frac{\partial\psi}{\partial y},$$

sendo  $U$  o vento zonal (vento ao longo de  $x$ ) e  $V$  o vento meridional (vento ao longo de  $y$ ).  $\nabla^2$  é o operador Laplaciano e  $J$  é o operador Jacobiano dado por

$$J(a, b) = \frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial b}{\partial y} - \frac{\partial a}{\partial y} \frac{\partial b}{\partial x}. \quad (3.4)$$

Como no caso da maioria de EDPs não-lineares, não conhecemos a solução analítica geral da equação de Rossby-Obukhov. Entretanto, para o caso unidimensional linearizado, dado por

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{l_0^2} \right) \psi + \beta \frac{\partial\psi}{\partial x} + U \frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} = 0, \quad (3.5)$$

a solução analítica é conhecida.

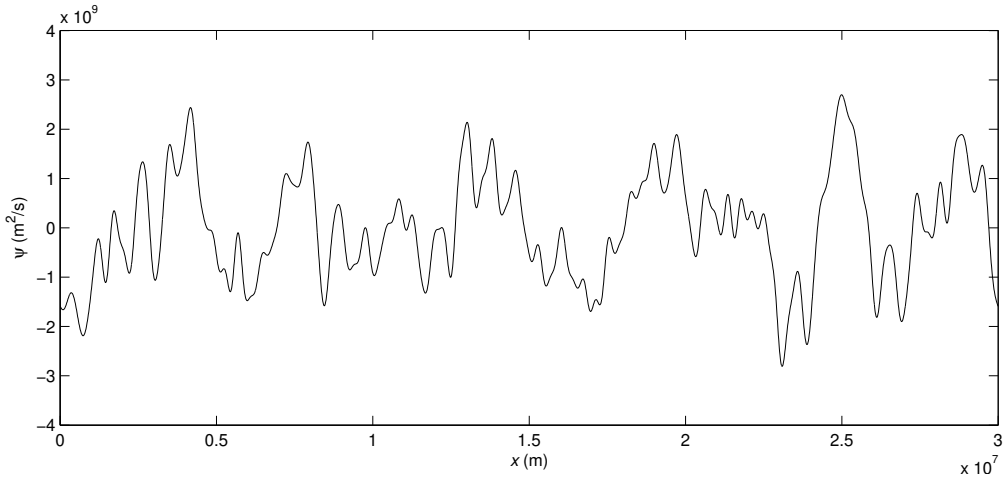


Figura 3.1: Gráfico da solução da equação de Rossby-Obukhov unidimensional no domínio  $[0, L]$  para  $t = 0$ .

Observando que  $\psi$  é uma função periódica em  $x$ , ou seja,

$$\psi(0, t) = \psi(L, t), \quad (3.6)$$

a solução da equação (3.5) tem a seguinte forma:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^N A_n \text{sen}[k_n(x - c_n t) + \phi_n], \quad (3.7)$$

onde

$$c_n = U - \frac{\beta + U/l_0^2}{k_n^2 + 1/l_0^2}, \quad (3.8)$$

$$k_n = \frac{2\pi n}{L},$$

e  $A_n$  e  $\phi_n$  são definidos pela condição inicial.

A Figura 3.1 mostra a solução (3.7) no instante de tempo  $t = 0$ , em todo domínio  $[0, L]$ , com  $U = 30$  m/s. Os coeficientes  $A_n$  e  $\phi_n$ , com  $n = 1, \dots, 85$ , foram gerados de forma aleatória entre  $[0, 10]$  e  $[0, 2\pi]$ , respectivamente.

### 3.3.2 Equação de Korteweg-de Vries

A equação de Korteweg-de Vries (KdV) [16, 17] é uma equação diferencial parcial não-linear dispersiva. Esta equação representa o modelo matemático de onda na superfície de água rasa e é dada por:

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0. \quad (3.9)$$

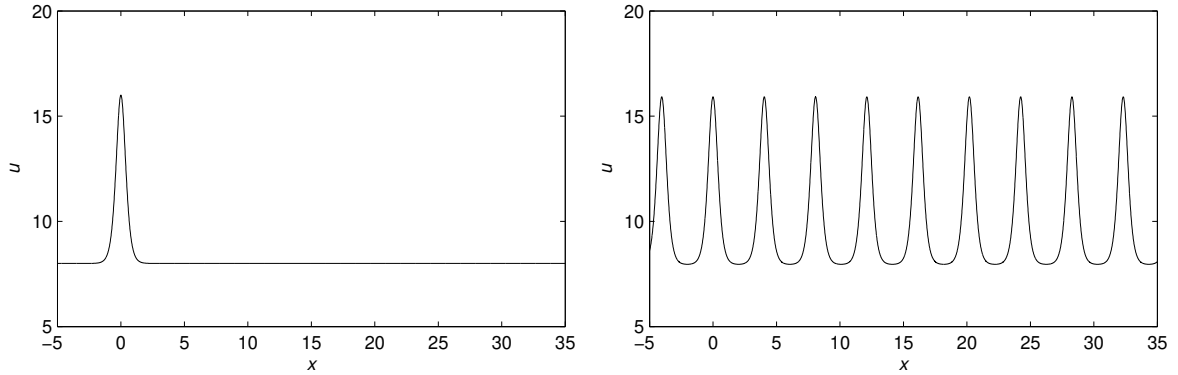


Figura 3.2: Gráfico da solução da equação de KdV para  $t = 0$ : sóliton com  $\gamma = 2$  e  $b = a$  (à esquerda); onda cnoidal com  $\gamma = 2$ ,  $m = 0.995$  e  $b = a$  (à direita).

A equação (3.9) possui solução analítica, como foi mostrada por Korteweg e de Vries [18], dada por

$$u = b + a \operatorname{cn}^2(\gamma(x - Vt)|m), \quad (3.10)$$

onde  $\operatorname{cn}(\cdot|m)$  é a função elíptica Jacobiana,  $m \in (0, 1)$  é o módulo da função elíptica,  $\gamma$  é o número de onda,  $a = 2m\gamma^2$  e  $V = 6b + 4(2m - 1)\gamma^2$ . Esta solução é chamada de onda cnoidal.



No caso em que  $m \rightarrow 1$  temos que  $\text{cn}(x|m) \rightarrow \text{sech}(x)$  e a solução (3.10) toma a forma de um sólito unidimensional:

$$u = b + a \text{sech}^2(\gamma(x - Vt)), \quad (3.11)$$

com  $V = 6b + 2a$  e  $a = 2\gamma$ .

A Figura 3.2 mostra a solução da equação de KdV no instante de tempo  $t = 0$ .

## Capítulo 4

# Abordagem usando otimização para resolução de modelos com dados no interior do domínio

Como descrevemos no capítulo anterior, na abordagem tradicional para resolver os modelos regionais, as condições de contorno são obtidas interpolando a solução fornecida pelo modelo global sobre a malha grossa. Essencialmente, os pontos globais no interior do domínio regional são descartados. Com o uso de ferramentas de otimização podemos reformular o problema de forma a aproveitar todos os dados disponíveis.

A seguir, analisaremos um exemplo trivial. Sejam  $y'' = 0$ , o “modelo regional”, definido em  $[a, b]$  e  $\{(x_1 = a, y_1), \dots, (x_m = b, y_m)\}$ , os “dados globais” do modelo. A abordagem clássica consiste em, simplesmente, tomar a solução como a reta que une  $(x_1, y_1)$  e  $(x_m, y_m)$ . Porém, ao invés disso, podemos tomar como solução uma reta que interpola os pontos no sentido de quadrados mínimos. Se os dados não contiverem erros ambos os resultados serão idênticos. Entretanto, na presença de erros, as diferenças podem ser significativas. Na Figura 4.1 mostramos o exemplo com os dados  $(x_i, y_i + e_i)$ ,  $i = 1, \dots, m$ , extraídos da solução exata  $y = 2x + 1$ , onde  $e_i$  corresponde a uma perturbação aleatória de  $y_i$  em até 30%. É fácil ver que nesse caso a solução razoável é a solução que interpola os pontos.

A intenção deste trabalho é formular um problema de otimização que busca resolver o modelo de tal forma que a solução seja mais próxima possível aos dados contidos no domínio, que pode ser interpretado como a interpolação dos dados pela solução das equações do modelo.

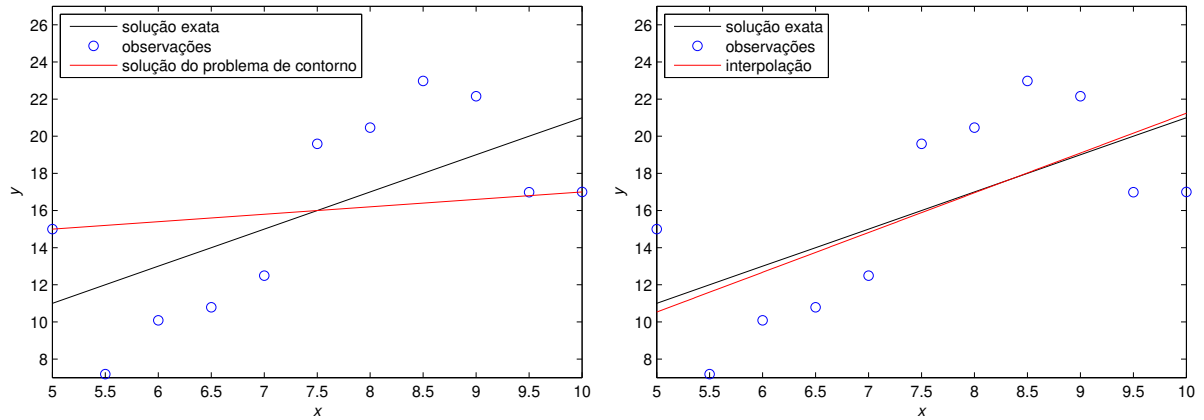


Figura 4.1: Solução de  $y'' = 0$ : problema de contorno (à esquerda) e interpolação por quadrados mínimos (à direita).

## 4.1 Formulação do problema de otimização

Para formular o problema de otimização vamos considerar um exemplo simples, mas bastante ilustrativo, o problema de contorno supersensível [6], dado por

$$\begin{aligned} \epsilon x'' &= -xx', \\ x(0) &= -1, \quad x(1) = 1, \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde  $\epsilon = 0.05$ .

O problema é chamado de supersensível, porque pequenas variações no contorno produzem soluções bem distintas, como podemos verificar na Figura 4.2, onde valor de  $x$  em 1 está entre 0.998 e 1.002.

Para obter a solução analítica, integramos a equação dos dois lados

$$\int \epsilon x'' dt = - \int xx' dt,$$

de onde

$$\epsilon x' = -\frac{x^2 + c}{2},$$

ou seja,

$$\epsilon \frac{x'}{x^2 + c} = -\frac{1}{2}.$$

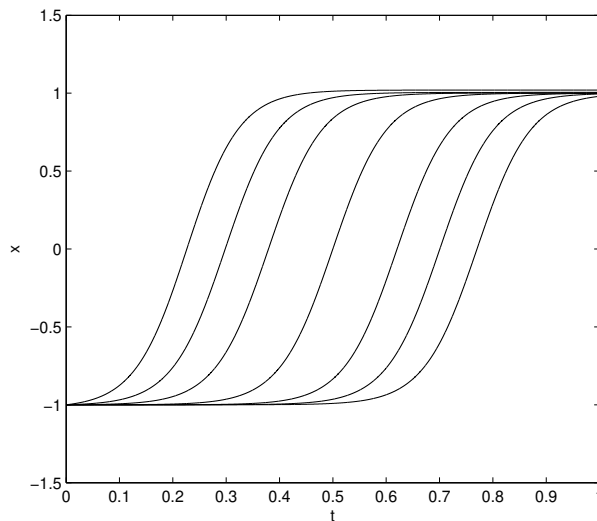


Figura 4.2: Solução analítica de  $\epsilon x'' = -xx'$ ,  $\epsilon = 0.05$  com  $x(0) = -1$  e  $x(1)$  variando próximo de 1.

E integrando novamente, temos

$$x = \begin{cases} \frac{\sqrt{-c} \left( 1 + \exp \frac{(t+k)\sqrt{-c}}{\epsilon} \right)}{1 - \exp \frac{(t+k)\sqrt{-c}}{\epsilon}}, & \text{se } c \leq 0, \\ \sqrt{c} \tan \left( \frac{(t+K)\sqrt{c}}{2\epsilon} \right), & \text{se } c > 0, \end{cases}$$

onde as constantes  $c$  e  $K$  são definidas pelas condições de contorno.

Suponhamos agora que queremos resolver a equação (4.1) tendo a solução perturbada, em no máximo 5%, em alguns pontos no domínio (Figura 4.3).

Obviamente, ao tentar resolver o problema numericamente com um método eficiente, usando apenas os ponto no contorno, obtemos uma solução bem distante da desejada, pois a solução analítica para esse contorno perturbado é bem diferente. A Figura 4.4 mostra a solução numérica usando o método de *shooting* com discretização de Runge-Kutta de ordem 4.

Vamos então formular a idéia de procurar a solução que esteja mais próxima possível aos

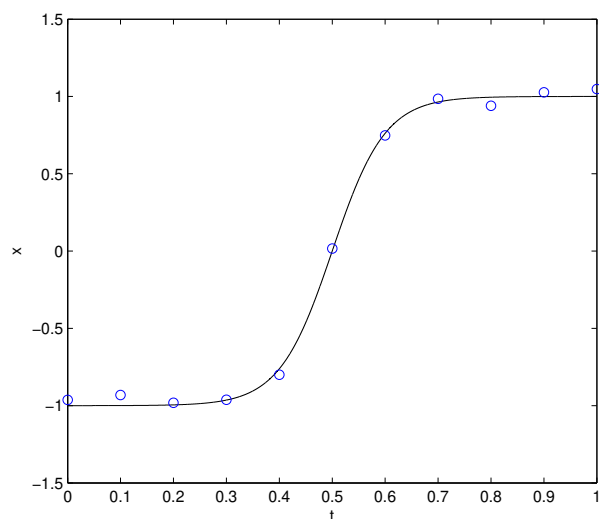


Figura 4.3: Solução de  $\epsilon x'' = -xx'$ ,  $\epsilon = 0.05$  com  $x(0) = -1$  e  $x(1) = 1$  e dados perturbados.

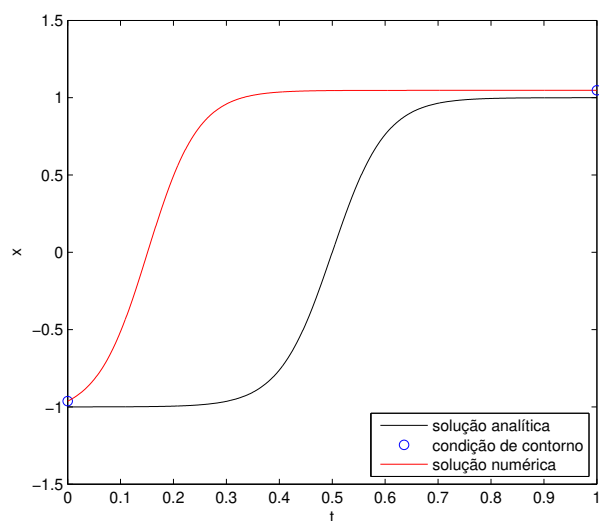


Figura 4.4: Solução numérica de  $\epsilon x'' = -xx'$ ,  $\epsilon = 0.05$  com contorno perturbado.

dados. Seja  $\{x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1\}$  a malha sobre o domínio e suponhamos que

$$h(x) = \begin{pmatrix} h_1(x) \\ h_2(x) \\ \vdots \\ h_{N-1}(x) \end{pmatrix} = 0 \quad (4.2)$$

é o vetor das discretizações da equação (4.1) nos pontos da malha  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N - 1$ .

Se  $V = (V_1, V_2, \dots, V_M)^T$  são os dados perturbados, então queremos achar o ponto  $x^*$  tal

que  $h(x^*) = 0$  e, além disso, a distância (em algum sentido) entre  $x^*$  e  $V$  seja a mínima possível. Podemos, portanto, formular o seguinte problema de otimização

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & d(x, V) \\ \text{s.a} \quad & h(x) = 0, \end{aligned} \tag{4.3}$$

onde  $d(., .)$  é a distância.

A distância entre a solução (que está em uma malha fina) e os dados (que estão em uma malha grossa) pode ser definida de várias formas. Neste trabalho, adotamos a seguinte distância

$$d(x, V) = \frac{1}{2} \|x - F(V)\|_2^2, \tag{4.4}$$

onde  $F$  é operador interpolação da malha grossa para malha fina.

Vamos aplicar agora a formulação (4.3) para novamente tentar resolver o problema (4.1) com dados perturbados. A Figura 4.5 mostra as soluções utilizando 3, 6 e todos os pontos dos dados gerados.

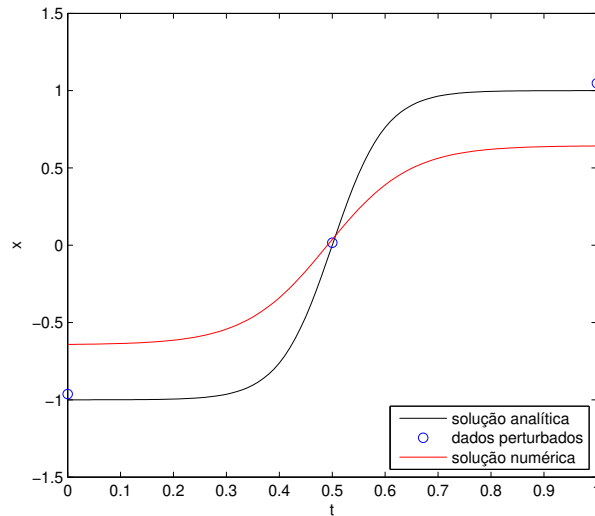
Com um exemplo simples vimos que a utilização dos dados no interior do domínio com uma formulação de otimização possibilita encontrar a solução desejada, enquanto que o problema de contorno (perturbado) fornece uma solução completamente diferente. Portanto, vamos aplicar a otimização aos modelos que possuem essas mesmas características, como os modelos regionais na meteorologia.

## 4.2 Problema de modelagem regional e otimização

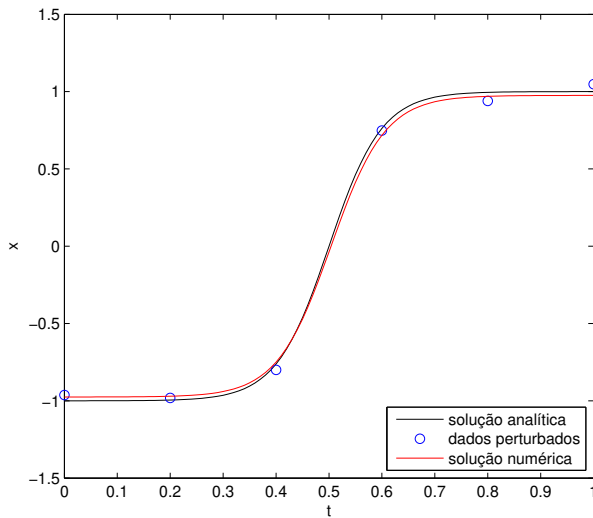
Suponhamos que temos uma solução de (3.1) em uma malha grossa (global),  $\Psi_{sol}$ . O objetivo é encontrar  $G_{sol}$  na malha fina (regional) que satisfaz o modelo regional (3.2) e que esteja o mais próxima possível da solução global  $\Psi_{sol} |_S$ . Nos termos da formulação (4.3), o problema regional pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & \frac{1}{2} \|G - F(\Psi_{sol} |_S)\|_2^2 \\ \text{s.a} \quad & \delta_t \{G\} - F_{rd} = 0, \\ & G(0) - Y_{local}(x) = 0. \end{aligned} \tag{4.5}$$

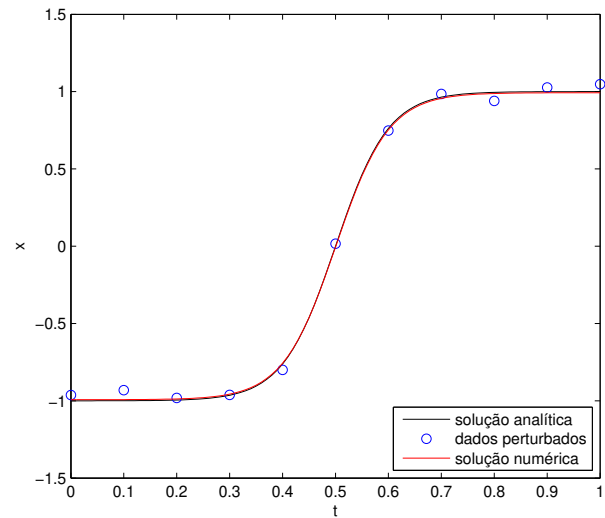
Basicamente, há duas formas de utilizar o problema (4.5) para resolver o modelo regional. A primeira é aplicá-lo evolutivamente para cada nível de tempo, ou seja, fazer o procedimento



(a) 3 pontos



(b) 6 pontos



(c) 11 pontos

Figura 4.5: Solução, usando otimização, de  $\epsilon x'' = -xx'$ ,  $\epsilon = 0.05$  com dados no interior do domínio.

equivalente ao utilizado nos métodos de diferenças finitas: dada a condição inicial em  $t_0$ , obter a solução em  $t_1$  e, em seguida, considerando que a condição inicial agora é dada em  $t_1$ , obter a solução em  $t_2$  e assim por diante.

A segunda forma é considerar como o domínio do problema a malha com todos os níveis de tempo (até o tempo final). Com isso, toda a informação disponibilizada pelo modelo global no período desejado será aproveitada. Além disso, como veremos adiante, para essa forma “não-evolutiva” de interpretar o problema, a malha no espaço-tempo pode ser consideravelmente

maior, preservando a mesma qualidade de solução e, o mais importante, é que o critério de estabilidade para o esquema escolhido não precisa ser satisfeito.

Obviamente, a desvantagem de considerar o problema em todo o domínio espaço-tempo é o tamanho do problema numérico quando queremos obter a solução para um longo período de tempo. A forma de limitar a dimensão do problema é dividir o domínio temporal em vários blocos e resolver o problema (4.5) para cada bloco, considerando como a condição inicial a solução no último nível de tempo do bloco anterior. A escolha do tamanho de cada bloco pode depender de vários fatores: o tamanho da malha regional, a quantidade de dados globais, o tipo de discretização escolhida, recursos computacionais, entre outros.

### 4.2.1 Algoritmo

Note que a condição inicial no problema (4.5) pode ser interpretada também como um dado, juntamente com os dados globais, porém de “melhor” qualidade.

Considerando como os dados do modelo

$$V = \begin{pmatrix} Y_{local}(x) \\ F(\Psi_{sol} | S) \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

reescrevemos o problema (4.5) na forma generalizada como

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & \frac{1}{2} \|u - V\|_P^2 \\ \text{s.a} \quad & h(u) = 0, \quad u \in \mathbb{R}^n \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde  $P$  é uma matriz diagonal de penalidade, que penaliza os dados de “melhor” qualidade, e  $h(u) = [h_1(u), h_2(u), \dots, h_m(u)]^T$  é o vetor das discretizações das equações regionais em cada ponto da malha.

As dimensões  $n$  e  $m$  são, respectivamente, o número de pontos da malha e o número de discretizações. Note que  $n$  e  $m$  estão relacionados, pois para cada ponto da malha que não está no contorno ou na condição inicial, há uma discretização.

Escrevendo as condições KKT do problema (4.7), obtemos um sistema não-linear dado por

$$\begin{aligned} P(u - V) + h'(u)^T \lambda &= 0 \\ h(u) &= 0, \end{aligned} \quad (4.8)$$



onde  $\lambda$  é o vetor dos multiplicadores de Lagrange e  $h'(u)$  é a matriz Jacobiana das restrições

$$h'(u) = \begin{pmatrix} \nabla h_1(u)^T \\ \nabla h_2(u)^T \\ \vdots \\ \nabla h_m(u)^T \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

É importante observar que  $h'(u)$  tem estrutura esparsa. Cada restrição  $h_i(u)$  é a discretização da equação do modelo em um ponto da malha, portanto envolve apenas alguns pontos próximos. Consequentemente, o gradiente  $\nabla h_i(u)$  será não-nulo apenas nos pontos envolvidos nessa discretização.

Considerando a dimensão  $n + m$  do sistema (4.8), os métodos que se mostram eficientes para sua resolução são do tipo Newton e Quase-Newton (ver [27]).

Uma iteração do método de Newton para (4.8) consiste em resolver o seguinte sistema linear

$$J(u_k, \lambda_k) \begin{pmatrix} \Delta u_k \\ \Delta \lambda_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} P(u_k - V) + h'(u_k)^T \lambda \\ h(u_k) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

e atualizar  $u_k$  e  $\lambda_k$  por

$$\begin{pmatrix} u_{k+1} \\ \lambda_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k \\ \lambda_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta u_k \\ \Delta \lambda_k \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

onde  $J$  é a matriz Jacobiana dada por

$$J(x, \lambda) = \begin{pmatrix} P + \sum_i^m \lambda_i \nabla^2 h_i(u) & h'(u)^T \\ h'(u) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

e  $\nabla^2 h_i(u)$ ,  $i = 1, \dots, m$  são as matrizes Hessianas das restrições.

A matriz (4.12) é uma matriz tipo ponto de sela e há vários métodos que podem ser aplicados para a resolução do sistema linear associado (ver [3]). Note que, no caso em que as restrições não são lineares, ou seja, quando o modelo é descrito por equações diferenciais não-lineares, o bloco superior esquerdo da matriz (4.12),  $P + \sum_i^m \lambda_i \nabla^2 h_i(u)$ , envolve o cálculo da Hessiana de cada restrição, o que é computacionalmente caro, uma vez que deve ser feito a cada iteração de Newton. Além disso, a matriz  $\sum_i^m \lambda_i \nabla^2 h_i(u)$  é cheia, pois as discretizações são feitas em todos os pontos da malha (exceto nos pontos do contorno e da condição inicial).

Por outro lado, quando as restrições  $h_i$  são lineares, ou seja, o modelo é definido por equações diferenciais lineares, a Hessiana  $\nabla^2 h_i$  é nula. Neste caso, a matriz Jacobiana toma a forma

$$\begin{pmatrix} P & h'(u)^T \\ h'(u) & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

que é uma matriz esparsa e o sistema linear associado pode ser resolvido rapidamente usando técnicas de esparsidade.

Com essas observações, vamos considerar a matriz (4.13) como uma aproximação da matriz Jacobiana do caso geral e introduziremos o seguinte algoritmo Quase-Newton para resolver o problema (4.7).

### Algoritmo Quase-Newton

Dados a matriz penalidade  $P$ , o critério de parada e o número máximo de iterações:

#### Passo 1. Inicialização

$$k = 0$$

$$\begin{pmatrix} u_0 \\ \lambda_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

#### Passo 2. Resolver o subproblema

$$J(u_k, 0) \begin{pmatrix} \Delta u_k \\ \Delta \lambda_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} P(u_k - V) + h'(u_k)^T \lambda \\ h(u_k) \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

#### Passo 3. Atualizar o ponto

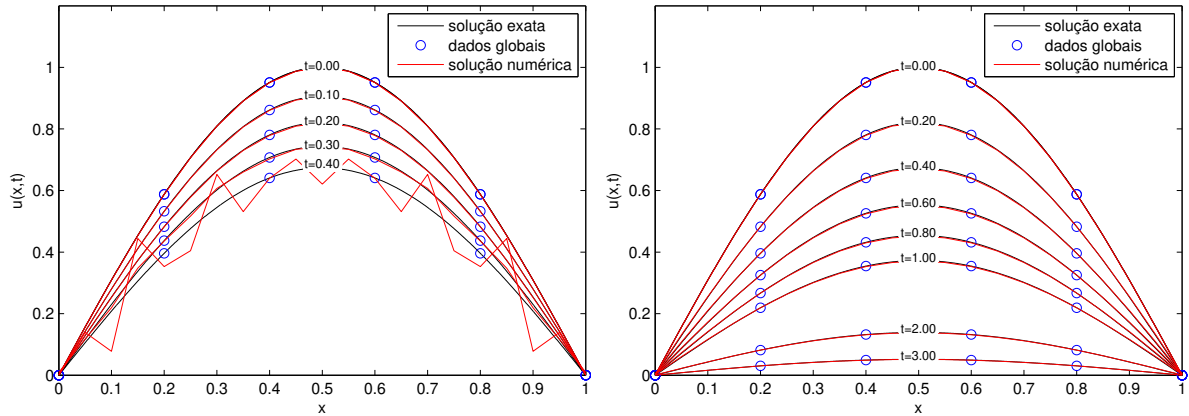
$$\begin{pmatrix} u_{k+1} \\ \lambda_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k \\ \lambda_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta u_k \\ \Delta \lambda_k \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

#### Passo 4. Verificar o critério de parada

Se o critério de parada não é satisfeito, atribuir  $k = k + 1$  e voltar ao passo 2.

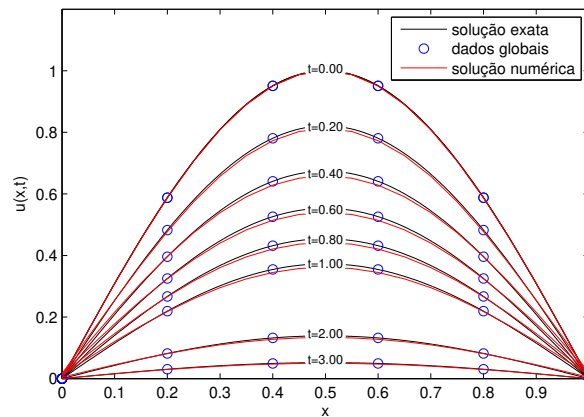
### 4.3 Otimização e o critério de estabilidade

Analisaremos agora o fenômeno mais interessante que surge quando a equação diferencial é resolvida usando a abordagem por otimização.



(a) Solução evolutiva para  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ .

(b) Solução não evolutiva para  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ .



(c) Solução não evolutiva para  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 400$ .

Figura 4.6: Solução numérica da equação de calor usando otimização para esquema avançado no tempo e centrado no espaço.  $\Delta x = 0.5$ ,  $a = 0.1$ .

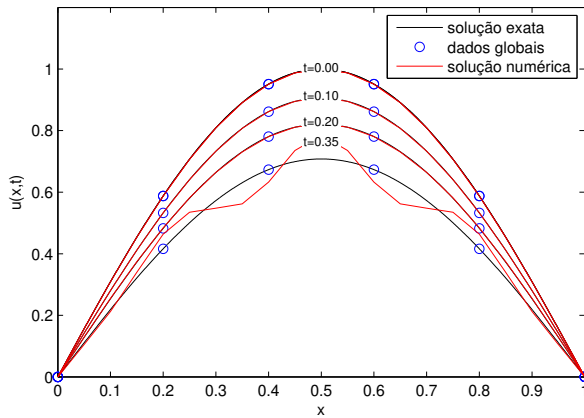
Como já comentamos anteriormente, podemos aplicar o método de otimização para resolver uma equação (ou um sistema de equações) de várias formas. Vamos tomar, como exemplo, a equação de calor (2.15) e ver o comportamento dos esquemas cuja solução numérica apresentamos na Seção 2.4.

Gerando os dados globais em uma malha grossa com  $\Delta x_{global} = 0.2$  e  $\Delta t_{global} = 0.1$ , resolvemos a equação usando dois esquemas sem respeitar sua condição de estabilidade aplicando o

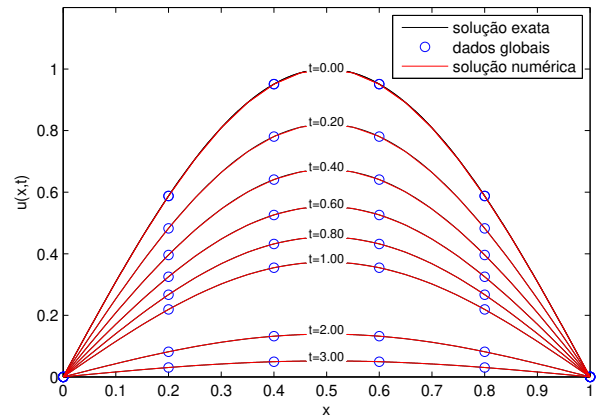
algoritmo da seção anterior de duas formas:

- evolutiva - resolvendo o problema de otimização em cada nível de tempo;
- não evolutiva - resolvendo o problema de otimização em todo o período.

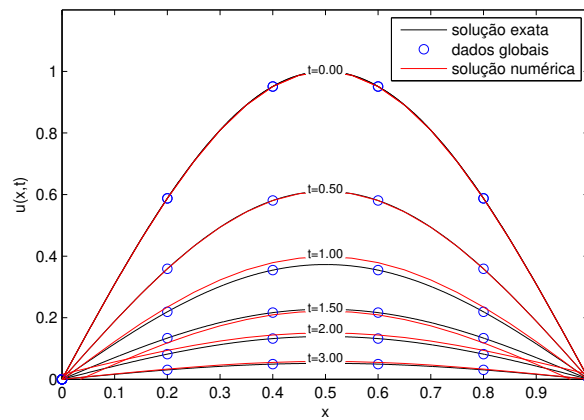
Em ambos os casos usamos uma penalização alta de  $10^4$  para a condição inicial.



(a) Solução evolutiva para  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ .



(b) Solução não evolutiva para  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ .



(c) Solução não evolutiva para  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 2000$ .

Figura 4.7: Solução numérica da equação de calor, usando otimização para esquema centrado no tempo e centrado no espaço.  $\Delta x = 0.5$ ,  $a = 0.1$ .

A Figura 4.6 mostra o resultado para o esquema avançado no tempo e centrado no espaço, com  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 1$ . O resultado evolutivo corresponde à solução obtida de forma tradicional, mostrando a instabilidade após um período curto de tempo. Por outro lado, no caso não evolutivo, a solução sempre tem um comportamento estável. Além disso, podemos tomar um passo no

tempo bem maior sem perder a qualidade na solução, como mostra o último gráfico da figura, onde tomamos, propositalmente,  $a \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 400$  para mostrar o comportamento robusto do método de otimização. O mesmo fenômeno acontece com o esquema centrado no tempo e centrado no espaço, que é incondicionalmente instável (Figura 4.7). Usando a forma evolutiva, a solução rapidamente se torna instável, enquanto que o uso de todos os níveis do tempo permite obter a solução estável e precisa com passos bem maiores comparados aos passos com abordagem de diferenças finitas tradicional.

Atualmente, não há uma teoria que explique o comportamento estável do problema não evolutivo. Porém, podemos observar que os dados globais interpolados na malha do problema atuam como uma regularização, exigindo que a solução não se afaste demais dos dados globais e não apresente comportamento oscilatório.

# Capítulo 5

## Discretização das equações de Rossby-Obukhov e de KdV

A finalidade deste capítulo é mostrar o comportamento do modelo experimental usando as equações de Rossby-Obukhov e de KdV. Para isso introduzimos vários esquemas para as duas equações e analisamos o seu comportamento numérico. Em seguida, apresentamos vários testes com o modelo experimental.

### 5.1 Discretização da equação de Rossby-Obukhov unidimensional

Antes de prosseguir com a discretização, observamos que para a implementação numérica da equação de Rossby-Obukhov unidimensional (3.5) é conveniente utilizar a representação adimensional a fim de evitar problemas de arredondamento. Tomando como parâmetros de escalamento  $S = 6 \cdot 10^6 \text{ m}$ ,  $T = S/V = 6 \cdot 10^5 \text{ s}$ ,  $V = 10 \text{ m/s}$ , as variáveis adimensionais assumem a seguinte forma:

$$\tilde{x} = \frac{x}{S}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{T}, \quad \tilde{\psi} = \frac{T}{S^2} \psi. \quad (5.1)$$

A equação adimensional é dada por

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{1}{b^2} \right) \tilde{\psi} + \beta_0 \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{x}} + U_0 \frac{\partial^3 \tilde{\psi}}{\partial \tilde{x}^3} = 0, \quad (5.2)$$

onde  $\frac{1}{b} = \frac{S}{l_0} = 2$ ,  $\beta_0 = \frac{\beta S^2}{V} = 57.6$  e  $U_0 = \frac{U}{V} \in [0, 3]$ .

Nas deduções teóricas e resultados numéricos para a equação de Rossby-Obukhov mostrados neste trabalho utilizaremos sempre as medidas dimensionais para maior comodidade. Entretanto, é importante observar que na implementação numérica foi utilizada a forma adimensional (5.1).

Por abuso de notação, usamos a mesma letra para denotar a variável dependente da EDP e sua aproximação discreta, ou seja, referimo-nos a  $\psi_n^k$  como a aproximação  $\psi(x_n, t_k)$ .

Para os testes numéricos consideramos todo o domínio espacial periódico  $[0, L]$ , discretizando-o com  $N + 1$  pontos,  $\{x_0 = 0, x_1, \dots, x_{N-1}, x_N = L\}$ . Portanto, a condição de contorno é dada por

$$\psi_{0\pm i}^k = \psi_{N\pm i}^k, \quad k > 0, \quad i = 0, \dots, N - 1. \quad (5.3)$$

Como condição inicial tomamos a solução analítica (3.7) no tempo  $t = 0$  apresentada na Figura 3.1, ou seja,

$$\psi_n^0 = \sum_{i=1}^{85} A_i \text{sen}[k_i x_n + \phi_i], \quad n \in \{0, \dots, N - 1\}, \quad (5.4)$$

com os coeficientes  $A_i$  e  $\phi_i$  gerados aleatoriamente entre  $[0, 10]$  e  $[0, 2\pi]$ , respectivamente.

### 5.1.1 Esquema centrado no tempo e centrado no espaço

O esquema centrado no tempo e centrado no espaço (também chamado de *leapfrog*) como o próprio nome diz, é montado usando a aproximação centrada para as derivadas tanto no tempo quanto no espaço (ver Tabela 2.1). Em cada ponto da malha,  $(x_n, t_k)$ , temos a seguinte aproximação discreta da equação (3.5)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\Delta t} \left( \frac{\psi_{n+1}^{k+1} - 2\psi_n^{k+1} + \psi_{n-1}^{k+1}}{\Delta x^2} - \frac{\psi_{n+1}^{k-1} - 2\psi_n^{k-1} + \psi_{n-1}^{k-1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{l_0^2} (\psi_n^{k+1} - \psi_n^{k-1}) \right) \\ & + \beta \left( \frac{\psi_{n+1}^k - \psi_{n-1}^k}{2\Delta x} \right) + U \left( \frac{\psi_{n+2}^k - 2\psi_{n+1}^k + 2\psi_{n-1}^k - \psi_{n-2}^k}{2\Delta x^3} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Como a equação (3.5) é homogênea, o erro de truncamento é o somatório dos erros nas aproximações das derivadas, ou seja, é  $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ .

Multiplicando a expressão (5.5) por  $2\Delta t \Delta x^2$  e isolando os elementos do nível de tempo  $t_{k+1}$  no lado esquerdo, temos a seguinte expressão do esquema

$$\psi_{n-1}^{k+1} - a\psi_n^{k+1} + \psi_{n+1}^{k+1} = b\psi_{n-2}^k - c\psi_{n-1}^k + c\psi_{n+1}^k - b\psi_{n+2}^k + \psi_{n-1}^{k-1} - a\psi_n^{k-1} + \psi_{n+1}^{k-1}, \quad (5.6)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= 2 + \frac{\Delta x^2}{l_0^2}, & b &= U \frac{\Delta t}{\Delta x}, \\ c &= 2U \frac{\Delta t}{\Delta x} - \beta \Delta t \Delta x. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Agora vamos analisar a estabilidade desse esquema. Substituindo  $\psi_n^k$  por  $g^k e^{in\xi}$  na expressão (5.6), o fator de amplificação é dado por

$$(e^{-i\xi} - a + e^{i\xi})g^2 = [b(e^{-2i\xi} - e^{2i\xi}) - c(e^{-i\xi} - e^{i\xi})]g + (e^{-i\xi} - a + e^{i\xi}).$$

Usando a relação  $e^{i\xi} = \cos \xi + i \operatorname{sen} \xi$ , simplificamos a expressão anterior

$$Ag^2 + iBg - A = 0, \quad (5.8)$$

com

$$\begin{aligned} A &= 2 \cos \xi - a \\ B &= 2(b \operatorname{sen} 2\xi - c \operatorname{sen} \xi). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Assim, temos que as raízes da equação (5.7) são dadas por

$$g_{\pm} = \frac{-iB \pm \sqrt{4A^2 - B^2}}{2A}. \quad (5.10)$$

Para que o esquema (5.6) seja estável, a condição  $|g_{\pm}| \leq 1$  deve ser satisfeita.

Primeiramente, analisaremos o caso  $B^2 \geq 4A^2$ .

$$\begin{aligned} |g_{\pm}|^2 &= \left| \frac{-iB \pm \sqrt{4A^2 - B^2}}{2A} \right|^2 = \left| \frac{(-B \pm \sqrt{B^2 - 4A^2})i}{2A} \right|^2 \\ &= \frac{(-B \pm \sqrt{B^2 - 4A^2})^2}{4A^2} = \frac{B^2 \pm 2B\sqrt{B^2 - 4A^2} + B^2 - 4A^2}{4A^2}. \end{aligned}$$

Para que  $|g_{\pm}|$  seja menor que 1 devemos ter

$$\pm 2B \underbrace{\sqrt{B^2 - 4A^2}}_{\geq 0} \leq 4A^2 - B^2 \leq 0.$$

Portanto, devemos ter  $B = A = 0$ . Porém,  $A = 2 \cos \xi - a = 2(\cos \xi - 1) - \frac{\Delta x^2}{l_0^2} < 0$  para todo  $\xi \in [-\pi, \pi]$ . Logo, chegamos a uma contradição.

Por outro lado, se  $B^2 \leq 4A^2$  temos que

$$|g_{\pm}|^2 = \left| \frac{-iB \pm \sqrt{4A^2 - B^2}}{2A} \right|^2 = \frac{B^2 + 4A^2 - B^2}{4A^2} = 1.$$



Logo, para  $B^2 \leq 4A^2$  o esquema é estável. Usando (5.7) e (5.9), temos

$$\sin^2 \xi \left( 2U \frac{\Delta t}{\Delta x} (\cos \xi - 1) + \beta \Delta t \Delta x \right)^2 \leq \left( 2(\cos \xi - 1) - \frac{\Delta x^2}{l_0^2} \right)^2, \quad (5.11)$$

para todo  $\xi \in [-\pi, \pi]$ . Como por motivos físicos é razoável considerar que  $\Delta x < 10^5 \text{ m}$  e  $\Delta t < 3600 \text{ s}$ , no intuito de simplificar a relação, podemos desprezar os termos  $\beta \Delta t \Delta x$  e  $\frac{\Delta x^2}{l_0^2}$  já que são próximos de zero. Dessa forma, temos

$$U \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{|\sin \xi|}, \quad \forall \xi \in [-\pi, \pi].$$

Portanto, o critério de estabilidade para esse esquema é dado por

$$U \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (5.12)$$

Agora vamos analisar o esquema numericamente. Note que é um esquema de três passos e, portanto, para a evolução numérica é necessário ter os dois primeiros níveis de tempo como condição inicial.

Dados  $\Psi^0$  e  $\Psi^1$ , para cada  $k \geq 1$ , temos o seguinte sistema linear

$$Q\Psi^{k+1} = P\Psi^k + Q\Psi^{k-1}, \quad (5.13)$$

onde

$$\Psi^k = \begin{pmatrix} \psi_0^k \\ \psi_1^k \\ \psi_2^k \\ \vdots \\ \psi_{N-2}^k \\ \psi_{N-1}^k \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N, \quad Q = \begin{pmatrix} -a & 1 & & & & 1 \\ 1 & -a & 1 & & & \\ & 1 & -a & 1 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & -a & 1 \\ 1 & & & & & 1 & -a \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & c & -b & & & b & -c \\ -c & 0 & c & -b & & & b \\ b & -c & 0 & c & -b & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & b & -c & 0 & c & -b \\ -b & & & & b & -c & 0 & c \\ c & -b & & & b & -c & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

A seguir descrevemos os resultados numéricos. Observamos que para discretizar uma onda, preservando a sua amplitude e o seu comprimento, é necessário tomar pelo menos 5 pontos e, assim como a menor onda presente na condição inicial tem comprimento de aproximadamente  $3.5 \times 10^5 m$ , devemos tomar o passo espacial  $\Delta x$  de no máximo  $8 \times 10^4 m$ . Os testes foram feitos para o vento zonal  $U = 30 m/s$  e para gerar  $\Psi^1$  usamos a solução analítica.

Na Figura 5.1 podemos ver que para  $\Delta x = 6 \times 10^4 m$  e  $\Delta t = 2000 s$  a solução numérica do sistema (5.13) para  $t = 96$  horas praticamente coincide com a solução exata. Note que a condição de estabilidade (5.12) é satisfeita, pois  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1$ . É interessante observar que durante

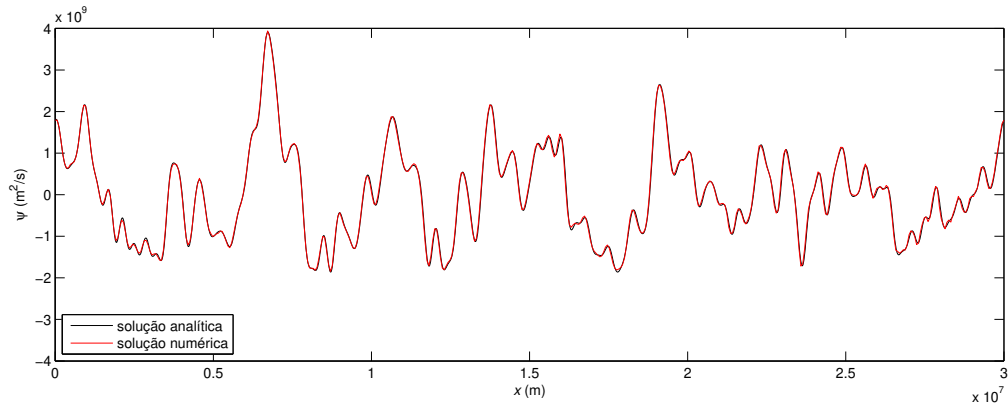


Figura 5.1: Solução numérica da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas com  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1$  ( $\Delta x = 60 km$  e  $\Delta t = 2000 s$ ). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço.

a análise de estabilidade desprezamos os termos  $\beta \Delta t \Delta x$  e  $\frac{\Delta x^2}{l_0^2}$ , que são próximos de zero. A Figura 5.2 mostra que a condição obtida é necessária e suficiente para a estabilidade do esquema, pois uma pequena violação ( $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1.003$ ) provoca uma solução instável.

Outro aspecto interessante do esquema é que se escolhermos os passos  $\Delta x$  e  $\Delta t$  tais que  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$ , a solução se torna menos precisa em relação à solução para  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1$ , como mostra a Figura 5.3, onde  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.9, 0.7$  e  $0.5$  com  $\Delta x = 6 \times 10^4 m$ .

Este fenômeno é o mesmo que pode ser observado na solução da equação de onda  $v_t(x, t) + bv_{xx}(x, t) = 0$  pelo esquema *upwind* (ver [7], por exemplo). Escolhendo o critério  $b \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1$ , a aproximação se torna exata, pois acompanha as características (Figura 5.4).

Voltando à equação de Rossby-Obukhov, para ter a mesma precisão obtida com  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1$ , é necessário diminuir a malha como mostra a Figura 5.5, onde as soluções foram obtidas usando  $\Delta x = 4 \times 10^4 m$ ,  $2 \times 10^4 m$  e  $10^4 m$ .

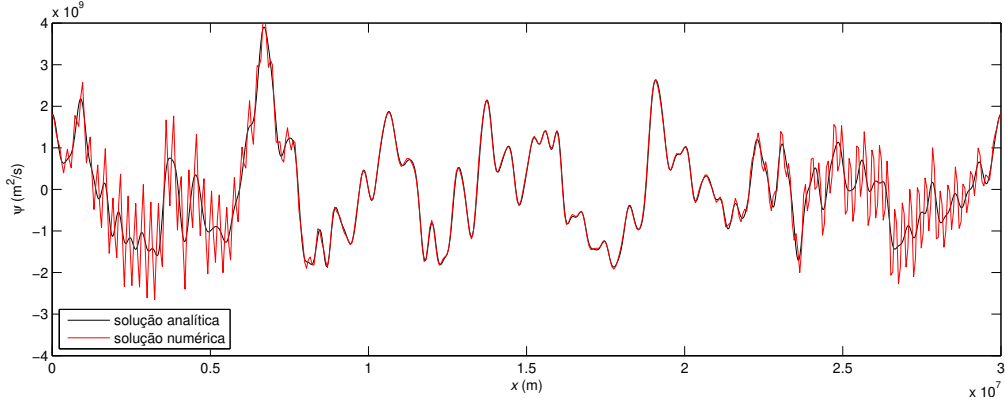


Figura 5.2: Instabilidade na solução numérica da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas provocada por uma pequena violação do critério de estabilidade  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 1.003$  ( $\Delta x = 60 \text{ km}$  e  $\Delta t = 2006 \text{ s}$ ). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço.

### 5.1.2 Esquema atrasado no tempo e centrado no espaço

O segundo esquema é construído usando a aproximação atrasada no tempo e centrada no espaço.

A sua expressão é dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{\psi_{n+1}^{k+1} - 2\psi_n^{k+1} + \psi_{n-1}^{k+1}}{\Delta x^2} - \frac{\psi_{n+1}^k - 2\psi_n^k + \psi_{n-1}^k}{\Delta x^2} - \frac{1}{l_0^2} (\psi_n^{k+1} - \psi_n^k) \right) \\ + \beta \left( \frac{\psi_{n+1}^{k+1} - \psi_{n-1}^{k+1}}{2\Delta x} \right) + U \left( \frac{\psi_{n+2}^{k+1} - 2\psi_{n+1}^{k+1} + 2\psi_{n-1}^{k+1} - \psi_{n-2}^{k+1}}{2\Delta x^3} \right) = 0, \end{aligned} \quad (5.14)$$

e o erro de truncamento é  $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ .

De maneira análoga ao esquema anterior, rearranjamos os termos, isolando os elementos do nível de tempo  $t_{k+1}$  no lado esquerdo,

$$-b\psi_{n-2}^{k+1} + (c+2)\psi_{n-1}^{k+1} - 2a\psi_n^{k+1} - (c-2)\psi_{n+1}^{k+1} + b\psi_{n+2}^{k+1} = 2\psi_{n-1}^k - 2a\psi_n^k + 2\psi_{n+1}^k, \quad (5.15)$$

onde  $a$ ,  $b$  e  $c$  são dados por (5.7).

Substituindo  $\psi_n^k$  por  $g^k e^{in\xi}$ , obtemos o fator de amplificação

$$g = \frac{2 \cos \xi - a}{i(b \sin 2\xi - c \sin \xi) - (2 \cos \xi - a)}, \quad (5.16)$$

de onde

$$\begin{aligned} |g|^2 &= \frac{(2 \cos \xi - a)^2}{\underbrace{(b \sin 2\xi - c \sin \xi)^2}_{\geq 0} + (2 \cos \xi - a)^2} \\ &\leq \frac{(2 \cos \xi - a)^2}{(2 \cos \xi - a)^2} = 1 \end{aligned}$$

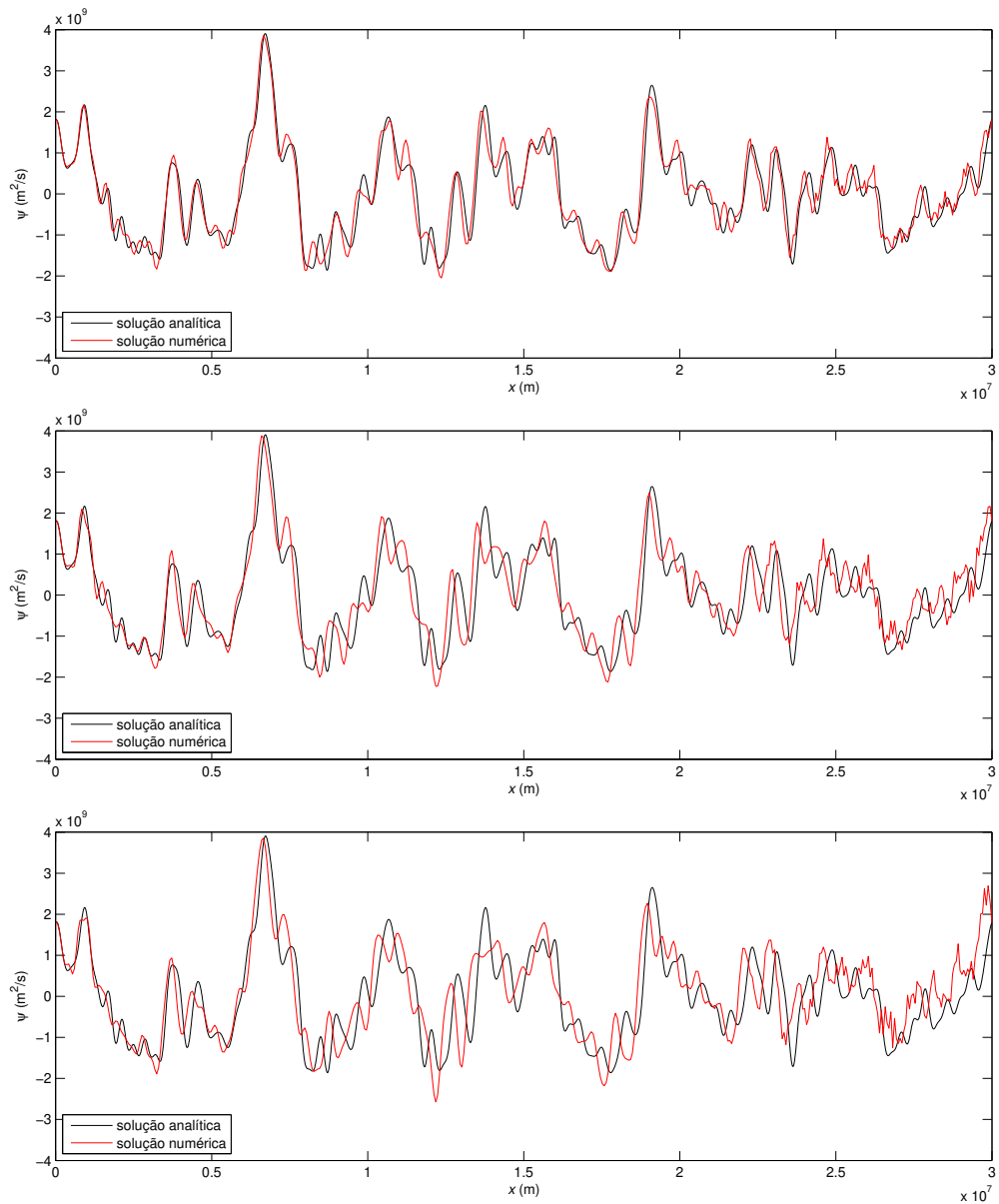


Figura 5.3: Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas com  $\Delta x = 60 \text{ km}$  fixo e com  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.9$  (primeiro gráfico),  $0.7$  (segundo) e  $0.5$  (terceiro). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço.

Portanto, o esquema é incondicionalmente estável.

Na forma matricial, temos o seguinte sistema linear a ser resolvido em cada nível de tempo:

$$Q\Psi^{k+1} = 2P\Psi^k, \quad (5.17)$$

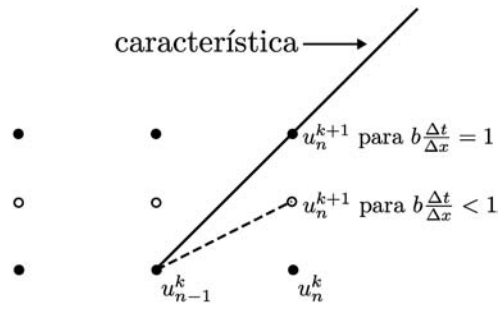


Figura 5.4: Característica da equação de onda  $v_t(x, t) + bv_{xx}(x, t) = 0$  e a aproximação da solução pelo esquema *upwind* em relação à escolha do critério  $b\frac{\Delta t}{\Delta x}$ .

onde

$$Q = \begin{pmatrix} -2a & -c+2 & b & & -b & c+2 \\ c+2 & -2a & -c+2 & b & & -b \\ -b & c+2 & -2a & -c+2 & b & \\ & & & \ddots & & \\ & & -b & c+2 & -2a & -c+2 & b \\ b & & & -b & c+2 & -2a & -c+2 \\ -c+2 & b & & & -b & c+2 & -2a \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$P = \begin{pmatrix} -a & 1 & & & 1 \\ 1 & -a & 1 & & \\ & 1 & -a & 1 & \\ & & & \ddots & \\ & & & 1 & -a & 1 \\ 1 & & & & 1 & -a \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Tomando as condições inicial e de contorno usadas para o esquema anterior, testamos o esquema numericamente. Note que a aproximação da derivada no tempo é de primeira ordem, portanto, como mostra a Figura 5.6, é necessário ter o passo no tempo bem pequeno ( $\Delta t = 10^{-5}$  no terceiro gráfico da Figura 5.6) para obter uma solução numérica próxima da solução exata.

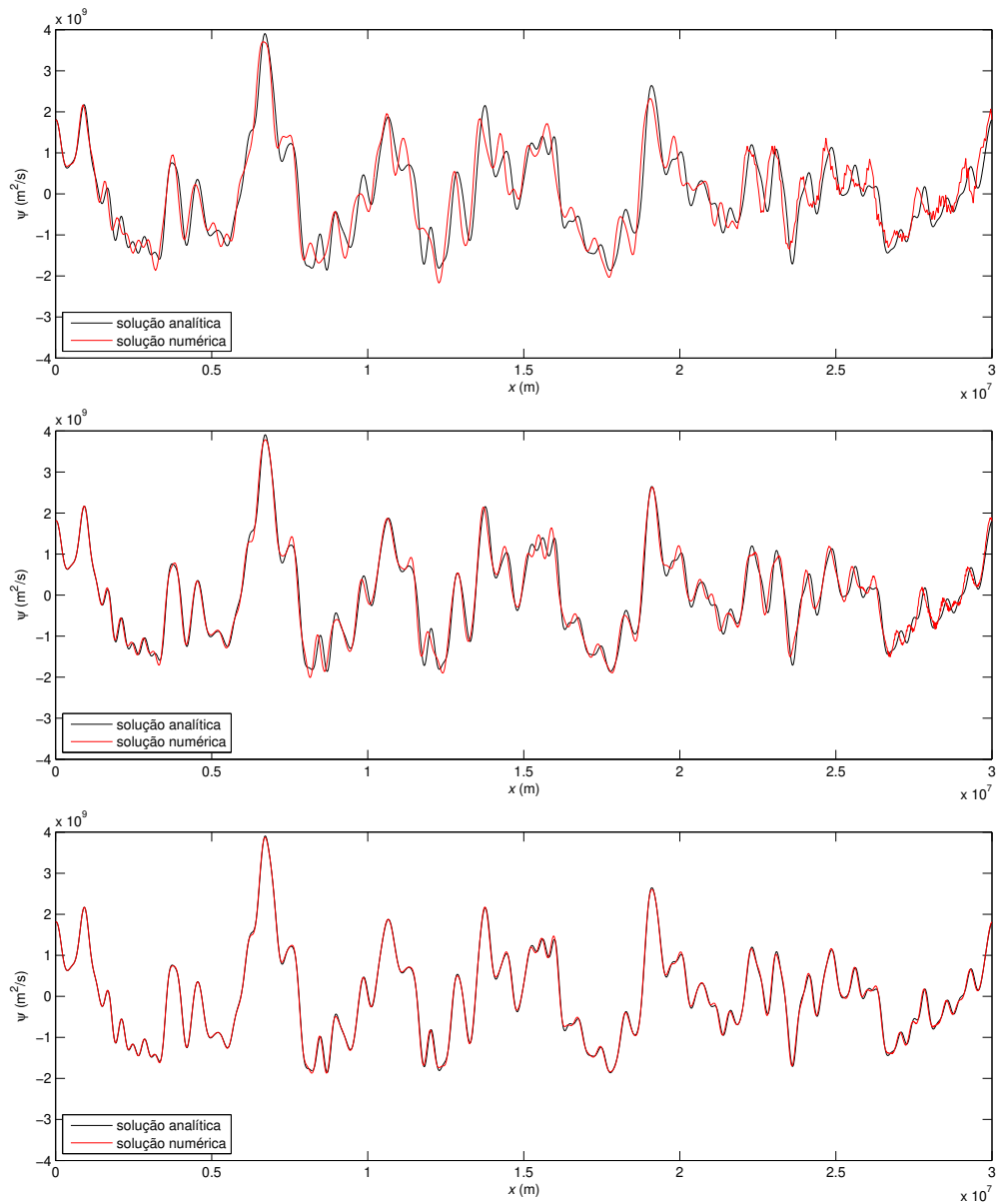


Figura 5.5: Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas com  $U \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.5$  fixo e com  $\Delta x = 40 \text{ km}$  (primeiro gráfico),  $20 \text{ km}$  (segundo) e  $10 \text{ km}$  (terceiro). Esquema centrado no tempo e centrado no espaço.

### 5.1.3 Esquema Crank-Nicolson

Por último, consideramos o esquema Crank-Nicolson. A idéia é discretizar a equação no ponto  $(x_n, t_{k+\frac{1}{2}})$ , aproximando as derivadas espaciais pelas médias das aproximações nos níveis de

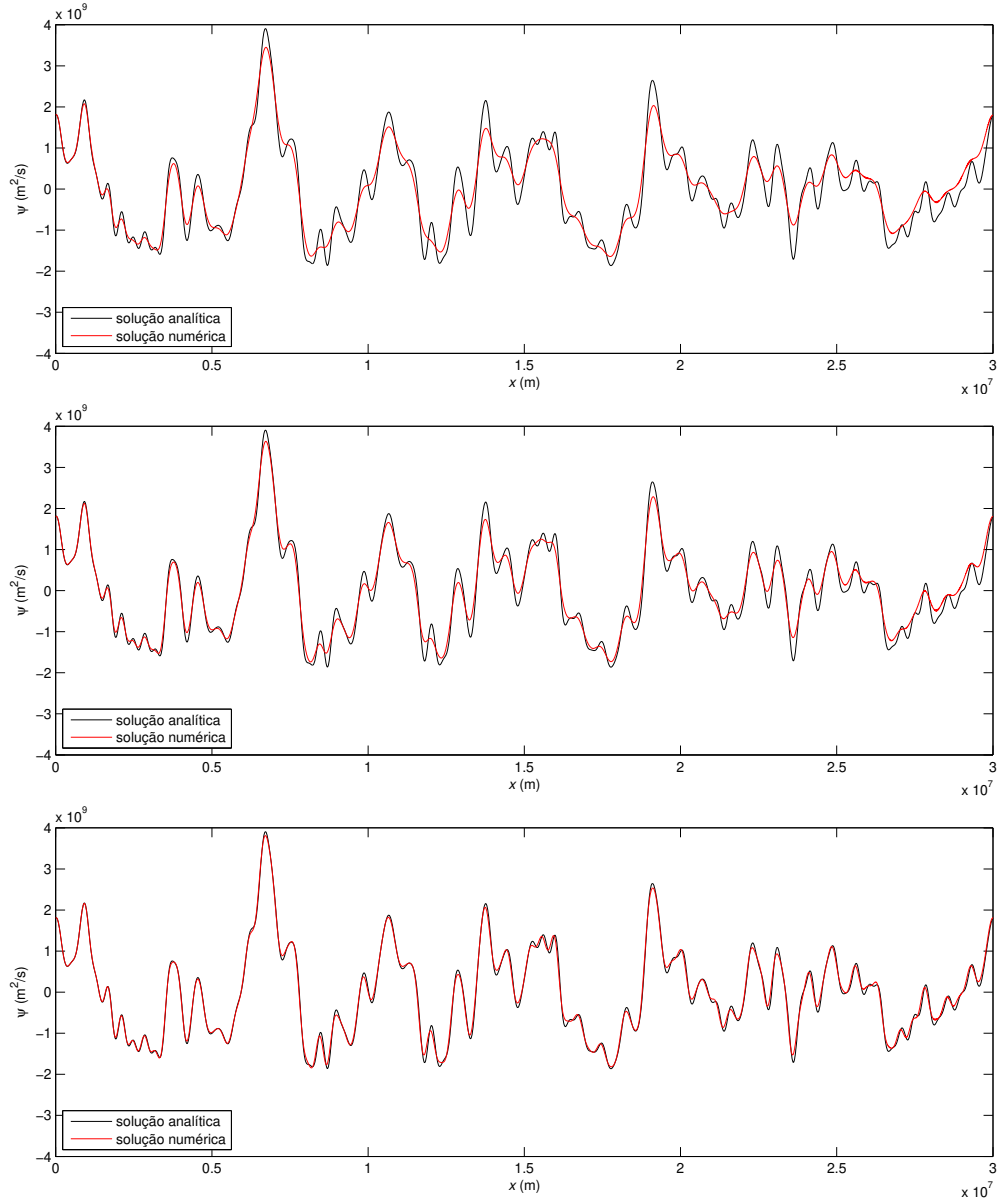


Figura 5.6: Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas com  $\Delta x = 10 \text{ km}$  fixo e com  $\Delta t = 100 \text{ s}$  (primeiro gráfico),  $\Delta t = 50 \text{ s}$  (segundo) e  $\Delta t = 10 \text{ s}$  (terceiro). Esquema atrasado no tempo e centrado no espaço.

tempo  $t_k$  e  $t_{k+1}$ . Assim, obtemos a expressão

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{\psi_{n+1}^{k+1} - 2\psi_n^{k+1} + \psi_{n-1}^{k+1}}{\Delta x^2} - \frac{\psi_{n+1}^k - 2\psi_n^k + \psi_{n-1}^k}{\Delta x^2} - \frac{1}{l_0^2} (\psi_n^{k+1} - \psi_n^k) \right) \\ & + \frac{\beta}{2} \left( \frac{\psi_{n+1}^{k+1} - \psi_{n-1}^{k+1}}{2\Delta x} + \frac{\psi_{n+1}^k - \psi_{n-1}^k}{2\Delta x} \right) \\ & + \frac{U}{2} \left( \frac{\psi_{n+2}^{k+1} - 2\psi_{n+1}^{k+1} + 2\psi_{n-1}^{k+1} - \psi_{n-2}^{k+1}}{2\Delta x^3} + \frac{\psi_{n+2}^k - 2\psi_{n+1}^k + 2\psi_{n-1}^k - \psi_{n-2}^k}{2\Delta x^3} \right) = 0, \end{aligned}$$

cujos erros de truncamento são  $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ .

Rearranjando os termos e usando (5.7), temos

$$\begin{aligned} & -\frac{b}{2}\psi_{n-2}^{k+1} + \left(\frac{c}{2} + 2\right)\psi_{n-1}^{k+1} - 2a\psi_n^{k+1} - \left(\frac{c}{2} - 2\right)\psi_{n+1}^{k+1} + \frac{b}{2}\psi_{n+2}^{k+1} \\ & = \frac{b}{2}\psi_{n-2}^k - \left(\frac{c}{2} - 2\right)\psi_{n-1}^k - 2a\psi_n^k + \left(\frac{c}{2} + 2\right)\psi_{n+1}^k - \frac{b}{2}\psi_{n+2}^k. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Substituindo  $\psi_n^k$  por  $g^k e^{in\xi}$ , obtemos o fator de amplificação

$$g = \frac{-i(b\text{sen}2\xi - c\text{sen}\xi) + 2(2\cos\xi - a)}{i(b\text{sen}2\xi - c\text{sen}\xi) + 2(2\cos\xi - a)}. \quad (5.19)$$

É fácil ver que  $|g| = 1$  para todo  $\xi \in [-\pi, \pi]$ . Portanto, o esquema é incondicionalmente estável.

O sistema linear a ser resolvido em cada nível de tempo é dado por

$$Q\Psi^{k+1} = P\Psi^k, \quad (5.20)$$

onde

$$Q = \begin{pmatrix} -2a & -\frac{c}{2} + 2 & \frac{b}{2} & & & -\frac{b}{2} & \frac{c}{2} + 2 \\ \frac{c}{2} + 2 & -2a & -\frac{c}{2} + 2 & \frac{b}{2} & & & -\frac{b}{2} \\ -\frac{b}{2} & \frac{c}{2} + 2 & -2a & -\frac{c}{2} + 2 & \frac{b}{2} & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & -\frac{b}{2} & \frac{c}{2} + 2 & -2a & -\frac{c}{2} + 2 & \frac{b}{2} \\ \frac{b}{2} & & & -\frac{b}{2} & \frac{c}{2} + 2 & -2a & -\frac{c}{2} + 2 \\ -\frac{c}{2} + 2 & \frac{b}{2} & & & -\frac{b}{2} & \frac{c}{2} + 2 & -2a \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

e

$$P = \begin{pmatrix} -2a & \frac{c}{2} + 2 & -\frac{b}{2} & & & \frac{b}{2} & -\frac{c}{2} + 2 \\ -\frac{c}{2} + 2 & -2a & \frac{c}{2} + 2 & -\frac{b}{2} & & & \frac{b}{2} \\ \frac{b}{2} & -\frac{c}{2} + 2 & -2a & \frac{c}{2} + 2 & -\frac{b}{2} & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & \frac{b}{2} & -\frac{c}{2} + 2 & -2a & \frac{c}{2} + 2 & -\frac{b}{2} \\ -\frac{b}{2} & & & \frac{b}{2} & -\frac{c}{2} + 2 & -2a & \frac{c}{2} + 2 \\ \frac{c}{2} + 2 & -\frac{b}{2} & & & \frac{b}{2} & -\frac{c}{2} + 2 & -2a \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Utilizando as mesmas condições inicial e de contorno dos experimentos anteriores, podemos observar que o esquema Crank-Nicolson é mais sensível ao tamanho do passo espacial  $\Delta x$ , ao contrário do esquema atrasado no tempo e centrado no espaço. Fixando o passo no tempo em



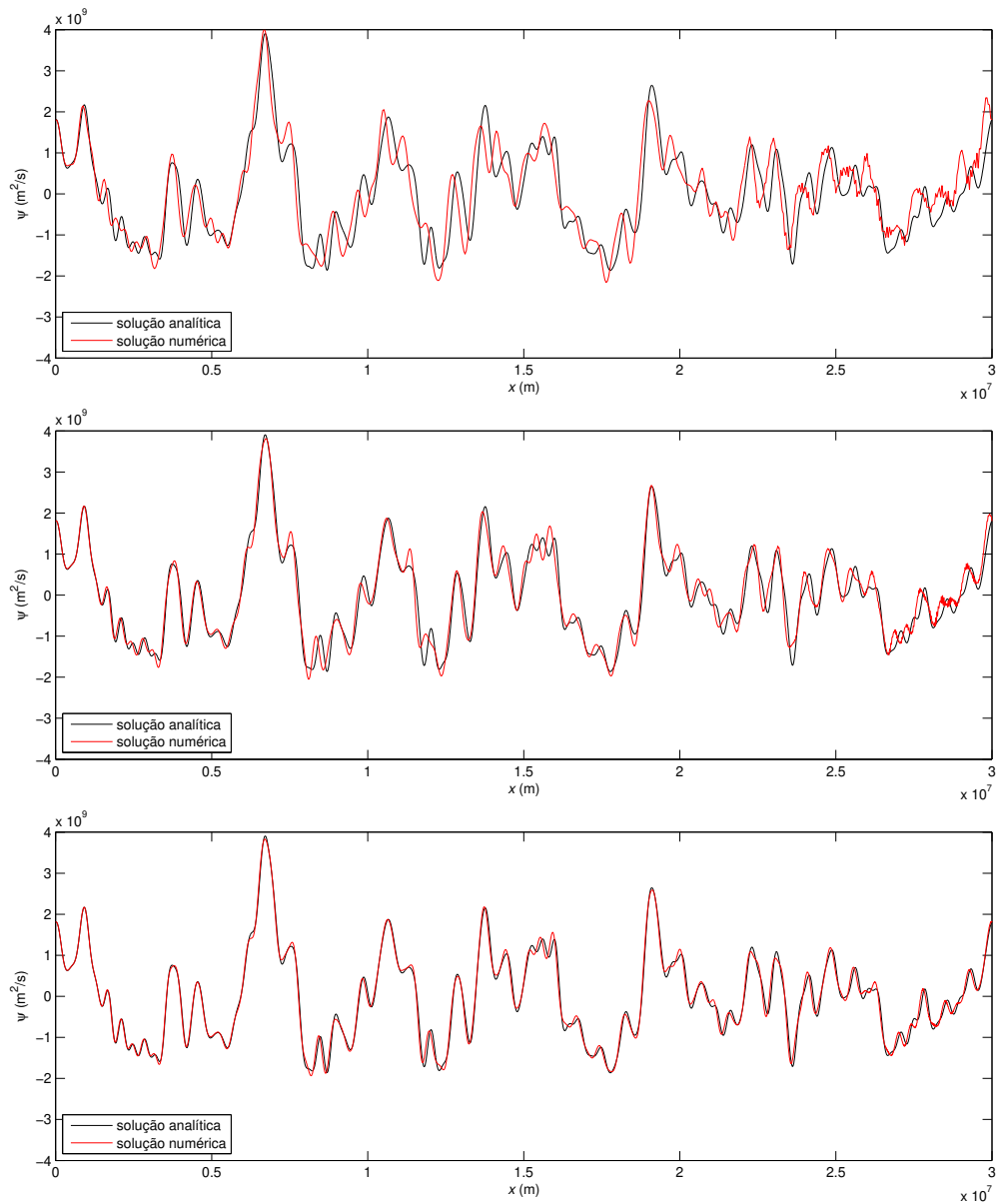


Figura 5.7: Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas com  $\Delta t = 400$  s fixo e com  $\Delta x = 40$  km (primeiro gráfico),  $\Delta x = 20$  km (segundo) e  $\Delta x = 10$  km (terceiro). Esquema Crank-Nicolson.

$\Delta t = 400$  s, a solução melhora significativamente diminuindo-se o passo no espaço de  $4 \times 10^4$  m para  $10^4$  m, como mostra a Figura 5.7. Por outro lado, se fixamos o passo no espaço em  $\Delta x = 10^4$  a solução não varia significativamente com o passo no tempo entre 800 s e 200 s (Figura 5.8).

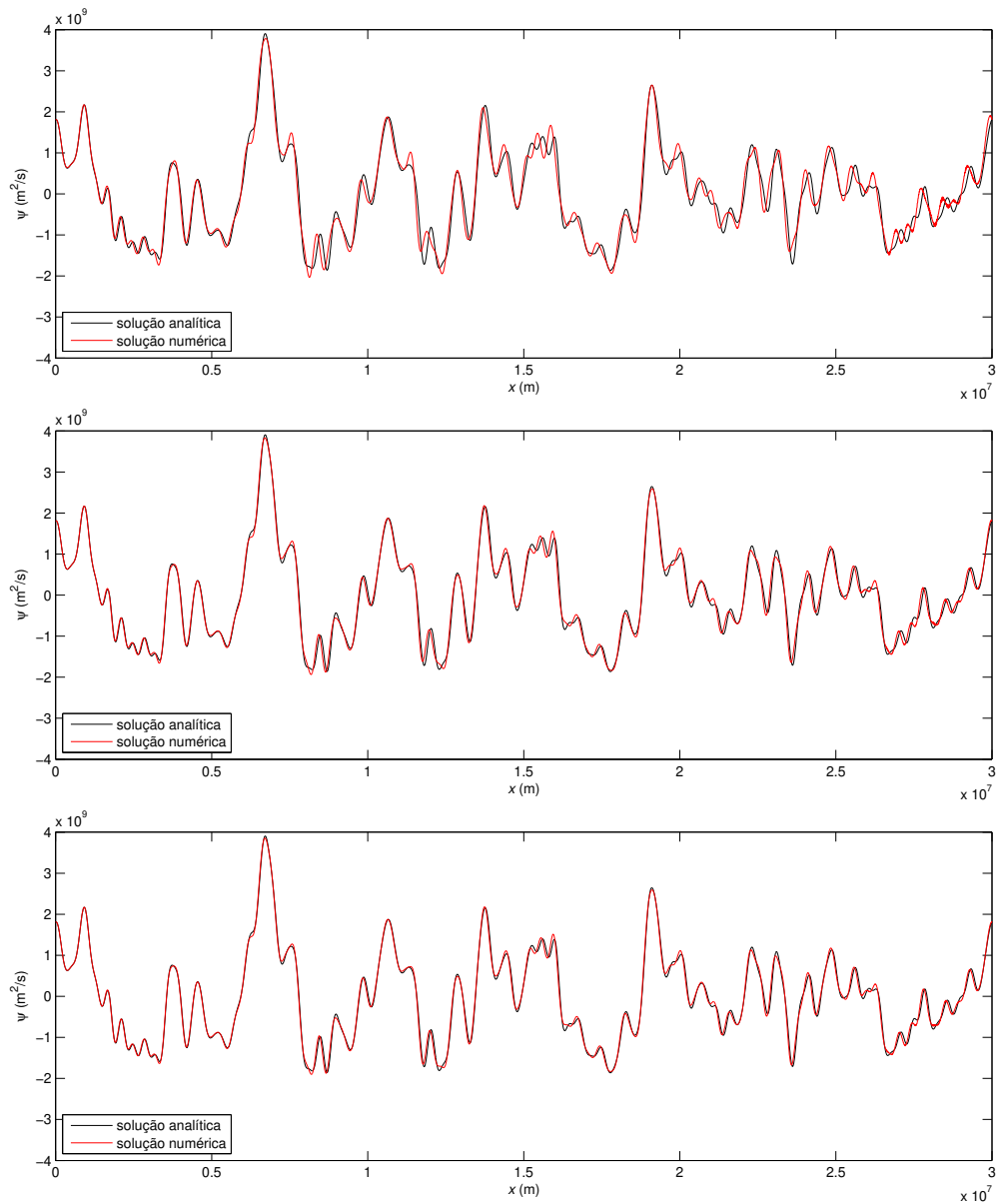


Figura 5.8: Soluções numéricas da equação de Rossby-Obukhov no instante  $t = 96$  horas com  $\Delta x = 10 \text{ km}$  fixo e com  $\Delta t = 800 \text{ s}$  (primeiro gráfico),  $\Delta t = 400 \text{ s}$  (segundo) e  $\Delta t = 200 \text{ s}$  (terceiro). Esquema Crank-Nicolson.

## 5.2 Discretização da equação de KdV

A seguir, introduzimos três esquemas de diferenças finitas para equação de Korteweg-de Vries. Não faremos a análise teórica da estabilidade, pois, sendo a equação não-linear, é um procedimento complexo e não é o objetivo deste trabalho (há muitas publicações que apresentam uma análise detalhada da estabilidade para vários esquemas de KdV, como [22, 29, 31, 37]).

Para os testes numéricos consideramos como o domínio espacial o intervalo  $[-5, 35]$ , discretizando-o com  $N + 1$  pontos,  $\{x_0 = -5, x_1, \dots, x_{N-1}, x_N = 35\}$ . Para as condições inicial e de contorno usamos as duas soluções analíticas mostradas na Figura 3.2 – solução cnoidal (3.10), com  $m = 0.995$ , e solução de sóliton (3.11). Os coeficientes são  $\gamma = 2$  e  $b = a$ .

### 5.2.1 Esquema explícito linear

Montamos o primeiro esquema usando a mesma idéia do esquema centrado no tempo e centrado no espaço da equação de Rossby-Obukhov.

$$\frac{u_n^{k+1} - u_n^{k-1}}{2\Delta t} + 6u_n^k \frac{u_{n+1}^k - u_{n-1}^k}{2\Delta x} + \frac{u_{n+2}^k - 2u_{n+1}^k + 2u_{n-1}^k - u_{n-2}^k}{2\Delta x^3} = 0. \quad (5.21)$$

É um esquema explícito e com erro de truncamento  $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ . Isolando  $u_n^{k+1}$  no lado esquerdo temos a seguinte expressão

$$u_n^{k+1} = hu_{n-2}^k + (6ru_n^k - 2h)u_{n-1}^k - (6ru_n^k - 2h)u_{n+1}^k - hu_{n+2}^k + u_n^{k-1}, \quad (5.22)$$

onde  $r = \frac{\Delta t}{\Delta x}$  e  $h = \frac{\Delta t}{\Delta x^3}$ .

Analisando os valores obtidos com os testes numéricos, apresentados na Tabela 5.1, vemos que a condição de estabilidade do esquema é extremamente exigente, pois impõe um passo no tempo muito pequeno em relação ao passo no espaço.

Na Figura 5.9 podemos ver a solução para o sóliton e onda cnoidal no instante  $t = 0.5$ , com passos no espaço  $\Delta x = 0.05$  e  $\Delta x = 0.02$  (o passo no tempo é o máximo permitido).

### 5.2.2 Esquema implícito linear

O segundo esquema é basicamente o esquema Crank-Nicolson. A diferença é que, para preservar a linearidade do esquema em relação a  $u^{k+1}$  no termo não-linear  $6uu_x$ ,  $u$  é discretizada no nível de tempo  $k$ . O esquema resultante, que chamamos de esquema implícito linear, é dado por

$$\begin{aligned} & \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\Delta t} + 6u_n^k \frac{1}{2} \left( \frac{u_{n+1}^{k+1} - u_{n-1}^{k+1}}{2\Delta x} + \frac{u_{n+1}^k - u_{n-1}^k}{2\Delta x} \right) \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{u_{n+2}^k - 2u_{n+1}^k + 2u_{n-1}^k - u_{n-2}^k}{2\Delta x^3} + \frac{u_{n+2}^k - 2u_{n+1}^k + 2u_{n-1}^k - u_{n-2}^k}{2\Delta x^3} \right) = 0 \end{aligned} \quad (5.23)$$

ou

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{4}hu_{n-2}^{k+1} + \frac{1}{2}(h - 3ru_n^k)u_{n-1}^{k+1} + u_n^{k+1} - \frac{1}{2}(h + 3ru_n^k)u_{n+1}^{k+1} + \frac{1}{4}hu_{n+2}^{k+1} \\ & = \frac{1}{4}hu_{n-2}^k - \frac{1}{2}(h - 3ru_n^k)u_{n-1}^k + u_n^k + \frac{1}{2}(h + 3ru_n^k)u_{n+1}^k - \frac{1}{4}hu_{n+2}^k, \end{aligned} \quad (5.24)$$

Tabela 5.1: Critérios de estabilidade para o esquema explícito linear de KdV.

$\Delta x$	$\Delta t \leq$
0.10	$4.5 \times 10^{-4}$
0.09	$3.2 \times 10^{-4}$
0.08	$2.2 \times 10^{-4}$
0.07	$1.4 \times 10^{-4}$
0.06	$8.8 \times 10^{-5}$
0.05	$5.0 \times 10^{-5}$
0.04	$2.5 \times 10^{-5}$
0.03	$1.0 \times 10^{-5}$
0.02	$3.1 \times 10^{-6}$
0.01	$3.8 \times 10^{-7}$

onde  $r = \frac{\Delta t}{\Delta x}$  e  $h = \frac{\Delta t}{\Delta x^3}$ .

Considerando que o contorno é dado em  $u_{0,1}^k$  e  $u_{N-1,N}^k$ , para  $k > 1$ , a equação (5.24) pode ser escrita na forma matricial:

$$Q_k \mathbf{u}^{k+1} = (2I - Q_k) \mathbf{u}^k + d_k, \quad (5.25)$$

com

$$\mathbf{u}^k = \begin{pmatrix} u_2^k \\ u_3^k \\ \vdots \\ u_{N-2}^k \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-3},$$

$$Q_k = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2}(h + 3ru_2^k) & \frac{1}{4}h & & & \\ \frac{1}{2}(h - 3ru_3^k) & 1 & \frac{1}{2}(h + 3ru_3^k) & \frac{1}{4}h & & \\ -\frac{1}{4}h & \frac{1}{2}(h - 3ru_4^k) & 1 & \frac{1}{2}(h + 3ru_4^k) & \frac{1}{4}h & \\ & & & \vdots & & \\ & & -\frac{1}{4}h & \frac{1}{2}(h - 3ru_{N-3}^k) & 1 & \frac{1}{2}(h + 3ru_{N-3}^k) \\ & & & -\frac{1}{4}h & \frac{1}{2}(h - 3ru_{N-2}^k) & 1 \end{pmatrix}$$

$\in \mathbb{R}^{N-3 \times N-3},$

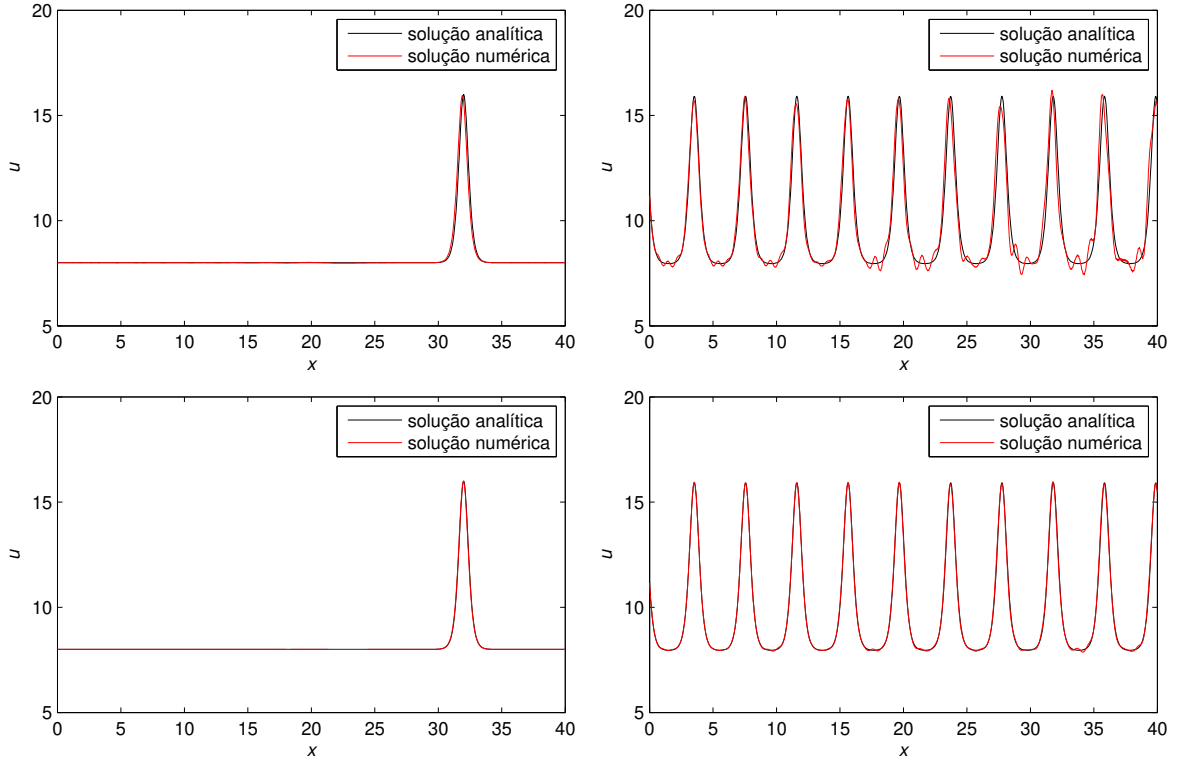


Figura 5.9: Soluções numéricas da equação de KdV no instante  $t = 0.5$  com  $\Delta x = 0.05$ ,  $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$  (acima) e  $\Delta x = 0.02$ ,  $\Delta t = 3.1 \times 10^{-6}$  (abaixo). Esquema explícito linear.

e

$$d_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}h(u_0^{k+1} + u_0^k) - \frac{1}{2}(h - 3ru_2^k)(u_1^{k+1} + u_1^k) \\ -\frac{1}{2}(h - 3ru_3^k)(u_0^{k+1} + u_0^k) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -\frac{1}{2}(h - 3ru_{N-3}^k)(u_N^{k+1} + u_N^k) \\ \frac{1}{4}h(u_N^{k+1} + u_N^k) - \frac{1}{2}(h - 3ru_{N-2}^k)(u_{N-1}^{k+1} + u_{N-1}^k) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-3}.$$

Comparado com o esquema anterior, esse esquema é incondicionalmente estável (ver [22]), mas seu erro de truncamento é  $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ . Portanto, a vantagem de poder usar passos maiores no tempo só pode ser aproveitada para evoluções com período de tempo curto, ou para coeficiente  $\gamma$  pequeno (implicando velocidade e amplitude de onda pequenos). Para estar próximo da precisão ilustrada na Figura 5.9 com o esquema explícito, precisamos tomar o passo no tempo pelo menos  $\Delta t = 10^{-5}$  (ver Figura 5.10).

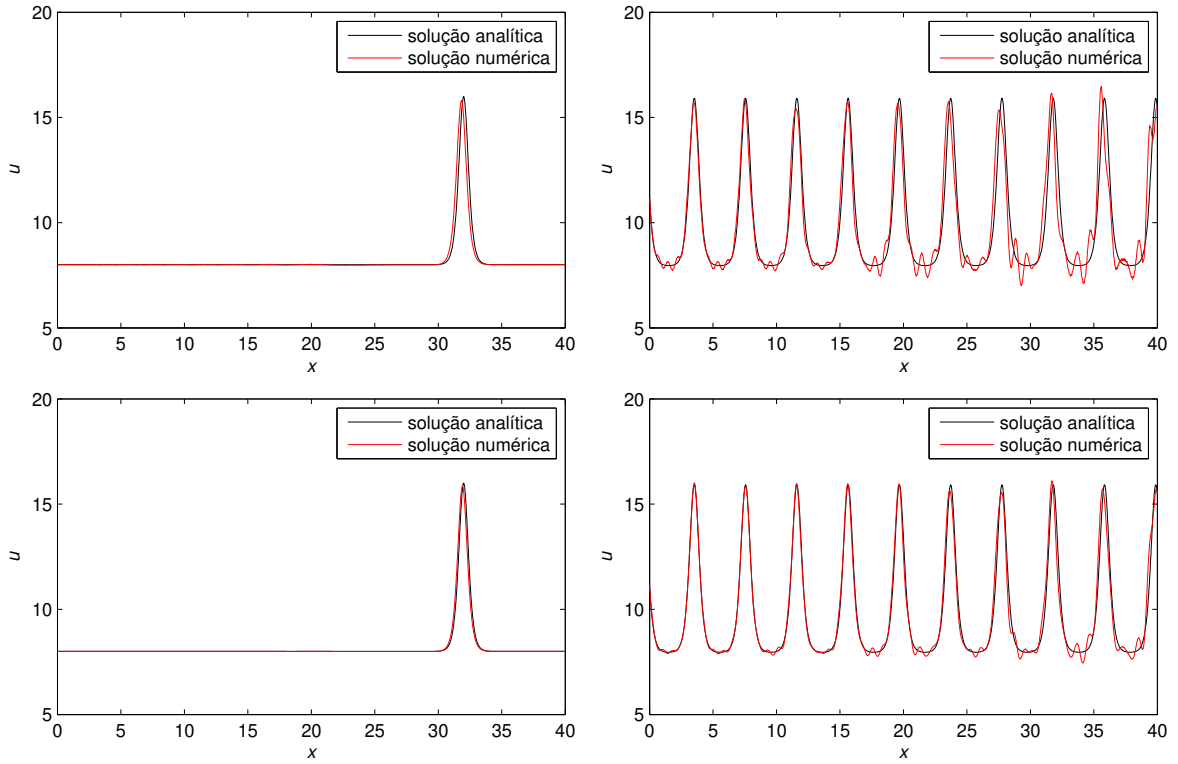


Figura 5.10: Soluções numéricas da equação de KdV no instante  $t = 0.5$  com  $\Delta t = 10^{-5}$  e  $\Delta x = 0.05$  (acima),  $\Delta x = 0.02$  (abaixo). Esquema implícito linear.

### 5.2.3 Esquema implícito não-linear

Como último esquema, que chamamos de esquema implícito não-linear, tomaremos o esquema deduzido por Furihata em [13] e que satisfaz as propriedades de conservação de massa e de energia:

$$\begin{aligned}
 & \frac{u_n^{k+1} - u_n^k}{\Delta t} + \frac{1}{2\Delta x} \left( (u_{n+1}^{k+1})^2 - (u_{n-1}^{k+1})^2 + u_{n+1}^{k+1}u_{n+1}^k - \right. \\
 & \left. - u_{n-1}^{k+1}u_{n-1}^k + (u_{n+1}^k)^2 - (u_{n-1}^k)^2 \right) + \frac{1}{2\Delta x^3} \left( \frac{u_{n+2}^{k+1} + u_{n+2}^k}{2} - \right. \\
 & \left. - (u_{n+1}^{k+1} + u_{n+1}^k) + (u_{n-1}^{k+1} + u_{n-1}^k) - \frac{u_{n-2}^{k+1} + u_{n-2}^k}{2} \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

É um esquema incondicionalmente estável e seu erro de truncamento é  $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ , porém é um esquema não-linear.

Para resolver o sistema obtido do esquema (5.26), vamos interpretá-lo como uma equação

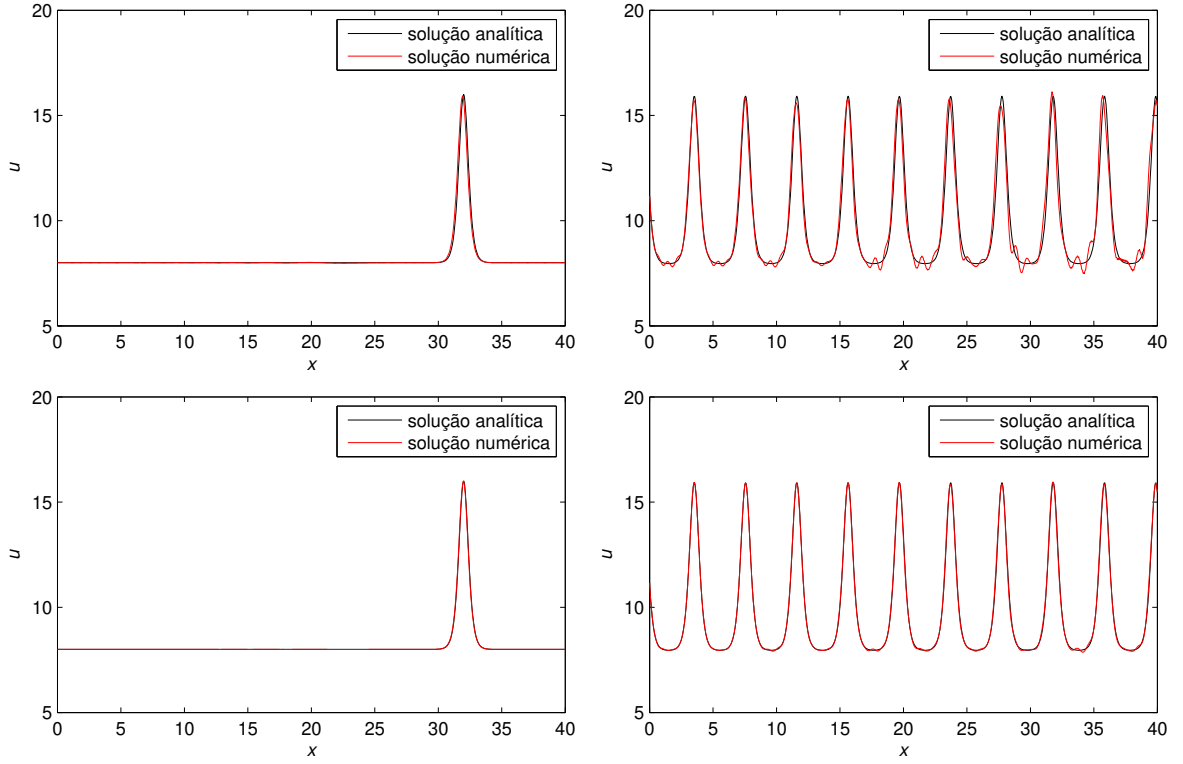


Figura 5.11: Soluções numéricas da equação de KdV no instante  $t = 0.5$  com  $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$  e  $\Delta x = 0.05$  (acima),  $\Delta x = 0.02$  (abaixo). Esquema implícito não-linear.

não-linear em  $\mathbf{u}^{k+1}$

$$F(\mathbf{u}^{k+1}) = 0, \quad k > 0, \quad (5.27)$$

e aplicamos o método de Newton (ver [28], por exemplo). A iteração Newton consiste em resolver o sistema linear

$$\begin{aligned} F'([\mathbf{u}^{k+1}]_i)[\Delta \mathbf{u}]_i &= -F([\mathbf{u}^{k+1}]_i) \\ [\mathbf{u}^{k+1}]_i &= [\mathbf{u}^{k+1}]_i + [\Delta \mathbf{u}]_i, \end{aligned} \quad (5.28)$$

onde  $F'(\mathbf{u}^{k+1})$  é a matriz jacobiana de  $F$  e é dada por

$$F'(\mathbf{u}^{k+1}) = \begin{pmatrix} 1 & a_2 & \frac{1}{4}h & & & \\ b_3 & 1 & a_3 & \frac{1}{4}h & & \\ -\frac{1}{4}h & b_4 & 1 & a_4 & \frac{1}{4}h & \\ & & & \vdots & & \\ & & -\frac{1}{4}h & b_{N-3} & 1 & a_{N-3} \\ & & -\frac{1}{4}h & b_{N-2} & 1 & \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-3 \times N-3},$$

onde

$$\begin{aligned} a_n &= -\frac{1}{2}(h - ru_{n+1}^k) + ru_{n+1}^{k+1}, \\ b_n &= \frac{1}{2}(h - ru_{n-1}^k) - ru_{n-1}^{k+1}. \end{aligned} \tag{5.29}$$

Apesar da necessidade de resolver um sistema não-linear em cada passo do tempo, o esquema de Furihata resolve a equação mais rapidamente que os esquemas anteriores, já que podem ser usados passos no tempo bem maiores para evoluir com a mesma precisão.

A Figura 5.11 mostra os resultados numéricos obtidos com o passo no tempo  $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ . Com o critério de parada de  $10^{-10}$ , o método de Newton convergiu em 4 passos em cada nível de tempo.

Concluimos esta seção observando que para a equação de KdV ser resolvida com uma precisão razoável exige-se uma malha espacial bem fina, além de uma relação muito pequena entre os passos no tempo e no espaço (a melhor relação mostrada nos gráficos é do esquema não-linear, sendo de  $10^{-2}$  para o período de evolução no tempo de 0.5).



# Capítulo 6

## Solução numérica do modelo

## experimental: abordagem tradicional

## versus otimização

Neste capítulo apresentamos três experimentos comparativos usando o modelo experimental para validar a proposta apresentada no Capítulo 4.

Os primeiros dois experimentos são feitos com a equação de Rossby-Obukhov, e o terceiro com a equação de KdV. Assim como cada experimento compreende vários testes numéricos, mostramos apenas os resultados mais expressivos e comentamos o comportamento dos outros.

### 6.1 Equação de Rossby-Obukhov

Primeiro analisamos o comportamento do modelo experimental com a equação de Rossby-Obukhov. Consideramos como o domínio regional o intervalo  $[1.8 \times 10^7, 2.4 \times 10^7]$   $m$  (6000  $km$  de comprimento) dentro do domínio periódico  $[0, L]$ .

Para formar a condição inicial usamos a solução analítica dada por

$$\psi(x, t) = \sum_{i=1}^{K=85} A_i \sin[k_i x + \phi_i], \quad x \in [1.8 \times 10^7, 2.4 \times 10^7]. \quad (6.1)$$

As 85 harmônicas, definidas pelos coeficientes  $A_i$  e  $\phi_i$ , correspondem à solução mostrada na Figura 3.1 e são iguais às usadas nos testes com a equação de Rossby-Obukhov no Capítulo 5. Tomaremos a velocidade como  $U = 30 \text{ m/s}$ .

## 6.1.1 Experimento 1

**Dados globais:** Vamos gerar os dados globais da seguinte forma:

- escolhemos a malha global como:

$$\frac{\Delta x_{glob} \quad \Delta t_{glob}}{300 \text{ km} \quad 2 \text{ horas}}$$

para o domínio espacial  $[0, L]$  e domínio temporal  $[0, 96]$  horas.

- sobre a malha geramos a solução analítica com 85 harmônicas;
- consideramos como os dados globais a solução gerada (mostrada na Figura 6.1).

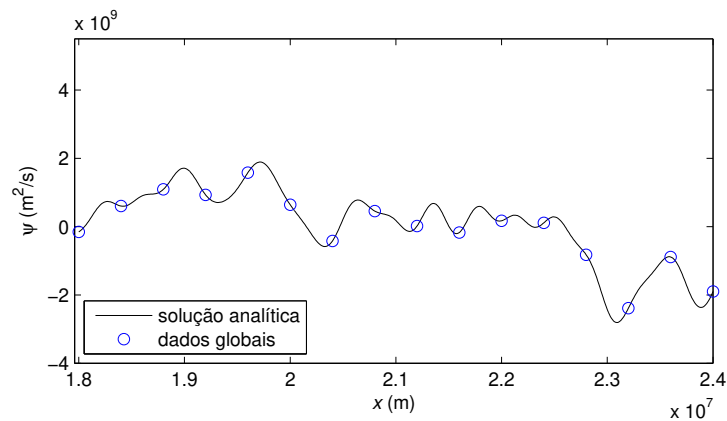


Figura 6.1: EXPERIMENTO 1. Dados globais para a equação de Rossby-Obukhov em  $t = 0$ .

**Condição de contorno:** Geramos a condição de contorno simplesmente interpolando linearmente os dados globais na malha do modelo experimental.

Primeiramente resolvemos o modelo experimental usando a abordagem tradicional. Escolhemos apenas dois esquemas – centrado no tempo e centrado no espaço, e Crank-Nicolson, – que mostraram o melhor comportamento quando resolvidos com contorno exato (apresentado no capítulo anterior). Os passos no tempo e no espaço para cada esquema foram escolhidos os maiores possíveis, mas de tal forma que a diminuição dos passos não apresenta variação significativa na solução do problema. Nas Figuras 6.2 e 6.3 podemos ver os gráficos da solução no instantes do tempo  $t = 24, 48$  e  $96$  horas, para os dois esquemas, respectivamente.

Podemos ver que em função dos erros no contorno provocados pela interpolação linear dos dados globais, a solução do modelo experimental diverge em pouco tempo da solução analítica,

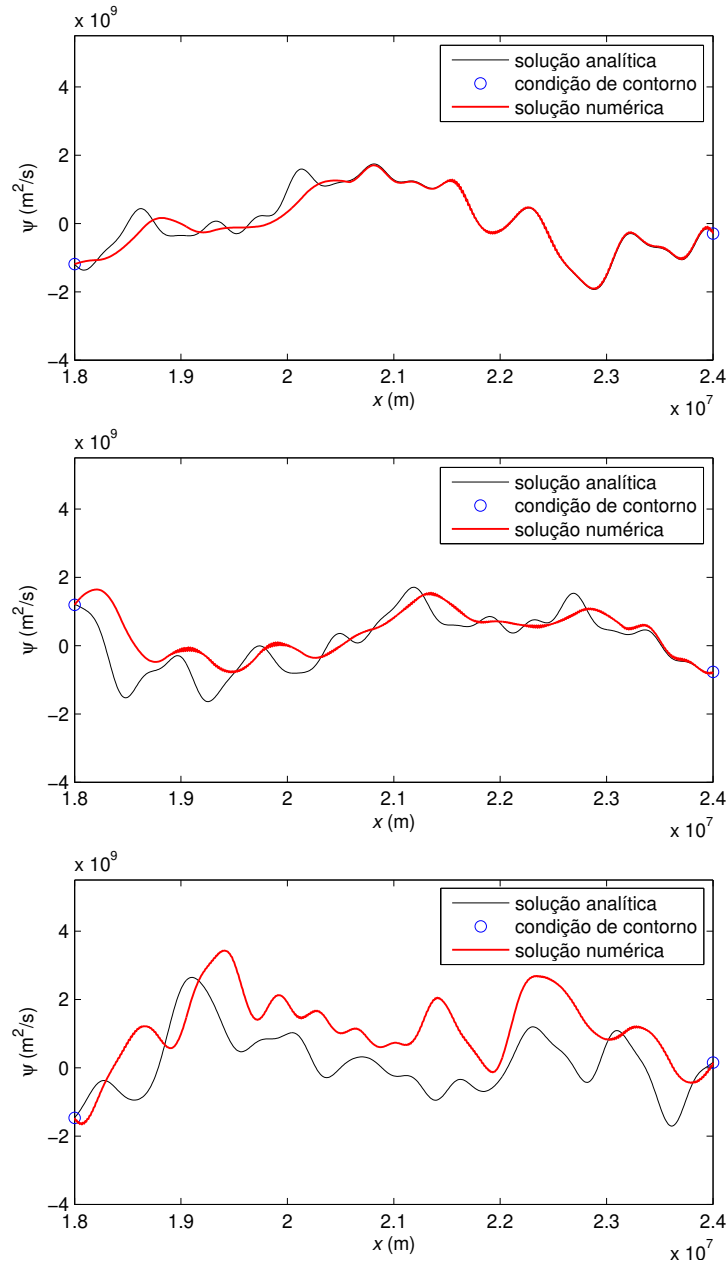


Figura 6.2: EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha:  $\Delta x = 10 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 333 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro). Tempo de CPU=0.13 s.

ou seja, quando não há mais influência da condição inicial. E quanto maior forem os erros no contorno, pior será a solução do modelo.

Agora vamos resolver o modelo experimental usando a abordagem por otimização, com os mesmos esquemas. Os passos no espaço e no tempo foram escolhidos para serem os maiores possíveis. A penalidade para a condição inicial é  $10^4$ , ou seja, tomamos a matriz de penalidade

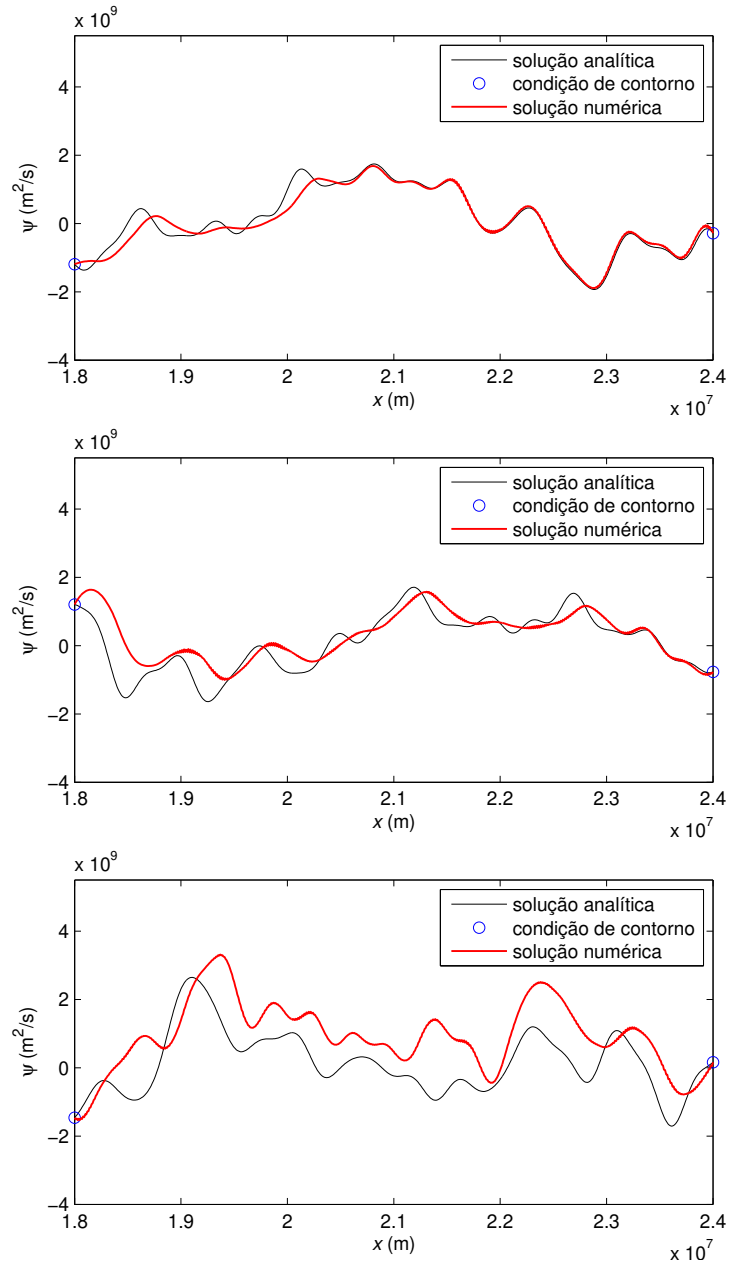


Figura 6.3: EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema Crank-Nicolson. Malha:  $\Delta x = 10 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 200 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro). Tempo de CPU=0.44 s.

$P$  como

$$P = \begin{pmatrix} 10^4 * I & & & \\ & I & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

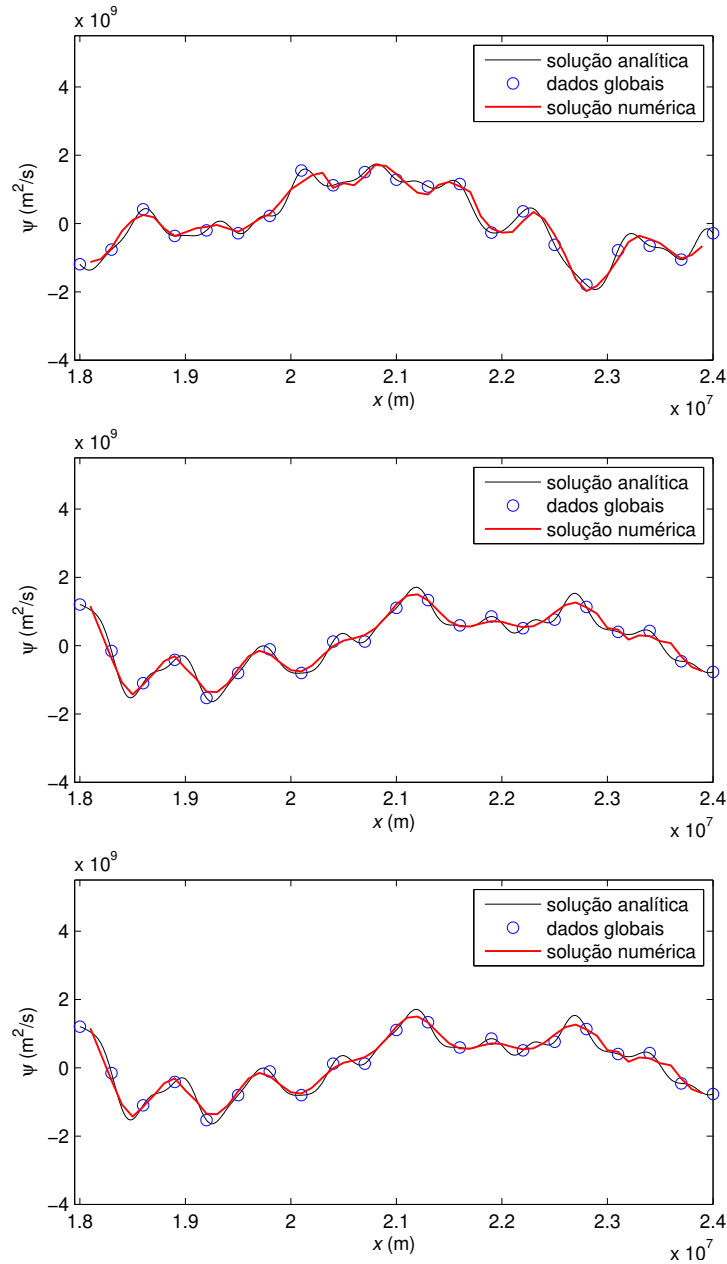


Figura 6.4: EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM DE OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha:  $\Delta x = 100 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 3600 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro). Tempo de CPU=0.63 s.

$I$  é a matriz identidade.

Observamos que a solução obtida pelo problema de otimização usando o esquema centrado no tempo e centrado no espaço, mostrada na Figura 6.4, apesar dos passos violarem a condição de estabilidade (5.12), apresenta um comportamento muito bom. E podemos notar também que para atingir a precisão aceitável na solução por otimização os passos no tempo e no espaço são

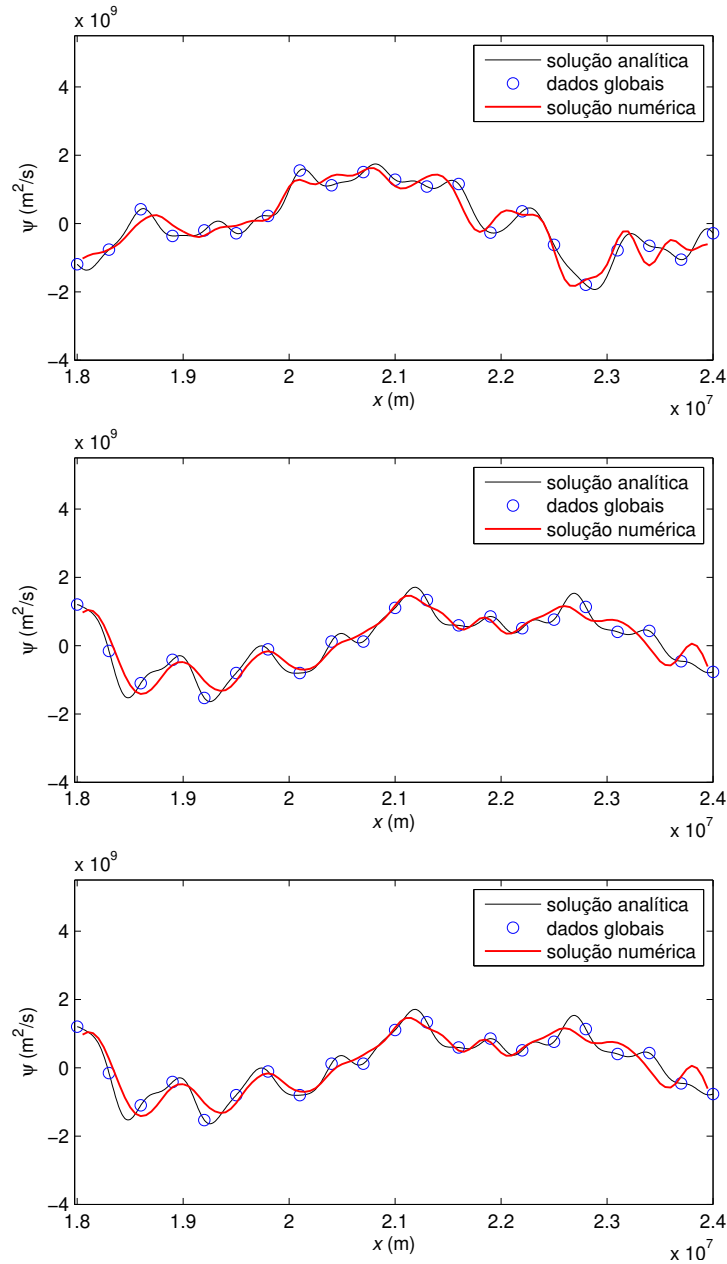


Figura 6.5: EXPERIMENTO 1. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema Crank-Nicolson. Malha:  $\Delta x = 50 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 1800 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro). Tempo de CPU=2.9 s.

significativamente maiores que os necessários para a solução tradicional com contorno exato. Na Tabela 6.1 resumimos os dados do Experimento 1.

Neste primeiro experimento mostramos que pequenos erros na condição de contorno podem levar a distorções fortes na solução. Porém, a utilização do método de otimização com os dados no interior do domínio fornece uma forma de evitar a sensibilidade da solução aos erros no

Tabela 6.1: EXPERIMENTO 1. CTCS - esquema centrado no tempo e centrado no espaço; C-N - esquema Crank-Nicolson.

	CTCS		C-N	
	Trad.	Otim.	Trad.	Otim.
$\Delta x$	10 <i>km</i>	100 <i>km</i>	10 <i>km</i>	50 <i>km</i>
$\Delta t$	333 <i>s</i>	3600 <i>s</i>	200 <i>s</i>	1800 <i>s</i>
Tempo CPU	0.13 <i>s</i>	0.63 <i>s</i>	0.44 <i>s</i>	2.9 <i>s</i>

contorno, permitindo obter uma solução boa.

### 6.1.2 Experimento 2

Nos testes anteriores, o modelo experimental não tem a capacidade de adicionar as escalas pequenas aos dados globais, pois a equação utilizada no modelo é a mesma utilizada para a geração de dados globais, de onde provém o contorno. Então, para simular um comportamento mais realista do modelo experimental do ponto de vista dos modelos regionais, tomaremos os dados globais e o contorno de forma diferente.

**Dados globais:** Queremos gerar dados globais mais realistas, ou seja, sem conter a informação sobre pequenas escalas. Para isso tomamos a solução analítica com apenas 25 harmônicas e, a partir dessa solução, geramos os dados globais na mesma malha do teste anterior, como mostra a Figura 6.6. Dessa forma, o menor tamanho da onda presente nos dados globais é de 1200 *km*.

**Condição de contorno:** Note que as primeiras harmônicas na solução da equação de Rossby-Obukhov (3.7) tem velocidade negativa, ou seja, as ondas de maior escala estão se movimentando da direita para esquerda nas nossas figuras. Por outro lado, todas as outras ondas de pequena escala propagam-se da esquerda para direita. Assim, como gostaríamos que o modelo experimental gerasse solução com a informação adicional (as ondas de pequena escala), que não está nos dados globais, definimos a condição de contorno como:

- exata à esquerda, ou seja, ao invés de usar os dados globais, usamos a solução analítica

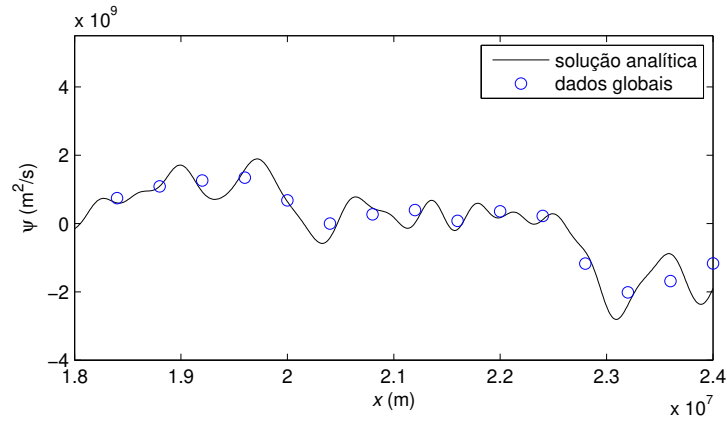


Figura 6.6: EXPERIMENTO 2. Dados globais para a equação de Rossby-Obukhov em  $t = 0$ .

com 85 harmônicas;

- à direita interpolamos os dados globais.

As Figuras 6.7 e 6.8 mostram o comportamento da solução do modelo resolvido com a abordagem tradicional. Observamos que, enquanto o erro introduzido no contorno direito se propaga dentro do domínio do modelo, a solução é bastante precisa. Mas assim que o erro atinge o contorno esquerdo, a solução perde o seu bom comportamento.

Repetimos o mesmo experimento usando a otimização. Se considerarmos apenas os dados globais e a condição inicial, o problema de otimização convergirá para a solução global, pois é uma solução válida da equação de Rossby-Obukhov com 25 harmônicas (Figura 6.9).

Ao introduzir os dados no contorno esquerdo com a mesma penalização utilizada para a condição inicial, ou seja, a matriz de penalidade tem a seguinte forma

$$P = \begin{pmatrix} 10^4 * I & & & & \\ & 10^4 * e_1 e_1^T + I & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 10^4 * e_1 e_1^T + I \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

a solução usando o esquema centrado no tempo e centrado no espaço praticamente coincide com a solução exata, como podemos ver na Figura 6.10. A solução usando o esquema Crank-Nicolson mostrada na Figura 6.11, por sua vez, não mostra um comportamento tão bom, mas é consideravelmente melhor que a solução por abordagem tradicional.

Na Tabela 6.2 podemos visualizar os dados sobre a malha e o tempo de solução do Experimento 2.



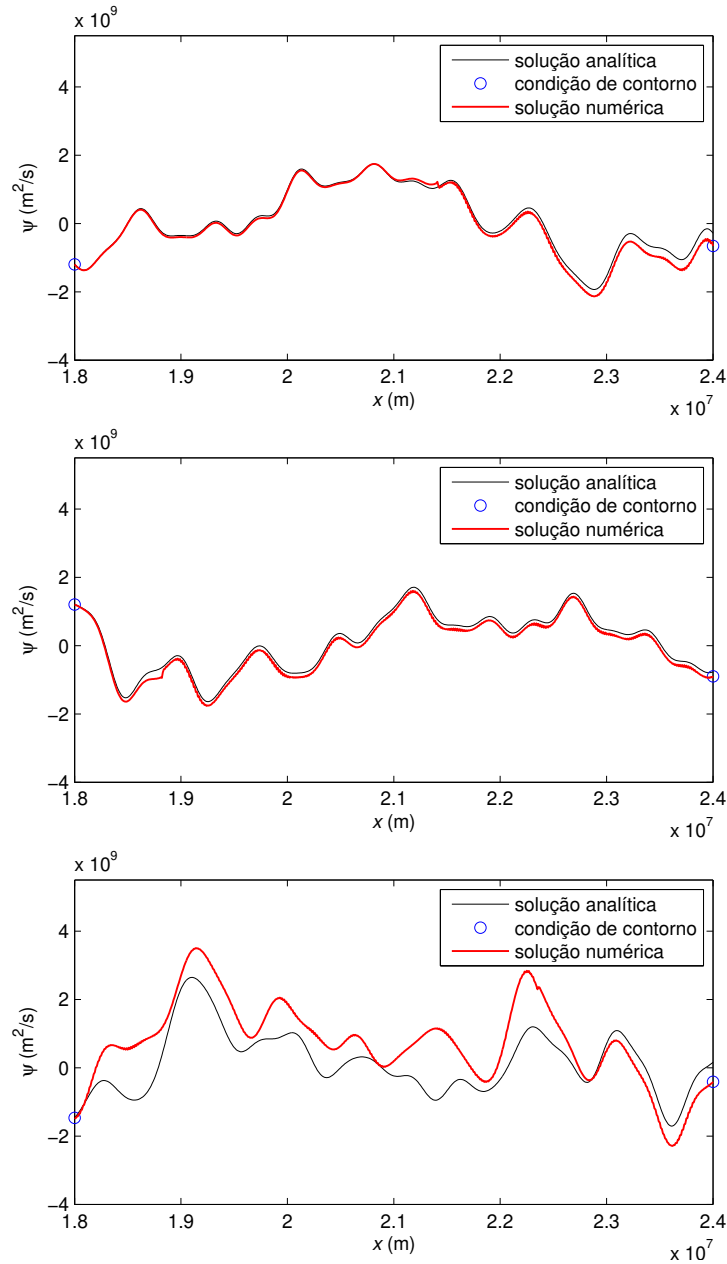


Figura 6.7: EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha:  $\Delta x = 10 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 333 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro). Tempo de CPU=0.14 s.

O segundo experimento tenta simular o comportamento mais realista dos dados globais. E novamente podemos concluir que os dados globais, mesmo não contendo toda a informação sobre os processo de menor escala, melhoram significativamente o comportamento da solução utilizando a otimização. Por último, apresentamos o resultado obtido com o problema de otimização sem usar os dados globais, apenas o contorno e a condição inicial (Figura 6.12).

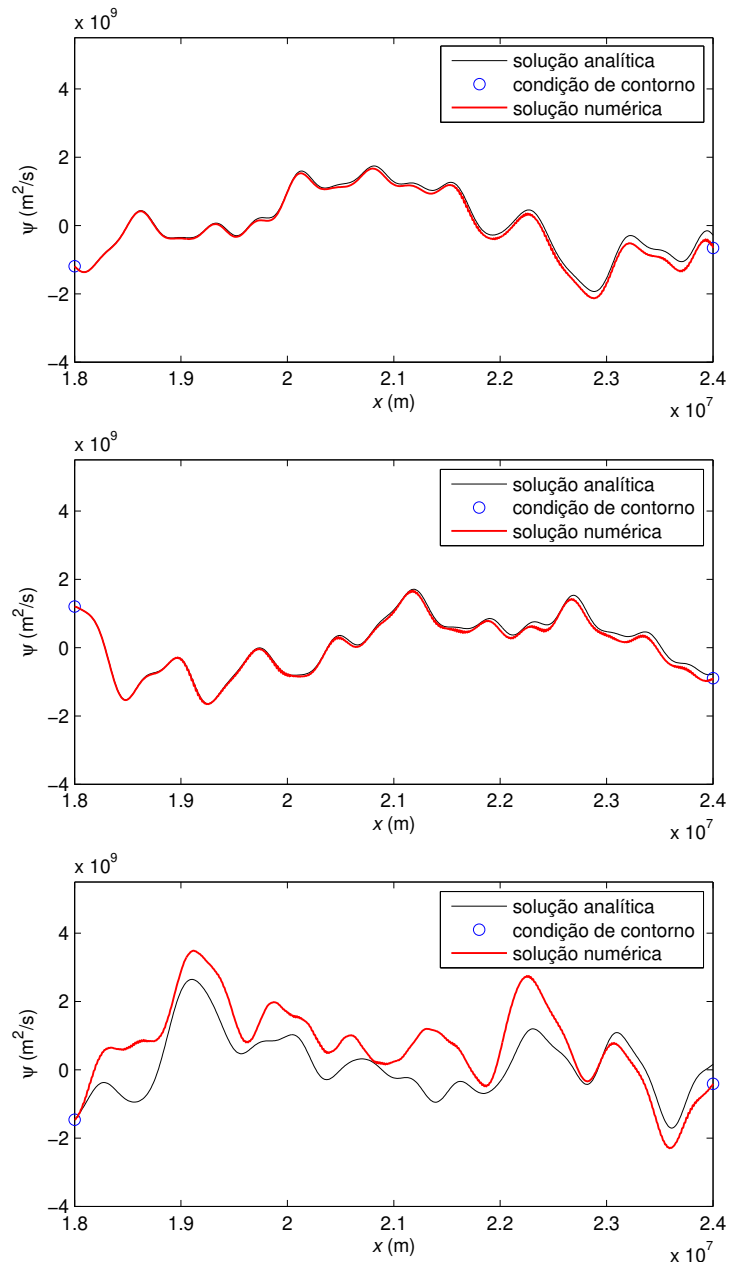


Figura 6.8: EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM TRADICIONAL. Esquema Crank-Nicolson. Malha:  $\Delta x = 10 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 200 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro). Tempo de CPU=0.48 s.

Percebemos que sem os pontos no interior, a solução numérica diverge da solução exata.

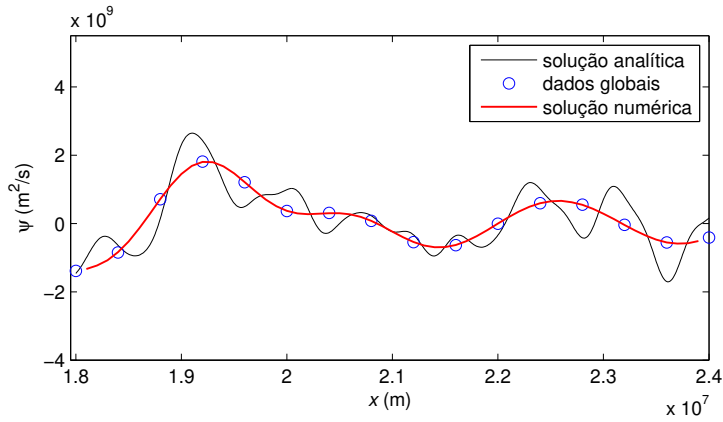


Figura 6.9: EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha:  $\Delta x = 100 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 3600 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 96$  horas, considerando apenas os dados globais. Tempo de CPU=0.64 s.

Tabela 6.2: EXPERIMENTO 2. CTCS - esquema centrado no tempo e centrado no espaço; C-N - esquema Crank-Nicolson.

	CTCS		C-N	
	Trad.	Otim.	Trad.	Otim.
$\Delta x$	10 km	70 km	10 km	50 km
$\Delta t$	333 s	2333 s	200 s	1800 s
Tempo CPU	0.14 s	1.91 s	0.48 s	2.86 s

## 6.2 Korteweg-de Vries

Já vimos que no caso da equação de Rossby-Obukhov, que é uma equação linear, os erros no contorno se propagam rapidamente para dentro do domínio, distorcendo significativamente a solução. Nessa seção mostramos o comportamento da equação não-linear de KdV.

Fizemos os testes com as duas soluções apresentadas na Subseção 3.3.2: onda cnoidal e sóliton. Como o sóliton é uma única onda, enquanto a solução cnoidal descreve infinitas ondas, tomamos domínios diferentes para as duas soluções. No caso de sóliton, obviamente que seamos visualizar a solução no domínio onde a onda está presente, por isso escolhemos o domínio espacial grande e como domínio temporal tomamos o tempo suficiente para a onda percorrer o

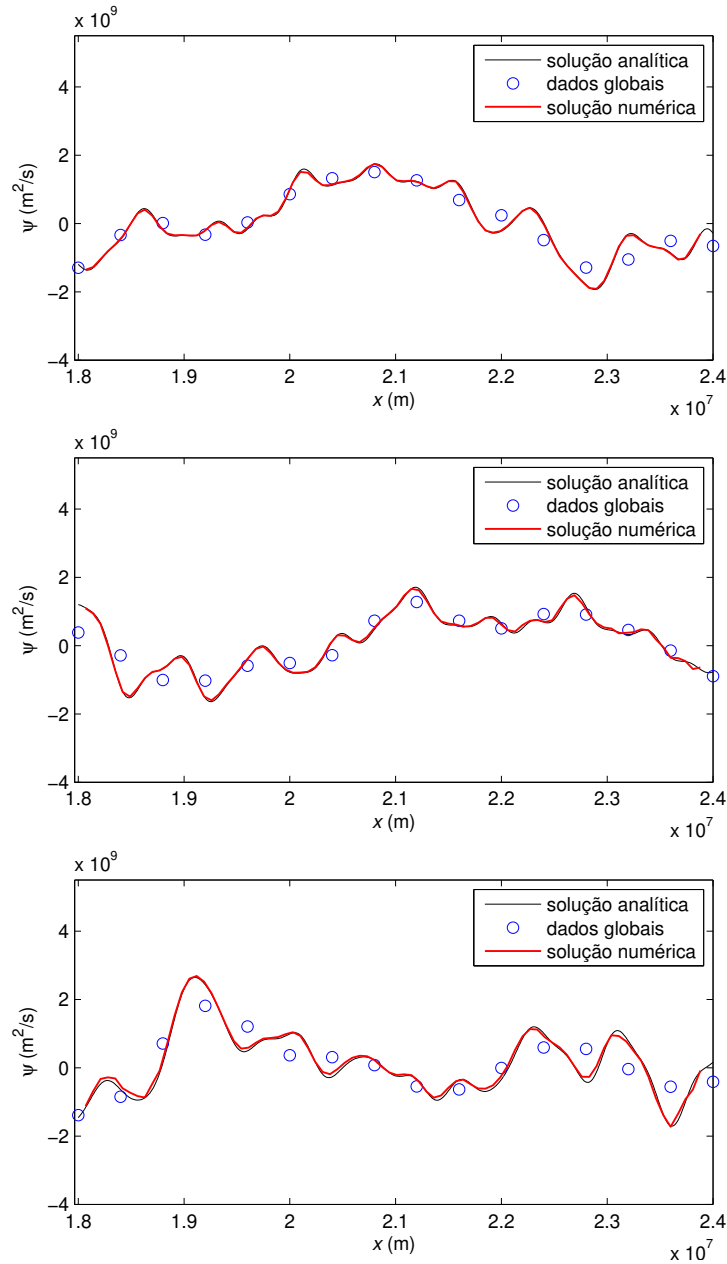


Figura 6.10: EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha:  $\Delta x = 70 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 2333 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro), considerando os dados globais e o contorno. Tempo de CPU=1.91 s.

domínio espacial. No caso de solução cnoidal, ao contrário de sóliton, analisamos o comportamento em um período longo de tempo, mas no domínio espacial pequeno.

Para gerar as condições iniciais e dados globais usamos as soluções analíticas (3.10) (onda cnoidal), com  $m = 0.995$ , e (3.11) (sóliton), usando os coeficientes  $a = b$  e  $\gamma = 2$ .

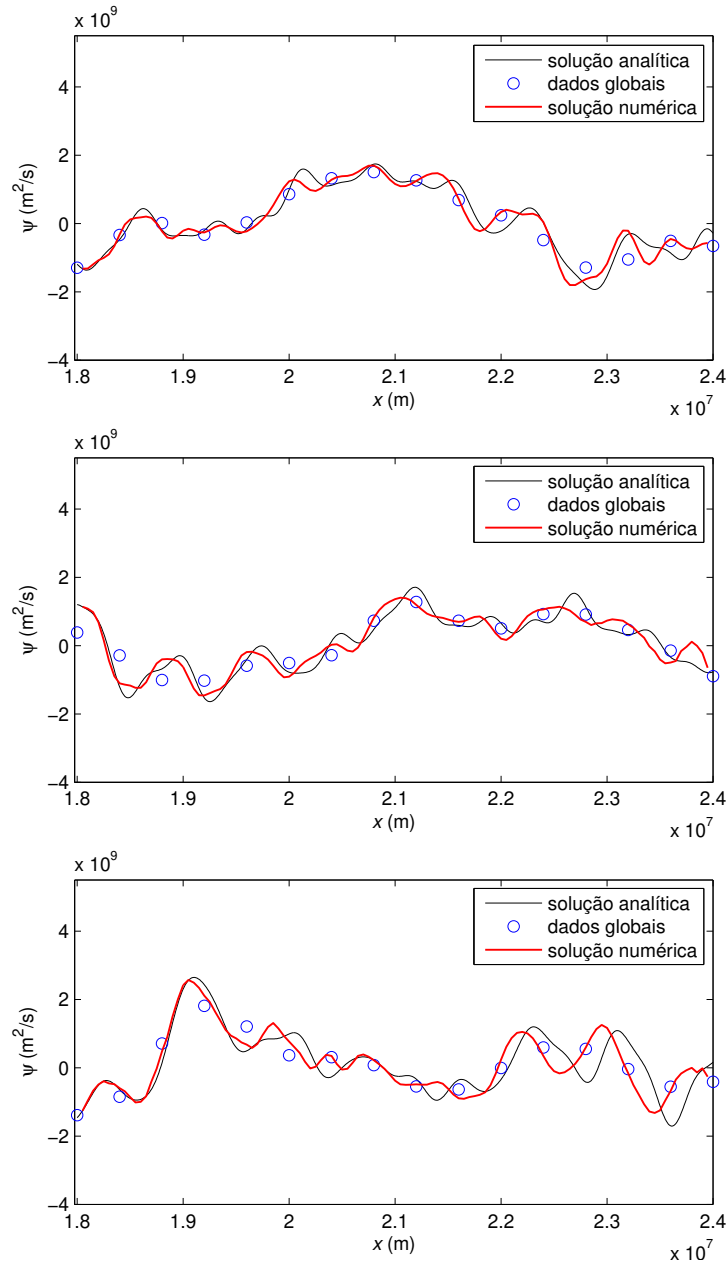


Figura 6.11: EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema Crank-Nicolson. Malha:  $\Delta x = 50 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 1800 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro), considerando os dados globais e o contorno. Tempo de CPU=2.86 s.

### 6.2.1 Experimento 3

Apresentamos os primeiros testes com a solução cnoidal da equação de KdV. Como domínio tomaremos o intervalo  $[0, 10]$  no espaço e  $[0, 5]$  no tempo.

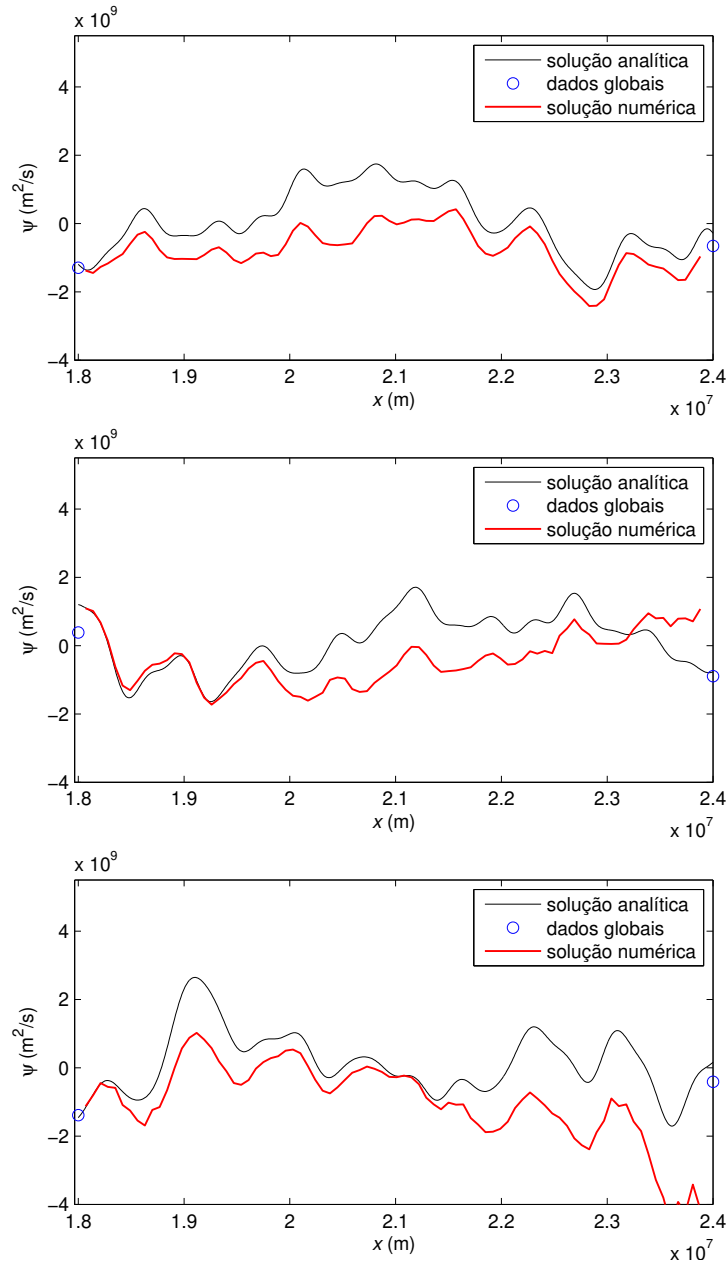


Figura 6.12: EXPERIMENTO 2. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Esquema centrado no tempo e centrado no espaço. Malha:  $\Delta x = 70 \text{ km}$ ,  $\Delta t = 2333 \text{ s}$ . Solução no tempo  $t = 24$  horas (primeiro gráfico),  $t = 48$  horas (segundo) e  $t = 96$  horas (terceiro), considerando apenas o contorno. Tempo de CPU=1.71 s.

**Dados globais:** Usando a mesma idéia do experimento 1, geramos os dados a partir da solução analítica em uma malha dada por

$$\begin{array}{cc} \Delta x_{glob} & \Delta t_{glob} \\ \hline 0.5 & 0.005 \\ \hline \end{array}$$

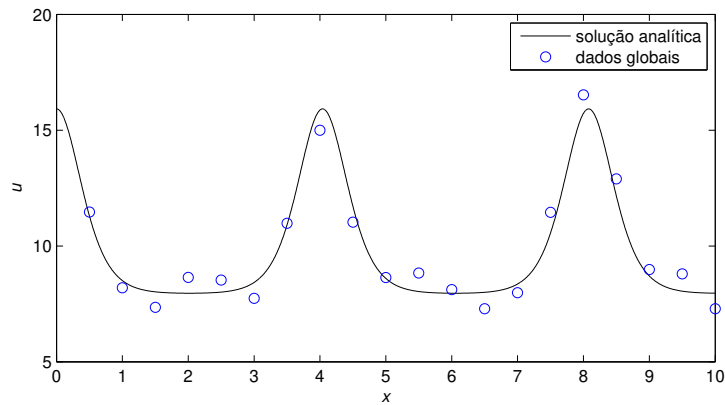


Figura 6.13: EXPERIMENTO 3. Dados globais para equação de KdV. Onda cnoidal.

e perturbamos o resultado em até 10%, como mostra a Figura 6.13.

Na resolução numérica do modelo experimental pela abordagem tradicional, usando apenas o contorno, as perturbações provenientes dos dados globais impossibilitam obter um solução aceitável da equação mesmo para um período de tempo muito curto, independentemente do esquema escolhido. Para o esquema implícito não-linear, que mostrou o melhor comportamento na solução com contorno exato, podemos observar na Figura 6.14, que as oscilações no instante de tempo  $t = 0.1$  já são significativas, e em  $t = 5$  a solução numérica é completamente caótica. É importante observar que na mesma malha,  $\Delta x = 0.02$  e  $\Delta t = 0.0002$ , a solução com contorno exato é muito próxima da solução analítica (ver Figura 5.11).

Tabela 6.3: EXPERIMENTO 3. Onda cnoidal.

	Esquema implícito não-linear	
	Trad.	Otim.
$\Delta x$	0.02	0.2
$\Delta t$	0.0002	0.005
Tamanho da malha	$500 \times 25000$	$50 \times 1000$
Tempo CPU	74.9 s	15.0 s

Aplicando a abordagem por otimização e usando a matriz de penalidade (6.2) do experimento 1, o melhor resultado é obtido pelo esquema implícito não-linear (Figura 6.15) na malha com

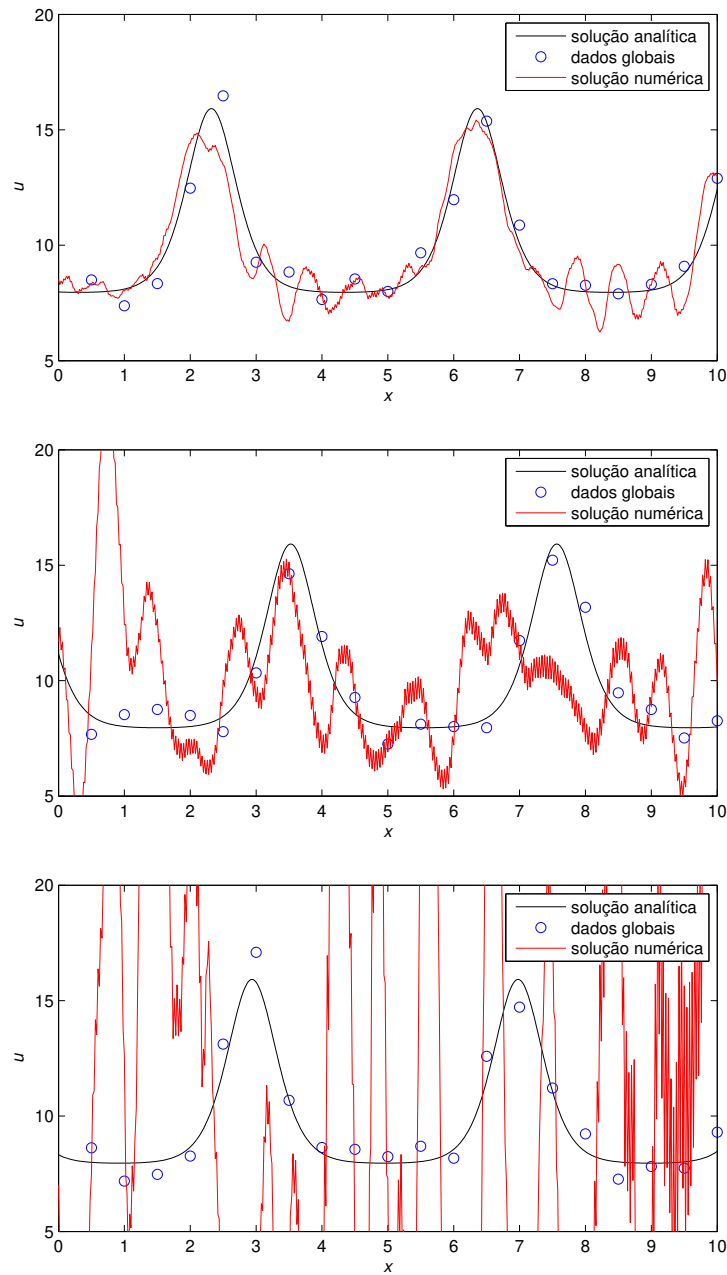


Figura 6.14: EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM TRADICIONAL. Onda cnoidal. Esquema implícito linear. Malha:  $\Delta x = 0.02$ ,  $\Delta t = 0.0002$ . Solução no tempo  $t = 0.1$  (primeiro gráfico),  $t = 0.5$  (segundo) e  $t = 5$  (terceiro). Tempo de CPU=74.9 s.

$\Delta x = 0.2$  e  $\Delta t = 0.005$ . Note que a malha é muito mais grossa que no caso da solução pela abordagem tradicional, mas mesmo assim foi necessário dividir o domínio do problema em blocos, cada um com tamanho de tempo igual a 1, que possibilita controlar a dimensão do problema numérico e, conseqüentemente, da memória de computador.



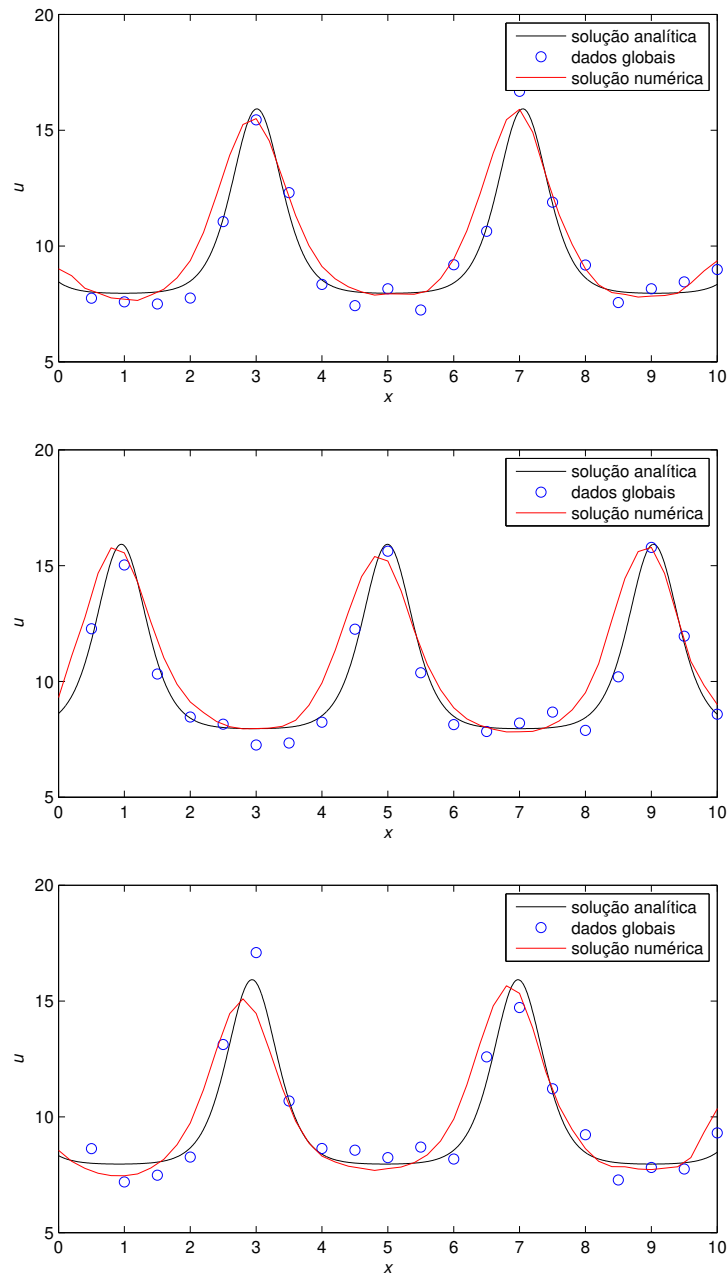


Figura 6.15: EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Onda cnoidal. Esquema implícito não-linear. Malha:  $\Delta x = 0.2$ ,  $\Delta t = 0.005$ . Solução no tempo  $t = 1$  (primeiro gráfico),  $t = 3$  (segundo) e  $t = 5$  (terceiro). Tempo de CPU=15.0 s.

Na Tabela 6.3 podemos visualizar os dados sobre a malha e o tempo de solução para a onda cnoidal.

É evidente a vantagem do método de otimização. Além de obter a solução, o tempo gasto pela CPU para resolver o problema de otimização é significativamente menor. Isso se deve

à dimensão do problema, que no caso de otimização é no mínimo 250 vezes menor, além da utilização de solução por blocos.

Por último realizamos os testes com sóliton. Escolhemos como domínio espacial o intervalo  $[-5, 35]$  e, conseqüentemente, o intervalo de tempo, no qual o sóliton percorre o domínio espacial é  $[0, 0.5]$ . Os dados globais no instante  $t = 0$  são mostrados na Figura 6.16.

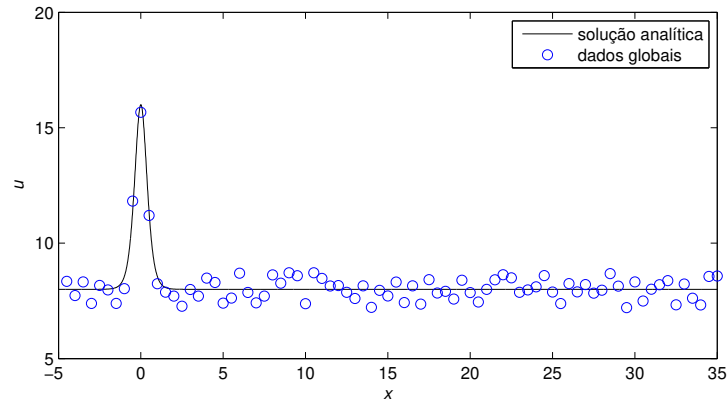


Figura 6.16: EXPERIMENTO 3.. Dados globais para equação de KdV. Sóliton.

Aplicando a abordagem tradicional com esquema implícito não-linear, usando os mesmos passos no espaço e no tempo do teste anterior com a onda cnoidal, podemos ver na Figura 6.17 que os resultados apresentam as oscilações crescentes introduzidas pelos erros no contorno, enquanto a solução por otimização é regularizada por dados globais e não apresenta erros significativos.

Na Tabela 6.4 apresentamos os dados sobre a malha e o tempo de solução para sóliton.

Tabela 6.4: EXPERIMENTO 3. Sóliton

	Esquema implícito não-linear	
	Trad.	Otim.
$\Delta x$	0.02	0.2
$\Delta t$	0.0002	0.0025
Tamanho da malha	$2000 \times 2500$	$200 \times 200$
Tempo CPU	19.1 s	14.9 s

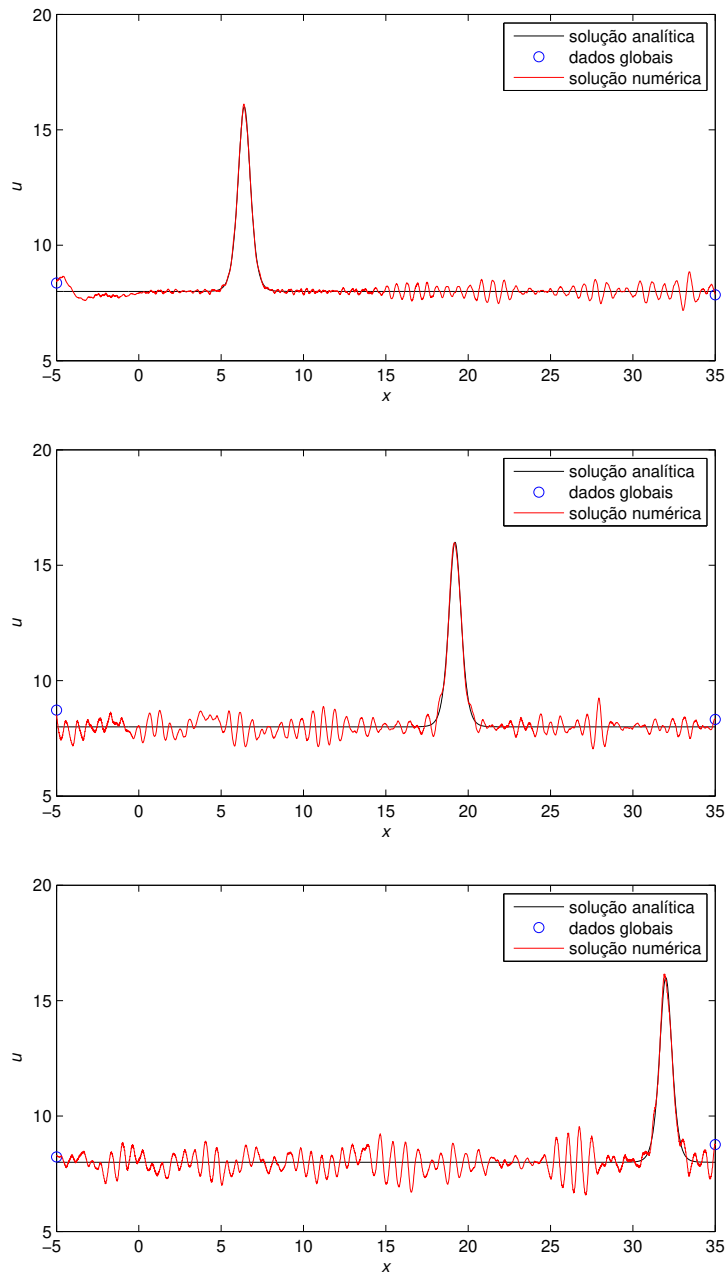


Figura 6.17: EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM TRADICIONAL. Sóliton. Esquema implícito linear. Malha:  $\Delta x = 0.02$ ,  $\Delta t = 0.0002$ . Solução no tempo  $t = 0.1$  (primeiro gráfico),  $t = 0.3$  (segundo) e  $t = 0.5$  (terceiro). Tempo de CPU=19.1 s.

O experimento 3 mostra claramente que a abordagem por otimização possibilita obter a solução que não é afetada por erros aleatórios presentes nos dados. Utilizando a solução por blocos é possível evoluir o modelo por um período de tempo qualquer, como mostram os testes com a onda cnoidal. A escolha do tamanho de bloco depende do potencial computacional, para um

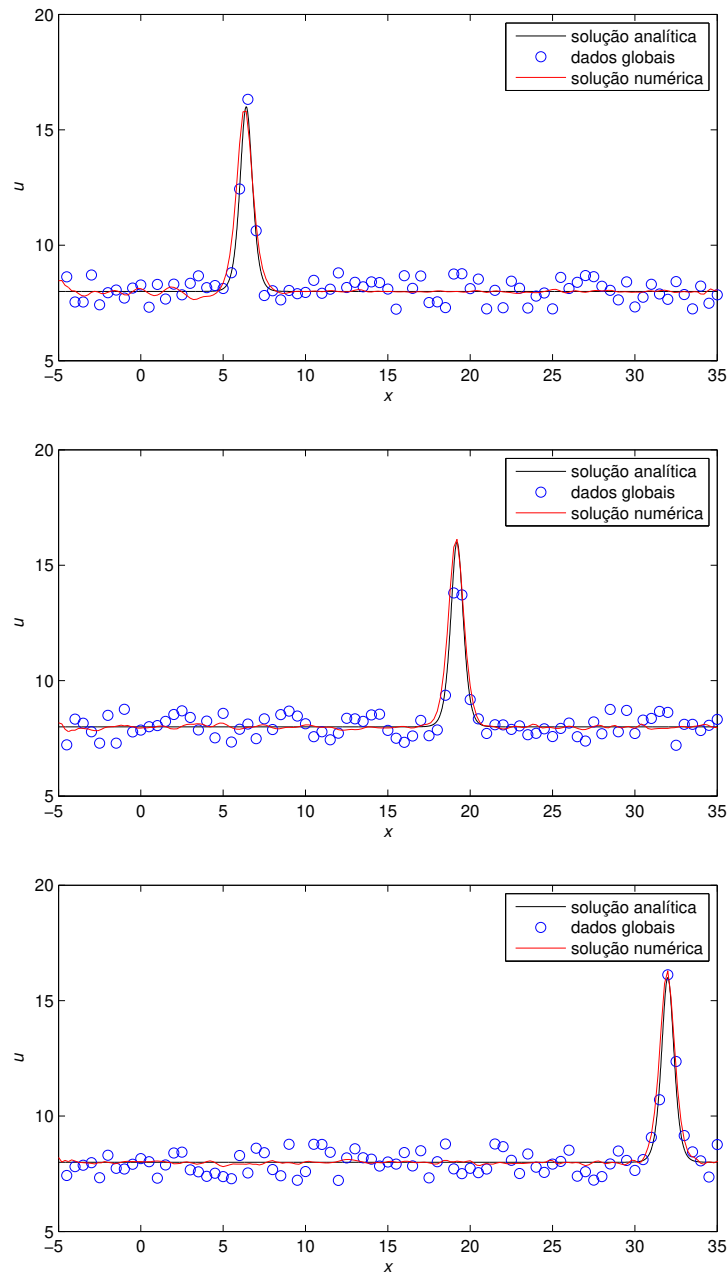


Figura 6.18: EXPERIMENTO 3. ABORDAGEM POR OTIMIZAÇÃO. Sóliton. Esquema implícito não-linear. Malha:  $\Delta x = 0.2$ ,  $\Delta t = 0.0025$ . Solução no tempo  $t = 0.1$  (primeiro gráfico),  $t = 0.3$  (segundo) e  $t = 0.5$  (terceiro). Tempo de CPU=14.9 s.

computador potente, com grande quantidade de memória, é possível aumentar o intervalo de tempo de cada bloco, aproveitando mais as informações fornecidas pelo modelo global ou pelas medições. O tamanho de bloco também determina a velocidade de convergência do problema de otimização. E o seu tamanho ótimo depende de vários fatores, como configuração do com-

putador, qualidade de implementação, linguagem de programação utilizada, entre outros.

# Capítulo 7

## Conclusões e considerações finais

Nesta tese consideramos o problema de encontrar a solução de um problema do tipo  $h(u) = 0$ ,  $u \in \Omega$ , que melhor se ajusta a um conjunto de dados representados por valores aproximados de  $u$  em pontos do domínio  $\Omega$ . A variável  $u$  é uma função definida em  $\Omega$ , que é um conjunto fechado de  $\mathbb{R}^{\dim(\Omega)}$ . Consideramos o problema na forma discretizada, de maneira que  $u$  pode ser considerado um vetor em um espaço de dimensão finita igual ao número de pontos da discretização. Dessa maneira, trata-se do problema de otimização definido por

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & \|u - u_{\text{dado}}\| \\ \text{s.a} \quad & h(u) = 0, \end{aligned}$$

Nossa primeira tentativa de resolver o problema foi por meio do Lagrangiano Aumentado, usando o programa Algencan ([1, 2]). Através de métodos de Lagrangiano Aumentado, o problema original é resolvido como uma seqüência de problemas de otimização irrestritos, em que a função objetivo inclui informação sobre as restrições. Essa abordagem é muito adequada para otimização, mas, em geral, para problemas de grande porte em que a informação da Jacobiana é mal estruturada, e portanto, as técnicas de esparsidade para resolução de sistemas lineares são difíceis de serem empregadas. A desvantagem do método de Lagrangiano Aumentado nesse caso é que a velocidade final de convergência é fraca. No caso do nosso problema, o sistema não-linear proveniente das condições de otimalidade é bem estruturado e a aplicação dos métodos de Newton e quase-Newton para sua resolução se torna bastante vantajosa ([27]). O método de Newton, utilizado no caso de EDPs lineares, é substituído, devido a seu alto custo computacional, por uma variação quase-Newton radical, no caso de EDPs não-lineares, que consiste na eliminação dos termos dependentes das restrições na submatriz superior-esquerda do sistema Newtoniano.

Existem diversas outras formas de lidar com problemas deste tipo. A mais comum consiste em deduzir, a partir dos dados, condições iniciais e de contorno adequadas, e resolver o problema de valor inicial ou de contorno com essas condições usando métodos usuais em EDP. Nosso ponto de vista é que grande parte da informação relativa aos dados no interior no domínio pode ser perdida neste processo.

Outra forma bastante geral de lidar com o problema é considerar que as incógnitas não são os valores de  $u$  em todos os pontos da malha, mas apenas aqueles valores no contorno ou iniciais que servem para a resolução do sistema de EDPs. Desta maneira, o número de variáveis é consideravelmente menor, e o gradiente da função objetivo em relação às variáveis pode ser obtido com técnicas relativas ao problema adjunto. A resolução da equação adjunta serve, essencialmente, para obter as derivadas da função objetivo e, modernamente, consideram-se formas de diferenciação automática, mais precisamente do modo reverso de diferenciação [4, 14]. Esta aproximação é muito bem considerada na literatura, embora os seguintes inconvenientes tenham sido detectados:

- (a) A técnica de diferenciação via adjunta requer considerável memória auxiliar, portanto é possível que grande parte da memória poupada pelo número de variáveis seja usada no cômputo das derivadas.
- (b) A equação adjunta fornece as derivadas do problema contínuo, que podem ser (talvez marginalmente) diferentes das derivadas do problema discretizado.

Nesta tese apontamos que um inconveniente fundamental é que os métodos baseados na consideração das condições iniciais ou de contorno como variáveis independentes força o emprego de esquemas de discretização estáveis para avaliação da função objetivo e o cálculo do gradiente. A principal observação para a abordagem desta tese é, em contraste, que nenhuma preocupação relativa à estabilidade dos esquemas de discretização é necessária.

A estabilidade dos esquemas de discretização depende de dois fatores: o grau de “implicitude” do esquema e o tamanho relativo do passo temporal em relação ao espacial. Brevemente, a estabilidade cresce com o grau de “implicitude” e decresce com o aumento de tamanho do passo temporal. Ambos processos acarretam custos computacionais em termos de tempo e de memória.

Portanto, é interessante que se possa abrir mão radicalmente de ambos requisitos, sobretudo

do tamanho relativo do passo temporal. Nesta tese mostramos que, para o problema que consideramos, os critérios de estabilidade associados tradicionalmente aos problemas de Cauchy-Dirichlet são irrelevantes. Isto, possibilita o uso de esquemas explícitos (centrados) com passos temporais grandes.

As razões para este fenômeno não são difíceis de entender se pensa-se, primeiro, que um esquema explícito instável para determinado problema de valores iniciais se converte em implícito (portanto, estável) para o mesmo problema se a condição inicial é substituída por uma condição “final” e o problema é olhado de trás para frente. Logo, a estabilidade, ou falta dela, é uma propriedade não apenas do esquema, mas da sua associação com condições iniciais ou de contorno. No nosso caso, temos condições “interiores” e nada é mais natural, então, que existam considerações de estabilidade diversas.

Em termos de álgebra linear e otimização, podemos pensar que o problema  $h(u) = 0$  (sem condições) é um sistema de equações indeterminado, cuja aproximação linear  $Au = b$  é, também, um sistema indeterminado. Quando colocamos condições iniciais ou finais, ou de contorno neste sistema, o que fazemos é transformá-lo em um sistema quadrado de equações. O problema é que este sistema quadrado pode ser bem ou mal condicionado. O caso em que sistema é bem condicionado corresponde aos esquemas ditos estáveis e o caso em que é mal condicionado, aos instáveis. Claramente, o bom ou o mal condicionamento depende também das variáveis fixas (condições) pois a matriz  $A$  pode conter submatrizes quadradas bem-condicionadas e mal-condicionadas.

Agora, quando temos dados em “todos” os pontos no domínio, transferimos o condicionamento à melhor situação possível. O problema de minimizar  $\|u - u_{dados}\|^2$  sujeito a  $Au = b$  somente é mal condicionado se todas as submatrizes quadradas de  $A$  são mal-condicionadas. Isto explica por que, em nosso caso, nunca encontramos mal-condicionamento e podemos sempre trabalhar com esquemas que, do ponto de vista do problema clássico de Cauchy, são instáveis.

Na tese ilustramos este fenômeno em diferentes problemas lineares (a equação de calor e a equação de Rossby-Obukhov) e não-lineares (a equação de KdV), de maneira que foi possível obter a solução do problema com a velocidade compatível com uma única evolução direta usando métodos usuais em EDP, sem perder a precisão na solução.



# Referências

- [1] R. Andreani, E. G. Birgin, J. M. Martínez, and M. L. Schuverdt. On augmented lagrangian methods with arbitrary lower-level constraints. *SIAM Journal on Optimization*, 18:1286–1309, 2007. Webpage: <http://www.ime.unicamp.br/martinez/technicalreports.html>.
- [2] R. Andreani, E. G. Birgin, J. M. Martínez, and M. L. Schuverdt. Augmented lagrangian methods under the constant positive linear dependence constraint qualification. *Mathematical Programming*, 111:5–32, 2008.
- [3] M. Benzi, G. H. Golub, and J. Liesen. Numerical solution of saddle point problems. *Acta Numerica*, 14:1–137, 2005.
- [4] E. G. Birgin and Yu. Evtushenko. Automatic differentiation and spectral projected gradient methods for optimal control problems. *Optimization methods and software*, 10:20–42, 1998.
- [5] E. G. Birgin and J. M. Martínez. Improving ultimate convergence of an augmented lagrangian method. *Optimization methods and software*, 23:177–195, 2008.
- [6] A. Bohé. The existence of supersensitive boundary-value problems. *Methods and Applications of Analysis*, 3(3):318–334, 1996.
- [7] M. Cristina C. Cunha. *Métodos Numéricos*. Editora da Unicamp, 2000.
- [8] B. Denis, R. Laprise, and D. Caya. Sensitivity of a regional climate model to the resolution of the lateral boundary conditions. *Climate Dynamics*, 20(2–3):107–126, 2003.
- [9] E. P. Diaconescu, R. Laprise, and L. Sushama. The impact of lateral boundary data errors on the simulated climate of a nested regional climate model. *Climate Dynamics*, 28(4):333–350, 2007.

- [10] R. M. Errico. What is an adjoint model? *Bull. Americ. Met. Soc.*, 78:2577–2591, 1997.
- [11] L. Ferreira-Mendonça, V. L. R. Lopes, and J. M. Martínez. Quasi-Newton acceleration for equality constrained minimization. *Computational Optimization and Applications*, 40(3):373–388, 2008.
- [12] M. Fisher, J. Nocedal, Y. Tremolet, and S. J. Wright. Data assimilation in weather forecasting: A case study in PDE-constrained optimization. *Optimization and Engineering*, 2008. Published online <http://www.springerlink.com/content/e47441q543236t31/>.
- [13] D. Furihata. Finite difference schemes for  $\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\alpha \frac{\delta g}{\delta u}$  that inherit energy conservation or dissipation property. *Journal of Computational Physics*, 156:181–205, 1999.
- [14] A. Griewank. On automatic differentiation. In *Mathematical Programming: Recent Developments and Applications*, pages 83–108. Kluwer Academic Publishers, 1989.
- [15] D. A. Griffin and K. R. Thomson. The adjoint method for data assimilation used operationally for shelf circulation. *J. Geophys. Res.*, 101(C2):3457–3477, 1996.
- [16] R. Grimshaw. Korteweg-de Vries equation. In A. C. Scott, editor, *Encyclopedia of Nonlinear Science*, pages 504–511. Taylor and Francis, 2004.
- [17] W. Hereman. Shallow water waves and solitary waves. In R. A. Meyers, editor, *Encyclopedia of Complexity and Systems Science*,. Springer Verlag, Heibelberg, Germany, 2008.
- [18] D.J Korteweg and H. de Vries. On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal and on a new type of long stationary waves. *Philosophical Magazine*, 36:422–443, 1895.
- [19] C. B. Laney. *Computational Gasdynamics*. Cambridge University Press, 1998.
- [20] F. X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations. *Teoretical Aspects*, 38A:97–110, 1986.
- [21] R. J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Birkhauser Verlag, 1992.
- [22] P. W. Li. On the numerical study of the KdV equation by the semi-implicit and leap-frog method. *Computer Physics Communications*, 88(2-3):121–127, 1995.

- [23] A. C. Lorenc. Modelling of error covariances by 4D-Var data assimilation. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 129:3167–3182, 2003.
- [24] A. C. Lorenc and T. Payne. 4D-Var and the butterfly effect: Statistical four-dimensional data assimilation for a wide range of scales. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 133:607–614, 2007.
- [25] C. Lu and G. L. Browning. Four-dimensional variational data assimilation for limited-area models: lateral boundary conditions, solution uniqueness and numerical convergence. *J. Atmos. Sci.*, 57:1341–1353, 2000.
- [26] J. C. López-Marcos and J. M. Sanz-Serna. Stability and convergence in numerical analysis iii: linear investigation of nonlinear stability. *IMA J. Numer. Anal.*, 8(1):71–84, 1988.
- [27] J. M. Martínez. Practical quasi-Newton methods for solving nonlinear systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 124:97–122, 2000.
- [28] J. M. Martínez and S. A. Santos. *Métodos computacionais de otimização*. XX Colóquio Brasileiro de Matemática. IMPA, 1995.
- [29] V. I. Mazhukin, P. P. Matus, and I. A. Mikhailyuk. Finite-difference schemes for the Korteweg-de Vries equation. *Differential Equations*, 36(5):789–797, 2000.
- [30] A. M. Obukhov. On the question of the geostrophic wind. *Izv. Akad. Nauk. SSSR Ser. Geograf.-Geofiz.*, 4:281–306, 1949.
- [31] K. Pen-Yu and J. M. Sanz-Serna. Convergence of methods for the numerical solution of the Korteweg-de Vries equation. *IMA J. Numer. Anal.*, 1(2):215–221, 1981.
- [32] F. Pisnitchenko, I. A. Pisnichenko, J. M. Martínez, and S. A. Santos. Continuous dynamic assimilation of the inner region data in hydrodynamics modelling: optimization approach. *Nonlinear Processes in Geophysics*. to appear.
- [33] F. Rabier. Overview of global data assimilation developments in numerical weather prediction centres. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 131:3215–3233, 2005.
- [34] E. E. Rosinger. Stability and convergence for non-linear difference schemes are equivalent. *IMA J. Applied Mathematics*, 26(2):143–149, 1980.

- [35] Y. Sasaki. An objective analysis based on the variational method. *J. Meteorol. Soc. Japan*, 36:738–742, 1958.
- [36] Y. Sasaki. Some basic formalisms in numerical variational analysis. *Mon. Wea. Rev.*, 98:875–883, 1970.
- [37] A. C. Scott, F. Y. F. Chu, and D. W. Mclaughlin. Soliton: A new concept in applied science. *Proceedings of the IEEE*, 61(10):1443–1482, 1973.
- [38] J. C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. SIAM, second edition edition, 2004.
- [39] J. W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations: Conservation Laws and Elliptic Equations*. Springer Verlag, 1995.
- [40] J. W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Springer Verlag, 1995.
- [41] Z. Wang, K. Droegemeier, and L. White. The adjoint Newton algorithm for large-scale unconstrained optimization in meteorology applications. *Comput. Optim. Appl.*, 10(3):283–320, 1998.
- [42] X. Zou and Y.-H. Kuo. Rainfall assimilation through an optimal control of initial and boundary conditions in limited-area mesoscale mode. *Mon. Wea. Rev.*, 124:2859–2882, 1996.