



Ciências
ULisboa

Modelação Numérica 2023

Aula 1

Pedro Miranda (8.3.38), Carlos Pires

pmmiranda@fc.ul.pt

Introdução ao curso, temas e objetivos, métodos de Avaliação. Conceitos básicos de modelação. Natureza da modelação numérica.

Modelação Numérica 2023

Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri
13-Feb	14-Feb	15-Feb	16-Feb	17-Feb	20-Feb	21-Feb	22-Feb	23-Feb	24-Feb	27-Feb	28-Feb	01-Mar	02-Mar	03-Mar
		T1									T2	T3	P1-1	P1-1
06-Mar	07-Mar	08-Mar	09-Mar	10-Mar	13-Mar	14-Mar	15-Mar	16-Mar	17-Mar	20-Mar	21-Mar	22-Mar	23-Mar	24-Mar
	T4	T5	P1-2	P1-2		T6	T7	P1-3	P1-3		T8	T9	P1-4	P1-4
27-Mar	28-Mar	29-Mar	30-Mar	31-Mar	03-Apr	04-Apr	05-Apr	06-Apr	07-Apr	10-Apr	11-Apr	12-Apr	13-Apr	14-Apr
	T10	T11	P1-5	P1-5		T12	T13			E1			Proj1	
17-Apr	18-Apr	19-Apr	20-Apr	21-Apr	24-Apr	25-Apr	26-Apr	27-Apr	28-Apr	01-May	02-May	03-May	04-May	05-May
	T14	T15	P2-1	P2-1			T16	P2-2	P2-2		T17	T18	P2-3	P2-3
08-May	09-May	10-May	11-May	12-May	15-May	16-May	17-May	18-May	19-May	22-May	23-May	24-May	25-May	26-May
	T19	T20	P2-4	P2-4		T21	T22	P2-5	P2-5	E2			Proj2	

Projetos devem ser entregues (E1,E2) na semana da defesa.

Início dos Projetos: P1-1 e P2-1

Apresentação: Proj1, Proj2

Ficheiros a entregar: MN2023_Px_PLxx_Gx.py, *.pptx (num zip)

Avaliação

Práticas obrigatórias (faltas<3), Grupos de 2 membros. Cf. transporte de nota do ano anterior.

2 **Projetos obrigatórios**: Resolução em python; apresentação powerpoint **OBRIGATÓRIA**; resposta a perguntas (60%).

Exame final: 40% (individual, **nota minima 8**)

Oral final individual para notas >16

As aulas práticas serão mais produtivas se as prepararem. É essencial não faltarem às aulas. Notem que a cadeira depende de **avaliação contínua**.

Projetos

Proj 1: Análise espectral de séries reais

Proj 2: Otimização de parâmetros em modelos

Extra: Solução numérica de equações diferenciais (na Teórica e Exame)

Cada projeto terá um **protocolo**.

Em ambos serão consolidados conhecimentos de processamento genérico (input/output, gráficos, estatísticas, etc.)

Os Projetos devem ser **originais**. Será valorizada a **inovação**, a qualidade e legibilidade do código, a qualidade dos outputs, a qualidade das apresentações.

Cada projeto será apresentado em 12 minutos (6 por cada membro do grupo) e será seguido de perguntas.

Bibliografia recomendada

Langtangen, H. P., & Linge, S. (2017). Finite difference computing with PDEs: a modern software approach (Vol. 16). Springer. <https://www.springer.com/gp/book/9783319554556>

Também disponível online:

<https://hplgit.github.io/fdm-book/doc/pub/book/pdf/fdm-book-4screen.pdf>

<https://hplgit.github.io/fdm-book/doc/pub/book/html/fdm-book.html>

Powerpoints das aulas: **fenix**

O que é um modelo?

Representação (**simplificada**) da realidade

(O conhecimento baseia-se sempre em “modelos”)

- Modelos conceptuais (qualitativos, esquemáticos, identificando causas e efeitos e/ou evolução típica)
- Modelos teóricos (e.g. traduzidos em equações analíticas entre variáveis): **Por vezes não têm solução...**
- Modelos analógicos (túnel de vento, tanque hidráulico, sandbox)
- **Modelos numéricos** (traduzidos em relações matemáticas **discretas** entre variáveis)

Para que serve um modelo?

Experiências “controladas” (o que acontece se...)

Trabalhar na “**escala laboratorial**” (no espaço e no tempo): o modelo só é útil se for realizável...

Exemplos: modelos de doenças humanas em cobaias; tunel de vento (modelos analógicos)...

Caracterizar **processos** individuais (causa e efeito)

Prever o futuro, estudar **cenários**

Como se constrói um modelo?

Seleção de **variáveis**

Seleção de **equações** constitutivas: leis básicas relacionando as variáveis

Dados experimentais: observações, condições fronteira

Algoritmo de solução

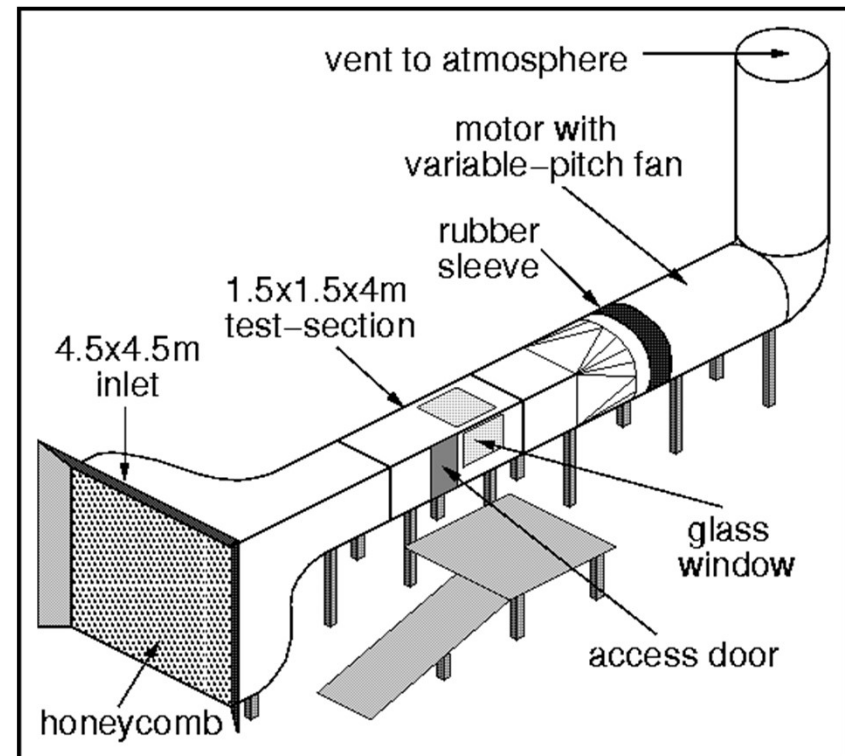
Validação da solução por comparação com **dados experimentais** independentes

Análise da **sensibilidade** da solução a diferentes parâmetros

Aplicação

O paradigma do modelo analógico: o túnel de vento

Em que condições pode o escoamento na zona de trabalho (test-section) representar um escoamento real?



O paradigma do modelo analógico: o túnel de vento

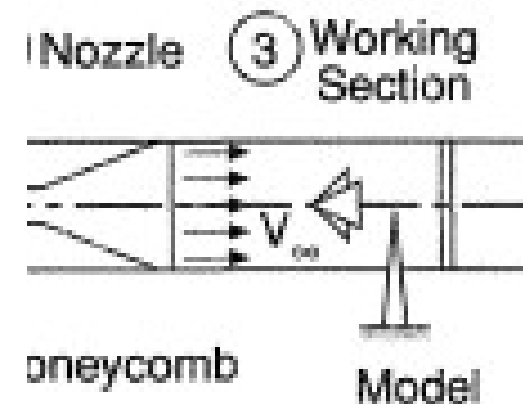
Em que condições pode o escoamento na zona de trabalho representar um escoamento real?

Na centro da zona de trabalho a velocidade do vento pode ser estabilizada num valor $U \in [0, U_{Max}]$

As outras variáveis (T, θ, p, ρ, q) **não são controladas...**

O vento (e também as outras variáveis) vai ser perturbado pelo modelo: perceber essa perturbação é o objetivo.

Como se relaciona U na vizinhança do modelo (em escala reduzida), com o **vento** na vizinhança do objeto que o modelo representa?



O túnel de vento só pode estudar processos puramente mecânicos, controlados pela intensidade do escoamento

Semelhança dinâmica

É possível escrever as equações na forma **adimensional**, tornando-as independentes da escala do modelo. Nessas equações as diferentes escalas (distâncias, velocidades, densidades, etc) são processadas de forma consistente.

O **teorema de Buckingham** estabelece que se as diferentes combinações adimensionais de escalas (**os números Π**) forem idênticas existe **semelhança dinâmica**.

Análise de semelhança (Navier-Stokes)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - w \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + f v + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

$$u = U\hat{u}, t = \tau\hat{t}, x = L\hat{x}, \hat{u} = O(1), \text{ etc ...}$$

$$\frac{U^2}{L}, \frac{WU}{H}$$

Escala força de inércia
(aceleração)

$$\frac{U}{\tau} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{t}} = - \frac{U^2}{L} \hat{u} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} - \frac{U^2}{L} \hat{v} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{y}} - \frac{WU}{H} \hat{w} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{z}} - \frac{P}{\rho} \frac{1}{\hat{\rho}} \frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{x}} + fU\hat{v} + \frac{\nu U}{L^2} \left(\frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \hat{y}^2} + \frac{L^2}{H^2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \hat{z}^2} \right)$$

Números Π (exemplo)

Equação adimensional

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{t}} = -\hat{u} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} - \hat{v} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{y}} - \hat{w} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{z}} - \frac{PL}{\rho U^2} \frac{1}{\hat{\rho}} \frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{x}} + \frac{1}{Ro} \hat{v} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \hat{y}^2} + \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial \hat{z}^2} \right)$$

$$\tau = \frac{L}{U} = \frac{H}{W} \text{ (tempo advectivo)}$$

Números Π (exemplo)

$$\mathbf{Re} = (U^2/L)/(\nu U/L^2) = \frac{\text{Força de inércia}}{\text{Força viscosa}} \text{ (Número de Reynolds)}$$

$$\mathbf{Ro} = (U^2/L)/fU = \frac{\text{Força de inércia}}{\text{Força de Coriolis}} \text{ (Número de Rossby)}$$

$$\frac{PL}{\rho U^2} = \frac{\text{Força Grad } P}{\text{Força de Inércia}}$$

Nota: só analisámos a equação de Navier-Stokes (momento). Há outros números independentes.

O Número de números Π , define o **Número de graus de Liberdade do modelo** (a dimensão do seu “espaço de fases”)

Em geral

Só é possível obter semelhança parcial, satisfazendo um subconjunto dos números Π .

Por outro lado, a análise que foi feita admitiu que cada variável era representada por uma única escala ($u = U\hat{u}$) o que é uma grande simplificação.

Modelação Numérica

A modelação analógica analisa sistemas “contínuos”, sujeitos a leis macroscópicas (termodinâmica, mecânica dos meios contínuos, ...). A modelação numérica processa **números computáveis**, i.e. números **discretos** (inteiros ou pseudo-reais, e.g. floating point).

Tal como na análise de semelhança por números Π , a **discretização** implica uma perda de graus de liberdade (uma simplificação...).

Os números Π continuam a ser relevantes na modelação numérica (nomeadamente na solução numérica de equações diferenciais).

Mas a discretização implica um tipo de simplificação diferente.

Funções (contínuas) de uma variável independente

$$V = V(t)$$

t é o tempo, mas pode ser outra variável ($x \dots$)

Discretização: Amostra regular com N pontos

$$V_n = V(t_0 + n\Delta t), n = 0, \dots, N - 1$$

t_0 – fase inicial (amostra 0)

Δt – intervalo de amostragem (step)

V_n – número float (truncado a 64 bit)