

DESENVOLVIMENTO DE SOLUÇÃO PARA PROBLEMA UNIDIMENSIONAL DE ADVECÇÃO E DIFUSÃO BI-FLUXO

Jader Lugon Junior¹

João Flávio Vieira Vasconcelos²

Luiz Bevilacqua³

Antônio José da Silva Neto⁴

Resumo

Neste trabalho é apresentada uma solução para um problema de advecção e difusão bi-fluxo em domínio espacial unidimensional, usando o Método de Diferenças Finitas, programado no software R e distribuído na plataforma CRAN (AdvDif4). Além do termo de transporte advectivo e da difusão primária (correspondente ao fluxo de Fick), a equação de difusão bi-fluxo inclui um termo correspondente à retenção ou fluxo secundário. O problema foi solucionado para diferentes condições iniciais e de contorno, e os resultados são compatíveis com os apresentados em trabalhos anteriores.

Palavras-chave: AdvDif4, Retenção, Anômala, Equações diferenciais, Quarta ordem.

Abstract

In the present work it is presented a solution for a unidimensional spatial domain bi-flux diffusion and advection problem using the Finite Differences Method, programmed in the software R and distributed by CRAN (AdvDif4). In addition to the term of advective transport and primary diffusion (corresponding to the Fickian flux), the bi-flux diffusion equation includes a term corresponding to the retention or secondary flow. The problem was solved for different initial and boundary conditions, and the results are compatible with those presented in previous studies.

Keywords: AdvDif4, Retention, Anomalous, Fourth order differential equations.

¹Instituto Federal Fluminense IFFluminense, jljunior@iff.edu.br

²Instituto Politécnico IPRJ/UERJ, jflavio@iprj.uerj.br

³Universidade Federal do Rio de Janeiro COPPE/UFRJ, bevilacqua@coc.ufrj.br

⁴Instituto Politécnico IPRJ/UERJ, ajsneto@iprj.uerj.br

Introdução

Em pesquisa recente foi desenvolvida uma formulação analítica para descrever o comportamento do processo difusivo com retenção parcial do fluxo (BEVILACQUA et al. (2011a, 2011b, 2013), pois apesar da difusão de um soluto em um meio contínuo ser usualmente descrita pela lei de Fick, existem aplicações nas quais outras formulações são necessárias (VASCONCELLOS et al., 2016). Cabe citar como exemplo de aplicação o transporte de cascalho no leito de rios foi abordado por Ganti et al. (2010) como um processo de difusão anômala.

A equação de difusão anômala foi solucionada por Silva et al. (2014) com o uso da rotina NDSolve disponível no software Mathematica. Posteriormente foi realizado um estudo de sensibilidade para estimar os parâmetros relacionados à formulação de difusão anômala. Foram desenvolvidas soluções para o problema inverso de difusão anômala utilizando métodos de inferência Bayesiana e de máxima verossimelhança (KNUPP et al., 2016; SILVA et al., 2013, 2014).

Vasconcellos et al. (2016) desenvolveram uma solução para o problema estacionário utilizando o Método de Volumes Finitos para resolver a equação de difusão anômala, tendo dedicado particular atenção às dificuldades numéricas relacionadas às condições de contorno (Dirichlet, Neumann e Robin).

Objetivo

Foram observados casos em que a solução do problema de difusão bi-fluxo resulta em valores negativos para a função modelada em determinadas posições do domínio espacial e onde apenas valores positivos teriam significado físico. O presente trabalho aprofunda o entendimento de tais ocorrências variando os coeficientes associados com a difusão.

Metodologia

Formulação da Equação de Difusão Bi-fluxo

No presente trabalho, visando possibilitar o uso em tais aplicações de transporte, foi desenvolvida uma solução para os problemas de interesse

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

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

Com objetivo de evitar os valores negativos na solução da Equação (1), foi desenvolvida a possibilidade de variar o parâmetro β em função de ϕ . Tal formulação afetará tanto a difusão primária quanto a secundária, caracterizadas por K_2 e K_4 respectivamente. Então, visando permitir a variação de β , foi necessário rever a Equação (1) e a partir de Bevilacqua et al. (2013),

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v \frac{\partial \phi}{\partial x} + K_2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] - K_4 \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta(1 - \beta) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right] \quad (2)$$

utilizando a regra da cadeia,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v \frac{\partial \phi}{\partial x} + K_2 \left[\frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] - K_4 \left[(1 - 2\beta) \frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + \beta(1 - \beta) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right] \quad (3)$$

Na próxima seção será descrito como o parâmetro β e sua derivada $\frac{\partial \beta}{\partial x}$ serão tratados numericamente.

A função $\beta(\phi)$

Considerando o interesse em solucionar situações nas quais $\beta(\phi = 0) = 1$ (eliminando o efeito da difusão secundária) e, portanto, eliminando o fluxo secundário de retenção, foi implementada a formulação de β representando a função sigmóide dependente de $\phi(x, t)$

$$\beta(\phi) = \beta_{max} - \frac{\beta_{max} - \beta_{min}}{1 + e^{-\gamma(\phi - \phi_0)}} \quad (4)$$

onde β_{max} , β_{min} , γ e ϕ_0 são parâmetros que definem a função sigmóide, e sua derivada analítica é dada por

$$\frac{\partial \beta}{\partial \phi} = -\gamma(\beta_{max} - \beta_{min}) \frac{-\gamma(\phi - \phi_0)}{[1 + e^{-\gamma(\phi - \phi_0)}]^2} \quad (5)$$

como apresentado na Fig. 1 abaixo.

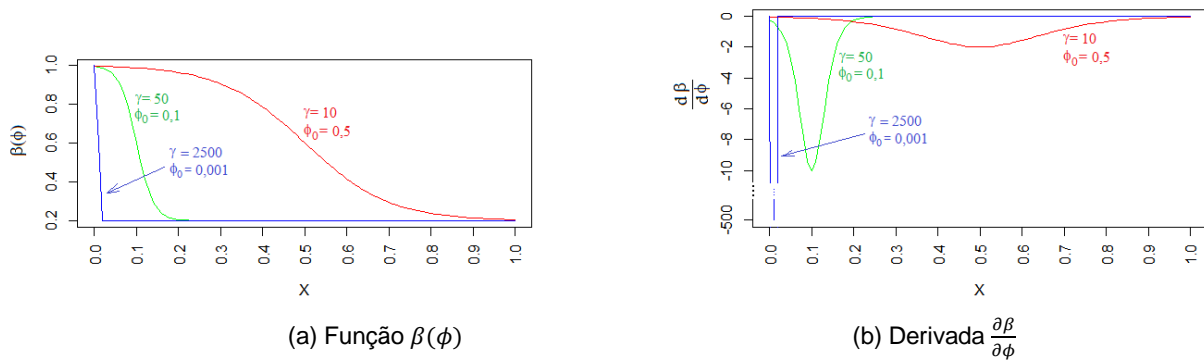


Figura 1: Gráfico da função sigmóide e sua derivada para diferentes valores dos parâmetros ϕ_0 e γ ($\beta_{max} = 1,0$ e $\beta_{min} = 0,2$).

A solução do problema de difusão bi-fluxo foi obtida usando o Método de Diferenças Finitas (MDF) programado no software R . Adotou-se uma solução atrasada no tempo para β e $\frac{\partial \beta}{\partial x}$, isto é, considerando $\beta^{t+\Delta t} \cong \beta^t$ e $\frac{\partial \beta^{t+\Delta t}}{\partial x} \cong \frac{\partial \beta^t}{\partial x}$. A partir de

$$\frac{\partial \beta}{\partial x} = \frac{\partial \beta}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (6)$$

Solução Numérica para o Problema de Difusão Bi-fluxo com o Método de Diferenças Finitas

Foi utilizada para solução numérica o Método de Diferenças Finitas da equação diferencial (3), a partir de discretizações no tempo e espaço, e aproximações para cada termo de acordo com expansões em série de Taylor.

A Figura 2 apresenta o esquema adotado para representar a discretização do domínio espacial.

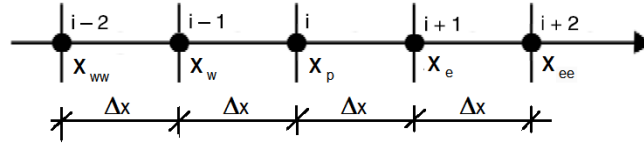


Figura 2: Esquema para representação da discretização espacial.

Nós no interior do domínio

A seguir são apresentadas as equações de diferenças (6-9) adotadas para a solução do problema de advecção e difusão bi-fluxo correspondente à Equação (3), Vasconcellos et al. (2016),

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=0} \cong \frac{\phi^{t+\Delta t} - \phi^t}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (7)$$

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

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x_p} \cong \frac{-\phi_{ww}^\theta + 16\phi_w^\theta + 30\phi_p^\theta + 16\phi_e^\theta - \phi_{ee}^\theta}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \quad (9)$$

$$\left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right|_{x_p} \cong \frac{\phi_{ee}^\theta - \phi_e^\theta + \phi_w^\theta - \phi_{ww}^\theta}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^2) \quad (10)$$

$$\left. \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \right|_{x_p} \cong \frac{\phi_{ww}^\theta - 4\phi_w^\theta + 6\phi_p^\theta - 4\phi_e^\theta - \phi_{ee}^\theta}{\Delta x^4} + O(\Delta x^2) \quad (11)$$

Neste trabalho foi adotado um esquema implícito para resolver as equações de diferenças finitas, ou seja, $\theta = t + \Delta t$ nas Equações (8-11). Assim, a cada passo de tempo Δt os valores da função ϕ foram calculados através da resolução de um sistema de equações algébricas lineares $Ax = b$, no qual a matriz A é pentadiagonal.

Nós na fronteira do domínio

A solução do problema depende do conhecimento de duas condições de contorno em cada extremo do domínio espacial. Sendo assim, com base em Silva et al. (2013) e Vasconcellos et al. (2016) foram implementadas combinações das seguintes condições de contorno: (i) valor da função conhecido (Dirichlet); (ii) primeira derivada conhecida (Neumann); (iii) segunda derivada conhecida; e (iv) combinação conhecida do valor da função e da derivada primeira (Robin).

$$w_{10}\phi|_{x=0} + w_{11}\frac{d\phi}{dx}\bigg|_{x=0} + w_{12}\frac{d^2\phi}{dx^2}\bigg|_{x=0} = f_{w1} \quad (12)$$

$$w_{20}\phi|_{x=0} + w_{21}\frac{d\phi}{dx}\bigg|_{x=0} + w_{22}\frac{d^2\phi}{dx^2}\bigg|_{x=0} = f_{w2} \quad (13)$$

$$e_{10}\phi|_{x=L} + e_{11}\frac{d\phi}{dx}\bigg|_{x=L} + e_{12}\frac{d^2\phi}{dx^2}\bigg|_{x=L} = f_{e1} \quad (14)$$

$$e_{20}\phi|_{x=L} + e_{21}\frac{d\phi}{dx}\bigg|_{x=L} + e_{22}\frac{d^2\phi}{dx^2}\bigg|_{x=L} = f_{e2} \quad (15)$$

onde L é o comprimento do domínio espacial. Assim, determinando adequadamente as variáveis w_{10} , w_{11} , w_{12} , w_{20} , w_{21} , w_{22} , bem como as funções f_{w1} e f_{w2} nas Eqs. (12 e 13), é possível representar diferentes condições na fronteira esquerda. Para representar a fronteira direita são definidos os valores e_{10} , e_{11} , e_{12} , e_{20} , e_{21} , e_{22} , bem como as funções f_{e1} e f_{e2} nas Eqs. (14 e 15).

Resultados e Discussão

A solução do problema de advecção e difusão bi-fluxo foi obtida com o Método de Diferenças Finitas utilizando o software R (R CORE TEAM, 2017) e o software está disponível para download na plataforma CRAN sob o nome “AdvDif4” (Lugon Jr. et al., 2018).

Descrição dos estudos de caso

Com objetivo de avaliar diferentes estudos de caso, foram considerados dois problemas com as condições iniciais e de contorno (c.c.) descritas na Tabela 1, que correspondem a situações idênticas àquelas tratadas por Silva et al. (2014).

Tabela 1: Problemas estudados

Condição	Problema A	Problema B
Condição Inicial	$\phi(x, t) _{t=0} = \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$	$\phi(x, t) _{t=0} = \left[\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\right]^{100}$
$x = 0$, C.C. 1	$\phi(x, t) _{x=0} = 0$	$\phi(x, t) _{x=0} = 0$
$x = 0$, C.C. 2	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg _{x=0} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg _{x=0} = 0$
$x = L$, C.C. 1	$\phi(x, t) _{x=L} = 0$	$\phi(x, t) _{x=L} = 0$
$x = L$, C.C. 2	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg _{x=L} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg _{x=L} = 0$
Tempo final t_f	100	1,0

C.C. Condição de Contorno

A função sigmóide foi para $\beta(\phi)$ foi definida com $\beta_{max} = 1,0$, $\beta_{min} = 0,2$, $\gamma = 2500$ e $\phi_0 = 0,001$. Em todas as simulações realizadas, o tempo de observação foi discretizado em 1000 intervalos e o domínio espacial em 100 intervalos.

O tempo computacional em um notebook com processador Intel (R) Core i5-5200U CPU @ 2.20GHz foi de aproximadamente 0,6s para cada simulação realizada.

As soluções dos Problemas A e B apresentados na Tabela 1 foram avaliadas com sete diferentes conjuntos de parâmetros, sendo que para todos os casos $L = 1,00$ e os outros parâmetros estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros usados para os estudos de caso

Problema	A			B			
	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6	Caso 7
β	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	$\beta(\phi)$ Eq. (4)
K_2	1,0E-3	1,0E-3	1,0E-3	1,0E-3	1,0E-3	1,0E-3	1,0E-3
K_4	1,0E-5	0,0	1,0E-5	1,0E-5	0,0	1,0E-5	1,0E-5
v	0,00	0,01	0,01	0,0	0,20	0,20	0,20

A Figura 3 apresenta os resultados obtidos nos casos 1 e 4, ou seja, considerando uma velocidade igual a zero, $v = 0$, e com valores típicos já utilizados na literatura para os outros parâmetros (SILVA et al., 2013, Vasconcellos et al., 2016) e, portanto, com comportamento conhecido para fins de validação.

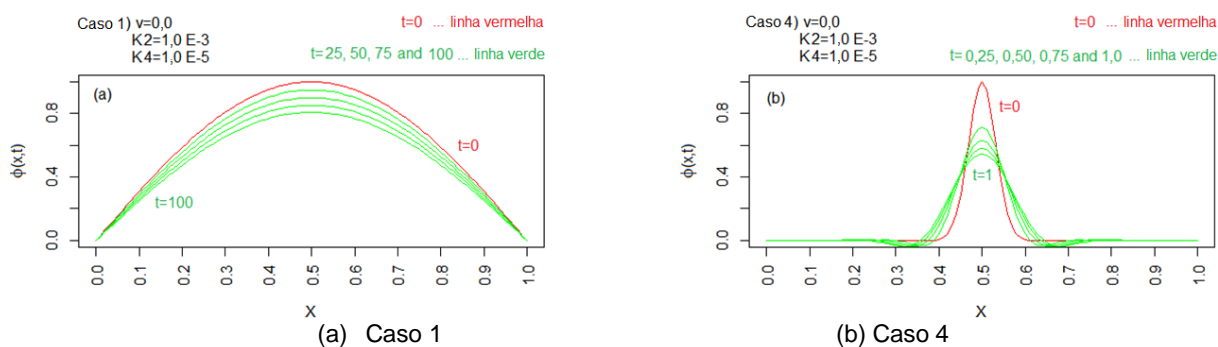


Figura 3: Solução para os casos 1 e 4 (sem advecção).

Observa-se a perfeita simetria nas soluções obtidas para as duas condições iniciais, um resultado que também é consequência das condições de contorno adotadas para os dois problemas. É importante notar os valores negativos para $\phi(x, t)$ que aparecem como resultado do fluxo secundário com $\beta = 0,2$, isto é constante.

A Figura 4 mostra os resultados obtidos para os casos 2 e 5, ou seja, eliminando a difusão secundária fazendo $K_4 = 0,0$, e com advecção com velocidade conhecida $v = 0,01$ e $0,2$, respectivamente.

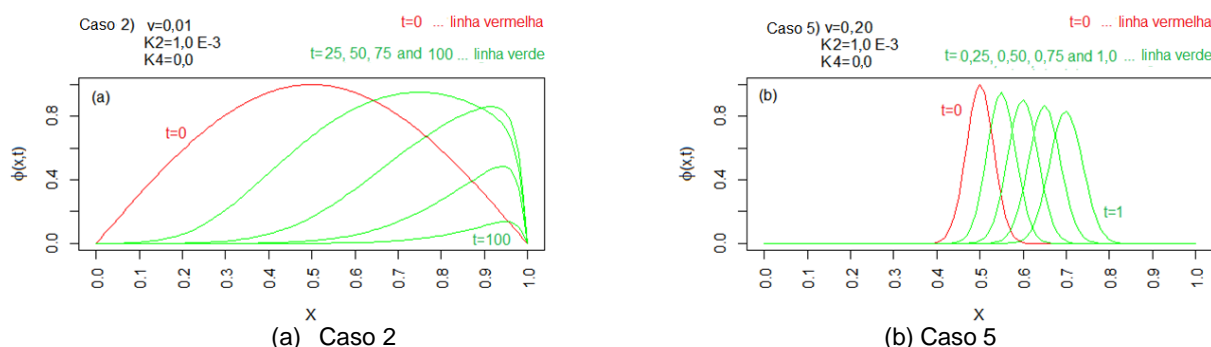


Figura 4: Solução para os casos 2 e 5 (com $\beta = \text{const}$, com advecção e difusão primária).

No Problema A (caso 2), a condição de contorno estabelecida para a segunda derivada é igual a zero, mas a primeira derivada é desconhecida, resultando em um decréscimo da inclinação ao longo do tempo do lado direito do gráfico. No Problema B (caso 5), a condição de contorno define que a primeira derivada é nula, ajudando a manter a simetria da onda ao longo do trajeto no segundo gráfico.

A Figura 5 mostra os resultados obtidos para os casos 3 e 6, considerando a presença de todos os três fenômenos modelados (advecção, difusão primária e secundária).

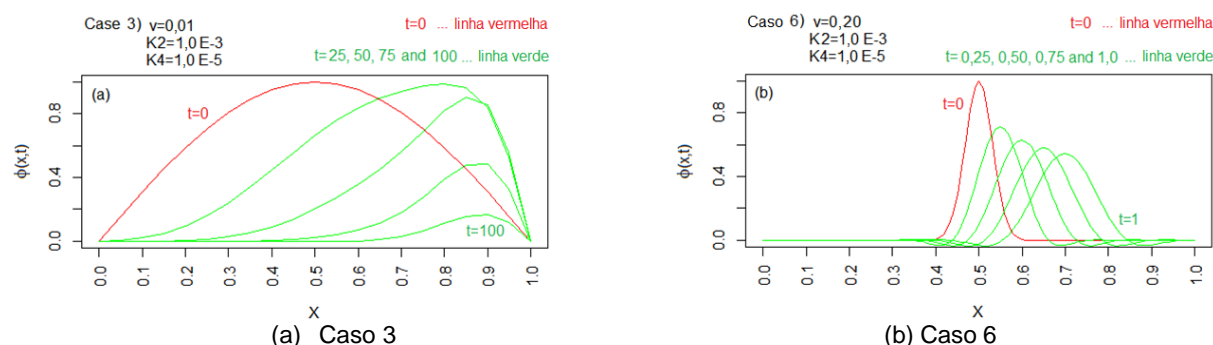


Figura 5: Solução para os casos 3 e 6 (com $\beta = \text{const}$, advecção, difusão primária e secundária).

É possível observar o efeito da difusão secundária quando se compara as Figs. 5 e 4. Destaca-se o aumento da retenção, no Problema A, que pode ser percebido através da diferença na inclinação das curvas do lado direito dos gráficos. No Problema B, é possível observar o efeito de retenção proporcionado pela difusão secundária ao perceber o aumento na largura da onda advectada. Novamente, pode-se observar valores negativos de $\phi(x,t)$ que ocorrem a partir do fluxo secundário quando $\beta = 0,2$.

A Figura 6 apresenta os resultados no caso 7, isto é, adotando a função sigmóide para representar $\beta(\phi)$ com todos os fenômenos, advecção, difusão primária e secundária.

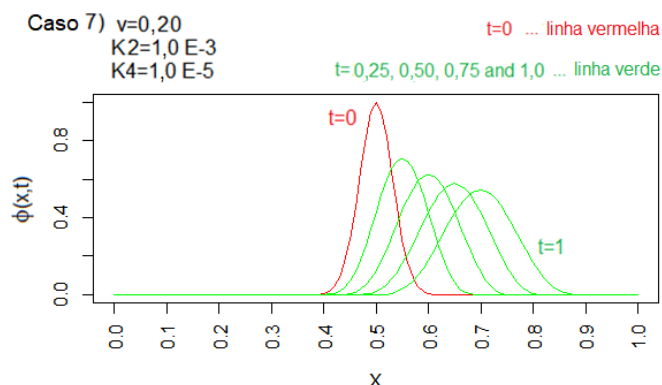


Figura 6: Solução para o caso 7 (com $\beta(\phi)$, advecção, difusão primária e secundária).

O efeito de retenção pode observado quando se compara as Figs. 6 e 3(b). É importante notar a diferença entre as Figs. 4(b) e 6, ou seja, na última a solução é sempre positiva, mas o modelo mantém o efeito de retenção proporcionado pelo fluxo secundário.

Conclusões

As soluções numéricas obtidas para os estudos de caso considerados permitiram avaliar separadamente o efeito advectivo, da difusão primária e da secundária em diferentes condições iniciais e de contorno. Além disto, a implementação da variação de $\beta(\phi)$ com a função sigmóide proporcionou o efeito de retenção pela difusão secundária e evitou o aparecimento de valores negativos na solução.

Com a solução desenvolvida, será possível adotar o novo modelo de advecção e difusão anômala e estimar os coeficientes com técnicas estocásticas disponibilizadas na plataforma CRAN, tais como DEoptim (Ardia et al., 2010), SAGen (XIANG et al., 2013), utilizando dados experimentais para aplicações com efeitos de retenção.

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

Agradecimentos

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

Referências

- Ganti, V. Meerschaert, M.M. Foufoula-Georgiou, E. Viparelli, E. Parker, G. Normal and anomalous diffusion of gravel tracer particles in rivers, *J. Geophys. Res.*, 115, F00A12, doi:10.1029/2008JF001222. 2010.
- Vasconcellos, J.F.V. Marinho, G.M. Zanni, J.H. Análise numérica da equação da difusão anômala com fluxo bimodal. *Rev. int. métodos núm. cálc. diset-no ing.* <http://dx.doi.org/10.2016/j.rimni.2016.05001>. 2016.
- Bevilacqua, L. Galeão, A.C.N.R. Costa, F.P. A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion process. *An Acad Bras Cienc.* 83 (2011) 1443-1464. 2011a.
- Bevilacqua, L. Galeão, A.C.N.R. Costa, F.P. On the significance of higher order differential terms in diffusion process. *J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng.* 33 (2011) 166-175. 2011b.
- Bevilacqua, L. Galeão, A.C.N.R. Simas, J.G. Doce, A.P.R. A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution. *J. Brazilian Soc. Mech Sci Eng.* (2013) 1-10. 2013.
- Lugon Jr., J., Rodrigues, P.P.G.W., Bevilacqua, L., Knupp, D.C., Vasconcellos, J.F., Silva Neto, A.J. 2018. AdvDif4: Solving 1D Advection Bi-Flux Diffusion Equation. <https://CRAN.R-project.org/package=AdvDif4>.
- Silva, L. G., Knupp, D. C., Bevilacqua, L., Galeão, A. C. N. R. e Silva Neto, A. J., Inverse Problem in Anomalous Diffusion with Uncertainty Propagation, *Computer Assisted Methods in Mechanics and Science*, Vol. 21, pp. 245-255, 2014.
- Knupp, D.C. Silva, L.G. Bevilacqua, L. Galeão, A.C.N.R. Silva Neto, A.J. Inverse Analysis of a New Anomalous Diffusion Model Employing Maximum Likelihood and Bayesian Estimation. In: Silva Neto, A.J., Santiago e O.L., Silva, G.N., *Mathematical Modeling and Computational Intelligence in Engineering Applications*, cap. 7 p. 89-104. Springer International Publishing, ISBN 978-3-319-38868-7, DOI: 10.1007/978-3-319-38869-4. 2016.
- Silva, L.G. Knupp, D.C. Bevilacqua, L. Galeão, A.C.N.R. Silva Neto, A.J. Formulação e solução de um Problema Inverso de Difusão Anômala com Técnicas Estocásticas. *Ciência e Natura*, (2014) p. 82-96. <http://dx.doi.org/10.5902/2179460X13184>. 2014.
- Silva. L.G. Knupp, D.C. Bevilacqua, L. Galeão, A.C.N.R. Simas, Galeão, J.G. Vasconcellos, J.F. Silva Neto, A.J. Investigation of a new model for anomalous diffusion phenomena by means of an inverse analysis, 4th Inverse Problems, Design and Optimization Symposium, Albi, France, (2013). 2013.
- R Core Team (2017). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>. 2017.
- Xiang, Y., Gubian, S., Suomela, B., Hoeng, J. Generalized Simulated Annealing for Global Optimization: The GenSA Package. *The R Journal* Volume 5/1, June 2013. URL <https://journal.r-project.org/archive/2013/RJ-2013-002/index.html>.
- Ardia, D., Boudt, K., Carl, P., Mullen, K.M., Peterson, B.G. (2010). Differential Evolution with 'DEoptim': An Application to Non-Convex Portfolio Optimization. *The R Journal*, 3(1), 27-34. URL https://journal.r-project.org/archive/2011-1/RJournal_2011-1_Ardia-et-al.pdf.

Anexo

O software para solução do problema de advecção e difusão bi-fluxo utilizando o Método de Diferenças Finitas está disponível para download na plataforma CRAN sob o

nome “AdvDif4” na versão 0.0.18. Abaixo está um dos scripts utilizados para gerar os gráficos do trabalho.

```
#
# funções para determinar o parâmetro beta e sua derivada
# Função Beta
fbeta<-function(p)
{f<-0.2
return(f)}
# Função para derivada de Beta
dbetadp<-function(p)
{f<-0
return(f)}
# Coeficientes de difusão
k2<-1E-3
k4<-1E-5
# Condição Inicial
f1<-function(x)
{ f<-sin(pi*x)
return(f)}
# velocity
v<-0.0
# Definição da discretização espacial e temporal
l<-1
m<-100
tf<-100
n<-1000
fn<-f1
# Condições na fronteira esquerda
w10<-1
w11<-0
w12<-0
w20<-0
w21<-0
w22<-1
fw1<-function(t)
{ f<-0
return(f)}
fw2<-function(t)
{ f<-0
return(f)}
# Condições na fronteira direita
e10<-1
e11<-0
e12<-0
e20<-0
e21<-0
e22<-1
fel<-function(t)
{ f<-0
return(f)}
fe2<-function(t)
{ f<-0
return(f)}
parm=c(k2,k4,v,l,m,tf,n,w10,w11,w12,w20,w21,w22,e10,e11,e12,e20,e21,e22)
func=c(fbeta=fbeta,dbetadp=dbetadp,fn=fn,fw1=fw1,fw2=fw2,fel=fel,fe2=fe2)
#
# chama função para resolver a equação de transporte
ad<-AdvDif4(parm,func)
#
# apresenta gráfico com os resultados
eixo<-seq(0,1,by=0.01)
plot(eixo,ad[1,1:101],type='l',col="red",xaxt="n",xlab="X", ylab="p(x,t)")
axis(1,seq(0,1,0.1),las=2)
lines(eixo,ad[250,1:101],type='l',col="green")
lines(eixo,ad[500,1:101],type='l',col="green")
lines(eixo,ad[750,1:101],type='l',col="green")
lines(eixo,ad[1000,1:101],type='l',col="green")
```