



# Trabalho 1 de Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II

**Ariel Nogueira Kovaljski**

Nova Friburgo, XX de setembro de 2020

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução . . . . .</b>	<b>3</b>
1.1	A Equação de Advecção-Difusão . . . . .	3
1.2	Método dos Volumes Finitos . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Desenvolvimento . . . . .</b>	<b>7</b>
2.1	Condições Inicial e de Contorno . . . . .	7
2.2	Consistência, Convergência e Estabilidade . . . . .	8
2.2.1	Consistência . . . . .	8
2.2.2	Convergência . . . . .	8
2.2.3	Estabilidade . . . . .	9
2.3	Programação . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Resultados . . . . .</b>	<b>12</b>
3.1	Resultados para variações de $L_x$ . . . . .	12
3.2	Resultados para variações de $nx$ . . . . .	15
3.3	Resultados para variações de $\bar{u}$ . . . . .	16
3.4	Resultados para variações de $\alpha$ . . . . .	17
3.5	Resultados para $\bar{u} = 0$ e variações de $\alpha$ . . . . .	20
3.6	Resultados para variações de $c_{\text{ini}}$ . . . . .	22
3.7	Resultados para variações de $c_{\text{inj}}$ . . . . .	23
3.8	Resultados para variações de $t_{\text{final}}$ . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Conclusão . . . . .</b>	<b>28</b>
<b>5</b>	<b>Código Computacional . . . . .</b>	<b>29</b>

# Lista de Figuras

1.1	Efeitos difusivos e advectivos observados no despejo de esgoto no Rio Bengala . . . . .	3
1.2	Partição do domínio da solução . . . . .	4
1.3	Posições ao redor do $i$ -ésimo volume da malha . . . . .	4
3.1	$L_x = 50\text{m}$ . . . . .	13
3.2	$L_x = 100\text{m}$ . . . . .	13
3.3	$L_x = 200\text{m}$ . . . . .	14
3.4	$L_x = 400\text{m}$ . . . . .	14
3.5	$nx = 25$ . . . . .	15
3.6	$nx = 50$ . . . . .	15
3.7	$nx = 100$ . . . . .	16
3.8	$\bar{u} = 2 \times 10^{-2}\text{m/s}$ . . . . .	16
3.9	$\bar{u} = 2 \times 10^{-1}\text{m/s}$ . . . . .	17
3.10	$\bar{u} = 2 \times 10^0\text{m/s}$ . . . . .	17
3.11	$\alpha = 2.0 \times 10^{-4}$ . . . . .	18
3.12	$\alpha = 2.0 \times 10^{-2}$ . . . . .	18
3.13	$\alpha = 2.0 \times 10^{-1}$ . . . . .	19
3.14	$\alpha = 2.0 \times 10^0$ . . . . .	19
3.15	$\bar{u} = 0$ & $\alpha = 2.0 \times 10^{-4}$ . . . . .	20
3.16	$\bar{u} = 0$ & $\alpha = 2.0 \times 10^{-2}$ . . . . .	20
3.17	$\bar{u} = 0$ & $\alpha = 2.0 \times 10^{-1}$ . . . . .	21
3.18	$\bar{u} = 0$ & $\alpha = 2.0 \times 10^0$ . . . . .	21
3.19	$c_{\text{ini}} = 0.5\text{mol/m}^3$ . . . . .	22
3.20	$c_{\text{ini}} = 1.0\text{mol/m}^3$ . . . . .	22
3.21	$c_{\text{ini}} = 2.0\text{mol/m}^3$ . . . . .	23
3.22	$c_{\text{inj}} = 0.75\text{mol/m}^3$ . . . . .	24
3.23	$c_{\text{inj}} = 1.5\text{mol/m}^3$ . . . . .	24
3.24	$c_{\text{inj}} = 3.0\text{mol/m}^3$ . . . . .	25
3.25	$t_{\text{final}} = 150\text{s}$ . . . . .	25
3.26	$t_{\text{final}} = 300\text{s}$ . . . . .	26
3.27	$t_{\text{final}} = 600\text{s}$ . . . . .	26
3.28	$t_{\text{final}} = 900\text{s}$ . . . . .	27

# 1. Introdução

Neste trabalho foi implementado um método computacional de maneira a resolver a equação de Advecção-Difusão de forma numérica.

Para melhor entender o desenvolvimento, é necessária introdução de alguns conceitos-chave utilizados.

## 1.1 A Equação de Advecção-Difusão

A equação de advecção-difusão possibilita a solução de problemas envolvendo variações espaciais e temporais da concentração de uma substância escoando em um fluido. Um exemplo bastante didático consiste no despejo de esgoto em um afluente: o contaminante sofrerá efeitos difusivos — concentrando-se ao redor da saída — e efeitos advectivos — sendo carregado no sentido da correnteza.



Figura 1.1: Efeitos difusivos e advectivos observados no despejo de esgoto no Rio Bengala

Para um problema unidimensional tem-se a seguinte forma,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc) - \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) = 0 \quad (1.1)$$

onde  $c$  indica a concentração,  $u$  a velocidade e  $D$  o coeficiente de difusão.

Considerando que para  $u$  e  $D$  constantes, tem-se  $\bar{u}$  e  $\alpha$ , respectivamente, é possível reescrever Eq. 1.1 como,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c}{\partial x} - \alpha \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (1.2)$$

## 1.2 Método dos Volumes Finitos

O método dos volumes finitos tem como finalidade a discretização do domínio espacial. Este é subdividido em um conjunto de volumes finitos e as variáveis dependentes são determinadas como médias volumétricas sobre estes volumes, avaliadas nos centros dos mesmos.

A partir da Eq. 1.1, para adaptá-la ao métodos dos volumes finitos, é possível reescrevê-la como

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (1.3)$$

onde,

$$\Phi = c \quad (1.4) \quad f = f(c) = uc - D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1.5)$$

Para a solução, considera-se um domínio discretizado e subdividido conforme figuras abaixo:

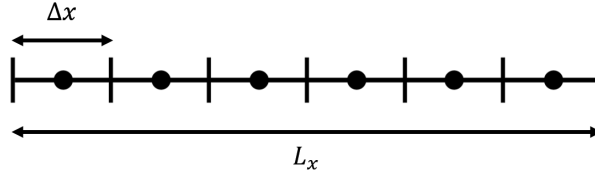


Figura 1.2: Partição do domínio da solução

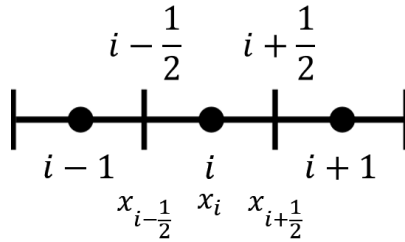


Figura 1.3: Posições ao redor do  $i$ -ésimo volume da malha

Para obter-se a discretização do domínio, integra-se a Eq. 1.3 no intervalo de tempo de  $t^n$  a  $t^{n+1}$  e no espaço de  $x_{i-\frac{1}{2}}$  a  $x_{i+\frac{1}{2}}$ . Além disso, define-se os incrementos no tempo e no espaço como

$$\Delta t = t^{n+1} - t^n \quad \text{e} \quad \Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$$

Tem-se, assim, uma integração dupla

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial \Phi}{\partial t} dt \right) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left( \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial f}{\partial x} dx \right) dt = 0$$

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} [\Phi(x, t^{n+1}) - \Phi(x, t^n)] dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(x_{i+\frac{1}{2}}, t) - f(x_{i-\frac{1}{2}}, t)] dt = 0 \quad (1.6)$$

Define-se uma variável  $Q_i^k$  que consiste no valor médio aproximado de  $\Phi$  no espaço, dado um tempo  $k$  onde  $k = t^n$  ou  $k = t^{n+1}$

$$Q_i^n \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x, t^n) dx \quad (1.7)$$

$$Q_i^{n+1} \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Phi(x, t^{n+1}) dx \quad (1.8)$$

Analogamente, define-se os fluxos como um  $F_k^n$  que consiste no valor médio aproximado de  $F$  no tempo, dada uma posição  $k$  onde  $k = x_{i-\frac{1}{2}}$  ou  $k = x_{i+\frac{1}{2}}$

$$F_{i-\frac{1}{2}}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(x_{i-\frac{1}{2}}, t) dt \quad (1.9)$$

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(x_{i+\frac{1}{2}}, t) dt \quad (1.10)$$

Substituindo as Eq. 1.7, 1.8, 1.9 e 1.10 na Eq. 1.6 e dividindo todos os termos por  $\Delta x$  tem-se que

$$\frac{1}{\Delta x} \left\{ \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} [\Phi(x, t^{n+1}) - \Phi(x, t^n)] dx \right\} + \frac{1}{\Delta x} \left\{ \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(x_{i+\frac{1}{2}}, t) - f(x_{i-\frac{1}{2}}, t)] dt \right\} = 0$$

$$Q_i^{n+1} - Q_i^n + \frac{1}{\Delta x} \left\{ \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(x_{i+\frac{1}{2}}, t) - f(x_{i-\frac{1}{2}}, t)] dt \right\} = 0$$

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta t \Delta x} \left\{ \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(x_{i+\frac{1}{2}}, t) - f(x_{i-\frac{1}{2}}, t)] dt \right\}$$

Por fim, obtém-se

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n) \quad (1.11)$$

onde o valor médio de  $\Phi$  no volume de controle,  $Q$ , deve ser atualizado iterativamente para o próximo passo de tempo.

Para a aproximação dos fluxos, dentre as possíveis metodologias, foi escolhido o uso de uma aproximação *upwind* para a concentração  $c$ :

$$c \approx \frac{(Q_i^n - Q_{i-1}^n)}{\Delta x} \quad (1.12)$$

e uma aproximação centrada para a derivada espacial da concentração  $\frac{\partial c}{\partial x}$ :

$$\frac{\partial c}{\partial x} \approx \frac{(Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n)}{\Delta x^2} \quad (1.13)$$

que, ao serem substituídas na Eq. 1.11, resultam em

$$\begin{aligned} Q_i^{n+1} &= Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \bar{u}Q_i^n - \alpha \frac{(Q_{i+1}^n - Q_i^n)}{\Delta x} - \bar{u}Q_{i-1}^n + \alpha \frac{(Q_i^n - Q_{i-1}^n)}{\Delta x} \right] \\ Q_i^{n+1} &= Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \bar{u}(Q_i^n - Q_{i-1}^n) - \alpha \frac{(Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n)}{\Delta x} \right] \\ Q_i^{n+1} &= Q_i^n - \Delta t \left[ \bar{u} \frac{(Q_i^n - Q_{i-1}^n)}{\Delta x} - \alpha \frac{(Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n)}{\Delta x^2} \right] \end{aligned} \quad (1.14)$$

## 2. Desenvolvimento

Neste capítulo serão abordados os passos e métodos utilizados para se obter a solução numérica do problema proposto.

### 2.1 Condições Inicial e de Contorno

A resolução de qualquer equação diferencial parcial (EDP) requer a determinação de sua condição(ões) inicial(ais) e de contorno. No caso da EDP discretizada (Eq. 1.14), o mesmo se aplica.

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \Delta t \left[ \bar{u} \frac{(Q_i^n - Q_{i-1}^n)}{\Delta x} - \alpha \frac{(Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n)}{\Delta x^2} \right]$$

Nota-se que há uma dependência temporal do termo futuro  $Q_i^{n+1}$  em relação aos termos  $Q$  presentes em  $n$ , e seus vizinhos espaciais  $i$ ,  $i \pm 1$ . A partir desta relação é possível perceber que, para se calcular o primeiro termo,  $Q^1$ , é necessário um termo de partida,  $Q^0$ . Se tem, assim, a necessidade do estabelecimento de uma condição inicial. Neste trabalho, considera-se uma concentração inicial,  $c_{\text{ini}}$ , constante para toda a malha.

Mudando o foco para os volumes da malha, nos volumes  $i = 0$  e  $i = 6$  há uma dependência de termos localizados além do seu domínio —  $Q_0^n$  e  $Q_{nx+1}^n$ , respectivamente. Para resolver este problema, neste trabalho foram adotadas as seguintes condições de contorno:

$$c(x = 0, t) = c_{\text{inj}} \quad (2.1) \quad \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=L_x}^t = 0 \quad (2.2)$$

Aliado a estas condições, utiliza-se o conceito de *volumes fantasmas*, para a definição destas condições no discreto. É possível redefinir as condições de contorno como uma média entre os dois volumes adjacentes. Ao se realizar tal construção para a fronteira esquerda, obtém-se,

$$c_{\text{inj}} = \frac{Q_0^n + Q_1^n}{2} \\ Q_0^n = 2c_{\text{inj}} - Q_1^n \quad (2.3)$$

Analogamente, para a fronteira direita, obtém-se,

$$\left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=L_x}^t \approx \frac{Q_{nx+1}^n - Q_{nx}^n}{\Delta x} = 0$$



$$Q_{nx+1}^n = Q_{nx}^n \quad (2.4)$$

A partir de ambas as relações, definem-se as equações discretas. Para o contorno esquerdo,

$$\begin{aligned} Q_1^{n+1} &= Q_1^n - \Delta t \left[ \bar{u} \frac{(Q_1^n - (2c_{\text{inj}} - Q_1^n))}{\Delta x} - \alpha \frac{(Q_2^n - 2Q_1^n + (2c_{\text{inj}} - Q_1^n))}{\Delta x^2} \right] \\ Q_1^{n+1} &= Q_1^n - \Delta t \left[ \bar{u} \frac{(2Q_1^n - 2c_{\text{inj}})}{\Delta x} - \alpha \frac{(Q_2^n - 3Q_1^n + 2c_{\text{inj}})}{\Delta x^2} \right] \end{aligned} \quad (2.5)$$

e para o contorno direito,

$$\begin{aligned} Q_{nx}^{n+1} &= Q_{nx}^n - \Delta t \left[ \bar{u} \frac{(Q_{nx}^n - Q_{nx-1}^n)}{\Delta x} - \alpha \frac{(Q_{nx}^n - 2Q_{nx}^n + Q_{nx-1}^n)}{\Delta x^2} \right] \\ Q_{nx}^{n+1} &= Q_{nx}^n - \Delta t \left[ \bar{u} \frac{(Q_{nx}^n - Q_{nx-1}^n)}{\Delta x} - \alpha \frac{(Q_{nx-1}^n - Q_{nx}^n)}{\Delta x^2} \right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

## 2.2 Consistência, Convergência e Estabilidade

A análise da consistência, convergência e estabilidade de uma EDP tem como finalidade garantir que a solução numérica do problema — calculada por algoritmos — se aproxime o máximo possível da solução real, com algumas observações.

### 2.2.1 Consistência

Se trata da equivalência da forma algorítmica da EDP em relação a sua forma analítica. Um método numérico é dito *consistente* quando, através de operações algébricas, é possível recuperar a EDP original.

### 2.2.2 Convergência

Se trata da aproximação dos valores numéricos do algoritmo à solução analítica da EDP, dado um certo número de iterações. Um método numérico é dito *convergente* quando este sempre irá tender aos valores da solução, não importando o número de iterações.

A análise direta da convergência de algoritmo é muito difícil, mesmo para os casos mais fáceis. Uma possível saída para esse problema é utilizar o Teorema da Equivalência de Lax, que diz:

“Para um problema linear de valor inicial bem-posto e um método de discretização consistente, estabilidade é condição necessária e suficiente para a convergência.” (Peter Lax)

Como a Eq. 1.14 foi obtida a partir da EDP analítica, é certa a sua consistência, restando assim, a determinação de sua estabilidade para a garantia da convergência.

### 2.2.3 Estabilidade

Se trata do comportamento do algoritmo e seus valores numéricos frente aos parâmetros de entrada. Um algoritmo *estável* se comporta de maneira esperada frente a uma faixa específica de valores de entrada.

Para se determinar a estabilidade da Eq. 1.14, é possível reescrevê-la para a análise através do método de Von Neumann.

$$(Q^*)_i^{n+1} = (s + C)(Q^*)_{i-1}^n + (1 - 2s + C)(Q^*)_i^n + s(Q^*)_{i+1}^n \quad (2.7)$$

onde  $Q^*$  é solução numérica da EDP, sujeita aos erros de arredondamento do computador,  $s = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$  e  $C = \frac{\bar{u} \Delta t}{\Delta x}$  (número de Courant). Além disso, define-se uma nova equação,

$$\xi_i^{n+1} = (s + C)\xi_{i-1}^n + (1 - 2s + C)\xi_i^n + s\xi_{i+1}^n \quad (2.8)$$

onde  $\xi_i^n = Q_i^n - (Q^*)_i^n$  é o erro numérico introduzido em cada ponto da malha.

Segundo o método de Von Neumann, é possível expandir cada termo  $\xi_i^n$  em uma série de Fourier,

$$\xi_i^n = (G)^n e^{j\theta i} \quad (2.9)$$

onde  $j$  é a unidade imaginária e  $G$  é um fator de amplificação, de forma que,

$$\xi_i^{n+1} = G\xi_i^n \quad (2.10)$$

e a estabilidade é garantida se  $|G| \leq 1$ . Substituindo esses termos em Eq. 2.8, obtém-se a seguinte equação:

$$G^{n+1} e^{j\theta i} = (s + C)G^n e^{j\theta(i-1)} + (1 - 2s + C)G^n e^{j\theta i} + sG^n e^{j\theta(i+1)} \quad (2.11)$$

Dividindo-a por  $G^n e^{j\theta i}$ ,

$$G = (s + C)e^{-j\theta} + (1 - 2s + C) + se^{j\theta}$$

A partir das relações de Euler,  $e^{-j\theta} = \cos \theta - j \sin \theta$  &  $e^{j\theta} = \cos \theta + j \sin \theta$ , é possível reescrevê-la como,

$$G = (s + C)e^{-j\theta} + (1 - 2s + C) + se^{j\theta}$$

$$G = 1 - (2s + C)(1 - \cos \theta) - jC \sin \theta$$

tendo assim,

$$|G| = \sqrt{[1 - (2s + C)(1 - \cos \theta)]^2 + C^2 \sin^2 \theta} \leq 1 \quad (2.12)$$

O caso limite para esta construção ocorre quando  $\sin \theta = \pm 1$  e  $\cos \theta = 0$ . É necessário analisar quais são os valores de  $s$  e  $C$  que mantém a veracidade da inequação.

$$|G| = \sqrt{[1 - (2s + C)(1)]^2 + C^2} \leq 1$$

Se  $2s + C \leq 1$  a condição é satisfeita. O que acontece, porém, no novo caso limite de  $2s + C = 1$ ?

$$|G| = \sqrt{(1 - 1)^2 + C^2} = \sqrt{C^2} = C$$

Como  $2s + C = 1$ ,  $C$  tem que ser menor que 1 para um  $s \neq 0$ . Desta forma,

$$\begin{aligned} 2\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} &\leq 1 \\ \Delta t \left( \frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} \right) &\leq 1 \\ \Delta t &\leq \frac{1}{\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}}{\Delta x}} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Tem-se, então, um método *condicionalmente estável*, ou seja, que depende de uma faixa de valores para garantir a estabilidade de seu funcionamento.

## 2.3 Programação

Aliado destes conceitos, foi possível construir um programa em linguagem C que calcula as concentrações para cada célula ao longo do tempo, exportando um arquivo de texto com os resultados; este arquivo, então, é lido por um *script* Python que gera um gráfico correspondente.

O programa principal possui a seguinte estrutura, descrita em C:

```
// Vetores para concentração no tempo 'n' e no tempo 'n+1', respectivamente
double Q_old[];
double Q_new[];

// Inicializa ambos os vetores com os valores da concentração inicial (c_ini)
inicializaVetor(Q_antigo)
inicializaVetor(Q_novo)

// Cálculo de Q, iterado ao longo do tempo
do {

// Cálculo do volume da fronteira esquerda
Q_new[0] = Q_old[0] - Delta_t/Delta_x * (
    u_bar * (2*Q_old[0] - 2*c_inj)
    - alpha * (Q_old[1] - 3*Q_old[0] + 2*c_inj) / Delta_x
);

// Cálculo de volumes do centro da malha
for (x = 1; x < nx - 1; ++x) {
    Q_new[x] = Q_old[x] - Delta_t/Delta_x * (
        u_bar * (Q_old[x] - Q_old[x-1])
        - alpha * (Q_old[x+1] - 2*Q_old[x] + Q_old[x-1]) / Delta_x
    );

// Cálculo do volume da fronteira direita
Q_new[x] = Q_old[x] - Delta_t/Delta_x * (
    u_bar * (Q_old[x] - Q_old[x-1])
    - alpha * (Q_old[x-1] - Q_old[x]) / Delta_x
);

// Atualiza vetores antigos para a próxima iteração
for (x = 0; x < nx; ++x) {
    Q_old[x] = Q_new[x];
}

// Incrementa passo de tempo
} while ( (t += Delta_t) <= t_final);
```

São definidos dois vetores, `Q_old[]` e `Q_new[]`, que correspondem as concentrações  $Q$  no tempo  $n$  e  $n + 1$ , respectivamente. Antes do cálculo das concentrações, os vetores são inicializados, em um simples laço `for`, com os valores de concentração inicial  $c_{ini}$ .

A cada iteração do laço `do-while`, o tempo `t` é incrementado por uma quantidade `Delta_t`, que obedece as regras de estabilidade descritas na seção anterior. Ao longo da iteração, o vetor `Q_new[]` é calculado para as fronteiras e para o centro da malha, em função de `Q_old[]`. Antes do fim da iteração, os vetores `Q_old[]` são atualizados com os valores de `Q_new[]`, o tempo é incrementado, e então a nova iteração é iniciada.

Ao fim da execução, o vetor `Q_new[]`, terá os resultados da concentração de cada célula da malha, correspondente a cada índice do vetor, no tempo `t = t_final`. Os pares índice-concentração são exportados em um arquivo de texto, linha-a-linha, para serem lidos e plotados pelo *script* Python.

### 3. Resultados

Neste capítulo serão descritos os resultados obtidos através da simulação da EDP com a variação de diversos parâmetros. Os parâmetros iniciais escolhidos para este trabalho foram:

- $L_x = 100\text{m}$  (comprimento do domínio)
- $nx = 50$  (número de células)
- $\bar{u} = 0.2\text{m/s}$  (velocidade de escoamento)
- $\alpha = 2.0 \times 10^{-4}$  (coeficiente de difusão)
- $c_{\text{ini}} = 1.0\text{mol/m}^3$  (concentração inicial)
- $c_{\text{inj}} = 1.5\text{mol/m}^3$  (concentração de injeção)
- $t_{\text{final}} = 300\text{s}$  (tempo final de simulação)
- $\Delta t = 0.1 \left( \frac{1}{\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}}{\Delta x}} \right) \approx 0.999001$  (passo de tempo)

#### 3.1 Resultados para variações de $L_x$

Com a variação de  $L_x$ , obtiveram-se os seguintes resultados:

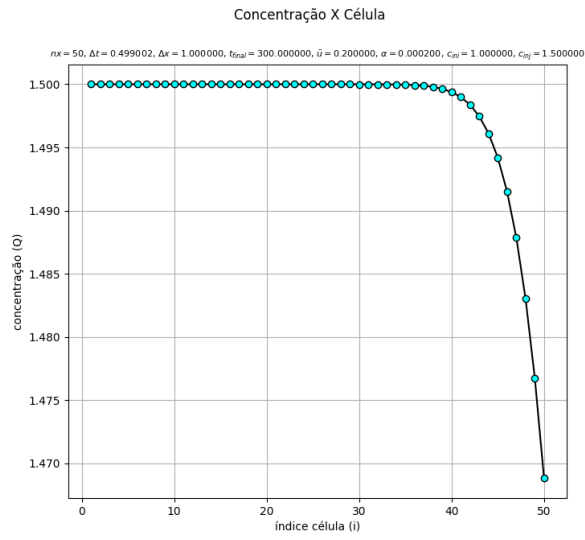


Figura 3.1:  $L_x = 50m$

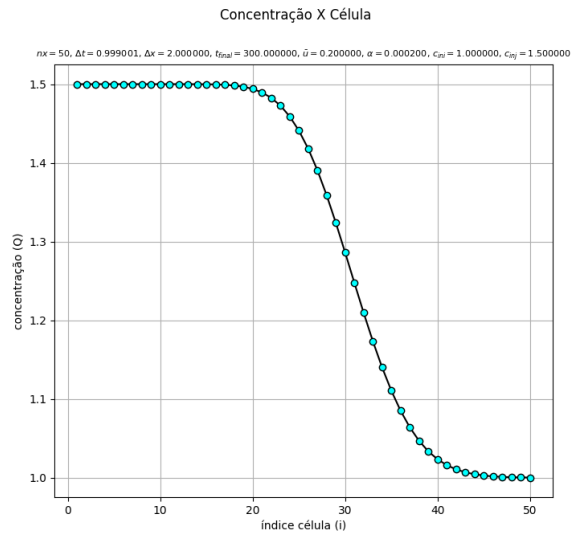


Figura 3.2:  $L_x = 100m$

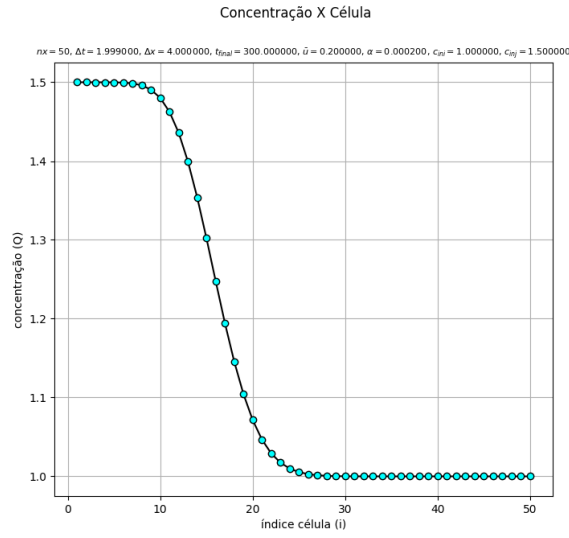


Figura 3.3:  $L_x = 200m$

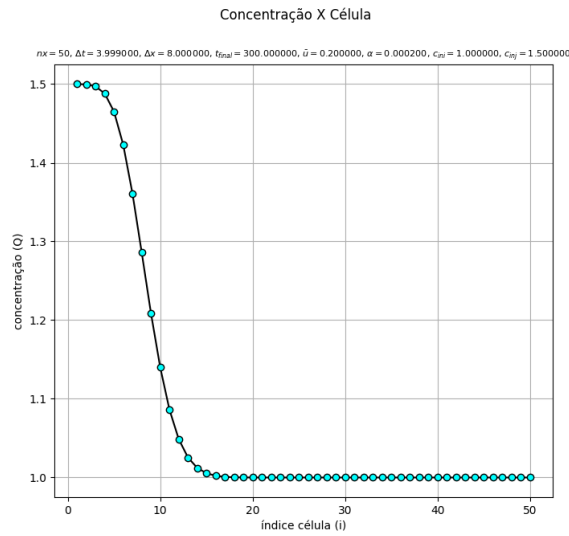


Figura 3.4:  $L_x = 400m$

Ao se variar o comprimento do domínio, percebe-se que os efeitos adectivos e difusivos levam mais tempo para percorrer toda a sua extensão. Sendo assim, quanto maior o domínio, maior a quantidade de tempo necessária para este alcançar o equilíbrio.

## 3.2 Resultados para variações de $nx$

Com a variação de  $nx$ , obtiveram-se os seguintes resultados:

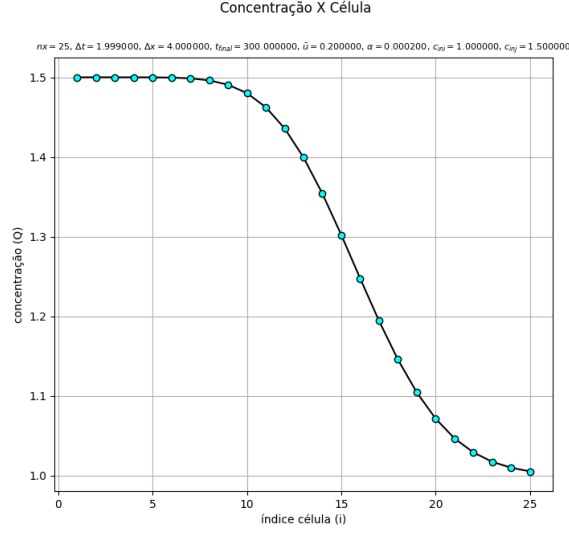


Figura 3.5:  $nx = 25$

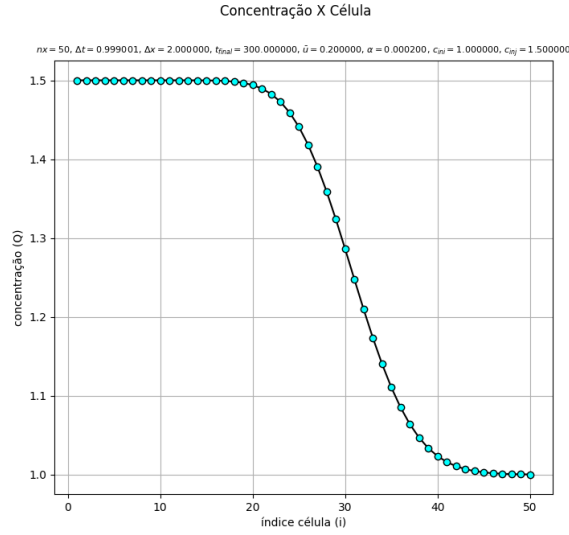


Figura 3.6:  $nx = 50$



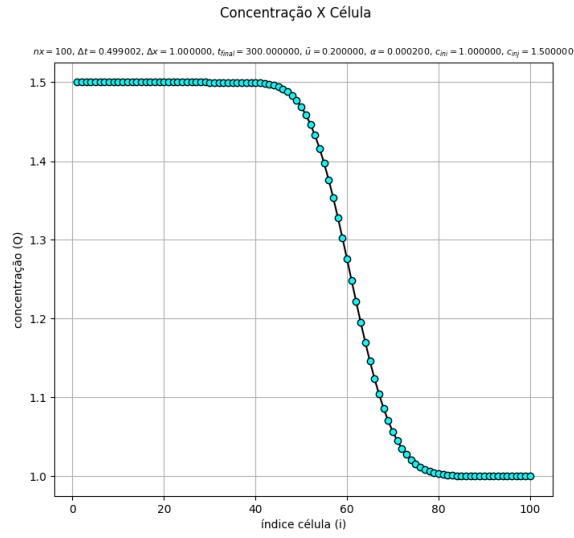


Figura 3.7:  $nx = 100$

Pode-se observar que a variação do  $nx$  resulta em um aumento da resolução do gráfico. A curva se torna mais detalhada, com mais células descrevendo a concentração naquela posição do domínio.

### 3.3 Resultados para variações de $\bar{u}$

Com a variação de  $\bar{u}$ , obtiveram-se os seguintes resultados:

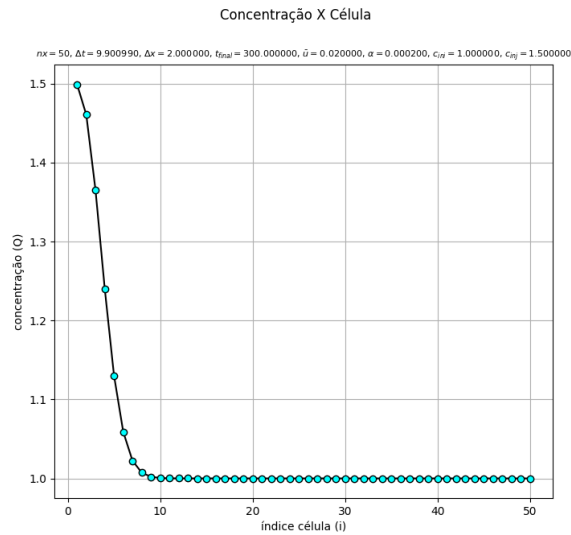


Figura 3.8:  $\bar{u} = 2 \times 10^{-2} \text{m/s}$

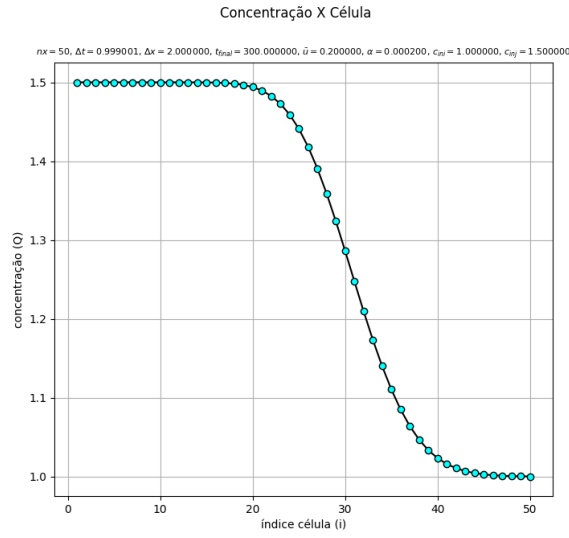


Figura 3.9:  $\bar{u} = 2 \times 10^{-1} \text{m/s}$

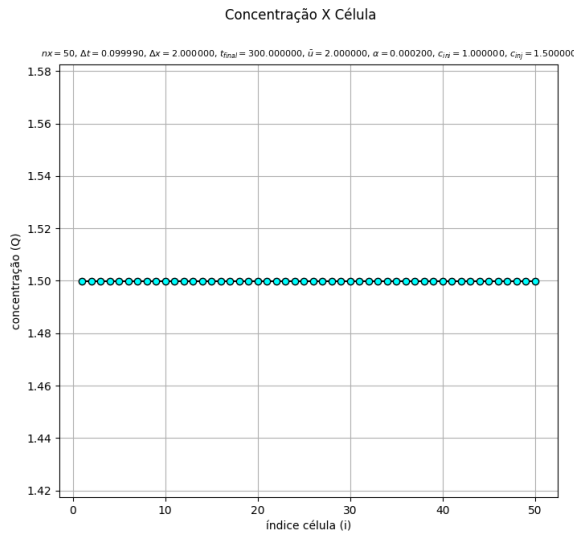


Figura 3.10:  $\bar{u} = 2 \times 10^0 \text{m/s}$

Pode-se observar que o sistema é bastante sensível em relação ao termo advectivo. Uma mudança na ordem de grandeza da velocidade faz com que este entre em equilíbrio em uma quantidade de tempo relativamente pequena.

### 3.4 Resultados para variações de $\alpha$

Com a variação de  $\alpha$ , obtiveram-se os seguintes resultados:

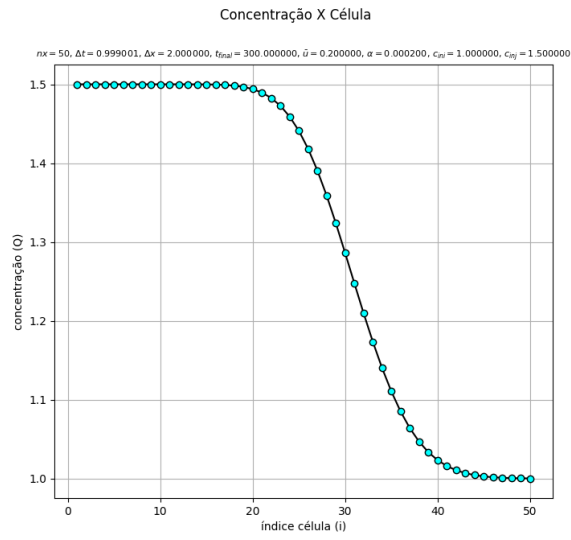


Figura 3.11:  $\alpha = 2.0 \times 10^{-4}$

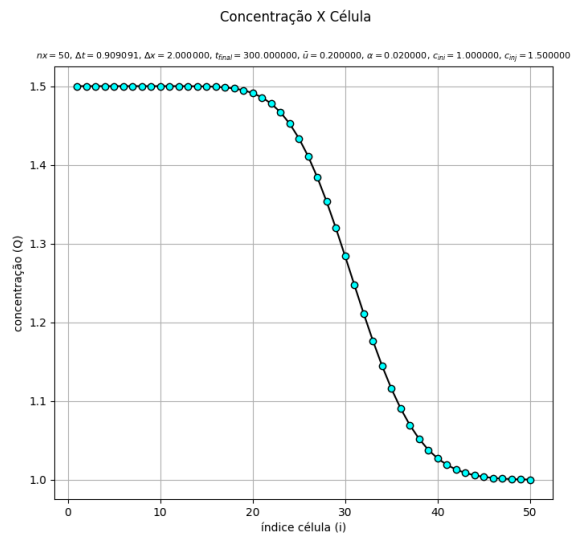


Figura 3.12:  $\alpha = 2.0 \times 10^{-2}$

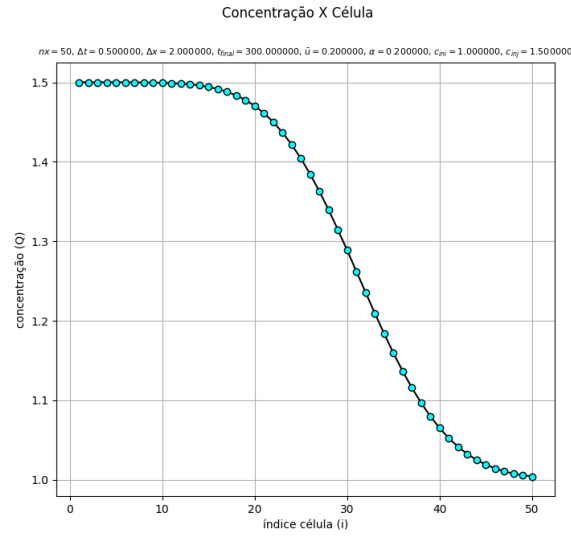


Figura 3.13:  $\alpha = 2.0 \times 10^{-1}$

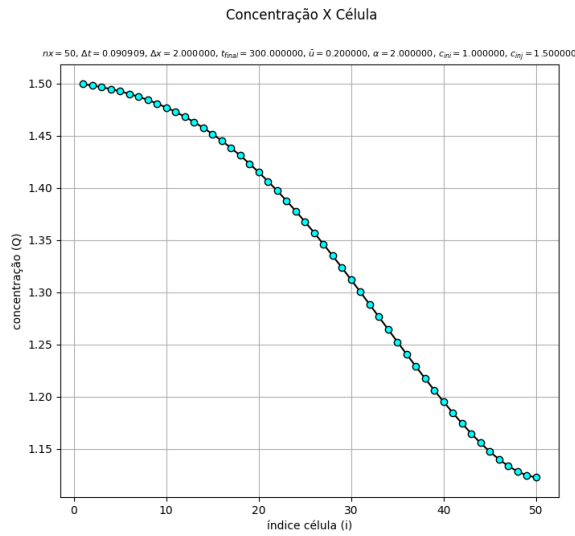


Figura 3.14:  $\alpha = 2.0 \times 10^0$

Nota-se que a presença do efeito difusivo é quase desprezível a concentrações na ordem de  $10^{-4}$ . Para  $\alpha \geq 1$ , porém, o efeito difusivo passa a ter uma presença significativa sobre o sistema, devendo assim ser levado em conta na modelagem de um problema real de engenharia.

### 3.5 Resultados para $\bar{u} = 0$ e variações de $\alpha$

No caso especial onde há uma ausência do termo advectivo, obtiveram-se os seguintes resultados:

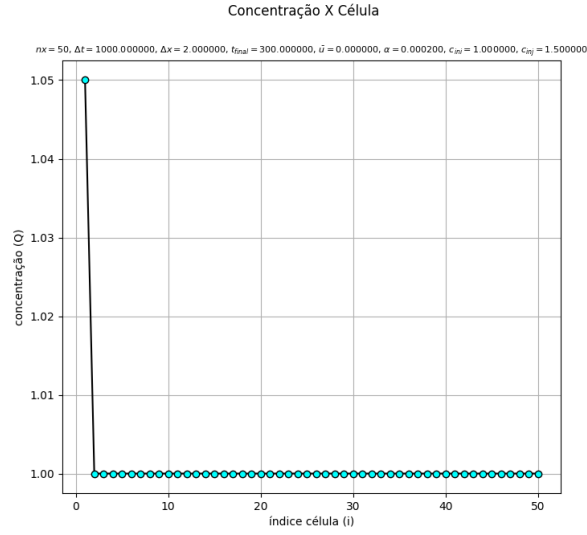


Figura 3.15:  $\bar{u} = 0$  &  $\alpha = 2.0 \times 10^{-4}$

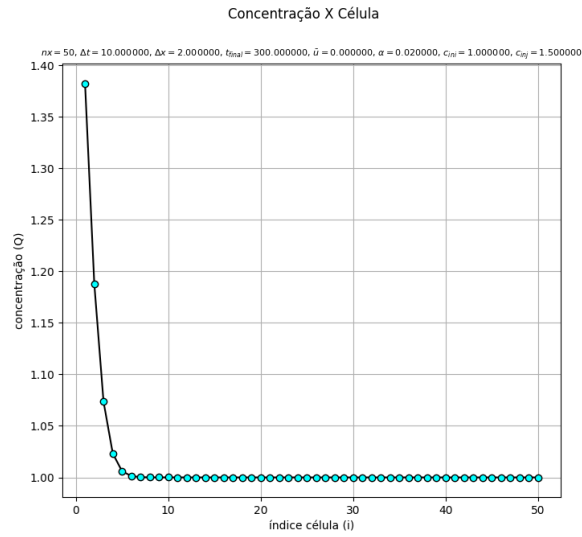


Figura 3.16:  $\bar{u} = 0$  &  $\alpha = 2.0 \times 10^{-2}$

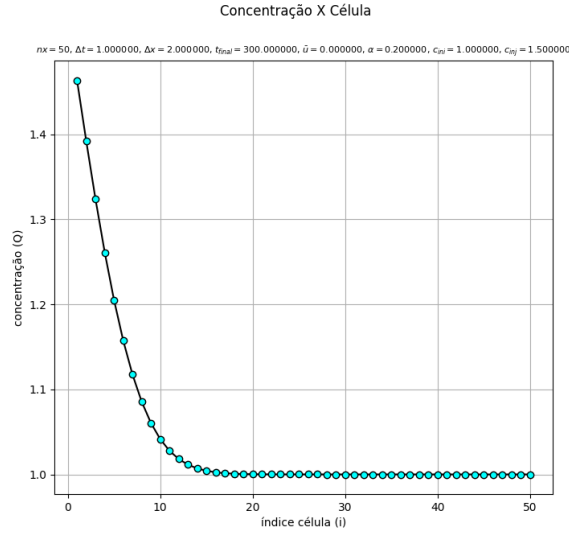


Figura 3.17:  $\bar{u} = 0$  &  $\alpha = 2.0 \times 10^{-1}$

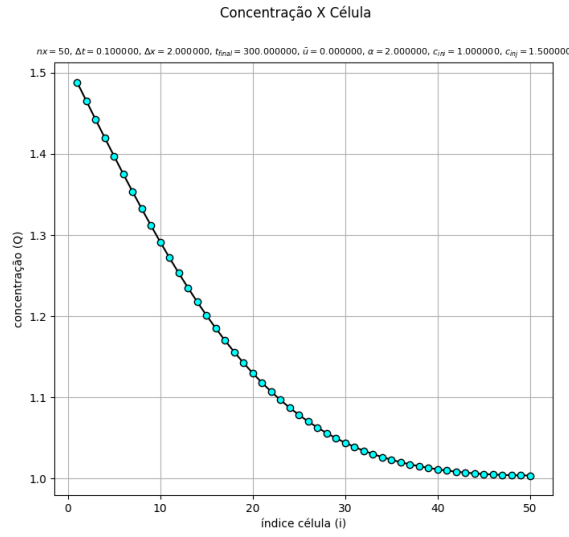


Figura 3.18:  $\bar{u} = 0$  &  $\alpha = 2.0 \times 10^0$

Com a ausência de um termo advectivo, o sistema leva bastante tempo para alcançar a estabilidade, dado valores de  $\alpha \leq 10^{-2}$ , pois a influência de um dado volume sobre os seus vizinhos é bastante pequeno. Com valores maiores, porém, os efeitos difusivos podem ser claramente apreciados, e a diferença de concentrações se propaga pelo sistema rapidamente.

### 3.6 Resultados para variações de $c_{ini}$

Com a variação de  $c_{ini}$ , obtiveram-se os seguintes resultados:

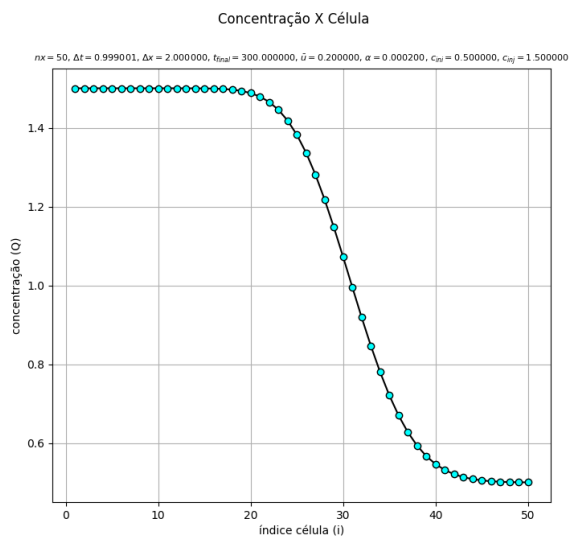


Figura 3.19:  $c_{ini} = 0.5\text{mol/m}^3$

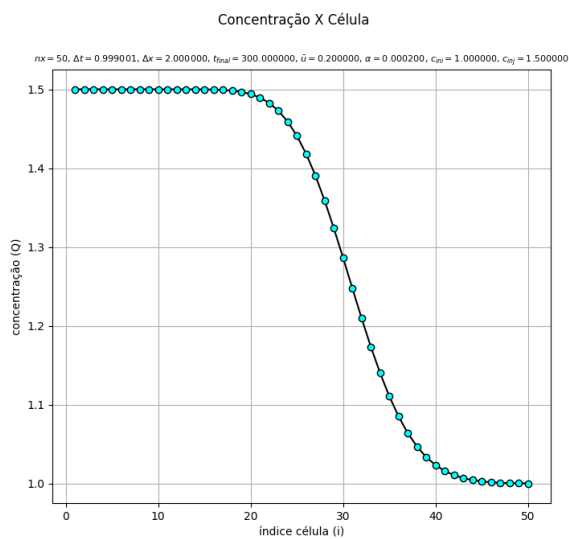


Figura 3.20:  $c_{ini} = 1.0\text{mol/m}^3$

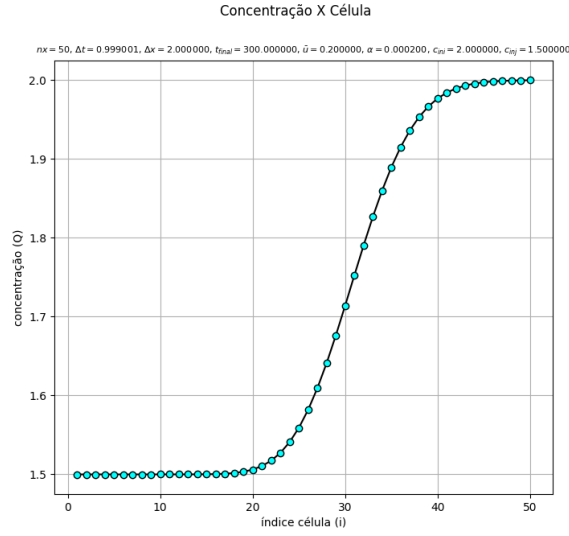


Figura 3.21:  $c_{ini} = 2.0 \text{ mol/m}^3$

Para uma variação da concentração inicial, nota-se que os volumes mais próximos do contorno direito mantêm esse valor para um tempo de simulação no qual os efeitos advectivos e difusivos não foram suficientes para influenciá-los. Sendo assim, para uma concentração inicial  $c_{ini}$  maior que a concentração de injeção  $c_{inj}$  o gráfico acaba se invertendo.

### 3.7 Resultados para variações de $c_{inj}$

Com a variação de  $c_{inj}$ , obtiveram-se os seguintes resultados:



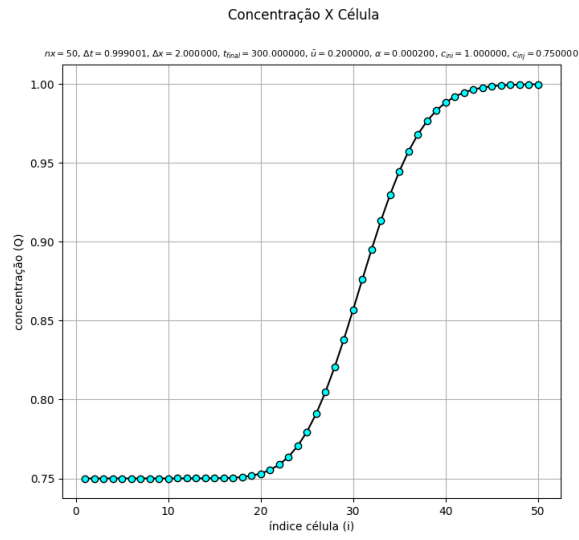


Figura 3.22:  $c_{inj} = 0.75 \text{ mol/m}^3$

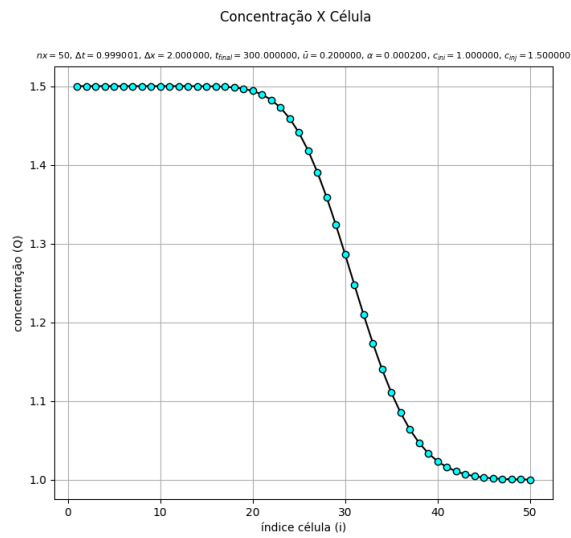


Figura 3.23:  $c_{inj} = 1.5 \text{ mol/m}^3$

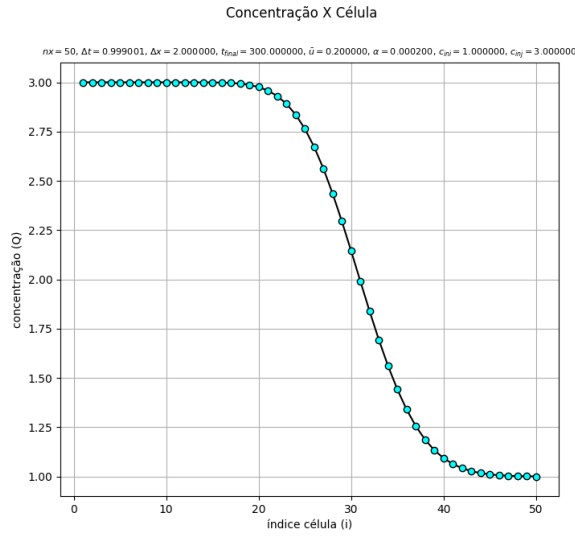


Figura 3.24:  $c_{inj} = 3.0 \text{ mol/m}^3$

Para uma variação da concentração de injeção, tem-se a situação oposta da seção anterior: volumes próximos ao contorno esquerdo sofrem influência quase que imediata da concentração de injeção, enquanto volumes distantes levam mais tempo para serem influenciados por seus vizinhos.

### 3.8 Resultados para variações de $t_{final}$

Com a variação de  $t_{final}$ , obtiveram-se os seguintes resultados:

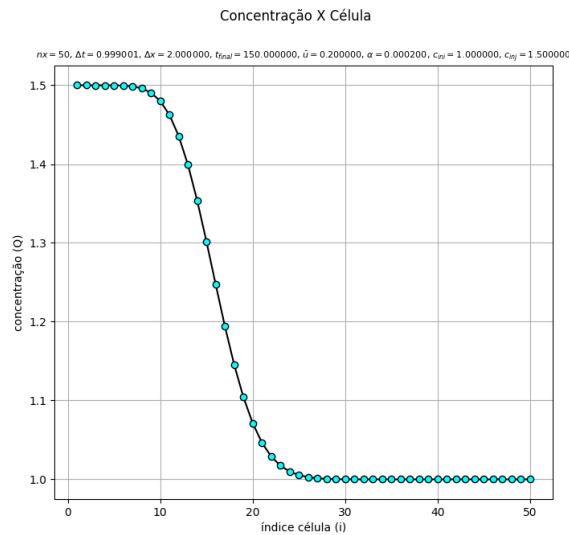


Figura 3.25:  $t_{final} = 150s$

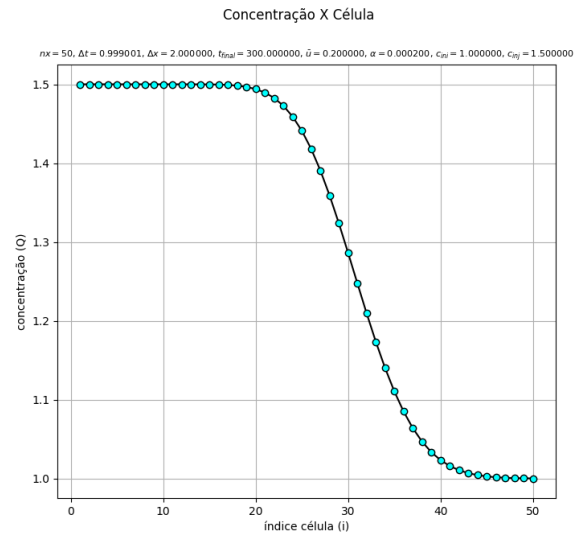


Figura 3.26:  $t_{final} = 300s$

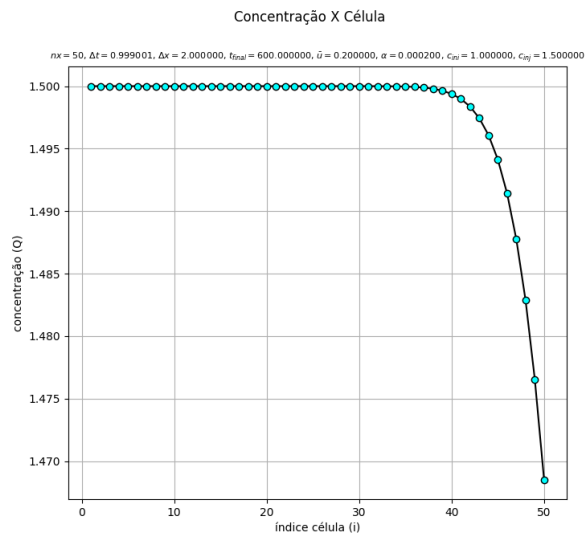


Figura 3.27:  $t_{final} = 600s$

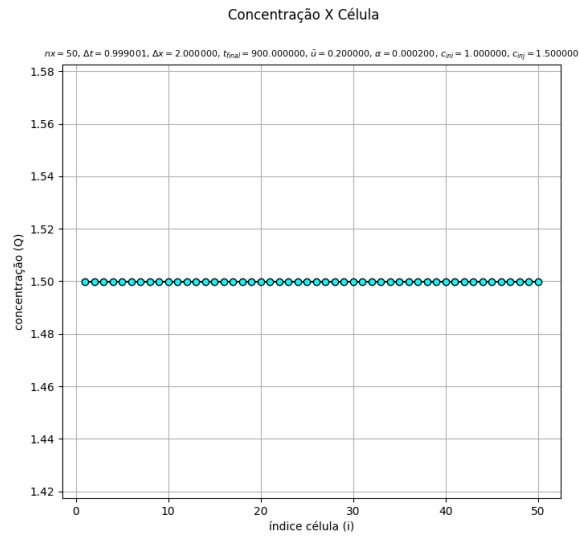


Figura 3.28:  $t_{\text{final}} = 900\text{s}$

Ao variar o tempo de simulação, nota-se que o sistema tende ao equilíbrio dado um tempo longo o suficiente para os efeitos difusivos e advectivos influenciarem todos os volumes de seu domínio.

## 4. Conclusão

As conclusões entram aqui.

## 5. Código Computacional

O código computacional entra aqui.