Ciências
ULisboa

Modelação Numérica 2024
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 2024

S	T	Q	Q	S
2024-02-26	2024-02-27	2024-02-28	2024-02-29	2024-03-01
	T1	T2		
2024-03-11	2024-03-12	2024-03-13	2024-03-14	2024-03-15
	T5	T6	PL2	PL2
2024-03-25	2024-03-26	2024-03-27	2024-03-28	2024-03-29
	T9			
2024-04-08	2024-04-09	2024-04-10	2024-04-11	2024-04-12
E1	T11	T12	PL5	PL5
2024-04-22	2024-04-23	2024-04-24	2024-04-25	2024-04-26
	T15	T16		
2024-05-06	2024-05-07	2024-05-08	2024-05-09	2024-05-10
	T18	T19	PL8	PL8
2024-05-20	2024-05-21	2024-05-22	2024-05-23	2024-05-24
E2	T22	T23	PL10	PL10

S	T	Q	Q	S
2024-03-04	2024-03-05	2024-03-06	2024-03-07	2024-03-08
	T3	T4	PL1	PL1
2024-03-18	2024-03-19	2024-03-20	2024-03-21	2024-03-22
	T7	T8	PL3	PL3
2024-04-01	2024-04-02	2024-04-03	2024-04-04	2024-04-05
		T10	PL4	PL4
2024-04-15	2024-04-16	2024-04-17	2024-04-18	2024-04-19
	T13	T14	PL6	PL6
2024-04-29	2024-04-30	2024-05-01	2024-05-02	2024-05-03
	T17		PL7	PL7
2024-05-13	2024-05-14	2024-05-15	2024-05-16	2024-05-17
	T20	T21	PL9	PL9
2024-05-27	2024-05-28	2024-05-29	2024-05-30	2024-05-31
?	?			

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

Apresentação: 11,12 Abril; 23,24 Maio

Ficheiros a entregar: MN2024_Px_PLxx_Gx.zip (*.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 espetral 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 (FENIX na semana da PL1, PL6).

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; túnel de vento (modelos analógicos)...

Caracterizar processos individuais (causa e efeito)

Prever o futuro, estudar cenários

Como se constrói um modelo numérico?

Seleção de variáveis

Seleção de equações constitutivas: leis básicas relacionando as variáveis

Dados experimentais: observações, condições fronteira

Algoritmo de solução

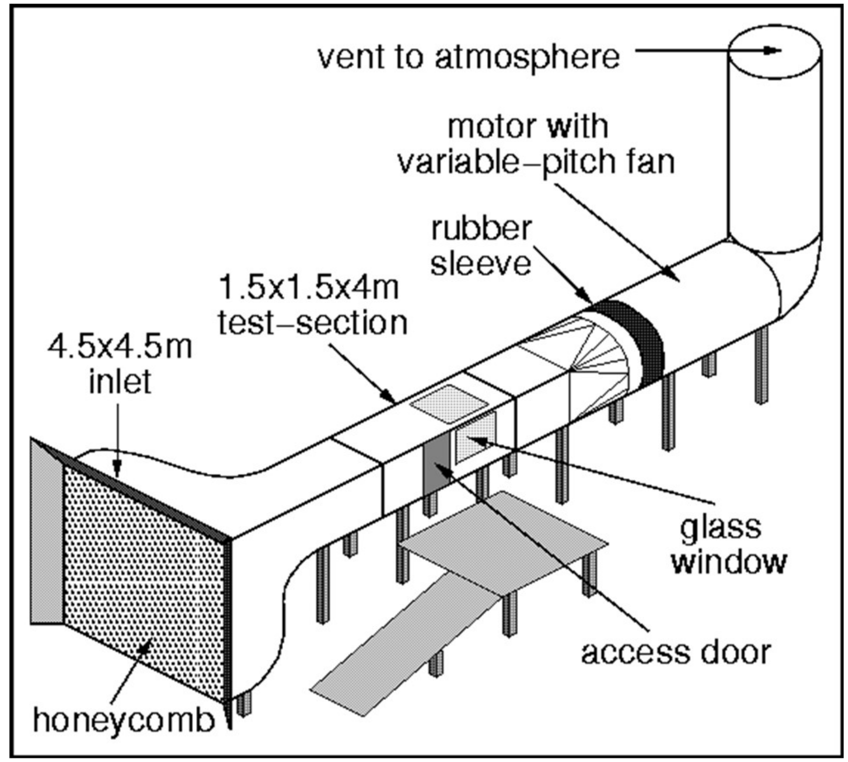
Validação da solução por comparação com dados experimentais independentes

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?



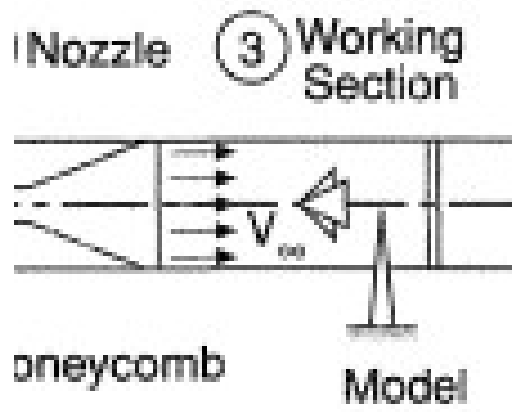
O paradigma do modelo analógico: o túnel de vento

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)

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

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

Escala força de inércia (aceleração)

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

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

Números Π (exemplo)

Equação adimensional

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

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

Números Π (exemplo)

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

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

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

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 ...)

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)