



**UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO POLITÉCNICO**

André da Silva Cardoso

**DFLD-*EXP*: uma solução semi-analítica para a equação de advecção-
dispersão**

**Nova Friburgo
2008**

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



**UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO POLITÉCNICO**

André da Silva Cardoso

DFLD-EXP: uma solução semi-analítica para a equação de advecção-dispersão

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Nélio Henderson

**Nova Friburgo
2008**

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/REDE SIRIUS/BIBLIOTECA CTC/E

C268

Cardoso, André da Silva.

DFLD-EXP: uma solução semi-analítica para a equação de advecção-dispersão / André da Silva Cardoso. - 2008.

52 f.: il.

Orientador: Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira.

Dissertação (Mestrado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Equações diferenciais parciais – Soluções numéricas - Teses. 2. Equação de calor – Teses. 3. Diferenças finitas – Teses. 4. Matrizes (Matemática) – Teses. 5. Análise numérica – Teses. I. Oliveira, Luiz Nélio Henderson Guedes de. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. III. Título.

CDU 517.95:519.6

[FOLHA DE APROVAÇÃO]

DEDICATÓRIA

Dedicado ao
meu pai, minha mãe e Aline, sempre presentes.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente ao meu orientador, Professor Nélío Henderson pela dedicação ao trabalho, confiança e disponibilidade, principalmente nesse último e conturbado ano. Aos membros respeitáveis corpo docente do Instituto Politécnico. Meus colegas que me acompanharam no primeiro ano do programa. Especial a CAPES, pela bolsa a mim disponibilizada durante o ano de 2006. Minha família e amigos.

*Vá calmamente entre o barulho e a pressa,
e lembre-se da paz que possa existir no silêncio.*

Retirado do texto DESIDERATA – Autor Desconhecido

RESUMO

CARDOSO, André da Silva. DFLD-EXP: uma solução semi-analítica para a equação de advecção-dispersão. 2008. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2008.

A equação de advecção-dispersão possui grande importância na engenharia e nas ciências aplicadas. No entanto, como é bem conhecido, a obtenção de uma solução numérica apropriada para essa equação é um problema desafiador tanto para engenheiros como para matemáticos, físicos e outros profissionais que trabalham com a modelagem de fenômenos associados a ela. Muitos métodos numéricos desenvolvidos podem apresentar uma série de inconvenientes, tais como oscilações, dispersão e/ou dissipação numérica e instabilidade, além de serem inapropriados para determinadas condições de contorno. O presente trabalho apresenta e analisa a metodologia DFLD-*exp*, uma nova abordagem para a obtenção de soluções semi-analíticas da equação de advecção-dispersão, a qual utiliza um tipo particular de diferenças finitas para a discretização espacial juntamente com técnicas de exponencial de matrizes para a resolução temporal. Uma cuidadosa análise numérica mostra que a metodologia resultante é não-oscilatória, essencialmente não-dispersiva e não-dissipativa, e incondicionalmente estável. Resoluções de vários exemplos numéricos, através de um código desenvolvido em linguagem MATLAB, confirmam os resultados teóricos.

Palavras-chave: Advecção-dispersão; solução semi-analítica; exponencial de matrizes.

ABSTRACT

The advection-dispersion equation has been very important in engineering and the applied sciences. However, the obtainment of an appropriate numerical solution to that equation has been a challenging problem to engineers, mathematicians, physicians and others that work in the modeling of phenomena associated to the advection-dispersion equation. Many developed numerical methods may produce a succession of mistakes, just as oscillations, numerical dispersion and/or dissipation, instability and those methods also may be inappropriate to determined boundary conditions. The present work shows and analyses the DFLD-*exp* methodology, a new way to obtain semi-analytic solutions to the advection-dispersion equation, that make use of a particular form of finite differencing to the spatial discretization with techniques of matrix exponential to the time solving. A detailed numerical analysis shows the methodology is non-oscillatory, essentially non-dispersive and non-dissipative, and unconditionally stable. Resolutions of any numerical examples, by a computational code developed in MATLAB language, confirm the theoretical results.

Keywords: Advection-dispersion; semi-analytic solution; matrix exponential.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	10
2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA.....	13
2.1 A Equação de Advecção-Dispersão.....	13
2.2 Solução Analítica Aproximada.....	15
3 O MÉTODO DFLD-EXP.....	16
3.1 Discretização Espacial.....	16
3.2 Geração da Grade.....	18
3.3 Análise da Dispersão e Dissipação Numérica.....	20
3.4 Dedução Alternativa.....	25
3.5 Resolução Temporal com Exponencial de Matrizes.....	27
4 EXEMPLOS NUMÉRICOS.....	40
4.1 Exemplos com Números de Peclet Constantes.....	40
4.2 Exemplos com Números de Peclet Distintos.....	44
4.3 Exemplos Gerais.....	50
5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS.....	54
5.1 Conclusões.....	54
5.2 Perspectivas Futuras.....	56
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	58
APÊNDICE.....	60

1 INTRODUÇÃO

A equação de advecção-dispersão (também chamada de convecção-difusão) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (CV) + \nabla \cdot (D\nabla C) = 0, \quad (1.1)$$

onde C é um escalar que representa, por exemplo, a concentração de uma espécie química e D o seu coeficiente de dispersão. Na Eq. (1.1), t descreve o tempo e V é um campo de velocidade especificado geralmente em uma, duas ou três dimensões espaciais.

A equação diferencial parcial descrita na Eq. (1.1) tem grande importância prática e teórica, e governa a evolução de uma variedade de fenômenos físicos, relacionados com escoamentos reativos e não-reativos, fluxos em meios porosos, modelagem de fenômenos atmosféricos naturais e previsão do tempo, problemas de dinâmicas dos gases, poluição do ar, poluição de rios e lagos, oceanografia, sísmica, semicondutores, fluxo de tráficos urbanos, escoamento em vasos capilares e tubos renais, transferência de calor por difusão e convecção, e outros problemas de interesse da tecnologia e das ciências aplicadas.

Muitas vezes o campo de velocidade, as condições de contorno e/ou as condições iniciais são descritas por funções suficientemente complicadas, de modo que soluções não podem ser determinadas analiticamente. Assim, em vários casos de interesse prático, soluções numéricas para a equação de advecção-dispersão são necessárias para modelar problemas do mundo real.

Durante as últimas décadas, a procura de uma solução numérica para a equação de advecção-dispersão tem envolvido um grande esforço de pesquisa e muitos algoritmos foram desenvolvidos em várias áreas de aplicações, veja Morton (1996). No entanto, é bem conhecido que algumas classes de tais algoritmos podem produzir dispersão ou dissipação de

origem numérica, além de comportamento oscilatório. Tais fenômenos numéricos indesejáveis afetam os valores da variável C , de modo que as concentrações resultantes podem apresentar aspectos espúrios, longe de serem fisicamente corretos. Em tais classes encontram-se os métodos clássicos de diferenças finitas, tal como o esquema de diferenças centradas, veja, por exemplo, Siemieniuch e Gladwell (1978) para uma análise desses métodos no âmbito da equação de advecção-dispersão.

Esquemas centrais não-oscilatórios foram introduzidos em um contexto numérico mais amplo envolvendo leis de conservação. Entre eles, podemos citar: (i) Os métodos do tipo Godunov, (ii) métodos do tipo TVD (*total variation diminishing*), (iii) métodos essencialmente não oscilatórios (ENO) e (iv) os esquemas centrais de Nessyahu-Tadmor e Kurganov-Tadmor. Para os leitores interessados em tais metodologias indicamos as seguintes fontes disponíveis na literatura, e as referências bibliográficas incluídas nelas: Nessyahu e Tadmor (1990), Thomas (1995, 1999), Kurganov e Tadmor (2000) e Leveque (2002). Talvez a maior desvantagem dessas metodologias resida no fato de muitas vezes imporem severas restrições no passo de tempo.

Considerando problemas de advecção-dispersão unidimensionais, no presente trabalho introduzimos e analisamos de maneira detalhada o método que denominamos de DFLD-*exp*. Trata-se de um método que utiliza uma discretização espacial em diferenças finitas com uma escolha apropriada para o tamanho do passo $h = \Delta x$. Esta escolha não apenas resulta em um esquema não oscilatório, o qual essencialmente não apresenta dispersão nem dissipação numérica, mas também reduz a discretização espacial a um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares cuja matriz dos coeficientes, $\mathbf{A}$, é simplesmente bidiagonal inferior. A geração da grade de discretização é feita de forma automatizada e é determinada, essencialmente, pelo campo de velocidade, o qual pode ser constante ou uma função não-decrescente da variável espacial x . Como consequência, os autovalores da matriz $\mathbf{A}$ dependem diretamente do número de Peclet nos nós da grade gerada.

Em adição, a resolução temporal é feita utilizando-se técnicas de exponencial de matrizes, as quais exploram fortemente a forma de $\mathbf{A}$ juntamente com a relação existente entre os seus autovalores. Três técnicas, que dependem ou não da multiplicidade dos autovalores de $\mathbf{A}$, são desenvolvidas e utilizadas no presente trabalho. Experimentos numéricos mostram que a metodologia DFLD-*exp* resultante dessas estratégias numéricas, além de eficiente, apresenta soluções semi-analíticas acuradas. Deve-se observar que o método DFLD-*exp* é também incondicionalmente estável estando inteiramente livre de restrições relacionadas com o passo de tempo proveniente de possíveis discretizações temporais.

Cuidadosas análises são feitas aqui, incluindo a análise numérica referente aos fenômenos de dissipação e dispersão numérica, a existência e unicidade das soluções semi-analíticas geradas pela metodologia DFLD-*exp*, e o comportamento assintótico de tais soluções.

2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

2.1 A Equação de Advecção-Dispersão

Neste trabalho, estaremos interessados em resolver equações diferenciais parciais unidimensionais da forma descrita abaixo, as quais são denominadas de advecção-dispersão,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (C v)}{\partial x} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0. \quad (2.1)$$

Tais equações estarão definidas sobre um domínio espacial $0 < x < L$, e serão válidas para $t > 0$. No contexto do fenômeno físico de advecção-dispersão, v e D representam a

velocidade e o coeficiente de dispersão, respectivamente. Aqui, suporemos que tais coeficientes possuem valores positivos, sendo D constante e $v(x)$ uma função não-decrescente da variável x . A hipótese de $v(x)$ ser não-decrescente é fisicamente coerente, pois garante que as partículas do fluido que estão na frente viajam com velocidade maior ou igual daquelas que se encontram atrás. Assim, não há ponto de estagnação ao longo do escoamento, permitindo que v seja sempre independente do tempo, além de garantir que o sentido da velocidade nunca possa ser revertido.

Consideraremos, que a função incógnita $C = C(x, t)$ satisfaz as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$C(x, 0) = f(x) ; 0 < x < L, \quad (2.2)$$

$$C(0, t) = C_0 ; t > 0, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial C(L, t)}{\partial x} = 0. \quad (2.4)$$

Introduzindo as mudanças de variáveis $C_R = C/C_0$, $x_R = x/L$ e $t_R = Dt/L^2$,

notamos que a equação diferencial na Eq.(2.1) se reduz à forma adimensional

$$\frac{\partial C_R}{\partial t_R} + \frac{\partial (C_R \lambda)}{\partial x_R} - \frac{\partial^2 C_R}{\partial x_R^2} = 0, \quad (2.5)$$

onde $\lambda(x) = v(x)L/D$ é o número de Peclet no ponto x . O número de Peclet é um adimensional que relaciona parâmetros do fenômeno advectivo com o dispersivo. Para problemas de fluxo de massa em escoamentos com viscosidade, o número de Peclet pode ser obtido a partir de outros dois adimensionais: o número de Reynolds, que dá a relação das forças advectivas com as forças viscosas, e o número de Schmidt, que relaciona forças viscosas com as dispersivas.

Em vista do exposto acima, dados D e $\lambda = \lambda(x)$, e usando a notação $\dot{\lambda} \equiv d\lambda(x)/dx$,

consideraremos o problema de encontrar uma solução (semi-analítica) para o problema acima, escrito na seguinte forma adimensional:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \lambda \frac{\partial C}{\partial x} - \dot{\lambda} C ; 0 < x < 1, \quad (2.6)$$

$$C(x,0) = g(x) ; 0 < x < 1 , \quad (2.7)$$

$$C(0,t) = 1 ; t > 0, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial C(L,t)}{\partial x} = 0 ; t > 0, \quad (2.9)$$

onde $g(x) = f(x)/C_0$ é no máximo uma função da variável x .

2.2 Solução Analítica Aproximada

Uma solução analítica aproximada para o problema descrito na Eq. (2.6) – (2.9) pode ser escrita, para $\lambda = \text{constante}$ e $g(x) = 0$, na seguinte forma (veja Siemieniuch e Gladwell, 1978)

$$C(x,t) = \exp(\lambda) \left\{ \left(1 + \lambda/2 (2 - x + \lambda t) \right) \operatorname{erfc} \left((2 - x + \lambda t) / 2\sqrt{t} \right) - \lambda \sqrt{(t/\pi)} \exp \left(- (2 - x + \lambda t)^2 / 4t \right) \right\} \\ + \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left((x - \lambda t) / 2\sqrt{t} \right) + \exp(\lambda x) \operatorname{erfc} \left((x + \lambda t) / 2\sqrt{t} \right) \right\}, \quad (2.10)$$

onde $\operatorname{erfc}(x)$ é a função erro complementar definida por

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x e^{-s^2} ds. \quad (2.11)$$

Para diferentes valores de t (adimensional), soluções analíticas aproximadas obtidas pela expressão descrita na Eq. (2.10) apresentam as formas mostradas na Figura 2.1.

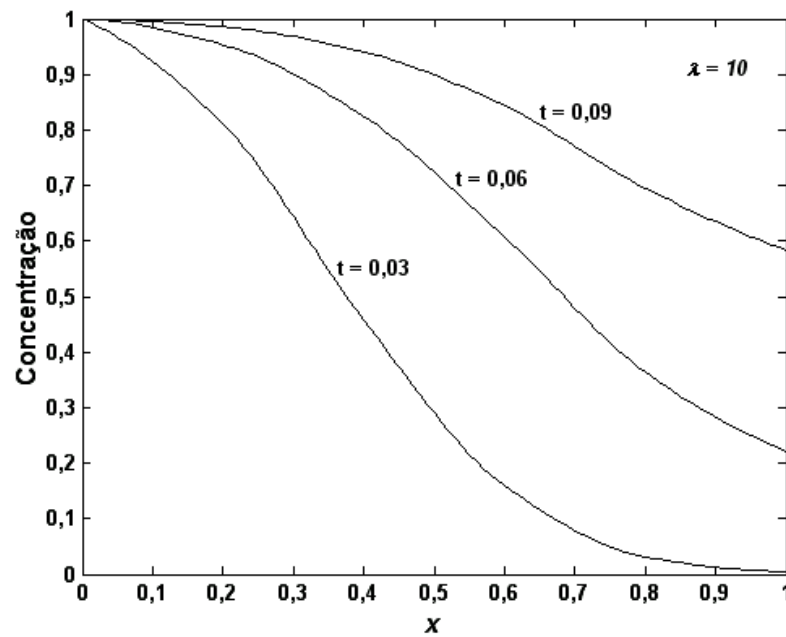


Figura 2.1. Soluções analíticas aproximadas para $\lambda = 10$.

3 O MÉTODO DFLD-EXP

3.1 Discretização Espacial

Consideramos uma grade com $n + 2$ pontos, $0 = x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1} = 1$ (veja a Figura 3.1), de modo que dois pontos consecutivos x_{i-1} e x_i encontram-se a uma distância

$h_i = x_i - x_{i-1}$, para todo $i = 1, \dots, n+1$. Dessa forma teremos que $\sum_{i=1}^{n+1} h_i = 1$.

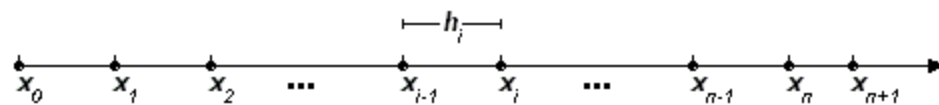


Figura 3.1. A grade de discretização com $n + 2$ pontos.

Inicialmente, seja a aproximação em série de Taylor, em torno do ponto x_i , dada por

$$C_{i-1}(t) = C_i(t) - h_i \frac{\partial C_i(t)}{\partial x} + \frac{h_i^2}{2} \frac{\partial^2 C_i(t)}{\partial x^2} + O(h_i^3), \quad (3.1)$$

onde $C_i(t) = C(x_i, t)$ e $O(h_i^3)$ denotam os termos de potência de h_i com expoentes maiores ou iguais a 3. Assim, de Eq. (3.1), segue a relação:

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial x} = \frac{C_i(t) - C_{i-1}(t)}{h_i} + \frac{h_i}{2} \frac{\partial^2 C_i(t)}{\partial x^2} + O(h_i^2). \quad (3.2)$$

Substituindo-se Eq. (3.2) na Eq.(2.6) obtemos

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = \lambda_i \frac{C_{i-1}(t) - C_i(t)}{h_i} + \left(1 - \frac{h_i \lambda_i}{2}\right) \frac{\partial^2 C_i(t)}{\partial x^2} - \dot{\lambda}_i C_i + O(h_i^2), \quad (3.3)$$

onde $\lambda_i \equiv \lambda(x_i)$.

Em seguida, considerando um procedimento semelhante àquele proposto por Van Ommen (1985), suporemos que para todo $i = 1, \dots, n$, mas não necessariamente para $i = n+1$, cada valor h_i é escolhido de modo a satisfazer a relação

$$h_i = \frac{2}{\lambda_i}. \quad (3.4)$$

A hipótese contida na Eq. (3.4) reduz a expressão na Eq. (3.3), obtendo-se a seguinte forma simplificada, inteiramente livre do termo dispersivo $\partial^2 C_i(t)/\partial x^2$,

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = \lambda_i^2 \frac{C_{i-1}(t) - C_i(t)}{2} - \dot{\lambda}_i C_i + O(h_i^2), \text{ para todo } i = 1, \dots, n. \quad (3.5)$$

Devido à condição de contorno descrita na Eq. (2.8), obtemos, para $i = 1$,

$$\frac{\partial C_1(t)}{\partial t} = -\left(\frac{\lambda_1^2}{2} + \dot{\lambda}_1\right) C_1(t) + \frac{\lambda_1^2}{2} + O(h_1^2). \quad (3.6)$$

Considerando um erro na ordem de h_i^2 , Eq. (3.5) e (3.6) podem ser aproximadas por

$$\frac{\partial C_1(t)}{\partial t} = \frac{\lambda_1^2}{2} - \left(\frac{\lambda_1^2}{2} + \dot{\lambda}_1 \right) C_1(t), \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = \frac{\lambda_i^2}{2} C_{i-1}(t) - \left(\frac{\lambda_i^2}{2} + \dot{\lambda}_i \right) C_i(t); \quad \forall i = 2, \dots, n. \quad (3.8)$$

As Eq. (3.7) e (3.8) constituem um sistema de equações diferenciais com n equações e n incógnitas, $C_i(t)$, para todo $i = 1, \dots, n$.

Para determinar o valor $C_{n+1}(t)$, podemos considerar a aproximação em diferenças finitas no ponto x_{n+1} , dada por

$$C_n(t) - C_{n+1}(t) = -\frac{2}{\lambda_n} \frac{\partial C_{n+1}(t)}{\partial x} + O(h_{n+1}). \quad (3.9)$$

Substituindo Eq. (2.9) na Eq. (3.9) chegamos a uma relação que define C_{n+1} em função do valor de C no ponto x_n ,

$$C_{n+1}(t) = C_n(t) + O(h_{n+1}). \quad (3.10)$$

A Eq. (3.10) representa uma aproximação de primeira ordem em h_{n+1} . Aproximações mais acuradas podem ser obtidas calculando-se $C_{n+1}(t)$ por interpolações dos valores de C ao redor do ponto x_{n+1} . No presente trabalho usaremos uma interpolação quadrática descrita no Apêndice.

O esquema resumido na Eq. (3.7) e (3.8) será denominado aqui de *Diferença Finita Livre de Dispersão* (DFLD). As Eqs. (3.5) e (3.6) mostram que a discretização espacial DFLD é um esquema de diferenças finitas acurado de segunda ordem na variável x .

3.2 Geração da Grade

Quando a função $\lambda(x)$ é uma constante, a Eq.(3.4) definirá uma grade com espaçamentos de tamanho uniforme entre os primeiros $n+1$ pontos, incluindo o ponto $x_0 = 0$. Neste caso, teremos necessariamente $h_i = 2/\lambda$, para todo $i=1, \dots, n$. Esta relação só é possível se, para os valores de h_i assim definidos, existir um número inteiro positivo n tal que $\sum_{i=1}^n h_i < 1$. Isso implica em uma grade com n pontos internos, onde n é um inteiro positivo escolhido de maneira que $n < \lambda/2$, ou seja, $n < \nu L/2D$. A última desigualdade mostra que efetivamente devem existir números inteiros com a referida propriedade, pois na prática tem-se em geral $\nu L \gg D$, principalmente para processos dominados pelo fenômeno de advecção, onde $\lambda > 1$. Feito isso, o último espaçamento é determinado pela diferença $h_{n+1} = 1 - \sum_{i=1}^n h_i$.

Quando $\lambda(x)$ não é constante, a grade não deve ser uniforme. Neste caso, usando Eq. (3.4), empregaremos a relação entre os pontos x_{i-1} e x_i dada por $x_i - x_{i-1} = 2/\lambda(x_i)$, para todo $i = 1, \dots, n$.

A análise acima sugere os seguintes algoritmos para a geração da grade de discretização:

Algoritmo 3.1 (Geração da grade para $\lambda(x) = \text{constante}$)

Dados: $\lambda > 2$.

Passo 1 : Faça $x_0 = 0$.

Passo 2: Escolha um número inteiro positivo apropriado tal que $n < \lambda/2$.

Passo 3 : Faça $h_i = 2/\lambda$, para todo $i = 1, \dots, n$.

Passo 4: Faça $h_{n+1} = 1 - \sum_{i=1}^n h_i$.

Passo 5: Faça $x_i = x_{i-1} + h_i$, para todo $i = 1, \dots, n+1$.

Algoritmo 3.2 (Geração da grade para $\lambda(x) \neq \text{constante}$)

Dados: $\lambda = \lambda(x)$.

Passo 1 : Faça $x_0 = 0$, $s = 0$, $i = 1$ e $n = 0$.

Passo 2: Enquanto $s < 1$,

Determine o ponto x_i que resolve a equação (provavelmente) não linear

$$x_i - x_{i-1} - 2/\lambda(x_i) = 0,$$

Faça $h_i = x_i - x_{i-1}$,

Faça $s = s + h_i$,

Faça $n = n + 1$,

Faça $i = i + 1$.

Passo 3: Faça $x_{n+1} = 1$ e $h_{n+1} = 1 - x_n$.

Obs.: Utilizar o Método de Newton para solucionar a equação não linear do passo 2.

3.3 Análise da Dispersão e Dissipação Numérica

Alguns métodos numéricos para a equação de advecção-dispersão podem apresentar dispersão numérica, veja Thomas (1995). Esse fenômeno numérico indesejável pode afetar de forma adversa a relação originalmente existente entre os termos advectivo e dispersivo, contribuindo para o cálculo de perfis de $C(x, t)$ fisicamente não realísticos, principalmente

para processos dominados pela advecção onde as conseqüências podem ser visivelmente mais dramáticas.

Para realizar uma análise da dispersão numérica do esquema DFLD, na presente seção suporemos que o número de Peclet é constante, isto é, $\lambda(x) = \lambda = \text{constante}$. Assim, teremos $h_k = h$, para todo $k = 1, \dots, n$. Em vista disso, para um ponto x_k da grade de discretização, o esquema DFLD toma a forma

$$\frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = \frac{\lambda^2}{2} (C_{k-1}(t) - C_k(t)). \quad (3.11)$$

Em seguida, de acordo com Thomas (1995), suporemos que a solução da equação representada na Eq. (3.11) possui a forma de uma série de Fourier finita, ou mais simplesmente:

$$C_k(t) = e^{i(\omega t + \beta kh)} \quad (3.12)$$

onde, agora, $i = \sqrt{-1}$ representa a unidade imaginária. O termo ω é a frequência da onda descrita na Eq. (3.12), enquanto que $\beta = 2\pi/\eta$ é denominado como número de onda, sendo η o comprimento de onda. A expressão na Eq. (3.12) pode ser escrita na forma equivalente

$$C_k(t) = e^{i\beta(kh - (\omega/\beta)t)}, \quad (3.13)$$

onde o termo $-\omega/\beta$ é denominado como velocidade de onda. Neste sentido, Eq.(3.11) define uma relação funcional entre ω e β , denominada como relação de dispersão discreta, denotada por $\omega_{Discret.} = \omega(\beta)$. De maneira análoga, considere a equação diferencial na Eq. (2.6), com $\dot{\lambda} = 0$, e uma solução dada por

$$C(x, t) = e^{i(\omega t + \beta x)}. \quad (3.14)$$

A substituição de Eq. (3.14) na Eq. (2.6) conduz à relação de dispersão para o problema contínuo (não discretizado). É fácil ver que tal relação tem a forma de uma função complexa dada por

$$\omega_{Cont.}(\beta) = \lambda\beta - i\beta^2. \quad (3.15)$$

Em vista de Eq. (3.15) é natural considerarmos que a relação de dispersão discreta possui a forma complexa indicada abaixo:

$$\omega_{Discret.}(\beta) = \alpha + ib, \quad (3.16)$$

onde $\alpha(\beta)$ e $b(\beta)$ são números reais. Assim, substituindo Eq. (3.16) na Eq. (3.13) obtemos

$$C_k(t) = e^{-bt} e^{i\beta(kh - (-\alpha/\beta)t)}. \quad (3.17)$$

Se $-\alpha/\beta = 0$, o esquema de discretização é dito não dispersivo, caso contrário o esquema deve apresentar dispersão numérica, principalmente se $-\alpha/\beta$ é uma função não trivial da variável β . No último caso, vê-se a solução de Eq. (3.11) como uma combinação de ondas da forma mostrada na Eq. (3.17), de modo que ondas com comprimentos de onda diferentes propagam-se com diferentes velocidades $-\alpha/\beta$, veja Thomas (1995). Por outro lado, se a solução indicada na Eq. (3.17) nunca decresce com o passar do tempo, então o esquema é considerado não dissipativo. Isto deve ocorrer quando a parte real do termo transiente no expoente de Eq. (3.17) for nulo, ou seja, quando $b = 0$. Se $b > 0$, para algum β , o esquema deve ser dissipativo.

Para analisar a possibilidade de alguma dispersão ou dissipação numérica introduzida pela discretização espacial DFLD, substituímos a Eq. (3.17) na Eq. (3.11), obtendo, após algumas simplificações,

$$\left(1 - \frac{2b}{\lambda^2}\right) + i\left(\frac{2\alpha}{\lambda^2}\right) = \cos \beta h - i \sin \beta h. \quad (3.18)$$

A expressão na Eq. (3.18) indica que (para o esquema DFLD) os termos $-\alpha/\beta$ e b são dados por

$$-\frac{\alpha}{\beta} = \frac{\lambda^2}{2\beta} \sin \beta h, \quad (3.19)$$

$$b(\beta) = \frac{\lambda^2}{2} (1 - \cos \beta h). \quad (3.20)$$

Definiremos o erro de dispersão relativo como sendo o seguinte quociente

$$\varepsilon_{Disper.} = \frac{(\operatorname{Re}(\omega_{Cont.})/\beta) - (-\alpha/\beta)}{\operatorname{Re}(\omega_{Cont.})/\beta}, \quad (3.21)$$

onde $\operatorname{Re}(\omega_{cont.})$ é a parte real da condição de dispersão do problema contínuo. Nota-se que, na realidade, a expressão na Eq. (3.21) mede o erro relativo da velocidade de onda $-\alpha/\beta$, introduzido pelo esquema de discretização, com relação à solução do problema não discretizado. Assim, levando em consideração as expressões em Eq. (3.4), (3.15) e (3.19), podemos escrever o erro de dispersão da discretização DFLD na seguinte forma funcional:

$$\varepsilon_{Disper.}(\phi) = 1 - \frac{\sin \phi}{\phi}, \quad (3.22)$$

onde $\phi \equiv \beta h$ é denominado ângulo de fase. Desde que $\lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{\sin \phi}{\phi} = 1$, então $\varepsilon_{Disper.}(\phi) \rightarrow 0$, sempre que $\phi \rightarrow 0$. O gráfico na Figura 3.2 não apenas demonstra esse fato como também mostra que o erro de dissipação do esquema DFLD se matem limitado, em torno do valor unitário, e tende para esse valor quando ϕ cresce.

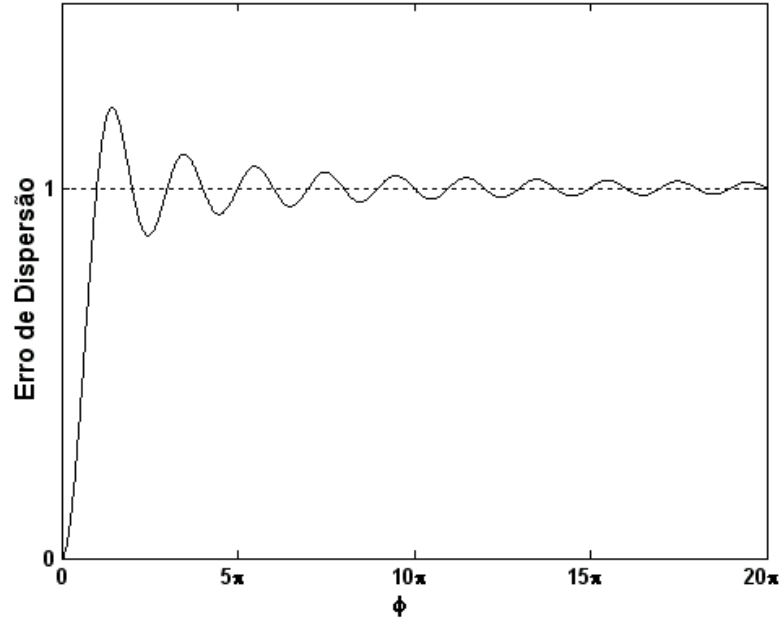


Figura 3.2. Comportamento do erro de dispersão com relação ao ângulo de fase.

Por outro lado, da expressão na Eq. (3.20) notamos que $b(\beta) \geq 0$, mas de Eq. (3.15) temos que $\text{Im}(\omega_{\text{Cont.}}) = -\beta^2 \leq 0$. Portanto, parece razoável medir o erro de dissipação com relação ao valor $-\text{Im}(\omega_{\text{Cont.}})$. Assim, de maneira análoga, definimos o erro de dissipação relativo pela seguinte expressão:

$$\varepsilon_{\text{Dissip.}} = \frac{-\text{Im}(\omega_{\text{Cont.}}) - b}{-\text{Im}(\omega_{\text{Cont.}})}. \quad (3.23)$$

Devido às Eq. (3.4) (3.15) e (3.20), a relação na Eq. (3.23) pode ser escrita na seguinte forma funcional:

$$\varepsilon_{\text{Dissip.}}(\phi) = 1 - \frac{2}{\phi^2}(1 - \cos \phi). \quad (3.24)$$

Desde que $\lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{2}{\phi^2}(1 - \cos \phi) = 1$, notamos que $\lim_{\phi \rightarrow 0} \varepsilon_{Dissp.}(\phi) = 0$. Mais claramente, o comportamento do erro de dissipação é mostrado no gráfico na Figura 3.3.

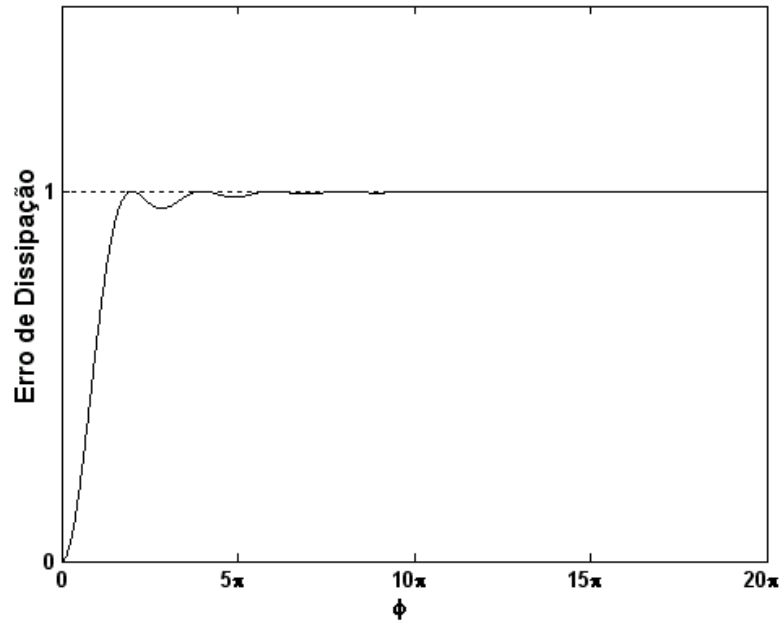


Figura 3.3. Comportamento do erro de dissipação com relação ao ângulo de fase.

Os fatos acima demonstram o seguinte resultado:

Proposição 3.1: Para uma grade suficientemente fina, típica de um escoamento dominado pelo fenômeno de advecção, onde $h = \frac{2}{\lambda} \ll 1$, o esquema de discretização espacial DFLD é essencialmente não dispersivo e não dissipativo.

3.4 Dedução Alternativa

A seguinte proposição apresenta uma dedução alternativa para o esquema DFLD, onde mostramos que esse esquema pode ser obtido usando-se diferenças centradas de segunda ordem.

Proposição 3.2: O esquema DFLD é um caso particular do esquema de diferenças finitas centradas para a equação de advecção-dispersão.

Prova: Considere as seguintes aproximações (de ordem h_i^2):

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial x} \cong \frac{1}{2h_i} [C_{i+1}(t) - C_{i-1}(t)] \quad (3.25)$$

e

$$\frac{\partial^2 C_i(t)}{\partial x^2} \cong \frac{1}{h_i^2} [C_{i+1}(t) - 2C_i(t) + C_{i-1}(t)]. \quad (3.26)$$

A substituição de Eq. (3.25) e (3.26) na Eq. (2.6) fornece o conhecido esquema de diferenças centradas de segunda ordem

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = \frac{C_{i+1}(t) - 2C_i(t) + C_{i-1}(t)}{h_i^2} - \lambda_i \frac{C_{i+1}(t) - C_{i-1}(t)}{2h_i} - \dot{\lambda}_i C_i(t); \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.27)$$

o qual pode ser escrito como segue:

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = \left(\frac{1}{h_i^2} - \frac{\lambda_i}{2h_i} \right) C_{i+1} - \frac{2}{h_i^2} C_i + \left(\frac{1}{h_i^2} + \frac{\lambda_i}{2h_i} \right) C_{i-1} - \dot{\lambda}_i C_i(t). \quad (3.28)$$

Agora é fácil ver que a substituição da condição $h_i = 2/\lambda_i$ (Eq. 3.4) na Eq. (3.28) resulta no esquema DFLD descrito em Eq. (3.5), o que conclui a demonstração.

Observando a Figura 2.1, notamos que a solução analítica aproximada descrita na Eq. (2.10) não apresenta nenhum tipo de oscilação. Infelizmente, como é bem conhecido, a discretização espacial por diferenças centradas pode, dependendo da escolha dos valores de

h_i , originar oscilações numéricas na solução da equação de advecção-dispersão, veja Siemieniuchi e Gladwell (1978). Além disso, como demonstrado por Price et al. (1966), independentemente da discretização espacial, técnicas de discretização temporal (mesmo implícitas) geralmente usadas no lado esquerdo de Eq. (3.27) também contribuem, por si só, para esse fenômeno de oscilação numérica. Tais fatos constituem aspectos que tornam a escolha do método de diferenças centradas, muitas vezes, rejeitada nas aplicações práticas. Como enfatizamos na Introdução, atualmente pode-se encontrar na literatura um grande desenvolvimento e emprego de esquemas centrais não oscilatórios. Entre os mais recentes estão os métodos de Nessyahu e Tadmor (1990), Kurganov e Tadmor (2000), Levy, Puppo e Russo (2000), Kurganov e Levy (2000), e muitos dos artigos citados nesses trabalhos, os quais foram desenvolvidos no âmbito das leis de conservação a partir do esquema LxF de Friedrichs e Lax (1971).

Além de ter a boa propriedade de ser não dispersivo e não dissipativo, mostraremos, entre outros aspectos, que a escolha de h_i definida na Eq. (3.4) faz do método DFLD um esquema central não oscilatório com relação à discretização espacial. Questões relacionadas com a estabilidade numérica, oscilações e dispersões provenientes de possíveis discretizações temporais serão contornadas aqui com o emprego de técnicas envolvendo exponenciais de matrizes.

3.5 Resolução Temporal com Exponencial de Matrizes

A discretização espacial DFLD indicada nas Eqs. (3.7) e (3.8) dá origem a um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) lineares. De fato, denotando por $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ o vetor dos pontos internos da grade, esse sistema pode ser descrito na seguinte forma vetorial:

$$\frac{d \mathbf{C}(\mathbf{x}, t)}{dt} = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \mathbf{C}(t) + \mathbf{b}(\mathbf{x}), \quad (3.29)$$

onde $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = (C_1(t), \dots, C_n(t))^T$. O vetor $\mathbf{b} \in \Re^n$ é dado por $\mathbf{b}(\mathbf{x}) = ((\lambda_1^2/2), 0, \dots, 0)^T$, e

$\mathbf{A}(\mathbf{x}) \in \Re^{n \times n}$ é uma matriz bidiagonal inferior, independente de t , definida por

$$A_{i,j} = \begin{cases} -(\dot{\lambda}_i + \lambda_i^2/2) & ; \text{ se } j = i, \text{ com } i = 1, \dots, n \\ \lambda_i^2/2 & ; \text{ se } j = i-1, \text{ com } i = 2, \dots, n \\ 0 & ; \text{ em caso contrário.} \end{cases} \quad (3.30)$$

A condição inicial para o sistema de EDOs na Eq. (3.29) decorre de Eq. (2.7), e possui a seguinte forma vetorial:

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{g}(\mathbf{x}), \quad (3.31)$$

onde $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = (g(x_1), \dots, g(x_n))^T$.

O problema de valor inicial descrito na Eq. (3.29) e (3.31) pode ser resolvido usando-se técnicas envolvendo exponencial de matrizes. Dado $\mathbf{A} \in \Re^{n \times n}$, classicamente a exponencial de uma matriz $t\mathbf{A}$ é definida por meio da série infinita

$$e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{I} + t\mathbf{A} + \frac{t^2}{2!} \mathbf{A}^2 + \dots + \frac{t^m}{m!} \mathbf{A}^m + \dots, \quad (3.32)$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade. É bem conhecido que essa série de matrizes pode, em casos favoráveis, ser usada para se obter uma solução de sistemas de EDOs lineares. O resultado clássico que garante a convergência da série na Eq. (3.32), e sua utilização na resolução do problema de valor inicial de interesse aqui, é relembrado na proposição seguinte. Para mais detalhes o leitor pode consultar o texto clássico de Bellman (1960), por exemplo.

Proposição 3.3: A série de matrizes definida na Eq. (3.32) existe para toda matriz $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$, com um valor fixado de t , e para todo t , com uma matriz fixada $\mathbf{A} \in \mathfrak{R}^{n \times n}$. Tal série converge uniformemente em qualquer região finita de valores de t . Além disso, se $\mathbf{A}$ é uma matriz inversível, então a solução do problema de valor inicial descrito na Eq. (3.29) e (3.31) existe, é única, e possui a seguinte forma vetorial:

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} + e^{t\mathbf{A}} (\mathbf{g} + \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}). \quad (3.33)$$

Apesar dessa solução analítica ser bastante atrativa, duas questões centrais surgem a respeito da utilização numérica da fórmula indicada na Eq. (3.32). Uma delas é certamente a determinação da matriz inversa $\mathbf{A}^{-1}$ e a outra, quase sempre mais intrigante, trata-se do cálculo da exponencial $e^{t\mathbf{A}}$, que muitas vezes necessita ser feito de forma truncada, aceitando-se uma soma finita incluindo apenas m parcelas. Felizmente esta aproximação truncada não é a única maneira de se estimar a exponencial de matrizes. De fato, como é bem conhecido, o desenvolvimento de métodos analíticos ou computacionais para o cálculo da exponencial de matrizes é, certamente há mais de três décadas, uma ativa área de pesquisa envolvendo aspectos teóricos e práticos relacionados com a teoria de matrizes e com a análise numérica em geral, com aplicações na física, engenharia, sistemas dinâmicos e problemas de controle ótimo, entre outros. Tais métodos, muitas vezes apropriados para problemas específicos, são revistos de forma crítica no artigo clássico de Moler e Van Loan (1978), o qual tem sido recentemente revisado (Moler e Van Loan, 2003). Métodos numéricos envolvendo

aproximações racionais, como a de Chebyshev, remontam ao trabalho pioneiro de Cody, Meinardus e Vargas (1969), ou às celebres aproximações de Padé, veja Fair e Luke (1970), e Higham (2001), por exemplo. Algoritmos baseados em aproximações polinomiais em espaços de Krylov têm experimentado grande crescimento nos últimos anos, não apenas nas aplicações (Nour-Omid, 1989; Gallopoulos e Saad, 1992) como também nos seus aspectos teóricos, Saad (1992), Hochbruck e Lubich (1997), Stewart e Leyk (1996). Sem dúvida nenhuma, o pacote computacional ExpoKit, desenvolvido por Sidje (1998), é hoje em dia a maior referência para o cálculo numérico de exponenciais de matrizes. O ExpoKit possui um variedade de rotinas, incluindo muitos dos algoritmos referidos acima, e tem a capacidade de calcular a exponencial de matrizes densas ou esparsas, grandes ou pequenas. Esse software possui duas versões, uma em FORTRAN e outra em MATLAB, que podem ser obtidas livremente no endereço eletrônico <http://www.maths.uq.edu.au/expokit>.

No presente estudo, devido à simplicidade da matriz $\mathbf{A}$, não apenas $\mathbf{A}^{-1}$ é facilmente determinada, mas também a exponencial $e^{t\mathbf{A}}$ pode ser calculada de forma eficiente e acurada, sem envolver erros decorrentes do truncamento da série de matrizes. De fato, como a matriz $\mathbf{A}$ na Eq. (3.30) é bidiagonal inferior, então os seus autovalores são os elementos que aparecem na diagonal principal, e o seu determinante é o produto desses valores. Desde que, para todo $x \in (0,1)$, $\lambda(x)$ é uma função estritamente positiva não-decrescente, então $\dot{\lambda}(x_i) + (\lambda(x_i)^2/2) > 0$. Assim, nenhum desses autovalores é nulo, e a matriz $\mathbf{A}$ é inversível, sendo sua inversa uma matriz triangular inferior relativamente fácil de ser calculada. Com isso em mente, é fácil mostrar o seguinte resultado:

Proposição 3.4: Se $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ é o vetor dos nós da grade de discretização, então todos os autovalores da matriz $\mathbf{A}(\mathbf{x}) \in \Re^{n \times n}$ originada pelo esquema DFLD são números reais,

dados por $\zeta_i \equiv -[\dot{\lambda}_i + (\lambda_i^2/2)]$; $i = 1, \dots, n$. Além disso, a matriz $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ é inversível e a sua inversa $\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})$ é uma matriz triangular inferior cujos elementos não nulos são dados por

$$A_{i,i}^{-1} = -\frac{1}{(\dot{\lambda}_i + \lambda_i^2/2)}; \quad \forall \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.34)$$

$$A_{i+k,i}^{-1} = -\frac{\prod_{j=i}^{i+k-1} (\lambda_{j+1}^2/2)}{\prod_{j=i}^{i+k} [(\dot{\lambda}_j + \lambda_j^2/2)]}; \quad \forall \quad k = 1, \dots, n-1 \text{ e } i = 1, \dots, n-k. \quad (3.35)$$

Em particular, se a função positiva $\lambda(x)$ é uma constante λ , para todo $x \in (0,1)$, então a matriz $\mathbf{A}$ possui seus autovalores todos iguais a $\zeta \equiv -\lambda^2/2$. Neste caso, $\mathbf{A}^{-1}$ é a matriz triangular inferior dada por

$$A_{i,j}^{-1} = \begin{cases} -\lambda^2/2 & ; \text{ se } i \geq j \\ 0 & ; \text{ se } i < j. \end{cases} \quad (3.36)$$

Observando a solução descrita na Eq. (3.33), notamos que não há necessidade de calcularmos explicitamente a matriz inversa $\mathbf{A}^{-1}$. De fato, basta determinarmos o vetor $\mathbf{u} \equiv \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$. No caso da discretização DFLD, isto pode ser feito escrevendo-se inicialmente a última equação na forma equivalente $\mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{b}$, notando que o sistema linear resultante é muito fácil de ser resolvido, pois a matriz dos coeficientes é bidiagonal inferior, e o vetor dos termos independentes possui, com exceção do seu primeiro elemento, todos os termos iguais a zero. Isto revela que o vetor $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_n)^T$ tem a seguinte forma:

$$u_i = -\prod_{k=1}^i \frac{(\lambda_k^2/2)}{(\dot{\lambda}_k + \lambda_k^2/2)}, \quad \forall \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.37)$$

O próximo resultado resume a forma da solução da equação de advecção-dispersão gerada pelo nosso método semi-analítico, para casos onde $\lambda(x)$ é constante para todo $x \in (0,1)$.

Teorema 3.1: Seja $\mathbf{A} \in \Re^{n \times n}$ a matriz resultante da discretização DFLD. Se no intervalo $(0,1)$ a função positiva $\lambda(x)$ é uma constante λ , então a solução do problema de advecção-dispersão discretizado pelo esquema DFLD, ou seja, a solução do problema de valor inicial indicado na Eq. (3.29) e (3.31), existe, é única e pode ser escrita, para todo $t > 0$, na forma

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{1} + e^{-(\lambda^2/2)t} \left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{t^k}{k!} \mathbf{B}^k \right) (\mathbf{g} - \mathbf{1}), \quad (3.38)$$

onde $\mathbf{1} \in \Re^n$ é o vetor $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T$ e $\mathbf{B} \in \Re^{n \times n}$ é uma matriz diagonal inferior definida por

$$B_{i,j} = \begin{cases} \lambda^2/2 & ; \text{ se } j = i-1, \text{ com } i = 2, \dots, n \\ 0 & ; \text{ em caso contrário.} \end{cases} \quad (3.39)$$

Prova: Como $\mathbf{A}$ é inversível, o problema nas Eqs. (3.29) e (3.31) admite a solução mostrada na Eq. (3.33). Desde que $\lambda_i = \lambda = \text{constante}$, $\forall i = 1, \dots, n$, então segue de Eq. (3.37) que

$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = -\mathbf{1}$. Note que o produto das matrizes $-(\lambda^2/2)t\mathbf{I}$ e $t[\mathbf{A} + (\lambda^2/2)\mathbf{I}]$ é comutativo.

Assim, podemos escrever $e^{-(\lambda^2/2)t\mathbf{I}} e^{t[\mathbf{A} + (\lambda^2/2)\mathbf{I}]} = e^{t\mathbf{A}}$, ou de forma equivalente

$$e^{t\mathbf{A}} = e^{-(\lambda^2/2)t\mathbf{I}} \left(\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{t^k}{k!} \mathbf{B}^k \right), \quad (3.40)$$

onde $\mathbf{B} = \mathbf{A} + (\lambda^2/2)\mathbf{I}$. Finalmente, para mostrar que a série na Eq. (3.40) é finita, note que

$\mathbf{B} \in \Re^{n \times n}$ assim definida é (devido à Eq. 3.30) uma matriz diagonal inferior como mostrada na Eq. (3.39). Conseqüentemente, $\mathbf{B}$ é nilpotente com $\mathbf{B}^k = 0$, para todo $k \geq n$. Isso conclui a demonstração.

As potências $\mathbf{B}^k$ de ordem $k = 1, \dots, n-1$, que aparecem na fórmula mostrada em Eq. (3.40), são matrizes do tipo triangular inferior que podem ser determinadas facilmente pela seguinte relação:

$$B_{i,j}^k = \begin{cases} (\lambda^2/2)^k & ; \text{ se } j = i - k, \text{ com } i = k + 1, \dots, n-1 \\ 0 & ; \text{ caso contrário.} \end{cases} \quad (3.41)$$

A expressão mostrada na Eq. (3.38) representa uma solução semi-analítica para o problema de advecção-dispersão descrito nas Eqs. (2.6) – (2.9). Observando essa solução, notamos que a função $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ só poderia apresentar um comportamento oscilatório se o autovalor $\zeta \equiv -\lambda^2/2$ fosse complexo. Como esse não é o caso, então podemos afirmar que, para $\lambda(x)$ constante, a discretização espacial DFLD e a técnica de exponenciais de matrizes utilizada aqui não introduzem nenhuma oscilação numérica na solução da equação de advecção-dispersão, o que está inteiramente coerente com a solução analítica aproximada mostrada na Figura. 2.1. Além disso, decorre também da solução na Eq.(3.38) que $\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{1}$.

O método desenvolvido acima será denominado de DFLD-*exp*.

É conhecido que discretizações temporais podem introduzir dissipações na solução numérica da equação de advecção-dispersão. De fato, métodos explícitos, cuja estabilidade numérica é alcançada sob rigorosas limitações no passo de tempo, costumam introduzir severas dissipações numéricas, veja Kurgonov e Tadmor (2000). Como aqui a resolução temporal é feita de forma analítica através de exponenciais de matrizes, então podemos afirmar que o esquema desenvolvido no presente trabalho possui as propriedades referidas no teorema abaixo.

Teorema 3.2. O método DFLD-*exp* é:

- (i) Um esquema central de segunda ordem;

- (ii) Incondicionalmente estável;
- (iii) Não oscilatório;
- (iv) Essencialmente não dispersivo;
- (v) Essencialmente não dissipativo.

A solução na Eq. (3.38) é válida para $\lambda = \text{constante}$, o que certamente ocorre para escoamentos unidimensionais incompressíveis, onde a velocidade se mantém a mesma para todo $0 < x < 1$. No que segue estenderemos o método DFLD-*exp* para casos onde $\lambda \neq \text{constante}$. Como a exponencial de matrizes sofre da anomalia de não preservar a boa propriedade básica “ $e^{a+b} = e^a e^b$ ” (a menos que “ $ab = ba$ ”!), veja por exemplo Bellman (1960), então essa extensão não é uma mera repetição das idéias apresentadas na demonstração do Teorema 3.1. Na realidade esse fato, relacionado com a necessária comutatividade do produto de “ a ” por “ b ”, torna a teoria de exponencial de matrizes intrigante e desafiadora.

Assim sendo, começaremos analisando a situação onde a matriz $\mathbf{A}$, decorrente da discretização DFLD, possui todos os seus autovalores distintos. O seguinte resultado é uma das ferramentas utilizadas aqui para a extensão da metodologia DFLF-*exp*.

Lema 3.1. Seja $\mathbf{A}$ uma matriz bidiagonal inferior dada por

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} b_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & & & & \\ & a_3 & \ddots & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & \\ & & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

Se $b_i \neq b_j$, para todo $i, j = 1, \dots, n$, então a exponencial $\mathbf{H}(t) = e^{t\mathbf{A}}$ é uma matriz triangular inferior da forma

$$e^{t\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} e^{tb_1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_{2,1} & e^{tb_2} & 0 & \dots & 0 \\ h_{3,1} & h_{3,2} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ h_{n-1,1} & h_{n-1,2} & \dots & & 0 \\ h_{n,1} & h_{n,2} & \dots & h_{n,n-1} & e^{tb_n} \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

onde os elementos da primeira subdiagonal são determinados por

$$h_{j+1,j} = \frac{a_{j+1}(e^{tb_j} - e^{tb_{j+1}})}{b_j - b_{j+1}}; \quad \forall \quad j = 1, \dots, n-1, \quad (3.44)$$

e os elementos que constituem as demais subdiagonais são calculados pela seguinte fórmula recursiva:

$$h_{j+k,j} = \frac{a_{j+k} h_{j+k-1,j} - a_{j+1} h_{j+k,j+1}}{b_j - b_{j+k}}, \quad \forall \quad k = 2, \dots, n-1 \text{ e } j = 1, \dots, n-k. \quad (3.45)$$

Prova: Utilizando a expansão descrita Eq. (3.32), é fácil ver que a matriz $e^{t\mathbf{A}}$ possui a seguinte forma:

$$e^{t\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 + tb_1 + \frac{t^2}{2!} b_1^2 + \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_{2,1} & 1 + tb_2 + \frac{t^2}{2!} b_2^2 + \dots & 0 & \dots & 0 \\ h_{3,1} & h_{3,2} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ h_{n-1,1} & h_{n-1,2} & \dots & & 0 \\ h_{n,1} & h_{n,2} & \dots & h_{n,n-1} & 1 + tb_n + \frac{t^2}{2!} b_n^2 + \dots \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

Assim, $\mathbf{H}(t) = e^{t\mathbf{A}}$ é uma matriz triangular inferior com elementos da diagonal principal dados por $h_{i,i} = e^{tb_i}$, para todo $i = 1, \dots, n$. Para demonstrar as relações na Eq. (3.44) e (3.45), consideramos inicialmente a identidade matricial:

$$\mathbf{A} e^{t\mathbf{A}} = e^{t\mathbf{A}} \mathbf{A}. \quad (3.47)$$

Em seguida, usando as matrizes descritas nas Eqs. (3.42) e (3.46), efetuamos as operações de multiplicação de matrizes indicadas em ambos os lados de Eq. (3.47). Isto resulta num sistema de equações cujas variáveis são os termos procurados. Assim, igualando os elementos das primeiras subdiagonais de ambos os lados de Eq. (3.48), obtemos a relação indicada na Eq. (3.44). Finalmente, utilizando, de maneira coerente, a igualdade existente entre cada termo das demais subdiagonais, chega-se facilmente à fórmula de recorrência mostrada na Eq. (3.45).

Explorando a estrutura esparsa da matriz $\mathbf{A}$, o lema acima resume uma maneira eficiente de calcular a exponencial $\mathbf{H}(t) = e^{t\mathbf{A}}$ de qualquer matriz bidiagonal que possui todos os termos da diagonal principal suficientemente distintos. O algoritmo para calcular os elementos, não necessariamente nulos, de $e^{t\mathbf{A}}$ é detalhado a seguir.

Algoritmo 3.3 (Cálculo de $\mathbf{H}(t) = e^{t\mathbf{A}}$)

Dados: $\mathbf{A}$ bidiagonal como na Eq. (3.42), onde $b_i - b_j \neq 0 \quad \forall \quad i, j = 1, \dots, n$.

Passo 1 : Faça $h_{i,i} = e^{tb_i}$, para todo $i = 1, \dots, n$.

Passo 2: Faça $h_{j+1,j} = \frac{a_{j+1}(e^{tb_j} - e^{tb_{j+1}})}{b_j - b_{j+1}}$, $j = 1, \dots, n-1$.

Passo 3 : Para $k = 2, \dots, n-1$ faça,

Para $j = 1, \dots, n-k$ faça,

$$h_{j+k,j} = \frac{a_{j+k} h_{j+k-1,j} - a_{j+1} h_{j+k,j+1}}{b_j - b_{j+k}}.$$

Teorema 3.3: Seja $\mathbf{A} \in \Re^{n \times n}$ a matriz resultante da discretização espacial DFLD. Suponha que no intervalo $(0,1)$ a função positiva $\lambda(x)$ não é necessariamente constante, mas $\lambda_i + \lambda_i^2/2 \neq \lambda_j + \lambda_j^2/2$ para todo $i, j = 1, \dots, n$. Então o método DFLD-*exp* pode ser estendido

para a resolução do problema de advecção-dispersão, com velocidade não constante, gerando a seguinte solução semi-analítica:

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{u} + \mathbf{H}(t)(\mathbf{g} + \mathbf{u}), \quad (3.48)$$

onde o vetor $\mathbf{u} \in \Re^n$ é definido na Eq.(3.37) e $\mathbf{H}(t) = (h_{i,j}) \in \Re^{n \times n}$ é uma matriz triangular inferior determinada pelo Algoritmo 3.3, com a condição $b_i = -(\dot{\lambda}_i + \lambda_i^2/2)$, para todo $i = 1, \dots, n$, e $a_j = \lambda_j^2/2$, para todo $j = 2, \dots, n$.

A seguir analisaremos a possibilidade da matriz $\mathbf{A}$ na Eq. (3.30) possuir autovalores com multiplicidade algébrica maior do que 1 e estritamente menor do que n . Para tal, usaremos no presente trabalho a norma 2 de matrizes, ou seja, dado uma matriz $\mathbf{A} \in \Re^{n \times n}$ consideraremos $\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|$, onde $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$. Neste caso, a extensão do método DFLD-exp será feita de maneira aproximada.

Lema 3.2 (*Fórmula de Trotter*): Seja $\mathbf{A}$ uma matriz quadrada. Se $\mathbf{A} = \mathbf{P} + \mathbf{Q}$, então

$$e^{t\mathbf{A}} = \lim_{m \rightarrow +\infty} \left(e^{t\mathbf{P}/m} e^{t\mathbf{Q}/m} \right)^m \quad (3.49)$$

Prova: (Trotter, 1959).

O resultado na Eq. (3.49) sugere a aproximação de Trotter:

$$e^{t\mathbf{A}} \cong \left(e^{t\mathbf{P}/m} e^{t\mathbf{Q}/m} \right)^m, \quad (3.50)$$

a qual não depende da comutatividade do produto entre $\mathbf{P}$ e $\mathbf{Q}$.

Como indicado por Moler e Van Loan (2003), a aproximação de Trotter é apropriada para uso prático principalmente se as exponenciais de matrizes $e^{\mathbf{P}}$ e $e^{\mathbf{Q}}$ puderem ser calculadas de forma acurada e eficiente, como é o caso do presente problema.

O erro cometido na aproximação de Trotter foi estimado por Moler e Van Loan (2003).

Lema 3.3: Seja $\mathbf{A}$ uma matriz quadrada. Se $\mathbf{A} = \mathbf{P} + \mathbf{Q}$, então

$$\left\| e^{t\mathbf{A}} - \left(e^{t\mathbf{P}/m} e^{t\mathbf{Q}/m} \right)^m \right\| \leq \frac{t^2 \|\mathbf{PQ} - \mathbf{QP}\|}{2m} e^{t(\|\mathbf{P}\| + \|\mathbf{Q}\|)}. \quad (3.51)$$

Prova: (Moler e Van Loan, 2003).

O resultado seguinte resume a nossa abordagem para estender o método DFLD-*exp* para o caso geral.

Teorema 3.4: Seja $\mathbf{A}$ a matriz decorrente da discretização DFLD e $\mathbf{A} = \mathbf{P} + \mathbf{Q}$ uma decomposição de $\mathbf{A}$, onde $\mathbf{Q} = \text{diag}(-(\dot{\lambda}_1 + \lambda_1^2/2), \dots, -(\dot{\lambda}_n + \lambda_n^2/2))$ é uma matriz diagonal e $\mathbf{P}$ é a seguinte matriz diagonal inferior

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ \lambda_2^2/2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_3^2/2 & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n^2/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

Então, dado um número inteiro $m > 0$, a solução do problema de advecção-dispersão (Eq. 2.6 – 2.9) decorrente da metodologia DFLD-*exp* pode ser aproximada por:

$$\tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{u} + \left[\left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{t^k}{k!} \left[\frac{\mathbf{P}}{m} \right]^k \right) \text{diag} \left(e^{-(\dot{\lambda}_1 + \lambda_1^2/2)t/m}, \dots, e^{-(\dot{\lambda}_n + \lambda_n^2/2)t/m} \right) \right]^m (\mathbf{g} + \mathbf{u}), \quad (3.53)$$

onde o vetor $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^n$ é dado na Eq.(3.37). Além disso, se $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ é a solução definida na Eq. (3.33), então o erro dessa aproximação com relação à norma do vetor $\mathbf{g} + \mathbf{u}$ pode ser estimada, para um dado instante de tempo $t > 0$, por:

$$\frac{\|\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t)\|}{\|\mathbf{g} + \mathbf{u}\|} \leq \frac{t^2 \sqrt{m_3}}{2m} e^{t(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})}, \quad (3.54)$$

onde

$$m_1 = \max \left\{ \left(\lambda_i^2 / 2 \right)^2, \forall i = 2, \dots, n \right\} \quad (3.55)$$

$$m_2 = \max \left\{ \left(\dot{\lambda}_i + \lambda_i^2 / 2 \right)^2; \forall i = 1, \dots, n \right\} \quad (3.56)$$

$$m_3 = \max \left\{ \left(\lambda_i^2 / 2 \right)^2 \left(\dot{\lambda}_{i-1} + \lambda_{i-1}^2 / 2 - \dot{\lambda}_i - \lambda_i^2 / 2 \right)^2, \forall i = 2, \dots, n \right\}. \quad (3.57)$$

Prova: É fácil notar que a expressão na Eq. (3.53) é a aproximação da solução descrita na Eq. (3.33) obtida usando-se a aproximação de Trotter (Eq. 3.50). Para isso, observe que $\mathbf{P}/m$ é uma matriz nilpotente de modo que $e^{t\mathbf{P}/m} = \sum_{k=0}^{n-1} (t^k/k!) [\mathbf{P}/m]^k$ e $e^{t\mathbf{Q}/m}$ é a matriz diagonal indicada na Eq.(3.53). Considerando $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ dado na Eq. (3.33), como a norma 2 de matrizes é consistente, temos $\left\| \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t) \right\| \leq \left\| e^{t\mathbf{A}} - \left(e^{t\mathbf{P}/m} e^{t\mathbf{Q}/m} \right)^m \right\| \left\| \mathbf{g} + \mathbf{u} \right\|$. Assim,

$$\left\| \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t) \right\| / \left\| \mathbf{g} + \mathbf{u} \right\| \leq \left\| e^{t\mathbf{A}} - \left(e^{t\mathbf{P}/m} e^{t\mathbf{Q}/m} \right)^m \right\| \leq \frac{t^2 \left\| \mathbf{PQ} - \mathbf{QP} \right\|}{2m} e^{t(\left\| \mathbf{P} \right\| + \left\| \mathbf{Q} \right\|)}, \quad \text{veja Eq.}$$

(3.51). Para completar a demonstração, dada uma matriz $\mathbf{M} \in \Re^{n \times n}$, lembramos que a norma 2 é tal que $\left\| \mathbf{M} \right\| = (\text{maior autovalor de } \mathbf{M}^T \mathbf{M})^{1/2}$, veja Golub e Van Loan (1996). Dessa forma é fácil verificar que $\left\| \mathbf{P} \right\| = \sqrt{m_1}$, $\left\| \mathbf{Q} \right\| = \sqrt{m_2}$ e $\left\| \mathbf{PQ} - \mathbf{QP} \right\| = \sqrt{m_3}$, onde m_1 , m_2 e m_3 são definidos na Eq. (3.55)-(3.57).

Proposição 3.5: A aproximação de Trotter não introduz instabilidade numérica nem oscilações na solução obtida pela (extensão da) metodologia DFLD-*exp*.

Prova: Observando a solução na Eq. (3.53), notamos que:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{u}, \quad \forall m > 0. \quad (3.58)$$

Assim, $\lim_{t \rightarrow +\infty} \left\| \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t) \right\| < +\infty$. Portanto, a aproximação de Trotter não causa problemas de instabilidade de natureza numérica. Além disso, como antes, a expressão na Eq. (3.53) garante

que a solução aproximada $\tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t)$ só apresentaria oscilações se a matriz $\mathbf{A}$ possuísse autovalores complexos, o que não é o caso.

O próximo teorema descreve o comportamento assintótico da solução $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$.

Teorema 3.5: Se $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ é a solução verdadeira do problema de valor inicial decorrente da discretização DFLD (Eq. 3.29 e 3.31), então

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{u}, \quad (3.59)$$

onde $\mathbf{u} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$.

Prova: Para cada instante de tempo $t > 0$, sem perda de generalidade, podemos considerar o parâmetro m na aproximação de Trotter como sendo da forma $m = [2^{e^t}]$, onde $[]$ denota a função maior inteiro. Assim, segue de Eq. (3.54) que

$$\frac{\|\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t)\|}{\|\mathbf{g} + \mathbf{u}\|} \leq \frac{t^2 \sqrt{m_3}}{2[2^{e^t}]} e^{t(\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2})}. \quad (3.60)$$

Tomando o limite na desigualdade indicada na Eq. (3.60), quando $t \rightarrow +\infty$, obtemos

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t)\| = 0. \quad (3.61)$$

Combinando Eq. (3.61) com Eq.(3.58), concluímos que $\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{u}$.

Corolário 3.1: Independente da multiplicidade dos autovalores da matriz $\mathbf{A}$ na Eq. (3.30), a solução do problema de advecção-dispersão calculada pela metodologia DFLD-*exp*, ou as soluções calculadas por qualquer uma das suas extensões desenvolvidas até aqui (as quais denotaremos genericamente por $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$), são tais que

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{(\lambda_1^2/2)}{(\dot{\lambda}_1 + \lambda_1^2/2)}, \prod_{k=1}^2 \frac{(\lambda_k^2/2)}{(\dot{\lambda}_k + \lambda_k^2/2)}, \dots, \prod_{k=1}^n \frac{(\lambda_k^2/2)}{(\dot{\lambda}_k + \lambda_k^2/2)} \right)^T. \quad (3.62)$$

Prova: Esse fato é uma consequência direta da demonstração do Teorema 3.5, do resultado na Eq.(3.58) e da definição de $\mathbf{u} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ na Eq. (3.37).

4 EXEMPLOS NUMÉRICOS

Resoluções de exemplos numéricos são importantes para a comprovação dos resultados teóricos desenvolvidos no presente trabalho. Em tais exemplos, consideraremos soluções do problema de advecção-dispersão obtidas pela metodologia DFLD-*exp* em situações que podem ser consideradas próximas daquelas de interesse prático. Assim, na concordância com as técnicas de exponencial de matrizes utilizadas aqui, dividiremos os exemplos estudados na três partes: (i) quando os valores dos números de Peclet forem iguais na todos os pontos da grade, (ii) quando todos esses valores forem distintos e (iii) quando, de forma geral, os números de Peclet ao longo da grade possuírem ou não multiplicidade.

Os exemplos deste capítulo serão também resolvidos utilizando-se o esquema clássico de diferenças finitas centradas, com uma discretização temporal totalmente implícita. A finalidade é a de comparar as soluções numéricas geradas pelo método clássico com aquelas obtidas pelo esquema DFLD-*exp*.

4.1 Exemplos com Números de Peclet Constantes

Se o número de Peclet é igual na todo o domínio, ou seja, se $\lambda(x) = \text{constante}$ para todo $x \in (0, 1)$, então os autovalores da matriz $\mathbf{A}$ na Eq. (3.29) são todos iguais. Neste caso, uma solução semi-analítica para o problema de advecção-dispersão pode ser calculada conforme indicado no Teorema 3.1.

Se as condições iniciais são nulas, isto é, se $g(x) = 0$ para todo $x \in (0, 1)$, a solução referida acima pode ser comparada com a solução analítica aproximada descrita na Eq. (2.10). Assim sendo, na Figura 4.1 é feita uma comparação entre a solução semi-analítica construída pelo método DFLD-*exp* e a solução analítica aproximada, para três instantes diferentes. Na Figura 4.1-(a) exibimos soluções para $\lambda = 10$, com os seguintes tempos adimensionais: $t_1 = 0,03$, $t_2 = 0,06$ e $t_3 = 0,09$, enquanto que na Figura 4.1-(b) mostramos soluções obtidas para $\lambda = 100$, com $t_1 = 0,002$, $t_2 = 0,004$ e $t_3 = 0,006$.

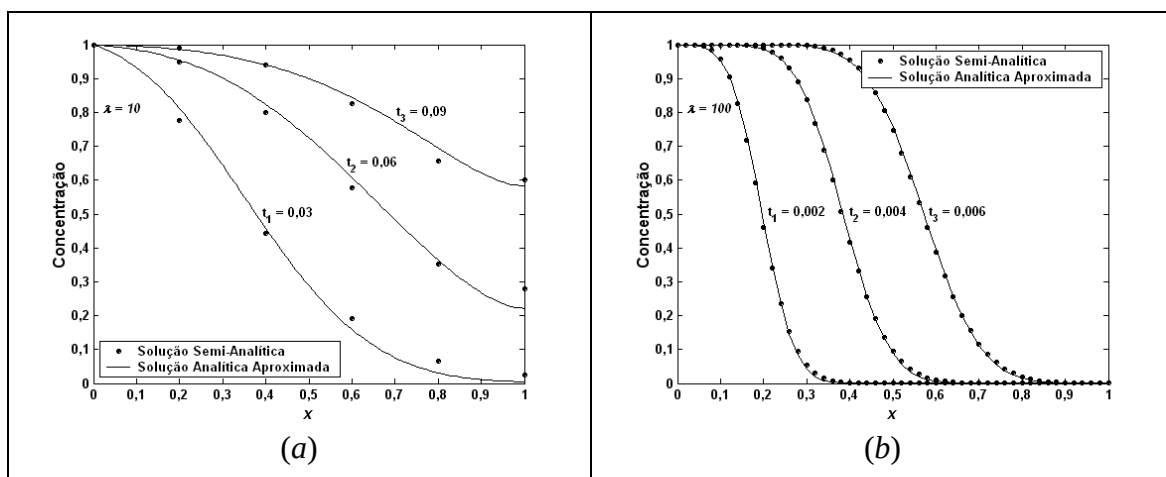


Figura 4.1. Comparação com a solução analítica aproximada para dois valores de λ .

Conforme a relação descrita na Eq. (3.4), o espaçamento da grade diminui quando λ cresce. Portanto, no primeiro caso, a grade possui apenas seis pontos. No segundo caso, o valor do número de Peclet mais elevado define uma grade com 51 pontos. Isto justifica a excelente concordância observada na Figura 4.1-(b), para todos os valores de t .

O erro relativo na norma 2, dado por

$$\varepsilon_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (C_i^{anl.} - C_i^{num.})^2}{\sum_{i=1}^n (C_i^{anl.})^2}}, \quad (4.1)$$

é usado nestes trabalho. Como pode ser visto na Tabela 4.1, a comparação com a solução analítica mostra numericamente que a solução obtida pelo método DFLD-*exp* resulta em erros pequenos, mesmo em casos onde a grade é relativamente grossa. A Tabela 4.1 comprova também que há uma diminuição substancial do erro ε_2 , quando a grade é refinada.

Tabela 4.1. Erro relativo na norma 2 para dois valores de λ na três diferentes tempos.

<i>tempo</i>	<i>Erro relativo na norma 2 para $\lambda = 10$ (6 pontos na grade)</i>	<i>Erro relativo na norma 2 para $\lambda = 100$ (51 pontos na grade)</i>
t_1	0,0257	0,0060
t_2	0,0174	0,0051
t_3	0,0088	0,0051

As soluções, desses mesmos problemas testes, obtidas com o método clássico são mostradas na Figura 4.2. Na parte (a) da Figura 4.2 temos soluções para $\lambda = 10$ e $t = 0,03$, utilizando três diferentes valores para os espaçamentos da grade. Nos resultados mostrados na Figura 4.2-(b), utilizamos $\lambda = 100$ e $t = 0,004$, com as mesmas três grades.

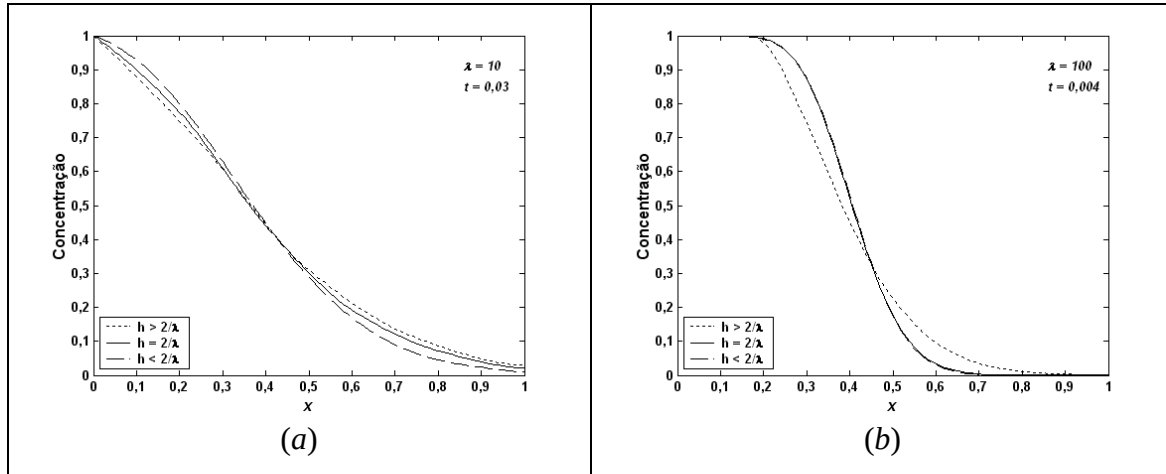


Figura 4.2. A influência da escolha de h nas soluções pelo método clássico.

Observando a Figura 4.2 vemos claramente a influência da escolha de h na solução numérica. De fato, podemos notar que a escolha de uma grade com espaçamento $h > 2/\lambda$ provoca dispersão numérica na solução produzida pelo método clássico. Portanto, tais resultados confirmam que uma escolha não apropriada do espaçamento da grade deve certamente fornecer soluções numéricas fisicamente incorretas para a equação de advecção-dispersão, o que não ocorre com o esquema DFLD.

As soluções na Figura 4.2 foram obtidas com uma discretização temporal com 100 pontos ao longo do eixo t , considerada ótima para essa classe de problemas. A seguir, a Figura 4.3 mostra a influência da escolha de Δt nos resultados gerados pelo método clássico, onde agora consideramos o espaçamento ótimo $h = 2/\lambda$.

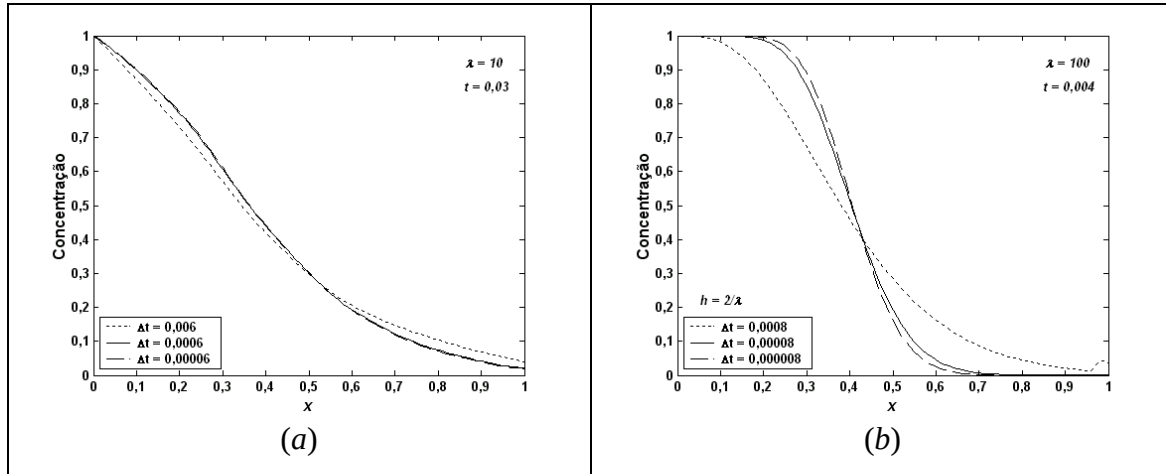


Figura 4.3. A influência da escolha de Δt nos resultados do método clássico.

É pouco conhecido que uma escolha de Δt (de valor relativamente pequeno) possa influenciar nos resultados obtidos por um esquema totalmente implícito. No entanto, analisando a Figura 4.3, observamos que de fato o erro provocado pela dispersão numérica diminui conforme diminuimos o passo de tempo.

Para esses problemas, notamos a maior acurácia e robustez do método DFLD-*exp*, o qual nos fornece comprovadamente uma discretização espacial livre de dispersão numérica e uma resolução temporal independente de passos de tempo.

4.2 Exemplos com números de Peclet Distintos

Na muitas situações de interesse prático, o número de Peclet é descrito por uma função estritamente crescente da variável x . Estes casos nos levam a uma matriz $\mathbf{A}$ com todos os autovalores distintos (veja Eq. 3.29). Tais problemas serão resolvidos nesta seção pela metodologia resumida no Teorema 3.3. Lembramos que esse tipo de problema fornece uma grade não-uniforme gerada de acordo com o Algoritmo 3.2.

Utilizando três valores distintos de tempo: $t_1 = 0,015$, $t_2 = 0,05$ e $t_{final} = 0,25$, a Figura 4.4 mostra as soluções obtidas para um campo λ linear crescente, dado por: $\lambda(x) = 10(x + 0,5)$, onde consideramos condições iniciais nulas, isto é, $g(x) = 0$ para todo $x \in (0, 1)$. A função λ assume valores relativamente baixos, por isso observamos que a grade deste exemplo é pouco refinada. Nossos experimentos numéricos comprovam que a curva referente ao instante t_{final} , na Figura 4.4, coincide com a forma da solução quando o problema encontra-se em regime permanente. Como sabemos, a solução $C(t)$ tende para $-u$, quando t cresce (veja o Teorema 3.5).

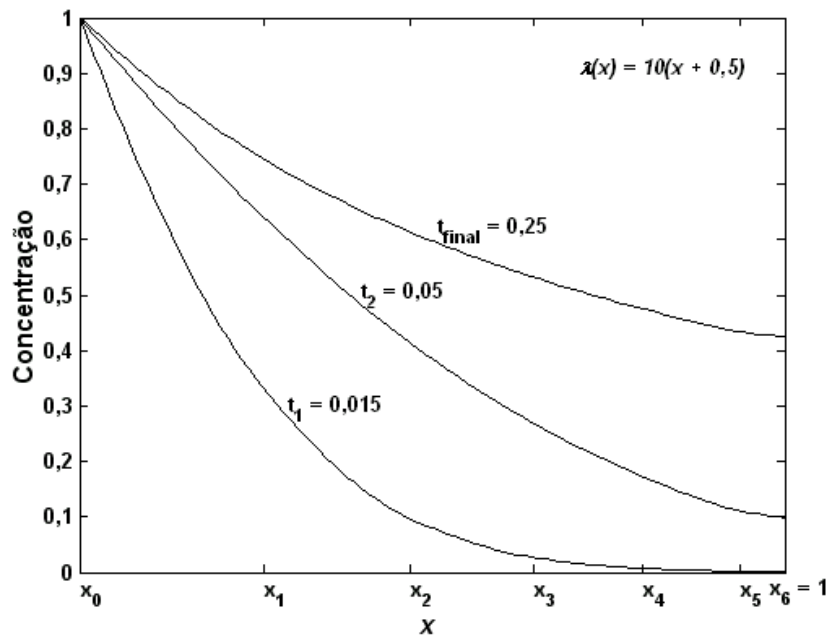


Figura 4.4. Perfis de concentração para números de Peclet crescentes.

Para construir um teste mais severo para o método proposto no presente trabalho, consideraremos a função λ como a mesma anterior, isto é, $\lambda(x) = 10(x + 0,5)$, porém as condições iniciais são agora descritas pela seguinte função descontínua:

$$g(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 1 - 1/\sqrt{2} \\ 1, & \text{se } x \geq 1 - 1/\sqrt{2} \end{cases} \quad (4.2)$$

A Figura 4.3 mostra as soluções obtidas pelo método DFLD-*exp* para três instantes distintos $t_1 = 0,015$, $t_2 = 0,05$ e $t_{final} = 0,25$, onde, como antes, t_{final} refere-se a solução na regime permanente. Como podemos observar, as três soluções mostradas na Figura 4.5 não apenas exibem o comportamento fisicamente esperado como também não mostram nenhum efeito proveniente da descontinuidade inerente da condição inicial. Isso provavelmente ocorre porque cada tempo considerado acima é grande o suficiente para que o processo dispersivo já tenha suavizado a referida descontinuidade.

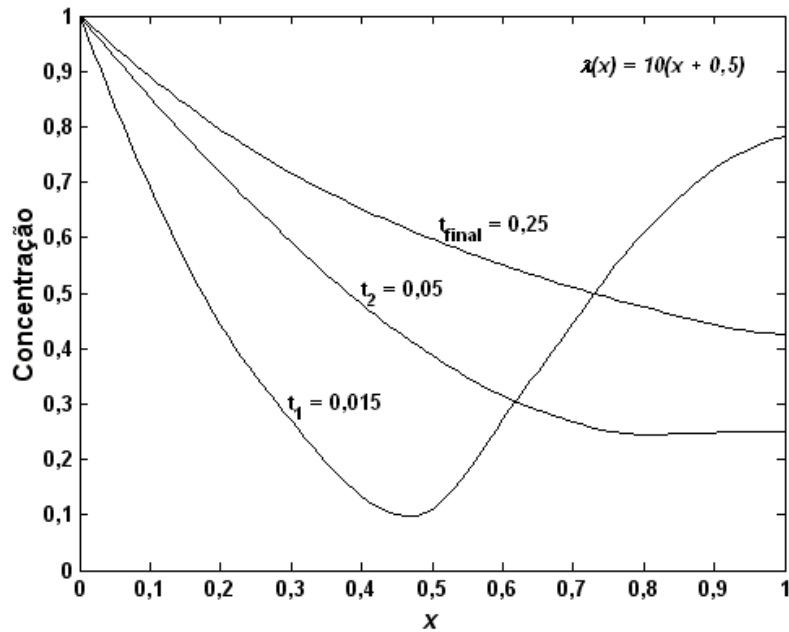


Figura 4.5. Concentrações para as condições iniciais descontínuas.

No entanto, para um instante de tempo muito pequeno, onde a dispersão física ainda não sanou totalmente os efeitos da descontinuidade inicial, devemos notar alguma consequência. De fato, para isso consideramos a função $\lambda(x) = 50(x + 0,5)$, a qual fornece

uma grade mais fina com 27 pontos, e as mesmas condições iniciais descritas pela função descontínua indicada na Eq. (4.2). Assim, podemos observar, como mostrado na Figura 4.6, um pequeno “achatamento” na solução numérica para o instante pequeno $t = 0,005$. Apesar disso, mesmo neste caso extremo, o método DFLD-*exp* é robusto o suficiente de modo a não apresentar oscilações ou severas discontinuidades na sua solução.

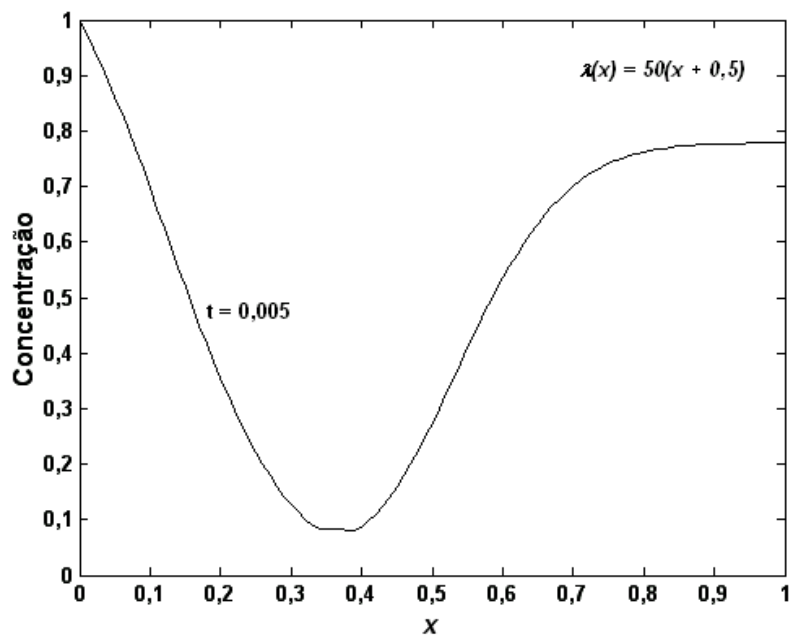


Figura 4.6. Perfil da solução com condições descontínuas para um tempo pequeno.

A Figura 4.7 mostra as soluções geradas pelo método DFLD-*exp* para o problema de advecção-dispersão com $\lambda(x) = 50(x + 0,5)$, para três diferentes instantes de tempo. A Figura 4.7-(a) considera condições iniciais nulas, enquanto que a Figura 4.7-(b) se refere às condições iniciais descritas pela função descontínua dada na Eq. (4.2). Podemos observar que, independente da função que define as condições iniciais, a solução é a mesma no instante t_{final} , quando o escoamento encontra-se em regime permanente.

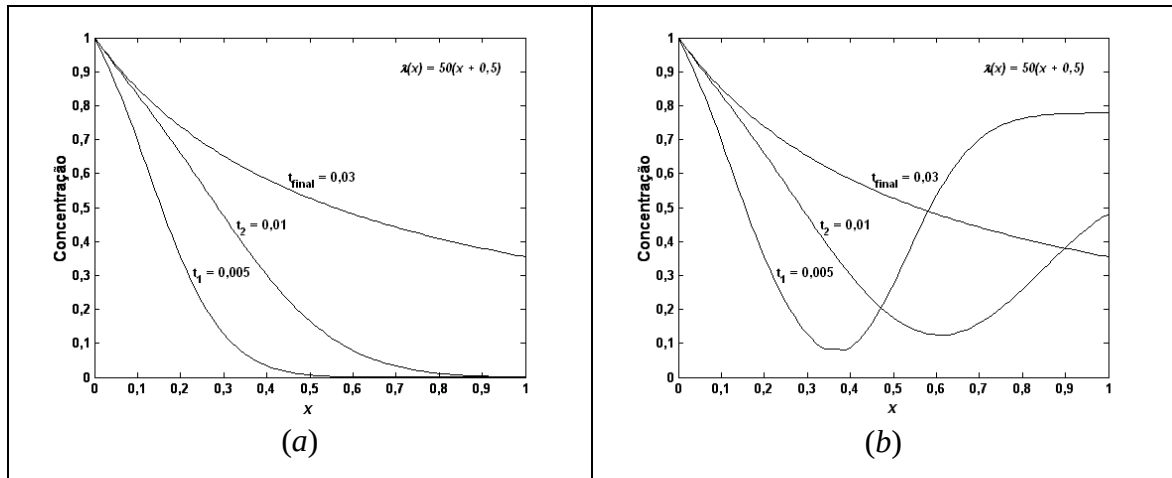


Figura 4.7. Concentrações com condições iniciais nulas (a) e descontínuas (b).

A Figura 4.8 exibe os resultados obtidos pelo método clássico para problemas com $\lambda(x) = 10(x + 0,5)$, em três diferentes tempos. Na Figura 4.8-(a) as condições iniciais são nulas e na (b) são descontínuas. Escolhemos uma grade considerada ideal, com $h_i = 2/\lambda_i$ e 100 pontos ao longo do eixo t .

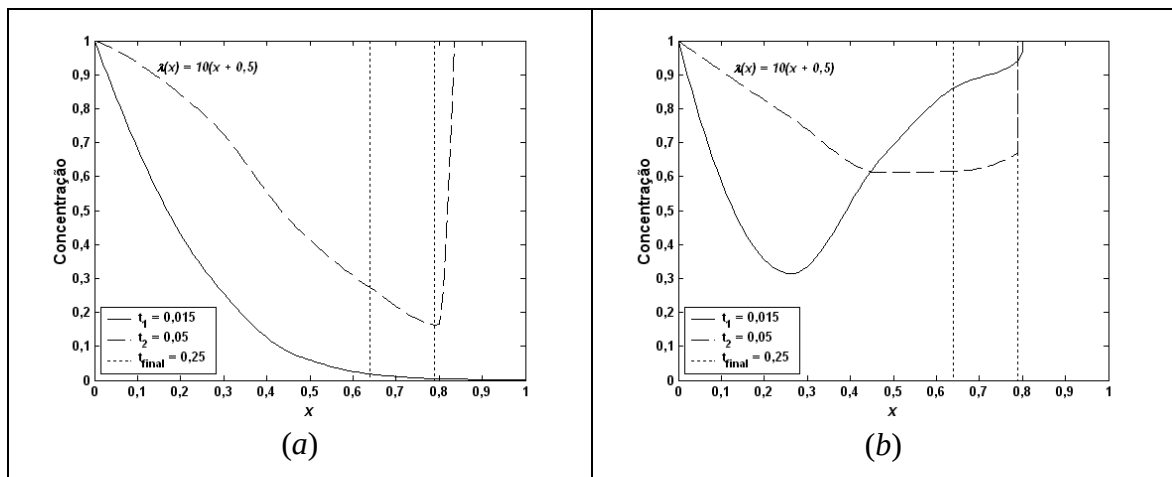


Figura 4.8. Soluções pelo método clássico: condições iniciais nulas (a) e descontínuas (b).

Nesses testes, com características fortemente dominadas pelo fenômeno de convecção, analisando a Figura 4.8 observamos que o método clássico só obtém um resultado considerado razoável no tempo (relativamente pequeno) $t = 0,015$, e com condições iniciais nulas. Nos demais casos, nota-se claramente que as soluções apresentam comportamentos espúrios, incluindo uma nítida tendência a severas oscilações numéricas quando o tempo final cresce. Os erros produzidos não permitem obtenção de valores nem de longe coerentes. Para o tempo $t_f = 0,25$, em regime permanente, o método clássico se torna completamente incapaz de gerar um esboço, mesmo que grosseiro, do perfil da solução esperada.

A Figura 4.9 mostra perfis de concentração obtidos pelo método clássico para um exemplo ainda mais advectivo, onde a função $\lambda(x)$ assume valores ainda maiores. Notamos que os erros do método clássico se acentuam, principalmente quando tratamos de condições iniciais descontínuas. De fato, nesse caso o método clássico (entre outros erros) não captura perfeitamente a descontinuidade no tempo $t = 0,005$. Nesse instante, pode-se notar uma nítida e completa suavização proveniente da dispersão (certamente) de origem numérica. Observamos também que no instante 0,01 a solução numérica já exibe uma forte tendência oscilatória. Assim, os resultados obtidos com a metodologia clássica, mesmo para instantes de tempo relativamente pequenos, são fisicamente incorretos.

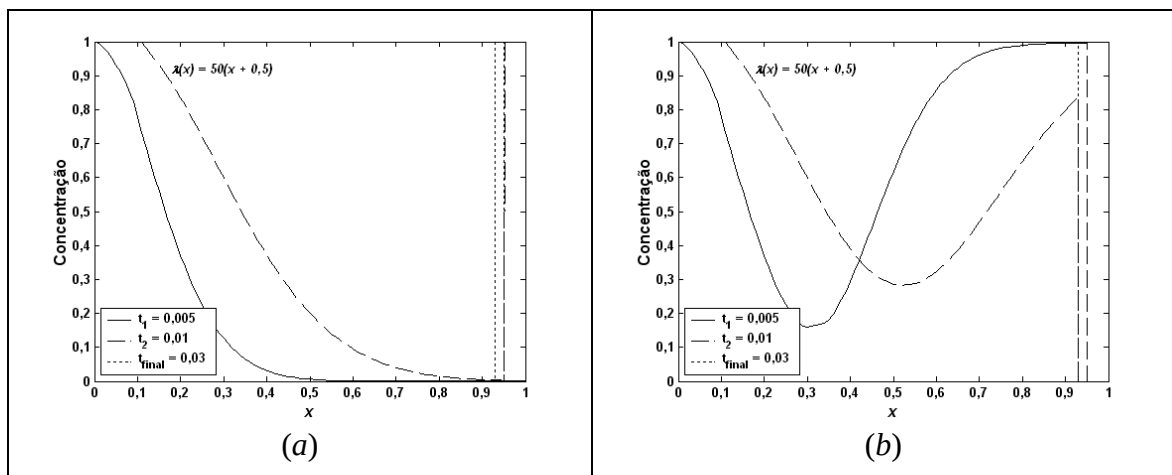


Figura 4.9. Soluções pelo método clássico: condições iniciais nulas (a) e descontínuas (b).

4.3 Exemplos Gerais

Casos ainda mais gerais podem ser tratados pela metodologia DFLD-*exp*, são situações onde pode existir multiplicidade entre os autovalores da matriz $\mathbf{A}$, mas eles não são necessariamente todos iguais. Para tratarmos exemplos desse tipo, nesta seção utilizaremos a aproximação de Trotter, de acordo com o Teorema 3.4.

Empregando a aproximação de Trotter, a acurácia do método DFLD-*exp* aumenta quando o valor do parâmetro m cresce, conforme indicado no limite definido na Eq. (3.49). Apesar de não haver necessidade, é claro que a aproximação de Trotter pode ser aplicada também para os casos estudados anteriormente, sendo que para λ constante a solução deve ser a mesma independente do número inteiro atribuído ao parâmetro $m > 0$. Assim, inicialmente para validarmos os resultados obtidos com a aproximação de Trotter, começaremos resolvendo exemplos cujas soluções já foram estabelecidas na última seção.

A Tabela 4.2 mostra o erro na norma 2, para diferentes valores de m , com relação a solução obtida na Seção 4.2. A função que define o número de Peclet para este caso é $\lambda(x) = 10(x + 0,5)$ e as condições iniciais são nulas.

Tabela 4.2. Erro relativo na norma 2 para a aproximação de Trotter (grade grossa).

	$t_1 = 0,015$	$t_2 = 0,05$
$m = 2$	0,0534	0,1075
$m = 10$	0,0112	0,0275
$m = 50$	0,0023	0,0058

A grade deste problema possui apenas 7 pontos, sendo relativamente grossa. Neste caso, como pode ser observado na Tabela 4.2, o valor $m = 50$ fornece uma boa aproximação.

Considerando grades mais refinadas, a Tabela 4.3 apresenta o erro na norma 2 para um exemplo estudado anteriormente, onde o número de Peclet é definido pela função $\lambda(x) = 50(x + 0,5)$ e as condições iniciais são nulas. Lembramos que neste caso a grade de discretização é constituída de 27 pontos, e (como antes) o erro é tomado com relação à solução obtida na Seção 4.2.

Tabela 4.3. Erro relativo na norma 2 para a aproximação de Trotter (grade fina).

	$t_1 = 0,005$	$t_2 = 0,01$
$m = 10$	0,1013	0,1247
$m = 50$	0,0220	0,0322
$m = 250$	0,0045	0,0068

Observando as Tabela 4.2 e 4.3 podemos notar claramente, como era de se esperar pela estimativa descrita na Eq. (3.54), que para mantermos a acurácia da solução, a medida que λ assume valores maiores, necessitaremos utilizar na aproximação de Trotter valores de m também cada vez maiores. Neste exemplo, $m = 250$ é suficiente para tornar o erro relativo nulo até a sua segunda casa decimal.

A seguir utilizaremos a metodologia DFLD-*exp* juntamente com a aproximação de Trotter para funções $\lambda(x)$ relativamente mais complicadas, as quais produzem diferentes tipos de multiplicidade nos autovalores da matriz $\mathbf{A}$. O primeiro exemplo desse tipo utiliza a seguinte função não-decrescente:

$$\lambda(x) = \begin{cases} 10, & \text{se } x < 1/3 \\ 10(x + 2/3), & \text{se } 1/3 \leq x < 2/3 \\ 40/3, & \text{se } x \geq 2/3 \end{cases} \quad (4.3)$$

A função indicada na Eq. (4.3) nos fornece uma grade com 7 pontos e exige, no contexto da nossa proposta, que utilizemos a aproximação de Trotter. Empregaremos neste caso o valor $m=50$. Para três valores de t , a Figura 4.10-(a) mostra as soluções deste problema com condições iniciais nulas. As soluções exibidas na Figura 4.10-(b) referem-se às condições iniciais descontínuas indicadas na Eq. (4.2).

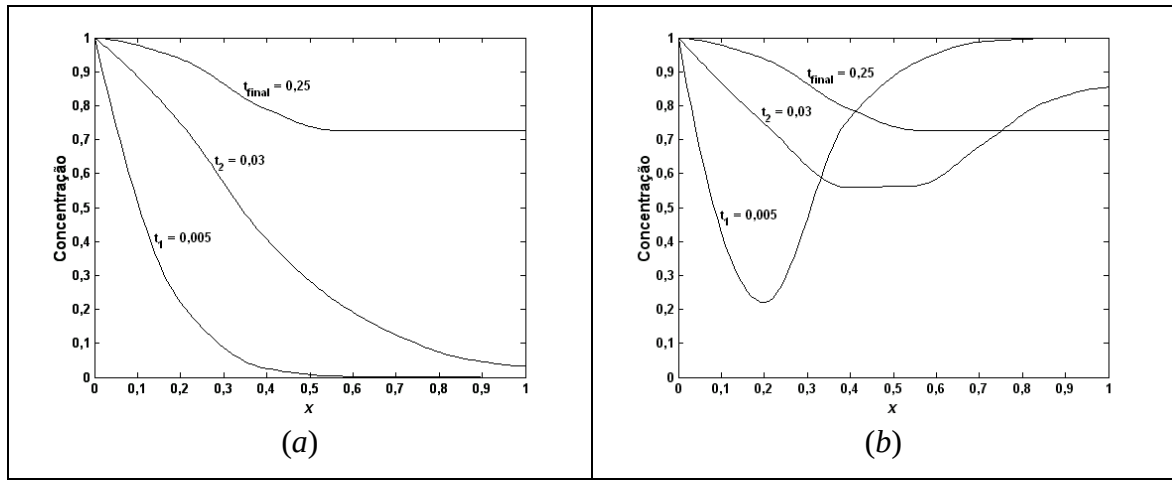


Figura 4.10. Soluções para condições iniciais nulas (a) e descontínuas (b) (grade grossa).

Soluções de um segundo exemplo semelhante ao anterior são apresentado na Figura 4.11. Neste caso, o número de Peclet assume valores grandes e obedece a seguinte relação:

$$\lambda(x) = \begin{cases} 50, & \text{se } x < 1/3 \\ 50(x + 2/3), & \text{se } 1/3 \leq x < 2/3. \\ 200/3, & \text{se } x \geq 2/3 \end{cases} \quad (4.4)$$

Neste exemplo, referente a um escoamento altamente advectivo, utilizamos $m=250$ e uma grade com 31 pontos.

Novamente, as Figuras 4.10 e 4.11 mostram que, independentemente das condições iniciais, as soluções apresentam o mesmo comportamento assintótico referente à t_{final} , o que concorda inteiramente com o resultado teórico descrito pelo Corolário 3.1.

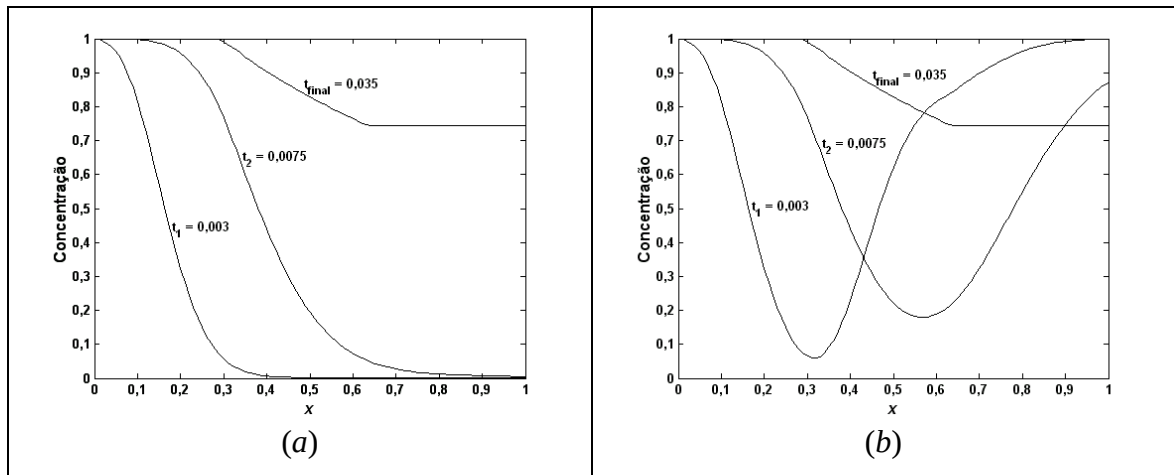


Figura 4.11. Soluções para condições iniciais nulas (a) e descontínuas (b) (grade fina).

5 Conclusões e Perspectivas Futuras

5.1 Conclusões

Uma nova metodologia para a resolução da equação de advecção-dispersão unidimensional em regime transiente, a qual denominamos de DFLD-*exp*, é formulada e matematicamente analisada. A discretização espacial é baseada em um esquema de diferença finita de segunda ordem (que denominamos de DFLD) semelhante ao utilizado por Van Ommen (1985), no contexto da teoria de células de misturas para escoamentos com velocidade constante. Este esquema é construído de tal forma que o coeficiente de dispersão é efetivamente eliminado durante o processo de discretização. Isso é possível mediante escolhas apropriadas para os espaçamentos da grade.

De forma mais geral, a nossa formulação considera que o campo de velocidade é constante ou uma função não-decrescente da variável espacial. Por questões de simplificação, a equação diferencial é estudada na sua forma adimensional, mas isso nem de longe é uma condição necessária para a utilização do método DFLD-*exp*.

A análise numérica desenvolvida aqui mostra que a discretização DFLD é não-oscilatória e essencialmente não-dispersiva e não-dissipativa. Mostramos também que na realidade esta discretização é um caso particular do esquema clássico de diferença centrada para a referida equação, onde a escolha apropriada para o espaçamento da grade é responsável por selecionar, entre possivelmente todas, a melhor diferença finita centrada clássica. Dessa forma, este esquema pode ser usado sem causar os danos que costumeiramente provoca na solução numérica da equação de advecção-dispersão.

Além das vantagens expostas acima, a discretização espacial DFLD transforma o problema de advecção-dispersão em um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares

cuja matriz dos coeficientes é simplesmente bidiagonal. Em vista da simplicidade da álgebra linear resultante da discretização DFLD e com o objetivo de evitar problemas de instabilidade numérica referentes a possíveis discretizações temporais, no presente trabalho a resolução no tempo é feita utilizando-se técnicas de exponencial de matrizes. Por essa razão a metodologia resultante foi denominada de *DFLD-exp*. Três diferentes estratégias, incondicionalmente estáveis, para o cálculo da exponencial da matriz dos coeficientes foram desenvolvidas e empregadas aqui. A escolha e utilização de umas dessas técnicas podem depender da relação entre os valores dos números de Peclet ao longo do domínio espacial, os quais determinam a multiplicidade entre os autovalores da referida matriz.

No contexto descrito acima, a metodologia resultante fornece soluções semi-analíticas para os problemas de advecção-dispersão tratados aqui. Nossa análise considera também a existência e unicidade de uma solução obtida via a metodologia *DFLD-exp*, seu comportamento assintótico e estimativas de erros de aproximações calculadas pela fórmula de Trotter (1959).

Devido à simplicidade da formulação algébrica decorrente dos algoritmos desenvolvidos neste trabalho, códigos computacionais para a metodologia *DFLD-exp* são obtidos com pouco esforço, sem exigir empregos ou importação de rotinas pré-existentes referentes à resolução de sistemas lineares ou ao cálculo da exponencial de matrizes.

Diferentes exemplos numéricos demonstram o desempenho da metodologia proposta, comprovando a sua acurácia e eficiência. Comparações com uma solução analítica aproximada mostram que a solução calculada pelo método *DFLD-exp* pode ser obtida muito próxima da solução exata.

5.2 Perspectivas Futuras

As propriedades teóricas e o bom desempenho demonstrado pela metodologia DFLD-*exp* recomendam a continuidade deste estudo e a sua utilização em problemas práticos decorrentes da engenharia e das ciências aplicadas.

Continuidades naturais dos resultados obtidos até aqui envolvem, certamente, os seguintes tópicos:

- *Extensões para incluir condições de contorno dependentes do tempo.* Durante a elaboração do presente trabalho esse aspecto foi abordado, mas não com a profundidade que gostaríamos a ponto de incluí-lo aqui. No entanto, nossos resultados preliminares mostram que a metodologia proposta pode ser estendida naturalmente para essa classe de problemas, deste que utilizemos em adição técnicas de integração numéricas (como a quadratura Gaussiana, por exemplo) necessárias para resolver, com certa precisão, as integrais que surgem na solução semi-analítica estendida. Consideramos esse tópico uma parte importante do nosso trabalho em desenvolvimento.
- *Possibilidade de outros esquemas clássicos de diferenças finitas tornarem o problema discretizado livre do termo dispersivo.* Este tópico foi superficialmente analisado durante a nossa pesquisa. Resultados iniciais, não apresentados aqui, mostraram que, com escolhas apropriadas para os espaçamentos da grade, além do esquema de diferença centrada apenas um dos esquemas clássicos possui essa propriedade. Apesar de a estrutura algébrica ser inteiramente análoga a do esquema DFLD, observamos que a metodologia resultante desse outro esquema é uma aproximação apenas de primeira ordem na variável espacial. Certamente esse tópico será estudado com mais profundidade e apresentado em um trabalho futuro, onde será considerada a possibilidade da utilização de esquemas de alta ordem (livres do termo dispersivo).

- *Extensões para problemas multidimensionais.* Este é um tópico extremamente relevante para o efetivo estabelecimento do esquema DFLD-*exp*. Certamente o seu sucesso dependerá da estrutura da matriz dos coeficientes, que influenciará nos futuros algoritmos destinados ao cálculo da exponencial de matrizes.
- *Aplicações do método DFLD-*exp*.* Dentre as várias possíveis aplicações, pretendemos em um futuro próximo utilizar a nossa metodologia no contexto dos problemas de contaminação do solo, mais especificamente pretendemos, inicialmente, simular o deslocamento de um traçador em um escoamento em meios porosos, além de visarmos à simulação do escoamento ligeiramente compressível e totalmente miscível em reservatórios de petróleo.
- *Extensões para a resolução da equação de advecção-dispersão-reação.*

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BELLMAN, R. Introduction to matrix analysis. New York: McGraw-Hill, 1960.

CODY, W. J.; MEINARDUS, G.; VARGAS, R. S. Chebyshev rational approximation to $\exp(-x)$ in $[0, +\infty)$ and applications to heat conduction problems. J. Approximation Theory, n. 2, p. 50-65, 1969.

FAIR, W.; LUKE, Y. Padé approximations to the operator exponential. Numerische Mathematik, n. 14, p. 379-382, 1970.

FRIEDRICHS, K. O.; LAX, P. D. Systems of conservation equations with a convex extension. Proc. Nat. Acad. Sci., n. 68, p. 1686-1688, 1971.

GALLOPOULOS, E.; SAAD, Y. Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods. SIAM J. Sci. Statist. Comput., n. 13, p. 1236-1264, 1992.

GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. Matrix computations. 3.ed. Baltimore: Johns Hopkins, 1996.

HIGHAM, N. J. Evaluating Padé approximants of the matrix logarithm. SIAM J. Matrix Anal. Appl., n. 22, p. 1126-1135, 2001.

HOCHBRUCK, M.; LUBICH, C. On Krylov subspaces approximations to the matrix exponential. SIAM J. Numer. Anal., n. 34, p.1911-1925, 1997.

KURGANOV, A.; TADMOR, E. New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations. J. Comput. Phys., n. 160, p. 241-282, 2000.

LEVEQUE, R. J. Finite volume methods for hyperbolic problems. Cambridge, Cambridge University Press, 2002. (Cambridge Texts in Applied Mathematics).

LEVY, D.; PUPPO, G.; RUSSO, G. Compact central *WENO* schemes for multidimensional conservation laws. SIAM J. Sci. Comput., n. 22, p. 656-672, 2000.

MOLER, C. B.; VAN LOAN, C. F. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. SIAM Rev., n. 20, p. 801-836, 1978.

MOLER, C. B.; VAN LOAN, C. F. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later. SIAM Rev., n. 45, p. 3-49, 2003.

MORTON, K. W. Numerical solution of convection-diffusion problems. London: Chapman & Hall, 1996.

NESSYAHU, H.; TADMOR, E. Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws. J. Comput. Phys., n. 89, p. 408, 1990.

NOUR-OMID, B. Applications of the Lanczos algorithm. Comput. Phys. Comm., n. 53, p. 153-168, 1989.

PRICE, H. S.; VARGAS, R. S.; WARREN, J. E. Applications of oscillation matrices to diffusion-convection equations. J. Math. Phys., n. 45, p. 301-311, 1966.

SAAD, Y. Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator. SIAM J. Numer. Anal., n. 29, p. 209-228, 1992.

SIDJE, R. B. *Expokit*: Software package for computing matrix exponential, ACM Trans Math Software, n. 24, p. 130-156, 1998.

SIEMIENIUCH, J. L.; GLADWELL, I. Analysis of explicit difference methods for a diffusion-convection equation. J. Num. Meth. Engng., n. 12, p. 899-916, 1978.

STEWART, D. E.; LEYK, T. S. Error estimates for Krylov subspace approximations of matrix exponential, J. Comput. Appl. Math., n. 72, p. 359-369, 1996.

THOMAS, J. W. Numerical partial differential equations: finite difference methods. New York: Springer, 1995. (Texts in Applied Mathematics, 22).

THOMAS, J. W. Numerical partial differential equations: conservation laws and elliptic equations. New York: Springer, 1999. (Texts in Applied Mathematics, 33).

TORTTER, H. F. Product of semigroups of operators. Proc. Amer. Math. Soc., n. 10, p. 545-551, 1959.

VAN OMMEN, H. C. The "mixing-cell" concept applied to transport of non-reactive and reactive components in soils and groundwater. J. Hydrol., n. 78, p. 201-213, 1985.

APÊNDICE

Estimando C_{n+1} por Interpolação Quadrática

Como referido no Capítulo 3, podemos, de forma alternativa, estimar o valor da concentração no ponto x_{n+1} de maneira mais acurada através de uma interpolação. O problema em questão nos fornece como condição de contorno a seguinte equação:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{x=1} = 0. \quad (\text{A.1})$$

Considerando uma aproximação em diferenças finitas centradas no nó x_{n+1} , o qual representa a posição $x=1$, obtemos

$$\frac{C_{n+2}(t) - C_n(t)}{2h_{n+1}} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Observe que implicitamente estamos supondo que o ponto adicional x_{n+2} foi introduzido na grade de maneira que x_{n+1} torna-se o ponto médio do segmento $[x_n, x_{n+2}]$. Em outras palavras, estamos considerando $h_{n+1} = x_{n+1} - x_n = x_{n+2} - x_{n+1}$. Em vista da expressão em Eq. (A.2), podemos escrever:

$$C_{n+2}(t) = C_n(t). \quad (\text{A.3})$$

Suponha que já foram calculados os valores C_i , para todo $i = 1, \dots, n$. Em seguida, em nossa interpolação, consideraremos que na vizinhança do ponto x_{n+1} , incluindo os pontos x_{n-1} , x_n e x_{n+2} , a solução possui a forma de um polinômio quadrático na variável x . Assim, podemos determinar $C_{n+1}(t)$ utilizando os valores conhecidos de $C(t)$ nos pontos x_{n-1} , x_n e x_{n+2} . Isso pode ser feito considerando

$$C_{n+1}(t) = P_2(x_{n+1}), \quad (\text{A.4})$$

onde $P_2(x)$ é o polinômio quadrático obtido pela seguinte interpolação de Lagrange:

$$P_2(x) = \sum_{\substack{j \neq n+1 \\ j=n-1}}^{n+2} C_j(t) \prod_{\substack{k \neq j \\ k=n-1}}^{n+2} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}. \quad (\text{A.5})$$

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)