Modelação Ambiental (2 º Sem 2007/2008)

MEAmb

Página alternativa

https://fenix.ist.utl.pt/homepage/ist146730/modelacao-ambiental-2007-2008

Corpo Docente

Ramiro Joaquim de Jesus Neves (Responsável)

Com Apoio de :
Marcos Mateus e Guillaume Riflet

Objectivos da Disciplina

- O que é um modelo,
- Os modelos matemáticos,
- Elementos que constituem um modelo,
- Os processos de transporte e as equações de evolução,
- Os métodos Numéricos,
- Programação/Linguagens gráficas,
- Gestão Ambiental, Modelos, Monitorização e Estudos de processos.

Programa

- Conceitos básicos de métodos numéricos,
- Programação em Visual Basic,
- Programação em PowerSim / Matlab,
- Modelos Presa-Predador
- Modelos Ecológicos,
- Modelos Hidrodinâmicos,
- Modelos de Transporte de Sedimentos.

Conhecimentos requeridos

- Mecânica dos Fluidos e Processos de Transporte,
- Programação,
- Ecologia e funcionamento dos ecossistemas,
- Ciclo dos Elementos e Ecologia,
- Fluxos de massa e de Energia através de um ecossistema.

Dificuldades Encontradas em Anos Anteriores

- Programação é a grande dificuldade.
- Mecânica dos Fluidos é uma dificuldade adicional, mas menor.

- Soluções: Acelerar o processo de aprendizagem de programação.

Equações que vamos resolver

- Conservação da massa:

$$\frac{\partial c_k}{\partial t}+\frac{\partial u_j c_k}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu\frac{\partial c}{\partial x_j}\right)+(F_k-P_k)$$

- Num modelo Hidrodinâmico também a equação de Transporte de Quantidade de Movimento:

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)+(Pressão+Gravidade)$$

Onde aparecem os conceitos requeridos

- Equação de Evolução (ou de Transporte),
- Na equação de Transporte de Quantidade de Movimento,
- Em*(F-P)*
- Se isto fosse conhecido bem como a programação, a disciplina poderia ser chamada de “Mecânica dos Fluidos Computacional….”

Como se resolvem as equações

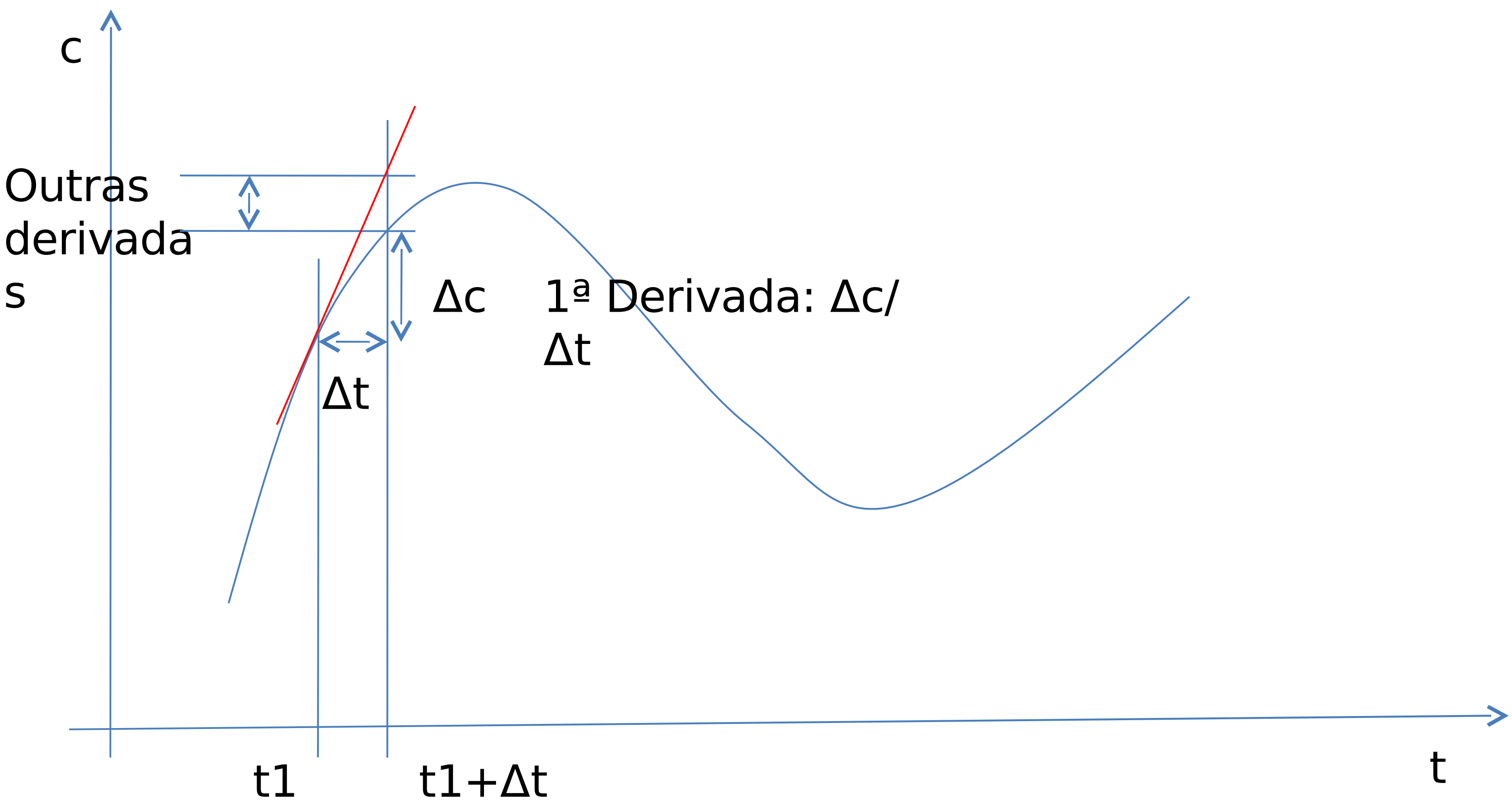
- Métodos Numéricos:
- Diferenças finitas/Volumes Finitos
- Elementos Finitos/Elementos de Fronteira.

- Como se constrói o método das diferenças finitas?
- Série de Taylor:

$$c_i^{t+\ t} = c_i^t + \ t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^t + \frac{\ t^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^t + \frac{\ t^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^t + \ldots + \frac{\ t^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^t$$

O que representa a série de Taylor?

$$c_i^{t+\ t}=c_i^t+\ t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^t+\frac{t^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^t+\frac{t^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^t+\ldots+\frac{t^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^t$$



Como usar para calcular as derivadas?

$$c_i^{t+t} = c_i^t + t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^t + \frac{t^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^t + \frac{t^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^t + \ldots. + \frac{t^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^t$$

$$c_i^{t+t} = c_i^t + t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^t + \circ(t^2)$$

Método Explícito

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^t = \frac{c_i^{t+t} - c_i^t}{t} + \circ(t)$$

$$c_i^t = c_i^{t+t} - t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t} + \frac{t^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^{t+t} - \frac{t^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^{t+t} + \ldots. + \frac{t^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^{t+t}$$

$$c_i^t = c_i^{t+t} - t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t} + \circ(t^2)$$

Método Implícito

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t} = \frac{c_i^{t+t} - c_i^t}{t} + \circ(t)$$

Outro Método

$$c_i^{t+t} = c_i^{t+t/2} + (t/2)\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t/2} + \frac{(t/2)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^{t+t/2} + \frac{(t/2)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^{t+t/2} + \ldots + \frac{(t/2)^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^{t+t/2}$$

$$c_i^{t-t} = c_i^{t+t/2} - (t/2)\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t/2} + \frac{(t/2)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^{t+t/2} - \frac{(t/2)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^{t+t/2} + \ldots + \frac{(t/2)^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^{t+t/2}$$

Subtraindo uma da outra:

$$c_i^{t+t} - c_i^{t} = + t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t/2} + \circ\left[(t/2)^3\right]$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^{t+t/2} = \frac{c_i^{t+t} - c_i^{t}}{t} + \circ\left[(t/2)^2\right]$$

Este método calcula a derivada no centro do intervalo de tempo e tem precisão de 2ª ordem. Dá a solução exacta até uma evolução parabólica

O que representa a série de Taylor?

$$c_i^{t+\ t} = c_i^t + \ t\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_i^t + \frac{t^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)_i^t + \frac{t^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial t^3}\right)_i^t + \ldots . + \frac{t^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial t^n}\right)_i^t$$

Derivadas no espaço?

$$c_{i+x}^{t}=c_{i}^{t}+x\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{i}^{t}+\frac{x^{2}}{2!}\left(\frac{\partial^{2} c}{\partial x^{2}}\right)_{i}^{t}+\frac{x^{3}}{3!}\left(\frac{\partial^{3} c}{\partial x^{3}}\right)_{i}^{t}+\ldots.+\frac{x^{n}}{n!}\left(\frac{\partial^{n} c}{\partial x^{n}}\right)_{i}^{t}$$

$$c_{i+x}^{t}=c_{i}^{t}+x\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{i}^{t}+\circ(x^{2})$$

Método downwind

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{i}^{t}=\frac{c_{i+x}^{t}-c_{i}^{t}}{x}+\circ(x)$$

$$c_{i-x}^{t}=c_{i}^{t}-x\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{i}^{t}+\frac{x^{2}}{2!}\left(\frac{\partial^{2} c}{\partial x^{2}}\right)_{i}^{t}-\frac{x^{3}}{3!}\left(\frac{\partial^{3} c}{\partial x^{3}}\right)_{i}^{t}+\ldots.+\frac{x^{n}}{n!}\left(\frac{\partial^{n} c}{\partial x^{n}}\right)_{i}^{t}$$

$$c_{i-x}^{t}=c_{i}^{t}-x\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{i}^{t}+\circ(x^{2})$$

Método upwind

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{i}^{t}=\frac{c_{i}^{t}-c_{i-x}^{t}}{x}+\circ(x)$$

Subtraindo uma equação da Outra

$$c_{i+x}^{t} = c_{i-x}^{t} - 2\,\mathrm{x}\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{i}^{t} + \circ\left(x^{3}\right)$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{i}^{t} = \frac{c_{i+x}^{t} - c_{i-x}^{t}}{2\,\mathrm{x}} + \circ\left(x^{2}\right)$$

Diferenças centrais

Derivadas no espaço?

$$c^{¿}_{i+x} = c^{¿}_{i} + x\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)^{¿}_{i} + \frac{x^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)^{¿}_{i} + \frac{x^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial x^3}\right)^{¿}_{i} + \ldots. + \frac{x^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial x^n}\right)^{¿}_{i}$$

$$c^{¿}_{i-x} = c^{¿}_{i} - x\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)^{¿}_{i} + \frac{x^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)^{¿}_{i} - \frac{x^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 c}{\partial x^3}\right)^{¿}_{i} + \ldots. + \frac{x^n}{n!}\left(\frac{\partial^n c}{\partial x^n}\right)^{¿}_{i}$$

Adicionando:

$$c^{¿}_{i+x} + c^{¿}_{i-x} = 2\mathrm{c}^{¿}_{i} - x^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}\right)^{¿}_{i} + \circ(x^4)$$

$$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)^{¿}_{i} = \frac{c^{¿}_{i-x} - 2\mathrm{c}^{¿}_{i} + c^{¿}_{i-x}}{x^2} + \circ(x^2)$$

Equações Algébricas

- Obtêm-se substituindo as derivadas pelas aproximações:

$$\frac{c^{t+\ t}-c^{t}}{t}+\circ\left(t\ \right)+u\,\frac{c^{t}_{x+\ x}-c^{t}_{x-\ x}}{2\mathrm{x}}+\circ\left(\ x^{2}\right)=\vartheta\,\frac{c^{t}_{x+\ x}-2\mathrm{c}^{t}_{x}+c^{t}_{x-\ x}}{x^{2}}+\circ\left(\ x^{2}\right)$$

  - Explícito, diferenças centrais. Precisão de 2ª ordem no espaço e 1ªno tempo.

$$\frac{c^{t+\ t}-c^{t}}{t}+\circ\left(\ t\right)^{2}+u\,\frac{c^{t+\ t/2}_{x+\ x}-c^{t+\ t/2}_{x-\ x}}{2\ \mathrm{x}}+\circ\left(\ x^{2}\right)=\vartheta\,\frac{c^{t+\ t/2}_{x+\ x}-2\mathrm{c}^{t+\ t/2}_{x}+c^{t+\ t/2}_{x-\ x}}{x^{2}}+\circ\left(\ x^{2}\right)$$

  - Semi-implícito (Crank-Nicholson) diferenças centrais espaço. Precisão de 2ª ordem no

O que se paga pela precisão de 2ª ordem no tempo?

Explícito Upwind

$$\frac{c^{t+t}-c^{t}}{t}+\circ\left(\ t\right)+u\frac{c_{x}^{t}-c_{x-x}^{t}}{x}+\circ\left(\ x^{2}\right)=\vartheta\frac{c_{x+\ x}^{t}-2\mathrm{c}_{x}^{t}+c_{x-\ x}^{t}}{x^{2}}+\circ\left(\ x^{2}\right)$$

- Precisão de 1ª ordem no tempo e no espaço para advecção. Segunda ordem para difusão.

Qual é o melhor método?

- Se o erro de truncatura fosse o único indicador seria Crank-Nicholson, com diferenças centrais!
- Mas não é o único. Temos também que ver a consistência com os processos que estamos a estudar.
- Como se faz fisicamente a Advecção (propriedade transportiva) e a Difusão?
- O método upwind respeita