Edital do Trabalho Computacional - TEA013

Professor: Emílio Graciliano Ferreira Mercuri, D.Sc.
Departamento de Engenharia Ambiental - DEA,
Universidade Federal do Paraná - UFPR
mercuri@ufpr.br

Abaixo encontra-se o Edital do Trabalho individual ou em dupla da disciplina TEA013.

Soluções da Equação da Advecção Difusão

O trabalho visa estimular o(a) discente no desenvolvimento, programação e interpretação das soluções da equação da advecção difusão.

A dupla/discente será avaliada conforme o desempenho nos trabalhos escrito e nos programas desenvolvidos.

Objetivo Geral

Resolver a equação da advecção difusão utilizando a teoria desenvolvida em sala da aula.

Objetivos Específicos

- Programar e fazer o gráfico das soluções analíticas
- Programar e fazer o gráfico das soluções numéricas
- Discutir a validade, precisão e acurácia de cada solução.

Cada dupla deverá propor as suas condições de contorno e condição inicial. O perfil de velocidades deve ser considerado constante em todos os casos.

Equação governante 1D

A equação da advecção difusão unidimensional é:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + U\frac{\partial u}{\partial x} = D\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)$$

Esquemas numéricos propostos

A seguir são propostos 4 esquemas explícitos e 1 esquema implícito para o proplema unidimensional.

- Explícito no tempo e diferença finita progressiva para $\frac{\partial u}{\partial x}$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + U\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} = D\left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}\right)$$

- Explícito no tempo e diferença finita regressiva para $\frac{\partial u}{\partial x}$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + U\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = D\left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}\right)$$

- Explícito no tempo e diferença finita centrada para $\frac{\partial u}{\partial x}$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + U\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = D\left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}\right)$$

- Método *Quickest* (explícito)

$$
\begin{aligned}
u_i^{n+1} = u_i^n \quad & + \quad \left[\mathrm{Fo}(1-\mathrm{Co}) - \frac{\mathrm{Co}}{6}(\mathrm{Co}^2 - 3\mathrm{Co} + 2)\right] u_{i+1}^n \\
& - \quad \left[\mathrm{Fo}(2-3\mathrm{Co}) - \frac{\mathrm{Co}}{2}(\mathrm{Co}^2 - 2\mathrm{Co} - 1)\right] u_i^n \\
& + \quad \left[\mathrm{Fo}(1-3\mathrm{Co}) - \frac{\mathrm{Co}}{2}(\mathrm{Co}^2 - \mathrm{Co} - 2)\right] u_{i-1}^n \\
& + \quad \left[\mathrm{Fo}(\mathrm{Co}) + \frac{\mathrm{Co}}{6}(\mathrm{Co}^2 - 1)\right] u_{i-2}^n
\end{aligned}
$$

- Método *Crank-Nicholson* (implícito)

$$
\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{U}{2}\left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right) = \frac{D}{2}\left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right)
$$

Equação governante 2D

A equação da advecção difusão bidimensional é:

$$
\frac{\partial u}{\partial t} + U\frac{\partial u}{\partial x} = D\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)
$$

sendo U a velocidade da água no canal na direção x, uma constante. As velocidades na direção y são desprezíveis e não serão consideradas.

Resultados Esperados

Seja $\hat{Y}$ o vetor com m resultados do modelo numérico em um tempo t específico para o domínio x e seja Y o vetor com os resultados da solução analítica nos mesmos pontos da solução numérica, então, pode-se calcular o Erro Quadrático médio (EQM) de acordo com a equação:

$$\text{EQM} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2$$

Considere qualquer caso de esquema numérico unidimensional. No tempo $t = 100\Delta t$ tem-se $1 < i < m$ pontos na malha para representar o domínio em x. Pode-se calcular o EQM da aproximação numérica para esse tempo específico, comparando-a com a solução analítica por meio da equação acima.

Caso 1D

Para cada um dos 5 esquemas numéricos 1D propostos (4 explícitos e 1 implícito), os resultados esperados são:

1. Gráfico da evolução temporal da solução.
2. EQM da aproximação numérica, comparando-a com a solução analítica.

Caso 2D

No caso bibimensional não será cobrado nenhum esquema numérico, apenas a representação gráfica com um estudo da solução analítica.

O número de Péclet (Pe) é um número adimensional relevante no estudo de fenômenos de transporte. É definido como a razão dos efeitos de advecção e difusão. Pode-se calcular o número de Péclet como:

$$\text{Pe} = \frac{\text{Co}}{\text{Fo}}$$

No caso no número de Péclet de uma malha:

$$\text{Pe} = \frac{\text{Co}}{\text{Fo}} = \frac{\frac{U\Delta t}{\Delta x}}{\frac{D\Delta t}{\Delta x^2}} = \frac{U\Delta t}{\Delta x}\frac{\Delta x^2}{D\Delta t} = \frac{U\Delta x}{D}$$

Os resultados esperados para a simulação bidimensional são:

- Sequência de imagens (ilustrando uma evolução temporal) para dois casos da solução analítica:
  1. Advecção dominando a Difusão: $U\Delta x > D$ ou $\text{Pe} > 1$
  2. Difusão dominando a Advecção: $U\Delta x < D$ ou $\text{Pe} < 1$
  3. Difusão da mesma ordem de Advecção: $U\Delta x = D$ ou $\text{Pe} = 1$
- Enviar os vídeos (ou gif's) dos três casos descritos acima para o e-mail mercuri@ufpr.br

Trabalho Escrito

Documento escrito: Formato ABNT, tamanho máximo: 30 páginas.

1. Introdução
   - Contextualização e Motivação
   - Objetivos
2. Revisão Bibliográfica
3. Materiais e Métodos
4. Resultados e Discussão
5. Conclusão
6. Referências Bibliográficas
7. **Anexos**: Códigos desenvolvidos

Data da Entrega: 22/06/2018 **(Entrega do trabalho escrito em sala de aula)**