



Algoritmos Talbot e Talbot-Racional para inversão da Transformada de Laplace aplicados a solução de um problema de difusão de mercúrio no ambiente aquático

Talbot and Rational-Talbot algorithms for inverting the Laplace transformation Applied to the solution of a problem of Mercury diffusion in the aquatic environment

E. K. Freitas^{1*}; J. A. Ferreira¹; B. D. A. Rodriguez¹; J. F. Prolo Filho²

¹Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Universidade Federal do Rio Grande, 96203-900, Rio Grande-RS, Brasil

²Programa de Pós-Graduação em Engenharia Oceânica, Universidade Federal do Rio Grande, 96203-900, Rio Grande-RS, Brasil

*elisandrakonflanz@gmail.com

(Recebido em 06 de março de 2023; aceito em 16 de agosto de 2023)

Nesse artigo, os métodos Talbot e Talbot-Racional são apresentados como alternativas numéricas para a inversão da Transformada de Laplace, especialmente para problemas em que a execução de forma analítica dos processos se torna muito difícil. Testes foram realizados no sentido de investigar o potencial de resolução dessas técnicas ao serem aplicadas em um problema de difusão de mercúrio no ambiente aquático. Com base nos resultados obtidos, concluiu-se que o algoritmo Talbot foi o mais eficiente para a inversão numérica da solução no referido problema. Já o método Talbot-Racional, mesmo usando uma quantidade maior de termos no somatório, não demonstrou desempenho equivalente no processo. Entretanto, destaca-se que tal aproximação melhora com o aumento do valor de N dentro de certos intervalos. Palavras-chave: transformada de laplace, método talbot, método talbot-racional.

In this article, the Talbot and Talbot-Rational methods are presented as numerical alternatives for the inversion of the Laplace transform, especially for problems in which the analytic execution of processes becomes very difficult. Tests are carried out in order to examine the resolution potential of these resources when applied to a problem of mercury diffusion in the aquatic environment. Based on the results obtained, it was concluded that Talbot's algorithm is efficient for the inversion of the application problem. Talbot-Rational, on the other hand, requires a greater amount of terms in the summation to efficiently carry out the inversion process. A better performance of the technique is observed for higher values of N .

Keywords: laplace transform, talbot method, rational-talbot method.

1. INTRODUÇÃO

A poluição provocada por metais pesados é um problema mundial com profundos impactos na saúde humana e no meio ambiente. Os danos ocasionados pela intoxicação por mercúrio, por exemplo, alertam para a necessidade de estudos permanentes sobre essa temática. Ao ser lançado na natureza, esse poluente pode causar altos níveis de contaminação, devido à bioacumulação através da cadeia alimentar. Neste cenário, busca-se aqui determinar, aproximadamente, a acumulação de mercúrio no meio aquático, a partir de um modelo matemático baseado na equação de difusão, que fornece a concentração do contaminante [1], cuja solução analítica pode ser obtida através da Transformada de Laplace. No entanto, a maior dificuldade na aplicação dessa técnica, está relacionada ao cálculo da transformada inversa, visto que, dependendo da forma das expressões resultantes, pode ser de difícil execução analítica [2]. Embora existam resultados tabelados para as mais diversas funções transformadas e suas inversas [3], existem casos em que a inversão analítica é inviável. Assim, o emprego de métodos de aproximação numérica torna-se de grande utilidade. Nesta perspectiva, nas últimas décadas, tem-se observado um aumento significativo no desenvolvimento e aplicação de métodos para a inversão numérica da Transformada de Laplace. Segundo Abate e Valkó (2004) [4], tais técnicas podem ter embasamento na expansão em Séries de Fourier, em funções de Laguerre, na combinação de funções de Gaver e na deformação do contorno de Bromwich.

Estudos recentes (Pillati et al. (2019) [2]; Ferreira et al. (2020) [5]; Freitas et al. (2021) [6]; Calixto et al. (2022) [7]) têm sido publicados no sentido de avaliar os métodos, a influência dos parâmetros numéricos e do emprego de contornos mais simples, confirmando que nenhuma das abordagens é superior em todos os critérios, para todas as classes de funções [2].

Dentro deste contexto, propõe-se neste trabalho a avaliação de dois métodos para a inversão numérica da Transformada de Laplace: o Talbot desenvolvido em 1979 [8], e a versão modificada deste, proposto por Weideman e Trefethen em 2006 [9], que aqui será chamado de Talbot-Racional por facilitar a nomenclatura e por basear-se em aproximações racionais. A justificativa da escolha está no interesse de investigar o desempenho numérico de técnicas baseadas na deformação do contorno de integração de Bromwich.

Apesar do método de Talbot ser conhecido como uma técnica robusta de inversão e de fácil implementação, com estabilidade numérica na resolução de diferentes problemas, incluindo a dispersão de poluentes [5], não foram encontradas referências na literatura para versões modificadas dele (como o Talbot-Racional) dedicadas à inversão numérica de soluções de problemas de dispersão de contaminantes. Contudo, Freitas et al. (2021) [6] apresentam uma análise comparativa desse método para a transformada inversa numérica de Laplace ao ser aplicado a um conjunto de funções elementares.

A fim de avaliar o desempenho dos métodos citados, aplicam-se os algoritmos à inversão numérica da solução transformada de Laplace de um problema de difusão de mercúrio no ambiente aquático.

2. MATERIAL E MÉTODOS

2.1 Método Talbot

Segundo Cohen (2007) [10], o método Talbot, proposto no ano de 1979, foi pioneiro na abordagem de métodos para a inversão numérica da Transformada de Laplace a partir da deformação do contorno de Bromwich. Sua técnica tem como princípio fundamental a avaliação da integral complexa de inversão, dada por

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} F(s) e^{st} ds = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\beta} F(s) e^{st} ds, \quad (1)$$

onde $f(t)$ é uma função definida para $t \geq 0$, $F(s)$ é a Transformada de Laplace de $f(t)$, o contorno β é uma linha vertical definida por s , que é o parâmetro complexo da Transformada de Laplace, $s = \alpha + i$, em $(\alpha - i\infty, \alpha + i\infty)$, α possui um valor fixo para que todas as singularidades da transformação estejam à esquerda da reta $s = \alpha$ paralela ao eixo imaginário. Vale ressaltar que tais nomenclaturas serão adotadas ao longo de todo este trabalho.

A convergência da integral dada pela Eq. (1) poderia ser maior se fosse atribuído aos valores de s uma componente real suficientemente grande negativa. Conforme Abate e Valkó (2004) [4], o método Talbot considera a chance de deformar o contorno β em algum caminho aberto em torno do eixo real negativo, contanto que nenhuma singularidade de $F(s)$ seja atravessada pela deformação de β . Portanto, a intenção de tal mudança é diminuir a magnitude do fator exponencial e^{st} na função integrando.

De modo geral, a linha do contorno β em $(\alpha - i\infty, \alpha + i\infty)$ é substituída por uma equivalente, β' , com início e fim no semiplano esquerdo do plano complexo tal que $\Re\{s\} \rightarrow -\infty$. Segundo Murli e Rizzard (1990) [11], essa substituição é possível se a função transformada $F(s)$ satisfaz as seguintes condições:

- (i) Para todas as singularidades de s_i deve-se ter $|\Im\{s_i\}| < \gamma$, onde γ é um número conhecido.
- (ii) $|F(s)|$ tende para zero uniformemente quando $|s| \rightarrow \infty$ em $\Re\{s\} < \gamma$.

No entanto, a dificuldade encontra-se na validação da condição (i) para uma função $F(s)$ em um novo contorno β' . Apesar disso, de acordo com Cohen (2007) [10], essa dificuldade pode ser contornada, tomando-se a função modificada $F(\lambda s + \sigma)$, através de uma escolha adequada dos parâmetros λ e de deslocamento σ , de forma que se $F(s)$ tem singularidade s_0 , $F(\lambda s + \sigma)$ terá uma singularidade s_0^* correspondente, tal que

$$s_0^* = \frac{(s_0 - \sigma)}{\lambda}, \quad (2)$$

e a Eq. (1) pode ser substituída por

$$f(t) = \frac{\lambda e^{\sigma t}}{2\pi i} \int_{\beta'} F(\lambda s + \sigma) e^{\lambda s t} ds, t > 0. \quad (3)$$

A fim de que as singularidades de $F(s)$ não sejam cruzadas pela deformação do contorno de Bromwich, é estabelecido no método Talbot uma função de varredura da região do novo contorno para mapear as singularidades de s_i , na qual

$$s(z) = \frac{z}{1-e^{-z}} + z \frac{v-1}{2}, \quad (4)$$

onde v é um parâmetro positivo arbitrário e $z \in (-2\pi i, 2\pi i)$.

Abate e Valkó (2004) [4] embasaram-se nessa premissa e definiram uma parametrização do contorno do método Talbot expressando a Eq. (4) como

$$s(\theta) = r\theta(\cot(\theta) + i), -\pi < \theta < \pi, \quad (5)$$

onde r é um parâmetro.

Aplicando a Eq. (5), a integral complexa de inversão, Eq. (1), pode ser escrita em termos de θ ,

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ts(\theta)} F(s(\theta)) s'(\theta) d\theta, \quad (6)$$

com $s'(\theta)$ expressando a derivada da Eq. (5) em relação à θ , tal que

$$s'(\theta) = ir(1 + i\sigma(\theta)), \sigma(\theta) = \theta + (\theta \cot(\theta) - 1)\cot(\theta). \quad (7)$$

Ainda por Abate e Valkó (2004) [4], a parametrização do contorno proposta por Talbot permite escrever a Eq. (1) como

$$f(t) = \frac{r}{\pi} \int_0^{\pi} \Re[e^{ts(\theta)} F(s(\theta))(1 + i\sigma(\theta))] d\theta. \quad (8)$$

No processo de integração da Eq. (8), uma aproximação para a integral é feita a partir da regra trapezoidal com passo de tamanho π/N e $\theta_k = k\pi/N$, resultando na fórmula geral para a obtenção da transformação inversa dada por

$$f(t, M) \approx \frac{r}{N} \left\{ \frac{1}{2} F(r) e^{rt} + \sum_{k=1}^{N-1} \Re[e^{ts(\theta_k)} F(s(\theta_k))(1 + i\sigma(\theta_k))] \right\}. \quad (9)$$

Por fim, é possível observar que a aproximação obtida, Eq. (9), depende apenas da avaliação da variação do parâmetro r . Dessa forma, Abate e Valkó (2004) [4] estabeleceram na prática que $r = 2N/5t$.

2.2 Método Talbot-Racional

A partir da deformação proposta por Talbot (1979) [8], novas abordagens foram formuladas para diferentes deformações do contorno. Entre elas, a aqui referida como Talbot-Racional. De acordo com Weideman (2006) [12], o método Talbot-Racional para a inversão numérica da Transformada de Laplace consiste em resolver numericamente a integral indicada na Eq. (1). No processo, faz-se a deformação do contorno de Bromwich e, ao invés do contorno do Talbot clássico, usa-se uma versão truncada, onde parte-se do semi-plano esquerdo e segue ao infinito, fazendo com que a convergência seja alcançada mais rapidamente [13]. A deformação pode ser justificada pelo teorema de Cauchy [14], desde que o contorno permaneça no domínio de analiticidade de $F(s)$. Supõe-se que tal contorno possa ser parametrizado por

$$C: s = s(\theta), -\pi \leq \theta \leq \pi, \quad (10)$$

onde,

$$s(\theta) \approx \frac{N}{t} \zeta(\theta), \zeta(\theta) = \sigma + \mu \left(1 + \frac{2\theta^2}{\theta^2 - \pi^2} + v i \theta \right) \quad (11)$$

e

$$s'(\theta) = \mu \left(\frac{-4\pi^2\theta}{(\theta^2 - \pi^2)^2} + v i \right). \quad (12)$$

Assim a integral de Bromwich, representada pela Eq. (1), pode ser expressa como

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{st} F(s) ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} e^{s(\theta)t} F(s(\theta)) s'(\theta) d\theta, \quad (13)$$

onde C é o contorno proposto na Eq. (10), s e s' estão definidas na Eq. (11) e (12), respectivamente.

Na sequência, aproxima-se a integral Eq. (13) pela regra do ponto médio, com espaçamento uniforme $h = 2\pi/N$, que produz

$$f(t) \approx \frac{1}{N} \mathfrak{S} \left\{ \sum_{k=1}^N e^{s(\theta_k)t} F(s(\theta_k)) s'(\theta_k) \right\}, \theta_k = (2k-1) \frac{\pi}{2N}. \quad (14)$$

No contorno do método Talbot original, o parâmetro α é igual a um ($\alpha = 1$). Weideman (2006) [12] segue essa recomendação e seleciona valores para os parâmetros σ , μ e v , aplicáveis nas Eqs. (11) e (12). Alguns autores, como Dingfelder e Weideman (2014) [13], usam ainda $0 < \alpha < 1$. O presente trabalho segue a abordagem de Weideman (2006) [12] e fixa os valores dos parâmetros, que estão apresentados na Tabela 1.

2.3 Problema de difusão do mercúrio do ambiente aquático

Assume-se que o problema de espalhamento do mercúrio no ambiente aquático pode ser representado matematicamente por

$$u \frac{\partial C(x,y)}{\partial x} = \frac{1}{Pe_y} \frac{\partial^2 C(x,y)}{\partial y^2} + D, \quad (15)$$

onde $C(x, y)$ é a concentração do poluente (mercúrio) na água, u a velocidade média da água (onde o sistema de coordenadas foi escolhido, de forma que a velocidade segue na direção de x), D é o termo fonte constante, $Pe_y = VL/k_y$ é o número Péclet relativo ao coeficiente de difusão na direção y , e $Re = VL/v$ é o número de Reynolds. As condições às quais o modelo está sujeito são:

$$C(0, y) = 1; \quad (16)$$

$$C(x, 0) = 0; \quad (17)$$

$$C\left(x, \frac{1}{10}\right) = 0. \quad (18)$$

O problema foi resolvido pela aplicação da Transformada de Laplace na variável x em cada termo da Eq. (15) e nas condições expressas por Eq. (17) e Eq. (18). Dessa forma, obtém-se a solução transformada dada por,

$$\hat{C}(s, y) = \frac{D}{us^2} \left[\frac{\sinh\left(\sqrt{Pe_y us}\left(\frac{1}{10}-y\right)\right)}{\sinh\left(\sqrt{Pe_y us}\frac{1}{10}\right)} + \frac{\sinh(\sqrt{Pe_y us}y)}{\sinh\left(\sqrt{Pe_y us}\frac{1}{10}\right)} - 1 \right] - \frac{1}{s} \left[\frac{\sinh\left(\sqrt{Pe_y us}\left(\frac{1}{10}-y\right)\right)}{\sinh\left(\sqrt{Pe_y us}\frac{1}{10}\right)} + \frac{\sinh(\sqrt{Pe_y us}y)}{\sinh\left(\sqrt{Pe_y us}\frac{1}{10}\right)} - 1 \right]. \quad (19)$$

Na necessidade de se ter uma referência para comparação e possibilitar a verificação do quão bons são os resultados gerados pelos métodos numéricos aqui propostos, usou-se as Transformadas Inversas de Laplace tabeladas em Spiegel (1965) [3] para escrever a solução analítica do problema, que é dada por:

$$C(x, y) = \frac{Pe_y D}{50\pi^3} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - (-1)^n)}{n^3} \text{sen}(10n\pi y) \left(1 - e^{\left(\frac{-100n^2\pi^2}{Pe_y u}x\right)} \right) \right] + \frac{+2}{\pi} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - (-1)^n)}{n} \text{sen}(10n\pi y) \left(e^{\left(\frac{-100n^2\pi^2}{Pe_y u}x\right)} \right) \right]. \quad (20)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a inversão numérica da solução transformada do problema, Eq. (19), os métodos Talbot e Talbot-Racional foram testados. Os algoritmos foram implementados no software livre Octave v.5.2.0 e os resultados foram apresentados na forma de figuras e tabelas. A Tabela 1 mostra os parâmetros considerados para o estudo do problema aqui discutido.

Tabela 1: Parâmetros utilizados na simulação.

Parâmetro	Valor	Significado
$\Re(adm)$	700.0	Número de Reynolds
$\nu(m^2/s)$	1.003×10^{-6}	Viscosidade cinemática
$L(m)$	10.0	Comprimento característico
$V(m/s)$	$\Re \times \nu/L$	Velocidade do escoamento
$k_x(m^2/s)$	1.670×10^{-9}	Coefficiente de difusão do poluente na direção x
$k_y(m^2/s)$	$300.0 \times k_x$	Coefficiente de difusão do poluente na direção y
$Pe_y(adm)$	$L \times V/k_y$	Número de Peclet na direção y
$u(m/s)$	0.5	Velocidade média do poluente no escoamento
$D(kg/m^3 s)$	0.5	Fonte
$M(adm)$	140	Truncamento do somatório da solução analítica
$N_x = N_y(adm)$	11	Número de pontos avaliados na direção x e y
$N(adm)$	-	Truncamento do somatório das soluções numéricas
$N_o(adm)$	-	Truncamento ótimo do somatório das soluções numéricas
$E_{ }$	-	Erro absoluto médio dos métodos
$\alpha(adm)$	1.0	Coefficiente do método Talbot-Racional
$\nu(adm)$	0.5653	Coefficiente do método Talbot-Racional
$\mu(adm)$	0.6443	Coefficiente do método Talbot-Racional
$\sigma(adm)$	-0.4814	Coefficiente do método Talbot-Racional

A Figura 1 apresenta o perfil do erro absoluto médio (E_{abs}^-), gerado a partir de cada um dos métodos empregados no trabalho. No cálculo desse erro, fez-se uma varredura dos valores de N no intervalo $[1,200]$ e, como critério de escolha, selecionou-se aquele perfil que resultasse no menor erro absoluto médio. A fórmula para o cálculo desse erro pode ser encontrada em Calixto et al. (2022) [7], que aqui foi adaptada para

$$E_{abs}^- = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} E_{abs} (C(x_i, y_j)), \tag{21}$$

onde $E_{abs} C(x_i, y_j)$ denota o erro absoluto estimado entre as inversões numéricas e analíticas para a função $C(x, y)$, em cada ponto de coordenada (x_i, y_j) .

Os gráficos obtidos para a solução do problema de difusão, seja através da inversão analítica ou por utilizar as inversões segundo os métodos numéricos, são visualmente idênticos. Por essa razão, optou-se por apresentar na Figura 2 apenas os gráficos obtidos segundo o método Talbot.

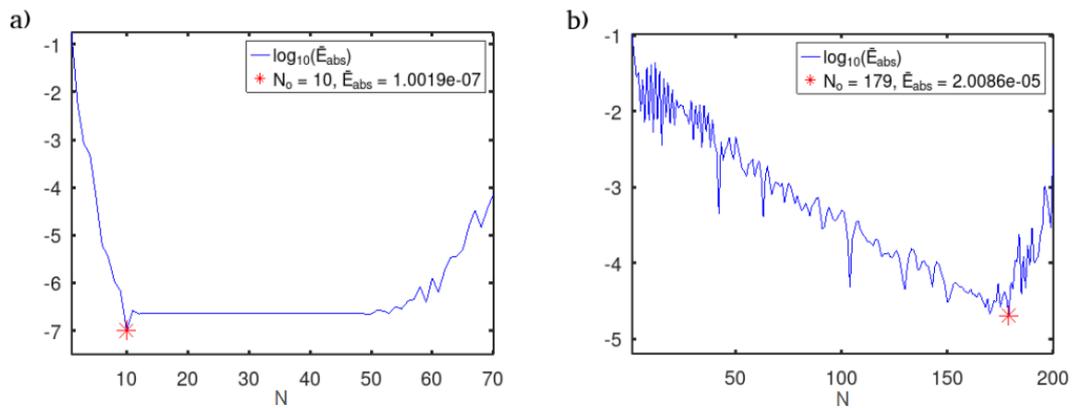


Figura 1: Erro absoluto médio obtido pelos métodos a) Talbot e b) Talbot-Racional.

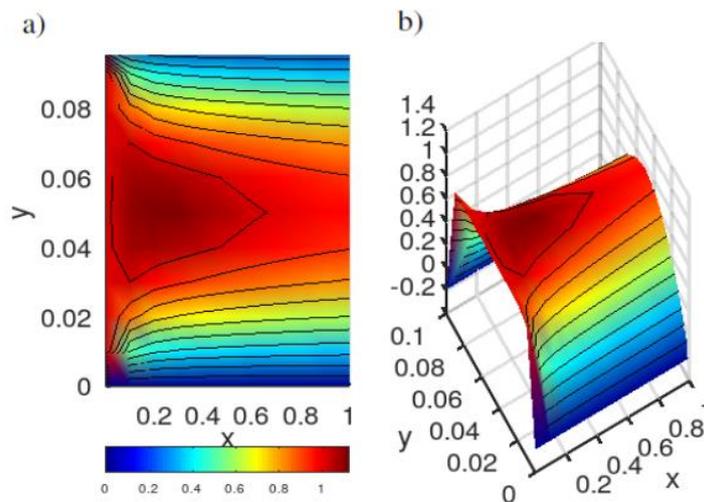


Figura 2: Perfil da solução numérica – Método Talbot: a) projeção no plano xy e b) superfície em perspectiva.

As Tabelas 2, 3 e 4 mostram a concentração de mercúrio, a partir da solução analítica e do emprego dos métodos numéricos de inversão Talbot e Talbot-Racional, para os valores de

$y = 0.01$ (faixa próxima à condição de contorno, onde ocorrem as menores variações no fluxo), $y = 0.03$ (faixa intermediária) e $y = 0.05$ (faixa onde o fluxo assume as maiores variações, a partir da qual também pode-se observar uma simetria dos fluxos para y maiores e menores que 0.05). Nas tabelas, fixou-se estes valores de y e registrou-se os perfis de concentração de mercúrio para os diferentes valores de x , gerados através do melhor N segundo nosso critério (N_0). Isso porque, como a Transformada de Laplace foi aplicada apenas na variável x , então a análise de desempenho dos métodos para o cálculo das respectivas inversões numéricas fica restrita a essa variável. A análise dos resultados foi feita a partir da concordância em termos de dígitos significativos entre os perfis de concentração calculados de forma analítica e os obtidos pelas aproximações numéricas.

Tabela 2: Comparação dos perfis de concentração para $y = 0.01$.

x	Analítica	Talbot - $N_0 = 10$	Talbot-Racional - $N_0 = 179$
10^{-3}	1.000999466944630	1.000999836876273	1.000959940229710
0.1	0.510924111535568	0.510924472165046	0.510924641352333
0.2	0.426691004141683	0.426691358045890	0.426691533958447
0.3	0.397163337133857	0.397163703255957	0.397163866950638
0.4	0.382262829014337	0.382263183326882	0.382263358825418
0.5	0.372300916761567	0.372301276221545	0.372301446603127
0.6	0.364485601829476	0.364485982295641	0.364486134716468
0.7	0.357932869331998	0.357933265577266	0.357933408730623
0.8	0.352307425155795	0.352307822767342	0.352308963719411
0.9	0.347439753468315	0.347440147426323	0.347462695795346
1.0	0.343216872776148	0.343217265699423	0.343067921089809

Tabela 3: Comparação dos perfis de concentração para $y = 0.03$.

x	Analítica	Talbot - $N_0 = 10$	Talbot-Racional - $N_0 = 179$
10^{-3}	1.000999796531610	1.000999841229290	1.001047406233405
0.1	1.021994539890121	1.021994586346748	1.021994743358506
0.2	0.970506303242076	0.970506350017429	0.970506506710460
0.3	0.934222440483722	0.934222477682402	0.934222643952116
0.4	0.906567675400685	0.906567718202000	0.906567878861175
0.5	0.883677711483825	0.883677751901768	0.883677914951599
0.6	0.864114900409288	0.864114944911204	0.864115107481263
0.7	0.847212376273314	0.847212423158567	0.847212591873079
0.8	0.832555917483017	0.832555961512832	0.832557294804024
0.9	0.819832213722166	0.819832253314640	0.819861273956692
1.0	0.808782205559682	0.808782242064833	0.808650836062339

Tabela 4: Comparação dos perfis de concentração para $y = 0.05$.

x	Analítica	Talbot - $N_0 = 10$	Talbot-Racional - $N_0 = 179$
10^{-3}	1.000999835337520	1.000999841229290	1.000482872742132
0.1	1.093742696658297	1.093742707349626	1.093742861320774
0.2	1.123745640872591	1.123745646425595	1.123745805535069
0.3	1.109184271409425	1.109184287358976	1.109184436072000
0.4	1.083644750041613	1.083644766778873	1.083644914695989
0.5	1.057787730143765	1.057787749361612	1.057787894822414
0.6	1.034292710765375	1.034292711584625	1.034292879138667
0.7	1.013593126687509	1.013593114676987	1.013593303109312
0.8	0.995531097435648	0.995531089707796	0.995532460615814
0.9	0.979819033288207	0.979819035324245	0.979848839242887
1.0	0.966164778347552	0.966164786222086	0.966029207378155

No problema de difusão de mercúrio aqui abordado, para o caso de $y = 0.01$, apresentado na Tabela 2, os resultados da concentração obtidos a partir da solução analítica e pela inversão numérica através da técnica de Talbot, mostram uma concordância de seis casas decimais para a maioria dos valores de x . Por outro lado, o método Talbot-Racional, mesmo utilizando valores de N significativamente maiores, forneceu resultados, no máximo, equivalentes aos obtidos por Talbot.

Para o caso de $y = 0.03$, os valores da solução analítica e da inversão numérica através de Talbot, predominantemente, apresentam uma concordância de sete casas decimais, como é possível verificar na Tabela 3. Já usando Talbot-Racional, dependendo do valor de x , a concordância variou entre cinco e seis dígitos decimais.

Conforme a Tabela 4, para o caso de $y = 0.05$, é possível perceber uma concordância de até oito casas decimais entre a solução analítica e a gerada por Talbot. Por sua vez, ainda para um número elevado de termos, Talbot-Racional exibiu concordância, na maioria, em seis dígitos significativos. Note que o método Talbot-Racional, quando aplicado a este problema de difusão (para os valores dos parâmetros aqui empregados), mesmo utilizando elevados valores de N ($N = 179$), não foi capaz de fornecer resultados melhores que os gerados por Talbot com $N = 10$ (Fig. 1). Dessa forma, no contexto do problema apresentado nesse artigo, o método Talbot é o mais indicado por fornecer melhores resultados com um custo computacional mais baixo.

4. CONCLUSÃO

Neste estudo, avaliou-se a precisão de dois métodos de inversão numérica da Transformada de Laplace, Talbot e Talbot-Racional, aplicados na obtenção da solução de um problema de difusão de mercúrio no ambiente aquático. Os resultados obtidos foram avaliados e comparados aos obtidos através da transformada inversa analítica.

As observações feitas durante a análise de desempenho dos métodos permitiram fazer recomendações quanto ao seu uso: o método Talbot apresenta excelente performance, por não exigir um grande número de termos no somatório e propiciar boa concordância em números de dígitos significativos. Entretanto, observou-se através dos testes que usar valores maiores de N , causa uma piora da precisão.

Na abordagem Talbot-Racional, verificou-se que uma das desvantagens está em a técnica requerer um número de termos muito alto para se obter a precisão próxima da desejada. Além disso, assim como para o outro método, o aumento do valor de N acima do N_0 não leva a resultados melhores.

Sugere-se, como proposta de continuidade, expandir o emprego dos métodos de inversão numérica da Transformada de Laplace, Talbot e Talbot-Racional, para o estudo da dispersão de outros tipos de poluentes.

5. AGRADECIMENTOS

À CAPES pelo apoio financeiro na realização deste estudo.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Veigle WJ, Head JH. Derivation of the gaussian plume model. *J Air Pollut Control Assoc.* 1978 Nov;28:1139-40. doi: 10.1080/00022470.1978.10470720
2. Pilatti C, Rodriguez BDA, Prolo Filho JF. Performance analysis of stehfest and power series expansion methods for solution to diffusive and advective transport problems. *Defect Diffus Forum.* 2019 Ago;396:99-108. doi: 10.4028/www.scientific.net/ddf.396.99
3. Spiegel MR. *Schaum's outline of theory and problems of laplace transforms.* Oshawa (CA): McGraw-Hill Book Company; 1965.
4. Abate J, Valkó PP. Multi-precision laplace transform inversion. *Int J Numer Methods Eng.* 2004 Mai;60:979-99. doi: 10.1002/nme.995

5. Ferreira JA, Calixto GRL, Freitas EK, Rodriguez BDA, Prolo Filho JF. Aspecto computacional da inversão numérica da Transformada de Laplace aplicada a um problema de transporte. *Rev Interdisciplinar Pesqu Eng*. 2020 Dez;6(2):139-52.
6. Freitas EK, Calixto GRL, Ferreira JA, Rodriguez BDA, Prolo Filho JF. Análise do parâmetro numérico n na transformada inversa de Laplace segundo o Algoritmo Talbot-Racional. *VETOR*. 2021 Dez;31(2):50-60. Doi: 10.14295/vetor.v31i2.13756
7. Calixto GRL, Freitas EK, Ferreira JA, Rodriguez BDA, Prolo Filho JF. Influência do parâmetro n no algoritmo talbot-fixo para inversão numérica da transformada de Laplace. *VETOR*. 2022 Jul;32(1):42-51. doi: 10.14295/vetor.v32i1.13754
8. Talbot A. The accurate numerical inversion of Laplace Transforms. *IMA J Appl Math*. 1979 Jan;23(1):97-120. doi: 10.1093/imamat/23.1.97
9. Trefethen LN, Weideman JAC, Schmelze T. Talbot Quadratures and rational approximations. *BIT Numer Math*. 2006 Ago;46:653-70. doi: 10.1007/s10543-006-0077-9
10. Cohen AM. Numerical methods for Laplace Transform inversion. Vol 5. New York (US): Springer Science & Business; 2007.
11. Murlı A, Rizzard M. Algorithm 682: Talbot's method for the Laplace inversion problem. *ACM Trans Math Softw*. 1990 Jun;16(2):158-68. doi: 10.1145/78928.78932
12. Weideman JAC. Optimizing talbot's contours for the inversion of the Laplace Transforms. *SIAM J Numer Anal*. 2006;44:2342-62. doi: 10.1137/050625837
13. Dingfelder B, Weideman JAC. An improved Talbot method for numerical Laplace Transform inversion. Springer Sci Business. 2014 Jul;68:167-83. doi: 10.1007/s11075-014-9895-z
14. Brown JW, Churchill RV. Complex variables and applications. 3. ed. New York (US): McGraw Hill; 1976.