

CAPÍTULO V – CONDIÇÕES DE CONTORNO COMPUTACIONAIS (e modelagem da dispersão para uma região geográfica específica)

1

5.1 – Motivação básica

Considere-se a equação diferencial representativa do efeito da advecção

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

sujeita às condições iniciais:

$$f(x, t = 0) = 0 \quad (5.2)$$

e uma condição de contorno da forma

$$f(x = 0, t) = A_o e^{i \omega t} \quad (5.3)$$

Resulta a solução analítica

$$f(x, t) = A_o e^{i(K x - \omega t)} \quad (5.4)$$

Onde:
$$\frac{\omega}{K} = c \quad (5.5)$$

(ω é a frequência angular, K é o número de onda e c é a velocidade de fase).

Para a solução numérica de (5.1) explícita, centrada no espaço e no tempo, se considera:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} + c \frac{f_{j+1}^n - f_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (5.6)$$

De forma análoga á parte analítica, a condição inicial é

$$f_j^{n=1} = 0 \quad (5.7)$$

e a condição de contorno é

$$f_{j=1}^{n+1} = A_o e^{i\omega(n+1)\Delta t} \quad (5.8)$$

Instituto Oceanográfico da Universidade de São Paulo

Aplica-se a solução numérica (5.6) aos pontos de grade $j = 2, 3, \dots, j_{\max}-1$. Tanto na equação analítica (5.1) como na solução numérica (5.6) foram fornecidas condições de contorno no ponto inicial do domínio ($x=0$) ou ponto inicial da grade ($j=1$), através de (5.3) e (5.8). Mas como aplicar a equação (5.6) ao último ponto de grade ($j=j_{\max}$)? Como não se pode aplicar a fórmula de recorrência ao último ponto de grade, é necessário impor uma condição de contorno adicional, chamada “Condição de Contorno Computacional”.

Evidentemente, este problema ocorre sempre que houver solução numérica com diferenças finitas centradas, como por exemplo na equação da difusão

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (5.9)$$

com a solução

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = D \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (5.10)$$

cujas programações requerem que, no ponto final de grade ($j=j_{\max}$), seja especificada uma condição de contorno computacional.

5.2 – Possíveis soluções computacionais para os contornos

Para resolver a equação analítica (5.1 ou 5.9), é necessária uma condição inicial (como 5.2) e uma condição de contorno no ponto inicial do domínio (como 5.3). Contudo, ao se resolver a equação de diferenças finitas (5.6 ou 5.10), além da condição inicial (como 5.7) e da condição de contorno no primeiro ponto de grade (como 5.8), é necessária uma condição de contorno adicional, chamada condição de contorno computacional $f_{j=j_{\max}}^{n+1}$.

Há algumas soluções possíveis para esta condição de contorno computacional (Haltiner & Williams, 1980; Ramming & Kowalik, 1980; Palma & Matano, 1998):

- 1) Utilizar um valor constante na borda (é a chamada fronteira rígida):

$$f_{j_{\max}}^{n+1} = cte. \quad (5.11)$$

- 2) Utilizar o mesmo valor do penúltimo ponto de grade calculado (condição não gradiente):

$$f_{j_{\max}}^{n+1} = f_{j_{\max}-1}^{n+1}. \quad (5.12)$$

- 3) Utilizar uma extrapolação dos resultados do modelo nos pontos de grade próximo ao contorno para o contorno:

$$f_{j\max}^{n+1} = 2 f_{j\max-1}^n - f_{j\max-2}^n \quad (5.13)$$

Ou

$$f_{j\max}^{n+1} = (4 f_{j\max-1}^n - f_{j\max-2}^n) / 3 \quad (5.14)$$

As relações (5.13) e (5.14) constituem extrapolações lineares e utilizam apenas os dois pontos imediatamente internos ao contorno; entretanto, podem também ser consideradas extrapolações de ordem maior, envolvendo mais pontos internos da grade. Note-se que os valores internos considerados correspondem ao nível de tempo (n), e não (n+1), porquanto o uso dos valores no nível de tempo renovado (n+1) instabiliza os resultados da modelagem.

- 4) Utilizar diferença finita lateral somente em jmax. Para a equação da advecção se tem:

$$\frac{f_{j\max}^{n+1} - f_{j\max}^n}{\Delta t} + c \frac{f_{j\max}^n - f_{j\max-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (5.15)$$

E para a equação da difusão se pode usar a expressão de primeira ordem:

$$\frac{f_{j\max}^{n+1} - f_{j\max}^n}{\Delta t} = D \frac{f_{j\max}^n - 2f_{j\max-1}^n + f_{j\max-2}^n}{\Delta x^2} \quad (5.16)$$

Ou a expressão de segunda ordem:

$$\frac{f_{j\max}^{n+1} - f_{j\max}^n}{\Delta t} = D \frac{2f_{j\max}^n - 5f_{j\max-1}^n + 4f_{j\max-2}^n - f_{j\max-3}^n}{\Delta x^2} \quad (5.17)$$

- 5) Utilizar uma condição radiacional. Ela consiste em “advectar” ou “transportar” as variáveis próximas ao contorno para o contorno, através de uma equação da advecção adicional (Sommerfeld, 1949; Orlanski, 1976). Como se desconhece a velocidade c_p desta nova equação, inicialmente ela é utilizada para o penúltimo ponto da grade, a fim de determinar c_p . E, a seguir, esta equação adicional é re-utilizada, somente no último ponto de grade, para renovar a solução no contorno.

A seguir, se demonstra a imposição de uma condição de contorno radiacional. Considere-se a equação da advecção adicional para uma variável genérica h:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + c_p \frac{\partial h}{\partial x} = 0 \quad (5.18)$$

A aplicação da equação no penúltimo ponto de grade consiste em:

$$\frac{h_{j_{\max}-1}^n - h_{j_{\max}-1}^{n-1}}{\Delta t} + c_p \frac{h_{j_{\max}-1}^{n-1} - h_{j_{\max}-2}^{n-1}}{\Delta x} = 0 \quad (5.19)$$

O que permite calcular a velocidade com que a variável será advectada para o contorno, isolando-se c_p em (5.19):

$$c_p = - \left[\frac{h_{j_{\max}-1}^n - h_{j_{\max}-1}^{n-1}}{\Delta t} \right] / \left[\frac{h_{j_{\max}-1}^{n-1} - h_{j_{\max}-2}^{n-1}}{\Delta x} \right] \quad (5.20)$$

A seguir, a equação da equação adicional é aplicada no último ponto de grade, com o valor de c_p dado por (5.20), para renovar a solução no contorno:

$$\frac{h_{j_{\max}}^{n+1} - h_{j_{\max}}^n}{\Delta t} + c_p \frac{h_{j_{\max}}^n - h_{j_{\max}-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (5.21)$$

O uso da condição de contorno radiacional só pode ser realizado desde que a condição de estabilidade seja respeitada, no caso, $0 \leq c_p \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$. Do contrário, para

$\frac{c_p \Delta t}{\Delta x} > 1$, deve se limitar $c_p = \frac{\Delta x}{\Delta t}$; e para $c_p < 0$, deve ser utilizada outra condição de contorno computacional.

6) Utilizar uma atenuação progressiva das soluções com a proximidade ao contorno (a zero ou a um valor prescrito para o contorno), numa chamada “camada esponja” ou “buffer zone” (Israeli & Orzag, 1981); por exemplo, nesta camada, quatro pontos antes do contorno a solução é 60% do valor prescrito, três pontos antes é 70%, dois pontos antes é 80% e um ponto antes é 90% do valor prescrito para o contorno:

$$f_j^{n+1} = \left[1 - \frac{(j - j_{\max})}{10} \right] * f_{\text{prescrito}} \quad (j_{\max} - 4) \leq j \leq j_{\max} \quad (5.22)$$

7) Relaxação Newtoniana ou “Nudging”: esta técnica consiste em incluir termos extras nas equações aplicadas nos contornos, com o propósito de encaminhar a solução no contorno para valor pré-estabelecido ou observado (f_{obs}) (Martinsen & Engedahl, 1987). Como exemplo para as equações da advecção e difusão, se inclui um termo como o do segundo membro de (5.23), onde K_{nud} é o coeficiente de relaxação:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = -K_{nud}(f - f_{obs}) \quad \frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - K_{nud}(f - f_{obs}) \quad (5.23)$$

Note-se que a equação $\frac{\partial f}{\partial t} = -K_{nud}(f - f_{obs})$ possui solução

$f = f_{obs} + f_{inicial} e^{-K_{nud} t}$, onde $f_{inicial}$ é uma condição inicial qualquer, de modo que, a longo prazo ($t \rightarrow \infty$), o valor de f tenderá a f_{obs} (dependendo do valor escolhido para o coeficiente K_{nud}).

8) Utilizar uma informação independente para $f_{j_{max}}^{n+1}$. Por exemplo, medições *in situ* ou por satélite ou resultados de outros modelos:

$$f_{j_{max}}^{n+1} = f_{observado} \quad (5.24)$$

5.3 - Consequências das soluções adotadas

As consequências das soluções adotadas podem ser avaliadas considerando soluções da forma

$$f(x, t) = A_0 \cos(Kx - \omega t) \quad (5.25)$$

o que corresponde, na discretização do espaço e do tempo, a:

$$f_j^n = A_0 \cos(Kj\Delta x - \omega n\Delta t) \quad (5.26)$$

Evidentemente, as melhores condições de contorno são as que provocam mínima reflexão dos sinais que atingem as bordas e mantêm continuidade dos resultados próximo aos limites da grade.

A utilização da solução 1 (fronteira rígida, 5.11) provoca reflexão total do sinal modelado na borda.

A solução 2 (não gradiente, 5.12) causa uma reflexão parcial no contorno, com amplitude igual a $A_0 \tan\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)$, logo para $K\Delta x \rightarrow 0$, a reflexão tende a zero.

A extrapolação da solução 3 (5.13 ou 5.14) resulta em uma reflexão na borda com amplitude $A_0 \tan^2\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)$. Desde que $\left|\tan\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)\right| < 1$, esta solução é melhor que a 2 (condição não gradiente, 5.12).

A solução 4 (diferença finita lateral, 5.15 a 5.17) tem consequência similar à da solução 3 (extrapolação linear, 5.13 ou 5.14).

A qualidade da modelagem com a adoção da solução 5 para o contorno (radiacional, 5.20-5.21) depende da tendência do distúrbio ser efetivamente advecado para fora do domínio do modelo. Note-se que qualquer que seja a equação a ser resolvida por métodos numéricos, como a equação da advecção (5.6) ou a da difusão (5.10), a condição de contorno radiacional constitui equação de advecção adicional a ser aplicada próximo ao contorno (5.20) e no contorno (5.21), de modo a “transportar” os resultados do modelo para a borda da grade.

As consequências das soluções para o contorno 6 a 8 (equações 5.22, 5.23 e 5.24) dependem da qualidade das informações a serem utilizadas como condições de borda do modelo.

Uma observação importante é que as condições de contorno computacionais (1) a (5), representadas pelas relações matemáticas (5.11) a (5.21), são “condições passivas”, nas quais o comportamento do contorno é condicionado pelos resultados do modelo nos pontos internos da grade. Por outro lado, as condições de contorno (6) a (8), dadas pelas expressões matemáticas (5.22) a (5.24), são “condições ativas”, no sentido que os resultados do modelo nos pontos internos da grade dependem das condições de borda impostas.

Exemplo 05.01 – o programa exp05_01adv_cc_rig.m representa a advecção de um sinal senoidal no ponto inicial de grade, submetido a uma condição de contorno na forma de parede rígida no final da grade (equação 5.11). A Figura 5.1 mostra resultados da modelagem após reflexão do sinal na borda.

Exercícios 05.01 a 05.04 – desenvolver os programas similares ao exemplo acima, exc05_01adv_cc_grad.m, com condições de contorno não gradiente (equação 5.12), exc05_02adv_cc_extrap.m, com extrapolação linear de resultados internos (5.13), exc05_03adv_cc_lat.m, com diferença finita lateral (5.15) e exc05_04adv_cc_rad.m, considerando condição radiacional (equações 5.20 e 5.21).

A Figura 5.2 apresenta resultado da simulação de advecção com condição de contorno não gradiente, onde a reflexão do sinal é bem menor do que na solução da parede rígida. A Figura 5.3 apresenta resultado da simulação com extrapolação de resultados para o contorno, onde a reflexão do sinal é ainda menor do que na condição de contorno não gradiente. A solução com diferença finita lateral no contorno não apresenta reflexão do sinal na borda (Figura 5.4) e o mesmo acontece com a condição de contorno radiacional.

Exemplo 05.02 – o programa exp05_02dif_cc_rig.m representa a difusão de um sinal retangular no centro da grade, submetido a uma condição de contorno na forma de parede rígida, no início e no final da grade (equação 5.11). A Figura 5.5 mostra resultados da modelagem com a condição de contorno adotada.

Exercícios 05.05 a 05.10 – desenvolver os programas similares ao exemplo acima, exc05_05dif_cc_grad.m, com condições de contorno não gradiente (equação 5.12),

exc05_06dif_cc_extrap.m, com extrapolação de resultados internos (5.13),
exc05_07dif_cc_extrap2.m, com extrapolação de resultados internos (5.14),
exc05_08dif_cc_lat.m, com diferença finita lateral (5.16),
exc05_09dif_cc_lat2.m, com diferença finita lateral (5.17) e
exc05_10dif_cc_rad.m, com condição radiacional (equações 5.20 e 5.21),
sendo que essas condições devem ser aplicadas no início e no final da grade. Ver
exemplo de resultado na Figura 5.6.

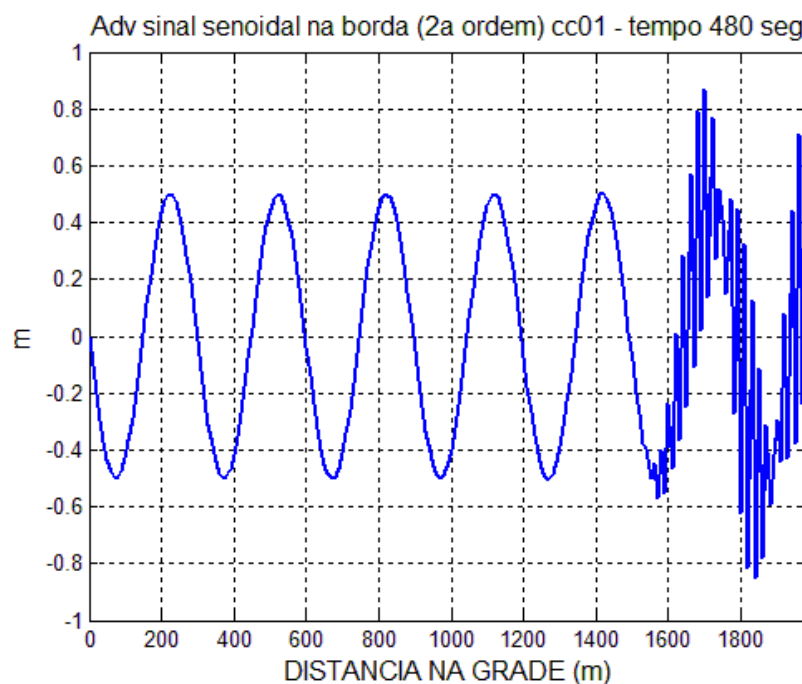


Fig. 5.1 – Resultado do modelo exp05_01adv_cc_rig.m. Configuração do sinal senoidal modelado após reflexão no final da grade, devido ao uso de condição de contorno na forma de parede rígida.

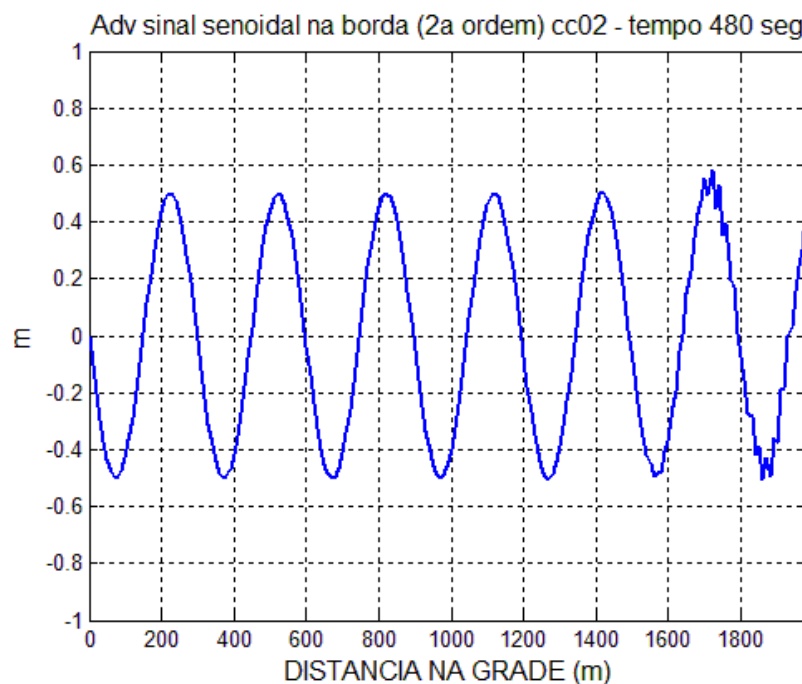


Fig. 5.2 – Resultado do modelo exc05_01adv_cc_grad.m. Configuração do sinal senoidal modelado com o uso de condição de contorno não gradiente.

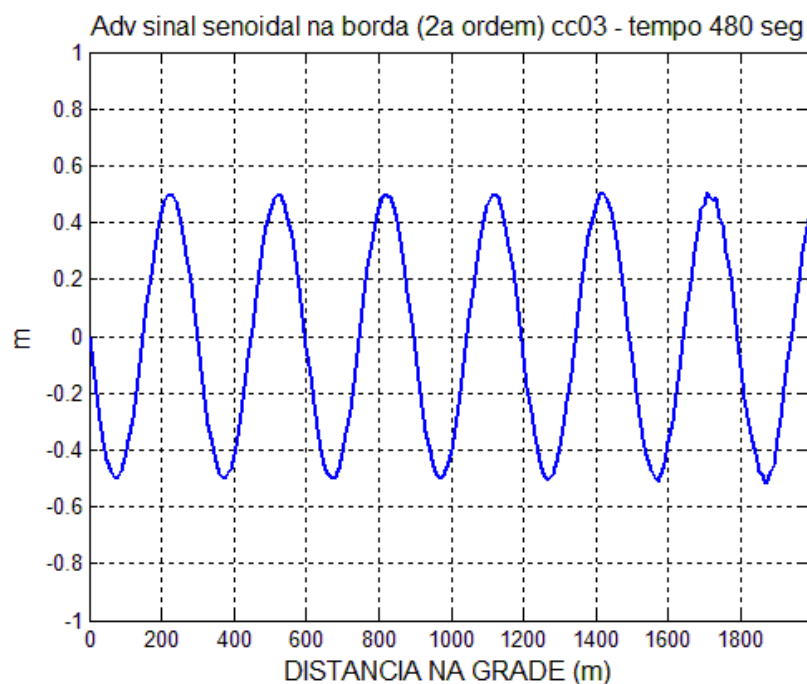


Fig. 5.3 – Resultado do modelo exc05_02adv_cc_extrap.m. Configuração do sinal senoidal modelado com o uso de condição de contorno correspondente à extrapolação linear de resultados do modelo em pontos internos.

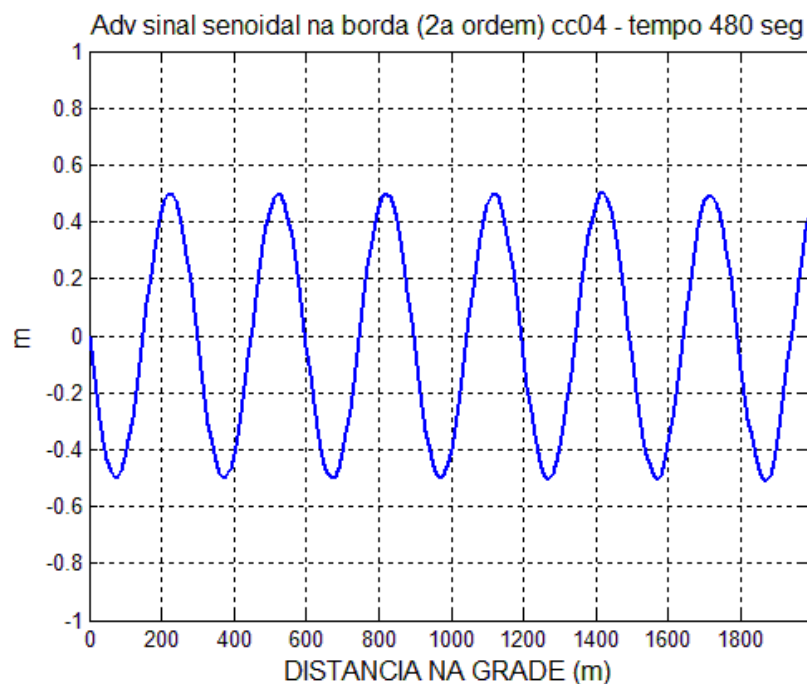


Fig. 5.4 – Resultado do modelo exc05_03adv_cc_lat.m. Configuração do sinal senoidal modelado com o uso de condição de contorno correspondente a diferença finita lateral.

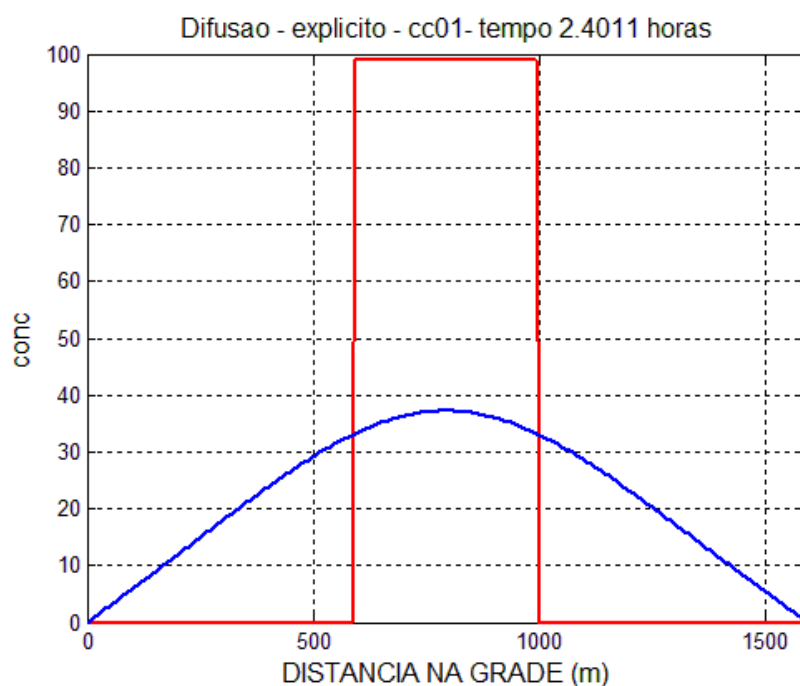


Fig. 5.5 – Resultado do modelo exp05_02dif_cc_rig.m. Configuração do sinal retangular submetido a difusão com o uso de condição de contorno na forma de parede rígida (nas duas extremidades da grade).



Fig. 5.6 – Resultado do modelo exc05_10dif_cc_rad.m. Configuração do sinal retangular submetido a difusão com o uso de condição de contorno radiacional (nas duas extremidades da grade).

5.4 – Modelagem considerando contornos continentais e ilhas

Na modelagem oceanográfica, a existência de contornos continentais e ilhas é representada através de:

- 1) Informação do campo de batimetria da região modelada.
- 2) Adoção de uma “chave” para cada ponto de grade, que vale 1 se o ponto for marítimo e vale 0 se for terrestre.
- 3) Em pontos terrestres não há cálculo de efeitos advectivos, difusivos, de decaimento, etc ...
- 4) Em pontos marítimos que são vizinhos a contornos terrestres, as componentes de corrente e de difusão perpendiculares a esses contornos são nulas.

Exemplo 05.03 – o programa `exp05_03adv_dif_dec_2d_terra.m` representa a advecção, difusão e decaimento 2D de uma concentração inicial em sub-região da grade (como um poluente na superfície do mar, por exemplo), com esquema de alta ordem e decaimento implícito. O programa envolve a batimetria da área modelada e a existência de um contorno terrestre e uma ilha. A Figura 5.7 apresenta resultado deste exemplo.

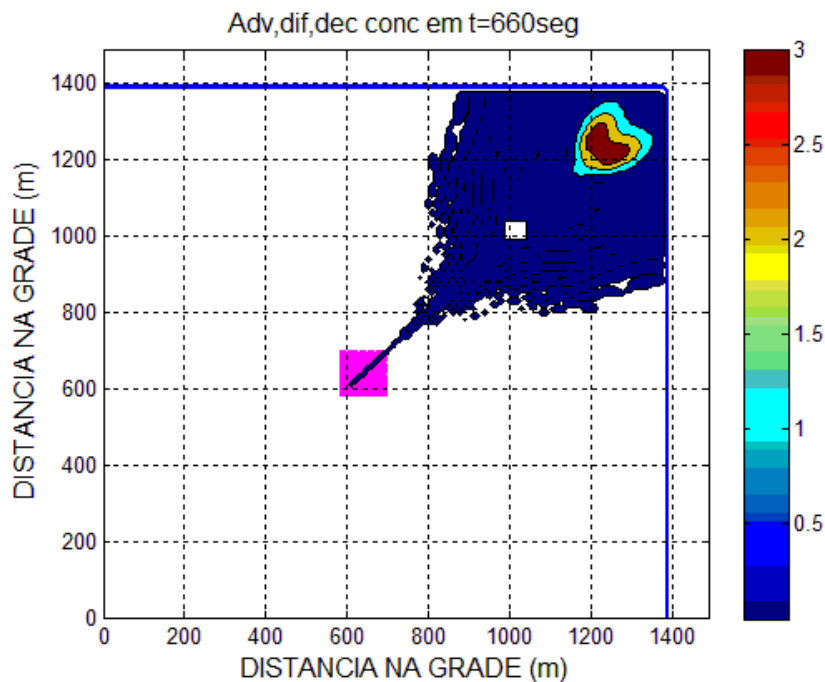


Fig. 5.7 – Resultado da simulação do modelo `exp05_03adv_dif_dec_2d_terra.m`. Simulação do programa de advecção – difusão – decaimento 2D, aplicado a uma concentração inicial, com contorno terrestre e ilha.

5.5 – Modelagem da dispersão para uma região geográfica específica

Na modelagem da dispersão para uma região geográfica específica (advecção, difusão e decaimento de uma substância ou propriedade da água do mar numa determinada área) se utiliza uma grade cujos pontos possuem posições definidas em latitude e longitude, os quais por sua vez determinam os espaçamentos de grade (não necessariamente uniformes). Este procedimento é apresentado no exemplo a seguir.

Exemplo 05.04 – o programa exp05_04disp_reg_geog.m representa a dispersão na Baía da Guanabara (Brasil), segundo uma formulação de segunda ordem no tempo e no espaço, utilizando a grade guanab_bat_disp.dat. Resultado ao final desta simulação é apresentado na Figura 5.8.

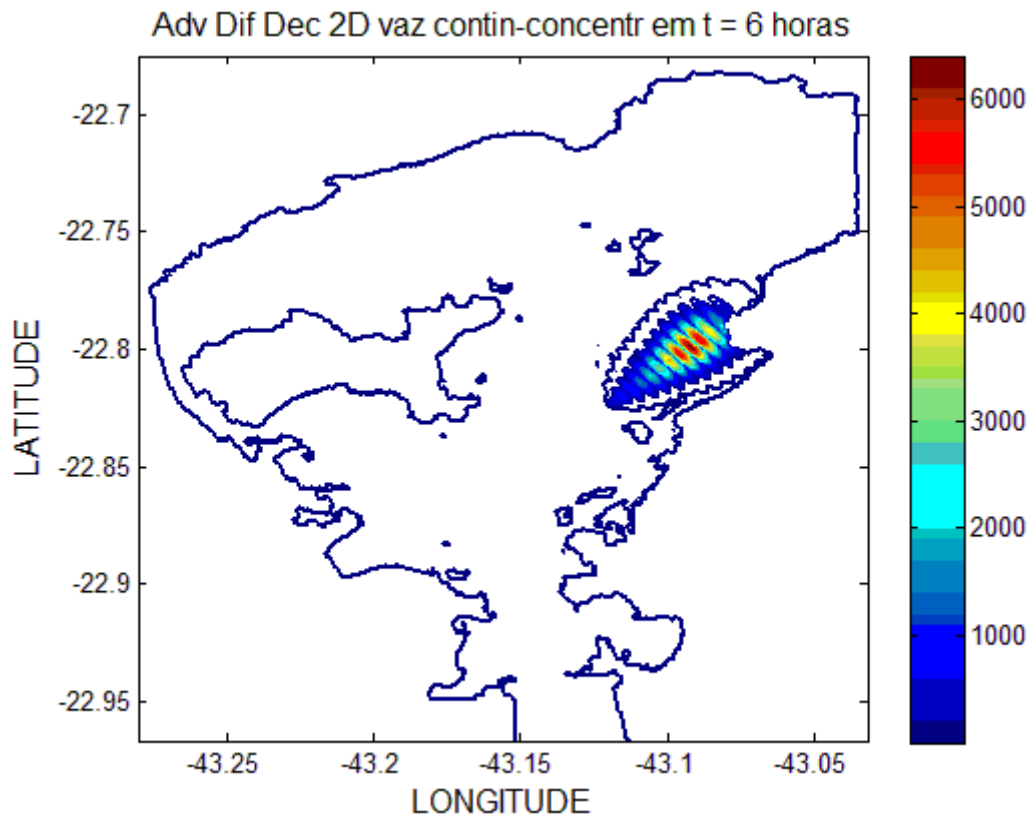


Fig. 5.8 – Resultado da simulação do modelo exp05_04disp_reg_geog.m, com advecção – difusão – decaimento 2D na Baía da Guanabara, aplicado à descarga contínua de uma substância na região.