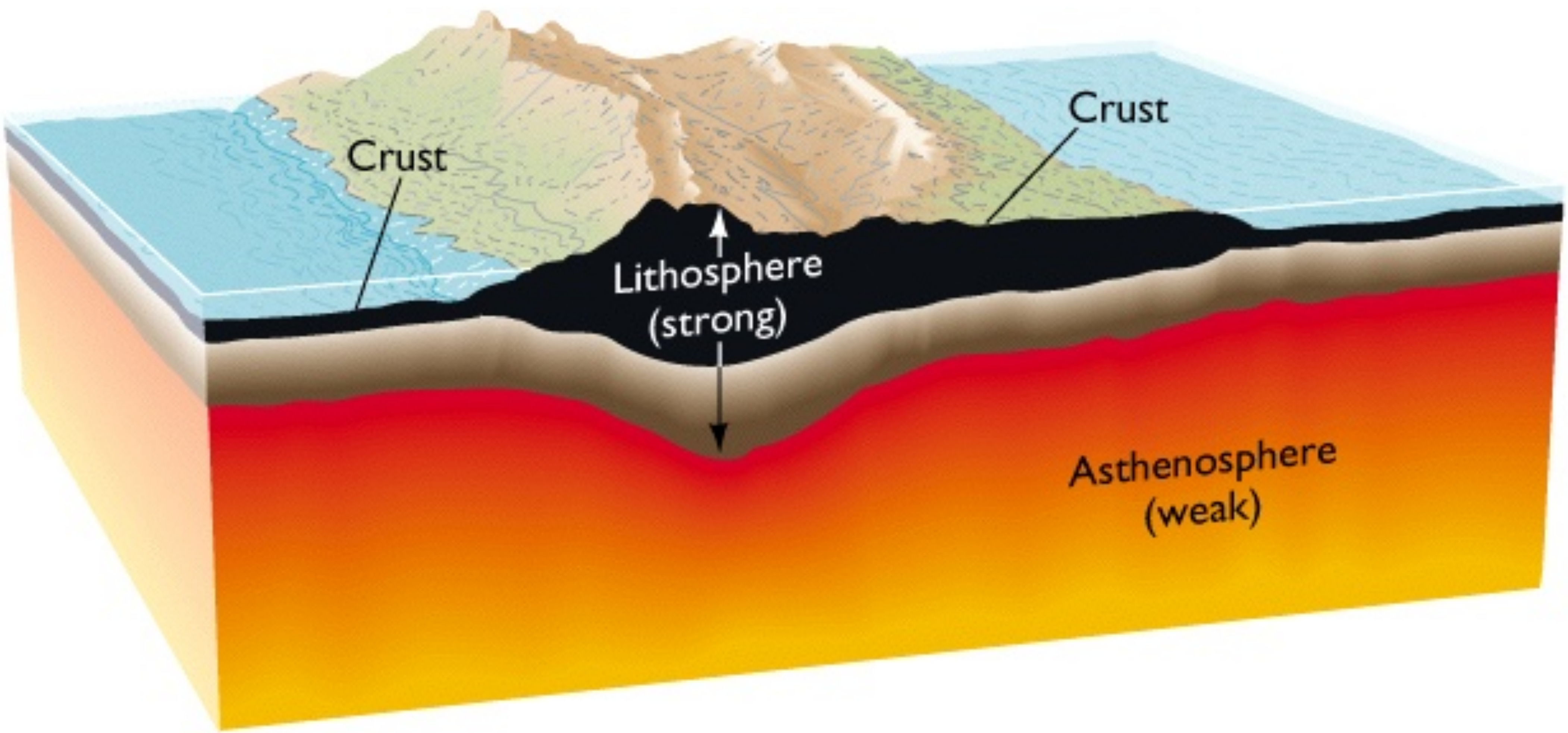
Modelos Quantitativos de Bacias Sedimentares

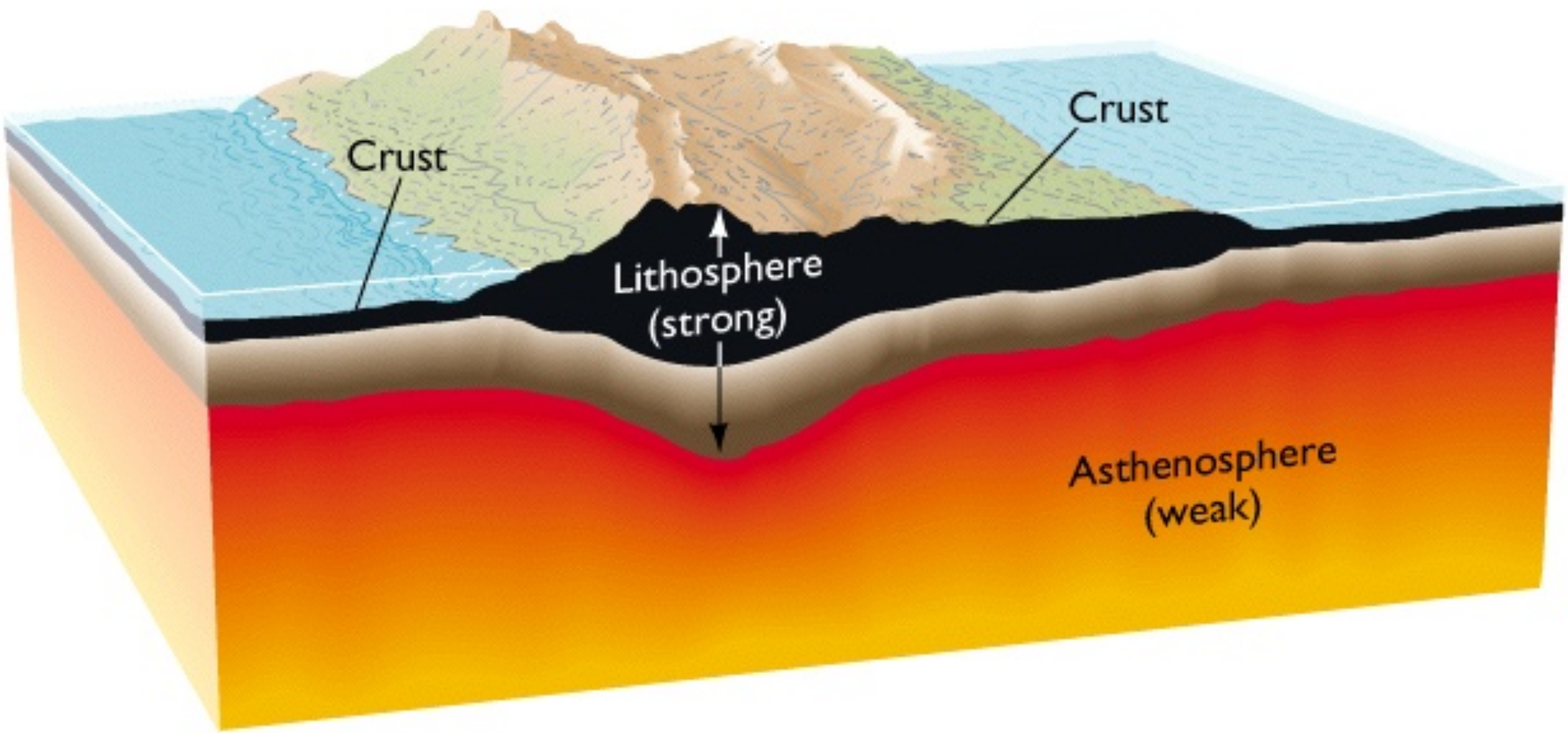
AGG0314

Estado térmico, fluxo térmico e gradiente geotérmico
(Parte II: solução numérica)

Transporte de calor na litosfera

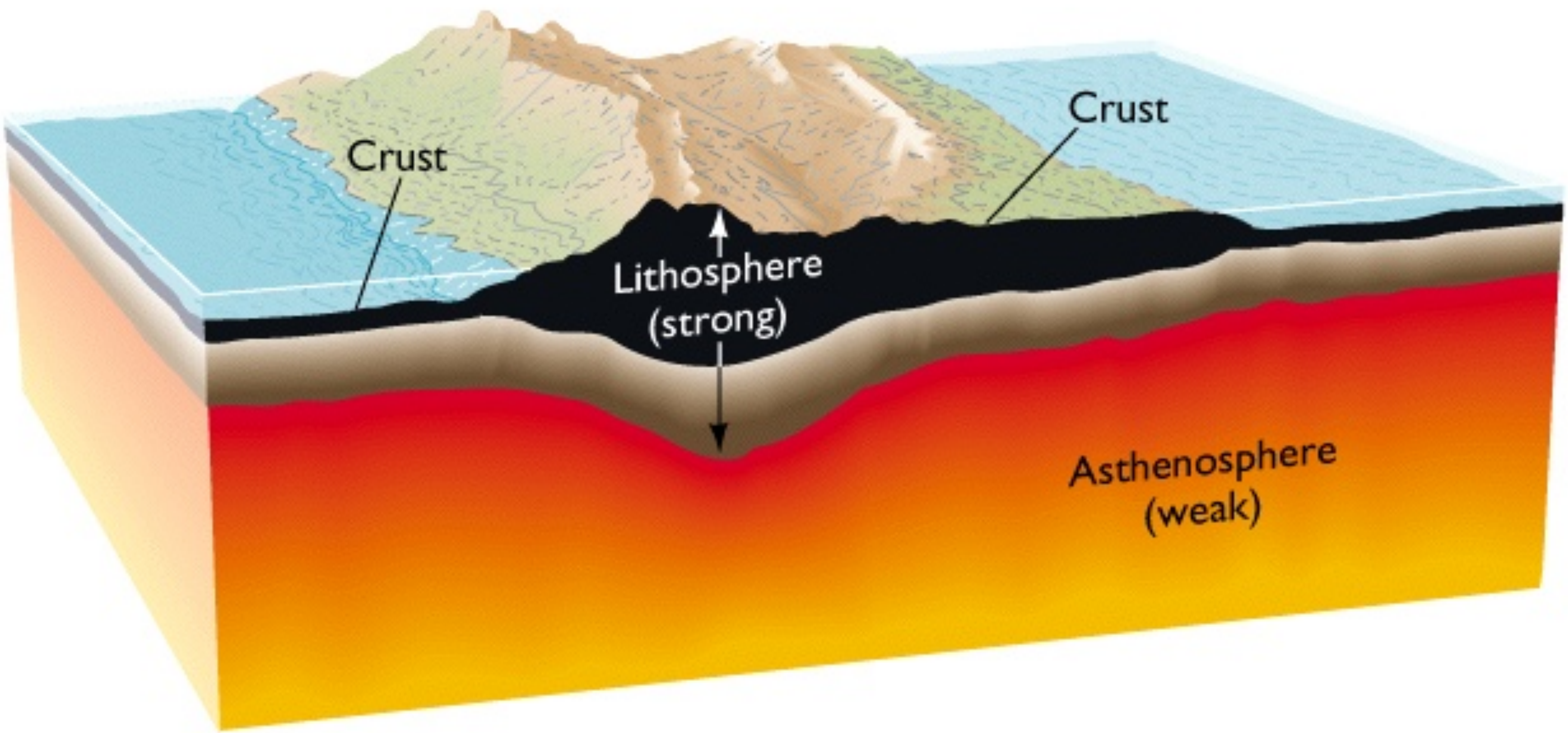


Transporte de calor na litosfera



Predomina condução

Transporte de calor na litosfera



Predomina
condução

condução
+
advecção

Equação de condução de calor com produção de calor interno (equação de difusão com termo fonte)

$$c\rho\frac{dT}{dt} = k\frac{d^2T}{dx^2} + \rho H$$

Variação temporal da temperatura

Termo difusivo

Produção local de calor

Equação de condução de calor com produção de calor interno (equação de difusão com termo fonte)

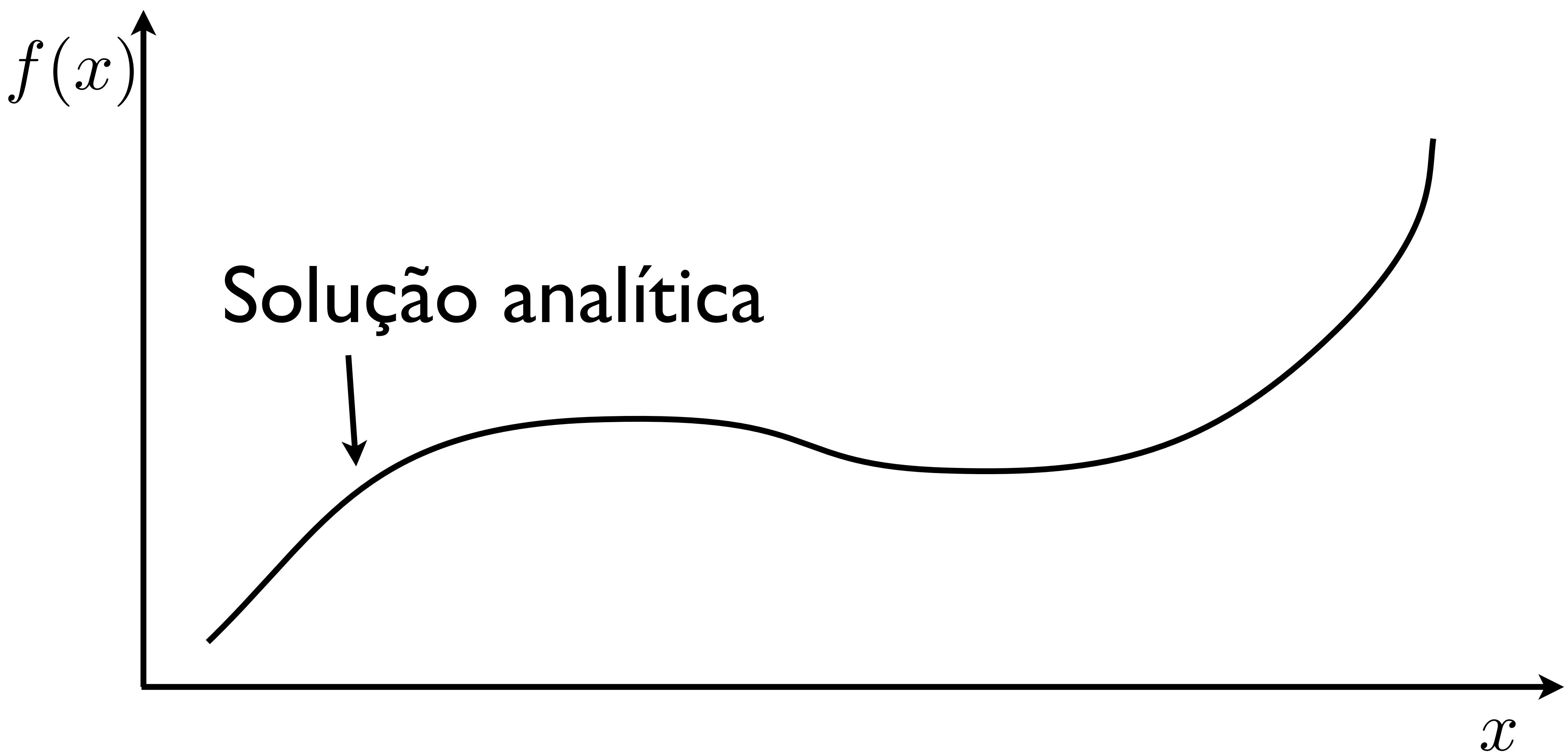
$$c\rho \frac{dT}{dt} = k \frac{d^2T}{dx^2} + \rho H$$

$$\frac{dT}{dt} = \kappa \frac{d^2T}{dx^2} + \frac{H}{c}$$

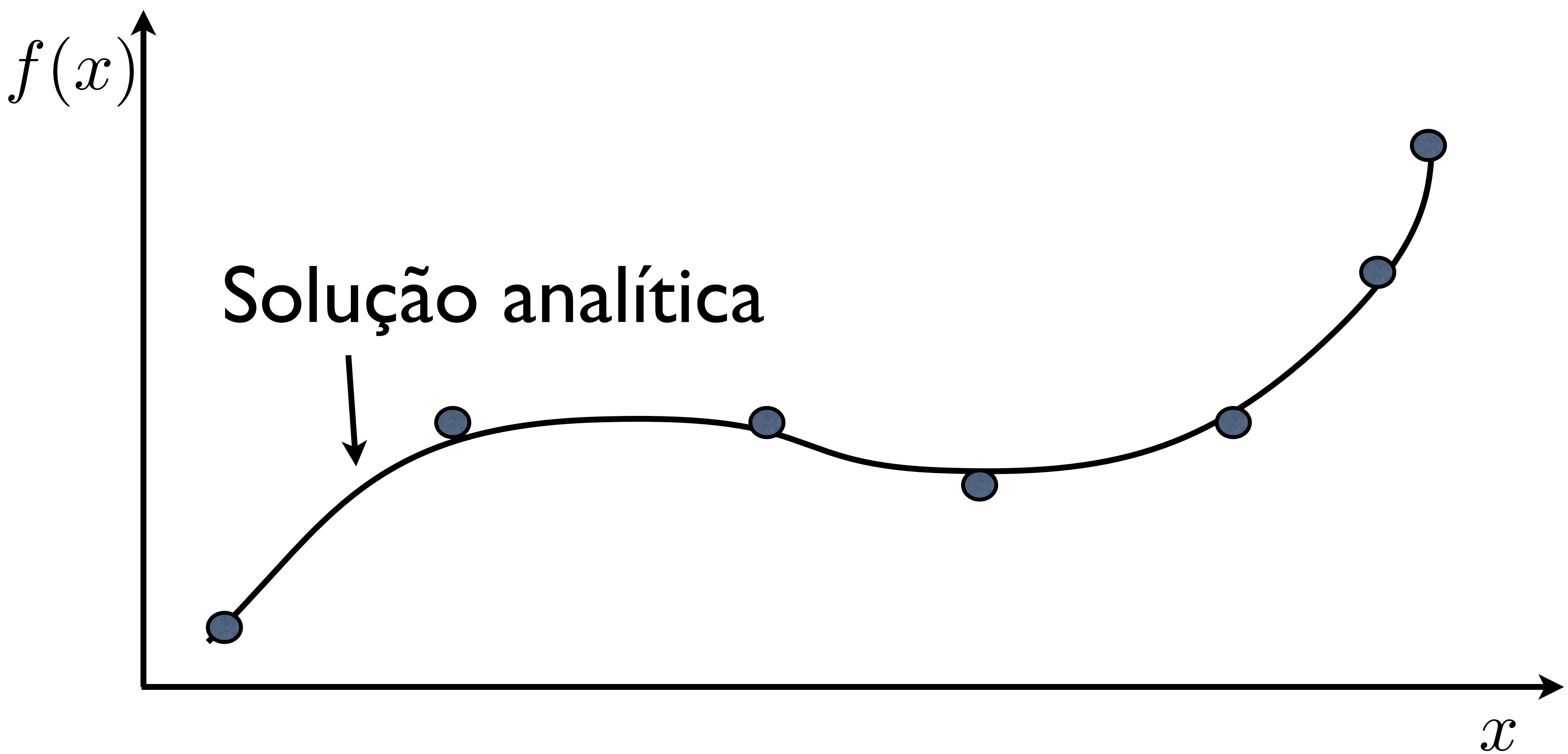
$$\kappa = \frac{k}{c\rho}$$

Aproximação numérica

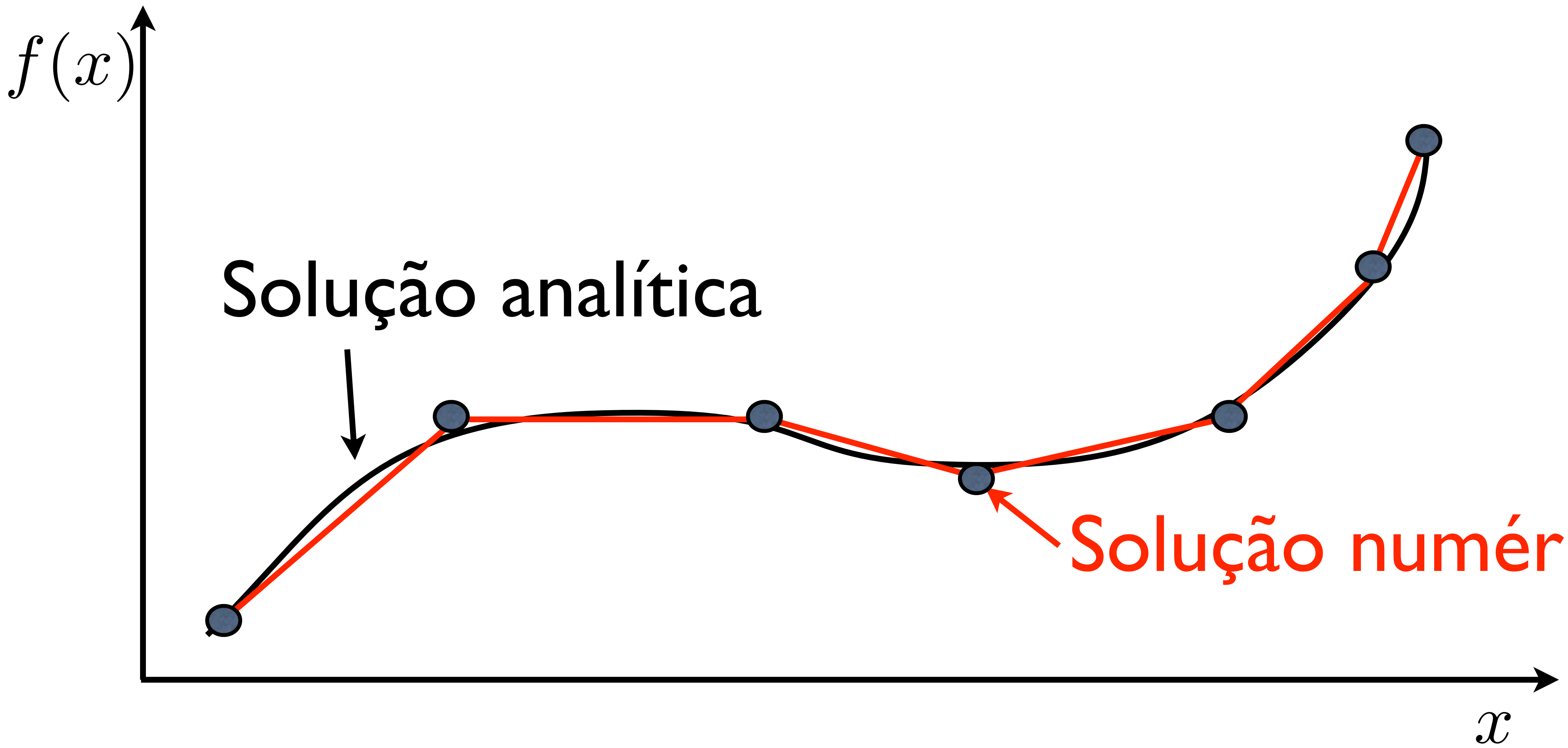
Aproximação numérica



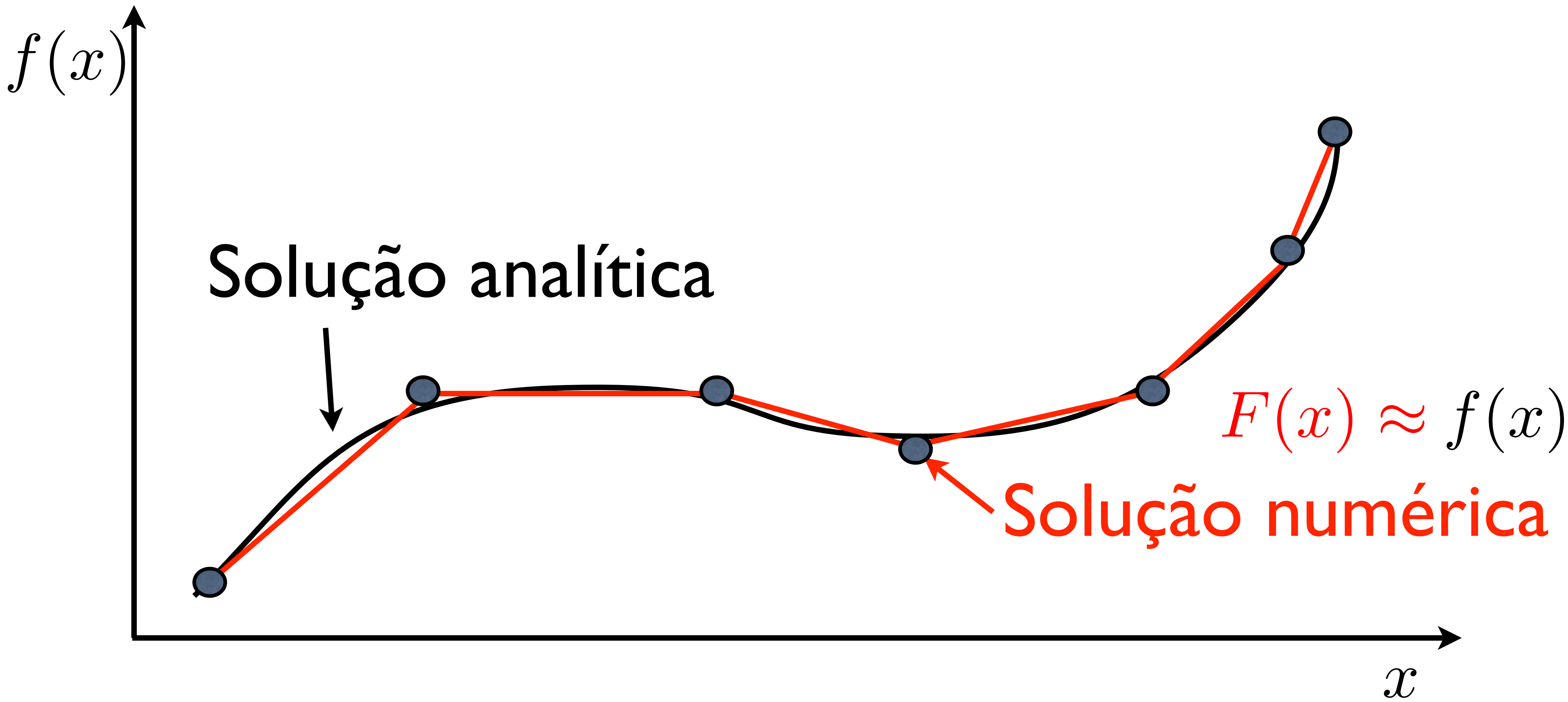
Aproximação numérica



Aproximação numérica



Aproximação numérica



Sol. analítica x Sol. numérica

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Solução aproximada

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua

- Solução aproximada

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua

- Solução aproximada
- Discreta

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido

- Solução aproximada
- Discreta

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido

- Solução aproximada
- Discreta
- Caixa preta

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido
- Todos os cenários

- Solução aproximada
- Discreta
- Caixa preta

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido
- Todos os cenários

- Solução aproximada
- Discreta
- Caixa preta
- 1 simulação por cenário

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido
- Todos os cenários
- Não exige validação

- Solução aproximada
- Discreta
- Caixa preta
- 1 simulação por cenário

Sol. analítica x Sol. numérica

- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido
- Todos os cenários
- Não exige validação

- Solução aproximada
- Discreta
- Caixa preta
- 1 simulação por cenário
- Exige validação

Sol. analítica x Sol. numérica

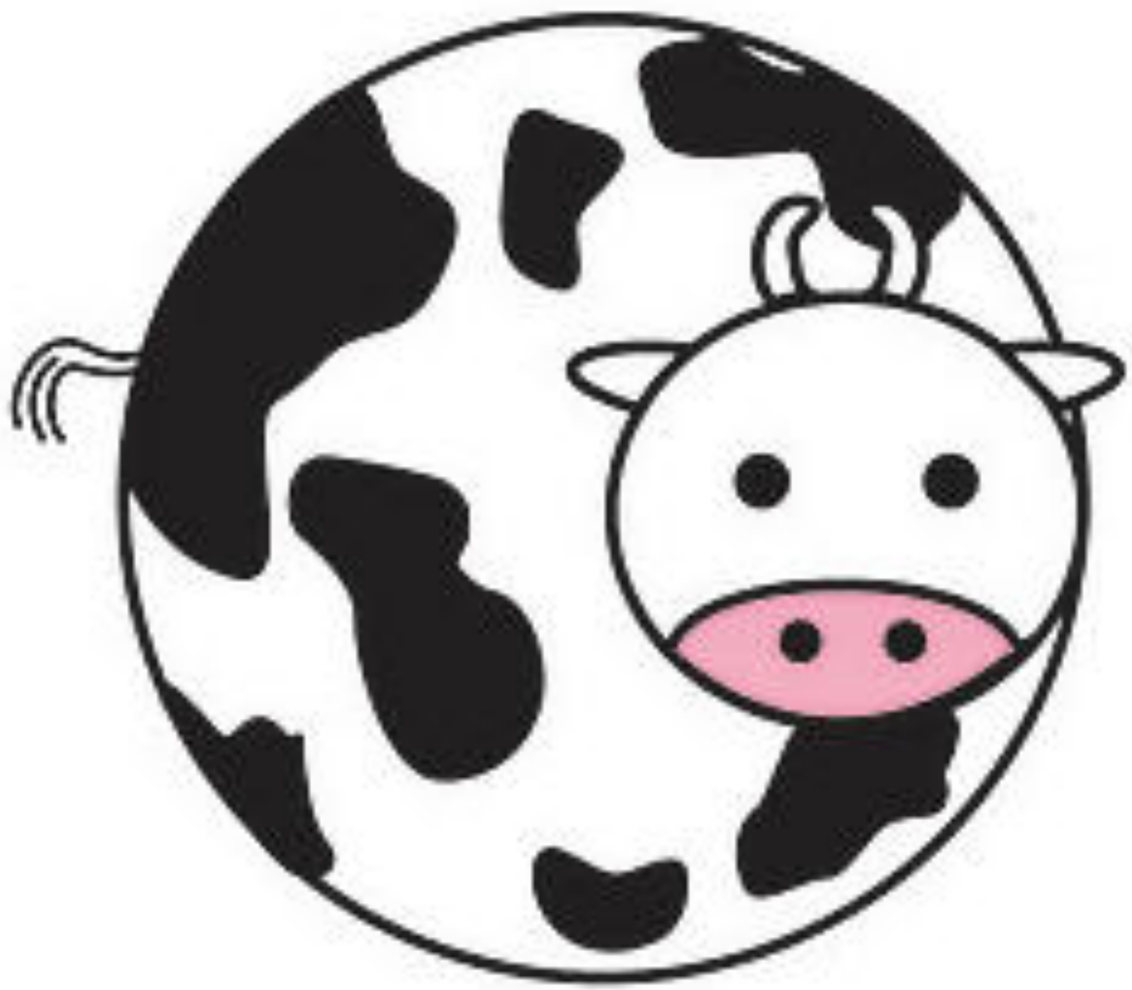
- Solução exata
- Contínua
- Nada é escondido
- Todos os cenários
- Não exige validação

- Solução aproximada
- Discreta
- Caixa preta
- 1 simulação por cenário
- Exige validação

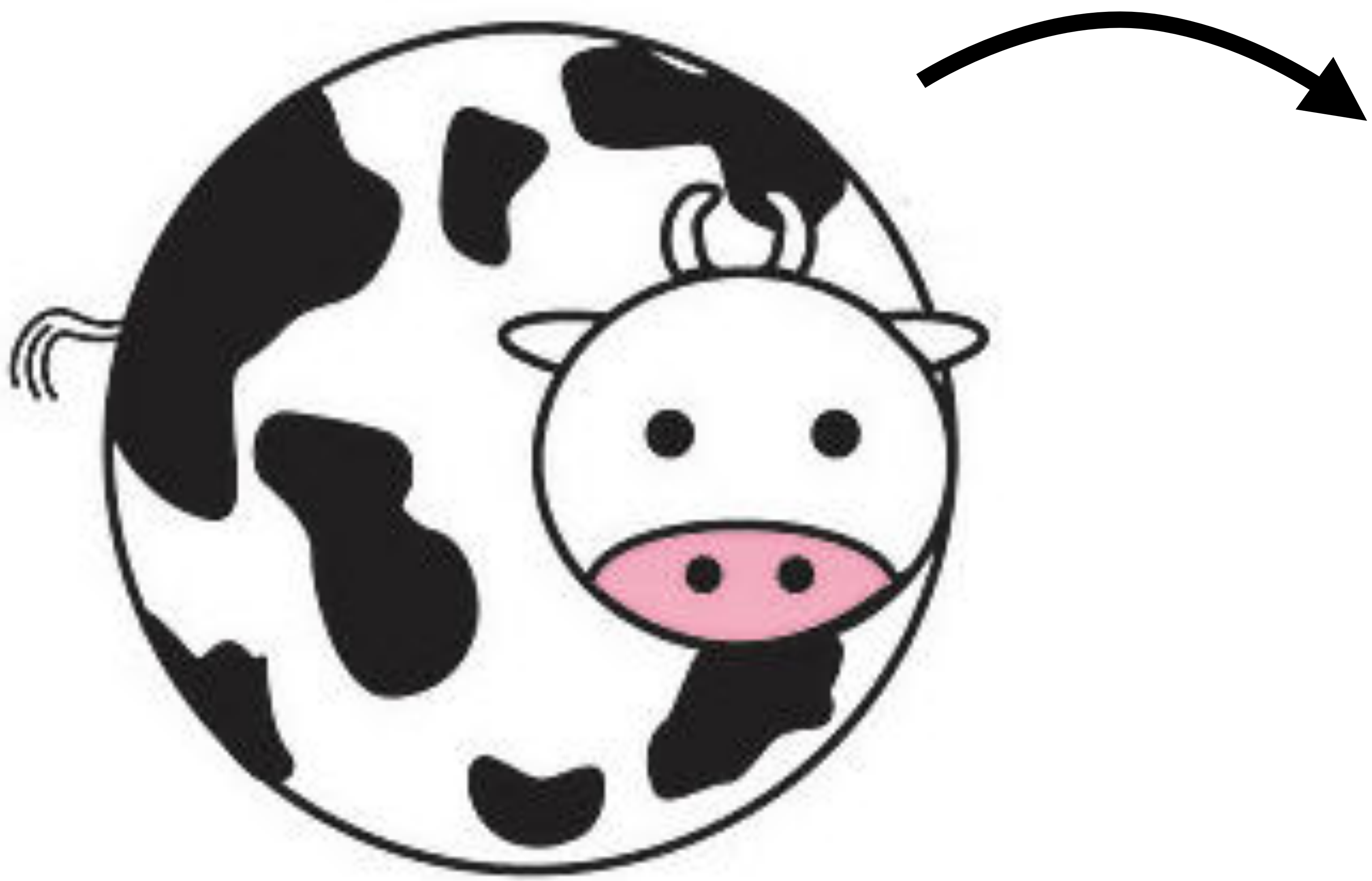
Ora bolas! Para que serve a modelagem numérica?

1. Geometria complicada

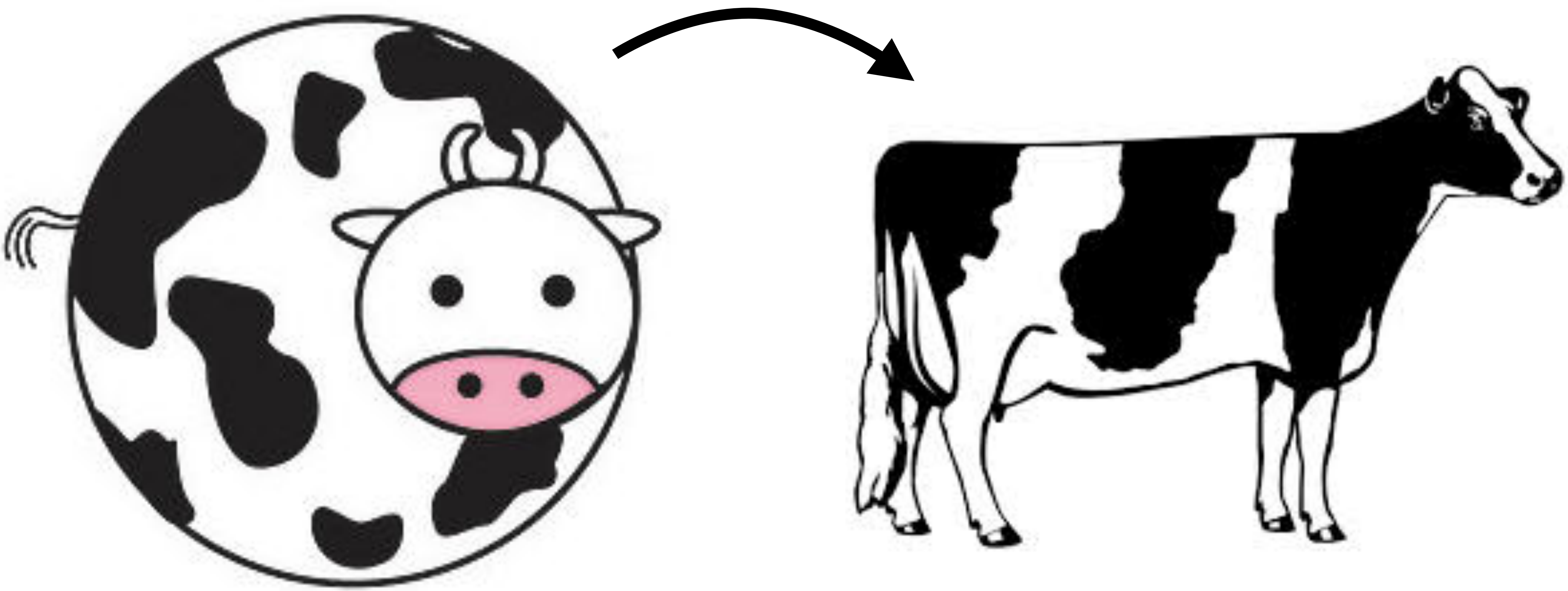
1. Geometria complicada



1. Geometria complicada

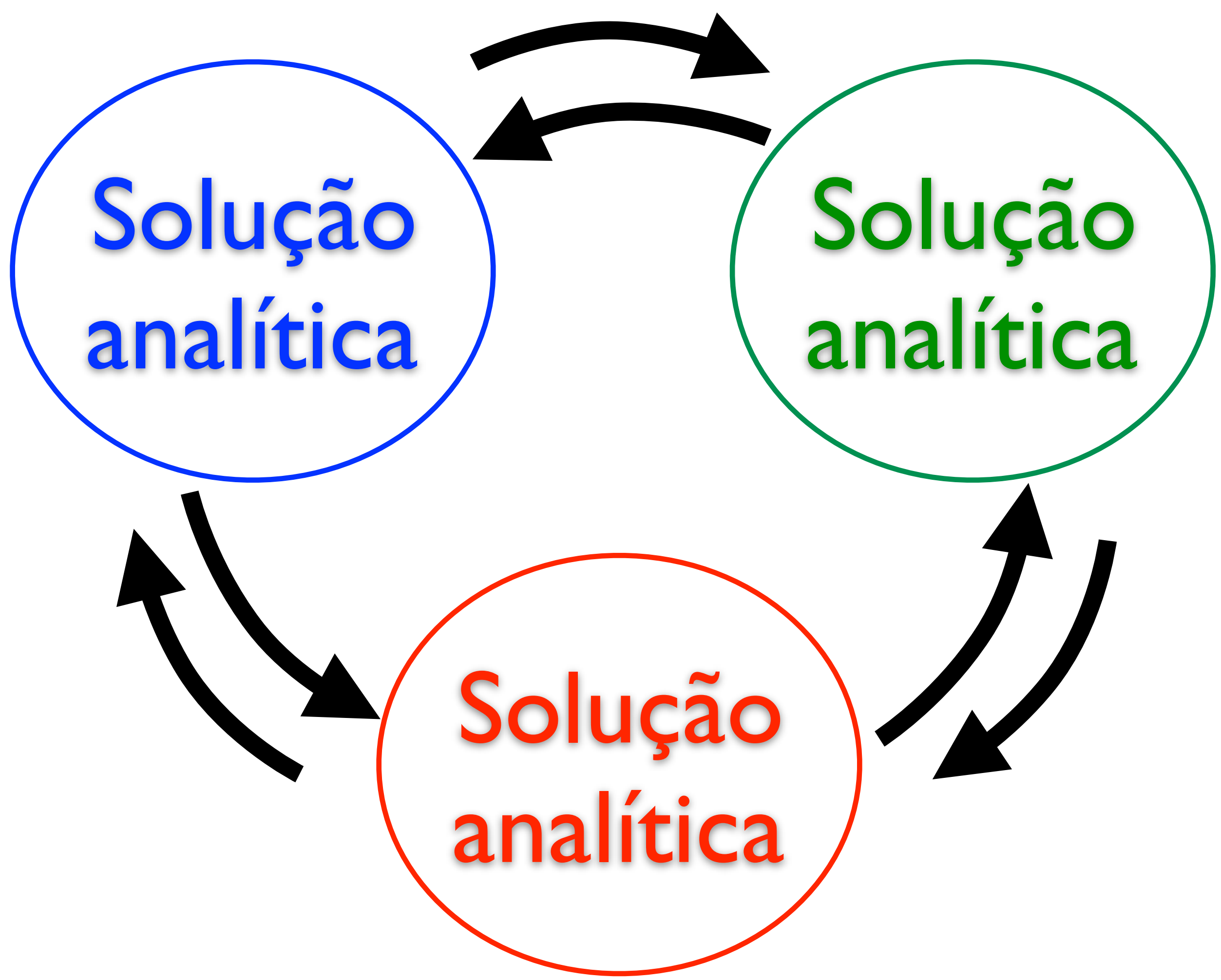


1. Geometria complicada

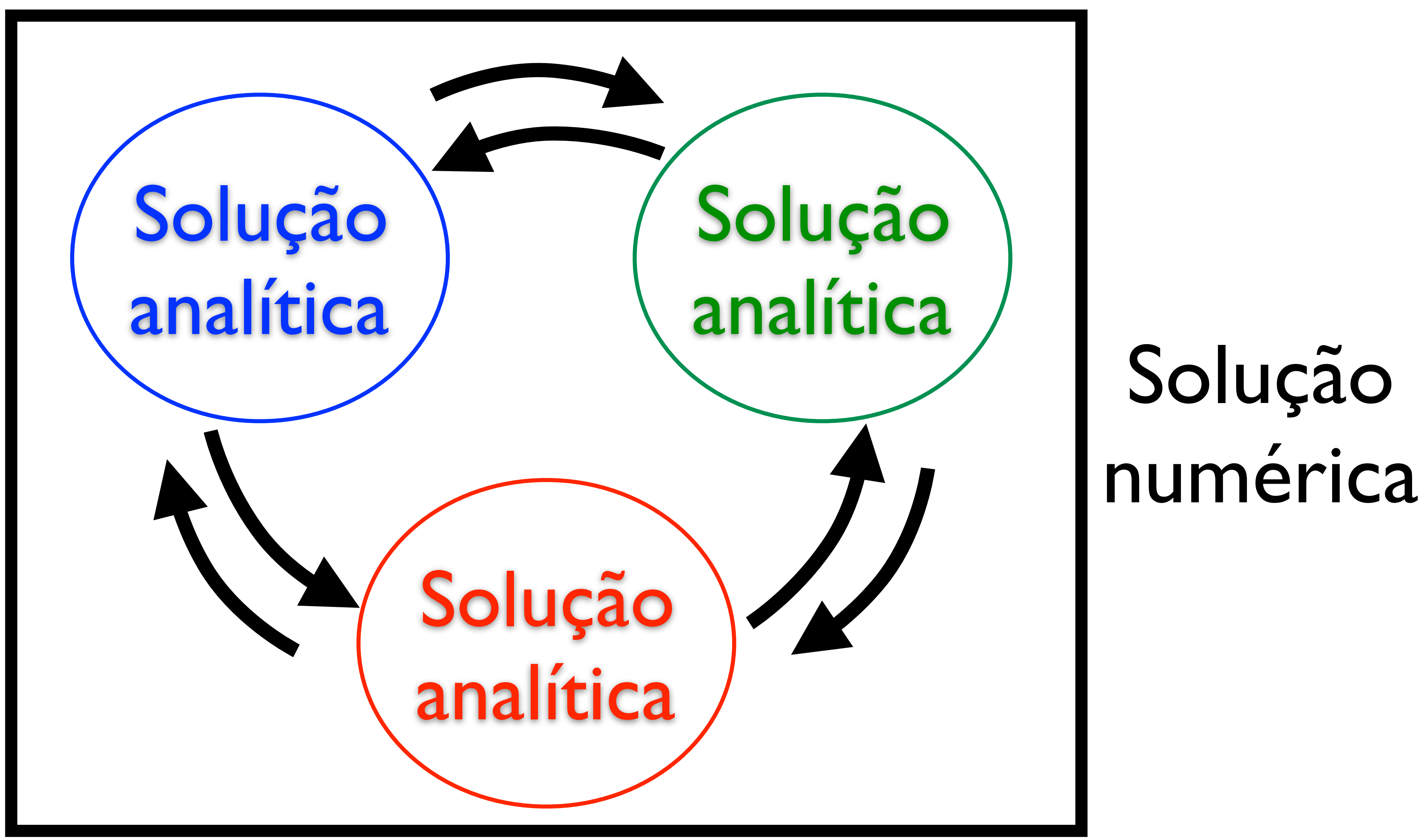


2. Acoplamento entre diferentes processos

2. Acoplamento entre diferentes processos



2. Acoplamento entre diferentes processos



Equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

tempo

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo:
temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

tempo

difusividade

Equação de difusão

u é a grandeza que está difundindo: temperatura, concentração de uma substância em um meio poroso, concentração de perfume no ar...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

tempo

difusividade

espaço (posição)

Aproximação em diferenças finitas

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

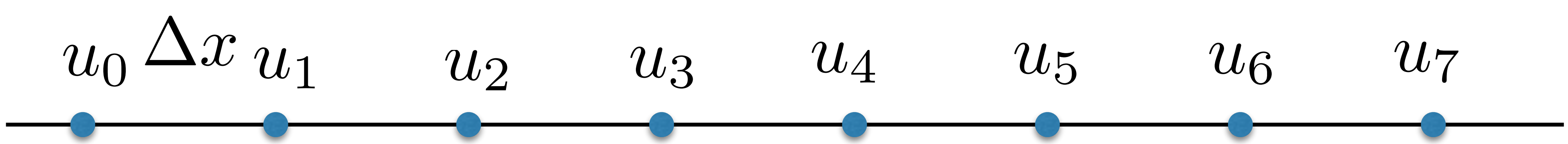
$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

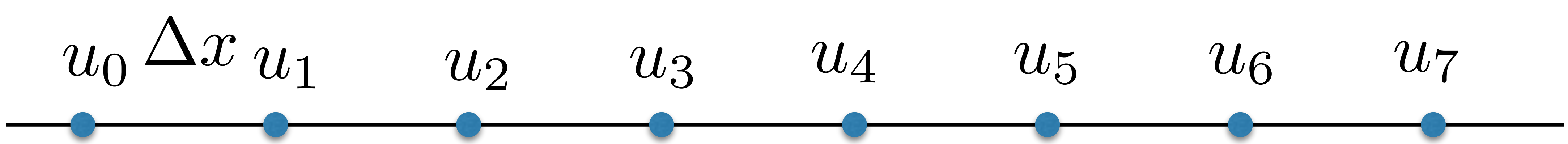
Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



Aproximação em diferenças finitas

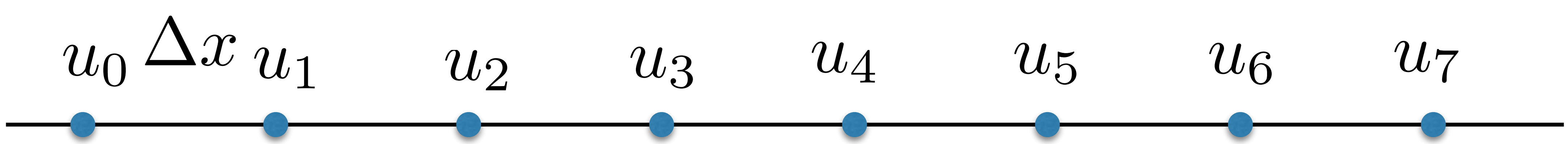
$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

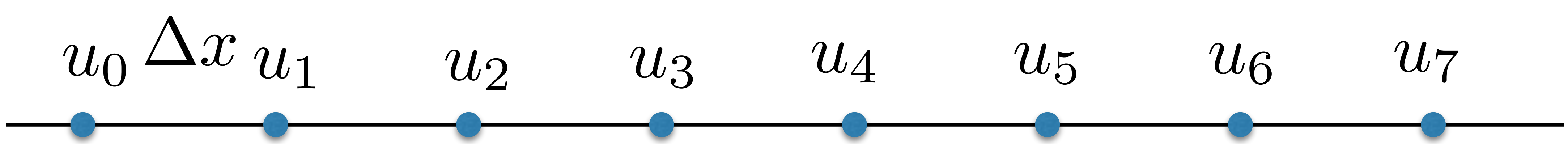


$\frac{\partial u}{\partial x} \approx$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

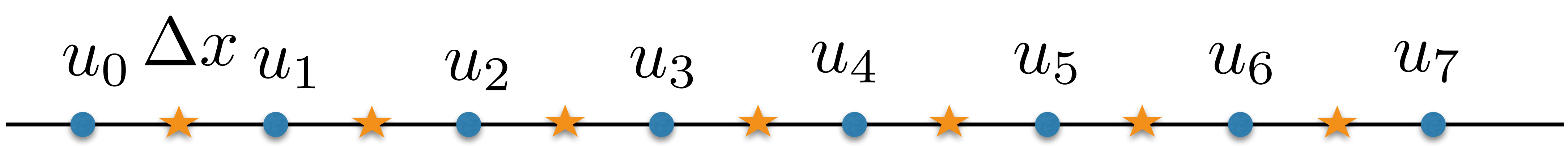


$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$



$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \quad \frac{u_2 - 2u_1 + u_0}{\Delta x^2} \quad \frac{u_3 - 2u_2 + u_1}{\Delta x^2} \quad \frac{u_4 - 2u_3 + u_2}{\Delta x^2} \quad \frac{u_5 - 2u_4 + u_3}{\Delta x^2} \quad \frac{u_6 - 2u_5 + u_4}{\Delta x^2} \quad \frac{u_7 - 2u_5 + u_5}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Condição de contorno

Condição de contorno

Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

Condição de contorno

Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

A forma mais simples é assumir um valor fixo para a grandeza estudada.

Condição de contorno

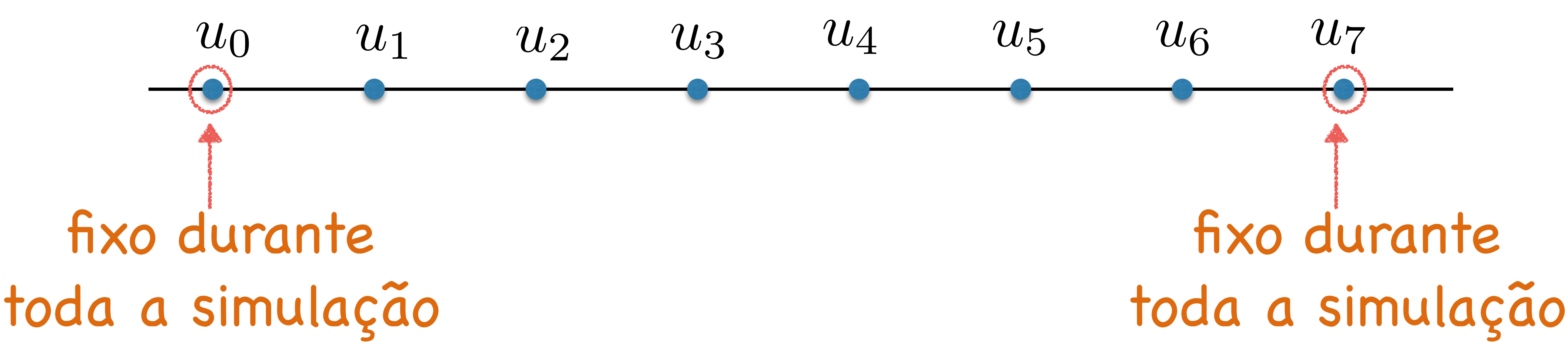
Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

A forma mais simples é assumir um valor fixo para a grandeza estudada.

Condição de contorno

Para o nosso problema em questão, existem várias formas de dizer como as bordas do domínio vão se comportar durante a solução da equação diferencial.

A forma mais simples é assumir um valor fixo para a grandeza estudada.



Condição inicial

É o estado inicial do nosso problema.

No nosso caso da equação de difusão, representa o valor atribuído para cada ponto do nosso domínio.

Condição inicial

É o estado inicial do nosso problema.

No nosso caso da equação de difusão, representa o valor atribuído para cada ponto do nosso domínio.

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas esses *u's* são [*presente*] ou [*futuro*]?

Mas como lidar com a variação no tempo??

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Mas esses *u's* são [*presente*] ou [*futuro*]?

Depende da formulação!!!

Formulação explícita

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os "u"s do membro da direita são no presente.

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{[u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}]^{[presente]}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

Essa formulação é chamada de explícita

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \frac{[u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}]^{[presente]}}{\Delta x^2}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

Essa formulação é chamada de explícita

Assim fica fácil isolar o valor de u no futuro, que eu não conheço a priori:

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left[\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$$

Formulação explícita

A forma mais simples é assumir que todos os “u”s do membro da direita são no presente.

Essa formulação é chamada de explícita

Assim fica fácil isolar o valor de u no futuro, que eu não conheço a priori:

$$\frac{u_i^{[futuro]} - u_i^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left[\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$$

$$u_i^{[futuro]} = \left[u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}\right]^{[presente]}$$

Evolução de u ao longo do tempo

Para estudar o modelo ao longo do tempo basta aplicar a expressão recursivamente:

```
t = 0

while t < t_max:
```

$$u_i^{[futuro]} = \left[u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right]^{[presente]}$$

$$u_i^{[presente]} = u_i^{[futuro]}$$

```
    t = t + dt
```

Evolução de u ao longo do tempo

Para estudar o modelo ao longo do tempo basta aplicar a expressão recursivamente:

```
t = 0

while t < t_max:
```

`u_aux` $= \left[u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right]^{[presente]}$

$u_i^{[presente]} =$ `u_aux`

```
    t = t + dt
```

Evolução de u ao longo do tempo

Para estudar o modelo ao longo do tempo basta aplicar a expressão recursivamente:

```
t = 0

while t < t_max:
```

u_aux $= u_i + \alpha \Delta t \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$

u_i = u_aux

```
t = t + dt
```

Vamos trabalhar!

$$T_i^{futuro} = T_i + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1})$$

Estabilidade numérica

$$T_i^{futuro} = T_i + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1})$$

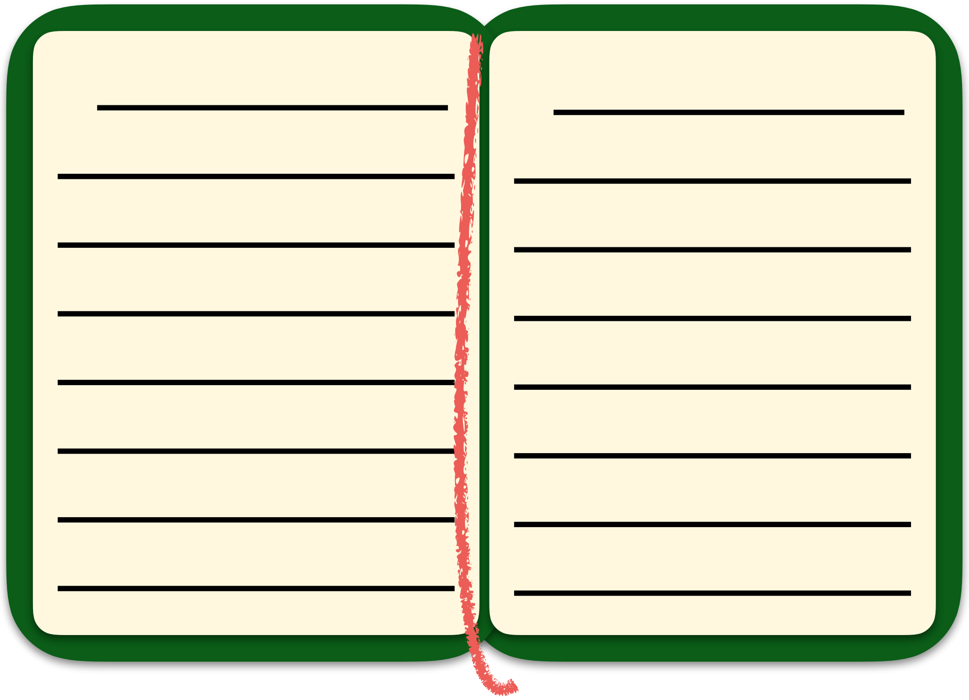
Esta formulação implícita é estável numericamente somente se

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\kappa}$$

E com produção de calor interno?

Não tem segredo!

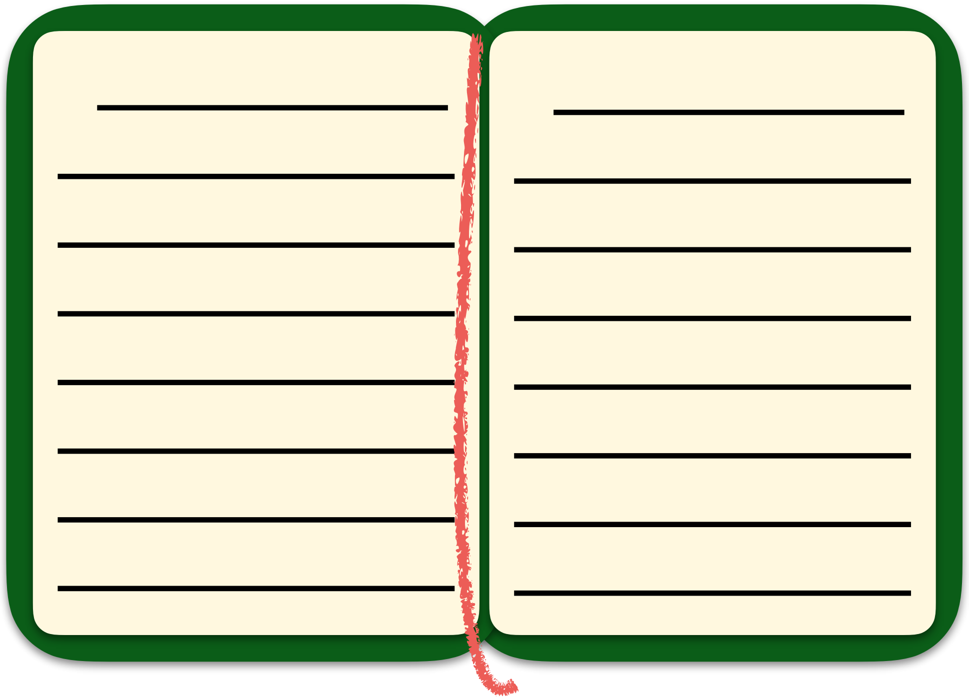
$$T_i^{futuro} = T_i + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}) + \Delta t \frac{H}{c}$$



Notebook para casa

- Escreva um script no ipython notebook que simule o resfriamento de um dique de 30 m de espessura com temperatura inicial de 1100^{o}C, com a rocha encaixante com temperatura inicial de 40^{o}C.

- Plote curvas da temperatura de pontos que estão a 10, 20, 50 e 100 m de uma das paredes do dique em função do tempo.



Notebook para casa

Dicas:

- Crie listas vazias para o tempo e a temperatura.

```
tp = []
Tp = []
```

- Use a função np.append para criar vetores que crescem a cada passo de tempo.

```
tp = np.append(tp,t)
Tp = np.append(Tp,T[“ponto de interesse”])
```