Teste 5
Métodos Numéricos para EDPs e Problemas Inversos

EDP-Modelagem 2025/2

November 17, 2025

Introdução

O teste tem três opções de questões, cada uma correspondendo a um tipo diferente de equação diferencial parcial: parabólica, hiperbólica e elíptica. Escolha uma das questões para fazer e entregar. Cada questão é dividida em duas partes, um problema direto e um problema inverso O problema direto é obrigatório. O problema inverso é um bônus. Todas as equações diferenciais parciais são em duas dimensões espaciais e projetadas para serem resolvidas via método de diferenças finitas, mas também podem ser resolvidas via outros métodos, se acharem mais conveniente. A otimização necessária para a segunda parte pode ser feita de diversas maneiras e podem ser implementadas diretamente ou resolvidas via outros pacotes. A sua resposta deve contextualizar minimamente o problema como um todo e explicar o desenvolvimento da resolução e os resultados obtidos, devendo ser entregue em um único relatório, via Classroom, em formato de caderno Jupyter, em Python ou em Julia, contendo as explicações, os códigos e os gráficos.

Os problemas direto e inverso de cada questão podem ser resumidos da seguinte forma.

- **Parte 1: O Problema Direto.** Você receberá todos os parâmetros necessários para caracterizar completamente o modelo físico. Sua tarefa é escrever o código computacional de um *solver* para simular o sistema e, com ele, produzir os gráficos e resultados especificados. Isso prova, em particular, que seu *solver* funciona.
- **Parte 2: O Problema Inverso.** Alguns parâmetros do problema direto serão modificados e não informados, sendo parâmetros indeterminados do modelo. Você receberá arquivos de dados "experimentais" (gerados de dados sintéticos acrescidos de ruído) e a sua tarefa é usar seu *solver* da Parte 1 dentro de um loop de otimização (ex: busca em grade, Nelder-Mead, ou gradiente descendente) para encontrar valores aproximados, para os parâmetros desconhecidos do modelo, que melhor se ajustam aos dados fornecidos.

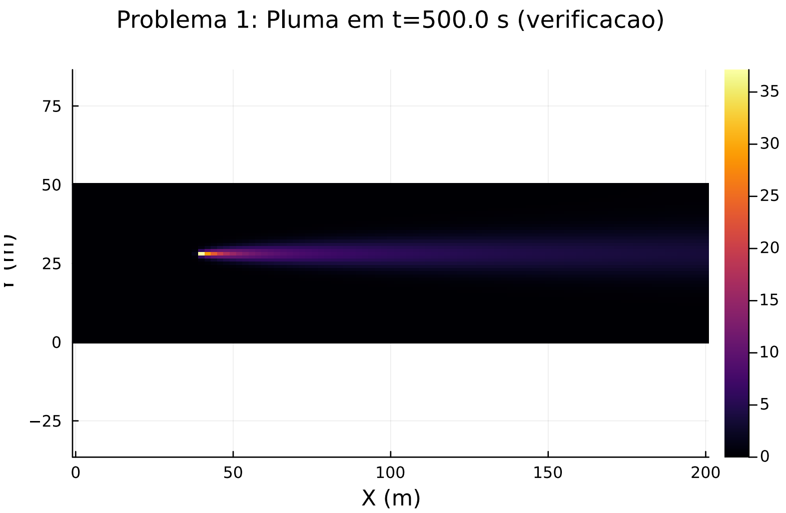
1 Questão 1 (Parabólico): Transporte de um poluente em um rio

Explicação do Modelo: Este modelo descreve como uma substância se move em um fluido como um rio. É uma combinação de dois processos:

- **Advecção:** O transporte da substância pelo movimento principal da correnteza do rio (como uma folha flutuando rio abaixo).
- **Difusão:** O processo da substância se espalhando de áreas de alta concentração para baixa concentração (como leite se misturando no café).

1.1 Parte 1: O Problema Direto (Simulando uma Pluma)

- **Objetivo:** Escrever um *solver* 2D de advecção-difusão para simular como uma fonte de poluente *conhecida* se espalha em um rio.
- **EDP:**
$$u_t + \mathbf{v}(y) \cdot \nabla u = D(u_{xx} + u_{yy}) + S(x, y).$$
- **Variáveis:**
  - $u(x, y, t)$: Concentração do poluente [massa/área, ex: g/m^2].
  - $\mathbf{v}(y)$: Vetor velocidade da correnteza [m/s].
  - D: Coeficiente de difusão [m^2/s].
  - $S(x, y)$: Densidade da fonte [g/(m$^2\cdot$ s)]. No código discreto, relaciona-se à taxa total de vazamento Q [g/s] dividida pela área da célula ($\Delta x \Delta y$).
- **Domínio:** $\Omega = [0, 200] \times [0, 50]$ (em metros).
- **Parâmetros Fornecidos:**
  - Campo de Velocidade: $\mathbf{v}(y) = (v(y), 0)$ com $v(y) = 1.0\frac{4y(50-y)}{50^2}$ $\texttt{m/s}$ (fluxo parabólico).
  - Difusão: $D = 0.1$ $\texttt{m}^2\texttt{/s}$.
  - Fonte: $S(x, y) = Q\delta(x - x_s)\delta(y - y_s)$ (densidade da fonte de poluente), com taxa constante $Q = 50.0$ $\texttt{g/s}$, localizada em $(x_s, y_s) = (40, 28)$ (em metros).
  - Condições de Contorno (CCs):
    - $u(0, y, t) = 0$ (Dirichlet, na entrada do rio, livre de poluente).
    - $\partial_x u(200, y, t) = 0$ (Neumann, na saída do rio e de poluente).
    - $\partial_y u(x, 0, t) = 0$ e $\partial_y u(x, 50, t) = 0$ (Neumann, margens do rio, sem fluxo de poluente).
  - Condição Inicial (CI): $u(x, y, 0) = 0$ (inicialmente, sem poluente, antes do "vazamento").
- **Tarefas & Entregáveis:** Faça um relatório descrevendo o problema, os métodos utilizados e os resultados obtidos, incluindo os seguintes pontos:
  1. Implemente um *solver* estável, em diferenças finitas (ex: *forward-time, centered-space (FTCS)* para a difusão, com *upwind* para a advecção).
  2. Rode sua simulação de $t = 0$ até $t = 500$ s.
  3. **Gráfico 1:** Mostre um gráfico de contorno 2D da concentração $u(x, y)$ em $t = 500$ $\texttt{s}$, semelhante ao gráfico a seguir



4. **Gráfico 2:** Plote a concentração $u(t, x, y)$ vs. tempo t em três locais distintos $M_i = (x_i, y_i)$, $i = 1, 2, 3$, correspondendo a três sensores, localizados em $M_1 = (150, 15)$ `m`, $M_2 = (150, 25)$ `m`, $M_3 = (150, 35)$ `m`.
5. **Concentração:** Determine a concentração em regime assintótico permanente (steady-state) no sensor $M_2 = (150, 25)$?

1.2 Parte 2: O Problema Inverso (Encontrando a Fonte)

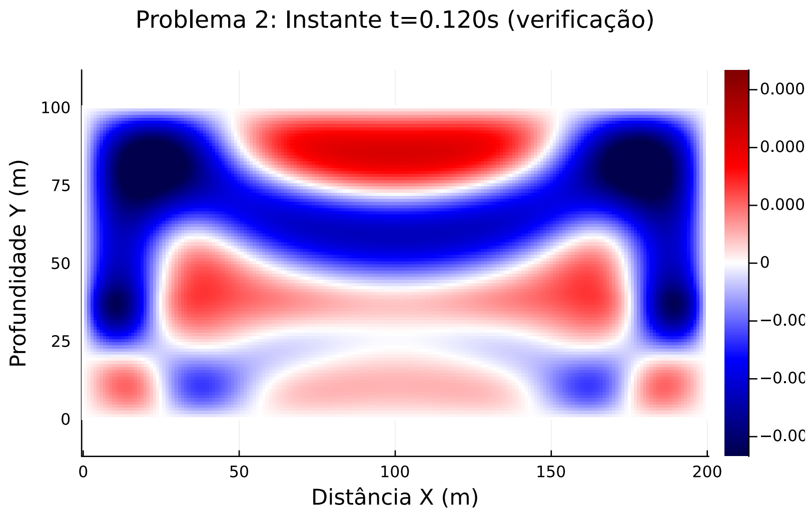
- **Objetivo:** Você recebe dados de sensores de um vazamento misterioso. Use seu *solver* para encontrar a localização e a intensidade do vazamento.
- **Configuração:** Mesma EDP, domínio, campo de velocidade, D, CIs, e CCs da Parte 1.
- **Incógnitas:** Os parâmetros $\mathbf{p} = (Q, x_s, y_s)$ da fonte foram modificados e são desconhecidos por você.
- **Dados Fornecidos:** `sensors_desafio.csv`. Este arquivo contém leituras de concentração $C_{\text{data}}(t_k)$ de:
  - $M_1 = (150, 15)$
  - $M_2 = (150, 25)$
  - $M_3 = (150, 35)$
- **Tarefas & Entregáveis:**
  1. Escreva uma rotina de otimização (ex: Busca em Grade ou Nelder-Mead) que "envolve" seu *solver* da Parte 1.
  2. Defina uma função de custo (loss) para minimizar. O objetivo é encontrar $\mathbf{p}^* = \arg\min L(\mathbf{p})$, onde:
  $$L(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^{3} \sum_{k} \left(u_{\text{num}}(M_j, t_k; \mathbf{p}) - C_{j,\text{data}}(t_k)\right)^2$$
  3. **Relatório:** Quais são os parâmetros de melhor ajuste $\mathbf{p}^* = (Q, x_s, y_s)$ que você encontrou?
  4. **Gráfico:** Crie um gráfico com três subplots. Em cada um, mostre os dados "reais" (ex: `sensor_M1`) como pontos e a previsão do seu modelo (ex: $u(M_1, t; \mathbf{p}^*)$) como uma linha contínua.

2 Problema 2 (Hiperbólico): Imageamento Sísmico

Explicação do Modelo: Este modelo descreve como ondas de som ou pressão (como as de uma explosão) viajam através de diferentes materiais. A **velocidade da onda** (c) é a propriedade chave: ondas viajam mais rápido em materiais densos (como rocha) e mais devagar em materiais macios (como sedimento). Ao rastrear reflexões nas fronteiras entre os materiais, podemos mapear essas estruturas subterrâneas.

2.1 Parte 1: O Problema Direto (Simulando um Disparo)

- **Objetivo:** Escrever um *solver* 2D da equação da onda para simular como as ondas viajam através de um modelo geológico *conhecido*.
- **EDP:**
$$u_{tt} = c(y)^2(u_{xx} + u_{yy}) + f(t, x, y)$$
- **Variáveis:**
  - $u(x, y, t)$: Pressão acústica [Pa] (ou deslocamento relativo).
  - $c(y)$: Velocidade de propagação da onda no meio [m/s].
  - $f(x, y, t)$: Termo de fonte (o "disparo" sísmico).
- **Domínio:** $\Omega = [0, 200] \times [0, 100]$ (em metros)
- **Parâmetros Fornecidos:**
  - Velocidade da Onda: $c(y) = \begin{cases} c_1 = 1500 \text{ m/s} & \text{se } y < 40 \text{ m} \\ c_2 = 2200 \text{ m/s} & \text{se } y \geq 40 \text{ m} \end{cases}$
  - Interface: $y_{\text{int}} = 40$ m
  - Fonte: Uma onda Ricker $f(t, x, y) = (1 - 2\tau^2)e^{-\tau^2}\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)$, concentrada no ponto $(x_0, y_0) = (100, 5)$, onde $\tau = \pi f_0(t - t_0)$, com $f_0 = 30\,\mathsf{s}^{-1}$ e $t_0 = 0.05\,\mathsf{s}$.
  - CCs: $u = 0$ (Dirichlet) em todas as 4 fronteiras.
  - CIs: $u(x, y, 0) = 0$ e $u_t(x, y, 0) = 0$.
- **Tarefas & Entregáveis:**
  1. Implemente o esquema MDF explícito de 5 pontos.
  2. Rode sua simulação de $t = 0$ até $t = 0.2$ s.
  3. **Gráfico 1 (Snapshots):** Mostre "snapshots" 2D do campo de onda $u(x, y)$ nos tempos $t = 0.04$ s, $t = 0.08$ s, e $t = 0.12$ s.



4. **Gráfico 2 (Sismograma):** Plote a pressão $u(t)$ registrada no geofone $G_5 = (160, 5)$. No seu gráfico, identifique claramente a "onda direta" e a "onda refletida".

2.2 Parte 2: O Problema Inverso (Imageando a Subsuperfície)

- **Objetivo:** Você recebe sismogramas (gravações de som) de um disparo real. Use seu *solver* para encontrar as propriedades *desconhecidas* das camadas do solo.
- **Configuração:** Mesma EDP, domínio, fonte, CIs, e CCs da Parte 1.
- **Incógnitas:** Os parâmetros $\mathbf{p} = (c_1, c_2, y_{\text{int}})$ do solo foram modificados e são desconhecidos por você.
- **Dados Fornecidos:** `seismograms_desafio.csv`. Este arquivo contém dados $d_j(t_k)$ de 5 geofones (G_1 a G_5).
- **Tarefas & Entregáveis:**
  1. Escreva uma rotina de otimização para seu *solver* da Parte 1.
  2. Defina uma função de custo para minimizar:

$$L(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^{5} \sum_{k} \left(u_{\text{num}}(G_j, t_k; \mathbf{p}) - d_{j,\text{data}}(t_k)\right)^2$$

  3. **Relatório:** Quais são os seus parâmetros de melhor ajuste $\mathbf{p}^* = (c_1, c_2, y_{\text{int}})$?
  4. **Gráfico:** Mostre uma comparação (dados vs. modelo) para pelo menos dois geofones: $G_2 = (70, 5)$ e $G_5 = (160, 5)$.

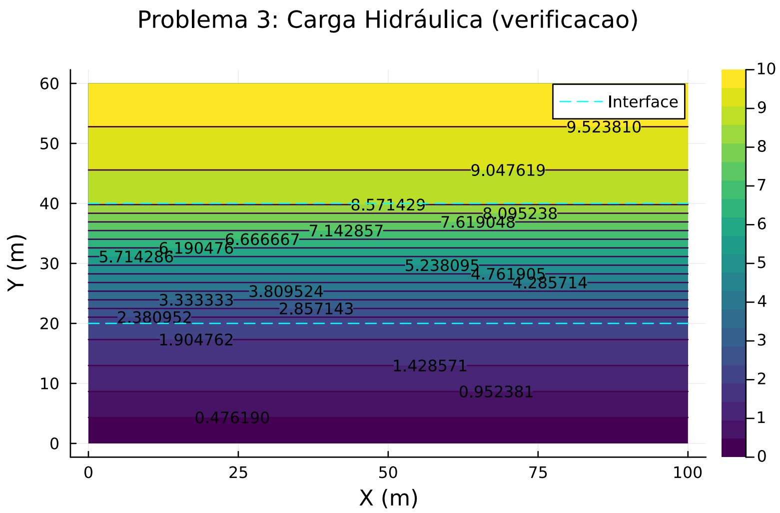
---

3 Problema 3 (Elíptico): Caracterização de Aquífero

Explicação do Modelo: Este modelo descreve um sistema que atingiu o **regime permanente** (valores não mudam mais com o tempo). Modelamos o fluxo de água subterrânea através de solo poroso, forçado a passar **verticalmente** através de camadas geológicas horizontais, de uma fonte de pressão no topo para uma saída na base. O fluxo é impulsionado por um gradiente de pressão (de "carga" alta para "carga" baixa, como de um lago para um rio) e é governado pela **condutividade hidráulica (K)** do material, uma medida de quão facilmente a água passa por ele.

3.1 Parte 1: O Problema Direto (Simulando Fluxo Subterrâneo)

- **Objetivo:** Escrever um *solver* 2D de fluxo em regime permanente para determinar o lençol freático (carga hidráulica) para uma geologia *conhecida*.
- **EDP:**
$$-\nabla \cdot (K(y)\nabla h) = 0$$
- **Variáveis:**
  - $h(x, y)$: Carga Hidráulica [m]. Representa a energia total da água por unidade de peso. É definida como $h = y + P/(\rho g)$, onde y é a elevação e P é a pressão. **A ação da gravidade já está incluída nesta variável.**
  - $K(y)$: Condutividade Hidráulica [m/s]. Mede a facilidade com que a água atravessa o meio poroso.
- **Domínio:** $\Omega = [0, 100] \times [0, 60]$ (em metros)
- **Parâmetros Fornecidos:**
  - Campo de Condutividade: 3 camadas horizontais
    * $K_1 = 10.0$ (para $y \in [40, 60]$) (Cascalho)
    * $K_2 = 2.0$ (para $y \in [20, 40]$) (Areia)
    * $K_3 = 6.0$ (para $y \in [0, 20]$) (Silte)
  - CCs:
    * $h(x, 60) = 10$ (Topo, fonte de alta pressão, Dirichlet)
    * $h(x, 0) = 0$ (Base, saída de baixa pressão, Dirichlet)
    * $\partial_x h(0, y) = 0$ e $\partial_x h(100, y) = 0$ (Laterais, impermeável, Neumann)
- **Tarefas & Entregáveis:**
  1. Implemente o esquema MDF de 5 pontos, criando um grande sistema linear esparso $A\mathbf{h} = \mathbf{b}$.
  2. Construa a matriz A e o vetor $\mathbf{b}$ e resolva para o vetor de cargas $\mathbf{h}$.
  3. **Gráfico:** Mostre um gráfico de contorno 2D do campo de carga $h(x, y)$ resultante.



4. **Relatório:** Quais são os valores de carga calculados nestes três locais de poços de observação?
   - $W_1 = (50, 50)$ (camada 1)
   - $W_2 = (50, 30)$ (camada 2)
   - $W_3 = (50, 10)$ (camada 3)

3.2 Parte 2: O Problema Inverso (Encontrando Propriedades das Camadas)

- **Objetivo:** Você recebe medições de carga de 3 poços. Use seu *solver* para encontrar as condutividades *desconhecidas* das camadas geológicas.

- **Configuração:** Mesma EDP, domínio, e CCs da Parte 1.

- **Incógnitas:** As condutividades $\mathbf{p} = (K_1, K_2, K_3)$ foram modificadas são desconhecidas por você.

- **Dados Fornecidos:** `wells_desafio.csv`. Este arquivo contém 3 medições escalares de carga, uma para cada poço (W_1, W_2, W_3).

- **Tarefas & Entregáveis:**

  1. Escreva uma rotina de otimização para seu *solver* da Parte 1.
  2. Defina uma função de custo para minimizar:

$$L(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^{3} \left(h_{\text{num}}(W_j; \mathbf{p}) - h_{j,\text{data}}\right)^2$$

  3. **Relatório:** Quais são os seus parâmetros de melhor ajuste $\mathbf{p}^* = (K_1, K_2, K_3)$?
  4. **Validação:** Crie uma tabela simples comparando os dados "reais" do `wells_desafio.csv` com os valores de carga previstos pelo seu modelo usando $\mathbf{p}^*$.