



# Trabalho 2 de Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II

**Ariel Nogueira Kovaljski**

Nova Friburgo, XX de novembro de 2020

# Sumário

<b>1</b>	<b>Resumo</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Introdução</b>	<b>4</b>
2.1	A Equação de Advecção	4
2.2	Método dos Volumes Finitos	4
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>5</b>
3.1	Condições Inicial e de Contorno	5
3.2	Métodos Numéricos	5
3.2.1	Métodos <i>Upwind</i>	6
3.2.2	Métodos de Alta Resolução	6
3.3	Estabilidade	7
3.4	Programação	8
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>10</b>
4.1	Forward Time-Backward Space (FTBS)	10
4.1.1	Resultados para variações de $nx$	10
4.1.2	Resultados para variações de $t_{\text{final}}$	12
4.2	Lax-Friedrichs (L-F)	13
4.2.1	Resultados para variações de $nx$	13
4.2.2	Resultados para variações de $t_{\text{final}}$	15
4.3	Lax-Wendroff (L-W)	16
4.3.1	Resultados para variações de $nx$	16
4.3.2	Resultados para variações de $t_{\text{final}}$	17
4.4	Beam-Warming (B-W)	19
4.4.1	Resultados para variações de $nx$	19
4.4.2	Resultados para variações de $t_{\text{final}}$	20
<b>5</b>	<b>Discussão</b>	<b>23</b>
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>24</b>
<b>7</b>	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>25</b>
<b>8</b>	<b>Código Computacional</b>	<b>26</b>
8.0.1	Código Principal ( <code>main.h</code> & <code>main.c</code> )	26
8.0.2	Código do Gráfico ( <code>plot_graph.py</code> )	29

# Lista de Figuras

4.1	$nx = 100$	11
4.2	$nx = 200\text{m}$	11
4.3	$nx = 400\text{m}$	12
4.4	$t_{\text{final}} = 0, 5\text{s}$	12
4.5	$t_{\text{final}} = 1, 0\text{s}$	13
4.6	$t_{\text{final}} = 1, 5\text{s}$	13
4.7	$nx = 100$	14
4.8	$nx = 200\text{m}$	14
4.9	$nx = 400\text{m}$	14
4.10	$t_{\text{final}} = 0, 5\text{s}$	15
4.11	$t_{\text{final}} = 1, 0\text{s}$	15
4.12	$t_{\text{final}} = 1, 5\text{s}$	16
4.13	$nx = 100$	16
4.14	$nx = 200\text{m}$	17
4.15	$nx = 400\text{m}$	17
4.16	$t_{\text{final}} = 0, 5\text{s}$	18
4.17	$t_{\text{final}} = 1, 0\text{s}$	18
4.18	$t_{\text{final}} = 1, 5\text{s}$	19
4.19	$nx = 100$	19
4.20	$nx = 200\text{m}$	20
4.21	$nx = 400\text{m}$	20
4.22	$t_{\text{final}} = 0, 5\text{s}$	21
4.23	$t_{\text{final}} = 1, 0\text{s}$	21
4.24	$t_{\text{final}} = 1, 5\text{s}$	22

# 1. Resumo

O resumo entra aqui.

## 2. Introdução

Neste trabalho foi implementado um método computacional de maneira a resolver a equação de advecção de forma numérica.

Para melhor entender o desenvolvimento, é necessária introdução de conceitos-chave utilizados, alguns dos quais já foram apresentados no primeiro trabalho.

### 2.1 A Equação de Advecção

A equação de advecção é obtida a partir da equação de advecção-difusão, introduzida no primeiro trabalho como exemplo de modelagem do escoamento de um contaminante em um córrego. A parte advectiva desta trata apenas do carregamento da substância devido a velocidade da correnteza. A forma mais geral da equação de advecção é

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc) = 0 \quad (2.1)$$

onde  $c$  indica a concentração e  $u$  a velocidade. Para este trabalho assume-se um  $u$  constante e maior que zero, denotado como  $\bar{u}$ . Sendo assim, a forma final equação da advecção a ser utilizada neste trabalho é

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (2.2)$$

### 2.2 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. Neste trabalho, serão utilizados quatro métodos numéricos — Forward Time-Backward Space (FTBS), Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff e Beam-Warming — visando resolver a equação da advecção.

## 3. Metodologia

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

### 3.1 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. Como proposto pelo trabalho, a concentração inicial da malha é dada pela seguinte equação

$$c(x, 0) = e^{-A(x-B)} + s(x) \quad (3.1)$$

e as condições de contorno são dadas pelas seguintes equações

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=0}^t = 0 \quad (3.2) \quad \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=L_x}^t = 0 \quad (3.3)$$

para o contorno esquerdo e direito, respectivamente.

Usando o conceitos de volumes fantasmas, é possível determinar o valor dos volumes no contorno, através das seguintes aproximações, para o contorno esquerdo,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=0}^t &\approx \frac{Q_1^n - Q_0^n}{\Delta x} = 0 \\ \therefore Q_1^n &= Q_0^n \end{aligned} \quad (3.4)$$

e para o contorno direito,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=L_x}^t &\approx \frac{Q_{nx+1}^n - Q_{nx}^n}{\Delta x} = 0 \\ \therefore Q_{nx+1}^n &= Q_{nx}^n \end{aligned} \quad (3.5)$$

### 3.2 Métodos Numéricos

Os métodos numéricos utilizados para a resolução da equação de advecção podem ser divididos em duas categorias: métodos *upwind* e métodos de alta resolução.

### 3.2.1 Métodos *Upwind*

<inserir descrição sobre upwind>. O método *upwind* escolhido para a resolução da equação da advecção é o *forward time-backward space* (FTBS).

#### Forward Time-Backward Space (FTBS)

O FTBS <inserir explicação sobre FTBS>. Sua discretização é:

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} (Q_i^n - Q_{i-1}^n) \quad (3.6)$$

aplicando as condições de contorno, obtém-se,

$$\begin{aligned} Q_i^{n+1} &= Q_i^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} (Q_1^n - Q_1^n) \\ \therefore Q_1^{n+1} &= Q_1^n \end{aligned} \quad (3.7)$$

para o primeiro elemento da malha (contorno esquerdo). O último elemento da malha (contorno direito) no método FTBS não necessita do volume fantasma, pois depende apenas do elemento atual  $Q_i^n$  e do anterior  $Q_{i-1}^n$ , portanto, a Eq. 3.6 aplica-se ao contorno direito.

### 3.2.2 Métodos de Alta Resolução

<inserir descrição sobre métodos de alta resolução>. Os métodos escolhidos para a resolução da equação da advecção são o Lax-Friedrichs (L-F), Lax-Wendroff (L-W) e Beam-Warming (B-W).

#### Lax-Friedrichs (L-F)

Para Lax-Friedrichs (L-F), tem-se a seguinte discretização

$$Q_i^{n+1} = \frac{Q_{i+1}^n + Q_{i-1}^n}{2} - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n) \quad (3.8)$$

aplicando as condições de contorno, obtém-se,

$$Q_1^{n+1} = \frac{Q_2^n + Q_1^n}{2} - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_2^n - Q_1^n) \quad (3.9)$$

para o primeiro elemento da malha (contorno esquerdo). Enquanto para o último elemento da malha (contorno direito), obtém-se,

$$Q_{nx}^{n+1} = \frac{Q_{nx}^n + Q_{nx-1}^n}{2} - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_{nx}^n - Q_{nx-1}^n) \quad (3.10)$$

#### Lax-Wendroff (L-W)

Para Lax-Wendroff (L-W), tem-se a seguinte discretização

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n) \quad (3.11)$$

aplicando as condições de contorno, obtém-se,

$$\begin{aligned} Q_1^{n+1} &= Q_1^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_2^n - Q_1^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_2^n - 2Q_1^n + Q_1^n) \\ Q_1^{n+1} &= Q_1^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_2^n - Q_1^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_2^n - Q_1^n) \end{aligned} \quad (3.12)$$

para o primeiro elemento da malha (contorno esquerdo). Enquanto para o último elemento da malha (contorno direito), obtém-se,

$$\begin{aligned} Q_{nx}^{n+1} &= Q_{nx}^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_{nx}^n - Q_{nx-1}^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_{nx}^n - 2Q_{nx}^n + Q_{nx-1}^n) \\ Q_{nx}^{n+1} &= Q_{nx}^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_{nx}^n - Q_{nx-1}^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_{nx-1}^n - Q_{nx}^n) \end{aligned} \quad (3.13)$$

### Beam-Warming (B-W)

Para Beam-Warming (B-W), tem-se a seguinte discretização

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (3Q_i^n - 4Q_{i-1}^n + Q_{i-2}^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_i^n - 2Q_{i-1}^n + Q_{i-2}^n) \quad (3.14)$$

onde, para o primeiro elemento (contorno esquerdo), devido ao termo  $Q_{i-2}^n$ , não é possível aplicar as condições de contorno diretamente. Sendo assim, apenas para o primeiro elemento da malha, será utilizado o método L-W. Desta forma, para  $i = 1$  a discretização utilizada é a Eq. 3.12. Para o segundo elemento, aplica-se a condição de contorno esquerda, resultando na seguinte discretização,

$$\begin{aligned} Q_2^{n+1} &= Q_2^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (3Q_2^n - 4Q_1^n + Q_1^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_2^n - 2Q_1^n + Q_1^n) \\ Q_2^{n+1} &= Q_2^n - \frac{3\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} (Q_2^n - Q_1^n) + \frac{\bar{u}^2\Delta t^2}{2\Delta x^2} (Q_2^n - Q_1^n) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Assim como no método FTBS, o último elemento da malha (contorno direito) do método B-W não necessita do volume fantasma, pois depende apenas do elemento atual  $Q_i^n$  e dos anteriores  $Q_{i-1}^n$  e  $Q_{i-2}^n$ , portanto, a Eq. 3.14 aplica-se ao contorno direito.

## 3.3 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.

A partir da condição de estabilidade para a equação da advecção-difusão, utilizada no primeiro trabalho,

$$\Delta t \leq \frac{1}{\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}}{\Delta x}} \quad (3.16)$$

considerando que não há componente difusivo  $\alpha$  na equação de advecção, o mesmo pode ser igualado a 0.

$$\Delta t \leq \frac{1}{\frac{2(0)}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}}{\Delta x}}$$



$$\Delta t \leq \frac{1}{\frac{\bar{u}}{\Delta x}}$$

$$\therefore \Delta t \leq \frac{\Delta x}{\bar{u}} \quad (3.17)$$

obtem-se assim a condição de estabilidade para os métodos numéricos para a equação da advecção. Trata-se de um método *condicionalmente estável*, ou seja que depende de uma faixa de valores para garantir a estabilidade de seu funcionamento.

### 3.4 Programação

Aliado destes conceitos, foi possível construir um programa em linguagem C que calcula as concentrações para cada célula ao longo do tempo, para cada método aqui citado, exportando arquivos de texto com os resultados; estes arquivos, então, são lidos por um *script* Python que gera os gráficos correspondentes.

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[];

// Para cada método, os vetores são inicializados e as concentrações são
// calculadas

// Método FTBS
// Inicializa ambos os vetores com a função de concentração inicial
initializeArray(Q_old, nx, A, B, C, D, E)
initializeArray(Q_new, nx, A, B, C, D, E)

// Calcula Q através do método FTBS
calculateQ_FTBS(Q_old, Q_new);

// Imprime na tela e salva os resultados no arquivo de texto
printAndSaveResults(Q_new, nx, FTBS);

// Método L-F
initializeArray(Q_old, nx, A, B, C, D, E)
initializeArray(Q_new, nx, A, B, C, D, E)
calculateQ_LF(Q_old, Q_new);
printAndSaveResults(Q_new, nx, LF);

// Método L-W
initializeArray(Q_old, nx, A, B, C, D, E)
initializeArray(Q_new, nx, A, B, C, D, E)
calculateQ_LW(Q_old, Q_new);
printAndSaveResults(Q_new, nx, LW);

// Método B-W
initializeArray(Q_old, nx, A, B, C, D, E)
initializeArray(Q_new, nx, A, B, C, D, E)
calculateQ_BW(Q_old, Q_new);
printAndSaveResults(Q_new, nx, BW);
```

A função `initializeArray` possui a seguinte estrutura:

```
int i;
double x, s;
```

```

// Laço 'for' percorre todos os índices do vetor
for (i = 0; i < nx; ++i) {

    // Posição 'x' (m) é definida como índice do volume * largura do volume
    x = i * Delta_x;

    // 's' recebe o valor de 'E' somente se C <= x <= D
    s = (x >= C && x <= D ? E : 0);

    // Cada índice do vetor 'Q' é inicializado segundo a condição inicial
    Q[i] = exp( -A * ((x - b)*(x - b)) ) + s;
}

```

Cada função `calculateQ` possui a seguinte estrutura:

```

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

    // Cálculo do volume da fronteira esquerda, onde 'leftBoundary' é a função
    // da fronteira esquerda específica a cada método
    Q_new[0] = leftBoundary(method, 0);

    // Cálculo de volumes do centro da malha, onde 'center' é a função do centro
    // da malha específica a cada método. Este laço começa em 'i = 2' caso o
    // método seja B-W.
    for (i = (method == BW ? 2 : 1); i < nx - 1; ++i) {
        Q_new[i] = center(method, i);
    }

    // Cálculo do volume da fronteira direita, onde 'rightBoundary' é a função
    // da fronteira direita específica a cada método
    Q_new[i] = rightBoundary(method, i);

    // Vetor 'Q_old' é atualizado com valores do 'Q_new' para a próxima iteração
    for (i = 0; i < nx; ++i) {
        Q_old[i] = Q_new[i];
    }

    // 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`, seguindo a função de concentração inicial  $e^{-A(x-b)^2} + s(x)$ .

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 volume da malha, correspondente a cada índice do vetor, no tempo  $t = t\_final$ . Os pares índice-concentração são exportados em um arquivo de texto, para cada método, linha-a-linha, para serem lidos e plotados pelo *script* Python.

## 4. 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:

- $L_x = 10\text{m}$  (comprimento do domínio)
- $nx = 200$  (número de células)
- $\bar{u} = 2\text{m/s}$  (velocidade de escoamento)
- $t_{\text{final}} = 1\text{s}$  (tempo final de simulação)
- $\Delta t = 0,9 \left( \frac{\Delta x}{\bar{u}} \right) = 0,0225$  (passo de tempo)
- $A = 100$
- $B = 1,5$
- $C = 4,0$
- $D = 6,0$
- $E = 2,0$

### 4.1 Forward Time-Backward Space (FTBS)

#### 4.1.1 Resultados para variações de $nx$

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

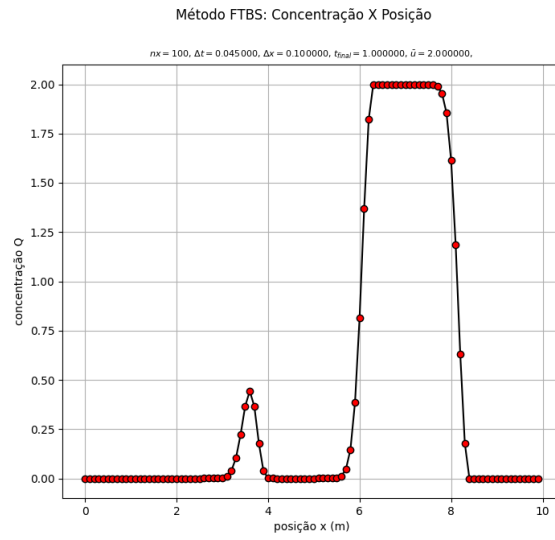


Figura 4.1:  $nx = 100$

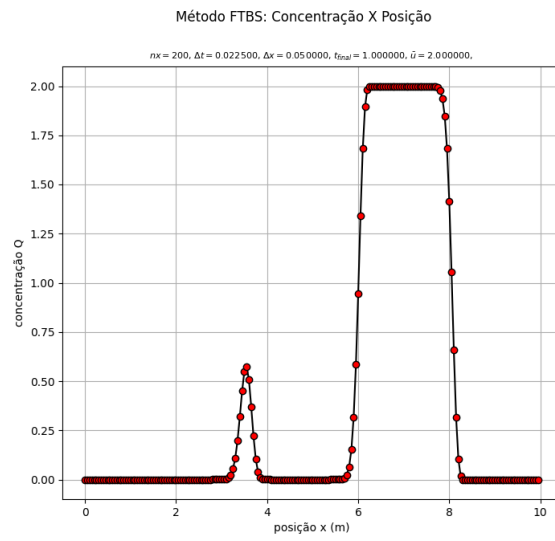


Figura 4.2:  $nx = 200m$

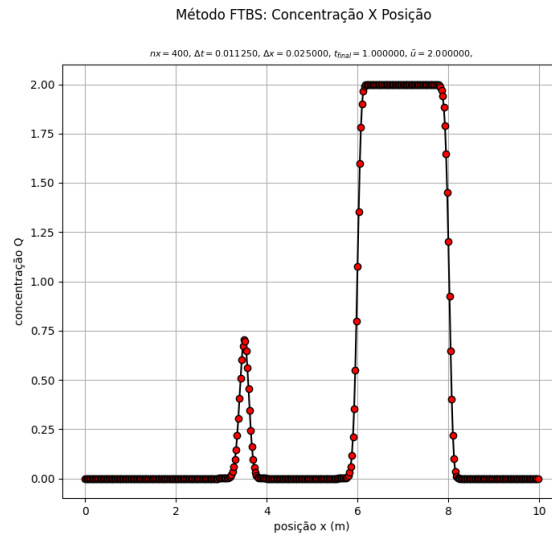


Figura 4.3:  $nx = 400m$

<inserir observações>

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

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

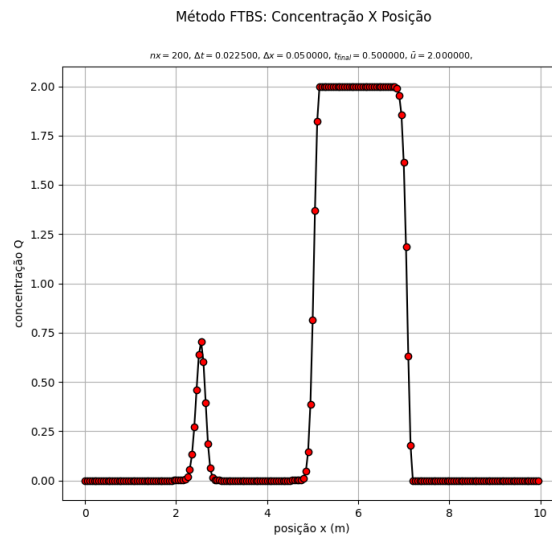


Figura 4.4:  $t_{final} = 0,5s$

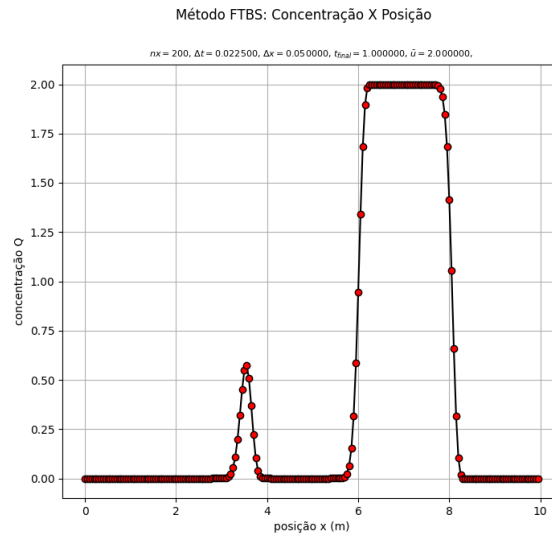


Figura 4.5:  $t_{final} = 1,0s$

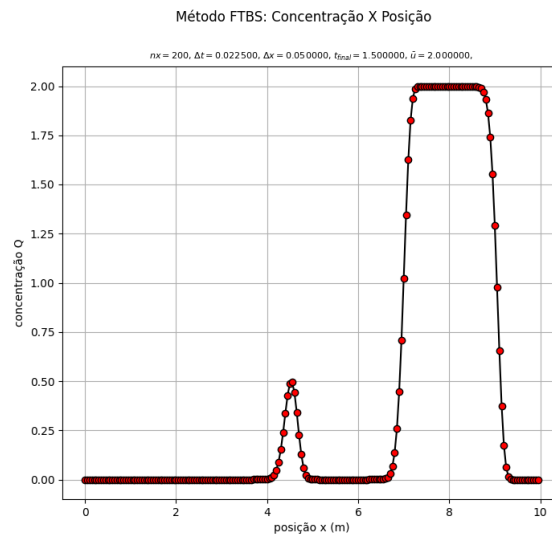


Figura 4.6:  $t_{final} = 1,5s$

<inserir observações>

## 4.2 Lax-Friedrichs (L-F)

### 4.2.1 Resultados para variações de $nx$

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

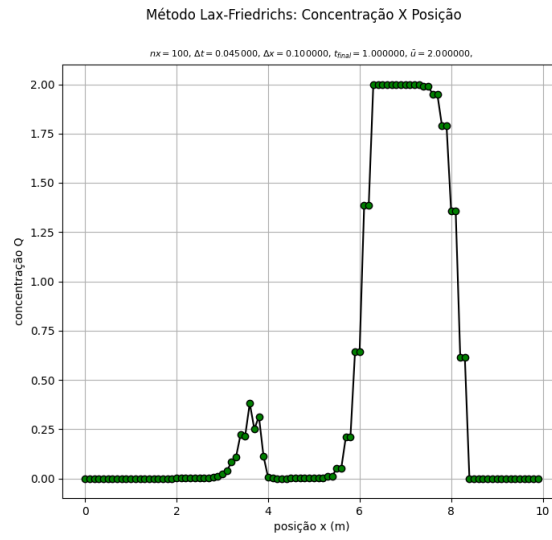


Figura 4.7:  $nx = 100$

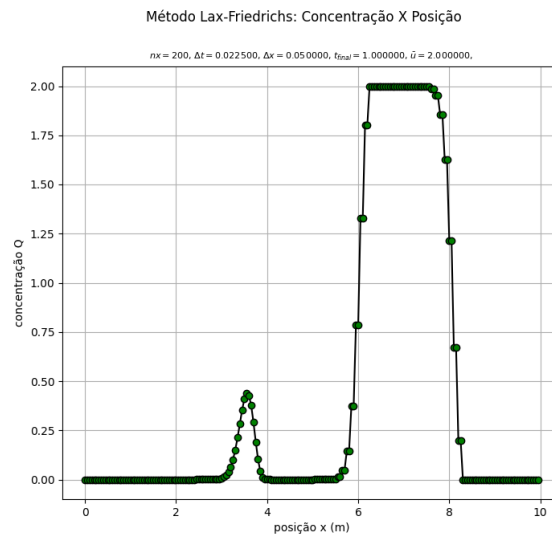


Figura 4.8:  $nx = 200m$

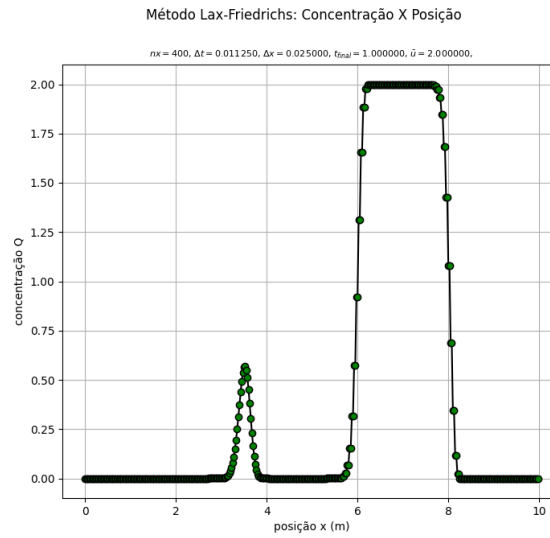


Figura 4.9:  $nx = 400m$

<inserir observações>

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

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

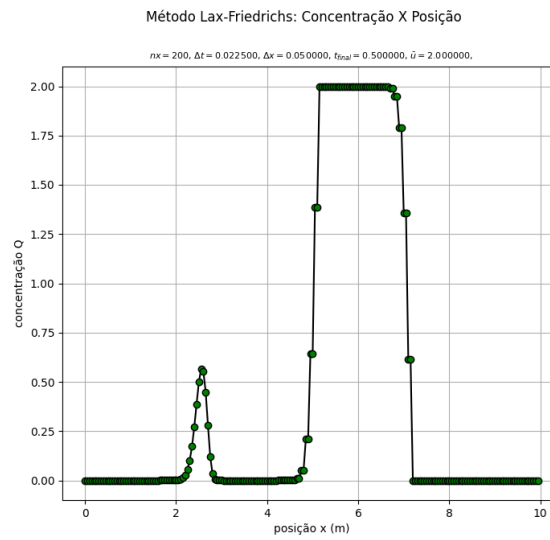


Figura 4.10:  $t_{final} = 0,5s$



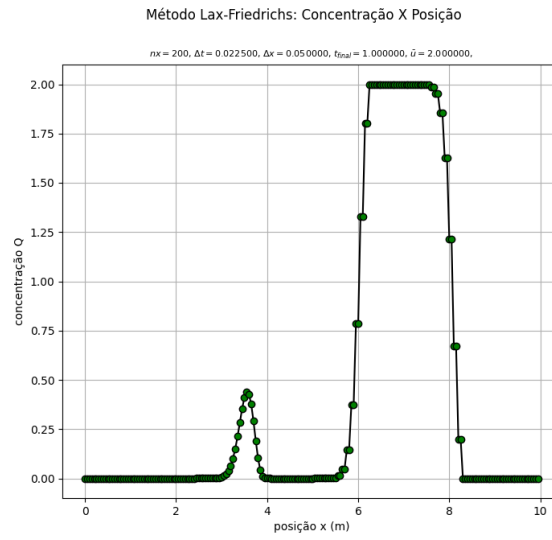


Figura 4.11:  $t_{\text{final}} = 1,0\text{s}$

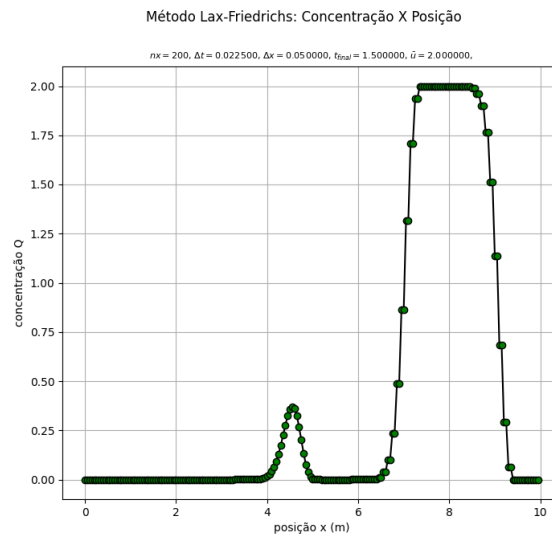


Figura 4.12:  $t_{\text{final}} = 1,5\text{s}$

<inserir observações>

## 4.3 Lax-Wendroff (L-W)

### 4.3.1 Resultados para variações de $nx$

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

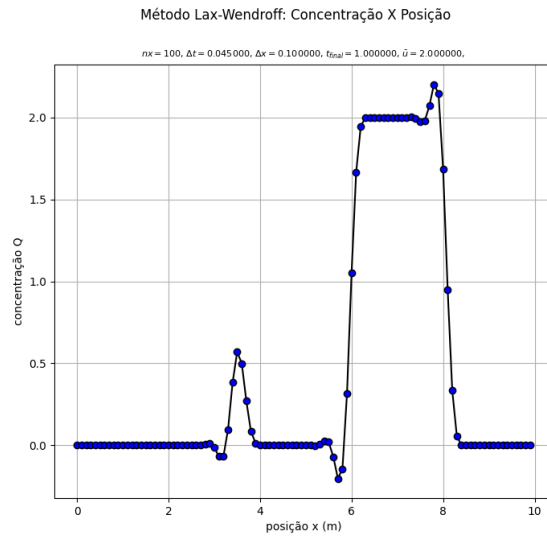


Figura 4.13:  $nx = 100$

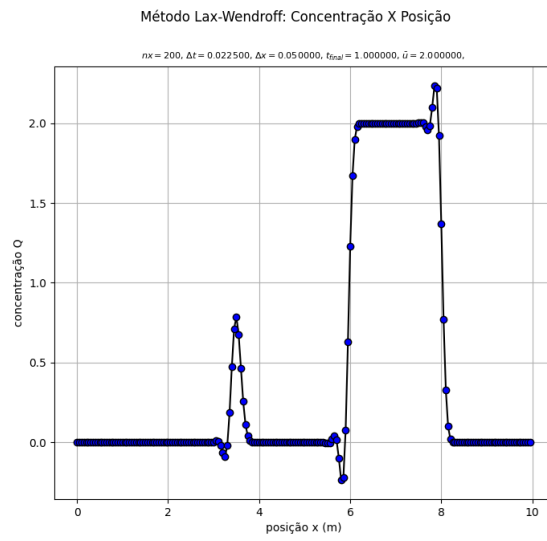


Figura 4.14:  $nx = 200m$

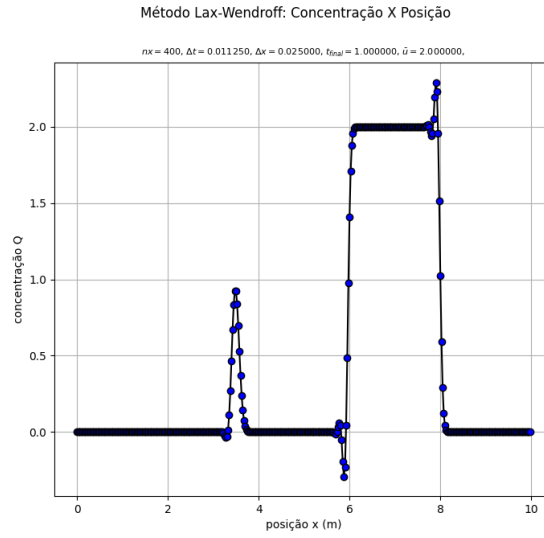


Figura 4.15:  $nx = 400m$

<inserir observações>

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

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

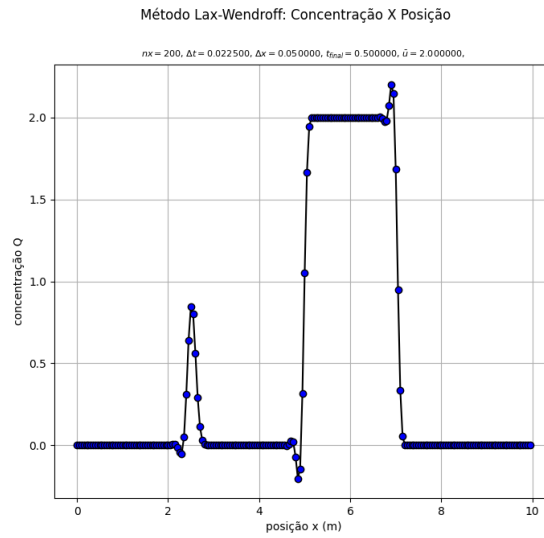


Figura 4.16:  $t_{final} = 0,5s$

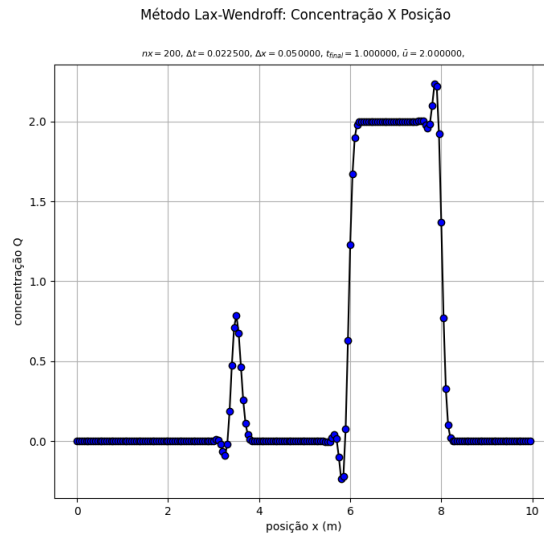


Figura 4.17:  $t_{\text{final}} = 1,0\text{s}$

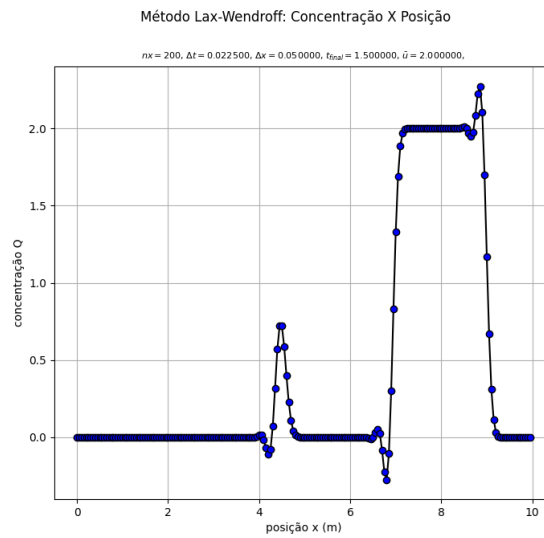


Figura 4.18:  $t_{\text{final}} = 1,5\text{s}$

<inserir observações>

## 4.4 Beam-Warming (B-W)

### 4.4.1 Resultados para variações de $nx$

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

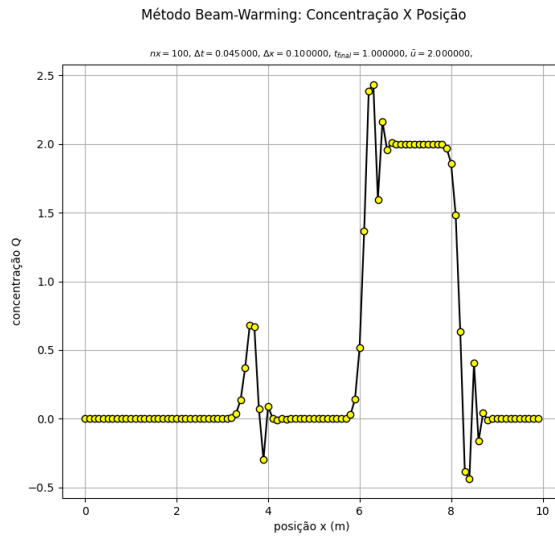


Figura 4.19:  $nx = 100$

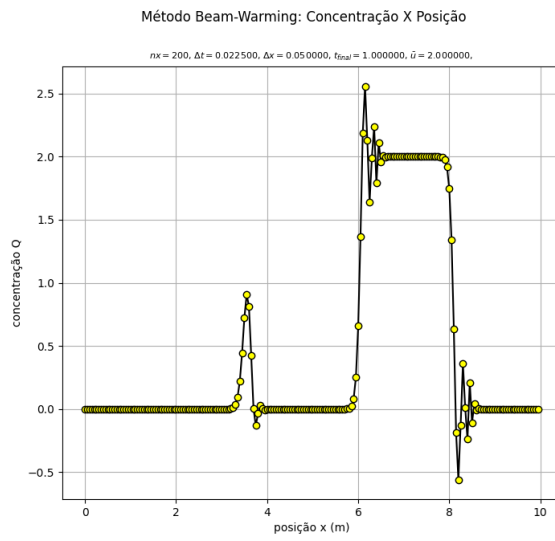


Figura 4.20:  $nx = 200m$

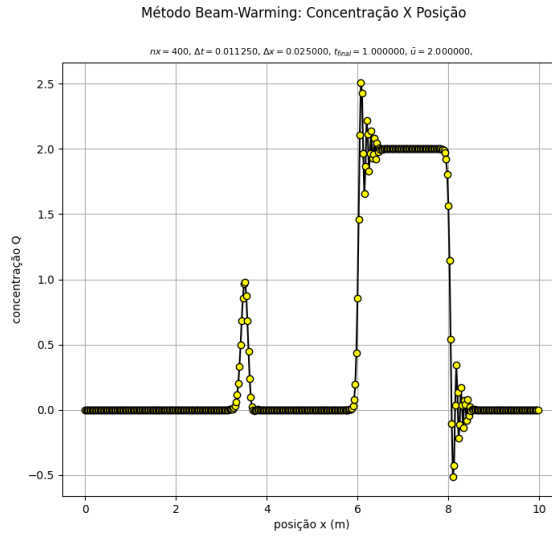


Figura 4.21:  $nx = 400m$

<inserir observações>

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

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

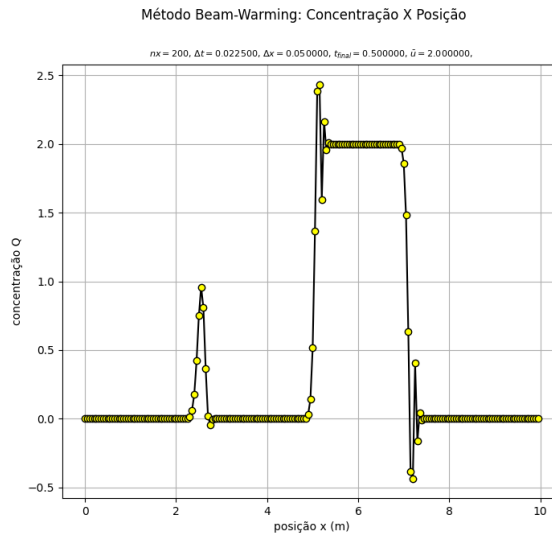


Figura 4.22:  $t_{final} = 0,5s$

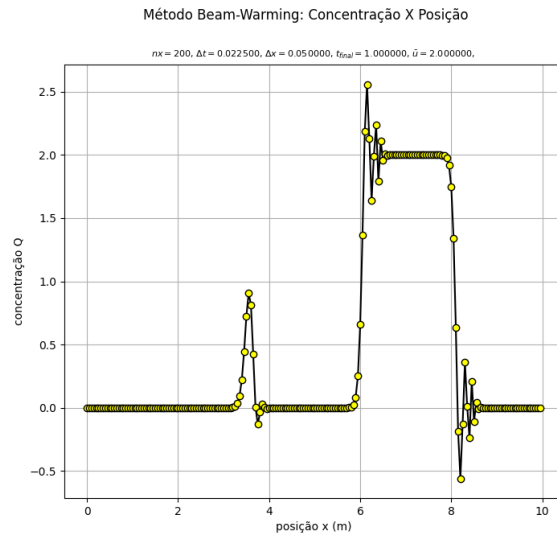


Figura 4.23:  $t_{\text{final}} = 1,0\text{s}$

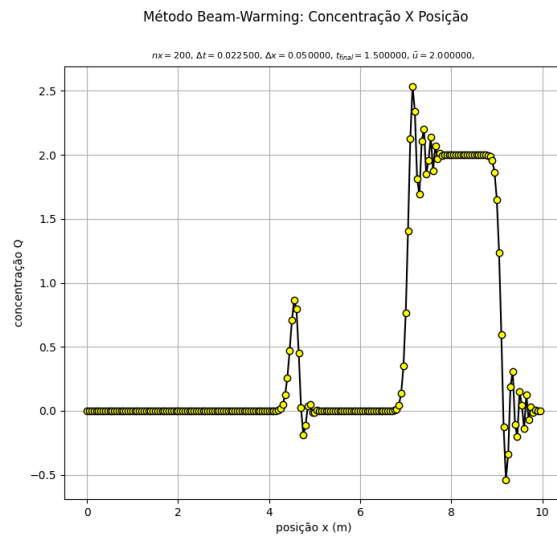


Figura 4.24:  $t_{\text{final}} = 1,5\text{s}$

<inserir observações>

## 5. Discussão

A discussão entra aqui.



## 6. Conclusão

Equações diferenciais modelam quase tudo a nossa volta. A imagem introdutória, do despejo de esgoto, é exemplo disso. Ser capaz de aliar a análise matemática ao poder de processamento de um computador desbloqueia inúmeras possibilidades, principalmente no campo de engenharia.

Muitas vezes, equações diferenciais parciais não possuem solução analítica. Apesar de isto parecer um obstáculo intransponível, é possível resolvê-las usando alguns métodos alternativos.

Com o auxílio do Método dos Volumes Finitos, é viável resolver EDPs muito difíceis desde que se sua forma discretizada respeite as regras de consistência, convergência e estabilidade. Assim será possível analisar seu comportamento ao longo do tempo, e determinar o seu significado físico.

Neste trabalho foi possível perceber que cada parâmetro tem uma influência sobre o comportamento da simulação da EDP. Em alguns casos, pequenas alterações são insignificantes e, em outros, extremamente notáveis. O conhecimento do comportamento destes parâmetros aplicado a ferramenta computacional agiliza o desenvolvimento de projetos de engenharia, e viabiliza alguns que seriam impraticáveis de serem resolvidos manualmente.

## 7. Referências Bibliográficas

A bibliografia entra aqui.

## 8. Código Computacional

### 8.0.1 Código Principal (main.h & main.c)

#### Arquivo main.h

```
/******  
 *      Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II -- Trabalho 1      *  
 *                               Ariel Nogueira Kovaljski                    *  
 *****/  
  
/*===== Parâmetros a serem ajustados =====*/  
  
#define Lx      100.0      /* Lx: comprimento do domínio (em m) */  
#define nx      50        /* nx: número de células */  
#define Delta_x (Lx/nx)   /* Delta_x: largura de cada célula (em m) */  
#define u_bar   0.2        /* u_bar: velocidade de escoamento (em m/s) */  
#define alpha   2.0e-4     /* alpha: coeficiente de difusão */  
#define c_ini   1.0        /* concentração inicial nos volumes da malha */  
#define c_inj   1.5        /* concentração de injeção nos vol. da malha */  
#define t_final 300.0      /* tempo final da simulação (em segundos) */  
/* Delta_t: passo de tempo (em segundos) */  
#define Delta_t (0.1 * (1/( (2*alpha)/(Delta_x*Delta_x) + u_bar/Delta_x ) ))  
  
/*=====*/  
  
void listParameters();  
void initializeArray(double arr[], int len, double value);  
void calculateQ(double old_arr[], double new_arr[]);  
void printAndSaveResults(double arr[], int len);
```

#### Arquivo main.c

```
/******  
 *      Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II -- Trabalho 1      *  
 *                               Ariel Nogueira Kovaljski                    *  
 *****/  
  
#include <stdio.h>  
#include <stdlib.h>  
#include "main.h"  
  
int main(void)  
{  
  
    double Q_new[nx];      /* array de Q no tempo n+1 */  
    double Q_old[nx];      /* array de Q no tempo n */  
  
    puts("\nMNED II - Trabalho 1\n=====");  
    puts("por Ariel Nogueira Kovaljski\n");
```

```

listParameters();

/* inicializa os arrays Q para uma concentração c_ini inicial */
initializeArray(Q_old, nx, c_ini);
initializeArray(Q_new, nx, c_ini);

calculateQ(Q_old, Q_new);
printAndSaveResults(Q_new, nx);

return 0;
}

void listParameters()
{
    puts("Parametros\n-----");
    puts("Constantes da equacao:");
    printf("Delta_t = %f, Delta_x = %f, u_bar = %3.2e, alpha = %3.2e, "
           "c_inj = %3.2e\n\n", Delta_t, Delta_t, u_bar, alpha, c_inj);
    puts("Constantes da simulacao:");
    printf("nx = %d, t_final = %f, c_ini = %3.2e\n\n", nx, t_final, c_ini);
}

/* Inicializa um array para um valor de entrada */
void initializeArray(double arr[], int len, double value)
{
    int i;
    for (i = 0; i < len; ++i) {
        arr[i] = value;
    }
}

/* Calcula as concentrações na malha ao longo do tempo */
void calculateQ(double old[], double new[])
{
    int x;
    int progress = 0, progress_count = 0;
    int progress_incr = (t_final/Delta_t) * 5 / 100;
    double t = 0;

    do {

        /*****
        *
        *          |==@==|==@==|==@==|==@==|==@==|==@==|
        *          ^
        *          Para o volume da fronteira esquerda
        *          o índice 0 refere-se ao volume nº 1 da malha
        */
        new[0] = old[0] - Delta_t/Delta_x * (
            u_bar * (2*old[0] - 2*c_inj)
            - alpha * (old[1] - 3*old[0] + 2*c_inj) / Delta_x
        );

        /*****
        *
        *          |==@==|==@==|==@==|==@==|==@==|==@==|
        *          ^   ^   ^   ^   ^
        *          Para os volumes do centro da malha
        */
        for (x = 1; x < nx - 1; ++x) {
            new[x] = old[x] - Delta_t/Delta_x * (

```

```

        u_bar * (old[x] - old[x-1])
        - alpha * (old[x+1] - 2*old[x] + old[x-1]) / Delta_x
    );
}

/*****
*
*      |==@==|==@==|==@==|==@==|==@==|==@==|
*      ^
*      Para o volume da fronteira direita
*      x possui valor de nx - 1 nesse ponto
*/
new[x] = old[x] - Delta_t/Delta_x * (
    u_bar * (old[x] - old[x-1])
    - alpha * (old[x-1] - old[x]) / Delta_x
);

/* incrementa o progresso a cada 5% */
if (progress_count == progress_incr){
    progress_count = 0;
    ++progress;
    printf("\rCalculando... %d%% concluido", progress * 5);
    fflush(stdout);
}

/* Atualiza array de valores antigos com os novos para a próxima
iteração */
for (x = 0; x < nx; ++x) {
    old[x] = new[x];
}

/* incrementa contador para cada 5% */
++progress_count;

} while ( (t += Delta_t) <= t_final);

}

/* Imprime na tela e salva os resultados num arquivo de saída */
void printAndSaveResults(double arr[], int len)
{
    int i;
    FILE *results_file;    /* Ponteiro para o arquivo de resultados */

    /* Imprime os resultados no console */
    printf("\n\nQ[%d] (tempo final: %.2fs) = [", nx, t_final);
    for (i = 0; i < len - 1; ++i) {
        printf("%f, ", arr[i]);
    }
    printf("%f]\n\n", arr[i]);

    /* Error Handling -- Verifica se é possível criar/escrever o arquivo de
    resultados */
    if ( (results_file = fopen("./results/results.txt", "w") ) == NULL
        && (results_file = fopen("../results/results.txt", "w")) == NULL) {
        fputs("[ERR] Houve um erro ao escrever o arquivo \"results.txt\"! "
            "Os resultados nao foram salvos.\n", stderr);
        exit(1);
    }

    /* Adiciona os resultados no arquivo "results.txt" */
    fprintf(results_file,

```

```

        "nx=%d\n"
        "Delta_t=%f\n"
        "Delta_x=%f\n"
        "t_final=%f\n"
        "u_bar=%f\n"
        "alpha=%f\n"
        "c_ini=%f\n"
        "c_inj=%f\n",
        nx, Delta_t, Delta_x, t_final, u_bar, alpha, c_ini, c_inj);
fputs("*****\n", results_file);

for (i = 0; i < len; ++i) {
    fprintf(results_file, "%d,%f\n", i + 1, arr[i]);
}

fclose(results_file); /* fecha o arquivo */

puts("[INFO] Os resultados foram salvos no arquivo \"results.txt\" "
      "no diretorio \"results/\".");
}

```

## 8.0.2 Código do Gráfico (plot\_graph.py)

```

#####
# Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II -- Trabalho 1 #
# Ariel Nogueira Kovaljski #
#####

import matplotlib.pyplot as plt

x = []
y = []
parameters = {}

# Abre arquivo para leitura
f = open('./results/results.txt', 'r')

for line_number, line in enumerate(f):
    if line_number < 8:
        # Adiciona parâmetros da simulação em um dicionário
        parameters[line.split('=')[0]] = (line.split('=')[1]).split('\n')[0]
    elif line_number == 8:
        # Pula linha separadora
        pass
    else:
        # Separa valores na lista 'x' e na lista 'y'
        x.append( int(line.split(',')[0]) )
        y.append( float( (line.split(',')[1]).split('\n')[0] ) )

# Configura e exibe o gráfico
fig, ax = plt.subplots()
fig.set_size_inches(8, 7) # Size of the window (1in = 100px)
ax.grid(True)

plt.suptitle("Concentração X Célula")
plt.title(rf"$nx = {parameters['nx']}$, "
          rf"$\Delta t = {parameters['Delta_t']}$, "
          rf"$\Delta x = {parameters['Delta_x']}$, "
          rf"$t_{{final}} = {parameters['t_final']}$, "
          rf"$\bar{u} = {parameters['u_bar']}$, "
          rf"$\alpha = {parameters['alpha']}$, "
          rf"$c_{{ini}} = {parameters['c_ini']}$, ")

```

```

rf"$c_{inj}" = {parameters['c_inj']}$", fontsize=8)

# Rótulo X -- resolvendo problema da célula
plt.xlabel("índice célula (i)")
plt.ylabel("concentração (Q)")
plt.plot(x,y,'ko-', markerfacecolor='cyan', markeredgecolor='k')
plt.show()

```