



UNIVERSIDADE  
ESTADUAL DE LONDRINA

---

JUNIOR FRANCISCO DIAS

**APLICAÇÃO DE MÉTODOS MÚLTIPLO ESTÁGIO NA  
EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO  
BIDIMENSIONAL**

JUNIOR FRANCISCO DIAS

**APLICAÇÃO DE MÉTODOS MÚLTIPLO ESTÁGIO NA  
EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO  
BIDIMENSIONAL**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Orientadora: Profa. Dra. Neyva Maria Lopes  
Romeiro

Co-orientador: Prof. Dr. Eliandro Rodrigues Cirilo

Londrina  
2014

**Catálogo elaborado pela Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central da  
Universidade Estadual de Londrina**

**Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)**

D541a	<p>Dias, Junior Francisco.</p> <p>Aplicação de métodos múltiplo estágio na equação de advecção-difusão-reação bidimensional / Junior Francisco Dias. – Londrina, 2014. 68 f. : il.</p> <p>Orientador: Neyva Maria Lopes Romeiro. Coorientador: Eliandro Rodrigues Cirilo. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós- Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, 2014. Inclui bibliografia.</p> <p>1. Equações diferenciais – Soluções numéricas – Teses. 2. Análise numérica – Teses. 3. Padé, Aproximante de – Teses. 4. Diferenças finitas – Teses. 5. Método dos elementos finitos – Teses. I. Romeiro, Neyva Maria Lopes. II. Cirilo, Eliandro Rodrigues. III. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional. IV. Título.</p> <p style="text-align: right;">CDU 517.9</p>
-------	---

JUNIOR FRANCISCO DIAS

**APLICAÇÃO DE MÉTODOS MÚLTIPLO ESTÁGIO NA  
EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO  
BIDIMENSIONAL**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Profa. Dra. Neyva Maria Lopes Romeiro  
UEL – Londrina – PR

---

Prof. Dr. Cosmo Damião Santiago  
UTFPR – Londrina – PR

---

Prof. Dr. Paulo Laerte Natti  
UEL – Londrina – PR

Londrina, 28 de fevereiro de 2014.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente à minha mãe Sebastiana, ao meu pai Francisco, à minha avó Vanir e à minha irmã Camila, pela compreensão pelos meus momentos de ausência, pois a distância e as horas de estudo nem sempre permitiram que eu estivesse presente.

À professora Neyva M. L. Romeiro, pelas orientações e sugestões de texto.

Ao professor Eliandro R. Cirilo, pelas dicas de programação.

À minha namorada Nayara Moryama, pela motivação e pelo auxílio gramatical

na composição do abstract.

Ao meu amigo Luis H. Tonon, pelas sugestões de diagramação em LATEX.

Às minhas amigas Cláudia B. Medeiros e Caroline Dall' Agnol pelas trocas de experiências no mestrado.

À CAPES pelo apoio financeiro.

DIAS, Junior Francisco. **Aplicação de Métodos Múltiplo Estágio na Equação de Advecção-Difusão-Reação Bidimensional**. 2014. 68 p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2014.

## RESUMO

Este trabalho é dedicado ao estudo de uma discretização para a variável temporal da equação de advecção-difusão-reação bidimensional. Essa equação não possui solução analítica conhecida, fato que motiva a utilização de métodos numéricos para aproximar a solução. Para atingir esse objetivo foram estudadas aproximações por diferenças finitas e os aproximantes de Padé. Tais aproximantes deram origem aos métodos PADE/A, PADE/B (método de Crank-Nicolson), PADE/C e PADE/D (método de Harten/Tal-Ezer), os quais foram testados em problemas unidimensionais e bidimensionais. Nas simulações realizadas concluiu-se que os métodos PADE/B, PADE/C e PADE/D apresentaram resultados semelhantes e melhores que os do PADE/A. A maior diferença observada para os métodos PADE/B, PADE/C e PADE/D ocorreram para alguns valores particulares do coeficiente difusivo e em relação ao tempo computacional, que foi menor para o PADE/C. Nas simulações bidimensionais, onde foram comparados os resultados obtidos pelo método PADE/C e por um método de elementos finitos na formulação espaçotempo, concluiu-se que o método PADE/C forneceu resultados semelhantes a um menor custo computacional.

**Palavras-chave:** Diferenças finitas. Equação de advecção-difusão-reação bidimensional. Aproximantes de Padé. Método de Crank-Nicolson. Método de Harten/Tal-Ezer.

DIAS, Junior Francisco. **Multi-Stage Methods Application in Two-Dimensional Advection- Diffusion-Reaction Equation**. 2014. 68 p. Dissertation (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2014.

### **ABSTRACT**

This dissertation is dedicated to the study of a temporal variable discretization from twodimensional advection-diffusion-reaction equation. This equation has no known analytical solution and this fact motivates the use of numerical methods to approximate their solution. To satisfy this objective finite difference approximations and Padé approximants were studied. This approximants originated the PADE/A, PADE/B (Crank-Nicolson method), PADE/C and PADE/D (Harten/Tal-Ezer method) methods that were tested in one-dimensional and two dimensional problems. In the simulations it was concluded that the PADE/B, PADE/C and PADE/D methods showed similar and better results than PADE/A. The greatest difference between PADE/B, PADE/C and PADE/D occurred for certain particular values of diffusion coefficient and the computational time lower for PADE/C. In the two-dimensional simulations, where the results obtained by PADE/C method and by a finite elements in the space-time formulation method were compared, it was concluded that the PADE/C method provided similar results at a lower computational cost.

**Keywords:** Finite differences. Two-dimensional advection-diffusion-reaction equation. Padé approximants. Crank-Nicolson method. Harten/Tal-Ezer method.

## LISTA DE FIGURAS

2.1	(a) Domínio () e (b) Malha computacional (M). .....	15
2.2	Malha computacional para a equação de Laplace [20]. .....	20
3.1	(a) Aproximações para a função exponencial utilizando os polinômios $h(x)$ e $g(x)$ obtidos a partir da Fórmula de Taylor e os aproximantes de Padé $R_{1;1}$ e $R_{2;2}$ . (b) Erro absoluto das aproximações da função exponencial .....	27
3.2	Níveis de tempo $n$ e $n + 1$ .....	29
3.3	Níveis de tempo $n$ , $n + 1=6$ , $n + 5=6$ e $n + 1$ .....	30
3.4	Níveis de tempo $n$ , $n + 1=6$ , $n + 1=2$ , $n + 5=6$ e $n + 1$ .....	30
3.5	Esquema de aproximação dos tempos intermediários da estratégia (A). .....	34
3.6	Esquema de aproximação dos tempos intermediários da estratégia (B). .....	37
3.7	Esquema de aproximação dos tempos intermediários da estratégia (C). .....	40
3.8	Estágios de tempo do sistema formado pelas equações (3.25)-(3.28). .....	44
3.9	Cálculo da concentração nos níveis de tempo $n + 1=6$ e $n + 1=2$ .....	44
3.10	Aproximação da concentração no nível de tempo $n+5=6$ , por meio de interpolação linear. ....	45
3.11	Cálculo da concentração no nível de tempo $n + 1$ .....	45
3.12	Cálculo sucessivo das concentrações nos níveis de tempo $n + 5=6$ e $n + 1$ . .....	46
4.1	Domínio do problema. ....	49
4.2	Superfície da solução analítica do problema (4.8) para $v_x = 1$ , $D_{xx} = 0:1$ , $k = 0:001$ , $t_f = 0:9$ e $y_0 \in [0; 2]$ . ....	50
4.3	Perfis da solução analítica e soluções utilizando os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D com diferentes valores de $D_{xx}$ e $P_{grid}$ , em uma malha de $201 \times 21$ pontos. ....	51
4.4	ERP dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D em cada nível de tempo para diferentes valores de $D_{xx}$ e $P_{grid}$ , em uma malha de $201 \times 21$ pontos. ....	52
4.5	Perfis da solução analítica e soluções utilizando os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D com diferentes valores de $D_{xx}$ e $k$ , em uma malha de $201 \times 21$ pontos. ....	54
4.6	ERP dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D em cada nível de tempo para diferentes valores de $D_{xx}$ e $k$ , em uma malha de $201 \times 21$ pontos. . ....	55



4.7	Resultados do método PADE/C para a equação de transporte em uma malha uniforme 21 _ 21 pontos: (a)-(c) resultados para $t_f = 0:2$ d; (d)-(f) resultados para $t_f = 1:0$ d. ....	57
4.8	Resultados da equação de advecção-difusão-reação bidimensional em um grid uniforme 20 _ 20 (400 elementos triangulares) apresentados em [41]: (a)-(c) resultados para $t_f = 0:2$ d; (d)-(f) resultados para $t_f = 1:0$ d .....	57
4.9	Valor absoluto da diferença entre as soluções C1 e C2 obtidas pelo método PADE/C e pelo método apresentado em [41], respectivamente .....	58
4.10	Norma do erro do método PADE/C com o refinamento da malha . ....	60
4.11	Norma do erro do método PADE/C com a redução de $\Delta t$ . ....	61

## LISTA DE TABELAS

3.1	Alguns aproximantes de Padé para a função $\exp(x)$ [3, 16]. .....	27
3.2	Maior erro absoluto cometido ao aproximar a função exponencial em alguns subintervalos. ....	28
4.1	Erros relativos percentuais máximos cometidos pelos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D para $k = 0:001$ e $t_f = 0:9$ , referentes às simulações apresentadas nas Figuras 4.3 e 4.4. ....	53
4.2	Tempo de processamento, em segundos, para diferentes valores do coeficiente de difusão, com $t_f = 0:9$ , referente às simulações apresentadas nas Figuras 4.3 e 4.4. ....	53
4.3	Erros relativos percentuais máximos cometidos pelos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D para diferentes coeficientes de difusão e reação, com $t_f = 0:9$ , referentes às simulações apresentadas nas Figuras 4.5 e 4.6 .....	55
4.4	Tempo de processamento, em segundos, para diferentes coeficientes de difusão e reação, com $t_f = 0:9$ , referente às simulações apresentadas nas Figuras 4.5 e 4.6 .....	56
4.5	Maior valor absoluto da diferença entre as soluções C1 e C2.....	58
4.6	Tempo de processamento do método PADE/C e do método de elementos finitos na formulação espaço tempo (EF), considerando uma malha uniforme $20 \times 20$ ( $21 \times 21$ pontos).....	59
4.7	Norma do erro do método PADE/C com o refinamento da malha. ....	59
4.8	Tempo de processamento do método PADE/C com o refinamento da malha .....	60
4.9	Norma do erro do método PADE/C com a redução de $\Delta t$ .....	61
4.10	Tempo de processamento do método PADE/C com a redução de $\Delta t$ .....	61
4.11	Soluções numéricas obtidas por meio dos métodos PADE/C e pelo método de elementos finitos na formulação espaço tempo (EF), apresentado por Romeiro et al. [41], para $y = 0:5$ m e para alguns valores de $x$ .....	62

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

1D	Unidimensional.
2D	Bidimensional.
3D	Tridimensional.
EDFs	Equações de Diferenças Finitas.
EDP	Equação Diferencial Parcial.
EDPs	Equações Diferenciais Parciais.
ELT	Erro Local de Truncamento.
ERP	Erro Relativo Percentual.
ERPs	Erros Relativos Percentuais.
ONU	Organização das Nações Unidas.
PADE/A	Método obtido a partir da estratégia (A).
PADE/B	Método obtido a partir da estratégia (B).
PADE/C	Método obtido a partir da estratégia (C).
PADE/D	Método obtido a partir da estratégia (D).

## LISTA DE SÍMBOLOS E NOTAÇÕES

$\Omega$	Domínio contínuo.
$\partial\Omega$	Bordo (ou fronteira) do conjunto .
$M$	Malha computacional.
$\Delta x$	Espaçamento da malha computacional na direção $x$ .
$\Delta y$	Espaçamento da malha computacional na direção $y$ .
$\Delta t$	Passo no tempo.
$R^{*+}$	Conjunto dos números reais positivos.
$O(\Delta x)$	Ordem $\Delta x$ .
$O(\Delta y)$	Ordem $\Delta y$ .
$O(\Delta t)$	Ordem $\Delta t$ .
$v_x$	Componente da velocidade na direção $x$ .
$v_y$	Componente da velocidade na direção $y$ .
$C$	Concentração dissolvida.
$k$	Coefficiente de primeira ordem da taxa de reação.
$D_{xx}$	Coefficiente do termo difusivo na direção $x$ .
$D_{yy}$	Coefficiente do termo difusivo na direção $y$ .
$R1;1$	Aproximante de Padé de segunda ordem.
$R2;2$	Aproximante de Padé de quarta ordem.
$Pegrid$	Número de Péclet.
$abs(x)$	Valor absoluto de $x$ .

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	12
<b>2</b>	<b>APROXIMAÇÃO POR DIFERENÇAS FINITAS</b> .....	15
2.1	DISCRETIZAÇÃO .....	15
2.2	FÓRMULA DE TAYLOR .....	16
2.3	MÉTODO ITERATIVO DE GAUSS-SEIDEL .....	19
<b>3</b>	<b>EQUAÇÃO DE TRANSPORTE</b> .....	24
3.1	APROXIMANTES DE PADÉ .....	25
3.2	DISCRETIZAÇÃO DA DERIVADA TEMPORAL .....	28
3.3	TRATAMENTO DAS DERIVADAS ESPACIAIS .....	31
3.4	NÍVEIS DE TEMPO INTERMEDIÁRIOS .....	33
3.4.1	Estratégia A .....	33
3.4.2	Estratégia B .....	37
3.4.3	Estratégia C .....	40
3.4.4	Estratégia D .....	43
<b>4</b>	<b>SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL</b> .....	48
4.1	SIMULAÇÃO DO MODELO UNIDIMENSIONAL .....	50
4.1.1	Teste 1: Resultados das Simulações com Diferentes Valores Para o Coeficiente de Difusão na Direção x .....	50
4.1.2	Teste 2: Simulações com Diferentes Valores para o Coeficiente de Reação .....	53
4.2	SIMULAÇÃO DO MODELO BIDIMENSIONAL .....	56
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	63
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	65

## 1 INTRODUÇÃO

A água é uma substância essencial para a vida na Terra, onde pode ser encontrada em abundância, pois cobre cerca de 70% de sua superfície. Entretanto, a maior parte dessa substância é salgada e está presente nos oceanos, sendo inadequada para o consumo humano [32].

Segundo a ONU (Organização das Nações Unidas) [1],

a água potável limpa, segura e adequada é vital para a sobrevivência de todos os organismos vivos e para o funcionamento dos ecossistemas, comunidades e economias. Mas a qualidade da água em todo o mundo é cada vez mais ameaçada à medida que as populações humanas crescem, atividades agrícolas e industriais se expandem e as mudanças climáticas ameaçam alterar o ciclo hidrológico global. [...]

Essa declaração, feita pela ONU no Dia Mundial da Água em 2010, revela como a contaminação desse recurso é um problema cada vez mais frequente e de grande importância, que deve ser foco da atenção de todos. Para se ter uma ideia, em um relatório elaborado também pela ONU em 2010, intitulado "Sick water" [12], é alertado que a poluição e contaminação da água mata mais do que todas as formas de violência juntas, incluindo as guerras, e que, no mundo, o índice de mortalidade infantil decorrente de doenças causadas pela má qualidade da água é de 17%. Além disso, de acordo com esse mesmo relatório, atualmente, mais da metade dos leitos hospitalares são ocupados por pessoas com doenças ligadas à água contaminada. Segundo [1], isso ocorre principalmente porque

a cada dia, milhões de toneladas de esgoto tratado inadequadamente e resíduos agrícolas e industriais são despejados nas águas de todo o mundo. [...]  
A contaminação da água enfraquece ou destrói os ecossistemas naturais que sustentam a saúde humana, a produção alimentar e a biodiversidade. [...]  
A maioria da água doce poluída acaba nos oceanos, prejudicando áreas costeiras e a pesca. [...]

Nesse texto, de autoria da ONU, é perceptível uma grande preocupação com a qualidade da água, pois esse recurso é um veiculador de doenças muito eficiente e de longo alcance, visto que todos necessitam utilizá-lo. Em face disto, muitas pesquisas que têm sido feitas para tentar minimizar o problema da poluição que afeta a qualidade da água. Em várias ocasiões, os métodos numéricos têm se demonstrado uma ferramenta importante e muito utilizada por vários pesquisadores [6, 13, 35]. Um exemplo da aplicação de tais métodos é o trabalho de Chau et al. [10], onde é simulado um problema advectivo-difusivo na baía de Tolo Harbor, à nordeste de Hong Kong. Os testes realizados mostraram que o modelo pode ser considerado satisfatório na simulação do controle de qualidade da água. As condições

de contorno flexíveis do modelo também possibilitam que o mesmo seja aplicado em outras geometrias e não só à de Tolo Harbor, se mostrando uma opção viável.

O trabalho de Le Feng et al. [17] também é direcionado à simulação numérica do controle da qualidade da água. Elaborado para o rio Suzhou, em Xangai, o modelo obteve resultados para a concentração de amônia com erros na faixa de 15% a 13%, o que atendeu aos requisitos de necessidades práticas.

Mais um trabalho que pode ser destacado é o de Myung Eun Lee e Il Won Seo [30] que foi realizado no rio Han, um dos mais importantes da Coreia. As simulações numéricas mostraram que as zonas de recirculação do fluido provocava uma variação periódica da concentração de poluente.

Por fim, Pardo et al. [37, 38] defendem em seu trabalho que as simulações numéricas também podem proporcionar melhor compreensão sobre processos reativos. Por meio de uma análise qualitativa, foi feita uma descrição da dinâmica dos processos envolvidos no escoamento de espécies reativas, tais como a dinâmica do processo de nitrificação, da demanda bioquímica de oxigênio e do nível de oxigênio dissolvido no corpo d'água do lago Igapó I, um dos principais pontos turísticos da cidade de Londrina, localizada no estado do Paraná, Brasil.

Os trabalhos acima referenciados são apenas alguns exemplos das inúmeras pesquisas relacionadas a simulação numérica de transporte de poluentes. De acordo com Bortoli [8],

[...] o uso de técnicas numéricas para a solução de complexos problemas de engenharia e da física é hoje uma realidade graças ao desenvolvimento de computadores de alta velocidade e grande capacidade de armazenamento. [...] Os métodos analíticos têm a desvantagem de serem aplicados apenas a problemas cujas hipóteses simplificativas os desviam demasiadamente do fenômeno físico real e, geralmente, só podem ser aplicados para geometrias simples. Nem por isso as soluções analíticas são descartadas, pois são muito importantes para validar casos-limites de modelos numéricos. [...]

Uma alternativa para estudar problemas em que não se conhece a solução analítica, além do tratamento numérico, é a experimentação prática. Contudo, ensaios em laboratório, mesmo em escala reduzida, podem ser caros ou até impossíveis, como a montagem experimental de previsão do tempo [20].

Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo a aplicação de métodos múltiplo estágio [16] na discretização temporal da equação de advecção-difusão-reação bidimensional [4] e subsequente análise da eficiência computacional de cada um. Para atingir esse objetivo é necessário estudar aproximações por diferenças finitas [20, 23] e os aproximantes de Padé [2, 39]. Para tanto, este trabalho está organizado em cinco capítulos, dos quais: o Capítulo 2 introduz o método de diferenças finitas; o Capítulo 3 apresenta a equação de advecção-difusão-reação bidimensional e sua discretização utilizando os aproximantes de

Padé; o Capítulo 4 simula problemas de transporte de poluentes; e o Capítulo 5 apresenta as considerações finais sobre o trabalho.



## 2 APROXIMAÇÃO POR DIFERENÇAS FINITAS

A aproximação de derivadas por diferenças finitas é uma técnica que tem como base, principalmente, a série de Taylor. Essa técnica é bastante empregada em problemas que envolvem aproximações de soluções de equações diferenciais [27], as quais um computador não é capaz de calcular os infinitos termos da série de Taylor ou mesmo lidar com processos limites onde a abordagem é teórica [20]. Como um dos objetivos deste trabalho é aproximar o operador diferencial presente nas EDPs, essa técnica será utilizada.

### 2.1 DISCRETIZAÇÃO

De acordo com Fortuna [20], obter a solução de uma equação diferencial em um domínio  $\Omega$ , implica em determinar valores para a variável dependente em cada ponto de  $\Omega$ . Se o conjunto  $\Omega$  é uma região contínua é necessário determinar uma fórmula analítica que forneça os valores da variável dependente. Com essa fórmula pode-se calcular os valores desejados para qualquer ponto de  $\Omega$ . Mas, como nem sempre é possível determinar uma fórmula e com o objetivo de obter a solução da equação apenas para alguns pontos (discretos) do domínio, selecionam-se esses pontos de maneira conveniente e calcula-se a solução utilizando métodos numéricos. Esse processo recebe o nome de discretização e o conjunto de pontos escolhidos é denominado malha computacional <sup>1</sup>, a qual denota-se por  $\mathcal{M}$ .

Considerando um domínio  $\Omega$  retangular, com lados paralelos aos eixos coordenados e um dos vértices na origem, pode-se construir uma malha para  $\Omega$  tomando as interseções de linhas horizontais e verticais, como apresentado na Figura 2.1.

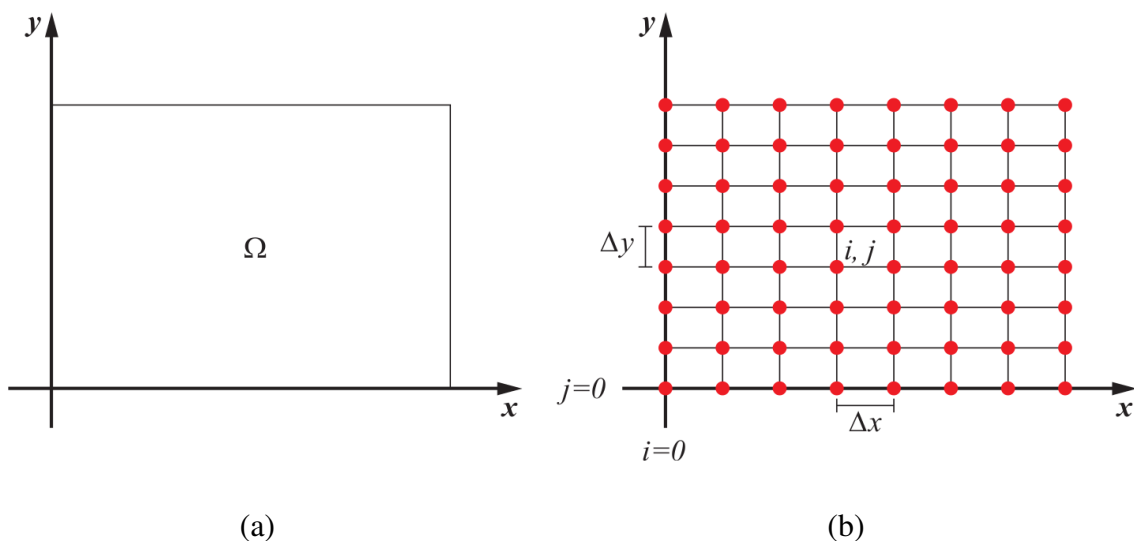


Figura 2.1: (a) Domínio ( $\Omega$ ) e (b) Malha computacional ( $\mathcal{M}$ ).

<sup>1</sup>Grid ou mesh, em inglês.

Na Figura 2.1b as distâncias entre dois pontos consecutivos, tanto na direção  $x$  como na direção  $y$ , são constantes <sup>2</sup>. Além disso, os índices  $i$  e  $j$  fornecem a localização do ponto na malha. O ponto  $(i, j)$ , por exemplo, está na  $i$ -ésima coluna e na  $j$ -ésima linha e possui coordenadas  $(i\Delta x, j\Delta y)$ .

Para trabalhar numericamente com as EDPs é preciso escrevê-las na forma de operações aritméticas, as quais possam ser executadas em um computador. Deste modo, é necessário substituir os diferenciais que aparecem na equação por expressões algébricas. Essas expressões são calculadas computacionalmente de modo a relacionar os pontos de  $\mathcal{M}$ . Tais expressões são denominadas aproximações por diferenças finitas [33].

Após determinar as aproximações por diferenças finitas obtém-se equações algébricas denominadas equações de diferenças finitas (EDFs), que quando resolvidas fornecem a solução aproximada do problema [20], quando existe.

Para determinar aproximações por diferenças finitas, utiliza-se o conhecimento sobre o cálculo da derivada de uma função  $f$ , dado por

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (2.1)$$

No lado direito da equação (2.1), a expressão  $(f(x+h) - f(x))/h$  é uma aproximação por diferenças finitas para a derivada de  $f$  em relação a  $x$ . Teoricamente, quanto menor o valor de  $h$ ,  $h \in \mathbb{R}_+^*$ , melhor a aproximação da derivada. Entretanto, na prática, há limitações numéricas onde, dependendo do valor escolhido para  $h$ , a quantidade de operações aritméticas que devem ser efetuadas computacionalmente é muito grande, "[...] isso sem contar os custos adicionais, como armazenamento de uma quantidade maior de dados em memória e em disco", como afirma Fortuna [20].

As aproximações por diferenças finitas têm o objetivo de aproximar o operador diferencial contínuo por uma expressão algébrica discreta. Neste caso,  $x+h$  e  $x$  representarão pontos de uma malha computacional e o cálculo do diferencial da função será aproximado pela Fórmula de Taylor [28].

## 2.2 FÓRMULA DE TAYLOR

Precursor no cálculo de diferenças finitas e inventor da integração por partes, Brook Taylor (1685-1731) é também o responsável pela dedução da fórmula conhecida hoje como Fórmula de Taylor <sup>3</sup>. Essa fórmula foi publicada pela primeira vez em seu livro *Methodus incrementorum directa et inversa*, de 1715 [34]. O **Teorema 2.1**, cujo enunciado e respectiva demonstração podem ser encontrados em [24], apresenta a Fórmula de Taylor com resto de Lagrange.

<sup>2</sup>Quando  $\Delta x$  e  $\Delta y$  são constantes, diz-se que a malha é uniforme.

<sup>3</sup>Também referenciada na literatura como Expansão de Taylor ou Série de Taylor.

**Teorema 2.1** (Fórmula de Taylor com resto de Lagrange). *Seja  $f$  uma função derivável até ordem  $n+1$  no intervalo  $I$  e sejam  $x, x_0 \in I$ . Então existe pelo menos um  $\bar{x}$  no intervalo aberto de extremos  $x_0$  e  $x$  tal que*

$$f(x) = P(x) + \frac{1}{(n+1)!} \frac{d^{n+1}f(\bar{x})}{dx^{n+1}} (x - x_0)^{n+1}, \quad (2.2)$$

onde

$$P(x) = f(x_0) + \frac{df(x_0)}{dx} (x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2f(x_0)}{dx^2} (x - x_0)^2 + \dots + \frac{1}{n!} \frac{d^n f(x_0)}{dx^n} (x - x_0)^n. \quad (2.3)$$

Para entender como a fórmula (2.3) será utilizada, considere o problema de aproximar a primeira derivada de  $f$ ,  $df/dx$ , nos pontos  $x_i$ , igualmente espaçados em uma malha unidimensional. Pode-se expandir  $f(x_i + \Delta x)$  utilizando a Fórmula de Taylor da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} f(x_i + \Delta x) = & f(x_i) + \Delta x \frac{df(x_i)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2f(x_i)}{dx^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3f(x_i)}{dx^3} \\ & + \frac{(\Delta x)^4}{4!} \frac{d^4f(x_i)}{dx^4} \dots + \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^{n+1}f(\bar{x}_a)}{dx^{n+1}} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Note que, pelo **Teorema 2.1**,  $\bar{x}_a$  não pertence à malha. Isolando a primeira derivada de  $f$  em (2.4), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{df(x_i)}{dx} = & \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} \\ & + \left[ -\frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2f(x_i)}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3f(x_i)}{dx^3} - \frac{(\Delta x)^3}{4!} \frac{d^4f(x_i)}{dx^4} \dots - \frac{(\Delta x)^n}{(n+1)!} \frac{d^{n+1}f(\bar{x}_a)}{dx^{n+1}} \right]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

O conjunto de termos entre colchetes na equação (2.5) é denominado erro local de truncamento (ELT) [20]. Este erro aparece devido ao truncamento da Fórmula de Taylor, visto que não se pode computar os infinitos termos da mesma. O ELT gera informações importantes acerca de como a diferença entre a aproximação da derivada e seu valor exato se comporta à medida que se refina a malha. Por exemplo, sob certas condições, entre as quais  $0 < \Delta x < 1$ , é possível demonstrar que o ELT varia linearmente com a variação de  $\Delta x$  [20]. Por esse motivo é comum representar o ELT, para esse caso, por  $O(\Delta x)$ . A expressão  $O(\Delta x)$ , de ordem um, indica como o erro varia com refinamento da malha. Uma expressão como  $O(\Delta x)^2$  indica que o ELT varia quadraticamente com a variação de  $\Delta x$ , ou seja, ordem dois. Se for considerado que, em geral, tem-se  $0 < \Delta x < 1$ , quanto maior for a ordem, melhor será a aproximação <sup>4</sup>.

Neste trabalho, para simplificar a notação, é escrito  $f_i$  no lugar de  $f(x_i)$  e  $f_{i\pm k}$

---

<sup>4</sup>A expressão  $O(\cdot)$  é conhecida como *símbolo de Landau*. Uma expressão do tipo  $O(\Delta x)^k$ , por exemplo, representa uma série de potências em  $\Delta x$ , iniciando com grau  $k = \text{constante}$  até  $k = +\infty$  [11].

no lugar de  $f(x \pm k \Delta x)$ . Assim, a equação (2.5) pode ser reescrita da seguinte maneira,

$$\frac{df_i}{dx} = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (2.6)$$

A equação (2.6) é uma equação de diferenças finitas, a qual é uma aproximação progressiva (ou avançada) de primeira ordem para  $df_i/dx$  [33], pois o ELT possui ordem um e para calcular a derivada em  $x_i$  foi utilizado um ponto que está adiante de  $x_i$  na malha computacional.

Outra maneira de se obter uma aproximação para  $df_i/dx$  é utilizar a Expansão de Taylor de  $f(x_i - \Delta x)$ , dada por

$$\begin{aligned} f(x_i - \Delta x) = & f(x_i) - \Delta x \frac{df(x_i)}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} \\ & + \frac{(\Delta x)^4}{4!} \frac{d^4 f(x_i)}{dx^4} \dots - \frac{(\Delta x)^n}{(n+1)!} \frac{d^{n+1} f(\bar{x}_b)}{dx^{n+1}}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

que é equivalente a

$$\begin{aligned} \frac{df(x_i)}{dx} = & \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} \\ & + \left[ \frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} + \frac{(\Delta x)^3}{4!} \frac{d^4 f(x_i)}{dx^4} \dots - \frac{(\Delta x)^n}{(n+1)!} \frac{d^{n+1} f(\bar{x}_b)}{dx^{n+1}} \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

ou, utilizando a notação simplificada,

$$\frac{df_i}{dx} = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (2.9)$$

A equação (2.9) é uma equação de diferença atrasada de primeira ordem para  $df_i/dx$  [33]. Além das aproximações apresentadas, (2.6) e (2.9), pode-se obter uma terceira, subtraindo (2.7) de (2.4) termo a termo, resultando em

$$\begin{aligned} f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = & 2 \Delta x \frac{df(x_i)}{dx} + 2 \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f(x_i)}{dx^3} + 2 \frac{(\Delta x)^5}{5!} \frac{d^5 f(x)}{dx^5} \\ & + \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^{n+1} f(\bar{x}_a)}{dx^{n+1}} + \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^{n+1} f(\bar{x}_b)}{dx^{n+1}}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

A equação (2.10) pode ser reescrita de maneira simplificada como

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2 \Delta x \frac{df(x_i)}{dx} + O(\Delta x)^3 \quad (2.11)$$

ou

$$\frac{df_i}{dx} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2 \Delta x} + O(\Delta x)^2, \quad (2.12)$$

que é denominada uma equação de diferença central de segunda ordem para  $df_i/dx$  [33]. Note que, nesse caso, o ELT possui ordem dois e, portanto, essa fórmula gera melhores aproximações que (2.6) e (2.9).

Para determinar uma aproximação por diferenças finitas para a derivada de segunda ordem de  $f$ , adiciona-se (2.4) e (2.7) termo a termo, de modo a obter

$$f(x_i + \Delta x) + f(x_i - \Delta x) = 2f(x_i) + 2 \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} + 2 \frac{(\Delta x)^4}{4!} \frac{d^4 f(x)}{dx^4} + \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^{n+1} f(\bar{x}_a)}{dx^{n+1}} - \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^{n+1} f(\bar{x}_b)}{dx^{n+1}}, \quad (2.13)$$

que pode ser reescrito de maneira simplificada como

$$\frac{f(x_i + \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i - \Delta x)}{(\Delta x)^2} = \frac{d^2 f(x_i)}{dx^2} + O(\Delta x)^2 \quad (2.14)$$

ou

$$\frac{d^2 f_i}{dx^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2. \quad (2.15)$$

Na próxima seção é apresentado um método iterativo para resolução de sistemas lineares, os quais aparecem na discretização das EDPs.

### 2.3 MÉTODO ITERATIVO DE GAUSS-SEIDEL

A equação de diferenças finitas de uma determinada EDP, quando calculada em cada ponto do domínio computacional, gera um sistema de equações algébricas que podem estar acopladas ou não. No caso de estarem acopladas, para obter a solução numérica da EDP, faz-se necessário resolver um sistema linear [20].

Existem várias técnicas para resolver sistemas lineares, podendo ser diretas ou iterativas. Para Fortuna [20] "o termo *métodos diretos* se refere às técnicas que, na ausência de erros de arredondamento e após um número finito de passos, obtém a solução exata do sistema linear, caso ela exista [...]". Já os *métodos iterativos*, segundo Heath [26], "iniciam com uma estimativa inicial para a solução e melhoram-na sucessivamente até que a solução seja tão precisa quanto desejada [...]".

Como exemplos de métodos diretos podem ser citados a Eliminação de Gauss [42] e a Fatoração LU [9], e como exemplos de métodos iterativos, o de Jacobi [22] e o de Gauss-Seidel [40]. Vários métodos também podem ser encontrados em [9].

Neste trabalho optou-se por utilizar o método de Gauss-Seidel porque o número de equações dos sistemas lineares gerados pelas discretizações é alto, dificultando a utilização de métodos diretos [20] e, além disso, este método converge mais rápido que o método de Jacobi [26] e é de mais fácil implementação que outros métodos mais robustos

disponíveis na literatura.

Para ilustrar como será aplicado o método de Gauss-Seidel na resolução de sistemas lineares, assim como descrito por Fortuna [20], considere a equação de Laplace bidimensional

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0, \quad (2.16)$$

com condições de contorno do tipo Dirichlet<sup>5</sup>, cuja discretização utilizando diferenças centrais de segunda ordem, equação (2.15), é dada por

$$\frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} = 0. \quad (2.17)$$

Considere também que o domínio  $\Omega$  é uma região quadrada, discretizada por  $\mathcal{M}$ , onde  $\Delta x$  e  $\Delta y$  são uniformes, como mostra a Figura 2.2.

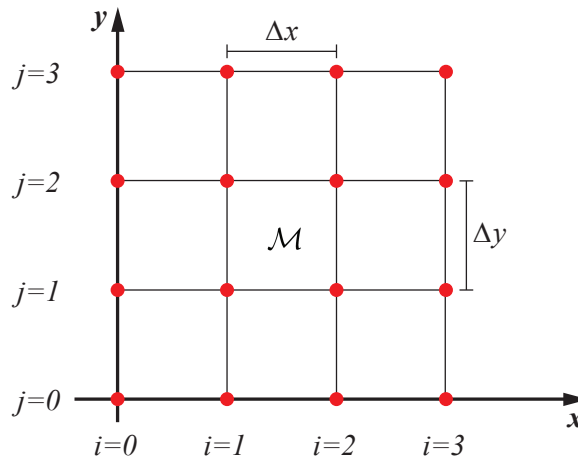


Figura 2.2: Malha computacional para a equação de Laplace [20].

A equação (2.17) pode ser reescrita de maneira simplificada como

$$f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j} + \frac{(\Delta x)^2}{(\Delta y)^2}(f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}) = 0 \quad (2.18)$$

ou

$$f_{i+1,j} + f_{i-1,j} - 2(1 + \beta^2)f_{i,j} + \beta^2(f_{i,j+1} + f_{i,j-1}) = 0, \quad (2.19)$$

em que  $\beta = \Delta x/\Delta y$ , e deve ser resolvida para os pontos no interior de  $\Omega$ , ou seja, para os pontos em que  $i = 1, 2$  e  $j = 1, 2$ . Substituindo os valores de  $i$  e  $j$  na equação (2.19), tem-se o

<sup>5</sup>Condições de contorno do tipo Dirichlet são aquelas que especificam o valor da função  $f(x, y)$  no bordo  $\partial\Omega$  da região.

seguinte sistema,

$$\begin{cases} f_{2,1} + f_{0,1} - 2(1 + \beta^2)f_{1,1} + \beta^2(f_{1,2} + f_{1,0}) = 0 & (2.20) \end{cases}$$

$$\begin{cases} f_{3,1} + f_{1,1} - 2(1 + \beta^2)f_{2,1} + \beta^2(f_{2,2} + f_{2,0}) = 0 & (2.21) \end{cases}$$

$$\begin{cases} f_{2,2} + f_{0,2} - 2(1 + \beta^2)f_{1,2} + \beta^2(f_{1,3} + f_{1,1}) = 0 & (2.22) \end{cases}$$

$$\begin{cases} f_{3,2} + f_{1,2} - 2(1 + \beta^2)f_{2,2} + \beta^2(f_{2,3} + f_{2,1}) = 0. & (2.23) \end{cases}$$

Pode-se reescrever (2.20)-(2.23) de forma matricial, dada por

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \gamma & 1 & \beta^2 & 0 \\ 1 & \gamma & 0 & \beta^2 \\ \beta^2 & 0 & \gamma & 1 \\ 0 & \beta^2 & 1 & \gamma \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} f_{1,1} \\ f_{2,1} \\ f_{1,2} \\ f_{2,2} \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} -f_{1,0}\beta^2 - f_{0,1} \\ -f_{2,0}\beta^2 - f_{3,1} \\ -f_{1,3}\beta^2 - f_{0,2} \\ -f_{2,3}\beta^2 - f_{3,2} \end{pmatrix}}_{\mathbf{b}} \quad (2.24)$$

ou

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (2.25)$$

onde  $\gamma = -2(1 + \beta^2)$ ,  $\mathbf{A}$  é a matriz dos coeficientes,  $\mathbf{x}$  é o vetor solução e  $\mathbf{b}$  é o vetor dos termos independentes. Observe que os valores armazenados por  $\mathbf{b}$  não são incógnitas, visto que a solução do problema é conhecida na fronteira.

Para resolver o sistema (2.25) pelo método de Gauss-Seidel, isola-se uma incógnita de cada equação,

$$f_{1,1} = \frac{(f_{1,2} + f_{1,0})\beta^2 + f_{2,1} + f_{0,1}}{-\gamma}; \quad (2.26)$$

$$f_{2,1} = \frac{(f_{2,2} + f_{2,0})\beta^2 + f_{3,1} + f_{1,1}}{-\gamma}; \quad (2.27)$$

$$f_{1,2} = \frac{(f_{1,3} + f_{1,1})\beta^2 + f_{2,2} + f_{0,2}}{-\gamma}; \quad (2.28)$$

$$f_{2,2} = \frac{(f_{2,3} + f_{2,1})\beta^2 + f_{3,2} + f_{1,2}}{-\gamma} \quad (2.29)$$

e, em seguida, a partir de um "chute" inicial  $\mathbf{x}^{(0)}$ <sup>6</sup>, constroi-se uma sequência  $\mathbf{x}^{(k)} = (f_{1,1}^{(k)}, f_{2,1}^{(k)}, f_{1,2}^{(k)}, f_{2,2}^{(k)})$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , que converge para a solução do sistema. De acordo com Lima [31], a sequência  $\mathbf{x}^{(k)}$  converge para  $\mathbf{x}$  (denota-se  $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \mathbf{x}$ ), se dado  $\epsilon > 0$ , existe  $k_0 \in \mathbb{N}$  tal

<sup>6</sup>Com excessão dos casos em que é especificado seu valor, o vetor  $\mathbf{x}^{(0)}$  será considerado como sendo o vetor nulo.

que  $k > k_0$  implica em  $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}\| < \epsilon$ . A sequência  $\mathbf{x}^{(k)}$  é obtida de modo que

$$f_{1,1}^{(k+1)} = \frac{\left(f_{1,2}^{(k)} + f_{1,0}\right) \beta^2 + f_{2,1}^{(k)} + f_{0,1}}{-\gamma}; \quad (2.30)$$

$$f_{2,1}^{(k+1)} = \frac{\left(f_{2,2}^{(k)} + f_{2,0}\right) \beta^2 + f_{3,1} + f_{1,1}^{(k+1)}}{-\gamma}; \quad (2.31)$$

$$f_{1,2}^{(k+1)} = \frac{\left(f_{1,3} + f_{1,1}^{(k+1)}\right) \beta^2 + f_{2,2}^{(k)} + f_{0,2}}{-\gamma}; \quad (2.32)$$

$$f_{2,2}^{(k+1)} = \frac{\left(f_{2,3} + f_{2,1}^{(k+1)}\right) \beta^2 + f_{3,2} + f_{1,2}^{(k+1)}}{-\gamma}, \quad (2.33)$$

onde as equações (2.30)-(2.33) são as mesmas que (2.26)-(2.29), acrescidas dos índices iterativos  $k$  e  $k + 1$ . Detalhes sobre a convergência e unicidade da solução de um sistema linear utilizando o método de Gauss-Seidel podem ser encontrados em [9, 22, 40].

Na prática, implementa-se o método de Gauss-Seidel para o sistema (2.25) isolando a incógnita  $f_{i,j}$  na equação (2.19), obtendo

$$f_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} + f_{i-1,j} + \beta^2 (f_{i,j+1} + f_{i,j-1})}{-\gamma}. \quad (2.34)$$

Em seguida, faz-se um "chute" inicial  $\mathbf{x}^{(0)}$  e executa-se o **Algoritmo 2.2**.

### Algoritmo 2.2.

*Define-se*  $k = 0$

*Define-se um valor para a tolerância (neste trabalho adotou-se  $10^{-5}$ )*

*Define-se um valor máximo de iterações ( $k_0$ )*

*Define-se*  $\epsilon = 1$

*Enquanto*  $k < k_0$  e  $\epsilon >$  tolerância

$\mathbf{x}_{aux} = \mathbf{x}^{(k)}$

*Para*  $j = 1$  até  $j = 2$

*Para*  $i = 1$  até  $i = 2$

$$f_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} + f_{i-1,j} + \beta^2 (f_{i,j+1} + f_{i,j-1})}{-\gamma}$$

*Fim para*

*Fim para*

$\epsilon = \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}_{aux}\|$

$k = k + 1$

*Fim enquanto*

Observando o **Algoritmo 2.2**, há dois critérios de parada,  $k = k_0$  e  $\epsilon = \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}_{aux}\| \leq$  tolerância. O primeiro critério é necessário, pois em caso de não haver



convergência da sequência, evita que o computador fique iterando demasiadamente, enquanto que o segundo tem como base o critério de Cauchy para convergência de sequências <sup>7</sup>.

Os conceitos apresentados compõem a parte introdutória do método de diferenças finitas. Essas e outras ideias serão aplicadas à discretização e implementação da equação de transporte utilizada neste trabalho.

---

<sup>7</sup>Critério de Cauchy: Segundo Lima [31], a sequência  $\mathbf{x}^{(k)}$  converge quando para todo  $\epsilon > 0$  existe  $k_0 \in \mathbb{N}$  tal que  $k, r > k_0 \Rightarrow \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(r)}\| < \epsilon$ .

### 3 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

Uma das maneiras de simular a concentração de um determinado poluente em um meio aquático é utilizar uma equação de transporte. O modelo adotado para este trabalho é o de advecção-difusão-reação bidimensional (2D) [4], em geral, utilizado quando a profundidade do canal é bem menor que sua largura. Sua equação é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - kC, \quad (3.1)$$

onde  $C$  é a concentração do poluente,  $D_{xx}$  e  $D_{yy}$  são os coeficientes dos termos difusivos nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente,  $v_x$  e  $v_y$  são os coeficientes dos termos advectivos e  $k$  é o coeficiente de primeira ordem da taxa de reação. Os coeficientes  $v_x$  e  $v_y$  são denominados também de velocidades de fluxo e são obtidos resolvendo as equações de Navier-Stokes no domínio computacional [20]<sup>1</sup>.

Segundo a Lei de Fick [44], o processo difusivo de um poluente em um fluido ocorre pela movimentação deste de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração. A advecção de um fluido é o movimento devido ao escoamento hidrodinâmico. Por fim, a taxa de reação descreve como ocorre a variação da concentração de poluente devido a processos químicos e biológicos.

Nesse capítulo, para discretizar a variável temporal da equação (3.1), é utilizado um método descrito por Donea et al. [16] que tem como base os aproximantes de Padé. Por meio desse método determina-se um sistema de equações que envolve a obtenção da solução da equação (3.1) em estágios intermediários de tempo. A partir de algumas estratégias descritas ainda nesse capítulo obtém-se quatro esquemas, a saber, o PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D. A estratégia utilizada na obtenção do esquema PADE/B conduz às mesmas equações que podem ser obtidas por meio do método de Crank-Nicolson e a estratégia geradora do esquema PADE/D é referenciada na literatura como método de Harten/Tal-Ezer [25]. Além dos aproximantes de Padé, para discretizar a equação (3.1), optou-se por diferenças centrais de segunda ordem nas derivadas segundas e diferenças atrasadas de primeira ordem para as derivadas primeiras. Essas escolhas, apesar de estarem sujeitas ao critério de estabilidade  $v_x > 0$  e  $v_y > 0$  [4], têm como objetivo utilizar menor quantidade de pontos da malha computacional, o que facilita os cálculos na fronteira [18], além de diminuir a complexidade do sistema linear a ser resolvido, reduzindo o tempo computacional [20].

Na próxima seção é feita uma introdução aos aproximantes de Padé.

---

<sup>1</sup>Para  $v_x$  e  $v_y$  constantes diz-se que o campo de velocidades é uniforme.

### 3.1 APROXIMANTES DE PADÉ

Com os primeiros registros sobre o assunto datados do século XVIII, os aproximantes de Padé foram estudados inicialmente pelos matemáticos Johan Heinrich Lambert (1728-1777) e Joseph Louis Lagrange (1736-1813), com contribuições também de Carl Gustav Jacob Jacobi (1804-1851) [11].

Apesar de já estudados anteriormente, a análise sistemática desses aproximantes só veio a ocorrer em 1892, quando foi publicada na revista parisiense *Annales Scientifiques École Normale Supérieure* uma tese em que eram discutidas representações de uma função por funções racionais. Essa publicação foi de autoria do matemático francês Henri Eugène Padé (1863-1953), mais conhecido como Henri Padé [36].

Segundo Aguilera-Navarro et al. [2],

entre outras vantagens, o método de Padé permite partir de uma série de potências (por exemplo, aquela obtida de uma modelagem de um problema) e obter muito mais informações do que a própria série pode fornecer diretamente. Pode-se afirmar que o método de Padé (seus aproximantes) é, em muitos sentidos, superior ao método clássico baseado nos desenvolvimentos de Taylor. Sendo uma função racional, os aproximantes de Padé são mais ricos analiticamente do que as funções polinomiais resultantes de truncamentos sucessivos das séries de Taylor. Além de tudo isso os aproximantes de Taylor são casos particulares dos aproximantes de Padé.

De acordo com Press et al. [39] e Baker Jr. et al. [7], um aproximante de Padé da série

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k x^k, \quad (3.2)$$

é uma função racional da forma

$$R_{L,M}(x) = \frac{\sum_{k=0}^L p_k x^k}{1 + \sum_{k=1}^M q_k x^k}, \quad (3.3)$$

que satisfaz

$$\sum_{k=0}^L f_k x^k - \frac{\sum_{k=0}^L p_k x^k}{1 + \sum_{k=1}^M q_k x^k} = O(x^{L+M+1}) \quad (3.4)$$

quando  $x \rightarrow 0$ . O número  $L + M$  é a ordem do aproximante de Padé.

Segundo Ladeia [29] e Coelho [11], uma maneira de determinar os coeficientes  $p_k$  e  $q_k$  a partir de (3.4), é dada por

$$\sum_{k=0}^L p_k x^k = \left( \sum_{k=0}^L f_k x^k \right) \left( 1 + \sum_{k=1}^M q_k x^k \right) + O(x^{L+M+1}) \quad (3.5)$$

ou, de forma mais explícita,

$$\begin{aligned} p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \dots + p_L x^L = \\ (f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + \dots + f_L x^L)(1 + q_1 x + q_2 x^2 + \dots + q_M x^M) + O(x^{L+M+1}). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Desenvolvendo o lado direito da equação (3.6) e utilizando a identidade de polinômios [5], obtém-se o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} p_0 = f_0 \end{array} \right. \quad (3.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p_1 = f_1 + q_1 f_0 \end{array} \right. \quad (3.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p_2 = f_2 + q_1 f_1 + q_2 f_0 \end{array} \right. \quad (3.9)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ p_L = f_L + q_1 f_{L-1} + \dots + q_L f_0 \end{array} \right. \quad (3.10)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = f_{L+1} + q_1 f_L + \dots + q_M f_{L-M+1} \end{array} \right. \quad (3.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = f_{L+2} + q_1 f_{L+1} + \dots + q_M f_{L-M+2} \end{array} \right. \quad (3.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ 0 = f_{L+M} + q_1 f_{L+M-1} + \dots + q_M f_L. \end{array} \right. \quad (3.13)$$

Desde que o sistema admita solução e  $L + M + 1 \leq N$ , o aproximante de Padé existe e é único [2].

Para este trabalho, o estudo sobre aproximantes de Padé se limitará ao aproximante da função exponencial, cuja Expansão de Taylor é

$$f(x) = \exp(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}. \quad (3.14)$$

A Tabela 3.1 apresenta alguns aproximantes de Padé para a função exponencial, obtidos a partir de (3.14).

Tabela 3.1: Alguns aproximantes de Padé para a função  $\exp(x)$  [3, 16].

$R_{L,M}$	$M = 0$	$M = 1$	$M = 2$	$M = 3$
$L = 0$	1	$\frac{1}{1-x}$	$\frac{2}{2-2x+x^2}$	$\frac{6}{6-6x+3x^2-x^3}$
$L = 1$	$\frac{1+x}{1}$	$\frac{2+x}{2-x}$	$\frac{6+2x}{6-4x+x^2}$	$\frac{24+6x}{24-18x+6x^2-x^3}$
$L = 2$	$\frac{2+2x+x^2}{2}$	$\frac{6+4x+x^2}{6-2x}$	$\frac{12+6x+x^2}{12-6x+x^2}$	$\frac{60+24x+3x^2}{60-36x+9x^2-x^3}$
$L = 3$	$\frac{6+6x+3x^2+x^3}{6}$	$\frac{24+18x+6x^2+x^3}{24-6x}$	$\frac{60+36x+9x^2+x^3}{60-24x+3x^2}$	$\frac{120+60x+12x^2+x^3}{120-60x+12x^2-x^3}$

A fim de comparar o desempenho dos aproximantes de Padé frente aos polinômios obtidos a partir da Fórmula de Taylor, são apresentados na Figura 3.1a os gráficos de  $f(x) = \exp(x)$ , sua aproximação utilizando os polinômios de grau 2 e 4 obtidos a partir da Fórmula de Taylor ( $h(x) = 1 + x + x^2/2$  e  $g(x) = 1 + x + x^2/2 + x^3/6 + x^4/24$ ) e os aproximantes de Padé de grau 2 e 4 ( $R_{1,1}(x) = (2+x)/(2-x)$  e  $R_{2,2} = (12+6x+x^2)/(12-6x+x^2)$ ). Além disso, na Figura 3.1b são apresentados os gráficos de  $\text{abs}(f(x) - h(x))$ ,  $\text{abs}(f(x) - R_{1,1}(x))$ ,  $\text{abs}(f(x) - g(x))$  e  $\text{abs}(f(x) - R_{2,2}(x))$ .

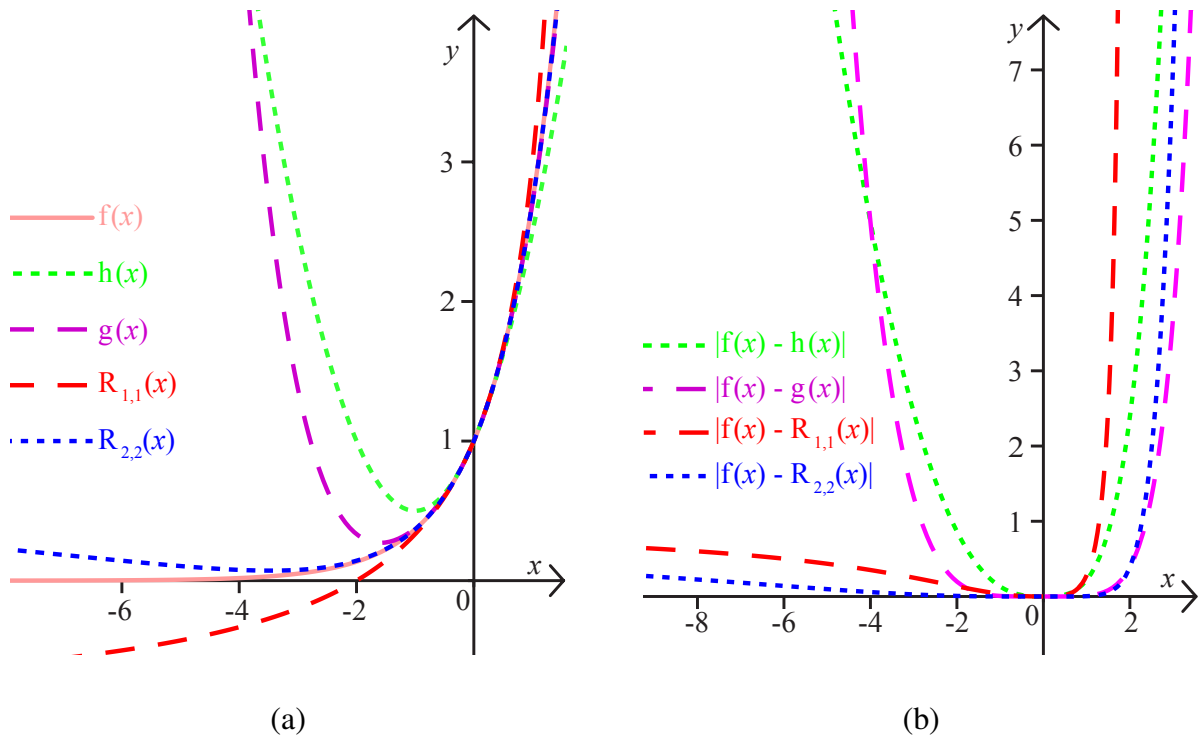


Figura 3.1: (a) Aproximações para a função exponencial utilizando os polinômios  $h(x)$  e  $g(x)$  obtidos a partir da Fórmula de Taylor e os aproximantes de Padé  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$ . (b) Erro absoluto das aproximações da função exponencial.

Uma análise mais criteriosa do erro de aproximação da função exponencial

pode ser feita observando o maior erro absoluto cometido em alguns subintervalos, apresentado na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Maior erro absoluto cometido ao aproximar a função exponencial em alguns subintervalos.

Intervalo	$[-0.25, 0.25]$	$[-0.50, 0.50]$	$[-0.75, 0.75]$	$[-1.00, 1.00]$
$\max(\text{abs}(f(x) - h(x)))$	0.002775	0.023721	0.085750	0.218280
$\max(\text{abs}(f(x) - g(x)))$	0.000008	0.000284	0.002254	0.009949
$\max(\text{abs}(f(x) - R_{1,1}(x)))$	0.001689	0.017945	0.083000	0.281720
$\max(\text{abs}(f(x) - R_{2,2}(x)))$	0.000002	0.000073	0.000721	0.003996

Observa-se na Figura 3.1 e na Tabela 3.2 que, nesse caso, os aproximantes de Padé  $R_{1,1}$  e  $R_{2,2}$  geraram melhores aproximações do que os polinômios de Taylor  $h(x)$  e  $g(x)$ , respectivamente, resultados que também podem ser confirmados em [2]. Em geral, quando comparado o aproximante de Padé  $R_{L,M}$  (da Tabela 3.1) com a Fórmula de Taylor (3.14) com  $k = L + M$ , os resultados são muitos semelhantes ou, em alguns casos, mais vantajosos em favor dos aproximantes de Padé.

Donea et al. [16] sugerem que o bom desempenho dos aproximantes de Padé motiva a utilização dos mesmos na discretização de problemas transientes, como é o caso da equação de transporte bidimensional. Por essa razão o objetivo principal deste trabalho é utilizar o aproximante  $R_{2,2}$  na discretização da derivada temporal presente na equação de transporte bidimensional, procedimento que é apresentado na Seção 3.2.

### 3.2 DISCRETIZAÇÃO DA DERIVADA TEMPORAL

Nessa seção é apresentada uma aproximação para a derivada temporal presente na equação (3.1), como proposto por Donea et al. [16], onde é utilizado o aproximante de Padé  $R_{2,2}$ .

Considerando  $C^{n+1}$  uma solução da equação de transporte para  $t^{n+1} = (n + 1) \Delta t$ , pode-se supor que  $C^{n+1}$  seja aproximada pela Expansão de Taylor a partir de  $C^n$ , uma solução da equação de transporte para  $t^n = n \Delta t$ , ou seja,

$$\begin{aligned}
 C^{n+1} &= C^n + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} C^n + \frac{1}{2!} \Delta t^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} C^n + \frac{1}{3!} \Delta t^3 \frac{\partial^3}{\partial t^3} C^n + \frac{1}{4!} \Delta t^4 \frac{\partial^4}{\partial t^4} C^n + \dots \\
 &= \left( 1 + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2!} \Delta t^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{3!} \Delta t^3 \frac{\partial^3}{\partial t^3} + \frac{1}{4!} \Delta t^4 \frac{\partial^4}{\partial t^4} + \dots \right) C^n \\
 &= \exp \left( \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right) C^n,
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

tal como ilustrado na Figura 3.2.

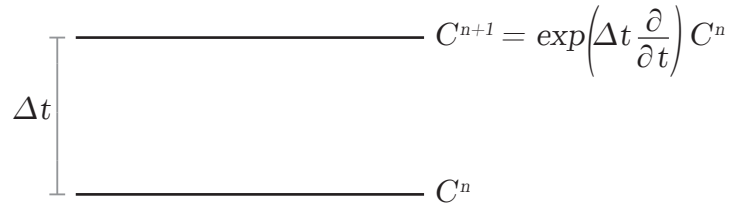


Figura 3.2: Níveis de tempo  $n$  e  $n + 1$ .

Portanto,  $C^{n+1}$  pode ser representada como  $\exp(\Delta t \partial/\partial t) C^n$ . Segundo Argyris et al. [3], pode-se representar  $\exp(\Delta t \partial/\partial t)$  utilizando o aproximante de Padé  $R_{2,2}$ , resultando em

$$\exp\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right) \simeq R_{2,2}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right) = \frac{1 + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)^2}{1 - \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)^2}. \quad (3.16)$$

Substituindo (3.16) em (3.15), tem-se

$$C^{m+1} \simeq \left[ \frac{1 + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)^2}{1 - \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)^2} \right] C^n, \quad (3.17)$$

que é equivalente a escrever

$$\left[ 1 - \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \right] C^{m+1} \simeq \left[ 1 + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12}\left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \right] C^n \quad (3.18)$$

ou ainda,

$$\left[ 1 - \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( 1 - \frac{1}{6}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] C^{m+1} \simeq \left[ 1 + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left( 1 + \frac{1}{6}\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] C^n. \quad (3.19)$$

Aproximações para os termos entre parênteses de (3.19) podem ser obtidas utilizando a Expansão de Taylor a partir de  $C^{n+5/6}$  e  $C^{n+1/6}$  da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} C^{n+1/6} &= \frac{C^n}{0!} + \left(\frac{\Delta t}{6}\right) \frac{\partial}{\partial t} \frac{C^n}{1!} + \left(\frac{\Delta t}{6}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{C^n}{2!} + \dots \\ &\simeq C^n + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t}; \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} C^{n+5/6} &= \frac{C^{n+1}}{0!} + \left(-\frac{\Delta t}{6}\right) \frac{\partial}{\partial t} \frac{C^{n+1}}{1!} + \left(-\frac{\Delta t}{6}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{C^{n+1}}{2!} + \dots \\ &\simeq C^{n+1} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

como pode ser observado na Figura 3.3.

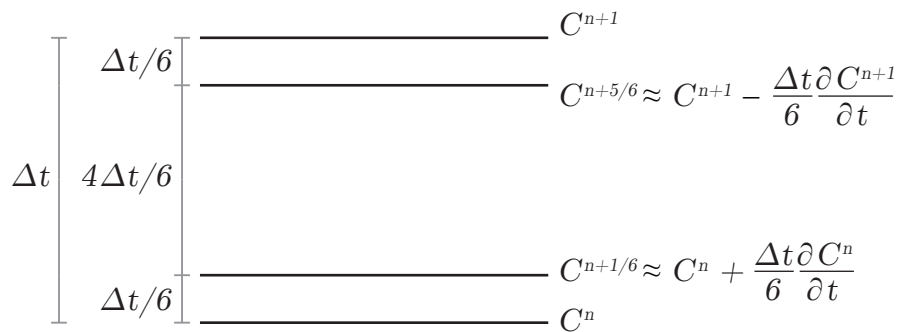


Figura 3.3: Níveis de tempo  $n$ ,  $n + 1/6$ ,  $n + 5/6$  e  $n + 1$ .

Agora, utilizando (3.20) e (3.21) reescreve-se a equação (3.19) como

$$C^{n+1} - \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial t} \simeq C^n + \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t}. \quad (3.22)$$

Similarmente, expandindo  $C^{n+1/2}$  em série de Taylor, tem-se

$$\begin{aligned} C^{n+1/2} &= \frac{C^n}{0!} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right) \frac{\partial C^n}{\partial t} \frac{1}{1!} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 C^n}{\partial t^2} \frac{1}{2!} + \dots \\ &\simeq C^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^n}{\partial t} \\ &\simeq C^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

como representado na Figura 3.4.

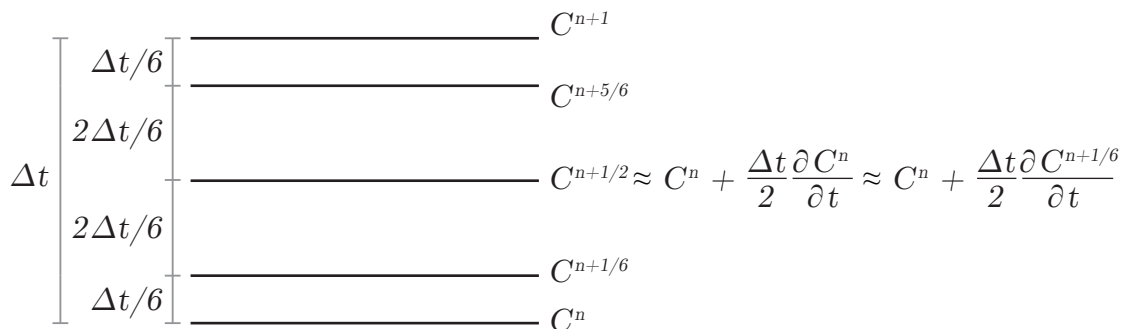


Figura 3.4: Níveis de tempo  $n$ ,  $n + 1/6$ ,  $n + 1/2$ ,  $n + 5/6$  e  $n + 1$ .

A partir de (3.22) e (3.23), obtém-se

$$C^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial t} \simeq C^{n+1/2}. \quad (3.24)$$



As equações (3.20), (3.23), (3.21) e (3.24) formam o sistema

$$\begin{cases} C^{n+1/6} \simeq C^n + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} & (3.25) \\ C^{n+1/2} \simeq C^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t} & (3.26) \\ C^{n+5/6} \simeq C^{n+1} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} & (3.27) \\ C^{n+1} \simeq C^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial t}, & (3.28) \end{cases}$$

que envolve cinco estágios de tempo, sendo três intermediários, como proposto por Donea et al. [16].

Substituindo  $C^n$  de (3.25) em (3.26), tem-se

$$C^{n+1/2} \simeq C^{n+1/6} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t}, \quad (3.29)$$

que ao ser substituída em (3.28) resulta em

$$C^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial t} \simeq C^{n+1/6} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t}. \quad (3.30)$$

Finalmente, incluindo a aproximação (3.27) em (3.30), obtém-se

$$C^{n+5/6} + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial t} \simeq C^{n+1/6} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t}. \quad (3.31)$$

Observe que o nível de tempo  $n + 1/2$  não está presente na equação (3.31).

Na Seção 3.3 o sistema formado pelas equações (3.25)-(3.28) e a equação (3.31) são utilizados para aproximar a derivada temporal da equação (3.1).

### 3.3 TRATAMENTO DAS DERIVADAS ESPACIAIS

Para dar continuidade à discretização da equação (3.1), deve-se reescrevê-la acrescentando os índices temporais  $n$ ,  $n + 1/6$ ,  $n + 5/6$  e  $n + 1$ , que aparecem na equação (3.31). Além disso, falta determinar aproximações por diferenças finitas para as derivadas  $\partial^2 C / \partial x^2$ ,  $\partial^2 C / \partial y^2$ ,  $\partial C / \partial x$  e  $\partial C / \partial y$ .

Reescrevendo a equação (3.1) com a inclusão dos índices temporais  $n$ ,  $n + 1/6$ ,  $n + 5/6$  e  $n + 1$ , obtém-se

$$\frac{\partial C^n}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C^n}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^n}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^n}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^n}{\partial y} - k C^n; \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C^{n+1/6}}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^{n+1/6}}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial y} - kC^{n+1/6}; \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C^{n+5/6}}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^{n+5/6}}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial y} - kC^{n+5/6}; \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C^{n+1}}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^{n+1}}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^{n+1}}{\partial y} - kC^{n+1}. \quad (3.35)$$

Substituindo as equações (3.32)-(3.35) em (3.31), segue que

$$\begin{aligned} & C^{n+5/6} + \frac{\Delta t}{6} \left[ D_{xx} \frac{\partial^2 C^{n+1}}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^{n+1}}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^{n+1}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^{n+1}}{\partial y} - kC^{n+1} \right] \\ & + \left[ -\frac{\Delta t}{2} \right] \left[ D_{xx} \frac{\partial^2 C^{n+5/6}}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^{n+5/6}}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^{n+5/6}}{\partial y} - kC^{n+5/6} \right] \\ & = C^{n+1/6} - \frac{\Delta t}{6} \left[ D_{xx} \frac{\partial^2 C^n}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^n}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^n}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^n}{\partial y} - kC^n \right] \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left[ D_{xx} \frac{\partial^2 C^{n+1/6}}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C^{n+1/6}}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial y} - kC^{n+1/6} \right]. \quad (3.36) \end{aligned}$$

Para as derivadas espaciais de ordem dois utiliza-se diferenças centrais

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \simeq \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}, \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \simeq \frac{C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}. \quad (3.38)$$

Enquanto, para as derivadas espaciais de ordem um, utiliza-se diferenças atrasadas

$$\frac{\partial C}{\partial x} \simeq \frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{\Delta x}; \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} \simeq \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{\Delta y}. \quad (3.40)$$

Substituindo as aproximações (3.37)-(3.40) na equação (3.36), segue que

$$\begin{aligned} & C_{i,j}^{n+5/6} + \frac{\Delta t}{6} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right. \\ & \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} - kC_{i,j}^{n+1} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ -\frac{\Delta t}{2} \right] \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{n+5/6} - 2C_{i,j}^{n+5/6} + C_{i-1,j}^{n+5/6}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{n+5/6} - 2C_{i,j}^{n+5/6} + C_{i,j-1}^{n+5/6}}{(\Delta y)^2} \right. \\
& \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{n+5/6} - C_{i-1,j}^{n+5/6}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{n+5/6} - C_{i,j-1}^{n+5/6}}{\Delta y} - kC_{i,j}^{n+5/6} \right] \\
& = C_{i,j}^{n+1/6} - \frac{\Delta t}{6} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \right. \\
& \left. - v_x \frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} - kC_{i,j}^n \right] \\
& + \frac{\Delta t}{2} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{n+1/6} - 2C_{i,j}^{n+1/6} + C_{i-1,j}^{n+1/6}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{n+1/6} - 2C_{i,j}^{n+1/6} + C_{i,j-1}^{n+1/6}}{(\Delta y)^2} \right. \\
& \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{n+1/6} - C_{i-1,j}^{n+1/6}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{n+1/6} - C_{i,j-1}^{n+1/6}}{\Delta y} - kC_{i,j}^{n+1/6} \right]. \tag{3.41}
\end{aligned}$$

A equação (3.41) corresponde a uma discretização da equação de transporte (3.1).

Na próxima seção será discutido como calcular os valores para  $C^{n+1}$  sendo conhecidos *a priori* apenas os valores para  $C^n$ .

### 3.4 NÍVEIS DE TEMPO INTERMEDIÁRIOS

De início não há como utilizar diretamente a equação (3.41) para resolver um problema de transporte, pois a solução nos níveis de tempo intermediários é desconhecida. Por esse motivo, nesta seção, são apresentadas algumas estratégias que podem ser utilizadas para calcular a solução da equação de transporte no nível de tempo  $n + 1$ , considerando conhecida apenas a solução no nível de tempo  $n$ . Além da equação (3.41), também são obtidas soluções por meio do sistema formado pelas equações (3.25)-(3.28), assunto que será discutido na estratégia (D).

#### 3.4.1 Estratégia A

Na estratégia (A) utiliza-se uma das mais simples aproximações das soluções nos níveis  $n + 1/6$  e  $n + 5/6$ , dadas por

$$C^{n+5/6} \simeq C^{n+1}, \tag{3.42}$$

$$C^{n+1/6} \simeq C^n, \tag{3.43}$$

como ilustrado na Figura 3.5.

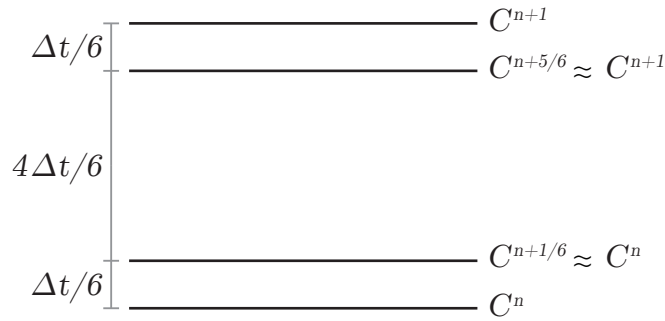


Figura 3.5: Esquema de aproximação dos tempos intermediários da estratégia (A).

Substituindo (3.42) e (3.43) na equação (3.31), tem-se

$$C^{m+1} + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial t} = C^m - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^m}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^m}{\partial t} \quad (3.44)$$

ou ainda,

$$C^{m+1} - \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial t} = C^m + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial C^m}{\partial t}. \quad (3.45)$$

Incluindo os índices espaciais em (3.45) e substituindo as equações (3.37)-(3.40), se obtém o seguinte esquema,

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{m+1} - \frac{\Delta t}{3} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{m+1} - 2C_{i,j}^{m+1} + C_{i-1,j}^{m+1}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{m+1} - 2C_{i,j}^{m+1} + C_{i,j-1}^{m+1}}{(\Delta y)^2} \right. \\ \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{m+1} - C_{i-1,j}^{m+1}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{m+1} - C_{i,j-1}^{m+1}}{\Delta y} - kC_{i,j}^{m+1} \right] \\ = C_{i,j}^m + \frac{\Delta t}{3} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^m - 2C_{i,j}^m + C_{i-1,j}^m}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^m - 2C_{i,j}^m + C_{i,j-1}^m}{(\Delta y)^2} \right. \\ \left. - v_x \frac{C_{i,j}^m - C_{i-1,j}^m}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^m - C_{i,j-1}^m}{\Delta y} - kC_{i,j}^m \right]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Isolando os coeficientes em (3.46) tem-se

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} \right) C_{i-1,j}^{m+1} \\ & + \left( \frac{2\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{3\Delta y} + \frac{2\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} + \frac{\Delta t k}{3} + 1 \right) C_{i,j}^{m+1} \\ & + \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^{m+1} + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{3\Delta y} \right) C_{i,j-1}^{m+1} + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^{m+1} \\ & = \left( \frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} \right) C_{i-1,j}^m \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left( -\frac{2 \Delta t D_{yy}}{3 (\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{3 \Delta y} - \frac{2 \Delta t D_{xx}}{3 (\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{3 \Delta x} - \frac{\Delta t k}{3} + 1 \right) C_{i,j}^n \\
& + \left( \frac{\Delta t D_{xx}}{3 (\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^n + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{3 (\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{3 \Delta y} \right) C_{i,j-1}^n + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{3 (\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^n. \tag{3.47}
\end{aligned}$$

Considerando as igualdades

$$a = \frac{\Delta t D_{xx}}{3 (\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{3 \Delta x}; \tag{3.48}$$

$$b = \frac{2 \Delta t D_{yy}}{3 (\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{3 \Delta y} + \frac{2 \Delta t D_{xx}}{3 (\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{3 \Delta x} + \frac{\Delta t k}{3}; \tag{3.49}$$

$$c = \frac{\Delta t D_{xx}}{3 (\Delta x)^2}; \tag{3.50}$$

$$d = \frac{\Delta t D_{yy}}{3 (\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{3 \Delta y}; \tag{3.51}$$

$$e = \frac{\Delta t D_{yy}}{3 (\Delta y)^2}, \tag{3.52}$$

pode-se reescrever (3.47) na forma simplificada, dada por

$$\begin{aligned}
& - a C_{i-1,j}^{n+1} + (b+1) C_{i,j}^{n+1} - c C_{i+1,j}^{n+1} - d C_{i,j-1}^{n+1} - e C_{i,j+1}^{n+1} \\
& = a C_{i-1,j}^n + (-b+1) C_{i,j}^n + c C_{i+1,j}^n + d C_{i,j-1}^n + e C_{i,j+1}^n. \tag{3.53}
\end{aligned}$$

A equação (3.53) estabelece uma relação entre uma matriz de um nível de tempo  $n$  e outra do nível de tempo  $n+1$ . Para  $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$ , o sistema linear gerado pela equação (3.53) é escrito de forma matricial dada por

$$\underbrace{\begin{pmatrix} b+1 & -c & 0 & -e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -a & b+1 & -c & 0 & -e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -a & b+1 & 0 & 0 & -e & 0 & 0 & 0 \\ -d & 0 & 0 & b+1 & -c & 0 & -e & 0 & 0 \\ 0 & -d & 0 & -a & b+1 & -c & 0 & -e & 0 \\ 0 & 0 & -d & 0 & -a & b+1 & 0 & 0 & -e \\ 0 & 0 & 0 & -d & 0 & 0 & b+1 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d & 0 & -a & b+1 & -c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -d & 0 & -a & b+1 \end{pmatrix}}_M \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1} \\ C_{1,2}^{n+1} \\ C_{1,3}^{n+1} \\ C_{2,1}^{n+1} \\ C_{2,2}^{n+1} \\ C_{2,3}^{n+1} \\ C_{3,1}^{n+1} \\ C_{3,2}^{n+1} \\ C_{3,3}^{n+1} \end{pmatrix}}_{C^{n+1}} =$$

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\begin{pmatrix} 1-b & c & 0 & e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1-b & c & 0 & e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 1-b & 0 & 0 & e & 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 & 1-b & c & 0 & e & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & a & 1-b & c & 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & a & 1-b & 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & 0 & d & 0 & 0 & 1-b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 & a & 1-b & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 & a & 1-b \end{pmatrix}}_N + \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^n \\ C_{1,2}^n \\ C_{1,3}^n \\ C_{2,1}^n \\ C_{2,2}^n \\ C_{2,3}^n \\ C_{3,1}^n \\ C_{3,2}^n \\ C_{3,3}^n \end{pmatrix}}_{C^n} \\
& \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,0}^n d + C_{0,1}^n a \\ C_{2,0}^n d \\ C_{3,0}^n d + C_{4,1}^n c \\ C_{0,2}^n a \\ 0 \\ C_{4,2}^n c \\ C_{1,4}^n e + C_{0,3}^n a \\ C_{2,4}^n e \\ C_{3,4}^n e + C_{4,3}^n c \end{pmatrix}}_{P^n} + \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,0}^{n+1} d + C_{0,1}^{n+1} a \\ C_{2,0}^{n+1} d \\ C_{3,0}^{n+1} d + C_{4,1}^{n+1} c \\ C_{0,2}^{n+1} a \\ 0 \\ C_{4,2}^{n+1} c \\ C_{1,4}^{n+1} e + C_{0,3}^{n+1} a \\ C_{2,4}^{n+1} e \\ C_{3,4}^{n+1} e + C_{4,3}^{n+1} c \end{pmatrix}}_{P^{n+1}} \\
& \hspace{15em} (3.54)
\end{aligned}$$

ou ainda,

$$M C^{n+1} = N C^n + P^n + P^{n+1}. \quad (3.55)$$

O sistema linear (3.55) é resolvido utilizando o método iterativo de Gauss-Seidel, onde as matrizes  $M$ ,  $N$  e  $C^n$  são conhecidas e os vetores  $P^n$  e  $P^{n+1}$  armazenam valores fora do domínio computacional, pois  $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$ . O "chute" inicial para a resolução do sistema linear é copiado do estágio anterior, ou seja,  $\mathbf{x}^{(0)} = C^n$ .

Os valores armazenados por  $P^n$  são calculados por meio da aplicação de pontos fantasmas [18, 20, 43], onde atribui-se a cada ponto fora do domínio o mesmo valor atribuído ao ponto mais próximo pertencente ao domínio. O ponto de coordenada  $i = 1$  e  $j = 0$ , por exemplo, recebe o mesmo valor que é atribuído ao de coordenada  $i = 1$  e  $j = 1$ , ou seja,  $C_{1,0}^n = C_{1,1}^n$ . Como a matriz  $C^{n+1}$  é desconhecida, não é possível proceder da mesma maneira para  $P^{n+1}$ , razão pela qual convencionou-se utilizar  $P^{n+1} = P^n$  para  $k = 0$ , como descrito na Seção 2.3. A partir de  $k = 1$  o vetor  $P^{n+1}$  é atualizado a cada nível iterativo,  $k = 1, 2, 3, \dots, k_0$ .

O método obtido por meio da estratégia (A) é denominado PADE/A.

### 3.4.2 Estratégia B

Na tentativa de aprimorar a estratégia (A), pode-se considerar que a concentração do poluente no nível de tempo  $n + 1/6$  é dependente das concentrações nos níveis de tempo  $n$  e  $n + 1$ . Como o nível  $n + 1/6$  está mais próximo de  $n$  do que de  $n + 1$ , supõe-se que  $C^n$  possui uma maior influência sobre  $C^{n+1/6}$  do que  $C^{n+1}$ . O mesmo raciocínio vale para  $C^{n+5/6}$ .

Para relacionar  $C^{n+1/6}$  com  $C^n$  e  $C^{n+1}$  utiliza-se a média ponderada. Observando atentamente, a estratégia (A) é um caso particular de média ponderada, em que um dos pesos é 1 e o outro é 0. Entretanto, para haver alguma interação entre as concentrações nos diferentes níveis de tempo, os pesos são calculados considerando a distância entre os níveis. Desse modo, segue que

$$C^{n+5/6} \simeq \frac{5}{6}C^{n+1} + \frac{1}{6}C^n; \quad (3.56)$$

$$C^{n+1/6} \simeq \frac{1}{6}C^{n+1} + \frac{5}{6}C^n, \quad (3.57)$$

aproximações que podem ser observadas na Figura 3.6.

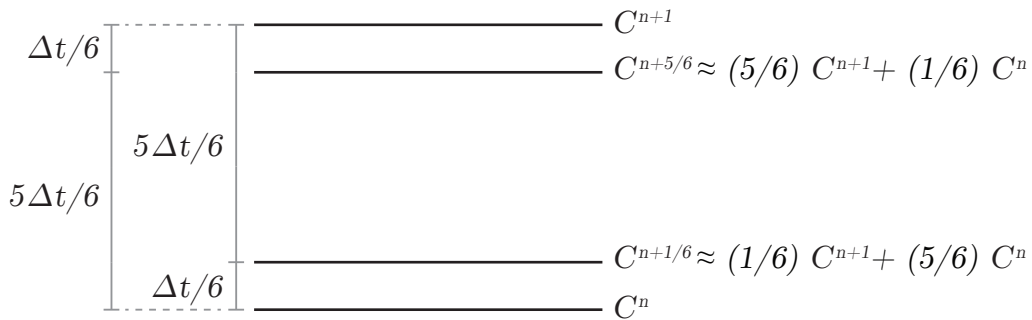


Figura 3.6: Esquema de aproximação dos tempos intermediários da estratégia (B).

Substituindo as relações (3.56) e (3.57) na equação (3.31), obtém-se

$$\begin{aligned} & \left( \frac{5}{6}C^{n+1} + \frac{1}{6}C^n \right) + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{5}{6}C^{n+1} + \frac{1}{6}C^n \right) \\ &= \left( \frac{1}{6}C^{n+1} + \frac{5}{6}C^n \right) - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{6}C^{n+1} + \frac{5}{6}C^n \right), \end{aligned} \quad (3.58)$$

que é equivalente a

$$\begin{aligned} & \frac{5}{6}C^{n+1} - \frac{1}{6}C^{n+1} + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} - \frac{5 \Delta t}{12} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} - \frac{\Delta t}{12} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} \\ &= \frac{5}{6}C^n - \frac{1}{6}C^n - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{5 \Delta t}{12} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{12} \frac{\partial C^n}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Simplificando a equação (3.59), tem-se

$$\frac{2}{3}C^{m+1} - \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial C^{m+1}}{\partial t} = \frac{2}{3}C^m + \frac{\Delta t}{3} \frac{\partial C^m}{\partial t}. \quad (3.60)$$

Acrescentando os índices espaciais em (3.60) e substituindo as equações (3.32) e (3.35), obtém-se o seguinte esquema,

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3}C_{i,j}^{m+1} - \frac{\Delta t}{3} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{m+1} - 2C_{i,j}^{m+1} + C_{i-1,j}^{m+1}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{m+1} - 2C_{i,j}^{m+1} + C_{i,j-1}^{m+1}}{(\Delta y)^2} \right. \\ & \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{m+1} - C_{i-1,j}^{m+1}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{m+1} - C_{i,j-1}^{m+1}}{\Delta y} - kC_{i,j}^{m+1} \right] \\ & = \frac{2}{3}C_{i,j}^m + \frac{\Delta t}{3} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^m - 2C_{i,j}^m + C_{i-1,j}^m}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^m - 2C_{i,j}^m + C_{i,j-1}^m}{(\Delta y)^2} \right. \\ & \left. - v_x \frac{C_{i,j}^m - C_{i-1,j}^m}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^m - C_{i,j-1}^m}{\Delta y} - kC_{i,j}^m \right]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Isolando os coeficientes em (3.61), tem-se

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} \right) C_{i-1,j}^{m+1} \\ & + \left( \frac{2\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{3\Delta y} + \frac{2\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} + \frac{\Delta t k}{3} + \frac{2}{3} \right) C_{i,j}^{m+1} \\ & + \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^{m+1} + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{3\Delta y} \right) C_{i,j-1}^{m+1} + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^{m+1} \\ & = \left( \frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} \right) C_{i-1,j}^m \\ & + \left( -\frac{2\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{3\Delta y} - \frac{2\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{3\Delta x} - \frac{\Delta t k}{3} + \frac{2}{3} \right) C_{i,j}^m \\ & + \left( \frac{\Delta t D_{xx}}{3(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^m + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{3\Delta y} \right) C_{i,j-1}^m + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{3(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^m. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Utilizando as igualdades (3.48)-(3.52), reescreve-se a equação (3.62) da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} & -a C_{i-1,j}^{m+1} + \left( b + \frac{2}{3} \right) C_{i,j}^{m+1} - c C_{i+1,j}^{m+1} - d C_{i,j-1}^{m+1} - e C_{i,j+1}^{m+1} \\ & = a C_{i-1,j}^m + \left( -b + \frac{2}{3} \right) C_{i,j}^m + c C_{i+1,j}^m + d C_{i,j-1}^m + e C_{i,j+1}^m. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Novamente, a equação (3.63) estabelece uma relação entre duas matrizes de níveis de tempo distintos. Para  $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$ , o sistema linear gerado pela equação (3.63) é escrito



de forma matricial dada por

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\begin{pmatrix} b + \frac{2}{3} & -c & 0 & -e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -a & b + \frac{2}{3} & -c & 0 & -e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -a & b + \frac{2}{3} & 0 & 0 & -e & 0 & 0 & 0 \\ -d & 0 & 0 & b + \frac{2}{3} & -c & 0 & -e & 0 & 0 \\ 0 & -d & 0 & -a & b + \frac{2}{3} & -c & 0 & -e & 0 \\ 0 & 0 & -d & 0 & -a & b + \frac{2}{3} & 0 & 0 & -e \\ 0 & 0 & 0 & -d & 0 & 0 & b + \frac{2}{3} & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d & 0 & -a & b + \frac{2}{3} & -c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -d & 0 & -a & b + \frac{2}{3} \end{pmatrix}}_{M} \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1} \\ C_{1,2}^{n+1} \\ C_{1,3}^{n+1} \\ C_{2,1}^{n+1} \\ C_{2,2}^{n+1} \\ C_{2,3}^{n+1} \\ C_{3,1}^{n+1} \\ C_{3,2}^{n+1} \\ C_{3,3}^{n+1} \end{pmatrix}}_{C^{n+1}} = \\
 & \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{2}{3} - b & c & 0 & e & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & \frac{2}{3} - b & c & 0 & e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & \frac{2}{3} - b & 0 & 0 & e & 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 & \frac{2}{3} - b & c & 0 & e & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & a & \frac{2}{3} - b & c & 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & d & 0 & a & \frac{2}{3} - b & 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & 0 & d & 0 & 0 & \frac{2}{3} - b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 & a & \frac{2}{3} - b & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d & 0 & a & \frac{2}{3} - b \end{pmatrix}}_{N} \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^n \\ C_{1,2}^n \\ C_{1,3}^n \\ C_{2,1}^n \\ C_{2,2}^n \\ C_{2,3}^n \\ C_{3,1}^n \\ C_{3,2}^n \\ C_{3,3}^n \end{pmatrix}}_{C^n} + \\
 & \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,0}^n d + C_{0,1}^n a \\ C_{2,0}^n d \\ C_{3,0}^n d + C_{4,1}^n c \\ C_{0,2}^n a \\ 0 \\ C_{4,2}^n c \\ C_{1,4}^n e + C_{0,3}^n a \\ C_{2,4}^n e \\ C_{3,4}^n e + C_{4,3}^n c \end{pmatrix}}_{P^n} + \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,0}^{n+1} d + C_{0,1}^{n+1} a \\ C_{2,0}^{n+1} d \\ C_{3,0}^{n+1} d + C_{4,1}^{n+1} c \\ C_{0,2}^{n+1} a \\ 0 \\ C_{4,2}^{n+1} c \\ C_{1,4}^{n+1} e + C_{0,3}^{n+1} a \\ C_{2,4}^{n+1} e \\ C_{3,4}^{n+1} e + C_{4,3}^{n+1} c \end{pmatrix}}_{P^{n+1}} \tag{3.64}
 \end{aligned}$$

ou

$$M C^{n+1} = N C^n + P^n + P^{n+1}. \tag{3.65}$$

Repetem-se aqui as mesmas observações feitas para o PADE/A. O método obtido por meio da estratégia (B), denominado PADE/B, fornece as mesmas equações que podem ser obtidas utilizando o método de Crank-Nicolson [14, 20].

Cabe aqui observar que o método PADE/B também pode ser obtido substituindo  $\exp(\Delta t \partial/\partial t)$  pela aproximação  $R_{1,1}(\Delta t \partial/\partial t)$  na equação (3.15). Em seguida, de modo análogo, repetem-se os passos executados na Seção 3.2. Os cálculos necessários para obter o método PADE/B (ou Crank-Nicolson) a partir do aproximante de Padé  $R_{1,1}$  podem ser encontrados em [16].

### 3.4.3 Estratégia C

A estratégia (C) é semelhante a (B). No entanto, no lugar de utilizar a média ponderada para o nível de tempo  $n + 1/6$ , utiliza-se a equação (3.25), como ilustrado na Figura 3.7.

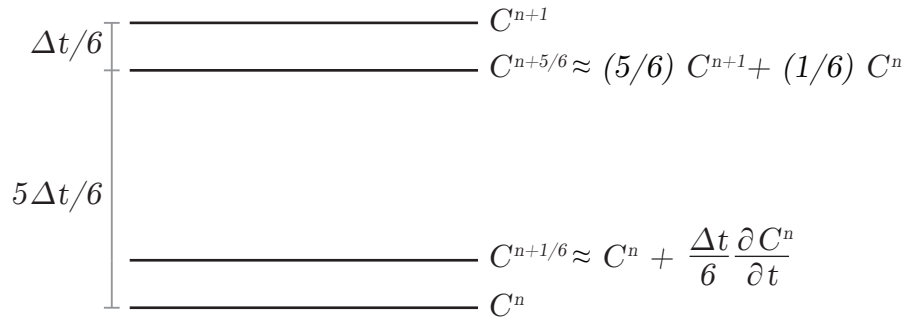


Figura 3.7: Esquema de aproximação dos tempos intermediários da estratégia (C).

Substituindo (3.56) em (3.31) segue que

$$\begin{aligned} & \left( \frac{5}{6}C^{n+1} + \frac{1}{6}C^n \right) + \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{5}{6}C^{n+1} + \frac{1}{6}C^n \right) \\ &= C^{n+1/6} - \frac{\Delta t}{6} \frac{\partial C^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

que é equivalente a

$$\frac{5}{6}C^{n+1} - \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial C^{n+1}}{\partial t} = C^{n+1/6} - \frac{1}{6}C^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial C^{n+1/6}}{\partial t} - \frac{\Delta t}{12} \frac{\partial C^n}{\partial t}. \quad (3.67)$$

Substituindo as equações (3.35), (3.32) e (3.33) em (3.67), tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{5}{6}C^{n+1} - \frac{\Delta t}{4} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right. \\ & \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} - kC_{i,j}^{n+1} \right] = C^{n+1/6} - \frac{1}{6}C^n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t}{2} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^{n+1/6} - 2C_{i,j}^{n+1/6} + C_{i-1,j}^{n+1/6}}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^{n+1/6} - 2C_{i,j}^{n+1/6} + C_{i,j-1}^{n+1/6}}{(\Delta y)^2} \right. \\
& \left. - v_x \frac{C_{i,j}^{n+1/6} - C_{i-1,j}^{n+1/6}}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^{n+1/6} - C_{i,j-1}^{n+1/6}}{\Delta y} - k C_{i,j}^{n+1/6} \right] \\
& + \left( -\frac{\Delta t}{12} \right) \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \right. \\
& \left. - v_x \frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} - k C_{i,j}^n \right]. \tag{3.68}
\end{aligned}$$

Isolando os coeficientes em (3.68), obtém-se

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{4(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{4\Delta x} \right) C_{i-1,j}^{n+1} \\
& + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{2(\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{4\Delta y} + \frac{\Delta t D_{xx}}{2(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{4\Delta x} + \frac{\Delta t k}{4} + \frac{5}{6} \right) C_{i,j}^{n+1} \\
& + \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{4(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{4(\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{4\Delta y} \right) C_{i,j-1}^{n+1} + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{4(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left( \frac{\Delta t D_{xx}}{2(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{2\Delta x} \right) C_{i-1,j}^{n+1/6} \\
& + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{(\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{2\Delta y} - \frac{\Delta t D_{xx}}{(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{2\Delta x} - \frac{\Delta t k}{2} + 1 \right) C_{i,j}^{n+1/6} \\
& + \left( \frac{\Delta t D_{xx}}{2(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^{n+1/6} + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{2(\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{2\Delta y} \right) C_{i,j-1}^{n+1/6} + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{2(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^{n+1/6} \\
& + \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{12(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t v_x}{12\Delta x} \right) C_{i-1,j}^n \\
& + \left( \frac{\Delta t D_{yy}}{6(\Delta y)^2} + \frac{\Delta t v_y}{12\Delta y} + \frac{\Delta t D_{xx}}{6(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t v_x}{12\Delta x} + \frac{\Delta t k}{12} - \frac{1}{6} \right) C_{i,j}^n \\
& + \left( -\frac{\Delta t D_{xx}}{12(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j}^n + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{12(\Delta y)^2} - \frac{\Delta t v_y}{12\Delta y} \right) C_{i,j-1}^n + \left( -\frac{\Delta t D_{yy}}{12(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1}^n. \tag{3.69}
\end{aligned}$$

Reescreve-se a equação (3.69) de maneira simplificada utilizando as igualdades (3.48)-(3.52), resultando em

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{3}{4}a \right) C_{i-1,j}^{n+1} + \left( \frac{3}{4}b + \frac{5}{6} \right) C_{i,j}^{n+1} + \left( -\frac{3}{4}c \right) C_{i+1,j}^{n+1} + \left( -\frac{3}{4}d \right) C_{i,j-1}^{n+1} + \left( -\frac{3}{4}e \right) C_{i,j+1}^{n+1} \\
& = \left( \frac{3}{2}a \right) C_{i-1,j}^{n+1/6} + \left( -\frac{3}{2}b + 1 \right) C_{i,j}^{n+1/6} + \left( \frac{3}{2}c \right) C_{i+1,j}^{n+1/6} + \left( \frac{3}{2}d \right) C_{i,j-1}^{n+1/6} + \left( \frac{3}{2}e \right) C_{i,j+1}^{n+1/6} \\
& + \left( -\frac{1}{4}a \right) C_{i-1,j}^n + \left( \frac{1}{4}b - \frac{1}{6} \right) C_{i,j}^n + \left( -\frac{1}{4}c \right) C_{i+1,j}^n + \left( -\frac{1}{4}d \right) C_{i,j-1}^n + \left( -\frac{1}{4}e \right) C_{i,j+1}^n. \tag{3.70}
\end{aligned}$$

Fazendo  $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$  na equação (3.70), obtém-se um sistema

linear, cuja forma matricial é dada por

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & -\frac{3c}{4} & 0 & -\frac{3e}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{3a}{4} & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & -\frac{3c}{4} & 0 & -\frac{3e}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3a}{4} & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & 0 & 0 & -\frac{3e}{4} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{3d}{4} & 0 & 0 & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & -\frac{3c}{4} & 0 & -\frac{3e}{4} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3d}{4} & 0 & -\frac{3a}{4} & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & -\frac{3c}{4} & 0 & -\frac{3e}{4} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3d}{4} & 0 & -\frac{3a}{4} & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & 0 & 0 & -\frac{3e}{4} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3d}{4} & 0 & 0 & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & -\frac{3c}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{3d}{4} & 0 & -\frac{3a}{4} & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} & -\frac{3e}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{3d}{4} & 0 & -\frac{3a}{4} & \frac{3b}{4} + \frac{5}{6} \end{pmatrix}}_M \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{m+1} \\ C_{1,2}^{m+1} \\ C_{1,3}^{m+1} \\ C_{2,1}^{m+1} \\ C_{2,2}^{m+1} \\ C_{2,3}^{m+1} \\ C_{3,1}^{m+1} \\ C_{3,2}^{m+1} \\ C_{3,3}^{m+1} \end{pmatrix}}_{C^{n+1}} = \\
 & \underbrace{\begin{pmatrix} 1 - \frac{3b}{2} & \frac{3e}{2} & 0 & \frac{3c}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3d}{2} & 1 - \frac{3b}{2} & \frac{3e}{2} & 0 & \frac{3c}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3d}{2} & 1 - \frac{3b}{2} & 0 & 0 & \frac{3c}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3a}{2} & 0 & 0 & 1 - \frac{3b}{2} & \frac{3e}{2} & 0 & \frac{3c}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3a}{2} & 0 & \frac{3d}{2} & 1 - \frac{3b}{2} & \frac{3e}{2} & 0 & \frac{3c}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3a}{2} & 0 & \frac{3d}{2} & 1 - \frac{3b}{2} & 0 & 0 & \frac{3c}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{3a}{2} & 0 & 0 & 1 - \frac{3b}{2} & \frac{3e}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3a}{2} & 0 & \frac{3d}{2} & 1 - \frac{3b}{2} & \frac{3e}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3a}{2} & 0 & \frac{3d}{2} & 1 - \frac{3b}{2} \end{pmatrix}}_Q \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{m+1/6} \\ C_{1,2}^{m+1/6} \\ C_{1,3}^{m+1/6} \\ C_{2,1}^{m+1/6} \\ C_{2,2}^{m+1/6} \\ C_{2,3}^{m+1/6} \\ C_{3,1}^{m+1/6} \\ C_{3,2}^{m+1/6} \\ C_{3,3}^{m+1/6} \end{pmatrix}}_{C^{n+1/6}} + \\
 & \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & -\frac{e}{4} & 0 & -\frac{c}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{d}{4} & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & -\frac{e}{4} & 0 & -\frac{c}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{d}{4} & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & 0 & 0 & -\frac{c}{4} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{a}{4} & 0 & 0 & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & -\frac{e}{4} & 0 & -\frac{c}{4} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{a}{4} & 0 & -\frac{d}{4} & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & -\frac{e}{4} & 0 & -\frac{c}{4} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{a}{4} & 0 & -\frac{d}{4} & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & 0 & 0 & -\frac{c}{4} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{a}{4} & 0 & 0 & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & -\frac{e}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{a}{4} & 0 & -\frac{d}{4} & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} & -\frac{e}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{a}{4} & 0 & -\frac{d}{4} & \frac{b}{4} - \frac{1}{6} \end{pmatrix}}_N \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^n \\ C_{1,2}^n \\ C_{1,3}^n \\ C_{2,1}^n \\ C_{2,2}^n \\ C_{2,3}^n \\ C_{3,1}^n \\ C_{3,2}^n \\ C_{3,3}^n \end{pmatrix}}_{C^n} + \\
 & \underbrace{\begin{pmatrix} -\frac{C_{1,0}^n d}{4} - \frac{C_{0,1}^n a}{4} \\ -\frac{C_{0,2}^n a}{4} \\ -\frac{C_{1,4}^n e}{4} - \frac{C_{0,3}^n a}{4} \\ -\frac{C_{2,0}^n d}{4} \\ 0 \\ -\frac{C_{2,4}^n e}{4} \\ -\frac{C_{3,0}^n d}{4} - \frac{C_{4,1}^n c}{4} \\ -\frac{C_{4,2}^n c}{4} \\ -\frac{C_{3,4}^n e}{4} - \frac{C_{4,3}^n c}{4} \end{pmatrix}}_{P^n} + \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{3C_{1,0}^{n+1/6} d}{2} + \frac{3C_{0,1}^{n+1/6} a}{2} \\ \frac{3C_{0,2}^{n+1/6} a}{2} \\ \frac{3C_{1,4}^{n+1/6} e}{2} + \frac{3C_{0,3}^{n+1/6} a}{2} \\ \frac{3C_{2,0}^{n+1/6} d}{2} \\ 0 \\ \frac{3C_{2,4}^{n+1/6} e}{2} \\ \frac{3C_{3,0}^{n+1/6} d}{2} + \frac{3C_{4,1}^{n+1/6} c}{2} \\ \frac{3C_{4,2}^{n+1/6} c}{2} \\ \frac{3C_{3,4}^{n+1/6} e}{2} + \frac{3C_{4,3}^{n+1/6} c}{2} \end{pmatrix}}_{P^{n+1/6}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{3C_{1,0}^{n+1} d}{4} + \frac{3C_{0,1}^{n+1} a}{4} \\ \frac{3C_{0,2}^{n+1} a}{4} \\ \frac{3C_{1,4}^{n+1} e}{4} + \frac{3C_{0,3}^{n+1} a}{4} \\ \frac{3C_{2,0}^{n+1} d}{4} \\ 0 \\ \frac{3C_{2,4}^{n+1} e}{4} \\ \frac{3C_{3,0}^{n+1} d}{4} + \frac{3C_{4,1}^{n+1} c}{4} \\ \frac{3C_{4,2}^{n+1} c}{4} \\ \frac{3C_{3,4}^{n+1} e}{4} + \frac{3C_{4,3}^{n+1} c}{4} \end{pmatrix}}_{P^{n+1}} \tag{3.71}
 \end{aligned}$$

ou

$$M C^{n+1} = Q C^{n+1/6} + N C^n + P^n + P^{n+1/6} + P^{n+1}, \quad (3.72)$$

onde as matrizes  $M$ ,  $Q$ ,  $N$  e  $C^n$  são conhecidas e os vetores  $P^n$ ,  $P^{n+1/6}$  e  $P^{n+1}$  armazenam valores fora do domínio computacional, pois  $i = 1, 2, 3$  e  $j = 1, 2, 3$ . Os valores armazenados por  $P^n$  são calculados por meio da aplicação de pontos fantasmas [18, 20, 43]. A matriz  $C^{n+1/6}$  é calculada por meio da relação (3.25), que se reescreve como

$$C_{i,j}^{n+1/6} = C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{6} \left[ D_{xx} \frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + D_{yy} \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} - v_x \frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} - v_y \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} - k C_{i,j}^n \right], \quad (3.73)$$

em que  $\partial C^n / \partial t$  foi aproximada pela equação (3.32), juntamente com as discretizações das derivadas espaciais (3.37)-(3.40).

De posse da relação (3.73) calcula-se, explicitamente, os valores para  $C^{n+1/6}$  e, em seguida, o vetor  $P^{n+1/6}$  é calculado de modo semelhante ao que foi feito para  $P^n$ . Por fim, calcula-se os valores para  $C^{n+1}$  resolvendo o sistema linear (3.72) por meio do método de Gauss-Seidel. O "chute" inicial para a resolução do sistema linear é calculado por meio de uma interpolação linear utilizando as concentrações nos níveis de tempo  $n$  e  $n + 1/6$ , ou seja,  $\mathbf{x}^{(0)} = 6 C^{n+1/6} - 5 C^n$ . O cálculo dos valores para  $P^{n+1}$  são feitos de maneira semelhante ao executado para o vetor  $P^{n+1}$  da estratégia (A).

O método obtido a partir da estratégia (C) é denominado PADE/C.

### 3.4.4 Estratégia D

Na estratégia (D) resolve-se o sistema formado pelas equações (3.25)-(3.28) sem utilizar (3.41). Essa estratégia se assemelha ao raciocínio apresentado por Donea et al. [16], em que são discutidos alguns métodos múltiplo estágio utilizando aproximantes de Padé. Tais métodos são atribuídos a Amiram Harten e Hillel Tal-Ezer e são denominados métodos de Harten/Tal-Ezer [25].

Basicamente, para determinar a solução no nível de tempo  $n + 1$ , resolve-se dois estágios explícitos, dados pelas equações (3.25) e (3.26) e dois estágios implícitos, dados pelas equações (3.27) e (3.28), como mostra a Figura 3.8.

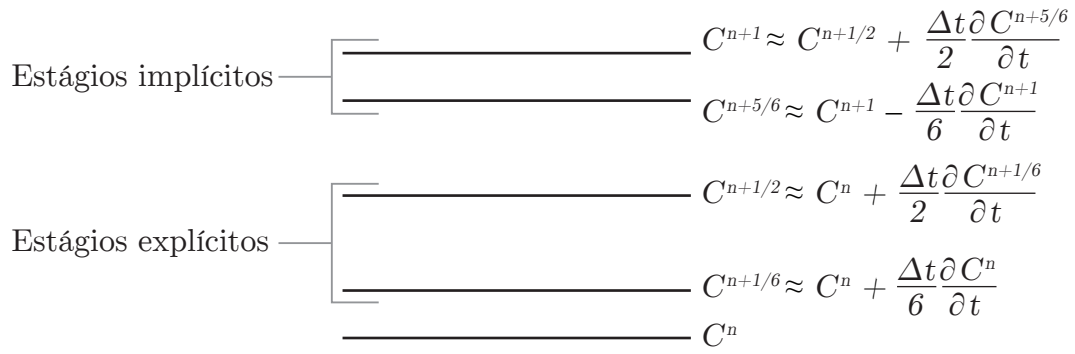


Figura 3.8: Estágios de tempo do sistema formado pelas equações (3.25)-(3.28).

Sendo conhecidos os valores para  $C^n$  (concentração de poluente no nível de tempo  $n$ ), as equações (3.25) e (3.26) são calculadas diretamente, nessa ordem, como mostra a Figura 3.9.

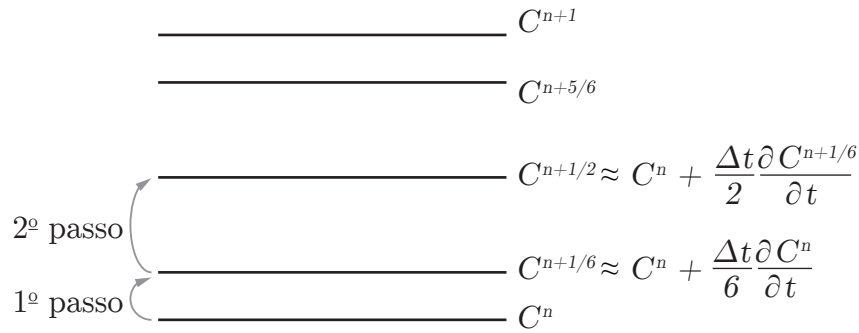


Figura 3.9: Cálculo da concentração nos níveis de tempo  $n + 1/6$  e  $n + 1/2$ .

Para  $i = 1, 2$  e  $j = 1, 2$  nas equações (3.25) e (3.26), matricialmente, tem-se

$$\underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1/6} \\ C_{1,2}^{n+1/6} \\ C_{2,1}^{n+1/6} \\ C_{2,2}^{n+1/6} \end{pmatrix}}_{C^{n+1/6}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 - \frac{b}{3} & \frac{e}{3} & \frac{c}{3} & 0 \\ \frac{d}{3} & 1 - \frac{b}{3} & 0 & \frac{c}{3} \\ \frac{a}{3} & 0 & 1 - \frac{b}{3} & \frac{e}{3} \\ 0 & \frac{a}{3} & \frac{d}{3} & 1 - \frac{b}{3} \end{pmatrix}}_N \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^n \\ C_{1,2}^n \\ C_{2,1}^n \\ C_{2,2}^n \end{pmatrix}}_{C^n} + \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{C_{1,0}^n d}{3} + \frac{C_{0,1}^n a}{3} \\ \frac{C_{1,3}^n e}{3} + \frac{C_{0,2}^n a}{3} \\ \frac{C_{2,0}^n d}{3} + \frac{C_{3,1}^n c}{3} \\ \frac{C_{2,3}^n e}{3} + \frac{C_{3,2}^n c}{3} \end{pmatrix}}_{P^n} \quad (3.74)$$

e

$$\underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1/2} \\ C_{1,2}^{n+1/2} \\ C_{2,1}^{n+1/2} \\ C_{2,2}^{n+1/2} \end{pmatrix}}_{C^{n+1/2}} = \underbrace{\begin{pmatrix} -b & e & c & 0 \\ d & -b & 0 & c \\ a & 0 & -b & e \\ 0 & a & d & -b \end{pmatrix}}_N \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1/6} \\ C_{1,2}^{n+1/6} \\ C_{2,1}^{n+1/6} \\ C_{2,2}^{n+1/6} \end{pmatrix}}_{C^{n+1/6}} + \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,0}^{n+1/6} d + C_{0,1}^{n+1/6} a \\ C_{1,3}^{n+1/6} e + C_{0,2}^{n+1/6} a \\ C_{2,0}^{n+1/6} d + C_{3,1}^{n+1/6} c \\ C_{2,3}^{n+1/6} e + C_{3,2}^{n+1/6} c \end{pmatrix}}_{P^{n+1/6}} + \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^n \\ C_{1,2}^n \\ C_{2,1}^n \\ C_{2,2}^n \end{pmatrix}}_{C^n} \quad (3.75)$$

ou, de maneira resumida,

$$C^{n+1/6} = N C^n + P^n \quad (3.76)$$

e

$$C^{n+1/2} = N C^{n+1/6} + P^{n+1/6} + C^n. \quad (3.77)$$

Os valores armazenados por  $P^n$  e  $P^{n+1/6}$  são calculados por meio da aplicação de pontos fantasmas [18, 20, 43]. Aproxima-se a concentração no nível de tempo  $n + 5/6$  por meio de uma interpolação linear utilizando a concentração nos níveis de tempo  $n + 1/6$  e  $n + 1/2$ , tal como representado na Figura 3.10.

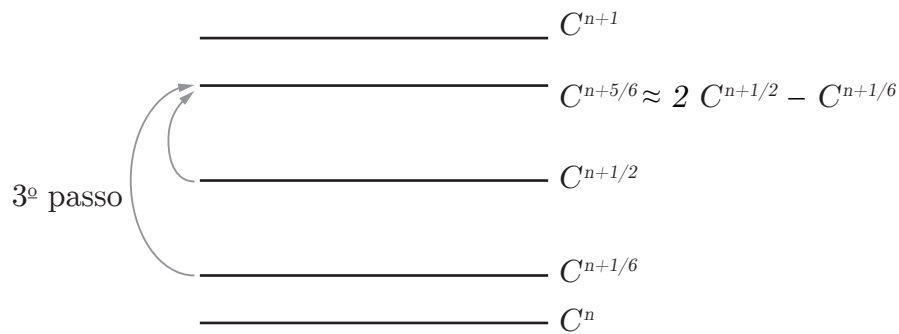


Figura 3.10: Aproximação da concentração no nível de tempo  $n + 5/6$ , por meio de interpolação linear.

Em seguida, como mostra a Figura 3.11, calcula-se a concentração no nível de tempo  $n + 1$  utilizando a equação (3.28).

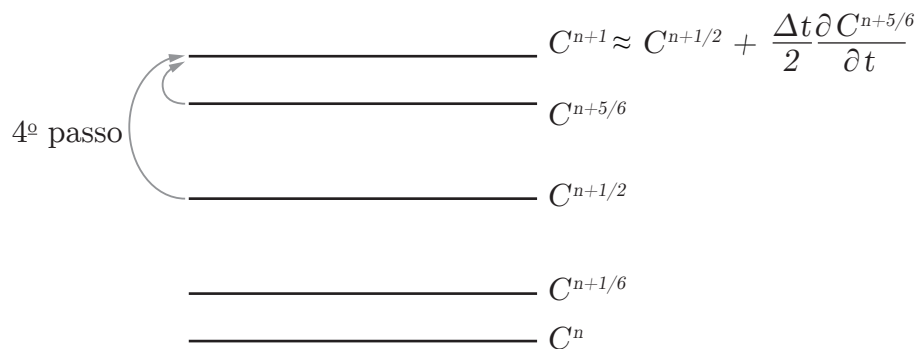


Figura 3.11: Cálculo da concentração no nível de tempo  $n + 1$ .

Por fim, utilizando as equações (3.27) e (3.28), recalcula-se a concentração nos níveis de tempo  $n + 5/6$  e  $n + 1$  sucessivamente até obter convergência para  $C^{n+1}$ , como ilustrado na Figura 3.12.

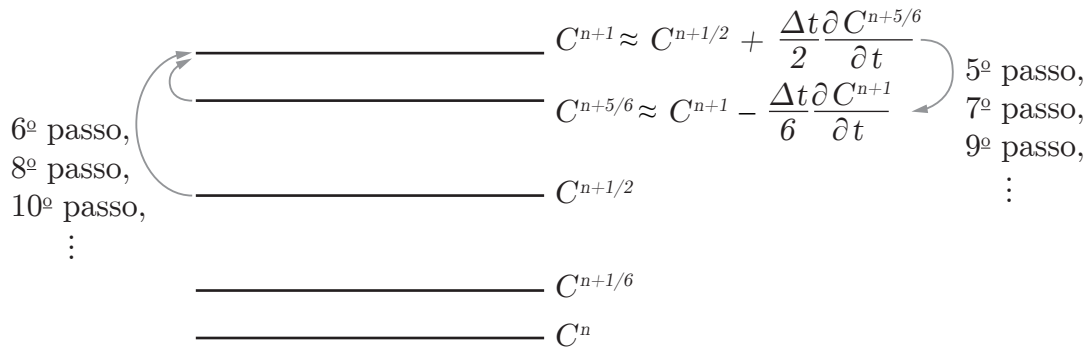


Figura 3.12: Cálculo sucessivo das concentrações nos níveis de tempo  $n + 5/6$  e  $n + 1$ .

Vale observar que, para  $i = 1, 2$  e  $j = 1, 2$ , o procedimento realizado a partir do 3º passo é equivalente a resolver o sistema linear

$$\underbrace{\begin{pmatrix} -b & e & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d & -b & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & -b & e & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & d & -b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{b}{3} + 1 & -\frac{e}{3} & -\frac{c}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{d}{3} & \frac{b}{3} + 1 & 0 & -\frac{c}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{a}{3} & 0 & \frac{b}{3} + 1 & -\frac{e}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{a}{3} & -\frac{d}{3} & \frac{b}{3} + 1 \end{pmatrix}}_M \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+5/6} \\ C_{1,2}^{n+5/6} \\ C_{2,1}^{n+5/6} \\ C_{2,2}^{n+5/6} \\ C_{1,1}^{n+1} \\ C_{1,2}^{n+1} \\ C_{2,1}^{n+1} \\ C_{2,2}^{n+1} \end{pmatrix}}_x = \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1} \\ C_{1,2}^{n+1} \\ C_{2,1}^{n+1} \\ C_{2,2}^{n+1} \end{pmatrix}}_y + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{C_{1,0}^{n+1} d + C_{0,1}^{n+1} a}{3} \\ \frac{C_{1,3}^{n+1} e + C_{0,2}^{n+1} a}{3} \\ \frac{C_{2,0}^{n+1} d + C_{3,1}^{n+1} c}{3} \\ \frac{C_{2,3}^{n+1} e + C_{3,2}^{n+1} c}{3} \end{pmatrix}}_{P^{n+1}} - \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,0}^{n+5/6} d + C_{0,1}^{n+5/6} a \\ C_{1,3}^{n+5/6} e + C_{0,2}^{n+5/6} a \\ C_{2,0}^{n+5/6} d + C_{3,1}^{n+5/6} c \\ C_{2,3}^{n+5/6} e + C_{3,2}^{n+5/6} c \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{P^{n+5/6}} - \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1/2} \\ C_{1,2}^{n+1/2} \\ C_{2,1}^{n+1/2} \\ C_{2,2}^{n+1/2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{C^{n+1/2}}, \quad (3.78)$$



pelo método iterativo de Gauss-Seidel, onde o "chute" inicial é dado por

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+5/6} \\ C_{1,2}^{n+5/6} \\ C_{2,1}^{n+5/6} \\ C_{2,2}^{n+5/6} \\ C_{1,1}^{n+1} \\ C_{1,2}^{n+1} \\ C_{2,1}^{n+1} \\ C_{2,2}^{n+1} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1/2} \\ C_{1,2}^{n+1/2} \\ C_{2,1}^{n+1/2} \\ C_{2,2}^{n+1/2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} C_{1,1}^{n+1/6} \\ C_{1,2}^{n+1/6} \\ C_{2,1}^{n+1/6} \\ C_{2,2}^{n+1/6} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.79)$$

Além disso, a ordem de cálculo dos elementos de  $\mathbf{x}^{(k)}$  seria do último para o primeiro. O sistema linear (3.78) pode ser reescrito de maneira resumida, dada por

$$M \mathbf{x} = \mathbf{y} + P^{n+1} - P^{n+5/6} - C^{n+1/2}. \quad (3.80)$$

Os vetores  $P^{n+1}$  e  $P^{n+5/6}$  são calculados de modo semelhante ao vetor  $P^{n+1}$  da estratégia (A). Denomina-se PADE/D o método obtido por meio da estratégia (D).

Como não há solução analítica conhecida para a equação de transporte bidimensional, para avaliar a qualidade da solução numérica e com a intenção de validar os resultados obtidos pelos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D, no próximo capítulo, são realizadas simplificações no modelo a fim de transformar o problema bidimensional em unidimensional, que possui solução analítica conhecida e, portanto, pode ser comparado diretamente com a solução numérica.

#### 4 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

No Capítulo 3 foram apresentados os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D que, neste capítulo, são utilizados para realizar algumas simulações. Inicialmente os testes consideram problemas em que  $v_y = 0$  e  $D_{yy} = 0$  na equação (3.1), transformando-os de bidimensionais para unidimensionais. Tais problemas possuem soluções analíticas conhecidas permitindo, assim, comparar diretamente com as soluções numéricas. Também são apresentados testes com  $v_y$  e  $D_{yy}$  não nulos, onde compara-se os resultados obtidos pelo método PADE/C com os apresentados por Romeiro et al. [41].

Todas as simulações feitas neste capítulo foram escritas em linguagem Fortran 90 e compiladas com o programa GFortran. O computador utilizado possui 3.7 GB de memória RAM, processador Intel Core i5 CPU M 480 @ 2.67 GHz  $\times$  4, tipo de sistema de 64-bit e sistema operacional Ubuntu 13.10.

A solução analítica da equação de advecção-difusão-reação unidimensional, apresentada por Genuchten [21], é

$$C(x, t) = C_0 H(x, t) + M(x, t) \quad (4.1)$$

onde

$$H(x, t) = \frac{1}{2} \exp \left[ \frac{(v_x - u)x}{2 D_{xx}} \right] \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - ut}{2 (D_{xx} t)^{1/2}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left[ \frac{(v_x + u)x}{2 D_{xx}} \right] \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + ut}{2 (D_{xx} t)^{1/2}} \right], \quad (4.2)$$

$$M(x, t) = -C_i \exp(-kt) \left\{ \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - v_x t}{2 (D_{xx} t)^{1/2}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left( \frac{v_x x}{D_{xx}} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + v_x t}{2 (D_{xx} t)^{1/2}} \right] \right\} + C_i \exp(-kt) \quad (4.3)$$

e

$$u = v_x \left( 1 + \frac{4k D_{xx}}{v_x^2} \right). \quad (4.4)$$

Na equação (4.1)  $C_0$  é a concentração na fronteira, na equação (4.3)  $C_i$  é a concentração inicial e o domínio considerado é  $[x_0, x_f]$ . A sigla *erfc* denota a função erro complementar [15], dada por

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt. \quad (4.5)$$

Resumidamente, o problema consiste em analisar a dispersão de determinado

poluente lançado constantemente na fronteira  $x = x_0$ , em uma região  $[x_0, x_f] \times [y_0, y_f]$ , de modo que  $C(x_0, y, t) = C_0$  para  $t \geq 0, y \in [y_0, y_f]$  e  $C(x, y, 0) = C_i$  para  $(x, y) \in (x_0, x_f] \times [y_0, y_f]$ , como ilustrado na Figura 4.1.

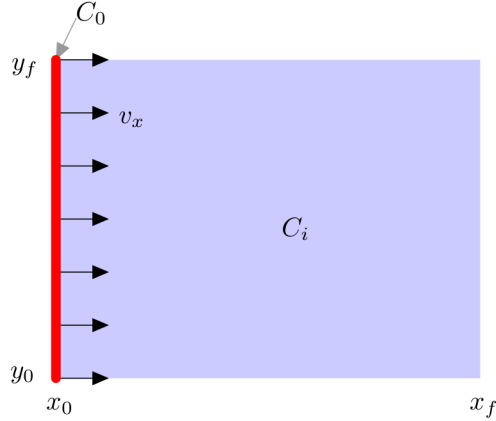


Figura 4.1: Domínio do problema.

Para analisar os métodos apresentados no Capítulo 3, considera-se um campo de velocidades uniforme, com  $v_x = 1$  e  $v_y = 0$ , e quanto aos coeficientes de difusão, tem-se  $D_{yy} = 0$ , enquanto que para  $D_{xx}$  são considerados diferentes valores, condições as quais possibilitam comparar as soluções numéricas do modelo bidimensional com a analítica da equação de transporte. Assim, o modelo considerado é

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - kC. \quad (4.6)$$

Os testes a serem apresentados se diferenciam, inicialmente, pelos valores de  $D_{xx}$ , o que corresponde a diferentes valores para o número adimensional  $Pe_{grid}$ , conhecido como número de Péclet [20], calculado para todas as simulações por meio da fórmula  $Pe_{grid} = v_x \Delta x / D_{xx}$ . Pode-se dizer que o número de Péclet mede a razão entre as intensidades dos processos de advecção e de difusão. Quanto maior o número de Péclet, maior a intensidade de advecção [20].

Para uma análise mais criteriosa da eficácia dos métodos, referente aos resultados a serem apresentados, utiliza-se o erro relativo percentual (ERP) que, no nível de tempo  $n$ , calcula-se da seguinte maneira,

$$ERP = \frac{\|C(:, (y_f - y_0)/2, n \Delta t) - C_A(:, (y_f - y_0)/2, n \Delta t)\|}{\|C(:, (y_f - y_0)/2, n \Delta t)\|} \quad (4.7)$$

onde  $C(:, (y_f - y_0)/2, n \Delta t)$  e  $C_A(:, (y_f - y_0)/2, n \Delta t)$  correspondem, respectivamente, aos vetores das soluções exata e aproximada, a norma utilizada é a euclidiana e o símbolo  $(:)$  indica que foram tomados todos os valores de  $x$  disponíveis na malha computacional.

#### 4.1 SIMULAÇÃO DO MODELO UNIDIMENSIONAL

Dada a equação (3.1), no domínio  $\Omega = [0, 2] \times [0, 2]$ , considere o seguinte problema, com condições iniciais e de fronteira

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - kC, & x \in (0, 2], t > 0, \\ C(x, y, 0) = C_i = 0, & x \in (0, 2], y \in [0, 2], \\ C(0, y, t) = C_0 = 1, & t \geq 0, \end{cases} \quad (4.8)$$

onde a função  $C = C(x, y, t)$ , para cada  $y$  fixo, corresponde a solução da equação de transporte unidimensional, com  $v_x = 1$ ,  $v_y = 0$ ,  $D_{yy} = 0$ ,  $k = 0.001$  e diferentes valores para o coeficiente difusivo, a saber,  $D_{xx} = 0.1$ ,  $D_{xx} = 0.02$ ,  $D_{xx} = 0.005$ ,  $D_{xx} = 0.001$  e  $D_{xx} = 0.0005$ .

Em particular, para  $v_x = 1$ ,  $D_{xx} = 0.1$ ,  $k = 0.001$  e  $t_f = 0.9$ , a superfície da solução analítica do problema (4.8) é apresentada na Figura 4.2.

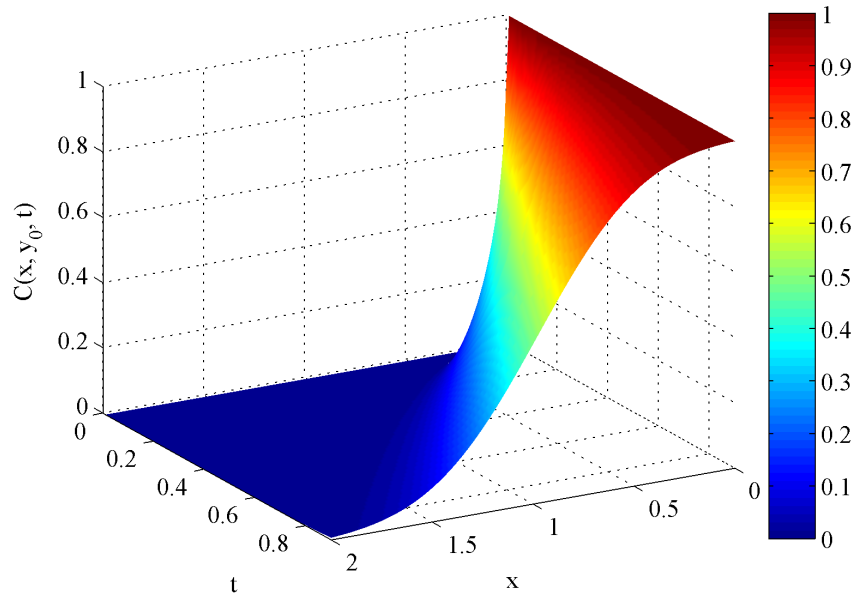


Figura 4.2: Superfície da solução analítica do problema (4.8) para  $v_x = 1$ ,  $D_{xx} = 0.1$ ,  $k = 0.001$ ,  $t_f = 0.9$  e  $y_0 \in [0, 2]$ .

Nas simulações cujos resultados são apresentados nas Figuras 4.3 e 4.4 os esquemas são testados apenas para  $v_y = 0$  e  $D_{yy} = 0$ . Resultados semelhantes são obtidos nos casos em que  $v_y$  e  $D_{yy}$  não são nulos e  $v_x$  e  $D_{xx}$  são iguais a zero, podendo ser observada certa simetria.

##### 4.1.1 Teste 1: Resultados das simulações com diferentes valores para o coeficiente de difusão na direção $x$

Na Figura 4.3 são apresentados os resultados das simulações para o tempo final  $t_f = 0.9$ ,  $\Delta x = 0.01$ ,  $\Delta y = 0.1$  e  $\Delta t = 0.0003$ .

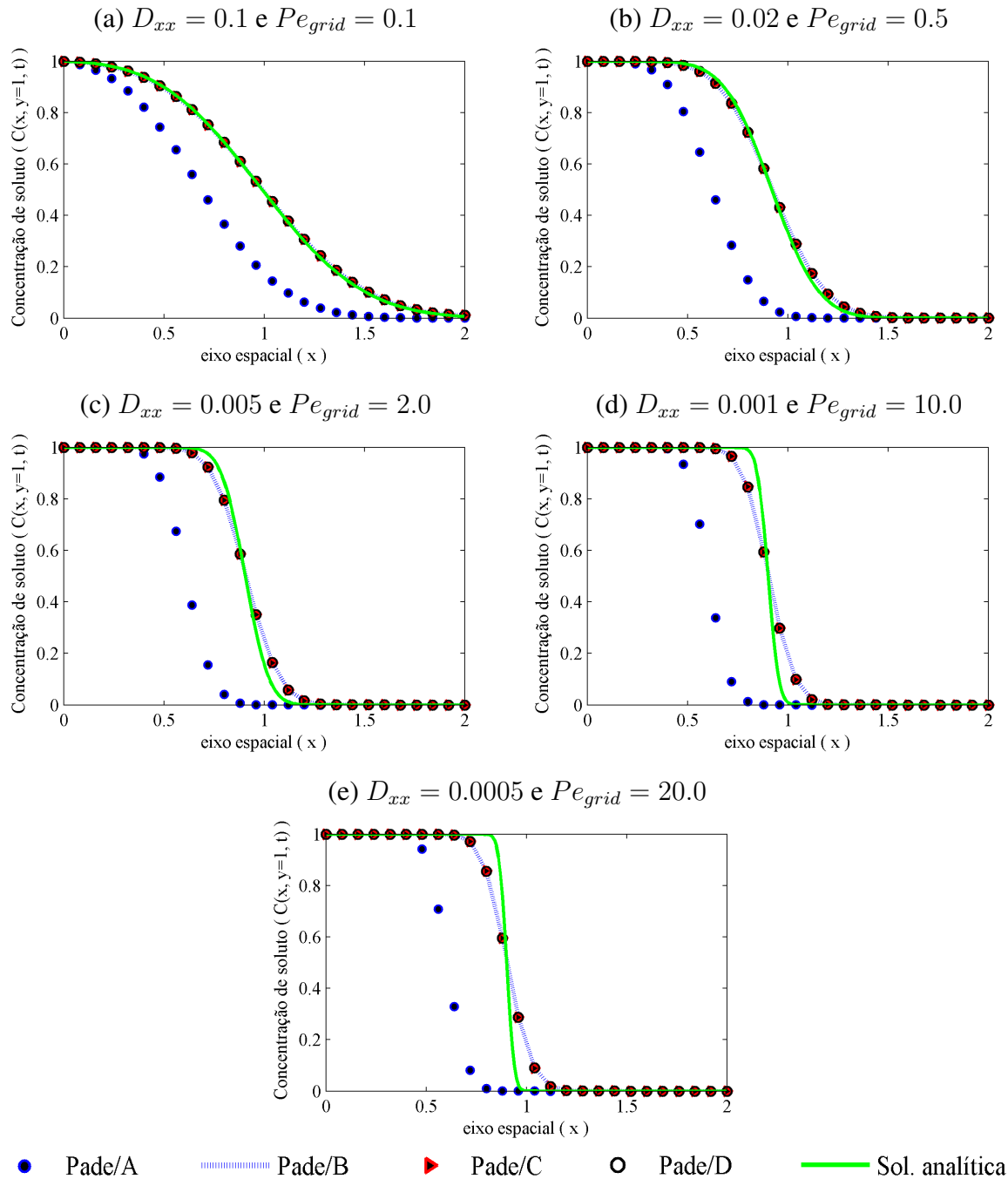


Figura 4.3: Perfis da solução analítica e soluções utilizando os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D com diferentes valores de  $D_{xx}$  e  $Pe_{grid}$ , em uma malha de  $201 \times 21$  pontos.

Observa-se na Figura 4.3 que os resultados obtidos pelo método PADE/A diferem da solução analítica independentemente do valor adotado para o coeficiente difusivo. Além disso, com a diminuição de  $D_{xx}$ , as soluções numéricas geradas pelos demais métodos se distanciam da solução analítica. Isso ocorre porque passa a predominar na equação a parte advectiva, cuja obtenção de aproximações constitui um dos grandes desafios da dinâmica de fluidos computacional. Alguns métodos, incluindo o que foi utilizado, são conhecidos por introduzir difusividade numérica para altos números de Péclet [20]. O efeito da difusividade

numérica é indesejado, pois distancia a solução numérica da solução real do problema. Esse afastamento pode ser confirmado observando a Figura 4.4.

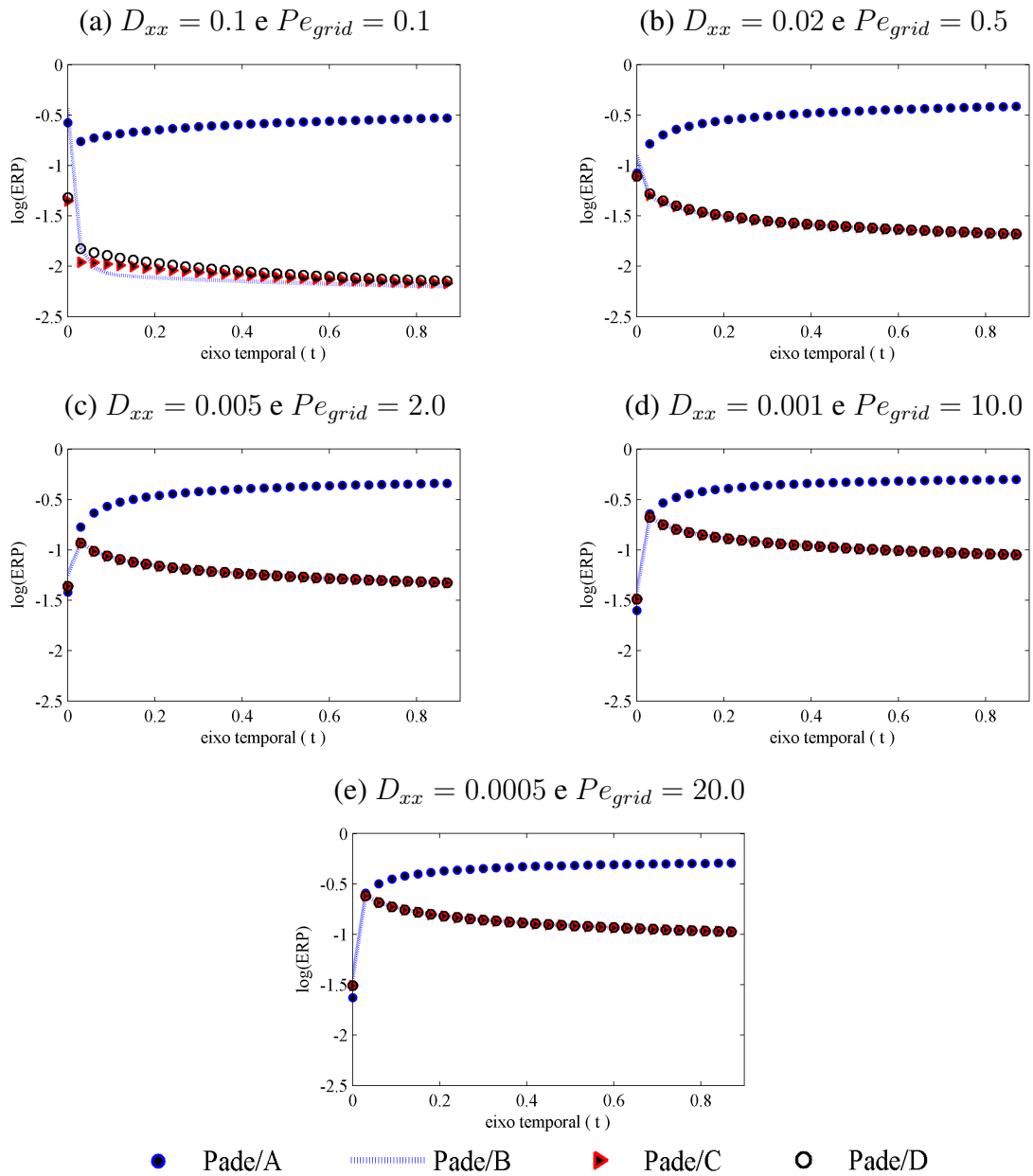


Figura 4.4: ERP dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D em cada nível de tempo para diferentes valores de  $D_{xx}$  e  $Pe_{grid}$ , em uma malha de  $201 \times 21$  pontos.

Observa-se na Figura 4.4 que o método PADE/A apresenta ERP crescente e que os métodos PADE/B, PADE/C e PADE/D apresentam ERPs decrescentes e muito semelhantes entre si. Percebe-se ainda, para todos os métodos, que há aumento no ERP quando há diminuição do coeficiente de difusão e, conseqüentemente, aumento do número de Péclet.

Com o objetivo de comparar o ERP dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D, apresenta-se na Tabela 4.1 o ERP máximo obtido em cada simulação.

Tabela 4.1: Erros relativos percentuais máximos cometidos pelos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D para  $k = 0.001$  e  $t_f = 0.9$ , referentes às simulações apresentadas nas Figuras 4.3 e 4.4.

Método	$D_{xx} = 0.1$	$D_{xx} = 0.02$	$D_{xx} = 0.005$	$D_{xx} = 0.001$	$D_{xx} = 0.0005$
PADE/A	0.299036	0.39016	0.46176	0.50312	0.51124
PADE/B	0.369891	0.12454	0.18855	0.34902	0.41566
PADE/C	0.044437	0.10399	0.19059	0.35029	0.41680
PADE/D	0.048092	0.10410	0.19037	0.34965	0.41606

Percebe-se na Tabela 4.1 que o método PADE/A apresenta maior ERP em quatro das simulações e que os demais métodos, exceto para  $D_{xx} = 0.1$ , apresentam resultados semelhantes, ou seja, todos sofrem aumento do ERP devido ao aumento do número de Péclet.

Outra análise que pode ser realizada para comparar os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D é em relação ao tempo computacional, apresentado na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Tempo de processamento, em segundos, para diferentes valores do coeficiente de difusão, com  $t_f = 0.9$ , referente às simulações apresentadas nas Figuras 4.3 e 4.4.

Método	$D_{xx} = 0.1$	$D_{xx} = 0.02$	$D_{xx} = 0.005$	$D_{xx} = 0.001$	$D_{xx} = 0.0005$
PADE/A	21.3	21.7	20.3	19.2	18.3
PADE/B	21.7	21.6	20.3	19.3	18.5
PADE/C	18.9	19.8	19.9	19.3	18.6
PADE/D	20.1	21.0	21.4	20.5	19.8

Na Tabela 4.2 é possível observar que o método PADE/C possui uma leve vantagem em comparação com os demais métodos, entretanto o tempo de simulação ainda é pequeno para se chegar a conclusões acerca da velocidade de processamento.

#### 4.1.2 Teste 2: Simulações com diferentes valores para o coeficiente de reação

Nessa seção são realizadas simulações com variação do coeficiente de reação, cujos resultados são apresentados na Figura 4.5, onde o tempo final de simulação é  $t_f = 0.9$ ,  $\Delta x = 0.01$ ,  $\Delta y = 0.1$  e  $\Delta t = 0.0003$ .

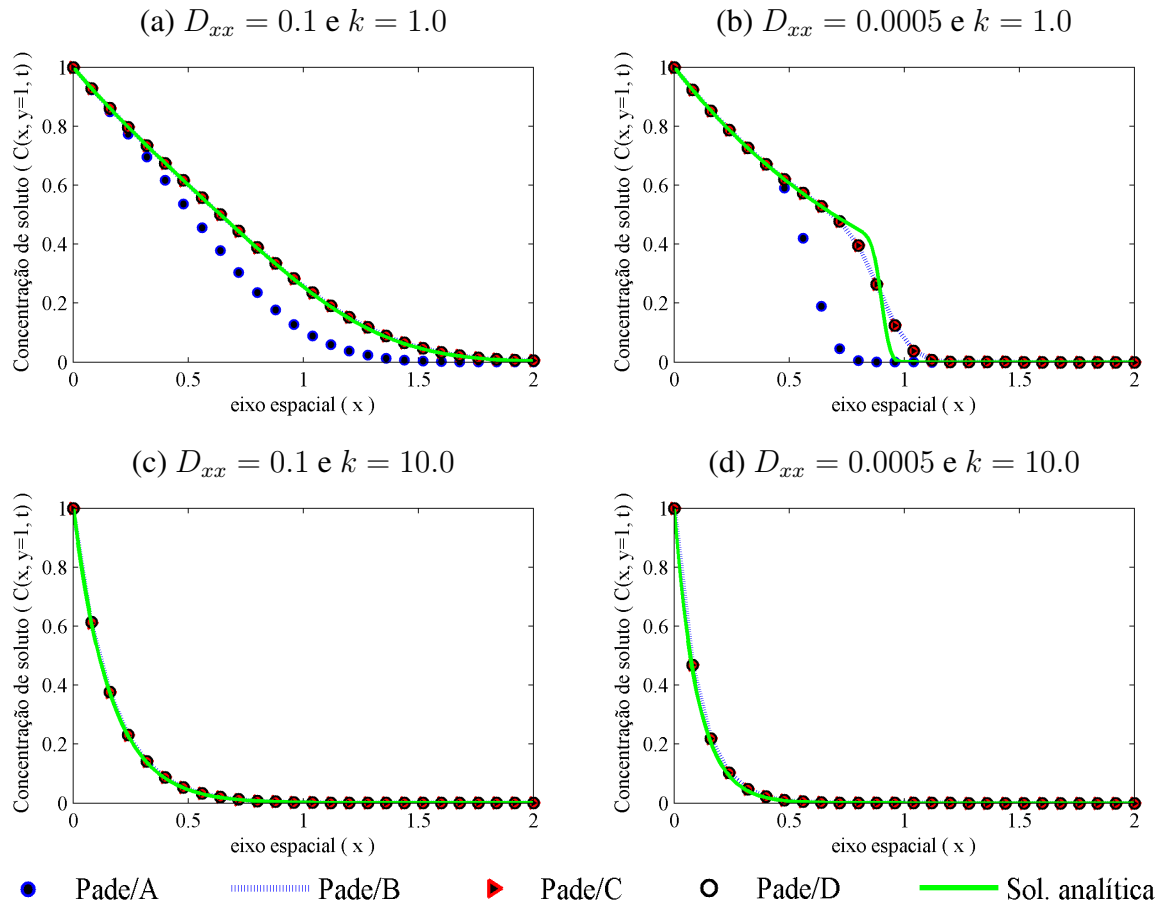


Figura 4.5: Perfis da solução analítica e soluções utilizando os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D com diferentes valores de  $D_{xx}$  e  $k$ , em uma malha de  $201 \times 21$  pontos.

Observe na Figura 4.5 que ao aumentar o coeficiente de reação de  $k = 1.0$  para  $k = 10.0$  a solução numérica ficou mais próxima da solução analítica. Esse ganho na qualidade da solução numérica pode ser observado inclusive para o método PADE/A, que não apresentou bons resultados para as simulações onde o termo advectivo tem maior influência. Isso ocorre, pois há predominância da parte reativa na equação de transporte, efeito que somado à difusão mascara o efeito do termo advectivo, que é mais difícil de se aproximar.

Apesar de não ficar tão claro como na Figura 4.3, os resultados apresentados na Figura 4.5 também mostram que quando há diminuição do valor de  $D_{xx}$  as soluções numéricas se distanciam da solução analítica, fato que pode ser confirmado observando a Figura 4.6, onde apresenta-se o ERP de cada método para todos os valores simulados para o coeficiente difusivo e para o coeficiente reativo.



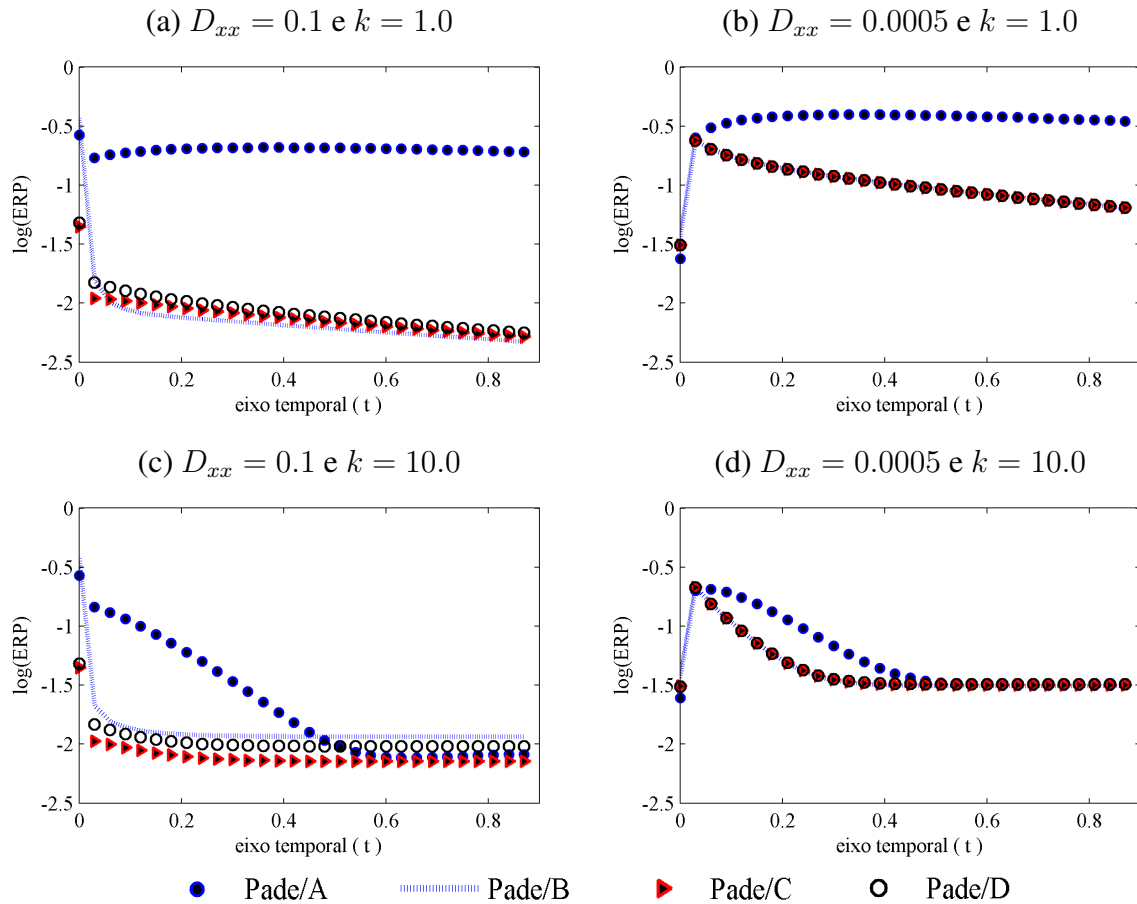


Figura 4.6: ERP dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D em cada nível de tempo para diferentes valores de  $D_{xx}$  e  $k$ , em uma malha de  $201 \times 21$  pontos.

Para comparar o ERP dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D nas simulações anteriores, apresenta-se na Tabela 4.3 o ERP máximo obtido em cada simulação.

Tabela 4.3: Erros relativos percentuais máximos cometidos pelos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D para diferentes coeficientes de difusão e reação, com  $t_f = 0.9$ , referentes às simulações apresentadas nas Figuras 4.5 e 4.6.

Método	$k = 1.0$		$k = 10.0$	
	$D_{xx} = 0.1$	$D_{xx} = 0.0005$	$D_{xx} = 0.1$	$D_{xx} = 0.0005$
PADE/A	0.266205	0.39742	0.267594	0.28124
PADE/B	0.370107	0.41460	0.372050	0.40530
PADE/C	0.044431	0.41579	0.044376	0.40685
PADE/D	0.048093	0.41508	0.048107	0.40637

Por fim, faz-se uma última comparação entre os métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D na Tabela 4.4, em relação ao tempo computacional.

Tabela 4.4: Tempo de processamento, em segundos, para diferentes coeficientes de difusão e reação, com  $t_f = 0.9$ , referente às simulações apresentadas nas Figuras 4.5 e 4.6.

Método	$k = 1.0$		$k = 10.0$	
	$D_{xx} = 0.1$	$D_{xx} = 0.0005$	$D_{xx} = 0.1$	$D_{xx} = 0.0005$
PADE/A	21.4	21.2	21.8	21.3
PADE/B	21.9	21.6	22.2	21.7
PADE/C	19.0	18.7	19.9	18.8
PADE/D	20.2	20.0	20.3	19.8

Com base nas simulações realizadas, conclui-se que o método PADE/A apresenta ERP crescente ou, em alguns casos, com menor taxa de decaimento que os demais métodos testados, como pode ser observado nas Figuras 4.4 e 4.6, motivo pelo qual esse método não será mais utilizado. Observa-se ainda que há semelhanças entre os resultados obtidos pelos métodos PADE/B, PADE/C e PADE/D em relação ao ERP. A maior diferença entre esses três métodos é observada nas Tabelas 4.1 e 4.3 para o ERP máximo quando  $D_{xx} = 0.1$ , que foi maior para o PADE/B, e nas Tabelas 4.2 e 4.4, onde percebe-se que o tempo computacional das simulações foi menor para o método PADE/C.

## 4.2 SIMULAÇÃO DO MODELO BIDIMENSIONAL

Na Seção 4.1 foram realizados testes unidimensionais onde concluiu-se que os métodos PADE/B, PADE/C e PADE/D são semelhantes em relação ao ERP. Além disso, foi observado que o método PADE/C demandou menor tempo computacional que o PADE/B e o PADE/D, motivo pelo qual, nessa seção, opta-se por esse método para simular um problema bidimensional.

Considere o seguinte problema,

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - kC, & x \in [-1, 1], y \in [-1, 1], t > 0, \\ C(x, y, 0) = 0, & x \in [-1, 1], y \in [-1, 1], \\ C(0, -0.5, t) = C(0, 0.5, t) = 1.0, & t > 0, \end{cases} \quad (4.9)$$

onde a função  $C = C(x, y, t)$  é a solução da equação de transporte bidimensional.

Apresenta-se na Figura 4.7 os resultados numéricos obtidos por meio do método PADE/C, considerando  $\Delta t = 0.002$  d (dia),  $D_{xx} = D_{yy} = 0.2 \text{ m}^2 \text{ d}^{-1}$ ,  $v_x = 1 \text{ m d}^{-1}$ ,  $v_y = 0 \text{ m d}^{-1}$ ,  $\Delta x = \Delta y = 0.1 \text{ m}$ ,  $k = 0.001 \text{ d}^{-1}$  e duas instâncias de tempo,  $t_f = 0.2 \text{ d}$  e  $t_f = 1.0 \text{ d}$ .

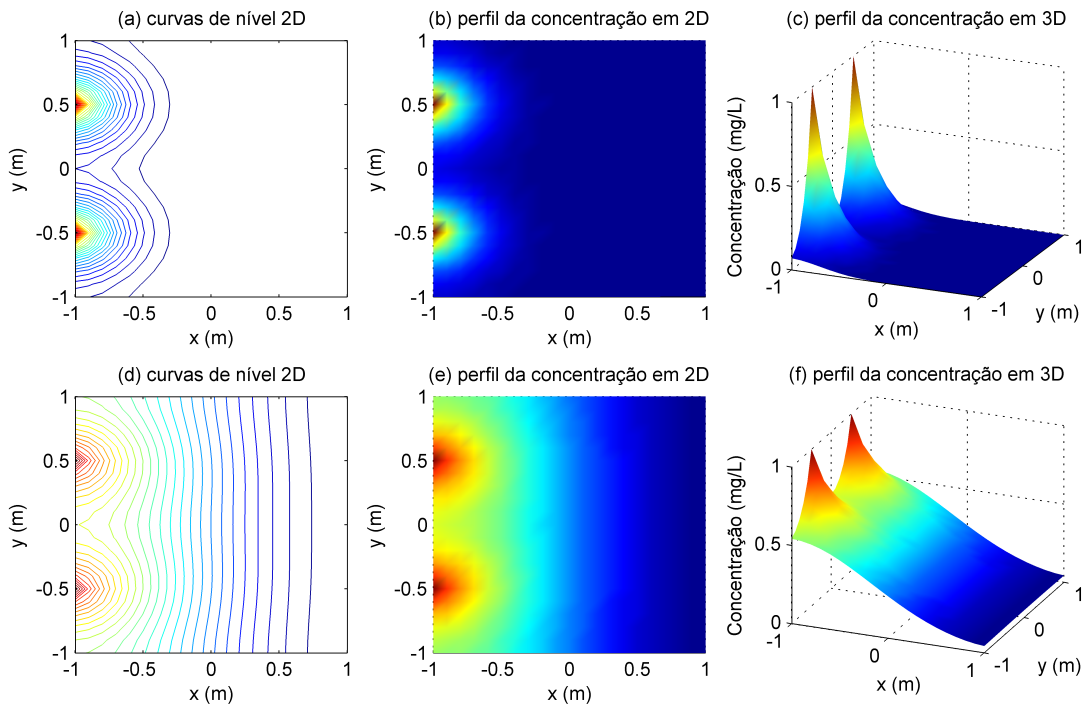


Figura 4.7: Resultados do método PADE/C para a equação de transporte em uma malha uniforme  $21 \times 21$  pontos: (a)-(c) resultados para  $t_f = 0.2$  d; (d)-(f) resultados para  $t_f = 1.0$  d.

Os resultados apresentados na Figura 4.7 são semelhantes aos apresentados em [41], onde utiliza-se um método de elementos finitos na formulação espaço-tempo. Tais resultados podem ser observados na Figura 4.8.

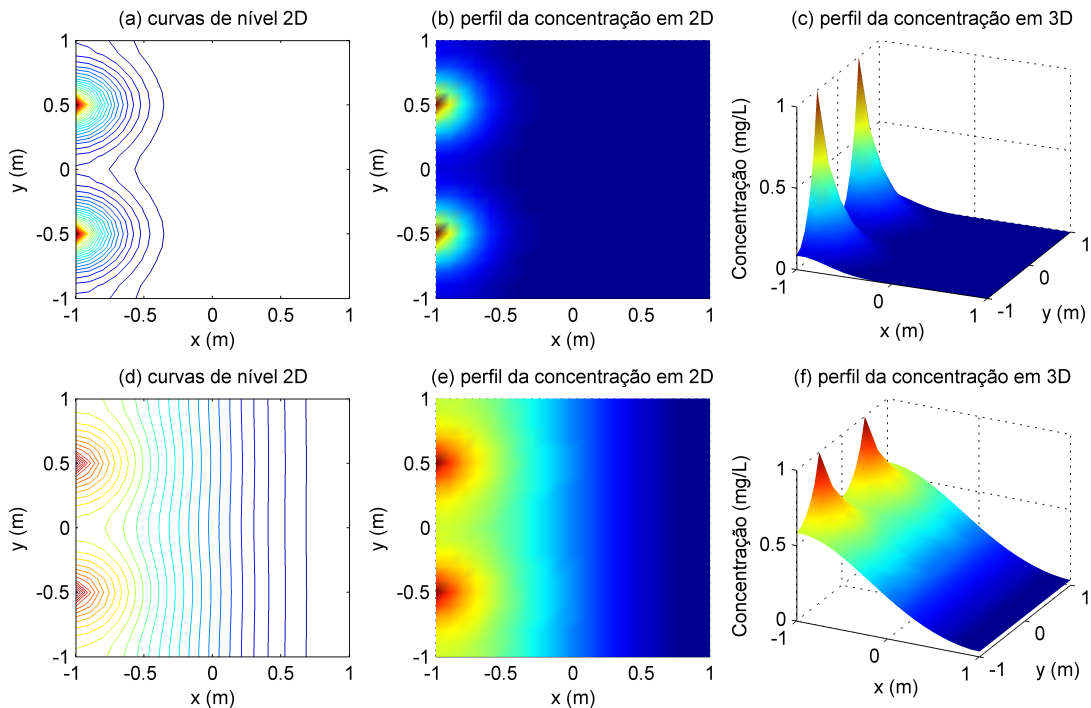


Figura 4.8: Resultados da equação de advecção-difusão-reação bidimensional em um grid uniforme  $20 \times 20$  (400 elementos triangulares) apresentados em [41]: (a)-(c) resultados para  $t_f = 0.2$  d; (d)-(f) resultados para  $t_f = 1.0$  d.

Além dessa análise qualitativa, pode-se comparar os resultados apresentados nas Figuras 4.7 e 4.8 numericamente, utilizando o valor absoluto da diferença entre as soluções obtidas pelo método PADE/C e as obtidas por [41], representadas, respectivamente, por  $C_1$  e  $C_2$ . Na Figura 4.9 é apresentado o valor absoluto da diferença entre as soluções para cada ponto da malha computacional.

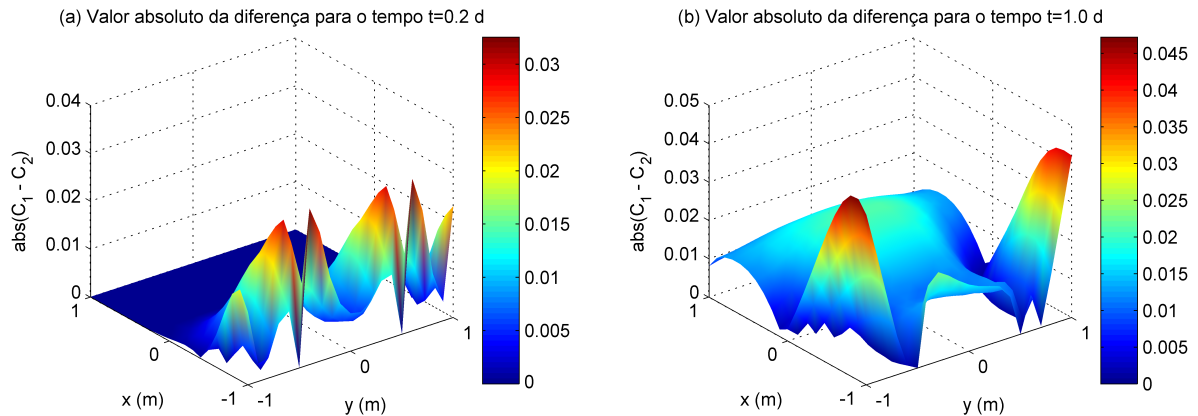


Figura 4.9: Valor absoluto da diferença entre as soluções  $C_1$  e  $C_2$  obtidas pelo método PADE/C e pelo método apresentado em [41], respectivamente.

Para comparar as soluções obtidas por meio de cada um dos métodos, além da Figura 4.9, pode-se utilizar a Tabela 4.5, onde apresenta-se o valor máximo para  $abs(C_1 - C_2)$ .

Tabela 4.5: Maior valor absoluto da diferença entre as soluções  $C_1$  e  $C_2$ .

Tempo	Valor máximo para $abs(C_1 - C_2)$
$t = 0.2$	0.032573
$t = 1.0$	0.047220

Os valores apresentados na Tabela 4.5 mostram que a diferença entre as soluções obtidas para o problema (4.9) pelo método PADE/C e pelo método de elementos finitos na formulação espaço-tempo, apresentado em [41], é pequena levando em consideração o tamanho da malha utilizada. Esse fato motiva a utilização do método PADE/C na avaliação da dinâmica de variação da concentração do modelo dado em (4.9), pois este método é de mais simples aplicação que o método de elementos finitos que, na literatura, é reconhecido por gerar melhores resultados que os métodos de diferenças finitas, assim como observado em [41]. Além disso, o método PADE/C possui vantagem em relação ao tempo computacional, que é apresentado na Tabela 4.6.

Tabela 4.6: Tempo de processamento do método PADE/C e do método de elementos finitos na formulação espaço tempo (EF), considerando uma malha uniforme  $20 \times 20$  ( $21 \times 21$  pontos).

PADE/C		EF	
$t = 0.2$	$t = 1.0$	$t = 0.2$	$t = 1.0$
0.0232 s	0.0476 s	3.2604 s	16.2553 s

Outra análise realizada para o método PADE/C é um teste de convergência com refinamento de malha. A fórmula do erro, para um certo tempo  $t$ , pode ser escrita como

$$\text{ERP} = \frac{\|C(:, :, t) - C_A(:, :, t)\|}{\|C(:, :, t)\|}, \quad (4.10)$$

onde  $C(:, :, t)$  e  $C_A(:, :, t)$  correspondem, respectivamente, as matrizes das soluções ótima e aproximada, a norma utilizada é a euclidiana e o símbolo  $(:)$  indica que foram tomados todos os valores de  $x$  e  $y$  disponíveis na malha computacional, nos pontos em que as diferentes malhas coincidem. A solução ótima é adotada como sendo àquela obtida a partir da malha mais refinada possível. Fixada essa malha mais refinada, constroi-se uma sequência de malhas, cada uma com espaçamentos  $\Delta x$  e  $\Delta y$  iguais ao dobro da anterior. A solução obtida em cada uma dessas malhas é considerada aproximada. Essa técnica de refinamento de malha vem de encontro à essência do método de diferenças finitas, que depende de boas aproximações para as derivadas da equação diferencial. Em parte, as aproximações das derivadas podem ser melhoradas com a diminuição de  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta t$ .

Na Tabela 4.7 e na Figura 4.10 são apresentados os valores dos erros, em norma, adotando uma malha com  $257 \times 257$  pontos (totalizando 66 049 pontos) como solução ótima,  $\Delta t = 0.0002$  d (dia),  $D_{xx} = D_{yy} = 0.2 \text{ m}^2 \text{ d}^{-1}$ ,  $v_x = 1 \text{ m d}^{-1}$ ,  $v_y = 0 \text{ m d}^{-1}$  e  $k = 0.001 \text{ d}^{-1}$ .

Tabela 4.7: Norma do erro do método PADE/C com o refinamento da malha.

$\Delta x (= \Delta y)$	Número de pontos na malha	Norma do erro	
		$t = 0.2$	$t = 1.0$
0.5	25	0.3182623	0.360991
0.25	81	0.1693971	0.286163
0.125	289	0.0762965	0.221005
0.0625	1089	0.0393330	0.156705
0.03125	4225	0.0205061	0.098143
0.015625	16641	0.0086452	0.046186

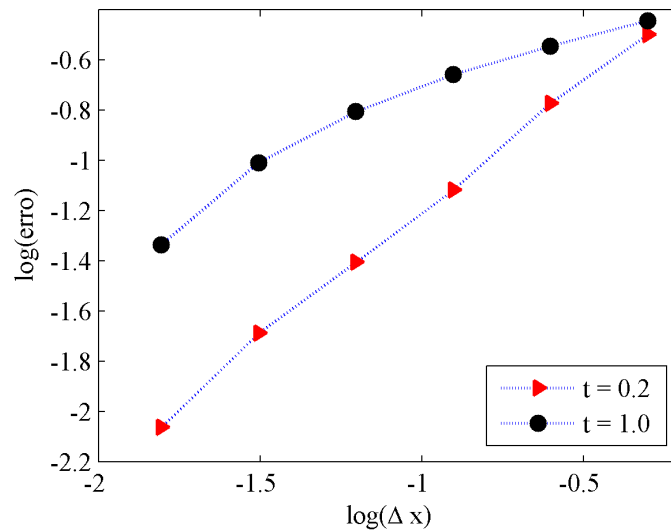


Figura 4.10: Norma do erro do método PADE/C com o refinamento da malha.

Pode ser observado na Figura 4.10 que o método PADE/C converge à medida que se refina a malha. Além disso, essa convergência ocorre de maneira estável, ou seja, não apresenta oscilações, o que reforça o bom comportamento do método, tornando seus resultados mais confiáveis. O tempo de processamento aumenta consideravelmente com o refinamento da malha, como observa-se na Tabela 4.8.

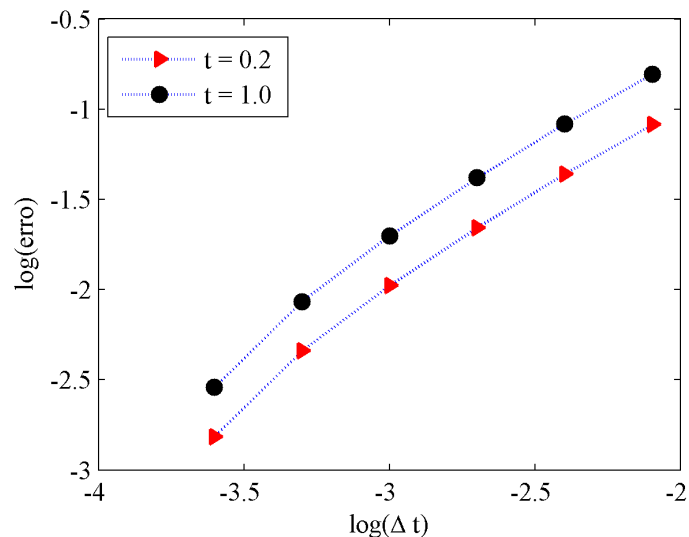
Tabela 4.8: Tempo de processamento do método PADE/C com o refinamento da malha.

$\Delta x (= \Delta y)$	Número de pontos na malha	Tempo	
		$t = 0.2$	$t = 1.0$
0.5	25	2.5640e-02 s	7.2234e-02 s
0.25	81	4.5300e-02 s	1.7523e-01 s
0.125	289	1.2999e-01 s	5.7045e-01 s
0.0625	1089	4.3612e-01 s	2.1009e+00 s
0.03125	4225	2.4678e+00 s	1.2320e+01 s
0.015625	16641	1.0812e+01 s	4.9415e+01 s

Além do refinamento da malha, também pode-se observar a norma do erro com a redução do passo no tempo, ou seja, à medida que se reduz o valor de  $\Delta t$ . Na Tabela 4.9 e na Figura 4.11 são apresentados os valores dos erros, em norma, adotando uma malha  $20 \times 20$  e  $\Delta t = 0.000125$  d (dia) como solução ótima,  $D_{xx} = D_{yy} = 0.2 \text{ m}^2 \text{ d}^{-1}$ ,  $v_x = 1 \text{ m d}^{-1}$ ,  $v_y = 0 \text{ m d}^{-1}$  e  $k = 0.001 \text{ d}^{-1}$ .

Tabela 4.9: Norma do erro do método PADE/C com a redução de  $\Delta t$ .

$\Delta t$		0.008	0.004	0.002	0.001	0.0005	0.00025
Norma do erro	$t = 0.2$	0.0823	0.0438	0.0221	0.0105	0.0046	0.0015
	$t = 1.0$	0.1568	0.0830	0.0417	0.0199	0.0086	0.0029

Figura 4.11: Norma do erro do método PADE/C com a redução de  $\Delta t$ .

Pode ser observado Figura 4.11 um comportamento semelhante ao da Figura 4.10, entretanto com um ganho na taxa de convergência. Isso mostra que o método não precisa de um passo no tempo muito pequeno para gerar bons resultados. O tempo de processamento também aumenta com a diminuição do passo no tempo, entretanto em uma velocidade menor que com o refinamento da malha, como observa-se na Tabela 4.10.

Tabela 4.10: Tempo de processamento do método PADE/C com a redução de  $\Delta t$ .

$\Delta t$		0.008	0.004	0.002	0.001	0.0005	0.00025
Tempo	$t = 0.2$	0.0091 s	0.0126 s	0.0190 s	0.0212 s	0.0377 s	0.0623 s
	$t = 1.0$	0.0211 s	0.0372 s	0.0575 s	0.0759 s	0.1466 s	0.2706 s

Nas Figuras 4.10 e 4.11 observa-se que a taxa de convergência do método PADE/C à medida que se diminui o passo no tempo é maior que a da convergência com o refinamento da malha, pois o método PADE/C, assim como o PADE/A, PADE/B e PADE/D, dá ênfase à aproximação da derivada temporal da equação de transporte. O refinamento da malha influencia fortemente a aproximação dos termos advectivos e difusivos, o que não é o foco deste trabalho.

Uma última comparação entre os métodos PADE/C e o de elementos finitos [41] pode ser feita observando a Tabela 4.11, onde é apresentado os valores correspondentes a solução da equação para alguns pontos da malha computacional.

Tabela 4.11: Soluções numéricas obtidas por meio dos métodos PADE/C e pelo método de elementos finitos na formulação espaço tempo (EF), apresentado por Romeiro et al. [41], para  $y = 0.5$  m e para alguns valores de  $x$ .

$x$	$t = 0.2$ d		$t = 1.0$ d	
	PADE/C	EF	PADE/C	EF
-1.0	1.0000e+00	1.0000e+00	1.000000	1.000000
-0.8	4.0917e-01	3.7999e-01	0.733579	0.722670
-0.6	1.6804e-01	1.4453e-01	0.594812	0.586670
-0.4	5.7558e-02	4.2189e-02	0.482766	0.474740
-0.2	1.5661e-02	8.4304e-03	0.382227	0.371790
0.0	3.3546e-03	1.0414e-03	0.291733	0.277810
0.2	5.6891e-04	6.5958e-05	0.213077	0.196190
0.4	7.7261e-05	6.7614e-07	0.148226	0.130030
0.6	8.5144e-06	-1.2661e-07	0.098174	0.080632
0.8	7.7187e-07	-3.4027e-09	0.063199	0.047924
1.0	6.7264e-08	1.8208e-10	0.045202	0.034724

Observando a Tabela 4.11 pode-se verificar que a variação entre os resultados dos métodos PADE/C e EF é pequena.



## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo desse trabalho foi aplicar métodos múltiplo estágio na discretização temporal da equação de transporte, cujo modelo utilizado foi o de advecção-difusão-reação bidimensional. Considerando certas condições iniciais e de contorno, ao se resolver a equação de transporte obtém-se a concentração de determinado poluente em um meio fluido para cada ponto do domínio computacional e para cada instante de tempo. Vale ressaltar que a motivação para resolver numericamente a equação (3.1) é que não há solução analítica conhecida. Para alcançar o objetivo, foi necessário estudar diferenças finitas e os aproximantes de Padé.

Na discretização da variável temporal da equação de transporte, discutida no Capítulo 3, se fez uso de um método descrito por Donea et al. [16], o qual tem como base os aproximantes de Padé. A utilização do aproximante de Padé  $R_{2,2}$  para a função exponencial conduz ao sistema formado pelas equações (3.25)-(3.28), que envolve três estágios intermediários de tempo. Para resolver esse sistema foram consideradas as estratégias (A), (B), (C) e (D), geradoras dos métodos PADE/A, PADE/B, PADE/C e PADE/D, respectivamente. As estratégias (A), (B) e (C) utilizam substituições para eliminar a necessidade de se considerar os estágios intermediários para resolver o sistema. Além disso, foi observado que a estratégia (B) conduz as mesmas equações que podem ser obtidas por meio do método de Crank-Nicolson. A estratégia (D), referenciada na literatura como método de Harten/Tal-Ezer, é a única que considerou todos os estágios intermediários de tempo. Ressalta-se neste momento que o método PADE/B pode ser obtido de modo análogo ao PADE/D, utilizando o aproximante de Padé  $R_{1,1}$  no lugar do  $R_{2,2}$ .

Para avaliar a qualidade da solução numérica da equação de transporte foram realizadas simplificações a fim de transformar o problema bidimensional em unidimensional, que possui solução analítica conhecida. Concluiu-se a partir das simulações realizadas para o problema unidimensional que o método PADE/A apresenta ERP crescente ou, em alguns casos, com baixa taxa de decaimento, o que fez com que esse método não fosse mais testado. Observou-se ainda que há grande semelhança entre os resultados obtidos pelos métodos PADE/B, PADE/C e PADE/D em relação ao ERP. As maiores diferenças entre esses três métodos é em relação ao ERP máximo quando  $D_{xx} = 0.1$  e em relação ao tempo computacional das simulações, ambas favoráveis ao PADE/C. Nas simulações realizadas, exceto para o caso em que  $D_{xx} = 0.1$ , os erros constatados nas Tabelas 4.1 e 4.3 não justificam a utilização de aproximantes de Padé de ordens elevadas na discretização da derivada temporal, visto que não há ganhos significativos.

Nas simulações bidimensionais concluiu-se que os resultados obtidos por meio do método PADE/C, cujo custo computacional é menor, são semelhantes aos obtidos em [41], onde utiliza-se um método de elementos finitos na formulação espaço-tempo. Além disso, foi observado que o método PADE/C apresentou convergência no teste de refinamento de

malha e no de diminuição do passo no tempo, como mostra as Tabelas 4.7 e 4.9, e as Figuras 4.10 e 4.11, fato que aumenta a confiabilidade dos resultados.

A pesquisa descrita neste trabalho pode ser incrementada de várias maneiras. Entre os temas que se apresentam como de maior interesse, elencam-se as seguintes possibilidades:

1. simular problemas com campos de velocidades não uniformes, gerados pelas equações de Navier-Stokes;
2. simular problemas em regiões não retangulares;
3. utilizar um método mais apropriado para aproximar o termo advectivo, como o ADB-QUICKEST [19].

**REFERÊNCIAS**

- [1] Un-water statement on water quality: World water day. <[www.unwater.org](http://www.unwater.org)>. *United Nations* (2010).
- [2] AGUILERA-NAVARRO, M. C. K., AGUILERA-NAVARRO, V. C., FERREIRA, R. C., AND TERAMON, N. Os aproximantes de padé. *Matemática Universitária* 26 (1999), 27.
- [3] ARGYRIS, J. H., VAZ, L. E., AND WILLAM, K. J. Higher order methods for transient diffusion analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 12, 2 (1977), 243–278.
- [4] ATAIE-ASHTIANI, B., AND HOSSEINI, S. A. Numerical errors of explicit finite difference approximation for two-dimensional solute transport equation with linear sorption. *Environmental Modelling and Software* 20, 7 (2005), 817–826.
- [5] AYRES JR., F. *Álgebra Moderna*. Schaum. McGraw Hill, 2003.
- [6] BABUSKA, I., AND ODEN, J. Verification and validation in computational engineering and science: basic concepts. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, 36–38 (2004), 4057 – 4066.
- [7] BAKER JR., G. A., AND GRAVES-MORRIS, P. R. The convergence of sequences of padé approximants. *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 87, 2 (1982), 382–394.
- [8] BORTOLI, Á. L. D. *Introdução à dinâmica de fluidos computacional*. Editora Universidade/UFRGS, 2000.
- [9] BURDEN, R. L., AND FAIRES, J. D. *Numerical analysis*. Cengage Learning, 1993.
- [10] CHAU, K. W., JIN, H. S., AND SIN, Y. S. A finite difference model of two-dimensional tidal flow in Tolo Harbor, Hong Kong. *Applied Mathematical Modelling* 20, 4 (1996), 321–328.
- [11] COELHO, L. A. B. Uso de aproximantes de padé na estimação de parâmetros modais em estruturas de grande porte. Tese de doutorado, Universidade de São Paulo, 2008.
- [12] CORCORAN, E., NELLEMAN, C., BAKER, E., BOS, R., OSBORN, D., AND SAVELLI, H. Sick water. *The central role of wastewater management in sustainable development. A rapid response assessment, United Nations Environment Programme. UN-HABITAT, GRID. Arendal* (2010).

- [13] CRAIG, J. R., AND RABIDEAU, A. J. Finite difference modeling of contaminant transport using analytic element flow solutions. *Advances in Water Resources* 29, 7 (2006), 1075 – 1087.
- [14] CRANK, J., AND NICOLSON, P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 43 (1947), 50–67.
- [15] DAHLQUIST, G., AND BJÖRCK, Å. *Numerical Methods in Scientific Computing Volume I*. SIAM, 2007.
- [16] DONEA, J., ROIG, B., AND HUERTA, A. High-order accurate time-stepping schemes for convection-diffusion problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering* 182, 3 (2000), 249–275.
- [17] FENG, L., WANG, D., AND CHEN, B. Modeling the effects of gate-controlled on water quality improvement in river network. *Procedia Environmental Sciences* 13 (2012), 2154–2160. 18th Biennial ISEM Conference on Ecological Modelling for Global Change and Coupled Human and Natural System.
- [18] FERNANDES, K. P. Solução numérica das equações de navier-stokes em um canal-tipo estenose usando métodos compactos e não compactos de alta ordem. Tese de doutorado, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", 2010.
- [19] FERREIRA, V. G., OISHI, C. M., KUROKAWA, F. A., KAIBARA, M. K., CUMINATO, J. A., CASTELO, A., MANGIAVACCHI, N., TOMÉ, M. F., AND MCKEE, S. A combination of implicit and adaptative upwind tools for the numerical solution of incompressible free surface flows. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 23, 6 (2007), 419–445.
- [20] FORTUNA, A. D. O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. Edusp, 2000.
- [21] GENUCHTEN, M. T. V. Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay. *Journal of Hydrology* 49, 3-4 (1981), 213–233.
- [22] GOLUB, G. H., AND ORTEGA, J. M. *Scientific computing and differential equations: an introduction to numerical methods*. Academic Press, 1992.
- [23] GRIEBEL, M., DORNSHEIFER, T., AND NEUNHOEFFER, T. *Numerical simulation in fluid dynamics: a practical introduction*, vol. 3. Siam, 1998.
- [24] GUIDORIZZI, H. L. *Um curso de cálculo*, 5 ed., vol. 2. LTC, 2001.

- [25] HARTEN, A., AND TAL-EZER, H. On a fourth order accurate implicit finite difference scheme for hyperbolic conservation laws: I. nonstiff strongly dynamic problems. *Mathematics of Computation* 36, 154 (1981), 353–373.
- [26] HEATH, M. T. *Scientific computing*. McGraw-Hill New York, 1997.
- [27] JOHNSON, C. *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Cambridge University Press, 1987.
- [28] KUZMIN, D. A guide to numerical methods for transport equations. *Universität Nürnberg* (2010).
- [29] LADEIA, C. A. Formulação semi-discreta aplicada as equações 1d de convecção-difusão-reação e de Burgers. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Londrina, 2012.
- [30] LEE, M. E., AND SEO, I. W. Analysis of pollutant transport in the han river with tidal current using a 2d finite element model. *Journal of Hydro-environment Research* 1, 1 (2007), 30–42.
- [31] LIMA, E. L. *Curso de Análise*, vol. 2. 2011.
- [32] MORAES BRANCO, P. D. Coisas que você deve saber sobre a água. *Serviço Geológico do Brasil* (2013).
- [33] MORTON, K. W. *Numerical solution of partial differential equations: an introduction*. Cambridge University Press, 2005.
- [34] O’CONNOR, J. J., AND ROBERTSON, E. F. The mactutor history of mathematics archive. <[www-history.mcs.st-andrews.ac.uk](http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk)>., June 2013.
- [35] ODEN, J., BELYTSCHKO, T., BABUSKA, I., AND HUGHES, T. Research directions in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192, 7–8 (2003), 913 – 922.
- [36] PADÉ, H. Sur la représentation approchée d’une fonction par des fractions rationnelles. *Annales Scientifiques École Normale Supérieure* (1892), 3–93.
- [37] PARDO, S. R. Uma modelagem do transporte e reações dos ciclos do carbono e do nitrogênio no Lago Igapó 1 - Londrina, Paraná. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Londrina, 2009.
- [38] PARDO, S. R., NATTI, P. L., ROMEIRO, N. M. L., AND CIRILO, E. R. A transport modeling of the carbon-nitrogen cycle at Igapó I Lake - Londrina, Paraná State, Brazil. *Acta Scientiarum* 34, 2 (2012), 217–226.

- [39] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. Numerical recipes in c: The art of scientific computing 2nd edition. *Cambridge (Mass.): Cambridge University Press, Cambridge* (1992).
- [40] QUARTERONI, A., SACCO, R., AND SALERI, F. *Numerical mathematics*, vol. 37. Springer, 2007.
- [41] ROMEIRO, N. M. L., CASTRO, R. G. S., AND CIRILO, E. R. Análise de metodologias numéricas para a busca da solução da equação de convecção-difusão-reação. In *Congresso de Métodos Numéricos en Ingeniería 2009* (2009).
- [42] STOER, J., BULIRSCH, R., BARTELS, R., GAUTSCHI, W., AND WITZGALL, C. *Introduction to numerical analysis*, vol. 2. Springer New York, 1993.
- [43] TRANGENSTEIN, J. A. *Numerical solution of hyperbolic partial differential equations*. Cambridge University Press, 2009.
- [44] WROBEL, L. C., EIGER, S., ROSMAN, P. C., TUCCI, C. E., CIRILLO, J. A., AND CABRAL, J. P. *Métodos numéricos em recursos hídricos*. ABRH, 1997.