Ciências
ULisboa

Modelação numérica 2021, Exame 1 (12 Maio)

1. A transferência de calor num fluido unidimensional é regida pela equação de advecção/difusão. Se o fluido se mover a velocidade constante $(u)$, esta equação escreve-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -u\frac{\partial T}{\partial x} + K\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

(a) Discretize a equação num método explícito utilizando aproximações de segunda ordem.

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^{n-1}}{2\Delta t} = -u\frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{K\left(T_{i-1}^{n-1} + T_{i+1}^{n-1} - 2T_i^{n-1}\right)}{\Delta x^2}$$

(b) Mostre como escreveria uma solução usando um método implícito: represente a solução na forma matricial.

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = -u\frac{T_{i+1}^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{K\left(T_{i-1}^{n+1} + T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1}\right)}{\Delta x^2}$$

$$\begin{bmatrix} & & \cdots & \\ -\frac{u\Delta t}{2\Delta x} - \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} & 1 + 2\frac{K\Delta t}{\Delta x^2} & \frac{u\Delta t}{2\Delta x} - \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ & & \cdots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{n+1} \\ \vdots \\ T_{Nx-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_b^n \\ \vdots \\ T_{bL}^n \end{bmatrix}$$

(c) Que vantagens e inconvenientes apresentam os métodos implícitos?
O método implícito é mais complicado de implementar e mais dispendioso mas pode ser incondicionalmente estável.

(d) Mostre (código python) como imporia a temperatura na fronteira esquerda $(T(x = 0, t))$ e o fluxo de calor na fronteira direita $(x = L)$, admitindo que o fluxo de calor é dado por:

$$F(x = L, t) = -\frac{K}{\rho c_p}\frac{\partial T}{\partial x}$$

Na forma discreta:

$$F^t = -\frac{K}{\rho c_p}\frac{\left(T_i^t - T_{i-1}^t\right)}{\Delta x}$$

```
Tx0[:]=… #condição fronteira esquerda (vetor fornecido)
F[:]=… #Fluxo de calor na fronteira direita (fornecido)
#it passo de tempo

T[0]=Tx0[it]
T[nx-1]=T[nx-2]-rho*cp*dx/K*F[it]
```

2. Um projeto municipal visa desenvolver um sistema adaptável, em que é preciso prever a forma como o produto iónico da água, $K_w$, varia com a temperatura ambiente, $T$. Com base em estudos anteriores, sabe-se que a variação de Kw com T obedece à função empírica:

$$-\log K_w = a\,T + b\log T + cT^2 + d$$

onde $a, b, c, d$ são constantes que variam de sistema para sistema.

(a) Trata-se de um problema linear ou não linear? Justifique.

Dado que as incógnitas são (a,b,c,d) a equação é linear (os coeficientes são função não lineares de T).

(b) Que observações, e em que número, devem ser realizadas para determinar os parâmetros $a, b, c, d$ adequados? Justifique.

São precisas, pelo menos 4 observações de $K_w$ e de $T$. Se existirem mais observações o problema será sobre-determinado e a solução será menos sensível ao erro.

(c) Indique o forma do problema linear com 10 observações, descrevendo, na forma matricial, o sistema de equações a resolver, e o erro da solução. Descreva o método de otimização e os procedimentos a seguir para a sua solução.

$$\begin{bmatrix} & \cdots & & \\ 1 & \log(T_k) & T_k^2 & 1 \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ & \cdots & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\log(K_{w_0}) \\ \\ \cdots \\ \\ -\log(K_{w_9}) \end{bmatrix}$$

Trata-se de um sistema sobre-determinado que pode ser resolvido com a pseudo invera, ou por um método não linear de busca de um mínimo da função de custo.

(d) Se tivesse escolhido um algoritmo não linear, qual seria a sua função de custo? (código python)

```
def cost(Kw,T,a,b,c,d)

    custo=np.mean((-np.log(Kw)-(a*T+b*np.log(T)+c*T**2+d))**2)

    return custo
```