

# Lista1\_IOF814

October 19, 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:

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

Analisando (11), nota-se que, para qualquer  $\Delta x$  e  $\Delta t$ , 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 (2) e (3) está no nível de tempo utilizado para calcular as derivadas espaciais, respectivamente,  $n$  (atual) e  $n+1$  (renovado).

#### Esquema Semi-Implícito

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

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 (5), devemos reescrevê-la da seguinte forma:

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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 (5) para as **variações em y**, obtendo  $s_k$  e  $p_k$ :

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

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 (11)-(14) podemos obter a solução geral do problema ao reescrever (10) na forma:

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

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

---

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

A fórmula de recorrência será então:

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

E, na forma matricial, (3) ficará:

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

Discretizando (1), 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 um 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 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 (1) pelo caso mais geral, equações (5) e (6):

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

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 (7), 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.m e, a seguir, seguem os resultados obtidos nos modelos elaborados.

PROGRAMAR

#### 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 (1), truncando a expansão no terceiro termo:

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

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

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

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

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

Para determinar os coeficientes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\delta$ , precisamos resolver o sistema de equações (4).

**Determinando  $\alpha$**

Multiplica-se (4.a) por  $\Delta t$  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 (4.d) por (-1) e somando (5), obtemos:

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

**Determinando  $\delta$**

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

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

**Determinando  $\beta$**

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

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

**Determinando  $\gamma$**

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

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

Finalmente, aplicamos as equações (6) a (9) em (1) 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 (10), obteremos:

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

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

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

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 se 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 em 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.**