Taller de modelacion 1

GF3022 Contaminación Atmosférica Otoño 2011

En este taller se considerará una simplificación de la Ecuación de Continuidad vista en clases, despreciando los términos de divergencia y de mezcla turbulenta.

Consideremos los siguiente campos, definidos en $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^+$:

- Sea $c(\overrightarrow{x}, t)$ la concentración de un cierto contaminante en el punto $\overrightarrow{x}$ y al instante t.

- Sea $\overrightarrow{V}(\overrightarrow{x}, t)$ un campo de velocidades en el punto $\overrightarrow{x}$ y al instante t, el cual supondremos es a divergencia nula.

- Sean $Q(\overrightarrow{x}, t)$ y $S(\overrightarrow{x}, t)$ funciones fuente y sumidero del contaminante, respectivamente.

Con estas definiciones el problema de advección se plantea como sigue

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\overrightarrow{V} \cdot \nabla c + Q - S \tag{1}$$

Además es necesario considerar condiciones iniciales de la forma

$$c(\overrightarrow{x}, 0) = c_0(\overrightarrow{x}) \tag{2}$$

Lo que haremos de aqui en adelante es tratar de resolver esta ecuación computacionalmente, mediante un esquema de diferencias finitas.

1 Método de diferencias finitas

1.1 En una dimensión

El concepto principal detrás de este método es el poder discretizar y aproximar la derivada de una función.

Primero ejemplificaremos el método para el caso unidimensional de una función f suave definida en un intervalo (a, b). Por definición, para $x \in (a, b)$ se tiene que

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{3}$$

y por lo tanto si h es pequeño, se puede considerar la aproximación

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{4}$$

Con esta idea en mente, si $f \in C^2(a, b)$ podemos considerar las siguientes expansiones de Taylor de primer orden

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + o(h^2) \tag{5}$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + o(h^2) \tag{6}$$

De (5), se puede obtener que

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + o(h) \tag{7}$$

Sea $N \in \mathbb{N}$. Definamos un mallado $(x_i)_{i=1}^{N+1}$ de (a, b) y paso $h = \frac{b-a}{N}$ por

$$x_i = a + (i-1)h \tag{8}$$

notando que de esta forma $x_1 = a$ y $x_{N+1} = b$. En general no es necesario que la malla sea equiespaciada, de hecho en muchas aplicaciones interesa considerar regiones particulares del dominio con mallas más refinadas.

Denotemos $f_i = f(x_i)$. Usando (5) y (6) se tienen las siguientes posibles aproximaciones de la derivada

Esquema forward:

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \tag{9}$$

Esquema backward:

$$f'(x) = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} \tag{10}$$

Esquema centrado

$$f'(x) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \tag{11}$$

1.1.1 Ecuacion de continuidad en una dimensión

Sea un horizonte temporal $T > 0$ y un dominio espacial (a, b). En el caso unidimensional se tiene que $\overrightarrow{V} = u\hat{x}$ y supondremos (por simplicidad y para asegurar la condicion de divergencia nula) que $u = cte$.

Sean las mallas temporal y espacial $(x_i)_{i=1}^{N+1}$ y $(t_n)_{n=1}^{N_t+1}$ de $[0, T]$ y (a, b), respectivamente. Definamos $c_i^n = c(x_i, t_n)$. Además denotaremos por h al paso espacial y por δt al paso temporal.

A modo de ejemplo (si se aproximan las derivadas parciales de manera análoga al caso anterior) el esquema backward en el espacio y en el tiempo para la Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) + u\frac{\partial c}{\partial x}(x,t) = Q(x,t) - S(x,t) \text{ , con } x \in (a,b),\, t \in (0,T) \tag{12}$$

está dado por:

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\delta t} + u\frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{h} = Q_i^n - S_i^n \tag{13}$$

Análogamente, el esquema forward está dado por

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\delta t} + u\frac{c_{i+1}^n - c_i^n}{h} = Q_i^n - S_i^n \tag{14}$$

En general, todos los esquemas de diferencias finitas siguen la misma idea, sin embargo en la práctica son diversos y dependiendo de la ecuación que se quiera resolver se debe elegir el más adecuado. Algunos ejemplos de estos esquemas son Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, Leap-frog, Implícitos, Crank-Nicolson, etc.

Algunos resultados teóricos para esta ecuación

En general, dado un esquema numérico es importante estudiar algunas propiedades de él. Las más importantes son las llamadas de convergencia, consistencia y estabilidad.

A grandes rasgos, la consistencia es cuando un esquema numérico representa bien la ecuación cuando h y δt convergen a cero. En este caso, para $u > 0$, (13) es consistente y para $u < 0$, (14) lo es.

Un esquema es estable con respecto a la norma $||\ ||$ si existe $K > 0$ independiente de h y de δt tal que $||c^n|| \leq K||c_0||$ (con $c^n = (c_1^n, c_2^n, \ldots, c_N^n)$) . Esta es una propiedad importante, pues da cuenta de lo "razonable" que pueden ser los resultados de un esquema. En este contexto se define el numero ν de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) como $|\nu| = \frac{|u|\delta t}{h}$, que garantiza estabilidad del sistema si $|\nu| < 1$ para el caso de la ecuación en estudio.

La convergencia de un esquema se refiere a que la solución de este esquema se aproxime a la solución real de la ecuación cuando los pasos temporales y espaciales tienden a 0. Se prueba que la condición CFL es necesaria, pero no suficiente para la convergencia.

2 Taller

En la página de u-cursos se encuentran archivos .m con la ecuación programada. A partir de esto, y modificaciones de este código responda lo siguiente:

2.1 Una dimensión

- Considere que la solución a la ecuación (12) (con lado derecho nulo) está dada por $c(x,t) = c_0(x - ut)$ donde c_0 es la condición inicial. ¿Qué comportamiento posee la solución teórica a lo largo del tiempo en términos de amplitud, traslación, etc...? .

Considere ahora el esquema numérico.

- ¿Que esquema(s) se está(n) utilizando?
- ¿Que condiciones iniciales y de borde tiene el script?¿Son razonables las condiciones de borde ?
- ¿Cual es el número CFL? ¿Se cumple la condición CFL?. Estudie el problema de la estabilidad (y por lo tanto de la convergencia) para casos límites de ν.
- Ahora fije un valor para N y considere $\nu = 0.7$. Modifique el código de manera tal que el número de elementos de la partición temporal sea función de N y tal que siempre se cumpla la codición CFL. Obtenga tiempos de cómputo en función de distintos valores para N. ¿Qué observa ? ¿Como cambia la solución numérica con mayor o menor N?
- ¿Como cambia la solución numérica a lo largo del tiempo? ¿Es consistente con la solución teórica ?.¿Qué ocurre en la frontera del dominio espacial ?. Explique las diferencias (si las hay) y por que podrían ocurrir.
- En el desarrollo anterior se ha considerado una condición inicial de clase C^2. ¿Qué ocurre si se consideran condiciones iniciales no diferenciables, por ejemplo tipo delta de Dirac?

2.2 Dos dimensiones

- ¿Qué condiciones iniciales y de borde tiene el script?
- ¿Cómo cambia la solución con mayor o menor N?
- De una estimación del numero de operaciones del código en función de N. ¿En que orden de magnitud aumenta el número de operaciones en función de un aumento en N.
- ¿Cómo cambia la solución de la ecuación a lo largo del tiempo? ¿Cómo es la influencia del viento en la trayectoria del contaminante?

- ¿Considere un tiempo en que el contaminante esté lejos del borde. ¿Hay conservación masa?. Justifique numéricamente y note que el campo de vientos es no-divergente.

- (bonus) Incluya en la ecuación los términos de divergencia (para los esquemas backward y forward) y haga algunas pruebas numéricas. Para ésto proponga un campo a divergencia no nula y entregue sus esquemas numéricos en un script de manera clara y detallada. Compare con el caso no divergente, indicando la relevancia (si es que existe) de la componente divergente del viento.