

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Solução Numérica de um Problema de Advecção e Difusão Anômala Unidimensional

Jader Lugon Junior¹

Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental, IFF, Macaé, RJ

Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues²

Departamento de Modelagem Computacional, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Luiz Bevilacqua³

Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa em Engenharia, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Diego Campos Knupp⁴

João Flávio Vieira Vasconcellos⁵

Antônio J. Silva Neto⁶

Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, Instituto Politécnico IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Resumo. Neste trabalho foi desenvolvida a solução para um problema de advecção e difusão anômala unidimensional utilizando o Método de Diferenças Finitas, programado no software R. Além do termo de transporte advectivo e da difusão primária (correspondente ao fluxo de Fick), a equação de difusão anômala inclui um termo correspondente à retenção ou fluxo secundário. O problema foi solucionado para diferentes condições iniciais e de contorno, sendo os resultados compatíveis com os apresentados em trabalhos anteriores da literatura.

Palavras-chave. Retenção. Difusão. Bi-fluxo. Equações diferenciais de quarta ordem.

1 Introdução

Apesar da difusão de um soluto em um meio contínuo ser usualmente descrito pela lei de Fick, existem diversas aplicações em que o processo difusivo não segue tal lei e necessita-se de outras formulações [4, 10]. Os pesquisadores Bevilacqua et al. [1–3] desenvolveram uma formulação analítica para descrever o comportamento do processo difusivo com uma parcela de retenção do fluxo. Ganti et al. [4] trataram o transporte de cascalhos no leito de rios como um processo de difusão anômala. No presente trabalho, visando uso em tais

¹jlugonjr@gmail.com

²pwatts@iprj.uerj.br

³bevilacqua@coc.ufrj.br

⁴diegoknupp@iprj.uerj.br

⁵jflavio@iprj.uerj.br

⁶ajsneto@iprj.uerj.br

aplicações, incluiu-se um termo advectivo na equação de difusão bi-fluxo, resultando na seguinte equação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v \frac{\partial \phi}{\partial x} + \beta K_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta) K_4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \quad (1)$$

onde ϕ representa a concentração de um soluto ou o número de indivíduos em uma população, x representa a coordenada espacial, t o tempo, v a velocidade, β a parcela sujeita à difusão primária e $(1 - \beta)$ é a parcela retida ou associada à difusão secundária, e K_2 e K_4 são parâmetros relacionados à difusão primária e secundária respectivamente.

Silva et al. [6] resolveram a equação de difusão anômala com a rotina NDSolve do software Mathematica e realizaram o estudo de sensibilidade visando a estimativa dos parâmetros da formulação de difusão anômala. Em artigos posteriores, a mesma equipe de pesquisadores apresentou soluções para o problema inverso de difusão anômala [5, 7, 8] utilizando como metodologias a inferência Bayesiana e a máxima verossimilhança.

Vasconcellos et al. [10] desenvolveram uma solução para o problema estacionário utilizando o Método de Volumes Finitos para resolver a equação de difusão anômala, tendo dedicado particular atenção às dificuldades numéricas relacionadas às condições de contorno (Dirichlet, Neumann e Robin).

No presente artigo apresentam-se os resultados para solução do problema direto, para o problema de advecção e difusão anômala, utilizando-se o Método de Diferenças Finitas programado no software R [9].

2 Solução Numérica para o Problema de Difusão Anômala com o Método de Diferenças Finitas

O Método de Diferenças Finitas permitiu resolver numericamente a equação diferencial (1), a partir de discretizações no tempo e espaço, e aproximações para cada termo de acordo com expansões em série de Taylor. A Figura 1 apresenta o esquema adotado para representar a discretização do domínio espacial.

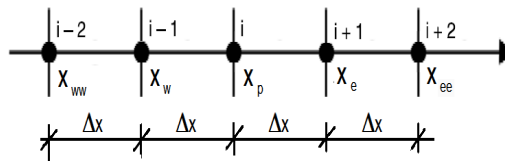


Figura 1: Esquema para representação da discretização espacial.

2.1 Nós interiores do domínio

A seguir apresentamos as equações de diferenças (2-5) adotadas para a solução do problema de advecção e difusão anômala correspondente à Equação (1)

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=0} \simeq \frac{\phi^{t+\Delta t} - \phi^t}{\Delta t} + O(\Delta t) \tag{2}$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x_p} \simeq \frac{\phi_{ww}^\theta - 8\phi_w^\theta + 8\phi_e^\theta - \phi_{ee}^\theta}{\Delta x} + O(\Delta x^4) \tag{3}$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x_p} \simeq \frac{-\phi_{ww}^\theta + 16\phi_w^\theta + 30\phi_p^\theta + 16\phi_e^\theta - \phi_{ee}^\theta}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \tag{4}$$

$$\left. \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right|_{x_p} \simeq \frac{\phi_{ww}^\theta - 4\phi_w^\theta + 6\phi_p^\theta - 4\phi_e^\theta - \phi_{ee}^\theta}{\Delta x^4} + O(\Delta x^2) \tag{5}$$

Neste trabalho foi adotado um esquema implícito para resolver as equações de diferenças finitas, ou seja, $\theta = t + \Delta t$ nas Equações (2-5). Assim, a cada passo de tempo Δt os valores da função ϕ foram calculados através da resolução de um sistema de equações algébricas lineares $Ax = b$, no qual a matriz A é pentadiagonal.

2.2 Nós do contorno do domínio

A solução do problema depende do conhecimento de duas condições de contorno em cada extremo do domínio espacial. Sendo assim, com base nas Refs. [7, 10] foram implementadas combinações das seguintes condições de contorno: (i) valor da função conhecido (Dirichlet); (ii) primeira derivada conhecida (Neumann); (iii) segunda derivada conhecida; e (iv) combinação conhecida do valor da função e da derivada primeira (Robin).

$$w_{10} \phi|_{x=0} + w_{11} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} + w_{12} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=0} = f_{w1} \tag{6}$$

$$w_{20} \phi|_{x=0} + w_{21} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} + w_{22} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=0} = f_{w2} \tag{7}$$

$$e_{10} \phi|_{x=L} + e_{11} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=L} + e_{12} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=L} = f_{e1} \tag{8}$$

$$e_{20} \phi|_{x=L} + e_{21} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=L} + e_{22} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=L} = f_{e2} \tag{9}$$

onde L é o comprimento do domínio espacial. Assim, definindo adequadamente as variáveis w_{10} , w_{11} , w_{12} , w_{20} , w_{21} e w_{22} , bem como as funções f_{w1} e f_{w2} , nas Eqs. (6 e 7), é possível representar diferentes condições na fronteira esquerda. Para representar a fronteira direita são definidos os valores e_{10} , e_{11} , e_{12} , e_{20} , e_{21} e e_{22} , bem como as funções f_{e1} e f_{e2} , nas Eqs. (8 e 9).

3 Resultados e Discussão

Com objetivo de avaliar diferentes estudos de caso, foram considerados dois problemas com as condições iniciais e de contorno descritas na Tabela 1, que correspondem a situações idênticas àquelas tratadas na Ref. [7].

Tabela 1: Problemas estudados.

Condição	Problema A	Problema B
Inicial	$\phi(x, t) _{t=0} = \text{sen} \left(\frac{\pi}{L} x \right)$	$\phi(x, t) _{t=0} = \left[\text{sen} \left(\frac{\pi}{L} x \right) \right]^{100} + 1$
Contorno à esquerda 1	$\phi(x, t) _{x=0} = 0$	$\phi(x, t) _{x=0} = 1$
Contorno à esquerda 2	$\frac{d^2 \phi}{dx^2} \Big _{x=0} = 0$	$\frac{d\phi}{dx} \Big _{x=0} = 0$
Contorno à direita 1	$\phi(x, t) _{x=L} = 0$	$\phi(x, t) _{x=L} = 1$
Contorno à direita 2	$\frac{d^2 \phi}{dx^2} \Big _{x=L} = 0$	$\frac{d\phi}{dx} \Big _{x=L} = 0$

As soluções dos Problemas A e B apresentados na Tabela 1 foram avaliadas com seis diferentes conjuntos de parâmetros, sendo que para todos os casos $L = 1,00$ e $\beta = 0,20$, e os outros parâmetros estão apresentados na Tabela 2, onde t_f corresponde ao tempo final de observação considerado para o problema de advecção e difusão anômala.

Tabela 2: Estudo de Casos implementados.

Variável	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6
Problema	A	A	A	B	B	B
K_2	1,00E-3	1,00E-3	1,00E-3	1,00E-3	1,00E-3	1,00E-3
K_4	1,00E-5	0,0	1,00E-5	1,00E-5	0,0	1,00E-5
v	0,00	0,01	0,01	0,00	0,20	0,20
t_f	100	100	100	1,0	1,0	1,0

Em todas as simulações realizadas, o tempo de observação foi discretizado em 1000 intervalos e o domínio espacial em 100 intervalos. O tempo computacional em um notebook com processador Intel(R) Core(TM) i5-5200U CPU @e 2.20GHz foi de aproximadamente 0,6s para cada simulação realizada.

Na Figura 2 são representados os resultados obtidos para os casos 1 e 4, ou seja, considerando uma velocidade nula, $v = 0$, e com valores típicos já utilizados na literatura para os demais parâmetros [8, 10] e, portanto, com comportamento conhecido para fins de validação.

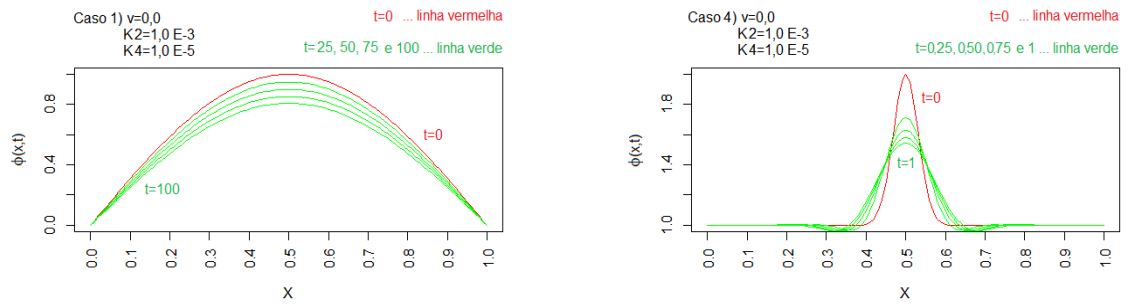


Figura 2: Solução para os casos 1 e 4 (difusão primária e secundária).

Observa-se a perfeita simetria nas soluções obtidas para as duas condições iniciais estabelecidas, resultado que também é consequência das condições de contorno adotadas para os dois problemas.

A Figura 3 apresenta os resultados obtidos para os casos 2 e 5 estudados, ou seja, eliminando a difusão secundária $K_4 = 0,0$, e com velocidade conhecida $v = 0,01$.

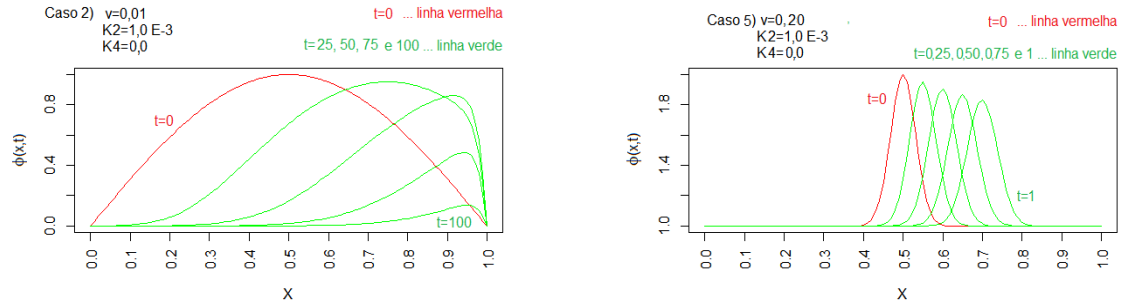


Figura 3: Solução para os casos 2 e 5 (advecção e difusão primária).

No problema A, o valor da derivada segunda é nulo, mas a primeira derivada é desconhecida, acarretando em uma declividade decrescente ao longo do tempo do lado direito do gráfico. No problema B, o valor da derivada primeira é nulo, contribuindo para manter a simetria da onda ao longo do trajeto no segundo gráfico.

Na Figura 4 são apresentados os resultados obtidos nos casos de estudo 3 e 6, com a presença de todos os fenômenos de interesse: advecção, difusão primária e secundária.

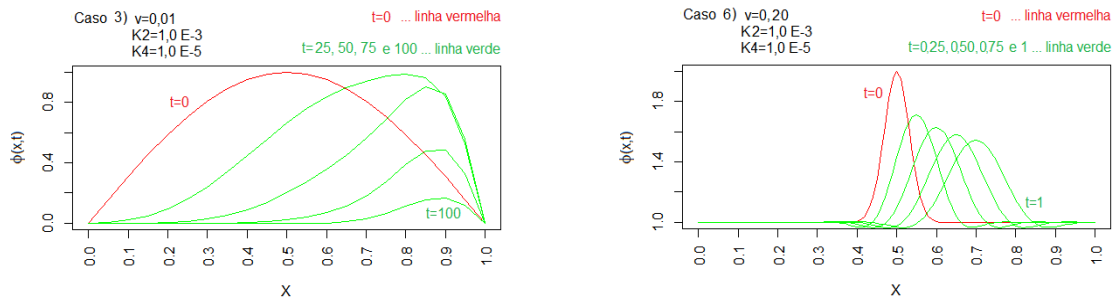


Figura 4: Solução para os casos 3 e 6 (com advecção, difusão primária e secundária).

É possível perceber o efeito da difusão secundária ao comparar as Figs. 3 e 4. Destaque para o aumento da retenção, no problema A, que pode ser percebida pela a diferença na inclinação das curvas do lado direito dos gráficos. No problema B, é possível observar o efeito de retenção proporcionado pela difusão secundária ao perceber o aumento da largura na onda advectada.

4 Conclusões e Trabalhos Futuros

As soluções numéricas obtidas para os estudos de caso considerados permitiram avaliar separadamente o efeito advectivo, da difusão primária e da secundária em diferentes condições iniciais e de contorno.

Com a solução desenvolvida, será possível calibrar o novo modelo de advecção e difusão anômala com dados experimentais para uso em aplicações onde ocorram efeitos de retenção. Com tal objetivo, a solução será também implementada para duas dimensões, bem como será realizado o estudo de sensibilidade e finalmente serão aplicadas técnicas para solução de problemas inversos.

Para a solução de problemas inversos, busca-se com frequência soluções para os problemas diretos correspondentes que sejam acurados e obtidas com tempo computacional reduzido. A solução aqui apresentada atende estes requisitos.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro fornecido da FAPERJ, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, e da CAPES, Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.

Referências

- [1] L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e F.P. Costa, 2011. *A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion process*. An Acad Bras Cienc. 83 (2011) 1443-1464

- [2] L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e F.P.Costa, 2011. *On the significance of higher order differential terms in diffusion process*. J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng. 33 (2011) 166-175
- [3] L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão, J.G.Simas e A.P.R.Doce, 2013. *A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution*. J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng. (2013) 1-10.
- [4] V.,Ganti, M.M.Meerschaert, E.Foufoula-Georgiou, E.Viparelli e G.Parker, 2010, *Normal and anomalous diffusion of gravel tracer particles in rivers*, J. Geophys. Res., 115, F00A12, doi:10.1029/2008JF001222.
- [5] D.C.Knupp, L.G.Silva, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e A.J.Silva Neto, 2016, *Inverse Analysis of a New Anomalous Diffusion Model Employing Maximum Likelihood and Bayesian Estimation*. In: Silva Neto, A.J., Santiago e O.L., Silva, G.N., *Mathematical Modeling and Computational Intelligence in Engineering Applications*, cap. 7 p. 89-104. Springer International Publishing, ISBN 978-3-319-38868-7, DOI: 10.1007/978-3-319-38869-4.
- [6] L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e A.J.Silva Neto, 2014. *Inverse problem in anomalous diffusion with uncertainty propagation*. 8th International Conference on Inverse Problems in Engineering-ICIPE 2014. Cracow, Poland.
- [7] L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão e A.J.Silva Neto, 2014, *Formulação e solução de um Problema Inverso de Difusão Anômala com Técnicas Estocásticas*. Ciência e Natura, (2014) p. 82-96. <http://dx.doi.org/10.5902/2179460X13184>.
- [8] L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão, J.G.Simas, J.F.Vasconcellos, e A.J.Silva Neto, 2013, *Investigation of a new model for anomalous diffusion phenomena by means of an inverse analysis*, 4th Inverse Problems, Design and Optimization Symposium, Albi, France, (2013)
- [9] R Core Team (2017). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.
- [10] J.F.V.Vasconcellos, G.M.Marinho e J.H.Zanni, 2016. *Análise numérica da equação da difusão anômala com fluxo bimodal*. Rev. int. métodos númer. cálc. diseño ing. <http://dx.doi.org/10.2016/j.rimni.2016.05001>.