Lista1_IOF814

October 18, 2017

1 Lista 1 - IOF814: Modelos Numéricos Aplicados a Processos Costeiros e Estuarinos

Q.01 - Demonstre que a solução da equação da difusão unidimensional linear que utiliza esquema centrado no tempo e espaço é incondicionalmente instável para uma solução explícita e incondicionalmente estável para uma solução implícita. A equação da difusão unidimensional linear é dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{1}$$

onde D ($D > 0$) é o coeficiente de difusão.

Tomando a solução de (1) de forma explícita, com esquema centrado no espaço e no tempo, obtemos:

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

Ainda com (1), podemos tomar a solução implícita com equema centrado no espaço e no tempo, obtendo:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2}(f_{j+1}^{n+1} - 2f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}) \tag{3}$$

Para analisar a estabilidade das equações (2) e (3), precisamos aplicar o Método de Von Neumann para estabilidade.

Para a Eq. (2)

Admitindo-se uma solução harmônica no espaço e polinomial no tempo, da forma:

$$f_j^n = B_j^n e^{iKj\Delta x} \tag{4}$$

onde K é o número de onda.

Aplicamos (4) em (2), obtendo:

$$\frac{B^{n+1}e^{iKj\Delta x} - B^{n-1}e^{iKj\Delta x}}{2\Delta x} = \frac{D}{\Delta x^2}(B^n e^{iK(j+1)\Delta x} - 2B^n e^{iKj\Delta x} + B^n e^{iK(j-1)\Delta x}) \tag{5}$$

A seguir, assumimos uma relação entre as amplitudes em instantes de tempo sucessivos, onde:

$$B^{n+1} = \lambda B^n e B^n = \lambda B^{n-1} \Rightarrow B^{n-1} = \lambda^{-1} B^n \tag{6}$$

Aplicando (6) em (5) e dividindo o resultado por (4), teremos:

$$\frac{\lambda - \lambda^{-1}}{2\Delta x} = \frac{D}{\Delta x^2}(e^{iK\Delta x} - 2 + e^{-iK\Delta x}) \tag{7}$$

Lembrando que $e^{i\theta} = cos(\theta) - isin(\theta)$, então (7) é reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\lambda - \lambda^{-1}}{2\Delta x} = \frac{D}{\Delta x^2}(2cos(K\Delta x) - 2) \tag{8}$$

Desenvolvendo (8) e considerando $q = 4\frac{\Delta t D}{\Delta x^2}$, temos:

$$\lambda - \lambda^{-1} - q(cos(K\Delta x - 1)) = 0 \tag{9}$$

Manipulando (9), chegamos em uma equação de 2º, da seguinte forma:

$$\lambda^2 - \lambda q(cos(K\Delta x - 1)) - 1 = 0 \tag{10}$$

A soluçao de (10) é dada por:

$$\lambda = \frac{q[cos(K\Delta x - 1)]^2 \pm \sqrt{q^2[cos(K\Delta x) - 1]^2 + 5}}{2} \tag{11}$$

Analisando (11), nota-se que, para qualquer Δx e Δt, a solução de $|\lambda| > 1$, ou seja, para qualquer passo de tempo e de espaço a solução implícita com esquema centrado no espaço e tempo será incondicionalmente instável.

Para a Eq. (3)

De forma análoga ao realizado para (2), fazemos para (3).

Aplicando (4) em (3):

$$\frac{B^{n+1}e^{iKj\Delta x} - B^{n-1}e^{iKj\Delta x}}{2\Delta x} = \frac{D}{\Delta x^2}(B^{n+1}e^{iK(j+1)\Delta x} - 2B^{n+1}e^{iKj\Delta x} + B^{n+1}e^{iK(j-1)\Delta x}) \tag{12}$$

Assumindo a relação (6) e dividindo o resultado por (4), finalmente obtemos:

$$\frac{\lambda - \lambda^{-1}}{2\Delta x} = \frac{D}{\Delta x^2}(\lambda e^{iK\Delta x} - 2\lambda + \lambda e^{-iK\Delta x}) \tag{13}$$

Manipulando (13), também chegamos em uma equação 2º:

$$\lambda^2[1 - q(cos(K\Delta x) - 1)] = 1 \tag{14}$$

Portando, a solução de (14) será:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{1 - q(cos(K\Delta x) - 1)}} \tag{15}$$

Analisando a equação (15), nota-se que, para qualquer passo de tempo e espaço, $|\lambda| \leq 1$ e, portanto, a solução implícita com esquema centrado no tempo e espaço será incondicionalmente estável.

Q.02 - Implemente um modelo para a solução da equação da advecção bi-dimensional por esquema semi-implícito centrado no tempo e no espaço.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u\frac{\partial f}{\partial x} + v\frac{\partial f}{\partial y} = 0 \tag{16}$$

O esquema semi-implícito centrado no tempo e espaço é dado através da média ponderada entre o esquema explícito e implícito, onde a soma do peso deve ser 1. Desta forma, precisamos desenvolver ambos os esquemas, para termos o requisitado no exercício.

Esquema Explícito

$$\frac{f_{j,k}^{n+1} - f_{j,k}^{n-1}}{2\Delta x} + u\frac{f_{j+1,k}^{n} - f_{j-1,k}^{n}}{2\Delta x} + v\frac{f_{j,k+1}^{n} - f_{j,k-1}^{n}}{2\Delta y} = 0 \tag{17}$$

Esquema Implícito

$$\frac{f_{j,k}^{n+1} - f_{j,k}^{n-1}}{2\Delta x} + u\frac{f_{j+1,k}^{n+1} - f_{j-1,k}^{n+1}}{2\Delta x} + v\frac{f_{j,k+1}^{n+1} - f_{j,k-1}^{n+1}}{2\Delta y} = 0 \tag{18}$$

A diferença entre (2) e (3) está no nível de tempo utilizado para calcular as derivadas espaciais, respectivamente, n (atual) e n+1 (renovado).

Esquema Semi-Implícito

$$\frac{f_{j,k}^{n+1} - f_{j,k}^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{u}{4\Delta x}(f_{j+1,k}^{n+1} - f_{j+1,k}^{n-1} + f_{j+1,k}^{n} - f_{j-1,k}^{n}) + \frac{v}{4\Delta y}(f_{j,k+1}^{n} - f_{j,k-1}^{n} + f_{j,k+1}^{n+1} - f_{j,k-1}^{n+1}) = 0 \tag{19}$$

Isolando o termo $f_{j,k}^{n+1}$, obteremos:

$$f_{j,k}^{n+1} = f_{,k}^{n-1} - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(f_{j+1,k}^{n+1} - f_{j-1,k}^{n+1} + f_{j+1,k}^{n} - f_{j-1,k}^{n}) - \frac{\Delta t}{2\Delta y}(f_{j,k+1}^{n} - f_{j,k-1}^{n} + f_{j,k+1}^{n+1} - f_{j,k-1}^{n+1}) \tag{20}$$

Para resolver a equação (5), devemos reescrevê-la da seguinte forma:

$$a_j f_{j-1}^{n+1} + b_j f_j^{n+1} + c_j f_{j+1}^{n+1} = d_j \tag{21}$$

$$a_k f_{k-1}^{n+1} + b_k f_k^{n+1} + c_k f_{k+1}^{n+1} = d_k \tag{22}$$

Nesta etapa do desenvolvimento, convém trabalharmos com cada equação de forma independente. Sendo assim, reescrevemos (5) somente para **as variações em** x, de forma que obteremos:

$$\frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}u f_{j-1}^{n+1} + f_j^{n+1} + \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}u f_{j+1}^{n+1} = f_j^{n-1} - \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}u(f_{j+1}^{n} - f_{j-1}^{n}) \tag{23}$$

Onde, comparando (8) e (6), temos os seguintes coeficientes:

$$a_j = \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}u; b_j = 1; c_j = \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}u; d_j = f_j^{n-1} - \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}u(f_{j+1}^{n} - f_{j-1}^{n}) \tag{24}$$

Como (8) é uma equação de três pontos, utilizamos o **método de inversão de linha** (Lindzen & Kuo, 1969) para transformá-la em uma equação de dois pontos.

Inicialmente, definimos:

$$f_j^{n+1} = s_j f_{j+1}^{n+1} + p_j \Rightarrow f_{j-1}^{n+1} = s_{j-1} f_j^{n+1} + p_{j-1} \tag{25}$$

Aplicando (9) e (10) em (8), teremos:

$$a_j(s_{j-1} f_j^{n+1} + p_{j-1}) + b_j f_j^{n+1} + c_j f_{j+1}^{n+1} = d_j \tag{26}$$

E, por fim, obtemos:

$$s_j = \frac{-c_j}{b_j + a_j s_{j-1}}; p_j = \frac{d_j - a_j p_{j-1}}{b_j + a_j s_{j-1}} \tag{27}$$

De modo análogo, podemos reescrever (5) para as **variações em** y, obtendo s_k e p_k:

$$\underbrace{-\frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta y} v}_{a_k} f_{k-1}^{n+1} + \underbrace{\frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta y} v}_{c_k} f_{k+1}^{n+1} = \underbrace{-\frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta y} v (f_{k+1}^{n} - f_{k-1}^{n})}_{d_k} \tag{28}$$

Sendo assim, obtemos:

$$s_k = \frac{-c_k}{b_k + a_k s_{k-1}}; p_k = \frac{d_k - a_j p_{k-1}}{b_k + a_k s_{k-1}} \tag{29}$$

Por fim, com as equações (11)-(14) podemos obter a solução geral do problema ao reescrever (10) na forma:

$$f_{j,k}^{n+1} = s_j f_{j+1,k}^{n+1} + s_k f_{j,k+1}^{n+1} - p_j - p_k \tag{30}$$

A solução numérica do exercício será realizada para a equação (16) e, todo o desenvolvimento numérico pode ser conferido no arquivo **lista1_Q02.m**. A seguir, analisamos os resultados obtidos no modelo elaborado.

`<h1><font color='red'>falta finalizar o código para colocar as imagens aqui e discuti-las<\font>`

Q.03 - O que são condições de contorno nas formas não gradiente, extrapolação linear e radiacional ? Dê exemplos para a equação da difusão uni-dimensional linear. Que consequências e que restrições deve ser consideradas ao usar estas condições de contorno ?

Q.04 - Implemente dois modelos de advecção de um sinal retangular numa grande uni-dimensional, através de esquemas avançados no tempo, que utilizam diferenças finitas no espaço de 1ª ordem e de 4ª ordem. Compare os resultados dos dois modelos. A equação da advecção é dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \tag{31}$$

Discretizando (1) para o esquema avançado no tempo e espaço de **1ª ordem**, teremos:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{\Delta t} + c\left(\frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{\Delta x}\right) = 0 \tag{32}$$

A fórmula de recorrência será então:

$$f_j^{n+1} = f_j^n - c\frac{\Delta t}{\Delta t}(f_{j+1}^n - f_j^n) \tag{33}$$

E, na forma matricial, (3) ficará:

$$fren(2 : jmax - 1) = fatu(2 : jmax - 1) - c\frac{dt}{dx}\left[fatu(3 : jmax) - fatu(2 : jmax - 1)\right] \tag{34}$$

Discretizando (1), para o mesmo esquema, mas desta vez de **4ª ordem**, teremos:

Q.05 - Determine os coeficientes da forma discretiza da equação da difusão

$$\frac{\partial f}{\partial t} - D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \alpha f_j^{n+1} + \beta f_{j+1}^n + \gamma f_{j-1}^n + \delta f_j^{n-1} \tag{35}$$

a partir de expressões da Série de Taylor. Qual é a principal utilidade do "Método dos coeficientes indefinidos"? Inicialmente expandimos os termos do lado direito da equação (1), truncando a expansão no terceiro termo:

$$\begin{aligned} f^{n+1} &= f^n + \Delta t\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + ... \\ f^{n-1} &= f^n - \Delta t\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - ... \\ f_{j+1} &= f_j + \Delta x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + ... \\ f_{j-1} &= f_j - \Delta x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - ... \end{aligned} \tag{36}$$

Aplicando o conjunto de equações (2) em (1), obteremos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} - D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \alpha(f^n + \Delta t\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}) + \beta(f_j + \Delta x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}) + \gamma(f^n - \Delta t\frac{\partial f}{\partial t} + \\ + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}) + \delta(f_j - \Delta x\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}) \end{aligned} \tag{37}$$

Associando os termos do lado direito aos termos do lado esquerdo de (3), obteremos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma + \delta = 0 & \text{(a)} \\ \alpha\Delta t - \delta\Delta t = 0 & \text{(b)} \\ \beta\Delta x - \gamma\Delta x = 0 \rightarrow \beta = \gamma & \text{(c)} \\ \beta\frac{\partial\Delta x^2}{2} + \gamma\frac{\partial\Delta x^2}{2} = -D \rightarrow \beta + \gamma = \frac{-2D}{\Delta x^2} & \text{(d)} \end{cases} \tag{38}$$

Para determinar os coeficientes α, β, γ e δ, precisamos resolver o sistema de equações (4).
Determinando α
Multiplica-se (4.a) por Δt e soma-se (4.b):

$$(\alpha+\beta+\gamma+\delta)\Delta t+\alpha\Delta t-\gamma\Delta t=0\rightarrow 2\alpha\Delta t+\beta\Delta t+\gamma\Delta t=0 \therefore 2\alpha+\beta+\gamma=\frac{1}{\Delta t} \tag{39}$$

Multiplicando (4.d) por (-1) e somando (5), obtemos:

$$\alpha=\frac{1}{2\Delta t}+\frac{D}{\Delta x^2} \tag{40}$$

Determinando δ
Aplica-se (6) em (4.b):

$$(\frac{1}{2\Delta t}+\frac{D}{\Delta x^2})\Delta t-\delta\Delta t=0\rightarrow\frac{1}{2}+\frac{\Delta tD}{\Delta x^2}-\delta\Delta t=1\rightarrow\delta=-\frac{1}{\Delta t}+\frac{\Delta tD}{\Delta x^2}+\frac{D}{\Delta x^2} \tag{41}$$

Determinando β
Aplicando (4.c) em (4.d):

$$\begin{aligned}\beta\frac{\Delta x^2}{2}+\beta\frac{\Delta x^2}{2}=-D\rightarrow\beta\Delta x^2=-D\\ \therefore\beta=-\frac{D}{\Delta x^2}\end{aligned} \tag{42}$$

Determinando γ
Como de (4.c) $\beta=\gamma$, então:

$$\gamma=-\frac{D}{\Delta x^2} \tag{43}$$

Finalmente, aplicamos as equações (6) a (9) em (1) e obteremos:

$$\frac{\partial f}{\partial t}-D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=(\frac{1}{2\Delta t}+\frac{D}{\Delta x^2})f_j^{n+1}+(-\frac{D}{\Delta x^2})f_{j+1}^n+(-\frac{D}{\Delta x^2})f_{j-1}^n+(-\frac{1}{2\Delta t}+\frac{D}{\Delta x^2})f_j^{n-1} \tag{44}$$

Desenvolvendo a equação (10), obteremos:

$$\frac{\partial f}{\partial t}-D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=\frac{f_j^{n+1}}{2\Delta t}+\frac{Df_j^{n+1}}{\Delta x^2}-\frac{Df_{j+1}^n}{\Delta x^2}-\frac{Df_{j-1}^n}{\Delta x^2}-\frac{f_j^{n-1}}{2\Delta t}+\frac{Df_j^{n-1}}{\Delta x^2} \tag{45}$$

Reorganizando a equação (11), finalmente obtemos a equação da difusão discretizada com esquema centrado no tempo e no espaço pseudo-implícito:

$$\frac{f_j^{n+1}-f_j^{n-1}}{2\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(f_{j+1}^n+f_{j-1}^n-f_j^{n+1}-f_j^{n-1}) \tag{46}$$

A principal utilidade de se utilizar o **"Método dos coeficientes indefinidos"** é que podemos usar mais pontos no esquema de discretização. Neste caso, foram utilizados 4 pontos e, portanto, 4 coeficientes foram definidos. Em caso de de usar 6, 8, 10 pontos, poderíamos ter, respectivamente, 6, 8 ou 10 coeficientes a serem determinados.

Q.06 - Implemente um modelo numérico de advecção-difusão-decaimento 2D para a área costeira ao largo de Santos (SP), para os limites (46.5°W - 46.2°W; 23.95°S - 24.15°S). Processe o modelo para a dispersão de um contaminante despejado de forma contínua no ponto 46.35°W 24.01°S (simulando a operação do emissário submarino) e a dispersão de um contaminante despejado instantaneamente em 46.35°W 24.10°S (simulando acidente com embarcação tem trânsito). Processe o modelo com correntes de 1m/s para Norte, Nordeste e Noroeste. Forneça mapas das plumas de contaminantes e detecte que áreas costeiras podem ser atingidas em cada caso.