

# Trabalho 2 de Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II

Ariel Nogueira Kovaljski

Nova Friburgo, 19 de novembro de 2020

# Sumário

1	Res	sumo .			
<b>2</b>	Inti	rodução	o		
	2.1	A Equ	ação de Advecção		
	2.2		o dos Volumes Finitos		
3	Me	todolog	gia		
	3.1	_	ções Inicial e de Contorno		
	3.2		os Numéricos		
		3.2.1	Métodos Upwind		
		3.2.2	Lax-Friedrichs (L-F)		
		3.2.3	Métodos de Alta Resolução		
	3.3	Estabi	lidade		
	3.4		ımação		
4	Res	ultado	s		
	4.1		rd Time-Backward Space (FTBS)		
		4.1.1	Resultados para variações de $nx$		
		4.1.2	Resultados para variações de $t_{\rm final}$		
	4.2	Lax-Fr	riedrichs (L-F)		
		4.2.1	Resultados para variações de $nx$		
		4.2.2	Resultados para variações de $t_{\rm final}$		
	4.3	Lax-W	Vendroff (L-W)		
		4.3.1	Resultados para variações de $nx$		
		4.3.2	Resultados para variações de $t_{\rm final}$		
	4.4	Beam-	Warming (B-W)		
		4.4.1	Resultados para variações de $nx$		
		4.4.2	Resultados para variações de $t_{\rm final}$		
5	Dis	Discussão			
6	Cor	ıclusão			
7	Referências Bibliográficas				
8	Cóc	ligo Co 8.0.1	omputacional		
		0.0	Código do Gráfico (plot graph py)		

# Lista de Figuras

4.1	FTBS: $nx = 100$	13
4.2	FTBS: $nx = 200 \dots \dots$	13
4.3	FTBS: $nx = 400$	14
4.4	FTBS: $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s	14
4.5	FTBS: $t_{\text{final}} = 1,0$ s	15
4.6	FTBS: $t_{\text{final}} = 3.0 \text{s} \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	15
4.7	FTBS: $t_{\text{final}} = 6.0 \text{s} \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	16
4.8	L-F: $nx = 100 \dots \dots$	17
4.9	L-F: $nx = 200 \dots \dots$	17
4.10	L-F: $nx = 400 \dots \dots$	18
4.11	L-F: $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s	18
	L-F: $t_{\text{final}} = 1,0$ s	19
4.13	L-F: $t_{\text{final}} = 3.0 \text{s}$	19
4.14	L-F: $t_{\text{final}} = 6.0$ s	20
4.15	L-W: $nx = 100$	21
4.16	L-W: $nx = 200$	21
4.17	L-W: $nx = 400$	22
4.18	L-W: $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s	22
4.19		23
4.20	L-W: $t_{\text{final}} = 3,0$ s	23
4.21	L-W: $t_{\text{final}} = 6,0$ s	24
4.22	B-W: $nx = 100$	25
		25
4.24	B-W: $nx = 400$	26
4.25	B-W: $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s	26
4.26	B-W: $t_{\text{final}} = 1,0$ s	27
4.27	B-W: $t_{\text{final}} = 3.0 \text{s} \dots \dots \dots$	27
4.28	B-W: $t_{\text{final}} = 6.0 \text{s} \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	28

## 1. Resumo

A obtenção de solução de equações diferenciais parciais (EDPs) é muitas vezes extremamente difícil ou até mesmo impossível, pois a mesma pode não possuir solução analítica. Através do Método dos Volumes Finitos, é possível discretizá-la, o que permite a obtenção de uma solução numérica aproximada ao se utilizar métodos numéricos computacionais.

Neste trabalho, foram utilizados quatro métodos numéricos — Forward Time-Backward Space (FTBS), Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff e Beam-Warming — visando resolver a EDP da advecção. A partir da solução obtida por cada método, foram variados parâmetros como o número de células e o tempo de simulação, o que permitiu observar o comportamento de cada e compará-los, revelando suas vantagens e desvantagens para cada situação.

## 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 dos 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

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

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \tag{2.2}$$

### 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. Partindo de um problema unidimensional, temos um caso particular da lei de conservação discretizada,

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n \right)$$
 (2.3)

onde F indica o fluxo, definido como,

$$F_{i\pm 1/2}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(x_{i\pm 1/2}, t) dt$$

e Qindica as concentrações na malha, definido como

$$Q_i^n \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{i_{i+1/2}} \phi(x, t_n) dx$$

Considerando que, para problemas hiperbólicos, a velocidade de propagação é finita, é possível definir uma representação para os fluxos nas faces do volume de controle em função de  $Q^n$ , isto é,

$$F_{i-1/2}^{n} = \mathcal{F}(Q_{i-1}^{n}, Q_{i}^{n})$$

$$F_{i+1/2}^n = \mathcal{F}(Q_i^n, Q_{i+1}^n)$$

Reescrevendo a Eq. 2.3 em função de  $\mathcal{F}$  obtém-se,

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ \mathcal{F}(Q_i^n, Q_{i+1}^n) - \mathcal{F}(Q_{i-1}^n, Q_i^n) \right]$$
 (2.4)

de forma que o valor futuro  $Q_i^{n+1}$  depende explicitamente dos valores anteriores  $Q^n$  na vizinhança do volume i e das funções  $\mathcal{F}$ .

Neste trabalho, serão utilizados quatro métodos numéricos baseados no método dos volumes finitos — 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

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

e as condições de contorno são dadas pelas seguintes equações

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

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,

$$\left(\frac{\partial c}{\partial c}\right)_{x=0}^{t} \approx \frac{Q_1^n - Q_0^n}{\Delta x} = 0$$

$$\therefore Q_1^n = Q_0^n \tag{3.4}$$

e para o contorno direito,

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

$$\therefore Q_{nx+1}^n = Q_{nx}^n \tag{3.5}$$

### 3.2 Métodos Numéricos

Os métodos numéricos utilizados para a resolução da equação de advecção são diversos. Nesta seção serão tratados os quatro métodos utilizados neste trabalho.

#### 3.2.1 Métodos Upwind

Problemas hiperbólicos, como a equação da advecção, possuem informação (ondas) que se propagam com uma velocidade e sentido característico. A utilização de métodos *upwind* leva em conta essa característica, permitindo uma modelagem mais acurada do fenômeno tratado. 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 trata da ideia de que, para a equação da advecção unidimensional, há apenas uma única onda que se propaga. O método upwind determina o valor de  $Q_i^{n+1}$ , onde, para um  $\bar{u}>0$ , resulta em um fluxo da esquerda para a direita, de forma que a concentração de cada volume  $Q_i^{n+1}$  depende dos volumes atual  $Q_i^n$  e anterior  $Q_{i-1}^n$ . Sua discretização é:

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

aplicando as condições de contorno, obtém-se,

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x} (Q_1^n - Q_1^n)$$

$$\therefore Q_1^{n+1} = Q_1^n$$
(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 Lax-Friedrichs (L-F)

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

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

aplicando as condições de contorno, obtém-se

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

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

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

#### 3.2.3 Métodos de Alta Resolução

A utilização de métodos *upwind* de primeira ordem, apesar de simples, acaba por introduzir significativa difusão numérica, impactando negativamente a acurácia da solução. Os métodos de alta resolução introduzem um termo corretivo, de maneira a minimizar a influência da difusão numérica sobre o resultado final. Os métodos de alta resolução escolhidos para a resolução da equação da advecção são o Lax-Wendroff (L-W) e Beam-Warming (B-W).

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

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

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

aplicando as condições de contorno, obtém-se,

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

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

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

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

$$Q_{nx}^{n+1} = Q_{nx}^{n} - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} \left( Q_{nx}^{n} - Q_{nx-1}^{n} \right) + \frac{\bar{u}^{2}\Delta t^{2}}{2\Delta x^{2}} \left( Q_{nx-1}^{n} - Q_{nx}^{n} \right)$$
(3.13)

#### Beam-Warming (B-W)

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

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

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,

$$Q_2^{n+1} = Q_2^n - \frac{\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} \left( 3Q_2^n - 4Q_1^n + Q_1^n \right) + \frac{\bar{u}^2 \Delta t^2}{2\Delta x^2} \left( Q_2^n - 2Q_1^n + Q_1^n \right)$$

$$Q_2^{n+1} = Q_2^n - \frac{3\bar{u}\Delta t}{2\Delta x} \left( Q_2^n - Q_1^n \right) + \frac{\bar{u}^2 \Delta t^2}{2\Delta x^2} \left( Q_2^n - Q_1^n \right)$$
(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,

$$\Delta t \le C \left( \frac{1}{\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \frac{\bar{u}}{\Delta x}} \right) \tag{3.16}$$

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

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

$$\Delta t \leq C \left( \frac{1}{\frac{\bar{u}}{\Delta x}} \right)$$

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

obtém-se assim a condição de estabilidade para os métodos numéricos para a equação da advecção, onde C trata-se do número de Courant: adota-se um valor de 0,9 para estre trabalho, visando satisfazer a condição de estabilidade e evitar possíveis erros numéricos durante o cálculo computacional. O método obtido 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 para o método Beam-Warming, que
    // utiliza Lax-Wendroff apenas para este caso
    if (method == BW) {leftBoudary(LW, 0);}
    // Cálculo do volume da fronteira esquerda, onde 'leftBoundary' é a função
    // da fronteira esquerda específica a cada método. Caso o método seja
    // 'Beam-Warming', calcula-se o volume logo após a fronteira.
    Q_new[0] = method == BW ? leftBoundary(method, 1) : 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 o próximo passo
    // de tempo
    for (i = 0; i < nx; ++i) {
        Q_old[i] = Q_new[i];
```

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

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 té 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:

- $L_x = 10$ m (comprimento do domínio)
- nx = 200 (número de células)
- $\bar{u} = 2\text{m/s}$  (velocidade de escoamento)
- $t_{\rm final}=1$ s (tempo final de simulação)
- $\Delta x = \frac{L_x}{nx} = 0,05 \text{m}$  (passo no espaço)
- $\Delta t = 0, 9\left(\frac{\Delta_x}{\bar{u}}\right) = 0,0225$ s (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:

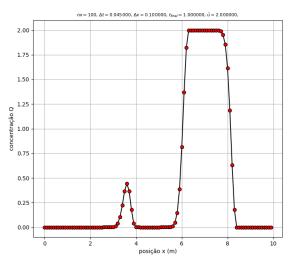


Figura 4.1: FTBS: nx = 100

#### Método FTBS: Concentração X Posição

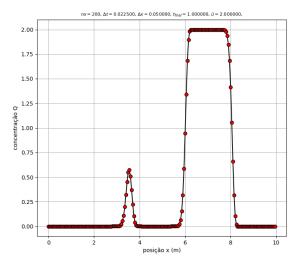


Figura 4.2: FTBS: nx = 200

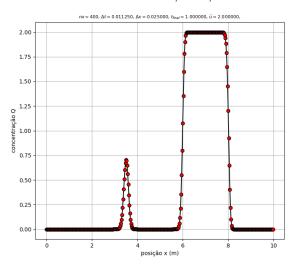


Figura 4.3: FTBS: nx = 400

Nota-se que o refinamento da malha resulta em uma curva mais suave, devido ao aumento da resolução. Este aumento no número de nós torna a solução discreta mais próxima da contínua (solução real).

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

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

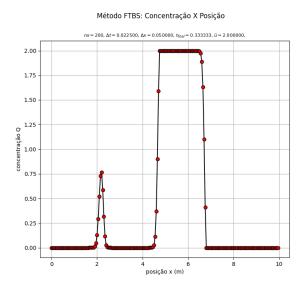


Figura 4.4: FTBS:  $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s

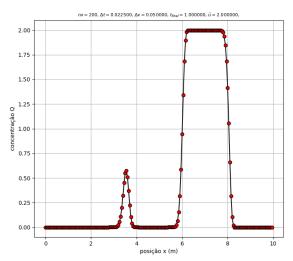


Figura 4.5: FTBS:  $t_{\rm final}=1,0{\rm s}$ 

#### Método FTBS: Concentração X Posição

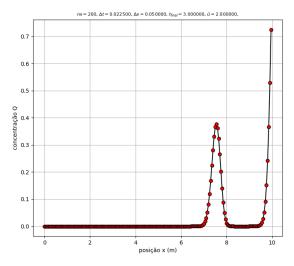


Figura 4.6: FTBS:  $t_{\text{final}} = 3,0\text{s}$ 

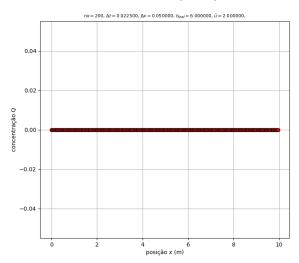


Figura 4.7: FTBS:  $t_{\text{final}} = 6,0$ s

Nota-se com o avanço do tempo, a onda, representada no gráfico, tende a se deslocar para a direita, devido ao valor de  $\bar{u}$  positivo. Para um tempo grande o suficiente, a concentração se estabiliza em zero.

## 4.2 Lax-Friedrichs (L-F)

## 4.2.1 Resultados para variações de nx

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

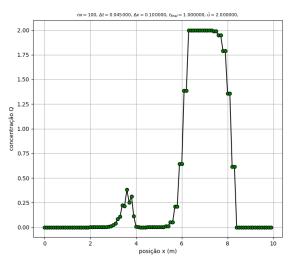


Figura 4.8: L-F: nx = 100

#### Método Lax-Friedrichs: Concentração X Posição

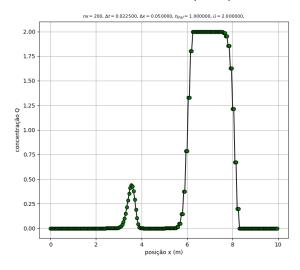


Figura 4.9: L-F: nx = 200

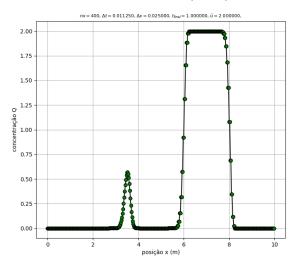


Figura 4.10: L-F: nx = 400

Nota-se que o refinamento da malha resulta em uma curva mais suave, devido ao aumento da resolução. Este aumento no número de nós torna a solução discreta mais próxima da contínua (solução real).

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

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

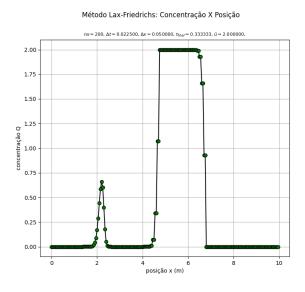


Figura 4.11: L-F:  $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s

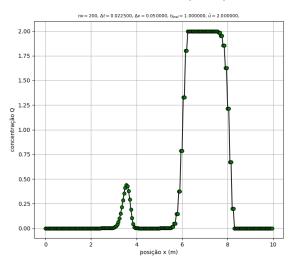


Figura 4.12: L-F:  $t_{\text{final}} = 1,0$ s

#### Método Lax-Friedrichs: Concentração X Posição

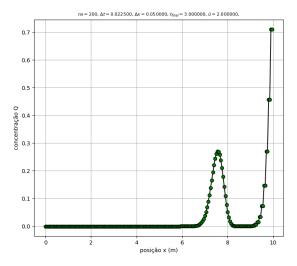


Figura 4.13: L-F:  $t_{\text{final}} = 3,0$ s

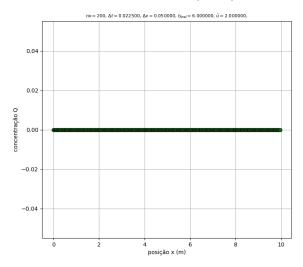


Figura 4.14: L-F:  $t_{\text{final}} = 6,0\text{s}$ 

Nota-se com o avanço do tempo, a onda, representada no gráfico, tende a se deslocar para a direita, devido ao valor de  $\bar{u}$  positivo. Para um tempo grande o suficiente, a concentração se estabiliza em zero.

## 4.3 Lax-Wendroff (L-W)

### 4.3.1 Resultados para variações de nx

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

#### Método Lax-Wendroff: Concentração X Posição

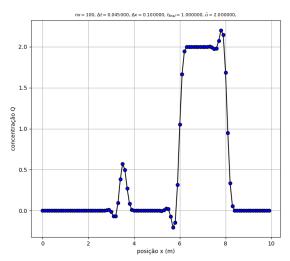


Figura 4.15: L-W: nx = 100

#### Método Lax-Wendroff: Concentração X Posição

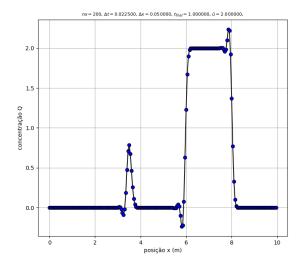


Figura 4.16: L-W: nx = 200



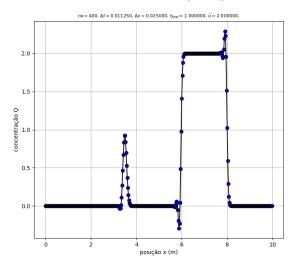


Figura 4.17: L-W: nx = 400

Nota-se, com o refinamento da malha, a presença das oscilações numéricas características do método.

Nota-se que o refinamento da malha resulta em uma curva mais suave, devido ao aumento da resolução, além disso, nota-se a presença de oscilações numéricas características do método.

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

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

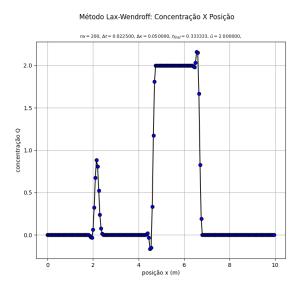


Figura 4.18: L-W:  $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s

#### Método Lax-Wendroff: Concentração X Posição

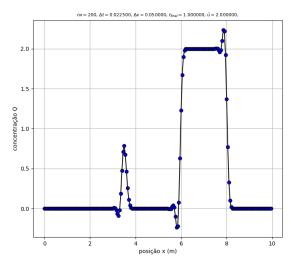


Figura 4.19: L-W:  $t_{\rm final}=1,0{\rm s}$ 

#### Método Lax-Wendroff: Concentração X Posição

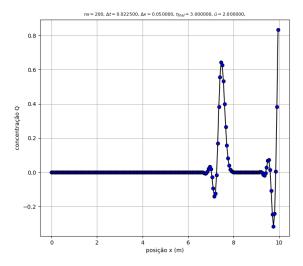


Figura 4.20: L-W:  $t_{\rm final}=3,0{\rm s}$ 



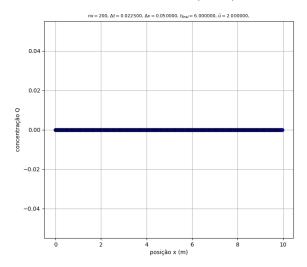


Figura 4.21: L-W:  $t_{\rm final}=6,0{\rm s}$ 

Nota-se com o avanço do tempo, a onda, representada no gráfico, tende a se deslocar para a direita, devido ao valor de  $\bar{u}$  positivo. Para um tempo grande o suficiente, a concentração se estabiliza em zero.

## 4.4 Beam-Warming (B-W)

## 4.4.1 Resultados para variações de nx

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

#### Método Beam-Warming: Concentração X Posição

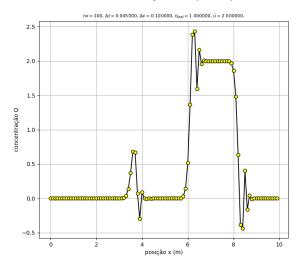


Figura 4.22: B-W: nx = 100

#### Método Beam-Warming: Concentração X Posição

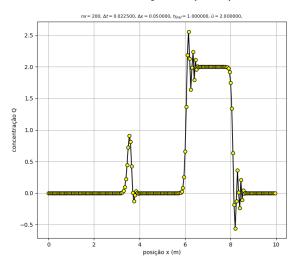


Figura 4.23: B-W: nx = 200



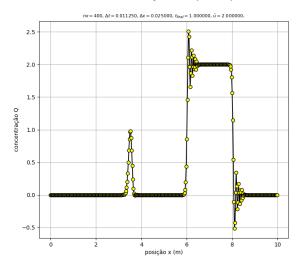


Figura 4.24: B-W: nx = 400

Nota-se que o refinamento da malha resulta em uma curva mais suave, devido ao aumento da resolução, além disso, nota-se a presença de oscilações numéricas características do método.

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

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

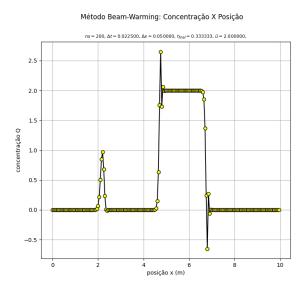


Figura 4.25: B-W:  $t_{\text{final}} = \frac{1}{3}$ s

#### Método Beam-Warming: Concentração X Posição

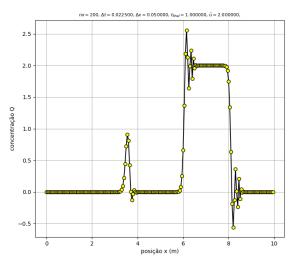


Figura 4.26: B-W:  $t_{\rm final}=1,0{\rm s}$ 

#### Método Beam-Warming: Concentração X Posição

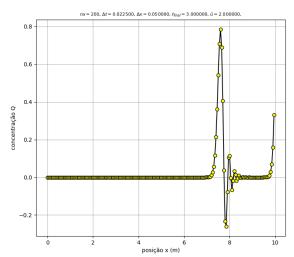


Figura 4.27: B-W:  $t_{\text{final}} = 3,0$ s

#### Método Beam-Warming: Concentração X Posição

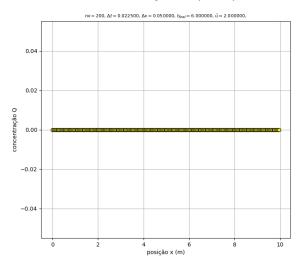


Figura 4.28: B-W:  $t_{\text{final}} = 6,0$ s

Nota-se com o avanço do tempo, a onda, representada no gráfico, tende a se deslocar para a direita, devido ao valor de  $\bar{u}$  positivo. Para um tempo grande o suficiente, a concentração se estabiliza em zero.

## 5. Discussão

Observa-se que a aplicação de diferentes métodos numéricos para um mesmo problema — neste caso, a EDP da advecção — resulta em soluções bastante diferentes. Métodos de primeira ordem como FTBS e Lax-Friedrichs, possuem erro de truncamento na ordem de  $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$  o que introduz uma pequena difusão numérica e oscilações. Métodos de segunda ordem como Lax-Wendroff e Beam-Warming apesar de tecnicamente melhores, apresentam erro de truncamento na ordem de  $\frac{\partial^3 c}{\partial x^3}$  o que resulta em dispersão numérica e maiores oscilações. Em relação aos refinamentos da malha, nota-se que todos os métodos se

Em relação aos refinamentos da malha, nota-se que todos os métodos se comportam de maneira similar. Uma diminuição no número de nós nx resulta em uma curva mais "pontiaguda" e um aumento deste resulta em uma curva mais "suave". Como consequência, pode-se concluir que o refinamento da malha aproxima os gráficos — pertencentes ao domínio discreto — da solução contínua, dada pela EDP analítica.

Em relação às mudanças em  $t_{\rm final}$ , observa-se que novamente os métodos apresentam comportamento similar. Conforme o avanço do tempo, o efeito advectivo faz com que as concentrações se desloquem para a direita, o que está de acordo com a velocidade  $\bar{u} > 0$ . Dado um tempo suficientemente longo, as concentrações se estabilizam em zero.

## 6. Conclusão

Equações diferenciais são uma ferramenta poderosa para a modelagem de problemas físicos. A EDP da advecção, muito utilizada na modelagem do escoamento de fluídos, pode ser difícil ou até impossível de resolver analiticamente.

Desta forma, se faz necessário o uso de métodos numéricos, os quais permitem a obtenção de uma solução aproximada para o problema. Diferentes métodos possuem diferentes comportamentos, com vantagens e desvantagens para cada situação. Neste trabalho, foi estudado o comportamento de quatro métodos, na busca da solução da equação da advecção.

Seguindo as condições de estabilidade, foi possível perceber que métodos como o FTBS e Lax-Friedrichs possuem um comportamento bastante suave, com poucas oscilações, mas não tão boa acurácia. Métodos de alta resolução como Lax-Wendroff e Beam-Warming possuem melhor acurácia, mas sofrem de oscilações espúrias que prejudicam sua precisão.

A escolha dentre diferentes métodos é necessária dependendo dos parâmetros do problema físico e do projeto de engenharia a ser estudado. É necessário estabelecer um  $\it tradeoff$  entre tempo de projeto vs. acurácia da solução, de maneira a manter os custos sob controle.

## 7. Referências Bibliográficas

- 1. **Pedro Amaral Souto**, Helio & **de Souza Boy**, Grazione, *Apostila de "Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II"*, 2020
- 2. **Pedro Amaral Souto**, Helio & **de Souza Boy**, Grazione, *Notas de aula de "Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II"*, 2020

## 8. Código Computacional

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

```
Arquivo main.h
```

#include <stdio.h>

```
Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II -- Trabalho 2
        Ariel Nogueira Kovaljski
 /*-----/
          (10.0)
(200)
#define LX
                             /* comprimento do domínio (em m)
                            /* número de células
/* largura de cada célula (em m)
/* velocidade de escoamento (em m/s)
#define NX
                                                                */
#define DELTA_X (LX/NX)
#define U_BAR (2.0)
#define T_FINAL (1.0)
                            /* tempo final da simulação (em segundos) */
#define COURANT (0.9)
                             /* C: número de courant
#define DELTA_T (COURANT*DELTA_X/U_BAR) /* passo de tempo (em segundos)
#define A (100.0)
#define B (1.5)
                             /* Parâmetros da condição inicial */
#define C (4.0)
#define D (6.0)
#define E (2.0)
/* Métodos utilizados para o cálculo de Q neste trabalho */
enum methods {FTBS, LF, LW, BW};
void listParameters();
void initializeArray(double arr[], int len, double a, double b, double c,
                 double d, double e);
void calculateQ_FTBS(double old_arr[], double new_arr[]);
void calculateQ_LF(double old_arr[], double new_arr[]);
void calculateQ_LW(double old_arr[], double new_arr[]);
void calculateQ_BW(double old_arr[], double new_arr[]);
void printAndSaveResults(double arr[], int len, int method);
Arquivo main.c
* Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II -- Trabalho 2 *
                      Ariel Nogueira Kovaljski
 *******************************
```

```
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <string.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("MNED II - Trabalho 2\n"
         "======\n"
         "por Ariel Nogueira Kovaljski\n");
    listParameters();
    /* Cálculo de Q via método Forward Time-Backward Space (FTBS) */
    initializeArray(Q_old, NX, A, B, C, D, E);
    initializeArray(Q_new, NX, A, B, C, D, E);
    calculateQ_FTBS(Q_old, Q_new);
    printAndSaveResults(Q_new, NX, FTBS);
    /* Cálculo de Q via método Lax-Friedrichs */
    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);
    /* Cálculo de Q via método Lax-Wendroff */
    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);
    /* Cálculo de Q via método Beam-Warming */
    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);
   return 0;
}
void listParameters()
    puts("Parametros\n----");
   puts("Constantes da equacao:");
    printf("DELTA_T = \%f, DELTA_X = \%f, U_BAR = \%3.2e\n\n",
          DELTA_T, DELTA_T, U_BAR);
    puts("Constantes da simulacao:");
    printf("NX = %d, T_FINAL = %f\n\n", NX, T_FINAL);
/* Inicializa um array para um valor de entrada */
void initializeArray(double arr[], int len, double a, double b, double c,
                    double d, double e)
    /********************
                        Condição de contorno
                    c(x,0) = exp(-A(x-B)^2) + s(x)
```

```
onde s(x) = \{ E,
                                se C <= x <= D
                         { 0,
    int i;
   double x, s;
    for (i = 0; i < len; ++i) {
       x = i * DELTA_X;
       s = (x \ge c \&\& x \le d ? e : 0);
       arr[i] = exp(-a * ((x - b)*(x - b))) + s;
}
/* Calcula as concentrações na malha ao longo do tempo */
/* Método Forward Time-Backward Space (FTBS) */
void calculateQ_FTBS(double old[], double new[])
    int i:
   int progress = 0, progress_count = 0;
    int progress_incr = (T_FINAL/DELTA_T) * 5.0 / 100;
   double t = 0;
   puts("Calculando FTBS...");
    do {
                    |==@==|==@==|==@==|==@==|
                    Para o volume da fronteira esquerda
                o índice O refere-se ao volume n^{\circ} 1 da malha
       new[0] = old[0];
        /**********************************
                    |==@==|==@==|==@==|==@==|
                         Para os volumes do centro
                       e na fronteira direita da malha
       */
       for (i = 1; i < NX; ++i) {
           new[i] = old[i] - U_BAR*DELTA_T/DELTA_X * (
              old[i] - old[i-1]
       }
        /* 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 o próximo
        passo de tempo */
       for (i = 0; i < NX; ++i) \{
           old[i] = new[i];
```

```
/* Incrementa contador para cada 5% */
        ++progress_count;
    } while ( (t += DELTA_T) <= T_FINAL );</pre>
}
/* Método Lax-Friedrichs */
void calculateQ_LF(double old[], double new[])
    int progress = 0, progress_count = 0;
    int progress_incr = (T_FINAL/DELTA_T) * 5.0 / 100;
    double t = 0;
    puts("Calculando Lax-Friedrichs...");
    do {
                     |==@==|==@==|==@==|==@==|
                    Para o volume da fronteira esquerda
                 o índice O refere-se ao volume n^{\,\varrho} 1 da malha
       new[0] = (
                   old[1] + old[0]
                 )/2 - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                   old[1] - old[0]
                     |==@==|==@==|==@==|==@==|
                     Para os volumes do centro da malha
        */
        for (i = 1; i < NX - 1; ++i) \{
           new[i] = (
                       old[i+1] + old[i-1]
                    )/2 - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                       old[i+1] - old[i-1]
                    );
        }
                    |==@==|==@==|==@==|==@==|
                     Para o volume da fronteira direita
                    i possui valor de NX - 1 nesse ponto
        */
       new[i] = (
                   old[i] + old[i-1]
                 )/2 - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                   old[i] - old[i-1]
                );
        /* 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 o próximo
       passo de tempo */
       for (i = 0; i < NX; ++i) {
           old[i] = new[i];
       /* Incrementa contador para cada 5% */
       ++progress_count;
   } while ( (t += DELTA_T) <= T_FINAL );</pre>
}
/* Método Lax-Wendroff */
void calculateQ_LW(double old[], double new[])
   int i:
   int progress = 0, progress_count = 0;
   int progress_incr = (T_FINAL/DELTA_T) * 5.0 / 100;
   double t = 0;
   puts("Calculando Lax-Wendroff...");
       /*********************
                   |==@==|==@==|==@==|==@==|
                   Para o volume da fronteira esquerda
               o indice O refere-se ao volume nº 1 da malha
       */
       new[0] = old[0] - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                 old[1] - old[0]
               ) + (U_BAR*U_BAR)*(DELTA_T*DELTA_T)/(2*DELTA_X*DELTA_X) * (
                  old[1] - old[0]
                   |==@==|==@==|==@==|==@==|
                    Para os volumes do centro da malha
       */
       for (i = 1; i < NX - 1; ++i) {
           new[i] = old[i] - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
              old[i+1] - old[i-1]
           ) + (U_BAR*U_BAR)*(DELTA_T*DELTA_T)/(2*DELTA_X*DELTA_X) * (
              old[i+1] - 2*old[i] + old[i-1]
           );
       }
       /*********************
                   |==@==|==@==|==@==|==@==|
                    Para o volume da fronteira direita
                   i possui valor de NX - 1 nesse ponto
       */
       new[i] = old[i] - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
           old[i] - old[i-1]
```

```
) + (U_BAR*U_BAR)*(DELTA_T*DELTA_T)/(2*DELTA_X*DELTA_X) * (
          old[i-1] - old[i]
       /* 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 o próximo
       passo de tempo */
       for (i = 0; i < NX; ++i) {
          old[i] = new[i];
       /* Incrementa contador para cada 5% */
       ++progress_count;
   } while ( (t += DELTA_T) <= T_FINAL );</pre>
}
/* Método Beam-Warming */
void calculateQ_BW(double old[], double new[])
   int i:
   int progress = 0, progress_count = 0;
   int progress_incr = (T_FINAL/DELTA_T) * 5.0 / 100;
   double t = 0;
   puts("Calculando Beam-Warming...");
   do {
       |==@==|==@==|==@==|==@==|
                  Para o volume da fronteira esquerda
               o indice O refere-se ao volume n^{\varrho} 1 da malha.
            O método de Lax-Wendroff é utilizado para este caso
      new[0] = old[0] - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                old[1] - old[0]
               ) + (U_BAR*U_BAR)*(DELTA_T*DELTA_T)/(2*DELTA_X*DELTA_X) * (
                 old[1] - old[0]
       |==@==|==@==|==@==|==@==|
               Para o volume logo após a fronteira esquerda
       new[1] = old[1] - 3 * U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                 old[1] - old[0]
               ) + (U_BAR*U_BAR)*(DELTA_T*DELTA_T)/(2*DELTA_X*DELTA_X) * (
                 old[1] - old[0]
       /*********************
```

```
|==@==|==@==|==@==|==@==|
                           Para os volumes do centro
                        e na fronteira direita da malha
        */
        for (i = 2; i < NX; ++i) {
            new[i] = old[i] - U_BAR*DELTA_T/(2*DELTA_X) * (
                        3*old[i] - 4*old[i-1] + old[i-2]
                     ) + (U_BAR*U_BAR)*(DELTA_T*DELTA_T)/(2*DELTA_X*DELTA_X) * (
                        old[i] - 2*old[i-1] + old[i-2]
        }
        /* 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 o próximo
        passo de tempo */
        for (i = 0; i < NX; ++i) {
            old[i] = new[i];
        /* Incrementa contador para cada 5% */
        ++progress_count;
    } while ( (t += DELTA_T) <= T_FINAL );</pre>
}
/* Imprime na tela e salva os resultados num arquivo de saída */
void printAndSaveResults(double arr[], int len, int method)
{
    int i:
    char filename[50], file0[50], file1[50];
                           /* Ponteiro para o arquivo de resultados */
    FILE *results_file;
    /* Prepara nome do arquivo de saída */
    switch (method) {
        case FTBS:
            snprintf(filename, 50, "%s%d%s", "results", method, ".txt");
            break:
        case LF:
            snprintf(filename, 50, "%s%d%s", "results", method, ".txt");
            break:
        case LW:
            snprintf(filename, 50, "%s%d%s", "results", method, ".txt");
            break;
            snprintf(filename, 50, "%s%d%s", "results", method, ".txt");
            break;
    }
    /* 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]);
```

```
/* Error Handling -- Verifica se é possível criar/escrever o arquivo de
                       resultados */
   snprintf(file0, 50, "%s%s", "./results/", filename);
snprintf(file1, 50, "%s%s", "./../results/", filename);
    if ( ( results_file = fopen(file0, "w") ) == NULL
       && ( results_file = fopen(file1, "w") ) == NULL) {
       fprintf(stderr, \ "[ERR] \ \ Houve \ um \ erro \ ao \ escrever \ o \ arquivo \ \ "%s\"! \ "
                       "Os resultados nao foram salvos.\n", filename);
       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",
           NX, DELTA_T, DELTA_X, T_FINAL, U_BAR);
    fputs("******************n", results_file);
    for (i = 0; i < len; ++i) {
       fprintf(results_file, "%f,%f\n", i * DELTA_X, arr[i]);
    fclose(results_file); /* Fecha o arquivo */
    printf("[INFO] Os resultados foram salvos no arquivo \"%s\" "
          "no diretorio \"results/\".\n\n", filename);
}
         Código do Gráfico (plot_graph.py)
8.0.2
Métodos Numéricos para Equações Diferenciais II -- Trabalho 2
                          Ariel Nogueira Kovaljski
import matplotlib.pyplot as plt
x0, y0 = [], []
x1, y1 = [], []
x2, y2 = [], []
x3, y3 = [], []
parameters = {}
    # Abre arquivos para leitura
    # Arquivo FTBS
    try:
       f0 = open('./results/results0.txt', 'r')
    except OSError as err:
       print("Erro ao abrir o arquivo 'results0.txt':", err)
    # Arquivo Lax-Friedrichs
       f1 = open('./results/results1.txt', 'r')
    except OSError as err:
       print("Erro ao abrir o arquivo 'results1.txt':", err)
```

printf("%f]\n\n", arr[i]);

```
# Arquivo Lax-Wendroff
       f2 = open('./results/results2.txt', 'r')
    except OSError as err:
       print("Erro ao abrir o arquivo 'results2.txt':", err)
    # Arquivo Beam-Warming
        f3 = open('./results/results3.txt', 'r')
    except OSError as err:
        print("Erro ao abrir o arquivo 'results3.txt':", err)
    # Extrai informações dos arquivos
    data_extract(f0, x0, y0)
    data_extract(f1, x1, y1)
    data_extract(f2, x2, y2)
    data_extract(f3, x3, y3)
    # Plota os gráficos de cada método
    plot_graph(x0, y0, 0)
    plot_graph(x1, y1, 1)
    plot_graph(x2, y2, 2)
   plot_graph(x3, y3, 3)
    # Exibe os gráficos
    plt.show()
def data_extract(f, x, y):
    for line_number, line in enumerate(f):
        if (line_number + 1) < 6:</pre>
            # Adiciona parâmetros da simulação em um dicionário
            parameters[line.split('=')[0]] = (line.split('=')[1]).split('\n')[0]
        elif (line_number + 1) == 6:
            # Pula linha separadora
           pass
        else:
            # Separa valores na lista 'x' e na lista 'y'
            x.append( float(line.split(',')[0]) )
            y.append( float((line.split(',')[1]).split('\n')[0]) )
def plot_graph(x, y, id):
    methods = {0:'FTBS', 1:'Lax-Friedrichs', 2:'Lax-Wendroff', 3:'Beam-Warming'}
    colors = {0: 'red', 1: 'green',
                                            2: 'blue',
                                                              3: 'yellow'}
    fig,ax = plt.subplots()
    fig.set_size_inches(8, 7)
   ax.grid(True)
    plt.suptitle(f"Método {methods[id]}: Concentração X Posição")
    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"$\bar{{u}} = {parameters['U_BAR']}$, ", fontsize=8)
    plt.xlabel("posição x (m)")
    plt.ylabel("concentração Q")
    plt.plot(x,y,'ko-', markerfacecolor=colors[id], markeredgecolor='k')
if __name__ == "__main__":
```

main()