Trabalho 1 de Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II

Ariel Nogueira Kovaljski

Nova Friburgo, XX de setembro de 2020

Sumário

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 fluído. 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,

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

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 α, respectivamente, é possível reescrever Eq. 1.1 como,

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

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

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \tag{1.3}$$

onde,

$$\Phi = c \tag{1.4}$$

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

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

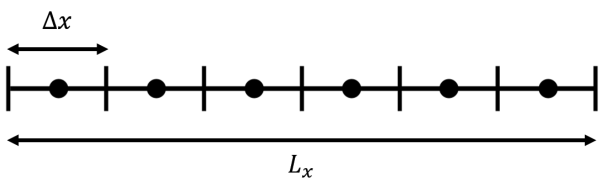

Figura 1.2: Partição do domínio da solução

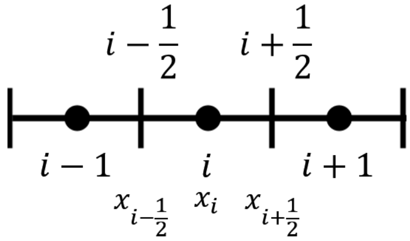

Figura 1.3: Posições ao redor do i-ésimo volume da malha

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

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

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 Φ 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 Δx 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 Φ 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 $\frac{\partial c}{\partial x}$:

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

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

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

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

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

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_{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:

$$c(x = 0, t) = c_{\text{inj}} \tag{2.1}$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=L_x}^{t} = 0 \tag{2.2}$$

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,

— *Inserir gráfico sobre células fantasmas* —

$$c_{\text{inj}} = \frac{Q_0^n + Q_1^n}{2}$$

$$Q_0^n = 2c_{\text{inj}} - Q_1^n \tag{2.3}$$

Analogamente, para a fronteira direita, obtém-se,

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

$$Q^n_{nx+1} = Q^n_{nx} \tag{2.4}$$

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

$$Q^{n+1}_1 = Q^n_1 - \Delta t\left[\bar{u}\frac{(Q^n_1 - (2c_{\text{inj}} - Q^n_1))}{\Delta x} - \alpha\frac{(Q^n_2 - 2Q^n_1 + (2c_{\text{inj}} - Q^n_1))}{\Delta x^2}\right]$$

$$Q^{n+1}_1 = Q^n_1 - \Delta t\left[\bar{u}\frac{(2Q^n_1 - 2c_{\text{inj}})}{\Delta x} - \alpha\frac{(Q^n_2 - 3Q^n_1 + 2c_{\text{inj}})}{\Delta x^2}\right] \tag{2.5}$$

e para o contorno direito,

$$Q^{n+1}_{nx} = Q^n_{nx} - \Delta t\left[\bar{u}\frac{(Q^n_{nx} - Q^n_{nx-1})}{\Delta x} - \alpha\frac{(Q^n_{nx} - 2Q^n_{nx} + Q^n_{nx-1})}{\Delta x^2}\right]$$

$$Q^{n+1}_{nx} = Q^n_{nx} - \Delta t\left[\bar{u}\frac{(Q^n_{nx} - Q^n_{nx-1})}{\Delta x} - \alpha\frac{(Q^n_{nx-1} - Q^n_{nx})}{\Delta x^2}\right] \tag{2.6}$$

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.

2.2.3 Estabilidade e Teorema de Lax

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.

A análise direta da estabilidade 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 bemposto e um método de discretização consistente, estabilidade é condição necessária e suficiente para a convergência." (Peter Lax)

3. Resultados

Os resultados entram aqui.

3.1 Seção 1

A seção 1 entra aqui.

3.2 Seção 2

A seção 2 entra aqui.

3.3 Seção 3

A seção 3 entra aqui.

4. Conclusão

As conclusões entram aqui.

5. Código Computacional

O código computacional entra aqui.