

## CAPÍTULO IV – EQUAÇÕES E SUAS CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE. EQUAÇÕES COMBINADAS E FORMULAÇÕES 2D E 3D

1

### 4.1 – Resumo das condições de estabilidade para soluções da equação da advecção

O resumo da análise de estabilidade da equação da advecção unidimensional linear (4.1) para esquemas explícitos e implícitos é fornecido na Tabela 4.1.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

Tabela 4.1 – Resumo das condições de estabilidade para a equação da advecção.

EQUAÇÃO DA ADVECÇÃO UNI-DIMENSIONAL			
Esquema explícito	Tipo de discretização		Condição de estabilidade
	Tempo	Espaço	
	avançado	centrado	Incondicionalmente instável
	avançado	avançado	$-1 \leq c \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 0$ útil se $c < 0$
	avançado	retardado	$0 \leq c \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ útil se $c > 0$
	centrado	centrado	$-1 \leq c \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$
Esquema implícito	Qualquer	Qualquer	Incondicionalmente estável

### 4.2 – Resumo das condições de estabilidade para soluções da equação da difusão

O resumo da análise de estabilidade da equação da difusão unidimensional linear (4.2) para esquemas explícitos e implícitos é fornecido na Tabela 4.2.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (4.2)$$

Tabela 4.2 – Resumo das condições de estabilidade para a equação da difusão.

EQUAÇÃO DA DIFUSÃO UNI-DIMENSIONAL			
Esquema explícito	Tipo de discretização		Condição de estabilidade
	Tempo	Espaço	
	avanzado	centrado	$\frac{D \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$
	centrado	centrado	Incondicionalmente instável
Esquema implícito	Qualquer	Qualquer	Incondicionalmente estável

2

### 4.3 – Equação do decaimento – o método direto de análise de estabilidade

A equação do decaimento representa o decaimento exponencial de uma propriedade, sendo escrita na seguinte forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -r f, \quad r > 0 \quad (4.3)$$

Para uma solução explícita avançada no tempo

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = -r f^n \quad (4.4)$$

não há necessidade de utilizar o método de von Neumann para análise de estabilidade, pode-se usar o método direto, pois a solução é escrita como

$$f^{n+1} = (1 - r\Delta t) f^n \quad (4.5)$$

ou seja, o coeficiente de amplificação é dado por:

$$\lambda = 1 - r\Delta t \quad (4.6)$$

e portanto a condição de estabilidade é:

$$\Delta t \leq 2/r \quad (4.7)$$

Por outro lado, ao considerar uma solução explícita centrada no tempo

$$\frac{f^{n+1} - f^{n-1}}{2\Delta t} = -r f^n \quad (4.8)$$

a aplicação do método de von Neumann (para três níveis de tempo) conduz a coeficiente de amplificação resultante da seguinte equação

$$\lambda^2 + 2 r \Delta t \lambda - 1 = 0 \quad (4.9)$$

cujas soluções tem  $\lambda$  com módulo maior que 1, e portanto o sistema é sempre instável.

Resulta então que, para a equação do decaimento, num esquema explícito, a formulação avançada no tempo é condicionalmente estável e a formulação centrada no tempo é incondicionalmente instável.

Por outro lado, numa formulação implícita, se tem

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = -r f^{n+1} \quad (4.10)$$

e novamente aplicando o método direto resulta

$$f^{n+1}(1 + r\Delta t) = f^n \quad (4.11)$$

$$f^{n+1} = \frac{1}{1 + r\Delta t} f^n \quad (4.12)$$

Portanto, o coeficiente de amplificação corresponde a:

$$\lambda = \frac{1}{1 + r\Delta t} \quad (4.13)$$

como  $r > 0$  e  $\Delta t > 0$ , resulta  $\lambda < 1$ , de modo que o sistema é incondicionalmente estável.

O resumo da análise de estabilidade da equação do decaimento (4.3) para esquemas explícitos e implícitos é fornecido na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Resumo das condições de estabilidade para a equação do decaimento.

EQUAÇÃO DO DECAIMENTO		
	Tipo de discretização no tempo	Condição de estabilidade
Esquema explícito	Avançado	$\Delta t \leq 2 / r$
	Centrado	Incondicionalmente instável
Esquema implícito	Qualquer	Incondicionalmente estável

#### 4.4 – Equação do oscilador

A seguir, considere-se a equação do oscilador

$$\frac{\partial f}{\partial t} = i \omega f, \quad \omega = \frac{2\pi}{T} \quad (4.14)$$

onde  $\omega$  é a frequência angular e  $T$  é o período de oscilação. Uma solução numérica geral avançada no tempo pode ser considerada como:

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = i \omega (a f^{n+1} + b f^n) \quad (4.15)$$

com  $a$  e  $b$  positivos; por consistência,  $(a+b) = 1$ . Para  $a = 1$ ,  $b = 0$  o esquema é implícito, para  $a = 0$ ,  $b = 1$  o esquema é explícito e para  $a = b = 1/2$  o esquema é semi-implícito. A solução desta equação leva a

$$f^{n+1} = \left( \frac{1 + i b \omega \Delta t}{1 - i a \omega \Delta t} \right) f^n \quad (4.16)$$

Dessa forma, pelo método direto resulta a condição de estabilidade na forma

$$\frac{1 + i b \omega \Delta t}{1 - i a \omega \Delta t} \leq 1 \quad (4.17)$$

a qual se reduz a

$$b \leq a \quad (4.18)$$

Considerando algumas escolhas para  $a$  e  $b$ :

- 1) Se  $a = 0$ ,  $b = 1$  - esquema explícito, avançado no tempo – instável
- 2) Se  $a = 1$ ,  $b = 0$  - esquema implícito - estável
- 3) Se  $a = b = 1/2$  - esquema semi-implícito – estável.

Por outro lado, o uso de diferença finita explícita centrada no tempo para a equação do oscilador (4.14) conduz a:

$$\frac{f^{n+1} - f^{n-1}}{2\Delta t} = i \omega f^n \quad (4.19)$$

E a aplicação do método de von Neumann para a análise de estabilidade fornece a expressão para o fator de amplificação:

$$\lambda^2 - 2 i \omega \Delta t \lambda - 1 = 0 \quad (4.20)$$

e portanto

$$\lambda = i \omega \Delta t \pm \sqrt{1 - \omega^2 \Delta t^2} \quad (4.21)$$

havendo estabilidade (no caso  $|\lambda| = 1$ ) para

$$|\omega \Delta t| \leq 1 \quad (4.22)$$

O resumo da análise de estabilidade da equação do oscilador (4.14) para esquemas explícitos e implícitos é fornecido na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Resumo das condições de estabilidade para a equação do oscilador.

EQUAÇÃO DO OSCILADOR		
	Tipo de discretização no tempo	Condição de estabilidade
Esquema explícito	Avançado	Incondicionalmente instável
	Centrado	$ \omega \Delta t  \leq 1$
Esquema implícito	Qualquer	Incondicionalmente estável

#### 4.5 – Difusão e decaimento

É importante ressaltar a similaridade das condições de estabilidade para as soluções explícitas das equações de difusão e decaimento (Tabelas 4.2 e 4.3). Isto porque são efeitos similares, que tendem a espalhar ou eliminar a energia de um sistema. Isto pode ser comprovado através da análise da equação

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - rf \quad (4.23)$$

Admitindo uma solução harmônica no espaço, com número de onda K, na forma

$$f(x,t) = B(t) \operatorname{sen}(Kx) \quad (4.24)$$

a equação (4.23) se torna

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -DK^2 B(t) \operatorname{sen}(Kx) - r B(t) \operatorname{sen}(Kx) \quad (4.25)$$

E portanto o decaimento com coeficiente r tem o mesmo efeito da difusão com coeficiente  $DK^2$  (mas este coeficiente depende do número de onda K).

#### 4.6 – Soluções para a equação da advecção – difusão - decaimento 1D

Na solução da equação da advecção, deve-se evitar o esquema explícito avançado no tempo e centrado no espaço; já para as equações da difusão e do decaimento, deve ser evitado o esquema explícito centrado no tempo e no espaço.

Soluções explícitas condicionalmente estáveis para a equação da advecção – difusão - decaimento podem ser consideradas da seguinte forma. Para um

esquema de 1ª ordem no tempo, podem ser consideradas diferenças finitas laterais para a advecção, da seguinte forma:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + \frac{c + |c|}{2} \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{c - |c|}{2} \frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{\Delta x} = D \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} - r f_j^n \quad (4.26)$$

Visto que os termos de difusão e decaimento muitas vezes limitam bastante o passo de tempo, uma opção à solução (4.26) se encontra no uso de soluções pseudo-implícitas, implícitas ou semi-implícitas para esses termos. No exemplo que segue, se tem o uso de um esquema explícito para a advecção e implícito para a difusão e o decaimento:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + \frac{c + |c|}{2} \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{c - |c|}{2} \frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{\Delta x} = D \frac{f_{j+1}^{n+1} - 2f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} - r f_j^{n+1} \quad (4.27)$$

Para uma solução explícita de 2ª ordem no tempo, se adota um esquema centrado no tempo e no espaço, para a advecção, e avançado no tempo e centrado no espaço, para a difusão e decaimento; esta solução tem a forma:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} + c \frac{f_{j+1}^n - f_{j-1}^n}{2\Delta x} = D \frac{f_{j+1}^{n-1} - 2f_j^{n-1} + f_{j-1}^{n-1}}{\Delta x^2} - r f_j^{n-1} \quad (4.28)$$

Como alternativa, a equação que segue apresenta uma solução de 2ª ordem no tempo, com solução pseudo-implícita para a difusão e semi-implícita para o decaimento:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} + c \frac{f_{j+1}^n - f_{j-1}^n}{2\Delta x} = D \frac{f_{j+1}^n - f_j^{n-1} - f_j^{n+1} + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} - r \left( \frac{f_j^{n-1} + f_j^{n+1}}{2} \right) \quad (4.29)$$

Note-se que os conceitos de diferenças finitas avançadas ou retardadas no tempo para os termos de uma equação dependem dos níveis de tempo desses termos e da diferença finita no tempo; de fato, na equação (4.28), os termos de difusão e de decaimento estão representados em forma avançada no tempo (em relação à diferença finita no tempo, com passo  $2\Delta t$ ).

Ao considerar vários efeitos conjuntamente numa equação (advecção, difusão, decaimento, etc ...), o passo de tempo do modelo deve ser o mínimo passo de tempo das respectivas condições de estabilidade de cada efeito.

#### 4.7 – Exemplos de discretização de equações 2D e 3D

As soluções explícitas acima apresentadas podem também ser utilizadas em equações 2D ou 3D, como por exemplo a equação da advecção – difusão – decaimento 3D, com velocidades  $u, v, w$  para a advecção, coeficientes  $D_x, D_y$  e  $D_z$  para a difusão e coeficiente  $r$  para o decaimento; baseado nas equações (4.26) e (4.28), as soluções de 1ª e 2ª ordem no tempo são fornecidas por::

$$\begin{aligned} & \frac{f_{jkl}^{n+1} - f_{jkl}^n}{\Delta t} + \frac{u + |u|}{2} \frac{f_{jkl}^n - f_{j-1,kl}^n}{\Delta x} + \frac{u - |u|}{2} \frac{f_{j+1,kl}^n - f_{jkl}^n}{\Delta x} + \\ & \frac{v + |v|}{2} \frac{f_{jkl}^n - f_{j,k-1,l}^n}{\Delta y} + \frac{v - |v|}{2} \frac{f_{j,k+1,l}^n - f_{jkl}^n}{\Delta y} + \\ & \frac{w + |w|}{2} \frac{f_{jkl}^n - f_{jk,l-1}^n}{\Delta z} + \frac{w - |w|}{2} \frac{f_{jk,l+1}^n - f_{jkl}^n}{\Delta z} = D_x \frac{f_{j+1,kl}^n - 2f_{jkl}^n + f_{j-1,kl}^n}{\Delta x^2} + \\ & D_y \frac{f_{j,k+1,l}^n - 2f_{jkl}^n + f_{j,k-1,l}^n}{\Delta y^2} + D_z \frac{f_{jk,l+1}^n - 2f_{jkl}^n + f_{jk,l-1}^n}{\Delta z^2} - r f_{jkl}^n \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} & \frac{f_{jkl}^{n+1} - f_{jkl}^{n-1}}{2\Delta t} + u \frac{f_{j+1,kl}^n - f_{j-1,kl}^n}{2\Delta x} + v \frac{f_{j,k+1,l}^n - f_{j,k-1,l}^n}{2\Delta y} + w \frac{f_{jk,l+1}^n - f_{jk,l-1}^n}{2\Delta z} = \\ & D_x \frac{f_{j+1,kl}^{n-1} - 2f_{jkl}^{n-1} + f_{j-1,kl}^{n-1}}{\Delta x^2} + \\ & D_y \frac{f_{j,k+1,l}^{n-1} - 2f_{jkl}^{n-1} + f_{j,k-1,l}^{n-1}}{\Delta y^2} + D_z \frac{f_{jk,l+1}^{n-1} - 2f_{jkl}^{n-1} + f_{jk,l-1}^{n-1}}{\Delta z^2} - r f_{jkl}^{n-1} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Evidentemente, há várias opções de utilização de esquemas implícitos (ou semi-implícitos ou pseudo-implícitos) nas equações da advecção – difusão – decaimento 2D ou 3D para termos específicos, como mostrado na equação (4.32) para o termo de decaimento:

$$\frac{f_{jkl}^{n+1} - f_{jkl}^{n-1}}{2\Delta t} + (\text{termos advectivos})^n = (\text{termos difusivos})^{n-1} - r f_{jkl}^{n+1} \quad (4.32)$$

de modo que

$$f_{jkl}^{n+1} = \left[ f_{jkl}^{n-1} - 2\Delta t (\text{termos advectivos})^n + 2\Delta t (\text{termos difusivos})^{n-1} \right] / (1 + 2r\Delta t) \quad (4.33)$$

Como observação final, as condições de estabilidade das equações na forma 2D e 3D diferem das condições para a forma 1D (Haltiner & Williams, 1980). Nas expressões

fornecidas nas Tabelas 4.1 e 4.2 para esquemas explícitos, o espaçamento de grade  $\Delta x$  dos modelos 1D é substituído por  $\frac{\sqrt{2}}{2} \Delta x$  nos modelos 2D e por  $\frac{\sqrt{3}}{2} \Delta x$  nos modelos 3D (considerando  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ ). Estas alterações podem ser explicadas da seguinte forma: as expressões da Tabela 4.1 indicam que, numa grade 1D, um distúrbio não pode se mover mais que um  $\Delta x$  num passo de tempo  $\Delta t$ ; analogamente, para modelos 2D e 3D, os mínimos espaçamentos de grade são dados pela metade da diagonal de uma célula de grade, que são  $\frac{\sqrt{2}}{2} \Delta x$  e  $\frac{\sqrt{3}}{2} \Delta x$ , respectivamente. Esta explicação para a equação da advecção pode ser estendida para a equação da difusão.

Ademais, em modelos 2D e 3D, ao considerar vários efeitos conjuntamente e espaçamentos de grade diferentes nas direções x, y e z, o passo de tempo do modelo deve ser o mínimo passo de tempo das respectivas condições de estabilidade de cada efeito, em cada direção.

**Exemplo 04.01** – o programa `exp04_01adv_dif_2d_bx_ord.m` representa a advecção, e difusão 2D de uma concentração devida a despejo contínuo em ponto da grade (como um poluente na superfície do mar, por exemplo), com esquema de baixa ordem, sem decaimento (baseado na equação 4.30). Exemplo de saída do programa se encontra na Figura 4.1.

**Exercício 04.01** – com base no programa `exp04_01adv_dif_2d_bx_ord.m`, desenvolver o programa `exc04_01adv_dif_2d_bx_ord.m` para representar a advecção e difusão 2D de uma concentração devida a despejo instantâneo.

**Exercício 04.02** – desenvolver o programa `exc04_02adv_dif_2d_alta_ord.m` para representar a advecção e difusão 2D de uma concentração devida a despejo contínuo em ponto da grade, com esquema de alta ordem, sem decaimento (baseado na equação 4.31). Exemplo de saída do programa se encontra na Figura 4.2.

**Exemplo 04.02** – o programa `exp04_02adv_dif_dec_2d.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 (baseado nas equações 4.31 a 4.33, com decaimento implícito). Note-se que o modelo monitora o total do poluente no decorrer do tempo (e sua máxima concentração). Um aspecto interessante é que o modelo poderia ser processado com decaimento nulo, e o correspondente resultado indicaria aumento do total do poluente no tempo; entretanto, os esquemas são conservativos e isso só ocorre pois o modelo anula concentrações negativas. Ver exemplo de saída ao final do processamento na Figura 4.3.

**Exercício 04.03** – desenvolver o programa `exc04_03adv_dif_dec_3d.m` para representar a advecção, difusão e decaimento 3D de uma descarga contínua de poluente num ponto da grade (simulando um emissário submarino de esgotos), com esquema de alta ordem (baseado nas equações 4.31 a 4.33, com decaimento implícito). A Figura 4.4 apresenta o resultado final desta simulação. Note-se que as concentrações são bem maiores no fundo do que na superfície, em função da proximidade com o ponto de descarga.



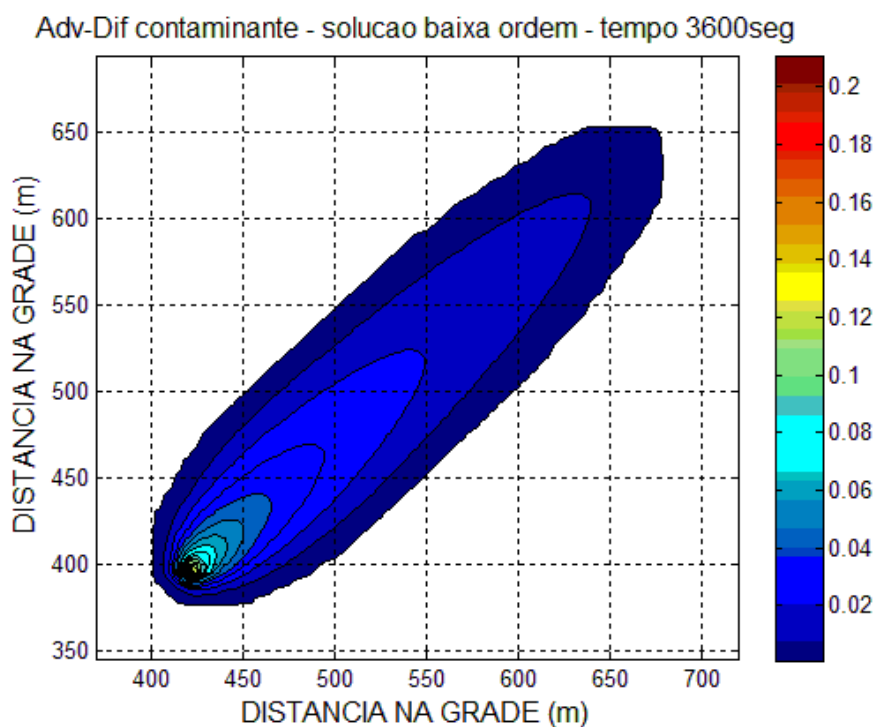


Fig. 4.1 – Resultado do modelo exp04\_01adv\_dif\_2d\_bx\_ord.m. Advecção e difusão 2D com esquema de baixa ordem.

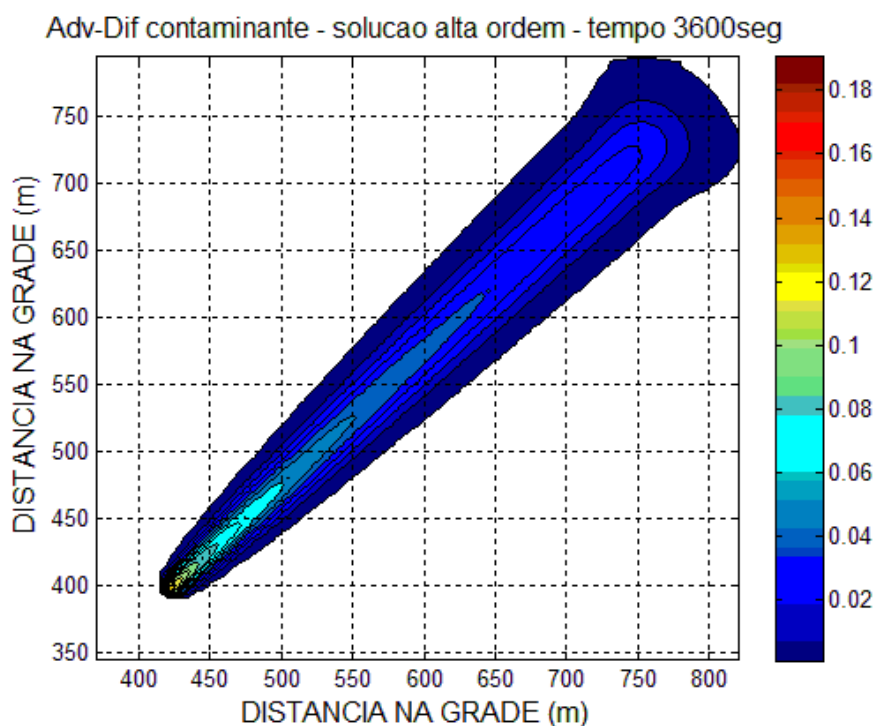


Fig. 4.2 – Resultado do modelo exc04\_02adv\_dif\_2d\_alta\_ord.m. Advecção e difusão 2D com esquema de alta ordem.

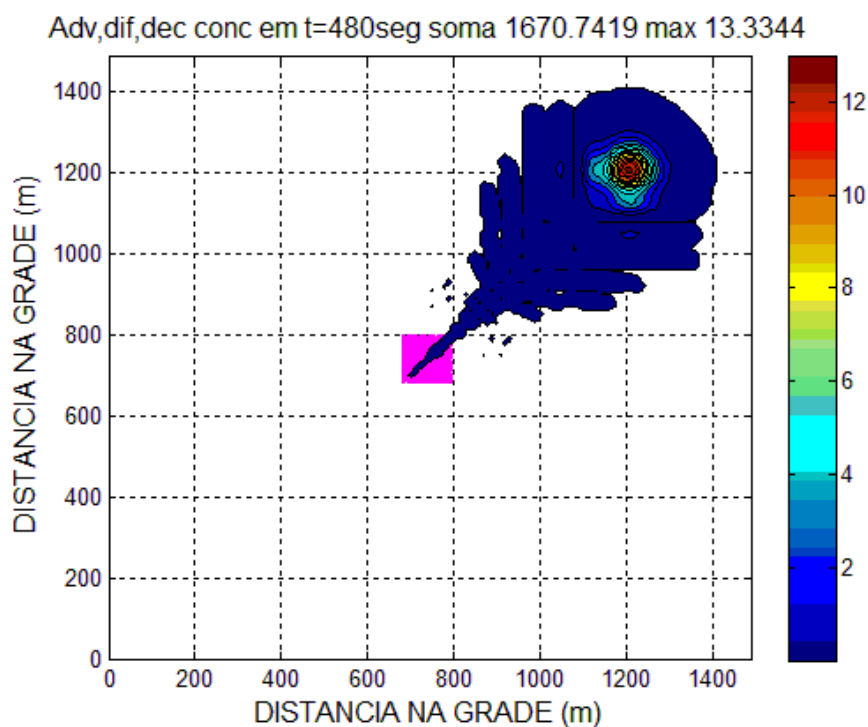


Fig. 4.3 – Resultado do modelo exp04\_02adv\_dif\_dec\_2d.m. Simulação do programa de advecção – difusão – decaimento 2D, aplicado a concentração inicial de poluente.

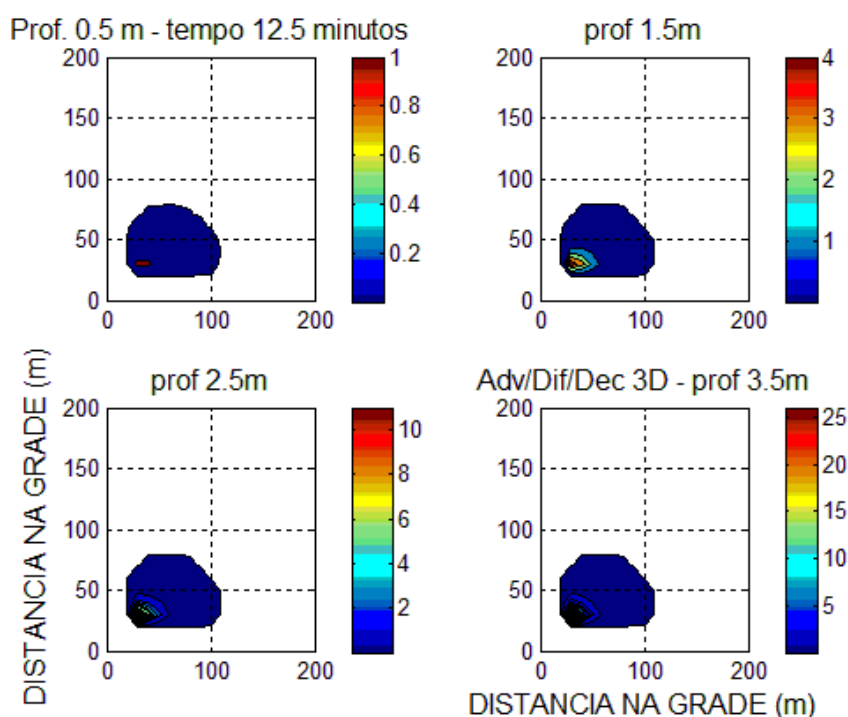


Fig. 4.4 – Resultado do modelo exc04\_03adv\_dif\_dec\_3d.m. Simulação do programa de advecção – difusão - decaimento 3D, aplicado a descarga contínua de poluente.