

Métodos numéricos para solução da equação de transporte de massa

Régis S. Pereira

*Instituto de Pesquisas Hidráulicas - UFRGS
Av. Bento Gonçalves, 9500 Porto Alegre, RS.
regis.pereira@ufrgs.br*

RESUMO: A introdução de constituintes prejudiciais em corpos d'água deve ser regulada de forma que suas concentrações permaneçam abaixo dos limites permissíveis. No caso de um sistema de gerenciamento ambiental, isto pode ser feito utilizando um modelo matemático que simulará as condições de transporte dos poluentes. O trabalho a seguir tem o objetivo de avaliar diversas técnicas de solução da equação de transporte. Os métodos foram divididos em explícitos e implícitos os quais foram empregados no mesmo problema para condições diferenciadas. Os resultados demonstraram que os métodos implícitos obtiveram o melhor desempenho, com destaque para os esquemas Crank-Nicholson e o Limitador de Fluxo. Entre os métodos explícitos pode-se destacar os resultados dos esquemas Lax-Wendrof, LeapFrog e Dufort-Frankel desde que as condições de estabilidade sejam obedecidas.

PALAVRAS-CHAVE: Equação de transporte, métodos numéricos.

1. INTRODUÇÃO

O estudo da equação de transporte, também denominada equação da advecção-difusão, continua sendo um ativo campo de pesquisa, uma vez que essa equação é de fundamental importância nos problemas relacionados a aerodinâmica, meteorologia, oceanografia, hidrologia, engenharia química e de reservatórios [24 e 13].

Tomando como objeto de estudo as aplicações desta equação na área de hidrologia, destaca-se o estudo das características de transporte de constituintes nos corpos d'água. A avaliação do transporte de escalares (contaminantes, salinidade, etc.) cresce na mesma proporção das preocupações com preservação dos recursos hídricos. Neste contexto, os modelos de advecção-difusão são utilizados para determinar o destino e dispersão de contaminantes, com o objetivo de avaliar as condições de qualidade das águas.

A equação de transporte tem características bastante peculiares que fazem com que sua resolução por meios numéricos seja dificultada. Por isso diversos métodos têm sido desenvolvidos e aplicados, com a intenção de superar as dificuldades numéricas impostas por esta equação. Tanto os métodos utilizados, como os problemas encontrados na resolução desta equação são os objetivos deste trabalho.

A seguir será apresentada a equação a ser estudada, alguns dos métodos numéricos mais utilizados para sua resolução, suas vantagens e desvantagens e para por fim será apresentada uma comparação entre estes métodos.

2. EQUAÇÃO DA ADVECÇÃO-DIFUSÃO

A equação unidimensional da advecção-difusão pode ser obtida realizando o balanço de massa em um volume de controle definido do domínio a ser estudado. Considerando um

constituente neutro e de mesma densidade da água, este se moverá com a mesma velocidade desta, exceto pela possível difusão molecular [26].

Utilizando uma aproximação Euleriana para a derivação da equação de transporte resulta numa representação teórica e direta do processo de dispersão. O resultado do balanço de massa determina que a variação de massa no volume de controle deve ser igual a variação de massa através da superfície deste volume menos a taxa de decaimento dentro do volume. A forma unidimensional usualmente utilizada desta equação pode ser expressa como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u \cdot C}{\partial x} = \frac{\partial^2 k_x \cdot C}{\partial x^2} \quad (1)$$

onde, C é a concentração do constituinte, u é a velocidade na direção x e k_x é o coeficiente global de dispersão nas direção x. A solução analítica da equação de transporte somente pode ser obtida fazendo-se considerações que simplifiquem o problema, tais como fornecer condições de contorno simples, considerar a velocidade e os coeficientes de dispersão constantes, entrada uniforme do constituinte na seção transversal e desprezar a difusão transversal e vertical, já que na maioria dos casos de escoamentos em rios e canais a dispersão longitudinal se sobrepõe preponderantemente a difusão transversal e vertical [19].

O termo a esquerda da equação 1 é denominado termo advectivo, enquanto que o termo da direita é referenciado como termo difusivo. A advecção é o transporte realizado pela corrente do fluido, e a difusão é o transporte de massa que ocorre por difusão molecular ou turbulenta [29], estes processos podem ser visualizados na Figura 1. O coeficiente k_x possui uma faixa de valores bem ampla, pois depende do tipo de escoamento e dos mecanismos de mistura.

Entre as principais dificuldades na resolução numérica da equação do transporte é o aparecimento da difusão numérica durante a discretização do termo convectivo da equação e instabilidade numérica [34]. A difusão numérica em alguns casos pode ser várias vezes maior que a difusão real e acabar levando a resultados equivocados [6, 7 e 8]. Enquanto que a instabilidade está ligada a grandes gradientes, que leva resultados oscilatórios [4]. Portanto, para obtenção da solução numérica desta equação, assim como de qualquer equação que compõe um modelo, deve-se ter consciência das limitações de cada esquema numérico utilizado, para que se possa saber sob quais circunstâncias esta solução coincidirá com a solução exata. E para isso devem ser aplicados os conceitos de convergência, consistência, estabilidade e precisão numérica.

A difusão numérica acontece quando um processo de transporte ocorre numa escala menor que a resolução da discretização utilizada. Considere-se duas regiões tendo concentrações diferentes (c_1 e c_2) (Figura 2a). Aplicando a equação de advecção-difusão (Figura 2b), percebe-se que a concentração c_2 avança e ocupará uma parte da célula a seguir, ocupada por c_1 , o que faz com que o modelo determine a média da concentração desta célula gerando uma concentração c_3 . (Figura 2c), caracterizando assim a difusão numérica.

A difusão numérica afeta qualquer propriedade do fluido que tenha características advectivas como salinidade, calor, sedimentos, nutrientes, plâncton, cor, etc. Muitos métodos foram desenvolvidos e muitos ainda estão em desenvolvimento para minimização da difusão numérica, porém estas técnicas ainda dependem de uma grade relativamente fina, ou seja, uma discretização espacial detalhada.

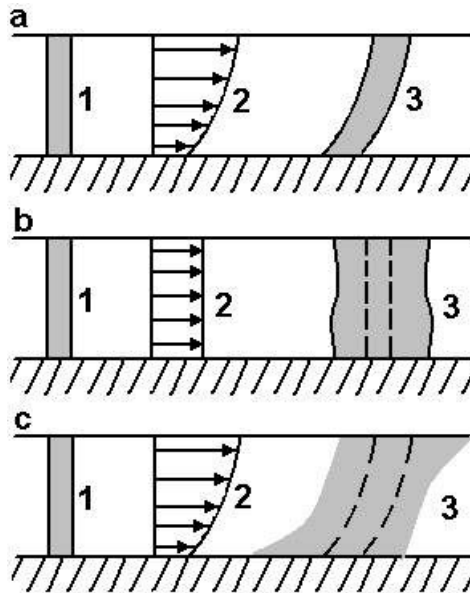


Figura 1: (1) Distribuição inicial do traçador; (2) Perfil de velocidade; (3) Distribuição final do traçador. (a) Advecção sem difusão; (b) Difusão sem convecção; (c) Advecção e difusão combinadas [9].

Apesar de todo o desenvolvimento dos computadores, a sua capacidade de processamento ainda limita a discretização em malhas muito finas. Esta limitação combinada com a grande diferença dos gradientes horizontais em relação aos verticais e laterais dos corpos d'água, leva a construção de grades de células com dimensões horizontais muito maiores que as verticais. Por outro lado, uma grade grosseira, limita a efetividade da introdução de termos não estacionários na equação do momento vertical, o que faz com que estes sejam desprezados, resultando na utilização de aproximações como a equação de águas rasas e pressão hidrostática [22]. Estas aproximações combinadas com a difusão numérica alteram substancialmente os resultados da simulação da dinâmica do sistema.

3. SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

A solução analítica da equação de advecção-difusão é dada seguinte distribuição gaussiana:

$$C(x,t) = \frac{1}{2 \cdot \sqrt{\pi \cdot k_x \cdot t}} \cdot e^{-\frac{(x-ut)^2}{4k_x t}} \quad (2)$$

A equação é válida para u e k_x constantes e concentração unitária e instantânea em $x=0$ e $t=0$ [5, 19 e 32].

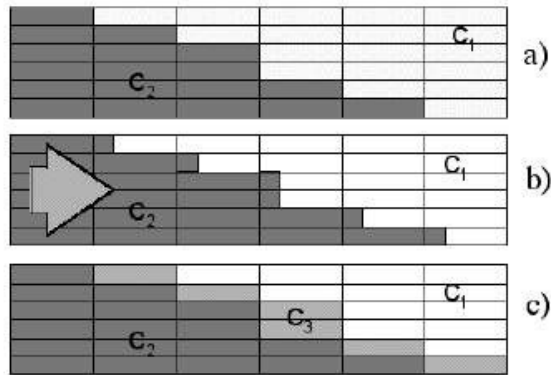


Figura 2: Diagrama esquemático da difusão numérica.

4. MÉTODOS NUMÉRICOS

O método de diferenças finitas (MDF) é o mais popular para resolução de problemas unidimensionais devido sua simplicidade e eficiência computacional.

O princípio do método de diferenças finitas para obtenção da solução de uma dada equação diferencial é aproximar as derivadas desta equação por um conjunto de valores da função em um determinado número de pontos. E para isto o método mais usual para realizar estas aproximações é através da séries de Taylor [13].

Os MDF podem ser classificados em explícitos e implícitos. Os esquemas explícitos de diferenças finitas são simples e de fácil implementação. Nestes esquemas a determinação do passo de tempo da discretização temporal é dependente da condição de estabilidade de Courant a fim de obter uma solução estável [20]. Já os esquemas implícitos são incondicionalmente estáveis, ou seja, o passo de tempo é independente da resolução espacial da grade adotada. Deve-se salientar que a estabilidade garantida pelos métodos implícitos não garante a precisão dos resultados, pois esta depende da discretização espacial, do passo de tempo e das condições de contorno adotadas. Além disso, os métodos implícitos geram um amortecimento nos resultados.

A seguir serão apresentados os esquemas mais utilizados para solução da equação de advecção-difusão.

4.1. Esquemas explícitos

Esquema FTCS: É um dos esquemas mais simples, sendo progressivo no tempo e centrado no espaço (Figura 3). Este esquema é de primeira ordem de acurácia no tempo e de segunda ordem no espaço. É incondicionalmente instável para escoamentos dominados pela advecção, devido ao aparecimento da difusão numérica, mas se estabiliza ao adicionar a difusão real, desde que o passo de tempo seja menor que o limite de estabilidade difusiva, equação 6 [18 e 30].

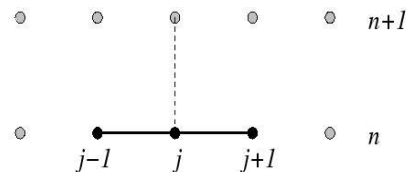


Figura 3: Representação do esquema FTCS.

Assim, aplicando este esquema à equação 1, resulta na seguinte expressão:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + u \cdot \frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} \quad (3)$$

Isolando o único termo desconhecido e simplificando a equação, resulta em:

$$C_j^{n+1} = (\beta + 0,5 \cdot C) \cdot C_{j-1}^n + (1 - 2 \cdot \beta) \cdot C_j^n + (\beta - 0,5 \cdot C) \cdot C_{j+1}^n \quad (4)$$

onde: $\beta = \frac{k_x \cdot \Delta t}{\Delta x^2}$ e $C = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x}$

Para que a estabilidade seja atingida é necessário que as restrições da equação 5 sejam satisfeitas.

$$0 \leq C^2 \leq 2 \cdot \beta \leq 1 \quad (5)$$

Esta última restrição pode ser dividida em duas, equações 6 e 7, que na verdade significam que não pode sair mais material por difusão nem por advecção, respectivamente, que aquele contido no volume de controle durante um passo de tempo [18]. A vantagem deste esquema é a simplicidade, porém as restrições de estabilidade restringem sua utilização na prática.

$$\beta = \frac{k_x \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (6)$$

$$C = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (7)$$

Esquema Upwind: este esquema é progressivo no tempo, e combina os esquemas progressivo e regressivo no espaço, sendo aplicado ao termo convectivo. Este método utiliza para determinar o ponto desconhecido o esquema regressivo para $u > 0$ (Figura 4a) e o progressivo para $u < 0$ (Figura 4b). Isso se deve ao fato de que se $u > 0$ a solução move-se para direita e assim utiliza-se os valores conhecidos (n, j) e $(n, j-1)$ para determinar o valor futuro $(n+1, j)$. Enquanto que se $u < 0$ a solução move-se para esquerda e usa-se o valor conhecido $(n, j+1)$ e (n, j) para obter valor em $(n+1, j)$ [27]. Este método se baseia no fato de que a equação diferencial irá simplesmente transladar as condições iniciais para um novo ponto e desse novo para um próximo ponto, e assim por diante. Dessa forma é necessário o conhecimento da direção da velocidade para que a translação dos valores seja feita na direção correta. Apesar de não ser um esquema centrado, pode-se obter bons resultados através deste esquema que é de primeira ordem no tempo e no espaço.

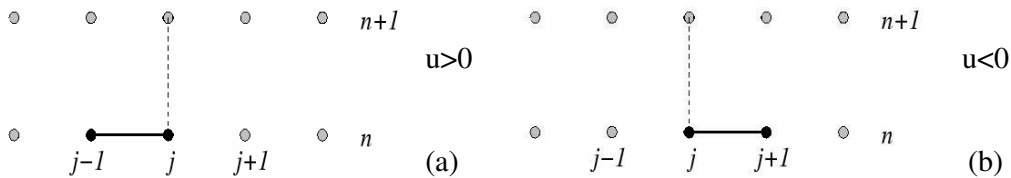


Figura 4: Representação do esquema Upwind.

Discretizando a equação de transporte com os esquemas acima encontra-se as seguintes expressões:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + u \cdot \frac{(C_j^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} \quad u > 0 \quad (8)$$

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} - u \cdot \frac{(C_{j+1}^n - C_j^n)}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} \quad u < 0 \quad (9)$$

Rearranjando as equações resultantes, tem-se:

$$C_j^{n+1} = (0.5 \cdot C + \beta) \cdot C_{j-1}^n + (1 - 0.5 \cdot C - 2 \cdot \beta) \cdot C_j^n + \beta \cdot C_{j+1}^n \quad u > 0 \quad (10)$$

$$C_j^{n+1} = (\beta - 0.5 \cdot C) \cdot C_{j-1}^n + (1 + 0.5 \cdot C - 2 \cdot \beta) \cdot C_j^n + \beta \cdot C_{j+1}^n \quad u < 0 \quad (11)$$

A condição para que este esquema tenha uma resposta estável é dada por:

$$\frac{C^2 - C}{2} \leq \beta \leq \frac{1 - C}{2} \quad (12)$$

Esquema Lax-Friedrichs (Figura 8): Uma proposta simples para resolver o problema de estabilidade do FTCS, foi apresentado por Lax e Friedrichs 1954, a qual apenas substitui o termo C_j^n pela sua média espacial $C_j^n = (C_{j+1}^n + C_{j-1}^n)/2$ [21].

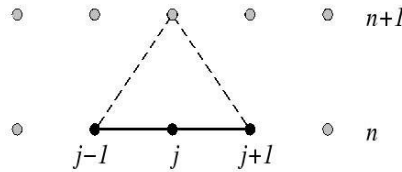


Figura 5: Representação do esquema Lax-Friedrichs.

Este esquema resultando na seguinte expressão:

$$\frac{C_j^{n+1} - \frac{(C_{j+1}^n + C_{j-1}^n)}{2}}{\Delta t} + u \cdot \frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} \quad (13)$$

Dessa forma, organizando a equação 13, obtém-se:

$$C_j^{n+1} = (\beta + 0,5 \cdot C) \cdot C_{j-1}^n + (1 - 2 \cdot \beta) \cdot \frac{(C_{j+1}^n + C_{j-1}^n)}{2} + (\beta - 0,5 \cdot C) \cdot C_{j+1}^n \quad (14)$$

A correção introduzida por Lax e Friedrichs é equivalente a introdução de uma difusão numérica, o que aumenta a estabilidade do esquema.

Esquema LeapFrog (Figura 8): este esquema é centrado no tempo e no espaço. Um dos

motivos das instabilidades observada no esquema FTCS e Lax-Fridrichs é a aproximação de primeira ordem da derivada no tempo, e por esta razão o esquema denominado LeapFrog introduz uma aproximação de segunda ordem no tempo, aumentando a estabilidade.

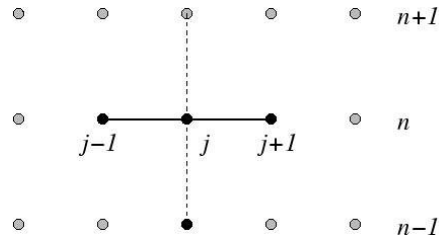


Figura 6: Representação do esquema LeapFrog.

Aplicando o esquema acima na equação 1, tem-se:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^{n-1}}{2 \cdot \Delta t} + u \cdot \frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^{n-1} - 2 \cdot C_j^{n-1} + C_{j+1}^{n-1})}{\Delta x^2} \quad (15)$$

Simplificando esta equação, obtém-se a solução da equação com o esquema LeapFrog.

$$C_j^{n+1} = C_j^{n-1} - C \cdot (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n) + 2 \cdot \beta \cdot (C_{j-1}^{n-1} - 2 \cdot C_j^{n-1} + C_{j+1}^{n-1}) \quad (16)$$

Esquema Lax-Wendroff (Figura 8): Este esquema de segunda ordem tanto no tempo quanto no espaço. Assim como o esquema Lax-Friedrichs, este adiciona alguma difusão numérica para obter uma solução mais estável. Na verdade, este esquema pode ser visto como uma combinação do Lax-Friedrichs e do LeapFrog. Este método se caracteriza como um esquema de dois passos, pois divide um passo de tempo em dois, onde, na primeira etapa os valores provisórios são calculados no centro da matriz em $(j-1/2, n+1/2)$ e $(j+1/2, n+1/2)$ utilizando um esquema progressivo no tempo e no espaço, em seguida faz-se a mesma aproximação realizada pelo esquema de Lax-Friedrichs, e por último calcula-se o valor final pelo método de diferenças centrais no tempo e no espaço [27].

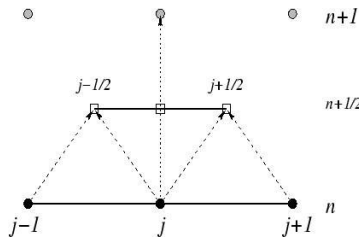


Figura 7: Representação do esquema Lax Wendroff.

Portanto, discretizando a equação de transporte conforme a Figura 7, resulta em:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^{n-1}}{2 \cdot \Delta t} + u \cdot \frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^n - (C_j^{n-1} + C_j^{n+1}) + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} \quad (17)$$

Rearranjando esta última equação, tem-se:

$$C_j^{n+1} = \frac{(2 \cdot \beta + C)}{(1 + 2 \cdot \beta)} \cdot C_{j-1}^n + \frac{(1 - 2 \cdot \beta)}{(1 + 2 \cdot \beta)} \cdot C_j^{n-1} + \frac{(2 \cdot \beta - C)}{(1 + 2 \cdot \beta)} \cdot C_{j+1}^n \quad (18)$$

A condição de estabilidade é determinada pela equação 19, respectivamente.

$$0 \leq C^2 \leq 2 \cdot (\beta + \alpha) \leq 1 \quad (19)$$

Esquema Dufort-Frankel (Figura 8): este esquema é baseado no esquema de Richardson, o qual é de segunda ordem no tempo e no espaço, além de utilizar diferenças centrais para os mesmos. O esquema proposto por Richardson é incondicionalmente estável para $\beta > 0$, o que o torna pouco prático. Assim Dufort e Frankel em 1953 [11], propuseram a substituição do C_j^n por $(C_{j+1}^n + C_{j-1}^n)/2$ no termo advectivo da equação de transporte, o que o torna condicionalmente estável.

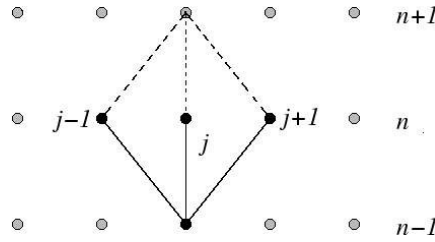


Figura 8: Representação do esquema Dufort-Frankel.

A expressão para solução da equação de transporte pelo esquema de Dufort-Frankel é dada por:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^{n-1}}{2 \cdot \Delta t} + u \cdot \frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} = \frac{k_x \cdot (C_{j-1}^n - (C_j^{n-1} + C_j^{n+1}) + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} \quad (20)$$

Manipulando a expressão acima pode-se isolar o termo no tempo (n+1) e obter a solução explícita do esquema:

$$C_j^{n+1} = \frac{(1 - 2 \cdot \beta)}{(1 + 2 \cdot \beta)} \cdot C_j^{n-1} + \frac{(2 \cdot \beta - C)}{(1 + 2 \cdot \beta)} C_{j+1}^n + \frac{(C + 2 \cdot \beta)}{(1 + 2 \cdot \beta)} C_{j-1}^n \quad (21)$$

A condição de estabilidade é a seguinte:

$$C \leq 1 \quad (22)$$

4.2. Esquema implícitos

A principal vantagem destes métodos é que não se encontra as diversas restrições quanto à escolha do passo de tempo observadas nos métodos explícitos. Entretanto a desvantagem desta técnica é o custo computacional quanto comparado aos métodos explícitos e o amortecimento dos resultados. Muitas vezes, mesmo para obtenção de uma solução com baixa precisão são necessárias muitas interações [15].

Esquema BTCS (Figura 9): este esquema é regressivo no tempo e centrado no espaço. Como já mencionado anteriormente é incondicionalmente estável.

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + u \cdot \frac{(C_{j+1}^{n+1} - C_{j-1}^{n+1})}{2 \cdot \Delta x} = k_x \cdot \frac{(C_{j-1}^{n+1} - 2 \cdot C_j^{n+1} + C_{j+1}^{n+1})}{\Delta x^2} \quad (23)$$

$$(C - 2 \cdot \beta) \cdot C_{j+1}^{n+1} - (C + 2 \cdot \beta) \cdot C_{j-1}^{n+1} + 2 \cdot (2 \cdot \beta + 1) \cdot C_j^{n+1} - 2 \cdot C_j^n = 0 \quad (24)$$

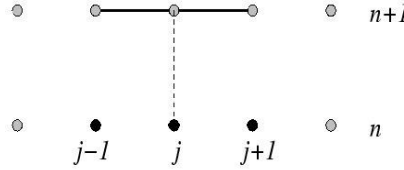


Figura 9: Representação do esquema BTCS.

Esquema Crank-Nicolson (Figura 10): este esquema é de segunda ordem tanto no tempo quanto no espaço, sendo incondicionalmente estável (exceto em circunstâncias excepcionais, raramente encontradas na prática), o que torna este método muito atrativo para resolução de equações diferenciais parciais. Entretanto, observa-se que este método resulta em oscilações para altos valores de β e quando existem grandes gradientes e descontinuidades nas condições iniciais, tais oscilações podem perdurar por vários passos de tempo até a estabilização [2].

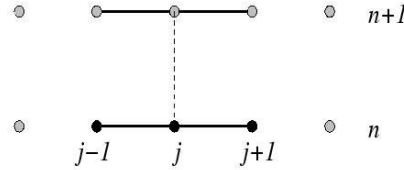


Figura 10 : Representação do esquema Crank-Nicolson.

O método de Crank-Nicolson pode ser considerado como uma combinação de passos alternados dos esquemas FTCS explícito e o BTCS implícito [12], onde a equação é aproximada por diferenças centrais no espaço e substituí-se as derivadas espaciais pela média dos seus valores nos tempos n e n+1 [10], resultando em:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + \frac{u}{2} \cdot \left[\frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{2 \cdot \Delta x} + \frac{(C_{j+1}^{n+1} - C_{j-1}^{n+1})}{2 \cdot \Delta x} \right] = \frac{k_x}{2} \cdot \left[\frac{(C_{j-1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j+1}^n)}{\Delta x^2} + \frac{(C_{j-1}^{n+1} - 2 \cdot C_j^{n+1} + C_{j+1}^{n+1})}{\Delta x^2} \right] \quad (25)$$

Reorganizando a equação anterior obtém-se o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} & -(\beta + 0,5 \cdot C) \cdot C_{j-1}^{n+1} + 2 \cdot (1 + \beta) \cdot C_j^{n+1} - (\beta - 0,5 \cdot C) \cdot C_{j+1}^{n+1} = (\beta + 0,5 \cdot C) \cdot C_{j-1}^n \\ & + 2 \cdot (1 - \beta) \cdot C_j^n + (\beta - 0,5 \cdot C) \cdot C_{j+1}^n \end{aligned} \quad (26)$$

Esquema Euleriano-Lagrangeano: o método Euleriano-Lagrangeano é um esquema

extensamente utilizado para solução da equação de transporte. Este método é uma combinação dos métodos Euleriano e Lagrangeano. No primeiro a equação é resolvida numa grade fixa no espaço. O problema deste método é que este é limitado pela condição de estabilidade de Courant-Friedrichs-Lewy, apesar disso é muito utilizado devido a facilidade de lidar com as condições de contorno e termos fonte [33 e 35]. Já o método Lagrangeano representa o transporte de constituintes por um número finito de partículas que se movimentam com o escoamento, dessa forma o sistema de coordenadas se move-se conforme a velocidade das partículas [17]. Assim a concentração do constituinte é determinada pelo número de partículas no volume de controle em um determinado tempo. A acurácia deste método melhora a medida que aumenta-se o número de partículas dentro de cada volume de controle, enquanto que sua resolução cresce com a diminuição deste volume, mas a combinação destas duas situações aumenta a demanda computacional [17].

Desta forma o método combinado Euleriano-Lagrangeano, divide o problema de transporte em dois passos. No primeiro passo utiliza-se uma aproximação Lagrangeana para solução da porção advectiva da equação de transporte. No segundo passo, usa o método Euleriano para solução dos termos restantes da equação. O algoritmo alterna estes dois passos repetidamente até a obtenção da solução [4 e 28]. Em muitos casos este método híbrido atinge resultados bem melhores que aqueles obtidos pelas técnicas aplicadas individualmente, apesar de não conservar a massa em certas circunstâncias, principalmente nas condições de contorno.

Considerando a equação de transporte (1) na sua forma Lagrangeana, tem-se:

$$\frac{DC}{Dt} - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \quad (27)$$

Percebe-se que na equação 27 o termo convectivo desaparece, isso acontece devido a adoção do sistema de coordenada Lagrangeanas, o qual move-se junto com o escoamento, portanto a dispersão ocorrerá apenas por difusão. A derivada substancial DC/Dt , indica que a taxa de variação no tempo é calculado ao longo da linha de corrente, definida por $dx/dt = u$. Dessa forma, no primeiro passo do esquema a concentração na origem da linha de corrente é determinada pelo Método das Características Modificado [28].

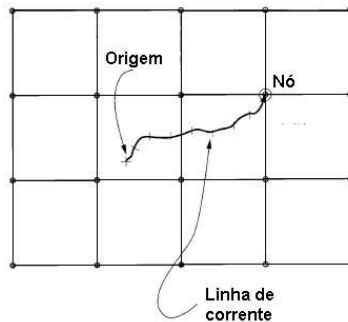


Figura 11: Representação do esquema Euleriano-Lagrangeano.

Uma vez definido o valor da concentração na origem da linha de corrente, ela é salva e utilizada no segundo passo do esquema onde a equação 27 é discretizada por um esquema centrado no espaço (Figura 11). A expressão resultante destes dois passos é:

$$\frac{\tilde{C}_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} = \frac{C_{j+1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (28)$$

$$\tilde{C}_j^{n+1} = C_{j+u\Delta t}^{n+1} \quad (29)$$

Como o valor de $(j + u \cdot \Delta t)$ não é inteiro e o termo $C_{j+u\Delta t}^{n+1}$ deve ser um ponto existente da grade, utilizasse uma interpolação para obter o valor em um nó existente da grade e em seus pontos vizinhos [3]. A acurácia, estabilidade e difusão numérica da equação discretizada pelo esquema Euleriano-Lagrangeano depende da função de interpolação escolhida.

Ruan e McLaughlin [28], utilizaram 4 funções de interpolação: linear, quadrática, cúbica e uma variação da cúbica (taut spline). Os resultados indicam que interpoladores lineares acarretam a soluções extremamente dispersivas, enquanto que os quadráticos apresentam resultados oscilatórios. Já os interpoladores cúbicos apresentam também oscilações nos resultados, porém menores que os quadráticos, as oscilações se pronunciam em locais com grandes gradientes de concentração. Já o interpolador “taut spline” mostrou-se o mais eficiente, pois se mostrou bem menos dispersivo que o linear e eliminou as oscilações observadas nos cúbicos. Esses resultados se devem ao fato deste interpolador incorporar termos de tensão e elasticidade no seu polinômio, o que elimina pontos de inflexão existentes nos polinômios cúbicos.

Esquemas Limitadores de fluxo: a crescente adoção destes esquemas se deve a sua característica de diminuir consideravelmente as oscilações dos resultados dos esquemas de segunda ordem, em problemas que envolvem descontinuidades, além de diminuir a dispersão numérica [1 e 25]. A idéia básica destes esquemas é utilizar um esquema híbrido que é de primeira ordem em regiões de gradientes suaves e expande-se para um esquema mais robusto de segunda ordem próximo as descontinuidades ou grandes gradientes [23]. A transformação entre os dois esquemas se dá por meio da multiplicação do termo advectivo por uma função ψ denominada “limitadora de fluxo” [31].

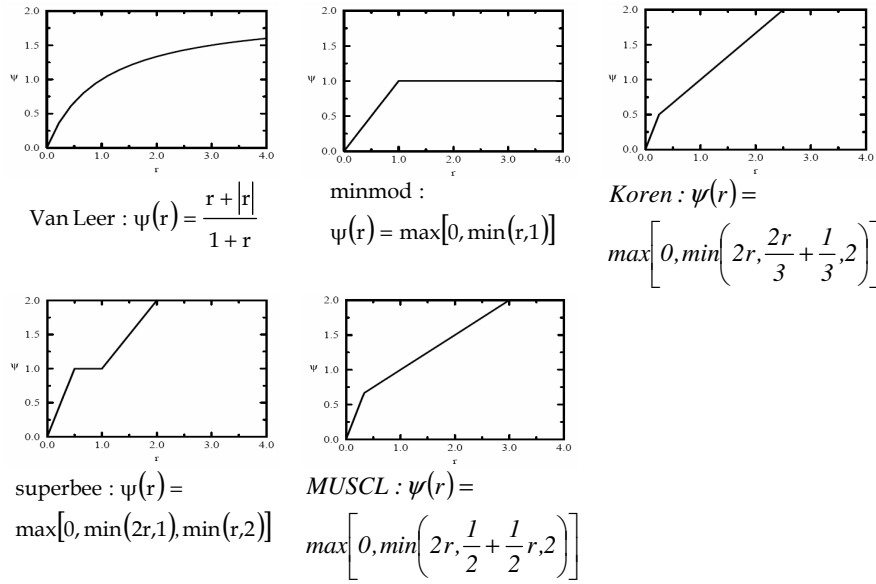
A escolha da função limitadora de fluxo depende dos gradientes encontrados. Dessa forma para avaliar tais gradientes (r) utiliza-se uma relação entre as concentrações expressa pela seguinte expressão:

$$r = \frac{C_{j-1}^n - C_j^n}{C_j^n - C_{j+1}^n} \quad (30)$$

Percebe-se pela equação acima que $r \approx 1$ o gradiente de concentrações é suave, assim como, quanto mais r se afasta de 1 mais acentuado é o gradiente de concentração. Na Tabela 1 são apresentadas algumas das mais comuns funções limitadoras de fluxo em função do gradiente r .

Um estudo comparativo realizado por Suratanakavikul e Marquis [31] demonstrou que entre as funções limitadoras de fluxo, a que demonstrou a melhor performance foi a Superbee, enquanto que a Mimmod causa os maiores erros de precisão. Foi ainda concluído que apesar da Superbee ter tido os melhores resultados gerais ela não é adequada para problemas de regime permanente, os quais são melhores solucionados pela função Koren.

Tabela 1: Exemplos de funções limitadoras de fluxo.



Outros esquemas: Há muitos outros esquemas possíveis de aplicação para solução da equação de transporte, porém menos utilizados e conhecidos, como é o caso do esquema de Siemieniuch–Gladwell, o qual na tentativa de eliminar a difusão numérica removeu o termo $\partial^2 C / \partial t^2$ do erro de truncamento [16], fazendo uso das seguintes aproximações para as derivadas da equação de transporte:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_j^n &= \frac{(2 \cdot \beta - C)}{4} \cdot \frac{(C_{j-1}^{n+1} - C_{j-1}^n)}{\Delta t} + \frac{(2 + C - 2 \cdot \beta)}{2} \cdot \frac{(C_j^{n+1} - C_j^n)}{\Delta t} + \frac{(2 \cdot \beta - C)}{4} \cdot \frac{(C_{j+1}^{n+1} - C_{j+1}^n)}{\Delta t} \\ \left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_j^n &= \frac{(C_{j+1}^n - C_{j-1}^n)}{4 \cdot \Delta x} + \frac{(C_{j+1}^{n+1} - C_{j-1}^{n+1})}{4 \cdot \Delta x} \\ \left. \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \right|_j^n &= \frac{1}{2} \cdot \frac{(C_{j+1}^{n+1} - 2 \cdot C_j^{n+1} + C_{j-1}^{n+1})}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{(C_{j+1}^n - 2 \cdot C_j^n + C_{j-1}^n)}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (31)$$

A maioria dos esquemas de diferenças finitas quando aplicado ao termo advectivo da equação de transporte introduz uma difusão artificial que é, em geral, várias ordens de grandeza maior que a difusão física, e por esta razão uma das estratégias utilizadas é resolver separadamente os termos de advecção e da difusão e posteriormente combinar seus resultados a fim de obter a solução final [19]. Desta forma surgem outros esquemas específicos para solução dos termos convectivos e difusivos. Exemplo disto é o esquema de Saulyev, que discretiza a equação de difusão conforme as Figura 12a e Figura 12b.

Os esquemas acima aplicados a equação de difusão, resultam nas equações 32 e 33, respectivamente.

$$C_j^{n+1} = \frac{1}{1 + \beta} \cdot (\beta \cdot C_{j-1}^{n+1} + (1 - \beta) \cdot C_j^n + \beta \cdot C_{j+1}^n) \quad (32)$$

$$C_j^{n+1} = \frac{1}{1 + \beta} \cdot (\beta \cdot C_{j+1}^{n+1} + (1 - \beta) \cdot C_j^n + \beta \cdot C_{j-1}^n) \quad (33)$$

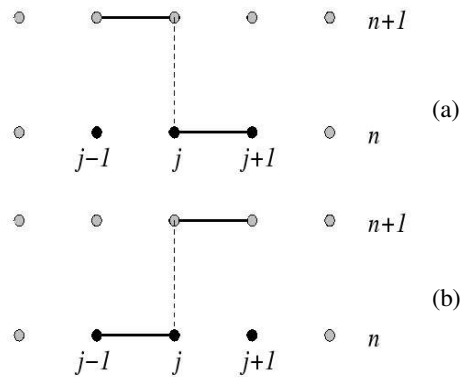


Figura 12: Representação do esquema Saul'yev.

Cabe salientar que este esquema apesar de utilizar dois pontos do tempo ($n+1$) nos trechos ($j - 1$) e (j) se tornar explícito quando o procedimento de cálculo é realizado da fronteira esquerda para direita para equação 32 e da direita para esquerda para equação 33. Outro esquema possível é combinar as duas equações resultando no esquema de Barakat e Clark [14].

5. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Com o objetivo de comparar os diversos esquemas numéricos apresentados (1 a 10), foi utilizado um problema idealizado da adição de 5kg de um constituinte conservativo em um rio, sendo que a adição acontece a 500m da condição de contorno a montante, de forma instantânea numa seção transversal de 60m². Esta situação foi avaliada para 5 casos diferentes, onde a escolha de cada caso foi feita levando em consideração o número de Courant (C) e o limite de estabilidade difusiva (β), que devem ser menores que 1 e 0,5, respectivamente.

Dessa forma, nos três primeiros casos optou-se por variar o passo de tempo e fixar o Δx . Assim, escolheu-se um caso onde ambas restrições fossem abaixo dos limites (caso 1), outro onde estas restrições fossem mais próximas dos seus valores máximos (caso 2), e um caso onde estes limites fossem ultrapassados (caso 3).

Já nos dois últimos casos fixou-se o Δt e variou-se o Δx . No caso 4, utilizou-se um valor de Δt correspondente a metade dos três primeiros casos e no caso 5 optou-se por um valor igual ao dobro. Os valores de cada parâmetro para todos os casos podem ser verificados na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros utilizados nas simulações

Casos	1	2	3	4	5
Δt (s)	36,00	90,00	180,00	36,00	36,00
Δx (m)	100,00	100,00	100,00	50,00	150,00
u (m.s ⁻¹)	0,67	0,67	0,67	0,67	0,67
Kx (m ² .s ⁻¹)	41,67	41,67	41,67	41,67	41,67
C	0,24	0,60	1,21	0,48	0,16
β	0,15	0,37	0,75	0,60	0,07

6. RESULTADOS

6.1. Esquemas explícitos

De acordo com os resultados, entre os esquemas explícitos, todos tiveram um comportamento estável para o caso 1, uma vez que as condições de estabilidade foram satisfeitas. Quanto a precisão, o esquema FTCS foi o que mostrou melhor resultado, uma vez que seus resultados foram iguais a solução analítica (Figura 13). Enquanto que os esquemas mais difusivos (3 ao 6) apresentaram um certo amortecimento da resposta, entre estes os Lax-Friedrichs foi o menos preciso (Figura 14).

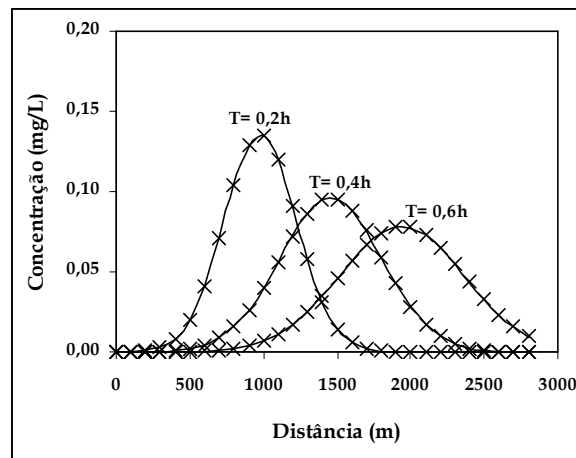


Figura 13: Solução da equação de transporte para o caso 1, pelo esquema FTCS. (Linha cheia: solução numérica; Pontos: Solução analítica).

Já no caso 2, onde as restrições de estabilidade estão mais próximas aos seus limite, os esquemas FTCS e Upwind demonstraram alguma instabilidade e imprecisões depois de decorrido um certo tempo de simulação (Figura 15), enquanto que os demais se mantiveram estáveis, apesar apresentar o mesmo amortecimento do caso 1.

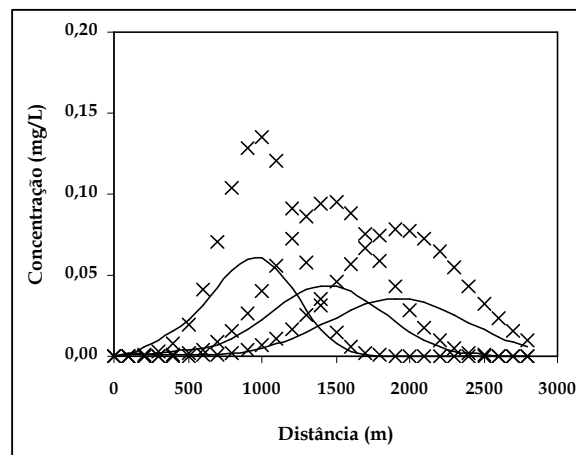


Figura 14: Solução da equação de transporte para o caso 1, pelo esquema Lax-Friedrichs. (Linha cheia: solução numérica; Pontos: Solução analítica).

Para o caso 3 todos os esquemas explícitos se mostraram instáveis, a diferença entre eles foi apenas que o crescimento dos erros nos esquemas FTCS e Upwind foram mais

acentuados. Comportamento semelhante foi percebido no caso 4, com um desempenho melhor dos esquemas 3 a 6 que conseguiram lidar melhor com o alto valor de β . Enquanto que no caso 5 os esquemas FTCS e Upwind mostraram ter mais dificuldade em relação aos demais em lidar com o passo de tempo maior, resultando em problemas de precisão essencialmente.

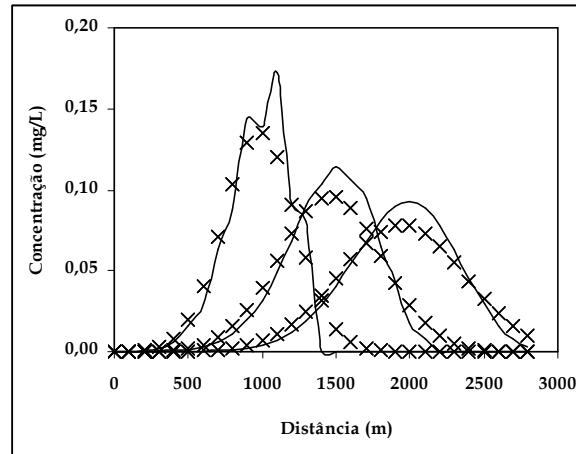


Figura 15: Solução da equação de transporte para o caso 2, pelo esquema FTCS. (Linha cheia: solução numérica; Pontos: Solução analítica).

Levando em conta os resultados dos casos 1, 2, 4 e 5 determinou-se que os esquemas explícitos podem ser divididos em 2 grupos levando em consideração o valor do erro médio quadrático (RMS), conforme mostra a tabela a seguir.

Tabela 3: Erro quadrático médio dos esquemas explícitos.

Esquemas	Erro RMS
FTCS, Upwind	5×10^{-2}
Lax-Friedrichs, Lax-Wendrof, LeapFrog, Dufort-Frankel	2×10^{-2}

Estes resultados mostram uma diferença razoavelmente grande entre os métodos de discretização espacial e temporal, já que os esquemas 1 e 2 resultam em erros maiores que o dobro dos obtidos pelos 3, 4, 5 e 6.

6.2. Esquemas implícitos

Os resultados da aplicação dos esquemas implícitos comprovaram a ausência de limitações quanto aos valores dos parâmetros C e β . Embora percebeu-se algumas diferenças significativas entre os 4 esquemas avaliados. A única característica comum encontrada nos resultados foi que as piores soluções para todos os esquemas foram apresentadas nos casos 3 e 5, que já era de se esperar devido as discretizações espacial e temporal terem sido menos refinadas.

Entre os esquemas, o BTCS foi o que apresentou os resultados menos preciso. Apesar da estabilidade, o esquema perde precisão quando aumenta-se o passo de tempo (caso 2) (Figura 16). Para determinadas situações como o caso 1, por exemplo, sua aplicação é justificável, pois converge rapidamente, além de apresentar um resultado semelhante ao encontrado pelo FTCS na Figura 13.

Já os esquemas Crank-Nicholson, Euleriano-Lagrangeano e os Limitadores de Fluxo

apresentaram resultados tão bons quanto aqueles obtidos pelos métodos explícitos, no caso 1. Não foi percebida uma grande diferença em relação ao tempo de simulação entre os métodos explícitos e implícitos, pois o problema proposto não exigiu uma grande demanda computacional. Entretanto, estes esquemas se mantiveram estáveis para todos valores dos parâmetros C e β utilizados. Vale salientar que foram utilizados o interpolador cúbico e a função Superbbe para os esquemas Euleriano-Lagrangeano e Limitador de Fluxo, respectivamente.

No caso 2, já se percebe nitidamente a diferença entre as vantagens dos métodos implícitos, como mostra a Figura 17, onde se observa que o esquema Crank-Nicholson não apresenta as mesmas perturbações que o FTCS, por exemplo, e aproxima-se mais da solução analítica.

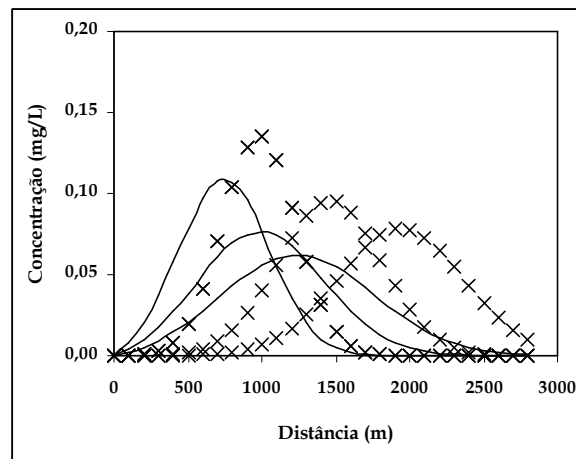


Figura 16: Solução da equação de transporte para o caso 2, pelo esquema BTCS. (Linha cheia: solução numérica; Pontos: Solução analítica).

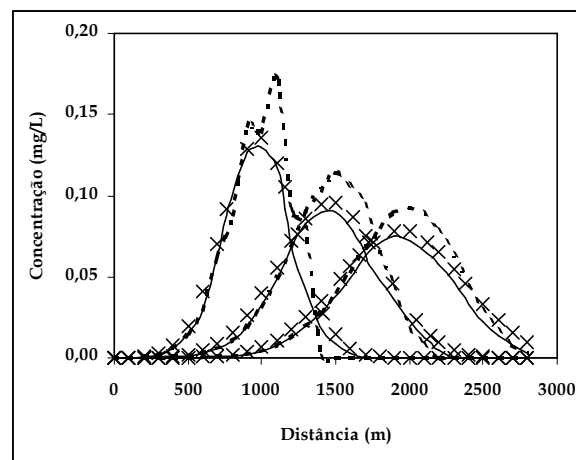


Figura 17: Solução da equação de transporte para o caso 2, pelos esquemas: Crank-Nicholson (Linha cheia), FTCS (Linha tracejada) e a solução analítica (Pontos).

Observando os resultados do esquema limitador de fluxo percebe-se um melhor desempenho em relação aos demais no início da simulação, logo em seguida que ocorre o despejo instantâneo do constituinte, pois é nesse instante que é encontrado o maior gradiente da simulação. O esquema limitador inibe o aparecimento de valores negativos nos primeiros

passos de simulação devido às oscilações resultantes do gradiente, conforme destacado na Figura 18.

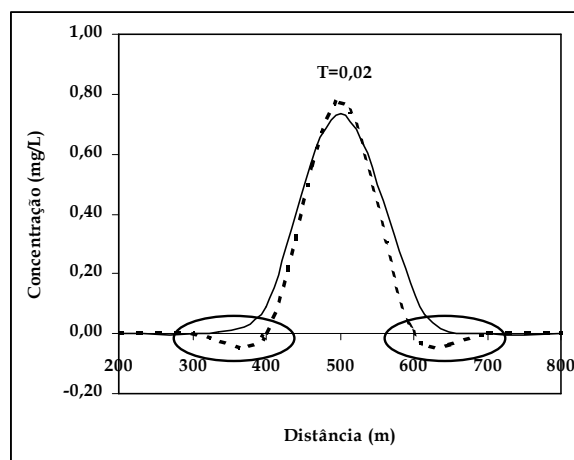


Figura 18: Solução da equação de transporte para o caso 1, pelos esquemas: Limitador de Fluxo (Linha cheia) e Upwind (Linha tracejada).

7. CONCLUSÃO

De modo geral, dentre os métodos explícitos, os esquemas LeapFrog, Lax-Wendrof e o Dufort-Frankel foram os que resultaram em melhores resultados, considerando que podem ser aplicados a uma faixa de valores de dt e dx mais ampla, causando prejuízos que podem ser aceitáveis, isto se deve as estratégias como adicionar uma difusão artificial, assim como a utilização de esquemas com aproximação de segunda ordem tanto no tempo como no espaço. Já os esquemas explícitos FTCS e Upwind têm suas aplicações mais limitadas devido a dificuldade de lidar com as restrições de estabilidade e precisão.

Quanto aos esquemas implícitos, pôde-se perceber suas grandes vantagens em relação aos explícitos, tanto no tratamento de grandes gradientes quanto na estabilidade, porém a sua utilização depende do grau de complexidade e das condições impostas pelo problema.

Apesar da grande variedade de métodos desenvolvidos para solução da equação de transporte, seu estudo ainda consiste num grande desafio devido a importância da suas aplicações.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 AWAD, M.; TURNER, I. Flux-limiting and non-linear solution techniques for simulation of transport in porous media. In: *Proceedings of the 1999 International conference on Computational Techniques and Applications*. 1999, Australia. Anais... Australia. Australian Mathematical Society, 1999.
- 2 BRITZ, D.; OSTERBY, O.; STRUTWOLF, J. Damping of Crank-Nicolson error oscillations. *Computational Biology and Chemistry*. v.27, n.3, p. 253-263, 2003.
- 3 CASULLI, V. Numerical Simulation of shallow water flow. In: *Computational Methods in Surface Hydrology*. 1990, Southampton. Anais... Southampton. Computational Mechanics Publications, 1990.
- 4 CASULLI, V.; CHENG, R. T. Stability analysis of Eulerian-Lagrangian methods for the one-dimensional shallow-water equations. *Applied Mathematical Modelling*. v.14, n.3, p. 122-131, 1990.

- 5 CHAPRA, S. C. *Surface Water Quality Modeling*. New York: McGraw-Hill, 1997. 844p.
- 6 CHOCK, D. P. A comparison of numerical methods for solving the advection equation--II. *Atmospheric Environment* (1967). v.19, n.4, p. 571-586, 1985.
- 7 CHOCK, D. P. A comparison of numerical methods for solving the advection equation--III. *Atmospheric Environment*.Part A.General Topics. v.25, n.5-6, p. 853-871, 1991.
- 8 CHOCK, D. P.; DUNKER, A. M. A comparison of numerical methods for solving the advection equation. *Atmospheric Environment* (1967). v.17, n.1, p. 11-24, 1983.
- 9 CUNGE, J. A.; HOLLY, F. M. JR.; VERWEY, A. *Practical aspects of computational river hydraulics*. London: Pitman Advanced, 1980. 420p.
- 10 DEHGHAN, M. Crank-Nicolson finite difference method for two-dimensional diffusion with an integral condition. *Applied Mathematics and Computation*. v.124, n.1, p. 17-27, 2001.
- 11 DEHGHAN, M. Fully explicit finite-difference methods for two-dimensional diffusion with an integral condition. *Nonlinear Analysis*. v.48, n.5, p. 637-650, 2002.
- 12 DEHGHAN, M. Numerical solution of one-dimensional parabolic inverse problem. *Applied Mathematics and Computation*. v.136, n.2-3, p. 333-344, 2003.
- 13 DEHGHAN, M. Numerical schemes for one-dimensional parabolic equations with nonstandard initial condition. *Applied Mathematics and Computation*. v.147, n.2, p. 321-331, 2004.
- 14 DEHGHAN, M. Weighted finite difference techniques for the one-dimensional advection-diffusion equation. *Applied Mathematics and Computation*. v.147, n.2, p. 307-319, 2004.
- 15 DEHGHAN, M. Fully implicit finite differences methods for two-dimensional diffusion with a non-local boundary condition. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. v.106, n.2, p. 255-269, 1999.
- 16 DEHGHAN, M. Numerical solution of the three-dimensional advection-diffusion equation. *Applied Mathematics and Computation*. v.150, n.1, p. 5-19, 2004.
- 17 EWING, E.; WANG, H. A summary of numerical methods for time-dependent advection-dominated partial differential equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. v.128, n.1-2, p. 423-445, 2001.
- 18 FLETCHER, C. A. J. *Computational Techniques for Fluids Dynamics*. New York: Springer-Verlag, 1997. 401p.
- 19 ISLAM, R. M.; CHAUDHRY, H. M. Numerical solution of transport equation for applications in environmental hydraulics and hydrology. *Journal of Hydrology*. v.191, n.1-4, p. 106-121, 1997.
- 20 KARSTEN, H. The straightforward numerical treatment of the time dependent advection in air pollution problems and its verification. *Atmospheric Environment* (1967). v.16, n.10, p. 2391-2399, 1982.
- 21 KURGANOV, A.; TADMOR, E. New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations. *Journal of Computational Physics*. v.160, n.1, p. 241-282, 2000.
- 22 LAVAL, B.; HODGES, B. R.; IMBERGER, J. Numerical diffusion in stratified lake models. In: *5th International Symposium on Stratified Flows*. 2000, Vancouver. Anais... Vancouver. 2000.
- 23 LEVEQUE, R. J. *Finite Diference Methods for Diferential Equations*. Washington: University of Washington, 1998. 230p.
- 24 NOYE, B. J. Some three-level finite difference methods for simulating advection in fluids. *Computers & Fluids*. v.19, n.1, p. 119-140, 1991.
- 25 PATNAIK, G.; GUIRGUIS, R. H.; BORIS, J. P.; ORAN, E. S. A barely implicit correction for flux-corrected transport. *Journal of Computational Physics*. v.71, n.1, p. 1-20, 1987.

- 26 PEREIRA, R. S.; NIENCHESKI, L. F. H. *Simulação computacional do acidente com o navio tanque Bahamas no porto de Rio Grande*. In: Seminário e Workshop em Engenharia Oceânica. 2004, Rio Grande. Anais... Rio Grande. Ed. da FURG, 2004.
- 27 REZZOLLA, L. *Numerical Methods for the Solution of Hyperbolic Partial Differential Equations*. 2004. Disponível em: <http://www.sissa.it/~rezzolla/lnotes/hyperblc_pdes_lnotes/index.html>. Acesso em: 08/16/2004.
- 28 RUAN, F.; MCLAUGHLIN, D. An investigation of Eulerian-Lagrangian methods for solving heterogeneous advection-dominated transport problems. *Water Resource Research*. v.35, n.08, p. 2359-2373, 1999.
- 29 SCHONNOR, J. *Environmental Modeling*. Wiley Interscience, 1996.
- 30 SPIEGELMAN, M. *Myths and Methods in Modeling*. Columbia: Columbia University, 2000. 202p.
- 31 SURATANAKAVIKUL, V.; MARQUIS, A. J. A Comparative Study of Flux-Limiters in Unsteady and Steady Flows. In: *13th National Mechanical Engineering Conference*. 1999, Cholburi, Thailand. Anais... Cholburi, Thailand. 1999.
- 32 TUCCI, C. E. M. *Modelos Hidrológicos*. Porto Alegre: Ed. da Universidade/UFRGS/ABRH, 1998. 669p.
- 33 WANG, H.; EWING, R. E.; QIN, G.; LYONS, S. L.; AL LAWATIA, M.; MAN, S. A Family of Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Methods for Multi-dimensional Advection-Reaction Equations. *Journal of Computational Physics*. v.152, n.1, p. 120-163, 1999.
- 34 YANG, Y.; WILSON, L. T.; MAKELA, M. E.; MARCHETTI, M. A. Accuracy of numerical methods for solving the advection-diffusion equation as applied to spore and insect dispersal. *Ecological Modelling*. v.109, n.1, p. 1-24, 1998.
- 35 YOUNG, D. L.; WANG, Y. F.; EL-DHO, T. I. Solution of the advection-diffusion equation using the Eulerian-Lagrangian boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*. v.24, n.6, p. 449-457, 2000.