

Lista1_IOF814

October 20, 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:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (1)$$

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:

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

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

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

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:

$$f_j^n = B_j^n e^{iKj\Delta x} \quad (4)$$

onde K é o número de onda.

Aplicamos (4) em (2), obtendo:

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

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

$$B^{n+1} = \lambda B^n e B^n = \lambda B^{n-1} \Rightarrow B^{n-1} = \lambda^{-1} B^n \quad (6)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

A solução de (10) é dada por:

$$\lambda = \frac{q\cos(K\Delta x) \pm \sqrt{q^2[\cos(K\Delta x) - 1]^2 + 4}}{2} \quad (11)$$

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):

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

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

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

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

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

Portando, a solução de (14) será:

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

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.

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

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

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

Esquema Implícito

$$\frac{f_{j,k}^{16-15n+1} - f_{j,k}^{n-1}}{2\Delta x} + u \frac{f_{j+1,k}^{n+1} - f_{j-1,k}^{n+1}}{2\Delta x} + v \frac{f_{j,k+1}^{n+1} - f_{j,k-1}^{n+1}}{2\Delta y} = 0 \quad (18)$$

A diferença entre (17) e (18) está no nível de tempo utilizado para calcular as derivadas espaciais, respectivamente, n (atual) e n+1 (renovado).

Esquema Semi-Implícito

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

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

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

Para resolver a equação (20), devemos reescrevê-la da seguinte forma:

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

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

Nesta etapa do desenvolvimento, convém trabalharmos com cada equação de forma independente. Sendo assim, reescrevemos (20) somente para **as variações em x**, de forma que obteremos:

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

Onde, comparando (23) e (21), temos os seguintes coeficientes:

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

Como (23) 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:

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

Aplicando (24) e (25) em (23), teremos:

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

E, por fim, obtemos:

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

De modo análogo, podemos reescrever (20) para as **variações em y**, obtendo s_k e p_k :

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

Sendo assim, obtemos:

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

Por fim, com as equações (26), (27), (28) e (29) podemos obter a solução geral do problema ao reescrever (10) na forma:

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

A solução numérica do exercício será realizada para a equação (30) e, todo o desenvolvimento numérico pode ser conferido no arquivo **lista1_Q02.m**. A seguir, analisamos os resultados obtidos no modelo elaborado.

<h1>falta finalizar o código para colocar as imagens aqui e discuti-las</h1>

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:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (31)$$

Discretizando (31) para o esquema avançado no tempo e retardado no espaço de 1ª ordem, teremos:

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

A fórmula de recorrência será então:

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

E, na forma matricial, (33) ficará:

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

onde fren representa o nível de tempo renovado (n+1) e fatu o nível de tempo atual (n).

Discretizando (31), para o mesmo esquema, mas desta vez de **4ª ordem**, é necessário trabalhar de forma diferente. Sendo assim, desenvolvemos inicialmente a discretização no esquema avançado no tempo:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} \quad (35)$$

Já para o esquema de 4ª ordem no espaço, teremos um conjunto de 5 equações:

Uma geral, em que os pontos de grade calculados são de 3:jmax-2, pensando em uma aplicação no matlab, onde jmax é o a quantidade máxima de pontos em j:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\left(f_{j-2}^n - 8f_{j-1}^n + 8f_{j+1}^n - f_{j+2}^n \right)}{12\Delta x} \quad (36)$$

Para, respectivamente, o 1º, 2º, penúltimo e último ponto de grade, teremos as seguintes equações:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\left(-25f_j^n + 48f_{j+1}^n - 36f_{j+2}^n + 16f_{j+3}^n - 3f_{j+4}^n \right)}{12\Delta x} & \text{(A)} \\ \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\left(-3f_{j-1}^n - 10f_j^n + 18f_{j+1}^n - 6f_{j+2}^n + f_{j+3}^n \right)}{12\Delta x} & \text{(B)} \\ \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\left(-f_{j-3}^n + 6f_{j-2}^n - 18f_{j-1}^n + 10f_j^n + 3f_{j+1}^n \right)}{12\Delta x} & \text{(C)} \\ \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\left(3f_{j-4}^n - 16f_{j-3}^n + 36f_{j-2}^n - 48f_{j-1}^n + 25f_j^n \right)}{12\Delta x} & \text{(D)} \end{cases} \quad (37)$$

Sendo assim, ao programarmos um modelo com a equação de advecção discretizada avançada no tempo e de 4ª ordem no espaço, teremos o seguinte conjunto de equações a ser implementado.

Iniciamos o desenvolvimento da discretização de (31) pelo caso mais geral, equações (35) e (36):

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + \frac{c}{12\Delta x} \left(f_{j-2}^n - 8f_{j-1}^n + 8f_{j+1}^n - f_{j+2}^n \right) = 0 \quad (38)$$

Que, isolando f_j^{n+1} obtemos a função de renovação:

$$f_j^{n+1} = f_j^n - c \frac{\Delta t}{12\Delta x} \left(f_{j-2}^n - 8f_{j-1}^n + 8f_{j+1}^n - f_{j+2}^n \right) \quad (39)$$

De forma análoga, podemos reescrever o conjunto de equações (37), isolando o nível renovado de tempo:

$$\begin{cases} f_j^{n+1} = f_j^n - c \frac{\Delta t}{12\Delta x} \left(-25f_j^n + 48f_{j+1}^n - 36f_{j+2}^n + 16f_{j+3}^n - 3f_{j+4}^n \right) & (A) \\ f_j^{n+1} = f_j^n - c \frac{\Delta t}{12\Delta x} \left(-3f_{j-1}^n - 10f_j^n + 18f_{j+1}^n - 6f_{j+2}^n + f_{j+3}^n \right) & (B) \\ f_j^{n+1} = f_j^n - c \frac{\Delta t}{12\Delta x} \left(-f_{j-3}^n + 6f_{j-2}^n - 18f_{j-1}^n + 10f_j^n + 3f_{j+1}^n \right) & (C) \\ f_j^{n+1} = f_j^n - c \frac{\Delta t}{12\Delta x} \left(3f_{j-4}^n - 16f_{j-3}^n + 36f_{j-2}^n - 48f_{j-1}^n + 25f_j^n \right) & (D) \end{cases} \quad (40)$$

A solução numérica de ambos os esquemas de discretização é realizada no arquivo lista1_Q04_ord01.m e lista1_Q04_ord04.m, a seguir, seguem os resultados obtidos nos modelos elaborados.

2 inserir imagens aqui

Comparativamente, nota-se que o esquema de ordem 4 (Fig~??) possui uma instabilidade maior que o esquema de ordem 1 (Fig~??), com ruídos que interferem no sinal e, com o tempo, amplificam-se. Desta forma, o esquema de baixa ordem foi considerado o mais adequado para modelar a advecção do sinal retangular do exercício.

Adicionalmente, foram estimados, utilizando-se as próprias rotinas do Matlab, o tempo de processamento de cada modelo, onde o modelo de ordem 1 rodou em, aproximadamente, 6 segundos o dobro de domínio temporal que o esquema de ordem 4 rodou em 4 segundos. Apesar o tempo menor do segundo esquema, conclui-se que, em questão de custo computacional e eficiência de processamento, o esquema de ordem 1 (baixa ordem) é o melhor para a questão. Ainda, comparando os passos de tempo de cada modelo, o esquema de baixa ordem rodou, de forma estável, com um Δt 10 vezes maior que o utilizado no esquema de alta ordem que, com $\Delta t > 1$ instabilizou rapidamente.

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

$$\frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \alpha f_j^{n+1} + \beta f_{j+1}^n + \gamma f_{j-1}^n + \delta f_j^{n-1} \quad (41)$$

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 (41), truncando a expansão no terceiro termo:

$$\begin{aligned}
f^{n+1} &= f^n + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \dots \\
f^{n-1} &= f^n - \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \dots \\
f_{j+1} &= f_j + \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots \\
f_{j-1} &= f_j - \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \dots
\end{aligned} \tag{42}$$

Aplicando o conjunto de equações (42) em (41), obteremos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \alpha \left(f^n + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right) + \beta \left(f_j + \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + \gamma \left(f^n - \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right) \\
&\quad + \delta \left(f_j - \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)
\end{aligned} \tag{43}$$

Associando os termos do lado direito aos termos do lado esquerdo de (43), obteremos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases}
\alpha + \beta + \gamma + \delta = 0 & (a) \\
\alpha \Delta t - \delta \Delta t = 0 & (b) \\
\beta \Delta x - \gamma \Delta x = 0 \rightarrow \beta = \gamma & (c) \\
\beta \frac{\Delta x^2}{2} + \gamma \frac{\Delta x^2}{2} = -D \rightarrow \beta + \gamma = \frac{-2D}{\Delta x^2} & (d)
\end{cases} \tag{44}$$

Para determinar os coeficientes α , β , γ e δ , precisamos resolver o sistema de equações (44).

Determinando α

Multiplica-se (4.a) por Δt e soma-se (4.b):

$$(\alpha + \beta + \gamma + \delta) \Delta t + \alpha \Delta t - \gamma \Delta t = 0 \rightarrow 2\alpha \Delta t + \beta \Delta t + \gamma \Delta t = 0 \therefore 2\alpha + \beta + \gamma = \frac{1}{\Delta t} \tag{45}$$

Multiplicando (44.d) por (-1) e somando (44), obtemos:

$$\alpha = \frac{1}{2\Delta t} + \frac{D}{\Delta x^2} \tag{46}$$

Determinando δ

Aplica-se (46) em (44.b):

$$\left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{D}{\Delta x^2} \right) \Delta t - \delta \Delta t = 0 \rightarrow \frac{1}{2} + \frac{\Delta t D}{\Delta x^2} - \delta \Delta t = 1 \rightarrow \delta = -\frac{1}{\Delta t} + \frac{D}{\Delta x^2} \tag{47}$$

Determinando β

Aplicando (44.c) em (44.d):

$$\begin{aligned}
\beta \frac{\Delta x^2}{2} + \beta \frac{\Delta x^2}{2} &= -D \rightarrow \beta \Delta x^2 = -D \\
\therefore \beta &= -\frac{D}{\Delta x^2}
\end{aligned} \tag{48}$$

Determinando γ

Como de (44.c) $\beta = \gamma$, então:

$$\gamma = -\frac{D}{\Delta x^2} \quad (49)$$

Finalmente, aplicamos as equações (46) a (49) em (41) e obteremos:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{D}{\Delta x^2}\right)f_j^{n+1} + \left(-\frac{D}{\Delta x^2}\right)f_{j+1}^n + \left(-\frac{D}{\Delta x^2}\right)f_{j-1}^n + \left(-\frac{1}{2\Delta t} + \frac{D}{\Delta x^2}\right)f_j^{n-1} \quad (50)$$

Desenvolvendo a equação (ex5:10), obteremos:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f_j^{n+1}}{2\Delta t} + \frac{Df_j^{n+1}}{\Delta x^2} - \frac{Df_{j+1}^n}{\Delta x^2} - \frac{Df_{j-1}^n}{\Delta x^2} - \frac{f_j^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{Df_j^{n-1}}{\Delta x^2} \quad (51)$$

Reorganizando a equação (51), finalmente obtemos a equação da difusão discretizada com esquema centrado no tempo e no espaço pseudo-implícito:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2}(f_{j+1}^n + f_{j-1}^n - f_j^{n+1} - f_j^{n-1}) \quad (52)$$

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.