

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

October 27, 2017

Aluno: Danilo Augusto Silva
Nº USP: 7279456
Data de Entrega: 31 de Outubro/2017

Informações gerais quanto a estrutura da lista:

codes/: contem os códigos elaborados para os exercícios;
data/: contem os arquivos de input para alguns códigos e
outputs/: contem os arquivos de saída dos códigos, armazenados em subpastas designada para cada questão, bem como o arquivo original .tex e .pdf desta lista, com os desenvolvimentos das discretizações e respostas dissertativas.

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:

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

Para resolver este problema numericamente, precisamos resolver um sistema linear do tipo $Ax = d$, onde A é uma matriz tri-diagonal, cuja diagonal principal é preenchida com os coeficientes que multiplicam todos os termos f^{n+1} , o vetor d é composto por todos os termos f^{n+1} e, por fim, x é o vetor de dados que queremos para o nível renovado (n+1).

Desta forma, organizamos (19) deixando os termos de instante renovado do lado esquerdo e os demais termos do lado direito, como a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta t} f_{j,k}^{n+1} + \frac{u}{4\Delta x} f_{j+1,k}^{n+1} - \frac{u}{4\Delta x} f_{j-1,k}^{n+1} + \frac{v}{4\Delta y} f_{j,k+1}^{n+1} - \frac{v}{4\Delta y} f_{j,k-1}^{n+1} &= \frac{f_{j,k}^{n-1}}{2\Delta t} - \\ &\frac{u}{4\Delta x} f_{j+1,k}^n + \frac{u}{4\Delta x} f_{j-1,k}^n - \frac{v}{4\Delta y} f_{j,k+1}^n + \frac{v}{4\Delta y} f_{j,k-1}^n \end{aligned} \quad (20)$$

A solução numérica de (20) é apresentada no código **lista1_Q02** e algumas imagens podem ser observadas nas Fig 1, Fig 2 e Fig 3.

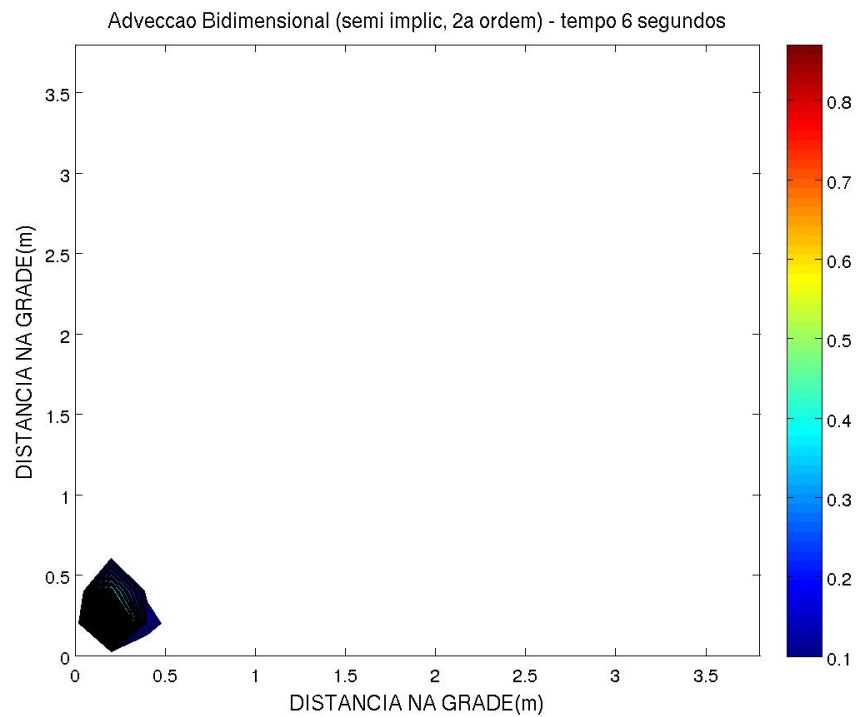


Fig 1 - Advecção bidimensional de um contaminante teórico, através de discretização com esquema semi implícito de 2ª ordem. Instante referente ao início da simulação (6 segundos).

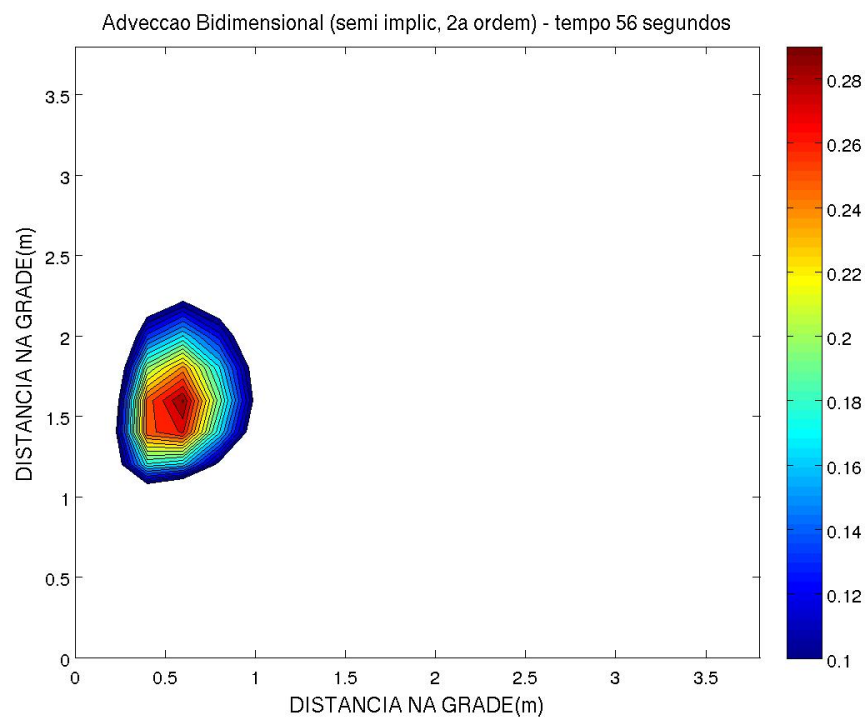


Fig 2 - Idem a Fig 1, mas para o instante de 56 segundos simulados.

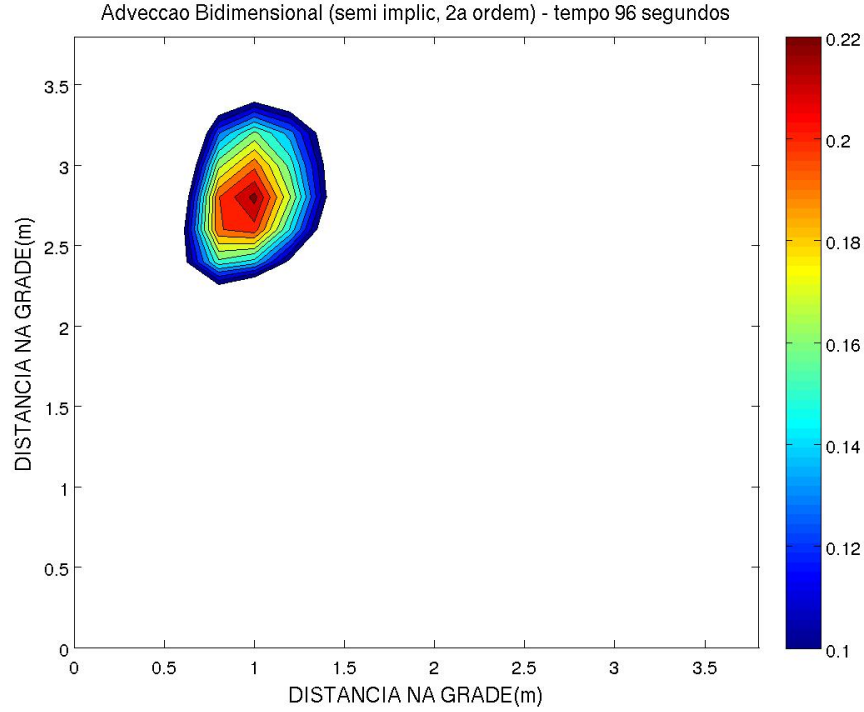


Fig 3 - Idem a Fig 1, mas para o instante de 96 segundos simulados, referente ao final da simulação.

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 ? Como não podemos aplicar a fórmula de recorrência ao último ponto de grade, é necessário impor uma condição de contorno adicional, chamada de "*Condição de Contorno Computacional*". Essa condição adicional é necessária junto a condição inicial e a condição de contorno no primeiro ponto da grade e é dada em $f_{j=jmax}^{n+1}$.

Condição não Gradiente

Utiliza-se o valor do penúltimo ponto de grade calculado e repete-se no último ponto, na seguinte forma:

$$f_{jmax}^{n+1} = f_{jmax-1}^{n+1} \quad (21)$$

Para a equação da difusão unidimensional linear, podemos determinar a condição de contorno computacional como sendo:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \longrightarrow \frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = D \left(\frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right) \quad (22)$$

Desta forma, de (22) determinado a fórmula de recorrência:

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

Por fim, de (23) determinamos o valor no último ponto de grade da equação da advecção unidimensional linear, na forma matricial, como:

$$fren(jmax) = fatu(jmax - 1) + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[fatu(jmax) - 2fatu(jmax - 1) + fatu(jmax - 2) \right] \quad (24)$$

Embora de fácil implementação e não possuir restrição de aplicação, essa condição conduz a instabilidade do modelo, ao refletir parcialmente o sinal no contorno, com amplitude igual a $A_0 \tan\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)$, ou seja, para $K\Delta x \rightarrow 0$ a reflexão tende a zero.

Extrapolação Linear

Utiliza-se os valores dos pontos imediatamente internos ao contorno no nível de tempo (n). Um exemplo tomando dois pontos é descrito da seguinte forma:

$$f_{jmax}^{n+1} = 2f_{jmax-1}^n - f_{jmax-2}^n \quad (25)$$

onde utiliza-se o penúltimo e antepenúltimo ponto de grade do instante de tempo atual (n), para se calcular o instante renovado (n+1). Na forma matricial, (25) toma a seguinte forma:

$$fren(jmax) = 2fatu(jmax - 1) - fatu(jmax - 2) \quad (26)$$

Entretanto, a utilização desta condição de contorno instabilidade o modelo, mas pode-se reduzir a instabilidade ao adotar mais pontos de grades. A reflexão na borda, nesta condição de contorno, possui amplitude $A_0 \tan^2\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)$, desde que $\left| \tan\left(\frac{K\Delta x}{2}\right) \right| < 1$, essa solução será melhor que a condição não gradiente.

Condição Radiacional

Consiste na advecção de variáveis próximas ao contorno, através de uma equação de advecção adicional:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_p \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (27)$$

Onde o parâmetro c_p é calculado utilizando-se o penúltimo ponto de grade (jmax-1) e, então, emprega-se a equação (27) para determinar os valores no contorno (jmax). Usando como exemplo a equação da difusão uni-dimensional, podemos discretizar (27) da seguinte forma:

$$\frac{f_{jmax-1}^n - f_{jmax-1}^{n-1}}{\Delta t} + c_p \frac{f_{jmax-1}^{n-1} - f_{jmax-2}^{n-1}}{\Delta x} = 0 \quad (28)$$

E, isolando c_p , obtemos, para o penúltimo ponto de grade, a seguinte equação:

$$c_p = - \frac{\frac{f_{jmax-1}^n - f_{jmax-1}^{n-1}}{\Delta t}}{\frac{f_{jmax-1}^{n-1} - f_{jmax-2}^{n-1}}{\Delta x}} \quad (29)$$

Desta maneira, tendo c_p calculado, podemos aplicar a condição de contorno radiacional para o último ponto de grade de um modelo para a equação da difusão 1D da seguinte forma:

$$fren(jmax) = fatu(jmax) - c_p * \frac{\Delta t}{\Delta x} * (fatu(jmax) - fatu(jmax - 1)); \quad (30)$$

Importante notar que, independente da equação sendo modelada, o distúrbio será propagado para o contorno utilizando uma equação de advecção aplicada no contorno e nas proximidades

dele. A qualidade desta condição é dada, portanto, pela tendência do distúrbio ser eficientemente advectado para fora do domínio.

Conclusão

Por fim, as melhores condições de contorno são as que provocam mínima reflexão do sinal nas bordas e mantêm a continuidade dos resultados próximo aos limites da grade.

Q.04 - Implemente dois modelos de advecção de um sinal retangular numa grande unidimensional, 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:

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

Sendo assim, ao programarmos um modelo com a equação de advecção discretiza 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):

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

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

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

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

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

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.

Comparativamente, nota-se que o esquema de ordem 4 (Fig 5) possui uma instabilidade maior que o esquema de ordem 1 (Fig 4), 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

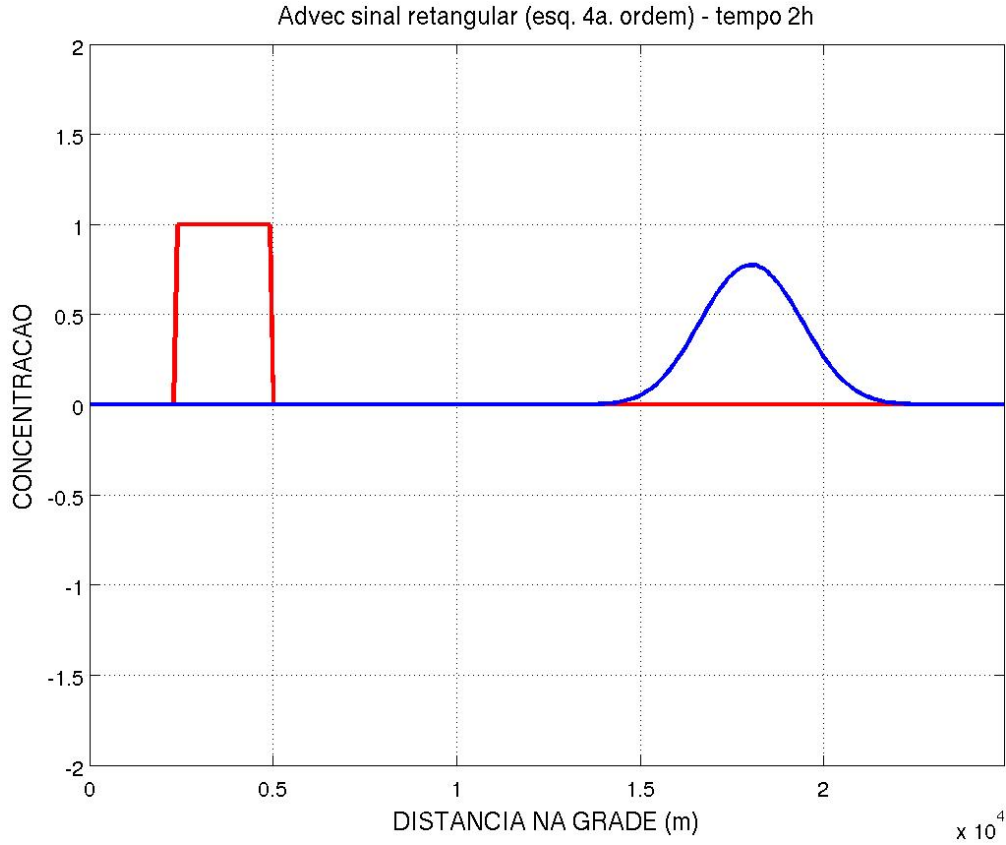


Fig 4 - Advecção de um sinal retangular em esquema avançado no tempo e retardado no espaço de 1ª ordem.

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 quarto termo, para termos um sistema fechado adiante (4 equações para 4 coeficientes):

$$\begin{aligned} f_j^{n+1} &= f_j^n + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} + \dots \\ f_j^{n-1} &= f_j^n - \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} + \dots \\ f_{j+1} &= f_j + \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \\ f_{j-1} &= f_j - \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \end{aligned} \quad (42)$$

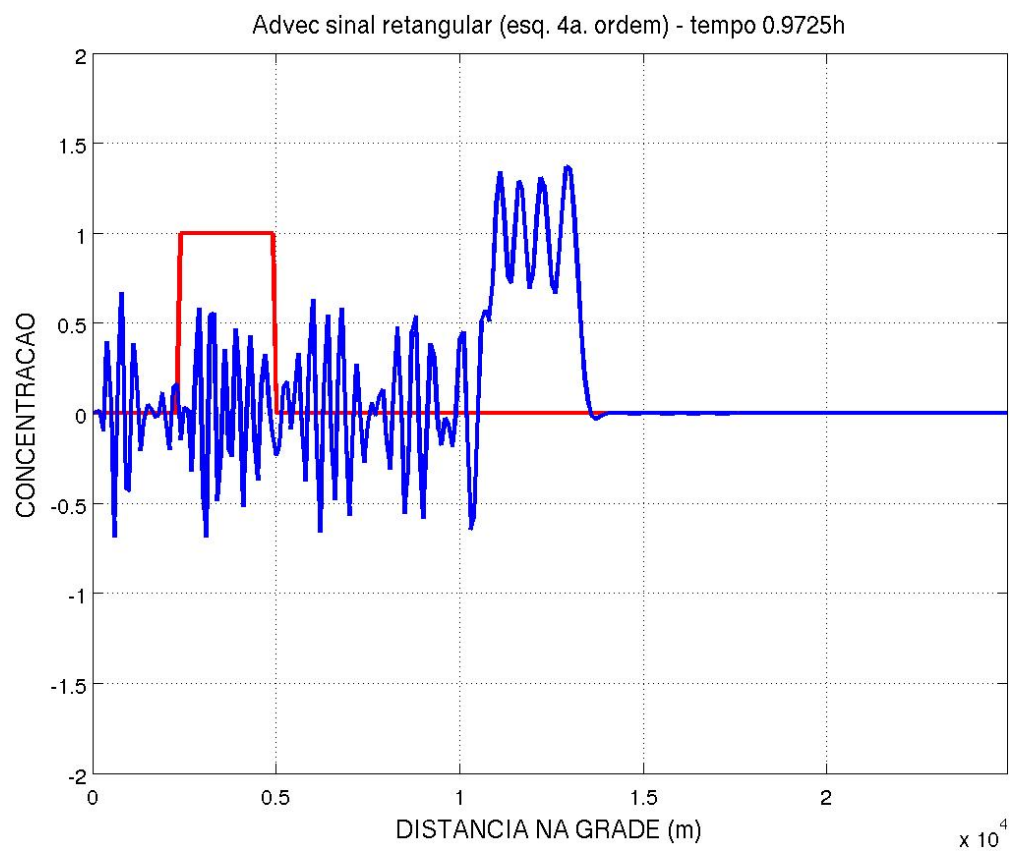


Fig 5 - Advecção de um sinal retangular em esquema avançado no tempo e retardado no espaço de 4^a ordem.

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = & \alpha(f^n + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3}) + \\ & \beta(f_j + \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}) + \gamma(f^n - \Delta t \frac{\partial f}{\partial t} + \\ & + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3}) + \delta(f_j - \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}) \end{aligned} \quad (43)$$

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

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

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):

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

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

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

Determinando δ

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

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

Determinando β

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

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

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:

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

Desenvolvendo a equação (50), 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, sendo um artifício para lidar com a instabilidade do esquema utilizado na discretização.

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. Fórmula de recorrência:

$$\begin{aligned} & \frac{f_{j,k}^{n+1} - f_{j,k}^n}{\Delta t} + \frac{u + |u|}{2} \frac{f_{j,k}^n - f_{j-1,k}^n}{\Delta x} + \frac{u - |u|}{2} \frac{f_{j+1,k}^n - f_{j,k}^n}{\Delta x} + \\ & \frac{v + |v|}{2} \frac{f_{j,k}^n - f_{j,k-1}^n}{\Delta y} + \frac{v - |v|}{2} \frac{f_{j,k+1}^n - f_{j,k}^n}{\Delta y} = \\ & D_x \frac{f_{j+1,k}^n - 2f_{j,k}^n + f_{j-1,k}^n}{\Delta x^2} + D_y \frac{f_{j,k+1}^n - 2f_{j,k}^n + f_{j,k-1}^n}{\Delta y^2} - r f_{j,k}^n \end{aligned} \quad (53)$$

O programa elaborado para resolver este exercício está no arquivo **Lista1_Q06.m** e as saídas do modelo estão em **outputs/**.

Para o cenário com ventos para Norte, notamos que as plumas, tanto do emissário quanto do acidente com embarcação, evoluem em direção a região central do domínio modelado, atingindo, eventualmente, a costa diretamente na praia de Santos. Considerando a velocidade das correntes, a pluma mais externa não atingirá a costa no período de simulação de 30 minutos, mas aumentando este período a pluma alcançará de fato, embora com concentrações muito baixas (em geral abaixo de 10^{-7}).

No cenário com ventos para Noroeste, a pluma do emissário atinge a região da ponta da praia e entrada do Porto de Santos, com elevadas concentrações. Já a pluma do acidente evolui para o setor superior leste do domínio, atingindo a região de Guarujá e Bertioga e, por um período de simulação maior, a pluma atingiria parte do Litoral Norte de São Paulo.

Por fim, o último cenário modelado, com ventos para Noroeste, a pluma do emissário a boca do estuário de São Vicente, enquanto que a pluma do acidente, por sua vez, atinge a região a Leste da grade, alcançando principalmente a região da Praia Grande e demais regiões. Da mesma forma que no segundo cenário.