

IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE
CONTORNO PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO
PELO USO COMBINADO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE COM
A SOLUÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO

Marcos Denicio da Silva de Souza

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS
EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

Prof. José Paulo Soares de Azevedo, Ph.D.

Prof. Webe João Mansur, Ph.D.

Prof. Cláudio José Martins, D.Sc.

Prof. Carlos Eduardo Ferraz de Mello, D.Sc.

Prof. Fernanda da Serra Costa, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 2005

SOUZA, MARCOS DENICIO DA SILVA DE

Implementação Computacional do Método
dos Elementos de Contorno para Solução de
Problemas de Difusão-advecção pelo Uso
Combinado da Solução Fundamental
Dependente Com a Solução Independente do
Tempo [Rio de Janeiro] 2005

XIII, 137 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc.,
Engenharia Civil, 2005)

Tese - Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1. Difusão-advecção
2. Método dos Elementos de Contorno
3. Soluções Fundamentais

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

*A minha mãe Leni e ao meu filho Vitor,
pelo presente inestimável da vida
e os valores ensinados.*

AGRADECIMENTOS

Ao professor José Paulo Soares de Azevedo pela compreensão, confiança e orientação.

Aos professores do Programa de Engenharia Civil da COPPE/UFRJ pelo embasamento teórico, em especial ao professor Webe Mansur.

À professora Fernanda da Serra Costa da Universidade Estadual do Rio de Janeiro (UERJ) e do Centro de Pesquisas de Energia Elétrica (CEPEL), ao professor Cláudio José Martins do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFETMG) e ao professor Carlos Eduardo Ferraz de Mello da Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), pela atenção e disponibilidade em participarem da banca da COPPE.

À Doutora Maria Elvira Piñeiro Maceira do CEPEL, pela oportunidade em fazer parte de um centro de pesquisa de excelência.

Aos funcionários da COPPE/UFRJ em especial à Beth Cornélio, Jairo e aos funcionários Raul e Franklin do Laboratório de Hidráulica Computacional.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

Aos colegas do Mestrado e Doutorado pelo incentivo e amizade, em especial a Carlos de Oliveira Cardoso, Marco Aurélio Ferro, Rafael Kelman e Angela Livino.

A Juliana Paiva de Aquino e Vitor Aquino de Souza pelo incentivo e carinho.

A Darwin Fernando Thomas Filho, Raimundo Nogueira Lopes Neto e Carla Medianeira Nogueira da Silva, pelo constante incentivo e amizade.

Resumo da Tese Apresentada à COPPE / UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE
CONTORNO PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO
PELO USO COMBINADO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE COM
A SOLUÇÃO INDEPENDENTE DO TEMPO

Marcos Denicio da Silva de Souza

Março/2005

Orientador: José Paulo Soares de Azevedo

Programa: Engenharia Civil

O presente trabalho apresenta uma forma combinada de solução de problemas de difusão-advecção transiente, com o método dos elementos de contorno, utilizando soluções fundamentais dependentes e soluções fundamentais independentes do tempo. Para avaliar a eficiência desta alternativa de modelagem que alia as vantagens das duas soluções (precisão em um caso e tempo de processamento computacional no outro) são apresentadas comparações com resultados analíticos presentes na literatura, simulações em problemas de transferência de calor em condutos e simulações de transporte de efluentes em rios.

A formulação empregada considera que em cada elemento do contorno é conhecido um valor de potencial, convecção ou de fluxo ao longo do tempo. A aproximação geométrica usa elementos constantes e isoparamétricos lineares com alternativa de nós duplos, e a discretização temporal é realizada por diferenças finitas para o modelo que usa solução fundamental independente do tempo. A presença explícita da integral de domínio é mantida na equação tornando obrigatório a discretização do domínio em células internas. O processo de marcha no tempo, com solução fundamental independente do tempo, parte de um valor inicial fornecido pelo modelo que utiliza solução fundamental dependente do tempo.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc)

COMPUTATIONAL IMPLEMENTATION OF BOUNDARY ELEMENT
METHOD FOR ADVECTION–DIFFUSION PROBLEMS SOLUTION WITH
COMBINED USE OF THE TIME INDEPENDENT SOLUTION WITH THE
DEPENDENT FUNDAMENTAL SOLUTION

Marcos Denicio da Silva de Souza

March/2005

Advisor: José Paulo Soares de Azevedo

Department: Civil Engineering

This work presents a combined form of problem solution of transient advection-diffusion, with boundary element method, using dependent fundamental solutions and independent fundamental solutions of time. In order to measure efficiency of this modelation alternative which joins advantages of both solutions (precision in one case and processing time in the other) comparisons with analytic results in literature, simulations of heat transfer problems in ducts and pollution transport simulations in rivers are presented.

The formulation used considers that in each boundary element is known a potential, convection or flow value (beyond) time. The geometric approach uses isoparametric linear and constant elements with double knots alternative, and time discretization with the model use independent fundamental solutions of time is realized by finite differences. Explicit presence of domain integral is hold in equation, making obligatory domain discretization in internal cells. Time marching process, with fundamental solution independent of time, start from an initial value delivered by the model that uses time dependent fundamental solution.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO	11
2.1 FORMULAÇÃO DO ELEMENTO DE CONTORNO	12
2.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO	15
2.3 EQUAÇÃO FUNDAMENTAL	17
2.4 EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO	19
2.5 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA	20
2.6 EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO PARA PONTOS INTERNOS	24
2.7 RELAÇÃO ENTRE NÚMERO DE PÉCLET E AS DISCRETIZAÇÕES	25
CAPÍTULO 3 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO	27
3.1 MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO EM REGIME PERMANENTE	27
3.2 EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO	30
3.3 DISCRETIZAÇÃO LINEAR UTILIZANDO ELEMENTOS LINEARES	33
3.4 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	40
3.5 CÁLCULO ANALÍTICO E NUMÉRICO DOS COEFICIENTES DE INFLUÊNCIA DA MATRIZ [G] PARA ELEMENTOS LINEARES	42
3.6 ACOPLAMENTO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO COM O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS	46
3.7 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO INTEGRAL COM ELEMENTOS LINEARES NO CONTORNO E CÉLULAS TRIANGULARES NO DOMÍNIO	47
3.8 EQUAÇÃO INTEGRAL EM FORMA MATRICIAL	50
3.9 INTEGRAÇÃO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL NO DOMÍNIO	54
CAPÍTULO 4 - USO COMBINADO DE SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS	57

CAPÍTULO 5 - IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E DESCRIÇÃO DAS SUBROTINAS	60
5.1 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO, FLUXOGRAMA E DESCRIÇÃO DAS SUBROTINAS	64
5.2 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO, FLUXOGRAMA E DESCRIÇÃO DAS SUBROTINAS	69
CAPÍTULO 6 - SIMULAÇÕES	77
6.1 DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE UNIDIMENSIONAL	78
6.2 RESULTADOS DA ANÁLISE UNIDIMENSIONAL	80
6.3 TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM CONDIÇÃO DE CONTORNO DE CONVECÇÃO EM CONDUTO	91
6.4 RESULTADOS DA ANÁLISE NAS FACES DO CONDUTO	93
6.5 TRANSPORTE DE EFLUENTE EM TRECHO DO RIO PARAÍBA DO SUL	96
6.6 RESULTADOS DO TRANSPORTE DE EFLUENTE NO PARAIBA DO SUL	97
6.7 COMPARAÇÃO ENTRE O ESQUEMA DE DIFERENÇA CENTRAL E O MODELO MDA NO RIO PARAÍBA DO SUL	100
6.8 RESULTADOS PARA 20, 40 E 60 PASSOS DE TEMPO	101
CAPÍTULO 7 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES	103
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	107
APÊNDICE A - TEMPO DE PROCESSAMENTO, SAÍDA GRÁFICA E MONITORAMENTO DOS MODELOS COMPUTACIONAIS	114
APÊNDICE B - INTEGRAÇÃO QUASE-SINGULAR COM TRANSFORMAÇÃO CÚBICA PARA ELEMENTOS CONSTANTES	122
APÊNDICE C - SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS UTILIZANDO ELEMENTOS DE CONTORNO PARA MEIOS PREDOMINANTEMENTE ADVECTIVOS	127
C.1 - TRUNCAMENTO DA EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR PARA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE	130
APÊNDICE D - SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS SIMULAÇÕES EM TRECHOS DO RIO PARAÍBA DO SUL	133

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1	SENTIDO DE INTEGRAÇÃO. _____	34
FIGURA 2	ELEMENTO LINEAR. _____	36
FIGURA 3	CÉLULA TRIANGULAR E SISTEMA DE COORDENADAS INTRÍNSECO. _____	54
FIGURA 4	DISTRIBUIÇÃO DE POTENCIAL PARA UM CHOQUE TÉRMICO UNITÁRIO. _____	58
FIGURA 5	FLUXOGRAMA DO PROGRAMA PRINCIPAL. _____	62
FIGURA 6	FLUXOGRAMA DO PROGRAMA MDASFDT. _____	67
FIGURA 7	PONTO DE COLOCAÇÃO NOS NÓS DO CONTORNO E PONTOS INTERNOS. _____	72
FIGURA 8	CONECTIVIDADES NUMA CÉLULA INDIVIDUAL DO DOMÍNIO. _____	72
FIGURA 9	FLUXOGRAMA DO PROGRAMA MDASFIT. _____	74
FIGURA 10	CONDIÇÕES DE CONTORNO E INFORMAÇÕES GEOMÉTRICAS. _____	78
FIGURA 11	DISCRETIZAÇÃO COM 24 ELEMENTOS DE CONTORNO. _____	80
FIGURA 12	ANÁLISE PARA NÚMERO DE PÉCLET NULO NO PONTO $P1(0,1;0,1)$. _____	81
FIGURA 13	ANÁLISE PARA NÚMERO DE PÉCLET NULO NO PONTO $P2(0,3;0,1)$. _____	81
FIGURA 14	ANÁLISE PARA NÚMERO DE PÉCLET IGUAL A 5 NO PONTO $P1(0,1;0,1)$. _____	82
FIGURA 15	ANÁLISE PARA NÚMERO DE PÉCLET IGUAL A 5 NO PONTO $P2(0,3;0,1)$. _____	82
FIGURA 16	ANÁLISE PARA NÚMERO DE PÉCLET IGUAL A 20 NO PONTO $P3(0,3;0,3)$. _____	84
FIGURA 17	ANÁLISE PARA NÚMERO DE PÉCLET IGUAL A 20 NO PONTO $P2(0,3;0,1)$. _____	84
FIGURA 18	ANÁLISE COM PÉCLET IGUAL A 20, APÓS $T=0,01$. _____	85
FIGURA 19	ANÁLISE COM PÉCLET IGUAL A 20, APÓS $T=0,03$. _____	86
FIGURA 20	ANÁLISE COM PÉCLET IGUAL A 20, APÓS $T=0,1$. _____	87
FIGURA 21	ANÁLISE COM PÉCLET IGUAL A 0, APÓS $T=0,01$. _____	88
FIGURA 22	ANÁLISE COM PÉCLET IGUAL A 0, APÓS $T=0,03$. _____	89
FIGURA 23	ANÁLISE COM PÉCLET IGUAL A 0, APÓS $T=0,1$. _____	90
FIGURA 24	SEÇÃO TRANSVERSAL COM ISOLAMENTO EXTERNO PERFEITO. _____	92
FIGURA 25	TEMPERATURA NAS FACES DO CONDUTO (80 ELEMENTOS). _____	93
FIGURA 26	TEMPERATURA NAS FACES DO CONDUTO (16 ELEMENTOS). _____	94
FIGURA 27	DERIVADA NAS FACES DO CONDUTO (80 ELEMENTOS). _____	94

FIGURA 28 TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO CONDUTO PARA T=0,25 SEGUNDOS. _____	95
FIGURA 29 TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO CONDUTO PARA T=5,0 SEGUNDOS. _____	95
FIGURA 30 TRANSPORTE DE EFLUENTE CONSERVATIVO COM PE = 10 (CASO 1)._____	98
FIGURA 31 TRANSPORTE DE EFLUENTE CONSERVATIVO COM PE = 20 (CASO 2)._____	98
FIGURA 32 TRANSPORTE DE EFLUENTE CONSERVATIVO COM PE = 50 (CASO 3)._____	99
FIGURA 33 TRANSPORTE DE EFLUENTE CONSERVATIVO COM PE = 10 (20 PASSOS).____	101
FIGURA 34 TRANSPORTE DE EFLUENTE CONSERVATIVO COM PE = 10 (40 PASSOS).____	102
FIGURA 35 TRANSPORTE DE EFLUENTE CONSERVATIVO COM PE = 10 (60 PASSOS).____	102
FIGURA A.1 EXECUÇÃO DO MODELO MDA. _____	115
FIGURA A.2 EXECUÇÃO COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO. ____	115
FIGURA A.3 EXECUÇÃO COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO. _	116
FIGURA A.4 EXECUÇÃO COM USO COMBINADO DE SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS. ____	116
FIGURA A.5 SAÍDA GRÁFICA INICIAL DO MDA. _____	117
FIGURA C 1- TRUNCAMENTO DA EXPONENCIAL ADVECTIVA DO MDASFDT. _____	131

ÍNDICE DE TABELAS

TABELA 1 - ORDEM DE GRANDEZA DE ΔT E O MÁXIMO VALOR PARA O NÚMERO DE PÉCLET. _____	25
TABELA 2 - DESVIO ENTRE O MDA E O ANALÍTICO A CADA PASSO DE TEMPO PARA $PE = 5$. _____	83
TABELA 3 - COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS ANALÍTICOS E OS OBTIDOS PELO MDA PARA $PE=5$. _____	83
TABELA 4 - TRUNCAMENTO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO. _	131

SÍMBOLOS

A_j	área da célula;
$C(\xi)$	coeficiente que define a posição do ponto fonte;
f_i	fluxo;
$F(u)$	função de fluxo total;
$\{F\}$	vetor de termos independentes;
g_{ij}^i	coeficientes de influência para matriz G_{ij} ;
G_{ij}	matriz que contém os coeficientes oriundos da solução fundamental;
h	distância vertical no sentido ascendente;
hc	coeficiente de convecção;
h_{ij}^k	coeficientes de influência para matriz H_{ij} ;
H_{ij}	matriz que contém os coeficientes oriundos da derivada normal;
I	sub-matriz identidade;
J	Jacobiano de transformação de variáveis;
k	coeficiente de difusividade;
k_0 e k_1	funções de Bessel de segunda classe de ordens 0 e 1 respectivamente;
K	difusividade;
L	comprimento característico ou de referência;
l_j	comprimento do elemento reto linear;
NC	número total de células no qual foi discretizado o domínio;
NG	Número de pontos de Gauss;
Nu	número de Nusselt;
\vec{n}	vetor unitário normal ao contorno apontando para fora do domínio;
η_k, w_k	coordenadas e pesos de Gauss tabelados;
$n(S)$	normal à superfície no ponto S;
p	derivada do potencial em relação a normal;
p^*	derivada da solução fundamental em relação a normal;
p^c	perdas convectivas;
P	integral no tempo da derivada normal da solução fundamental;

Pe	número adimensional de Péclet;
p, s	pontos internos (no domínio);
P, S	pontos no contorno;
Q^*	intensidade da fonte concentrada;
r	distância entre o ponto fonte e o ponto campo;
R	distância vetorial entre o ponto fonte e o ponto campo;
t_f	tempo de aplicação da fonte;
t	tempo transcorrido;
u	potencial;
u^c	vetor contendo os valores de potenciais nodais na célula;
u^*	solução fundamental;
U	integral no tempo da solução fundamental;
x	ponto campo;
\underline{x}	ponto genérico do domínio;
x_1, x_2, x_3	coordenadas cartesianas;
$\delta(p, s)$	função delta de Dirac;
μ	velocidade média;
\underline{v}	vetor velocidade na direção normal;
ξ	ponto fonte;
β	ângulo interno no ponto ξ ;
ϕ	função de interpolação;
ρ	massa específica do fluido;
τ	tempo de aplicação da fonte menos tempo transcorrido;
Δt	intervalo de tempo;
Γ	contorno;
Ω	domínio;
$\underline{\nabla}$	vetor gradiente;
∇^2	operador laplaciano.

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

A qualidade de água compatível com determinados usos disponível no planeta torna-se cada vez mais uma preocupação por parte de engenheiros e pesquisadores que procuram estabelecer com determinada antecedência quais os tipos e conseqüências de despejos de cargas poluidoras nos rios. Existe uma forma simples e prática de apresentar um diagnóstico inicial, que se baseia em índices ou indicadores de qualidade de água, necessitando nesse caso retirada de amostras de água, análise laboratorial e uso adequado do índice conforme a finalidade a que este se destina. Porém, todo esse trabalho demanda um alto custo para um correto monitoramento, o que muitas vezes prejudica sua utilização. Uma ampla análise sobre os mais variados tipos e usos de indicadores de qualidade de água em rios foi determinado em SOUZA e AZEVEDO (2001).

Tendo por objetivo inicial apresentar uma alternativa de modelagem numérica com base em princípios físicos que permita fornecer informações que seja auxiliar na análise da situação que se encontra um ambiente aquático, procurou-se desenvolver neste trabalho uma implementação computacional eficiente utilizando o método dos elementos de contorno. Contudo, sabe-se que representar a situação real do comportamento do transporte de efluentes num rio é um problema de difícil solução, e muitas vezes isto é feito de forma equivocada ou excessivamente simplificada, considerando-se aproximações que levam a uma maior magnitude de erros e resultados que não correspondem à realidade do problema. Um caso típico consiste na suposição do transporte de um efluente em um rio como sendo um problema unidimensional em toda sua extensão, levando em consideração apenas as variações longitudinais da nuvem poluente. Analisemos o caso mais detalhadamente:

Seja um efluente colocado em uma margem de um canal de rio. Se o lançamento for pontual, o efluente espalha-se de forma tridimensional (ao menos na região mais próxima à fonte emissora). Este passa a deslocar-se para jusante do ponto de lançamento e ocupar uma maior região, o que aos poucos faz com que o fenômeno torne-se bidimensional devido à uniformização de concentração na direção vertical como determinado em FISCHER et al. (1979). A seqüência natural é que bem mais a jusante o efluente passe a distribuir-se de forma um pouco mais uniforme ao longo das seções transversais do rio, podendo então considerar-se com relativo grau de precisão um transporte unidimensional, ou seja, a equação unidimensional de transporte só é rigorosamente válida na fase dispersiva do transporte de um efluente, o que ocorre bem a jusante do ponto de lançamento inicial, onde a distância a partir da qual o modelo unidimensional é válido será tanto maior quanto maior for a largura do rio.

As restrições impostas para o uso da equação da dispersão longitudinal foram determinadas por CHATWIN (1980):

- A turbulência seja estatisticamente estacionária;
- O material transportado seja passivo, ou seja, que não afete o escoamento;
- Um tempo suficientemente longo tenha decorrido após o lançamento do constituinte;
- O escoamento ocorre em regime permanente e uniforme.

A concentração de um efluente representa a quantidade de um constituinte em um dado volume de uma região no espaço, no momento em que este volume torna-se infinitesimal, porém deve ser suficientemente grande para que possa supor-se a existência de um meio contínuo que permita a definição de variáveis matemáticas contínuas. O valor dessa concentração ao longo do tempo e espaço dependerá entre

outras razões, da forma como será transportada, dentre as quais pode-se destacar a difusão molecular, a advecção e a convecção.

A difusão molecular é o transporte devido à agitação térmica das partículas de um fluido ocasionando o espalhamento das partículas dos constituintes, isto num meio caracterizado pela velocidade média nula, processo esse que matematicamente é expresso pela lei de FICK.

A advecção é o movimento de um constituinte pelo campo de velocidades do meio fluido que o contém. Embora não seja sempre verdade, é usual considerar que a velocidade do constituinte seja igual à velocidade do fluido envolvente. Esta simplificação acarreta maiores erros no caso do transporte de sedimentos que se precipitam ao longo da direção vertical com velocidade diferente da do fluido.

A convecção segundo FISCHER et al. (1979) é um transporte vertical induzido por instabilidade hidrostática, portanto decorrente de gradientes verticais de densidade, mas é comum encontrarmos-la definida como um sinônimo de advecção para problemas térmicos.

O desenvolvimento matemático relacionado à distribuição espacial e temporal de um constituinte em um meio fluido deve basear-se no princípio de conservação de massa. Neste, o conceito de fluxo como grandeza vetorial faz-se necessário para um correto equacionamento do fenômeno de transporte de efluentes, sendo que esse fluxo pode ser decorrente da ação somente de difusão ou devido à ação simultânea da difusão e da advecção, cuja implementação computacional é bastante mais complexa, sendo admitido por simplificação que o constituinte em estudo não afeta as características hidrodinâmicas do escoamento. Uma forma de equacionar o problema da difusão-advecção de forma análoga ao da difusão pura é utilizando uma transformação apropriada de coordenadas como descrito por FISCHER et al. (1979) que utilizou uma

mudança de variável, onde esta nova variável contempla a incorporação da velocidade do meio. Problemas com a formulação do elemento de contorno baseando-se na transformação da variável exponencial foram avaliados por SINGH e TANAKA (2000), convertendo a equação da difusão-advecção numa equação modificada de Helmholtz.

Soluções analíticas para casos simplificados encontram-se na literatura técnica relacionada à difusão-advecção, porém a maioria dos problemas práticos não se encaixa nestas simplificações, sendo necessário o uso de soluções numéricas e métodos numéricos como diferenças finitas, elementos finitos e elementos de contorno.

O objetivo principal deste trabalho é o desenvolvimento de um modelo numérico alternativo e eficiente, utilizando o Método dos Elementos de Contorno para realizar simulações com a equação da difusão-advecção visando a análise bidimensional da transferência de calor e para o transporte de efluentes em rios.

O Método dos Elementos de Contorno (M.E.C.) ganhou popularidade no meio científico com o desenvolvimento da informática e é um método que apresenta algumas vantagens em relação a outros métodos numéricos para solução de problemas de engenharia e desenvolvimento de pesquisas. Dentre elas pode-se salientar o fato de este considerar que o problema pode ser representado apenas pelo seu contorno, reduzindo assim o número de incógnitas para sua solução, o que torna menor o gasto de tempo de processamento computacional. Entretanto, o fato desse método necessitar de uma função de Green para obtenção do potencial o torna mais restrito do que outros métodos, tais como o método dos elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos.

A partir da equação diferencial que rege o problema da difusão-advecção e das condições de contorno, obtém-se a formulação integral de contorno onde se emprega a função de Green correspondente ao domínio infinito (solução fundamental). Esta

formulação complementada pela discretização numérica é conhecida como método dos elementos de contorno como determinado em BREBBIA, TELLES e WROBEL (1984).

A discretização é feita no espaço e no tempo transformando a solução do problema original em uma sucessão de soluções de sistemas de equações algébricas objetivando apresentar a formulação matemática, tanto no caso da solução fundamental dependente quanto da independente do tempo.

Os primeiros trabalhos com o M.E.C. utilizavam a transformada de Laplace. A partir destes foram desenvolvidos vários estudos utilizando solução fundamental dependente do tempo que apresentaram ótimos resultados, como os obtidos por LIM, CHAN e CHANDRA (1994). Porém, esta alternativa de solução apresentou como deficiência um tempo de processamento computacional elevado devido à sobreposição de matrizes e memória computacional necessária. Foram então realizados estudos para contornar essa dificuldade utilizando solução fundamental independente do tempo, como foi desenvolvido por JESUS (2001) para o caso da difusão.

Soluções numéricas para análise linear da equação da difusão-advecção tem sido utilizadas por muitos métodos numéricos, onde a estabilidade da solução pode ser obtida com o uso de métodos artificiais como determinado por BOZTOSUN e CHARAFI (2002). Aplicações com o M.E.C e análise sensitiva para solução da equação da difusão-advecção para processos contínuos foram determinadas por CHOLEWA, NOWAK e WROBEL (2004), cujo procedimento envolve a derivada total da temperatura e o coeficiente de sensibilidade relevante para encontrar a correta posição da mudança de fase, onde o problema de contorno foi formulado para líquidos e sólidos com a separação por subdomínios para mudança de fase.

Há alternativas como técnicas de decomposição em multidomínio que foram apresentadas por SINGH e TANAKA (1999), PARTRIDGE e SENSALÉ (2000), e por

FLOREZ e POWER (2001) utilizando reciprocidade dual para solução da equação de Navier-Stokes bidimensional. ZIENIUK (2001) apresentou uma opção de solução, para problemas de potencial, com uma modificação do método da equação integral de contorno usando funções lineares paramétricas. A utilização da equação da difusão bidimensional e da modificada de Helmholtz tempo dependente para zonas axisimétricas com reciprocidade dual foi apresentada por BENZ e RANCIS (2002).

A estabilidade da solução da equação da difusão-advecção transiente unidimensional tem sido analisada através de modelos de elementos de Green (GEM) como determinado por TAIGBENU (1999) e para o caso da solução fundamental dependente do tempo da condução de calor não linear foi determinado por TAIGBENU (2004).

O estudo de problemas de difusão em meios homogêneos utilizando a solução fundamental dependente do tempo foi apresentado por YOUNG et al. (2004) para uma, duas e três dimensões, usando o método das diferenças finitas (MDF) através de uma combinação linear da solução fundamental para o operador difusivo.

As funções de Green para a equação da difusão transiente tridimensional para meios homogêneos e não homogêneos foram utilizadas por SUTRADHAR, PAULINO e GRAY (2002), onde a implementação numérica é realizada usando aproximações de Galerkin e a dependência do tempo é resolvida por inversão numérica da transformada de Laplace; para esta inversão foram comparados os resultados obtidos com o método de série de Fourier e os com algoritmos de Stehfest's, onde este último apresentou maior precisão.

A análise da equação da difusão convectiva bidimensional com número de Péclet grandes foi realizada por QIU, WROBEL e POWER (1998) utilizando funções modificadas de Bessel, e em três dimensões por GRIGOREIEV E DARGUSH (2004)

utilizando métodos iterativos e matrizes esparsas para obter maior eficiência na solução com Péclet variando de 1000 até 10000.

O problema inverso para condução de calor foi abordado por HON e WEI (2004) utilizando solução fundamental e esquemas numéricos de livre integração, usando técnicas de regularização de Tikhonov e o método curva-L para obter aproximação numérica de estabilidade. A aproximação é realizada estendendo-se a solução para problemas de maior dimensão sobre domínio irregular.

As equações e condições de contorno obtidas no problema de difusão-advecção têm uma forma semelhante às obtidas para vários outros fenômenos físicos que ocorrem freqüentemente na natureza. Isso, além de permitir diversas analogias formais, possibilita um tratamento matemático unificado destes. O transporte de massa e a transferência de calor são alguns dos fenômenos físicos que podem ser representados pela teoria do potencial. Por meio deles, introduzimos os conceitos de fontes (massas no caso gravitacional e cargas no caso eletrostático) e de potencial (temperatura ou concentração). Esses conceitos e suas generalizações conduzem à teoria matemática do potencial. Na literatura técnica é usual encontrarmos o termo condução – convecção para problemas de fluxo de calor e difusão-advecção para simulações de transportes de massa.

Este trabalho apresenta uma alternativa mais eficiente em uma forma combinada de soluções fundamentais, ou do desenvolvimento e uso combinado de modelos que utilizam diferentes tipos de soluções fundamentais, para solução de problemas de difusão-advecção transiente (SCDA) com o método dos elementos de contorno, utilizando solução fundamental dependente do tempo (SFDT) e solução fundamental independente do tempo (SFIT). Para avaliar as vantagens desta alternativa de modelagem que alia as vantagens das duas soluções, precisão com a SFDT e redução do

tempo de processamento computacional com a SFIT, são apresentadas comparações com resultados analíticos presentes na literatura (nestes estudos o potencial é representado pela temperatura) e são realizadas simulações, quanto à concentração de efluentes, em trechos do rio Paraíba do Sul (neste caso o potencial é representado pela concentração).

A modelagem envolvendo a equação da difusão-advecção transiente apresenta complexidade muito superior ao caso particular da difusão, devido à incorporação dos termos advectivos, sendo necessário uma correta e criteriosa combinação entre a velocidade, a discretização espacial e a discretização temporal, conforme determinado em LIM, CHAN e CHANDRA (1994).

Elaborou-se um programa, em linguagem FORTRAN, para solução da equação da difusão-advecção em duas dimensões (MDA) que gerencia três alternativas de modelagem desenvolvidas nesse trabalho. O modelo numérico apresenta uma avaliação gráfica inicial dos resultados fazendo uso de “*libraries*” do compilador FORTRAN *PowerStation*. Um programa similar para difusão obtém-se através da simplificação do programa para difusão-advecção em que a velocidade do meio seja considerada nula, o que utilizando soluções fundamentais e o método dos elementos de contorno é obtido anulando o número de Péclet, onde o problema passa a ser puramente difusivo e a equação correspondente se torna parabólica. Nos casos em que o número de Péclet tende ao infinito o problema passa a ser puramente advectivo e a equação se torna hiperbólica.

Problemas puramente difusivos são facilmente solucionados com a utilização de métodos discretos como diferenças finitas. Já nos casos advectivos, o problema torna-se de propagação, apresentando oscilações numéricas e amortecimento da frente de onda. Nestes casos é aconselhável a observação do tipo de solução fundamental a ser utilizada

como determinado em QIU, WROBEL e POWER (1998) e respeitar a relação entre a velocidade de transporte e a discretização no espaço e no tempo. Recomenda-se o uso de funções de Bessel de ordem superior para os casos de singularidade forte e hiper singular, o que está descrito detalhadamente no APÊNDICE C do presente trabalho.

A metodologia utilizada e desenvolvida nesse trabalho está descrita em quatro capítulos:

No CAPÍTULO 2 a formulação integral de contorno é revista para o caso de Difusão-advecção em regime transiente utilizando solução fundamental dependente do tempo, onde o procedimento espacial é descrito para elementos constantes e a integração no tempo da solução fundamental e da sua derivada normal são feitas numericamente pelo método da quadratura de Gauss e utilizando a transformada de Telles.

O CAPÍTULO 3 apresenta o desenvolvimento da formulação matemática para difusão-advecção com solução fundamental independente do tempo utilizando elementos lineares, onde foi considerado que o potencial e o fluxo são constantes em cada intervalo de tempo.

No CAPÍTULO 4 está descrito o uso combinado da solução fundamental dependente do tempo com a solução fundamental independente do tempo, a escolha do ponto que pertence ao contorno ou ao domínio para avaliação do uso, e o estudo das derivadas de primeira e de segunda ordem para obtenção do ponto de estabilização e do ponto de inflexão, respectivamente.

O CAPÍTULO 5 apresenta a implementação computacional proposta, os fluxogramas e a descrição das subrotinas referentes a cada uma das alternativas de solução descritas nos capítulos 2,3 e 4.

Para avaliar o desempenho da metodologia descrita nos capítulos 2, 3, 4 e 5, utilizaram-se quatro exemplos que estão presentes no CAPÍTULO 6. O primeiro objetiva a análise da precisão do modelo, e para isso comparou-se o modelo MDA proposto, a SFDT e a SFIT com a solução analítica correspondente a um exemplo da literatura. O segundo consiste numa aplicação em um problema de condução de calor (que é uma simplificação da condução-convecção de calor, anulando o número de Péclet). O terceiro e o quarto exemplos são estudos de transporte de efluente em trechos do rio Paraíba do Sul, sendo que para estes dois últimos realizou-se comparações com o Método das Diferenças Finitas e a solução analítica apresentada no APÊNDICE D.

A metodologia implementada e os resultados obtidos no CAPÍTULO 6 permitem efetuar as conclusões e sugestões para futuras pesquisas descritas no CAPÍTULO 7.

O modelo desenvolvido neste trabalho faz uso das “*libraries*” do FORTRAN *PowerStation* para a determinação do tempo de processamento computacional em cada alternativa de modelagem e para uma saída gráfica inicial dos resultados. Este modelo apresenta ainda três rotinas que foram desenvolvidas e incluídas no modelo MDA, objetivando uma alternativa de “chave de tempo” ou de monitoramento do uso de modelos computacionais. No APÊNDICE A estas questões estão apresentadas com maiores detalhes.

As simulações em meios predominantemente advectivos são bastante complexas e foram analisadas por QIU, WROBEL e POWER (1998) e por SAMEC e SKERGET (2004) que analisaram o exemplo clássico de problemas de transporte por difusão-advectação com velocidade constante em duas dimensões e em uma dimensão respectivamente. Adequados equacionamentos, utilizando as funções de Bessel modificadas e a série de Taylor, estão apresentados no APÊNDICE C.

CAPÍTULO 2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO

Neste capítulo, apresenta-se o Método dos Elementos de Contorno para solução da equação da difusão-advecção com solução fundamental dependente do tempo, onde a equação integral de contorno é aproximada substituindo-se a geometria real por segmentos de reta (elementos de contorno) e a variação das funções é governada localmente em termos de valores nodais em cada elemento.

Na Seção (2.1) o M.E.C. é aplicado para solução da equação da difusão-advecção em regime transiente, considerando que em cada trecho do contorno a variação no tempo do potencial ou de sua derivada normal é conhecida a priori. A equação diferencial parcial é transformada numa equação integral de contorno com o uso da solução fundamental dependente do tempo.

Na Seção (2.2) são apresentadas as condições de contorno e é realizada a discretização no tempo, que considera que o potencial e sua derivada são constantes em cada intervalo dentro de cada elemento. Como a expressão integral para cada tempo depende de todos os valores obtidos em tempos anteriores, faz-se necessário um processo de marcha no tempo.

Na Seção (2.3) é apresentada a equação fundamental da difusão-advecção e a solução correspondente para o regime transiente, onde deve-se levar em consideração que o primeiro intervalo de tempo contém uma singularidade quando o ponto fonte coincide com o elemento campo. Essa singularidade é retirada com uma divisão do

primeiro intervalo de tempo e o auxílio da transformada de Telles no primeiro trecho deste intervalo. O sistema de equações é resolvido para cada intervalo de tempo, levando em consideração a influência dos valores obtidos nos passos de tempo anteriores.

A equação integral de contorno para difusão-advecção transiente, a implementação numérica, a equação integral de contorno para pontos internos e a relação entre o número de Péclet com as discretizações estão descritas da seção (2.4) a (2.7) com as devidas considerações adotadas no programa MDASFDT (Modelo de Difusão-advecção com Solução Fundamental Dependente do Tempo).

2.1 FORMULAÇÃO DO ELEMENTO DE CONTORNO

A formulação do método do elemento de contorno para problemas no plano é apresentada nessa seção em regime permanente e transiente, sendo que uma técnica similar pode ser usada para obter uma formulação do M.E.C. em três dimensões. Dentro da presente aplicação, a velocidade convectiva é assumida constante no tempo e no espaço.

No escoamento em regime permanente com velocidade não nula e constante, a equação governante não será a de Laplace, como é no caso da difusão em regime permanente, mas sim:

$$\rho C_p \left(v_x \frac{\partial u}{\partial x} + v_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (1)$$

onde v_x, v_y são as componentes das velocidades nas direções x e y respectivamente, K é a difusividade e u é o potencial.

Considerando uma substância incompressível e pela equação da continuidade obtém-se a equação governante da difusão-advecção representada pela equação (2).

$$\left(v_x \frac{\partial u}{\partial x} + v_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{K}{\rho C_p} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

Considerando como propriedades constantes do meio: ρ , C_p e K , que $\frac{K}{\rho C_p} = \alpha = k$ e

substituindo estas igualdades na equação (2) chega-se a seguinte expressão:

$$v_x \frac{\partial u}{\partial x} + v_y \frac{\partial u}{\partial y} = k \nabla^2 u \quad (3)$$

A equação da Difusão – Advecção em regime permanente é dada por:

$$v_i \frac{\partial u}{\partial x_i} = k \nabla^2 u \quad (4)$$

onde V_i é a velocidade convectiva, e k é o coeficiente de difusividade.

Sendo que na camada limite cinética: $v_x \gg v_y$ e introduzindo estas considerações na equação governante temos:

$$\left(v_x \frac{\partial u}{\partial x} + v_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) = k \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (5)$$

A adimensionalização é feita com o uso de um comprimento característico ou de referência L e que leva a expressão (5) a:

$$\left(v_x^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v_y^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) = \left(\frac{k}{V L} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (6)$$

Sendo a adimensionalização:

$$x^* = \frac{x}{L}; \quad y^* = \frac{y}{L}; \quad v_x^* = \frac{v}{x}; \quad v_y^* = \frac{v}{y} \quad e \quad u^* = \frac{u - u_s}{u_\infty - u_s} \quad (7)$$

Portanto temos para camada limite térmica:

$$\left(v_x^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v_y^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) = \left(\frac{1}{P_e} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (8)$$

A equação da difusão-Advecção em regime permanente adimensionalizada fica sendo:

$$V_i^* \frac{\partial u^*}{\partial x_i} = \frac{1}{P_e} \nabla^2 u^* \quad (9)$$

A equação que governa problemas de difusão-advecção em regime transiente, segundo LIM, CHAN e CHANDRA (1994), pode ser expressa como:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + v_i \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_i} - k \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x_i^2} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (10)$$

Onde V_i é a velocidade convectiva e k é o coeficiente de difusividade.

Para velocidade constante de advecção, pode-se introduzir um sistema de coordenadas com eixos orientados perpendiculares a direção normal para o vetor velocidade. Fazendo o desenvolvimento das equações, a equação governante pode ser expressa como:

$$\frac{1}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{v_i}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x_i^2} = 0 \quad (11)$$

$$\frac{v_i}{k} \cdot \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_i} = \frac{v_i \cdot L}{k} \cdot \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_1} \quad (12)$$

Respeitando a igualdade acima, observando que foi admitido uma mudança de escala e introduzindo um comprimento característico L, tornando $\frac{\partial u(x,t)}{\partial x_i} = \frac{L \partial u(x,t)}{\partial x_1}$, o que nos permite escrever a equação governante da difusão-advecção transiente como:

$$-\frac{L}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - Pe \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_1} + L \nabla^2 u(x,t) = 0 \text{ em } \Omega \quad (13)$$

Sendo que a direção de x_1 é a mesma da resultante da velocidade de advecção. Pe é o número de Peclet, que relaciona a velocidade convectiva na direção de x_1 , o comprimento característico ou de referência (L) e o termo difusivo (k).

2.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno implementadas no modelo MDA são as de Dirichlet, Neumann e Robin.

Condições de contorno essenciais ou de Dirichlet,

$$u(\underline{x}, t) = \bar{u}(\underline{x}, t) \quad \text{em } \Gamma_u \quad (14)$$

Condições de contorno naturais ou de Neumann

$$p(\underline{x}, t) = \bar{p}(\underline{x}, t) \quad \text{em } \Gamma_p \quad (15)$$

Condições de contorno de convecção ou de Robin

$$\bar{p} = h(\bar{u} - u_c) \quad (16)$$

onde as barras nestas expressões indicam que esses valores são conhecidos, h é o coeficiente de convecção e u_c é a temperatura do fluido;

A condição de contorno de convecção é representada por uma relação entre o potencial e a sua derivada normal, denominada condição mista ou de Robin. Esta condição possui utilidade em problemas envolvendo a condução térmica ou na transferência de calor nas faces de condutos aquecidos em seu interior, conforme será apresentado na seção (6.3) desse trabalho.

Na implementação computacional esta condição de contorno causa influência na montagem das colunas da matriz formada pela integral da solução fundamental [G], onde o coeficiente do primeiro termo da equação (17) multiplica a coluna j desta matriz e é adicionada à coluna j da matriz que contém as incógnitas do problema [A]. Já o coeficiente do segundo termo multiplica a coluna j da matriz [G] e será adicionado ao vetor de termos independentes {f}. Maiores detalhes sobre essas matrizes estão descritos nas demais seções deste capítulo.

Sabendo pela lei de Fourier que: $q_c = h(u - u_c)$ e $q_c = -k \frac{\partial u}{\partial n} = -kp$, onde u_c é

conhecido, igualando essas expressões temos:

$$P_{convectivo} = \frac{-h_{ij}}{k} u_j + \frac{h_{ij}}{k} u_c \quad (17)$$

Segundo LIM, CHAN e CHANDRA (1994), o fluxo na superfície (p) inclui a contribuição das perdas convectivas p^c e pode ser escrita em relação ao número de Nusselt da seguinte forma:

$$p^c(\underline{x}, t) = Nu[u(\underline{x}, t) - u_\infty] \quad (18)$$

Onde u_∞ representa a temperatura ambiente e Nu é o número de Nusselt (hL/k), sendo h o coeficiente de transferência de calor convectivo, com L e k os mesmos descritos anteriormente.

No modelo com solução fundamental dependente do tempo está sendo considerado que as condições iniciais são nulas no domínio Ω , $u(\underline{x}, 0) = \bar{u}(\underline{x}, 0)$ em Ω , e as condições de contorno não variam com o tempo.

O caso de condições iniciais não nulas ($u_0 \neq 0$) não apresenta nenhuma dificuldade prática, podendo sempre ser considerado através de uma subdivisão do domínio em células e integração de funções conhecidas nestas células. Isto está implementado no modelo que utiliza solução fundamental independente do tempo e que será apresentado no CAPÍTULO 3 deste trabalho, estando em maiores detalhes em WROBEL (1981).

Mesmo que tenhamos ($u_0 \neq 0$), a integral de domínio das condições iniciais pode ser reduzida a uma integral de contorno desde que u_0 seja uma função harmônica; se u_0 é uniforme no domínio, a integral de temperatura ou concentração pode ser eliminada tomando-se u_0 como origem de medição.

2.3 EQUAÇÃO FUNDAMENTAL

Para determinar a equação fundamental pode-se partir da equação governante da difusão-advecção transiente:

$$-\frac{\partial u^*(\underline{x}, t)}{\partial t} - Pe \frac{\partial u^*(\underline{x}, t)}{\partial X_1} = \nabla^2 u^*(\underline{x}, t) + \delta(\underline{x} - \underline{\xi})(t - t_f) \quad \text{em } \Omega^* \quad (19)$$

Onde $\underline{\xi}$ e \underline{x} são os pontos fonte e campo, respectivamente, no domínio, $\tau = t_f - t$ é o tempo final de aplicação da fonte menos o tempo transcorrido. Sendo Ω^* o domínio estando-se trabalhando com solução fundamental.

Aqui $u^*(\underline{x}, t)$ representa o aumento de potencial sobre o corpo. Caso a distribuição inicial de potencial não seja uniforme, necessita-se de uma integral de domínio.

Aplicando o teorema da divergência obtemos a equação governante para difusão-advecção apresentada pela expressão (23).

Assumindo que $u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = 0$ isso nos possibilita a obtenção da solução fundamental $u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t)$ representada pela equação (20), como foi calculado em LIM, CHAN e CHANDRA (1994).

$$u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = \frac{1}{4\pi\tau} \exp\left[-\frac{\left[\{x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}) + Pe(\tau)\}^2 + (x_2(\underline{x}) - x_2(\underline{\xi}))^2\right]}{4\tau}\right] \quad (20)$$

Desenvolvendo os trinômios quadrados perfeitos obtém-se a solução fundamental no plano:

$$u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = \frac{1}{4\pi\tau} \exp\left[-\frac{r^2}{4\tau}\right] \exp\left[-\frac{Pe}{2}(x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}))\right] \exp\left[-\frac{Pe^2}{4}(\tau)\right] \quad (21)$$

Onde r é a distância euclidiana entre o ponto fonte ($\underline{\xi}$) e o ponto campo (\underline{x}). Em (21) a primeira exponencial representa o efeito condutivo, a segunda e a terceira

exponenciais representam o efeito devido à convecção no espaço e no tempo, respectivamente.

De posse da solução fundamental u^* , pode-se obter a derivada normal desta:

$$p^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = \frac{-r \frac{\partial r}{\partial n}}{8\pi\tau^2} \cdot \exp\left[-\frac{r^2}{4\tau}\right] \cdot \exp\left[-\frac{Pe}{2}(x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}))\right] \cdot \exp\left[\frac{-Pe^2\tau}{4}\right] \quad (22)$$

Onde: $-r \cdot \frac{\partial r}{\partial n} = -\frac{1}{r} r_{\underline{u}} n = [x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi})] n_1(\underline{x}) + [x_2(\underline{x}) - x_2(\underline{\xi})] n_2(\underline{x})$ é a projeção

da distância r sobre a normal ao contorno.

2.4 EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO

A equação integral de contorno para problemas de difusão-advecção transiente pode ser obtida aplicando-se uma sentença de resíduos ponderados, integrando por partes e aproximando o ponto ξ sobre o contorno, chegando à seguinte expressão:

$$C(\underline{\xi})u(\underline{\xi}, t_f) = \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) p(\underline{x}, t) - p^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) \right] d\Gamma \right\} dt - Pe \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) n_1(\underline{x}, t) d\Gamma \right\} dt \quad (23)$$

O coeficiente $C(\underline{\xi})$, depende da geometria na vizinhança de ξ ; se o contorno é suave junto à ξ , então $C(\underline{\xi})=1/2$ para problemas em duas ou três dimensões. Para os pontos pertencentes ao domínio $C(\underline{\xi})=1$. Anulando o número de Pe na equação (23), obtém-se a formulação correspondente ao fenômeno físico de difusão pura.

2.5 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

A implementação numérica da equação do método dos elementos de contorno para problemas de difusão-advecção transiente é discutida nessa seção. O primeiro passo é a discretização do contorno para o domínio bidimensional em elementos de contorno. Neste caso a discretização no tempo e no espaço são necessárias. O contorno é discretizado em NE elementos de contorno espaciais e a dimensão do tempo é subdividida em NT passos de tempo.

É importante relatar que esta discretização está sendo feita para situação em que o ponto fonte pertence ao contorno que é suave ($\xi \in \Gamma$), sendo assim o coeficiente $C(\underline{\xi}) = 0,5$.

No caso transiente, utilizando elementos constantes no tempo, a Equação Integral de Contorno discretizada em forma matricial fica representada pela equação (24), onde U^* e P^* são a integral no tempo da solução fundamental e da sua derivada normal respectivamente.

$$0,5.u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} p_j^k \int_{\Gamma_j} U^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) - \sum_{j=1}^{NE} u_j^k \int_{\Gamma_j} P^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \right) + \sum_{k=1}^{NT} \left(- \sum_{j=1}^{NE} u_j^k \int_{\Gamma_j} \vec{U}^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \right) \quad (24)$$

$$0,5.u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k \cdot p_j^k - \sum_{j=1}^{NE} \hat{H}_{ij}^k \cdot u_j^k \right) \quad (25)$$

Onde as matrizes G_{ij}^k e \hat{H}_{ij}^k são expressas por:

$$G_{ij}^k = \int_{\Gamma_j} U^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \quad (26)$$

$$\hat{H}_{ij}^k = \int_{\Gamma_j} P^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) + \int_{\Gamma_j} \overset{\Gamma}{U}^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \quad (27)$$

Nestas matrizes a integral $\int_{\Gamma_j} U^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ e a integral $\int_{\Gamma_j} P^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ são formadas devido a influência da difusão, ao passo que a $\int_{\Gamma_j} \overset{\Gamma}{U}^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ é formada a partir da influência da advecção.

$$H_{ij}^k = \begin{cases} \hat{H}_{ij}^k + 0,5 & \text{se } k=1 \text{ e } i=j \end{cases} \quad (28)$$

$$H_{ij}^k = \begin{cases} \hat{H}_{ij}^k & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (29)$$

Aqui:

$$U_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_0}^{t_f} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) dt \quad (30)$$

$$P_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_0}^{t_f} p^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) dt \quad (31)$$

$$\mathbf{U}^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_0}^{t_f} Pe.u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) n_1(\underline{x}, t) dt \quad (32)$$

No caso transiente, há uma integração singular quando o ponto fonte pertence ao elemento campo para o primeiro intervalo de tempo. Escrevendo a equação (24) para cada ponto fonte, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\sum_{k=1}^{NT} [H]^k \{u\}^{NT-k+1} = \sum_{k=1}^{NT} [G]^k \{p\}^{NT-k+1} \quad (33)$$

Para obter os valores de $\{u\}$ e $\{p\}$ no tempo NT faz-se necessário um esquema de marcha no tempo a partir de NT=1, uma vez que não conhecemos *a priori* os valores de u_j e p_j em todos os tempos:

Assim, particularizando-se a equação (33) para NT=1.

$$[H]^1 \{u\}^1 = [G]^1 \{p\}^1 \quad (34)$$

Impondo-se as condições de contorno na equação (34) de maneira análoga ao caso permanente, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$[A]^1 \{X\}^1 = \{f\}^1 \quad (35)$$

A solução deste sistema de equações, nos fornece u_j^1 e p_j^1 em todo contorno discretizado.

Após seja determinado os valores de u_j^1 e p_j^1 , pode-se avançar no tempo e calcular $[A]^1 \{X\}^1 = \{f\}^1$ e p_j^2 usando a expressão (33) particularizada para NT=2:

$$\sum_{k=1}^2 [H]^k \{u\}^{3-k} = \sum_{k=1}^2 [G]^k \{p\}^{3-k} \quad (36)$$

ou

$$[H]^1 \{u\}^2 + [H]^2 \{u\}^1 = [G]^1 \{p\}^2 + [G]^2 \{p\}^1 \quad (37)$$

Escrevendo a equação (37) de outra forma temos:

$$[H]^1 \{u\}^2 = [G]^1 \{p\}^2 + \{h\}^2 \quad (38)$$

onde: $\{h\}^2$ contém as contribuições do passado, isto é:

$$\{h\}^2 = [G]^2 \{p\}^1 - [H]^2 \{u\}^1 \quad (39)$$

Aplicando as condições de contorno na expressão (38) obtém-se um sistema de equações:

$$[A]^1 \{X\}^2 = \{f\}^2 + \{h\}^2 \quad (40)$$

que resolvido fornece os valores de u_j^2 e p_j^2 em todo o contorno.

O processo continua até atingir o nível de tempo desejado NT:

$$[H]^1 \{u\}^{NT} = [G]^1 \{p\}^{NT} + \{h\}^{NT} \quad (41)$$

Onde: $\{h\}^{NT}$ representa a contribuição da história anterior de u_j e p_j em todo o contorno:

$$\{h\}^{NT} = \sum_{k=2}^{NT} \left([G]^k \{p\}^{NT-k+1} - [H]^k \{u\}^{NT-k+1} \right) \quad (42)$$

No processo de marcha no tempo; $\{h\}^{NT}$ possui apenas termos conhecidos dos coeficientes de influência e dos valores de $\{u\}$ e $\{p\}$ em tempos anteriores, isto é, de 1 até (NT -1).

O sistema de equações algébricas é obtido aplicando-se as condições de contorno em NT, o que leva a:

$$\{A\}^1 \{x\}^{NT} = \{f\}^{NT} + \{h\}^{NT} \quad (43)$$

2.6 EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO PARA PONTOS INTERNOS

É análoga a equação (23), porém nesse caso o coeficiente $C(\underline{\xi}) = 1$, ou seja:

$$\begin{aligned} u(\underline{\xi}, t_f) = & \int_0^{\tau} \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) p(\underline{x}, t) - p^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) \right] d\Gamma \right\} dt \\ & - Pe \int_0^{\tau} \left\{ \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) n_1(\underline{x}, t) d\Gamma \right\} dt \end{aligned} \quad (44)$$

Para determinação dos potenciais em pontos internos, faz-se uso da forma discreta da equação (44):

$$u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k \cdot P_j^k - \sum_{j=1}^{NE} H_{ij}^k \cdot u_j^k \right) \quad (45)$$

Os valores de u_j, p_j no contorno são obtidos a cada passo de tempo, no nível de tempo atual. Os coeficientes G_{ij} e H_{ij} são determinados para cada ponto interno por expressões análogas a (26) e (27).

2.7 RELAÇÃO ENTRE NÚMERO DE PÉCLET E AS DISCRETIZAÇÕES

A discretização do espaço e do tempo são fundamentais para se obter bons resultados, utilizando a solução fundamental dependente e independente do tempo da equação da difusão-advecção transiente, porém para difusão há uma menor preocupação com estas discretizações devido a menor complexidade de seu equacionamento, uma vez que esta é uma situação particular ou simplificada da equação da difusão-advecção .

LIM, CHAN e CHANDRA (1994) determinaram que deve-se obedecer uma relação entre o intervalo de tempo Δt e o máximo valor para o número de Péclet para uma discretização do espaço de $\Delta X=0,1$ (conforme está apresentado na Tabela 1), cujas variáveis estão todas adimensionalizadas.

Tabela 1 - Ordem de grandeza de Δt e o máximo valor para o número de Péclet.

Δt	Máximo Pe
10^{-2}	100
10^{-3}	300
10^{-4}	1000
10^{-5}	2100

Na formulação incondicional estável do M.E.C. foi calculado por LIM, CHAN e CHANDRA (1994), que o termo $(Pe^2 / 4)^n (\tau)^n$ nas equações (21) e (22) tem uma tendência de criar oscilações para número de Péclet grandes. Isto pode ser evitado escolhendo um incremento de tempo adequado conforme a tabela 1.

LIM, CHAN e CHANDRA (1994) calcularam que o incremento de tempo é limitado por um critério de estabilidade definido pelo Número de Nusselt, sendo este o produto do número de Péclet pela razão entre o intervalo de tempo e de espaço.

$$Nu = Pe \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (46)$$

Quando Pe aumenta, o tamanho da malha correspondente a discretização no espaço terá que ser reduzido para se obter gradientes altos. Consequentemente, o incremento de tempo deve ser limitado e relacionado com uma relação inicial de possíveis discretizações do tempo, conforme as seguintes expressões adimensionalizadas.

$$\Delta t \cong \sqrt{Pe} \quad \text{ou} \quad \Delta t \cong Pe^{-2} \quad (47)$$

A fim de comparar a precisão do modelo de difusão-advecção proposto com os obtidos na literatura, onde LIM, CHAN e CHANDRA (1994) definiram o desvio do modelo através da raiz quadrada do erro médio quadrático de cada passo de tempo por:

$$E = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (u - u_1)^2}{N}} \quad (48)$$

onde u é a solução analítica, u_1 é a solução aproximada e N é o número de nós.

CAPÍTULO 3 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO

3.1 MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO EM REGIME PERMANENTE

Para obter a equação da difusão-advecção em regime permanente pode-se partir da equação de conservação de massa relacionada ao fluxo f_i .

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_i} = 0 \quad (49)$$

Sabendo que a equação do fluxo total como foi determinado em GRIGOR'EV (2001) é dada por:

$$f_i = -k \frac{\partial u}{\partial x_i} + v_i u \quad (50)$$

onde k é a difusividade, u é a concentração e v_i é a velocidade convectiva, logo substituindo (50) em (49) temos:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(-k \frac{\partial u}{\partial x_i} + v_i u \right) = 0 \quad (51)$$

Desenvolvendo a derivada em (51) ficamos para função do fluxo total $F(u)$ com:

$$F(u) = -k \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} + v_i \frac{\partial u}{\partial x_i} \quad (52)$$

Na expressão (52) a difusividade escalar depende da coordenada x_i e não da velocidade convectiva. Multiplicando a equação (52) por $\left(-\frac{1}{k}\right)$ em ambos os lados da igualdade temos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} - \frac{v_i}{k} \frac{\partial u}{\partial x_i} = 0 \quad (53)$$

Considerando que a difusividade k do meio é constante num comprimento característico l , e recordando a relação entre o número adimensional de Péclet e a velocidade.

$$P_e = \frac{V.l}{k} = \frac{v_i}{k} \quad (54)$$

Seja uma direção de fluxo x_i , com velocidade convectiva v_i e difusividade k , a equação da difusão-advecção unidimensional substituindo a equação (54) em (53) é representada por:

$$\nabla^2 u - P_e \frac{\partial u}{\partial x_i} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (55)$$

A solução fundamental unidimensional e sua derivada normal foram calculadas por GRIGOR'EV (2001) e são representadas pelas equações (56) e (57) respectivamente.

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{|Pe|} \exp\left\{-\left[\frac{Pe(\xi - x) + |Pe||\xi - x|}{2}\right]\right\} \quad (56)$$

$$p^*(\xi, x) = -\left(\frac{Pe + (\xi - x)}{2}\right) \exp\left\{-\left[\frac{Pe(\xi - x) + |Pe||\xi - x|}{2}\right]\right\} \quad (57)$$

O caso bidimensional pode ser determinado de forma análoga, porém levando em consideração a componente da velocidade na direção y, o que torna a equação (55) em:

$$\nabla^2 u - \frac{v_x}{k} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{v_y}{k} \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (58)$$

Para a equação (58) a solução fundamental e derivada normal é apresentada pelas sentenças a seguir e que estão descritas mais detalhadamente no APÊNDICE C deste trabalho.

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{2\pi k} (\exp(-vR/2k)) k_0(\mu r) \quad (59)$$

$$p^*(\xi, x) = \frac{1}{2\pi k} (\exp(-vR/2k)) \left[\left(\mu k_1 + \frac{v_n}{2k} k_0 \right) (\mu r) \right] \quad (60)$$

Onde k_0 e k_1 são as funções de Bessel de segunda classe de ordens 0 e 1 respectivamente, sendo $\mu = |v|/(2k)$ e $r = |R|$ a distância vetorial entre os pontos campo e fonte.

Nas equações (59) e (60) aparece uma exponencial que para facilitar a implementação computacional recomenda-se expandir em séries de Taylor lembrando que:

$$\exp(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad (61)$$

Na formulação do Método dos Elementos de Contorno a equação diferencial e condições de contorno que regem o fenômeno de distribuição de potenciais, em regime permanente, podem ser transformadas em uma equação integral de contorno estabelecendo uma sentença de resíduos ponderados. Essa formulação será restrita a duas dimensões, com condições de contorno análogas ao descrito no CAPÍTULO 2.

3.2 EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO

A equação integral de contorno correspondente à expressão (58) é:

$$C(\underline{\xi})u(\underline{\xi}) = k \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) p(\underline{x}) - p^*(\underline{\xi}, \underline{x}) u(\underline{x}) \right] d\Gamma(\underline{x}) \right\} - \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) u(\underline{x}) v_n(\underline{x}) d\Gamma(\underline{x}) \quad (62)$$

Considerando a velocidade constante na direção do fluxo e em função do número de Péclet temos:

$$C(\underline{\xi})u(\underline{\xi}) = \int_{\Gamma} \left[u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) p(\underline{x}) - p^*(\underline{\xi}, \underline{x}) u(\underline{x}) \right] d\Gamma(\underline{x}) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) u(\underline{x}) d\Gamma(\underline{x}) \quad (63)$$

As soluções da equação (58) podem ser obtidas através de métodos aproximados. Para problemas bidimensionais temos para solução fundamental e sua derivada normal, utilizando como base as determinações por QIU, WROBEL e POWER (1998), e por SAMEC e SKERGET (2004), as seguintes expressões:

$$u^*(\xi, x) = -\frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \cdot \ln(\mu r/2) \quad (64)$$

$$p^*(\xi, x) = -\frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \cdot \left[\left(\frac{v_n}{2k} \ln(\mu r/2) \right) + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial n} \right) \right] \quad (65)$$

Sendo k_0 e k_1 funções de Bessel de grau 0 e 1 respectivamente, v_n o vetor velocidade na direção normal e r é a distância entre o ponto fonte ξ e o ponto campo x .

$$c(\xi) u(\xi) = \sum_{j=1}^{NE} \left(\int_{\Gamma_j} p(x) u^*(\xi; x) d\Gamma - \int_{\Gamma_j} u(x) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \right) \quad (66)$$

A equação (66) ainda pode ser escrita como:

$$c(\xi) u(\xi) + \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} u(x) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} p(x) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) + \sum_{j=1}^{NE} -Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \quad (67)$$

Desse modo a equação (67) também pode ser escrita para pontos internos como:

$$u(\xi) = -\int_{\Gamma} u(x)p^*(\xi; x)d\Gamma(x) + \int_{\Gamma} p(x)u^*(\xi; x)d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x)u(x)d\Gamma(x) \quad (68)$$

A expressão (68) permite que se calcule o valor de $u(\xi)$ em um ponto interno ξ , desde que os valores das incógnitas no contorno u e p sejam conhecidos. O cálculo destas incógnitas é feito a partir da equação integral para pontos fontes localizados no contorno.

As velocidades nos pontos internos nas direções dos eixos x e y também podem ser obtidas a partir da lei de Fourier, supondo que o meio é homogêneo e isotrópico.

$$q_x = -K \frac{\partial u}{\partial \xi_x} \quad (69)$$

$$q_y = -K \frac{\partial u}{\partial \xi_y} \quad (70)$$

$$q_x = -K \frac{\partial}{\partial \xi_x} \left(\int_{\Gamma} p(x)u^*(\xi; x)d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} u(x)p^*(\xi; x)d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x)u(x)d\Gamma(x) \right) \quad (71)$$

$$q_y = -K \frac{\partial}{\partial \xi_y} \left(\int_{\Gamma} p(x)u^*(\xi; x)d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} u(x)p^*(\xi; x)d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x)u(x)d\Gamma(x) \right) \quad (72)$$

Levando em consideração que o ponto é interno, os valores de u^* e p^* não são singulares e portanto pode-se inverter a ordem de diferenciação e integração nestas expressões obtendo:

$$q_x = -K \left(\int_{\Gamma} p(x) \frac{\partial u^*(\xi; x)}{\partial \xi_x} d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} u(x) \frac{\partial p^*(\xi; x)}{\partial \xi_x} d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \right) \quad (73)$$

$$q_y = -K \left(\int_{\Gamma} p(x) \frac{\partial u^*(\xi; x)}{\partial \xi_y} d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} u(x) \frac{\partial p^*(\xi; x)}{\partial \xi_y} d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \right) \quad (74)$$

A solução para os pontos pertencentes ao contorno é obtida tomando-se o limite quando o ponto ξ tende ao contorno Γ .

$$c(\xi) u(\xi) = \int_{\Gamma} p(x) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} u(x) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \quad (75)$$

Esta equação é válida para pontos ξ internos ou pertencentes ao contorno Γ desde que se observe que, para o espaço bidimensional:

$$C(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \xi \notin (\Omega + \Gamma) \\ \beta / 2\pi & \text{se } \xi \in \Gamma \\ 1 & \text{se } \xi \in \Omega \end{cases} \quad (76)$$

Onde β é o ângulo interno no ponto ξ .

Quando o contorno é suave em ξ , $\beta = \pi$ e portanto $c(\xi) = 0,5$.

3.3 DISCRETIZAÇÃO LINEAR UTILIZANDO ELEMENTOS LINEARES

MANSUR et al.(1996) determinaram que para se obter a solução numérica da equação integral de contorno é necessário que se discretize o contorno Γ em elementos, que sejam capazes de aproximar bem a geometria, u e p ao longo do

contorno. Diferentes tipos de elementos podem ser utilizados, tais como elementos constantes, lineares ou quadráticos como calculado por BREBBIA, TELLES e WROBEL (1984). Na formulação que se apresenta para solução fundamental independente do tempo empregam-se os elementos lineares.

Neste caso o contorno real é aproximado por uma série de segmentos de linha reta, denominados elementos, sendo estes definidos por dois nós geométricos.

No caso de elementos lineares a discretização é feita dividindo o contorno em NE segmentos retos. As incógnitas são avaliadas nos pontos de interseção entre dois elementos consecutivos, isto é, em suas extremidades.

O ponto fonte ξ , agora denominado ponto de colocação é o ponto de interseção entre dois elementos consecutivos, que é simultaneamente nó geométrico e funcional.

É importante observar que em problemas bidimensionais um “observador” percorrendo o contorno Γ no sentido de integração deve deixar o domínio Ω à sua esquerda conforme mostra a Figura 1.

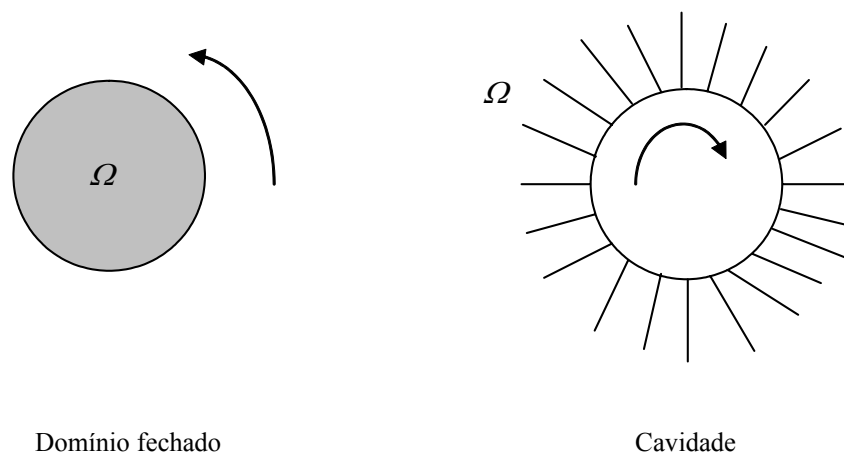


Figura 1 Sentido de Integração.

A orientação quando da numeração dos nós em problemas envolvendo condutos vazados é na face externa no sentido anti-horário e na face interna no sentido horário,

formando assim uma região de integração entre estas faces do conduto, como calculado por SOUZA e AZEVEDO (2003).

Efetuada a discretização pode-se substituir a integral de contorno por uma soma de integrais sobre elementos. Assim, introduzindo-se a aproximação geométrica na equação integral de contorno para um ponto de colocação ξ coincidente com um nó funcional tem-se:

$$c(\xi) u(\xi) = \sum_{j=1}^{NE} \left(\int_{\Gamma_j} p(x) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) - \int_{\Gamma_j} u(x) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma_j} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \right) \quad (77)$$

onde NE é o número de elementos.

Agrupando os termos de interesse pode-se escrever a equação (77) como:

$$c(\xi) u(\xi) + \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} u(x) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} p(x) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma_j} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) \quad (78)$$

A variação das funções u e p ao longo do contorno é aproximada por um número finito de valores nodais usando-se funções de interpolação em cada elemento. No elemento linear os valores de u e p variam linearmente ao longo do elemento como mostra a Figura 2. Os valores de u e p em qualquer ponto do elemento podem ser definidos em termos de seus valores nodais e duas funções de interpolação N_1 e N_2 na coordenada homogênea local η tal que:

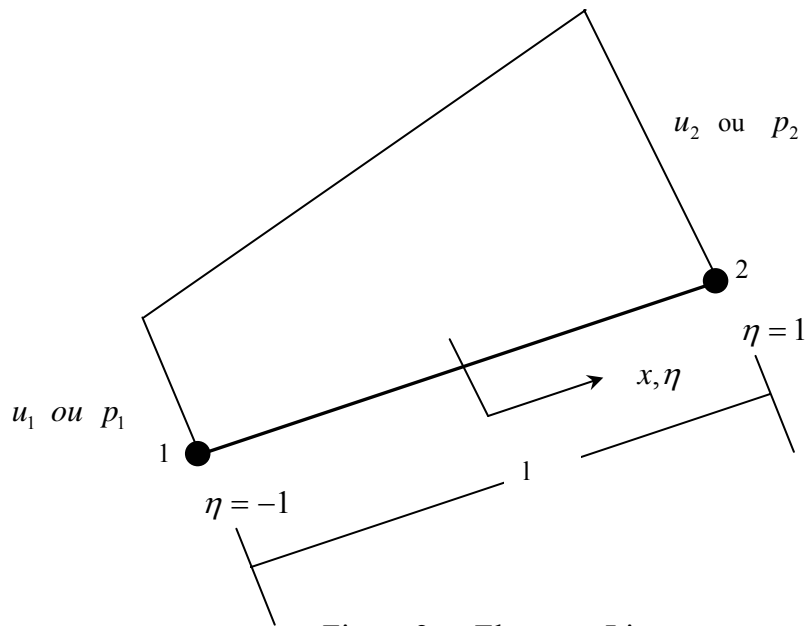


Figura 2 Elemento Linear.

$$u(\eta) = N_1 u_1 + N_2 u_2 = [N_1 \quad N_2] \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} \quad (79)$$

$$p(\eta) = N_1 p_1 + N_2 p_2 = [N_1 \quad N_2] \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix} \quad (80)$$

As funções N_1 e N_2 são dadas por

$$N_1 = \frac{1}{2}(1 - \eta) \quad (81)$$

$$N_2 = \frac{1}{2}(1 + \eta) \quad (82)$$

A integral ao longo do elemento j no lado esquerdo da equação (78) fica:

$$\int_{\Gamma_j} u(x) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] p^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} d\Gamma(x) = \begin{bmatrix} h_{ij}^1 & h_{ij}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} \quad (83)$$

Onde:

$$h_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 p^*(\xi; x) d\Gamma(x) \quad (84)$$

$$h_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 p^*(\xi; x) d\Gamma(x) \quad (85)$$

O coeficiente de influência h_{ij}^k é definido como a interação entre o ponto i sob consideração e um particular nó k no elemento j .

Para as integrais de contorno do lado direito da equação (78) pode-se escrever:

$$\int_{\Gamma_j} p(x, t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix} d\Gamma(x) = \begin{bmatrix} g_{ij}^1 & g_{ij}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix} \quad (86)$$

$$\int_{\Gamma_j} u(x, t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} d\Gamma(x) = \begin{bmatrix} g_{ij}^1 & g_{ij}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} \quad (87)$$

onde

$$g_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 u^*(\xi; x) d\Gamma(x) \quad (88)$$

$$g_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 u^*(\xi; x) d\Gamma(x) \quad (89)$$

Para escrever a equação correspondente ao nó i na forma discreta precisa-se adicionar a contribuição de dois elementos adjacentes $(j-1)$ e (j) num único termo, definindo o coeficiente nodal. Isto resultará na seguinte equação:

$$c_i u_i + \begin{bmatrix} \hat{H}_{i1} & \hat{H}_{i2} & \dots & \hat{H}_{iN} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_N \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{i1} & G_{i2} & \dots & G_{iN} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \dots \\ p_N \end{Bmatrix} \quad (90)$$

Onde cada termo é igual ao termo h^2 do elemento $(j-1)$ mais o termo h^1 do elemento (j) para um sistema de numeração no sentido anti-horário. O mesmo aplica-se para G_{ij} .

A equação (90) pode ser escrita na forma compacta da seguinte maneira

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^{NE} \hat{H}_{ij} u_j = \sum_{j=1}^{NE} G_{ij} p_j \quad (91)$$

ou mais simplesmente

$$\sum_{j=1}^{NE} H_{ij} u_j = \sum_{j=1}^{NE} G_{ij} p_j \quad (92)$$

onde

$$H_{ij} = \hat{H}_{ij} \quad \text{para } i \neq j, \quad (93)$$

$$H_{ij} = \hat{H}_{ij} + c_i \quad \text{para } i = j. \quad (94)$$

Quando se escreve a equação (92) para cada nó funcional, obtém-se um sistema de equações de ordem $(NE \times NE)$ o qual pode ser representado na forma matricial como:

$$[H]\{U\} = [G]\{P\} \quad (95)$$

Se a superfície não é suave no ponto i , o valor $c_i = 0,5$ não é mais válido, mas pode-se calcular os termos da diagonal de H usando o fato que quando um potencial uniforme é aplicado no corpo inteiro os valores de p devem ser zero. Sob esta condição a equação (95) produz para domínios fechados:

$$[H]\{I\} = 0 \quad (96)$$

A equação (96) indica que a soma de todos os elementos de H numa linha deve ser zero, conseqüentemente os valores dos coeficientes da diagonal podem ser facilmente calculados uma vez que todos os coeficientes não pertencentes à diagonal são conhecidos, isto é:

$$H_{ii} = -\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N H_{ij} \quad (97)$$

Em domínios infinitos temos:

$$H_{ii} = -\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N H_{ij} + 1, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (98)$$

O Sistema de equações dado pela expressão (99) deve ser reordenado de tal forma a se ter os coeficientes que multiplicam as incógnitas do lado esquerdo e após a aplicação das condições de contorno, pode ser escrito como:

$$[A]\{X\} = \{F\} \quad (99)$$

onde

$\{X\}$ Contém as incógnitas nos nós funcionais.

$\{F\}$ Vetor de termos independentes que contém as contribuições dos valores conhecidos do contorno.

As condições de contorno são impostas da seguinte maneira: quando u_j é conhecido, a coluna j da matriz $[A]$ é igual a menos a coluna j da matriz $[G]$ e o vetor $\{F\}$ recebe uma contribuição igual a $-u_j$ multiplicado pela coluna j da matriz $[H]$; quando p_j é conhecido, a coluna j da matriz $[A]$ é igual a coluna j da matriz $[H]$ e o vetor $\{F\}$ recebe uma contribuição igual a p_j multiplicado pela coluna j da matriz $[G]$.

3.4 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

O cálculo dos coeficientes H_{ij} e G_{ij} quando os pontos fonte e campo não são coincidentes, isto é, fora da diagonal principal ($i \neq j$), envolvem integrações regulares e pode-se usar quadratura de Gauss. A integração de uma função $f(x)$ em um intervalo $[a,b]$ é feita usando-se coordenadas naturais η , conforme indicado na expressão a seguir:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f[x(\eta)]|J|d\eta \quad (100)$$

Pode-se escrever em relação aos limites de integração e a coordenada de Gauss a seguinte expressão:

$$x = a + \frac{b-a}{2}(\eta + 1) \quad (101)$$

Sendo o Jacobiano $|J|$ em (100) dado por:

$$dx = |J|d\eta = \frac{b-a}{2}d\eta \quad (102)$$

Escolhido o número de pontos de Gauss “NG” que vai ser utilizado na integração, “ I ” pode ser calculado por:

$$I = \sum_{k=1}^{NG} f(x(\eta_k))w_k J(\eta_k) \quad (103)$$

$$I = \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^{NG} f[x(\eta_k)]w_k \quad (104)$$

Para integrações dentro de um elemento reto linear de comprimento l_j pode-se escrever a equação (104) da seguinte forma, como determinado em BREBBIA et al. (1984).

$$I = \frac{l_j}{2} \sum_{k=1}^{NG} f[x(\eta_k)]w_k \quad (105)$$

Sendo: NG – Número de pontos de Gauss

$$J - \text{ Jacobiano de transformação de variáveis} = \frac{d\Gamma}{d\eta} = \frac{l_j}{2}$$

η_k, w_k - coordenadas e pesos de Gauss tabelados.

Os coeficientes da diagonal de $[H]$ e $[G]$ envolvem núcleos singulares e podem ser calculados analiticamente:

$$H_{ii} = c(\xi) \text{ pois } \hat{H}_{ij} = 0 \quad (106)$$

Uma vez que $\frac{\partial r}{\partial n} = 0$ nas integrações que contêm a singularidade pois r é perpendicular à normal .

O cálculo dos coeficientes de influência da matriz $[G]$ quando o ponto de colocação ξ_i situa-se sobre um dos nós do elemento Γ_j , será apresentado na seção seguinte.

3.5 CÁLCULO ANALÍTICO E NUMÉRICO DOS COEFICIENTES DE INFLUÊNCIA DA MATRIZ [G] PARA ELEMENTOS LINEARES

Apresenta-se nessa seção o cálculo analítico dos coeficientes de influência da matriz G , para o caso do ponto de colocação ξ_i coincidir com um dos nós do elemento Γ_j . Esses coeficientes compõem a diagonal principal da referida matriz. Serão analisados os casos unidimensional e bidimensional.

O número de Peclet pode ser calculado de forma global, onde o comprimento característico será a maior dimensão da geometria em estudo. Num rio, por exemplo, seria o comprimento longitudinal do mesmo, ou pode ser local e nesse caso o comprimento de referência é o tamanho do elemento da malha discretizada. Neste caso particular em que $Pe(x) = Pe = \text{Constante}$, a solução da equação da difusão-advecção unidimensional determinada por GRIGOR'EV (1994) é:

$$u(x) = \frac{e^{(Pe \cdot x)} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (107)$$

Nas equações abaixo apresentadas os índices 1 e 2 representam, respectivamente, o nó inicial e final do elemento Γ_j .

A sub-matriz abaixo identificada como \tilde{g}_{ij} é de ordem (1 x 2), e pode ser representada como (o índice i se refere ao nó ξ_i ; o índice j , ao elemento Γ_j):

$$\tilde{g}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ g_{ij} & g_{ij} \end{bmatrix}_j = \int_{\Gamma} u^* [N_1 \quad N_2] d\Gamma \quad (108)$$

O cálculo é desenvolvido na coordenada natural η e o Jacobiano da transformação é igual à metade do elemento, isto é, $|J| = \frac{l_j}{2}$

$$\tilde{g}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ g_{ij} & g_{ij} \end{bmatrix}_j = \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 u^* [N_1 \quad N_2] d\eta \quad (109)$$

Desse modo:

$$g_{ij}^1 = \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 N_1 u^* d\eta = \frac{l_j}{2} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1-\eta) \frac{e^{(Pe.x)} - 1}{e^{Pe} - 1} d\eta \quad (110)$$

A função de interpolação N_1 e a distância r entre o ponto fonte e o ponto campo são expressos por:

$$N_1 = \frac{(1-\eta)}{2} \quad (111)$$

$$x = \frac{l_j}{2}(1+\eta) \quad (112)$$

Substituindo (112 e 111) em (110), obtém-se:

$$g_{ij}^1 = \frac{l_j}{4} \int_{-1}^1 \left(\frac{e^{(Pe.lj(1+n)/2)} - 1}{(e^{Pe} - 1)} \right) (1-\eta) d\eta \quad (113)$$

$$g_{ij}^1 = \frac{l_j}{4(e^{Pe} - 1)} \left[\int_{-1}^1 (e^{(Pe.lj(1+n)/2)} - 1) d\eta + \int_{-1}^1 (e^{(Pe.lj(1+n)/2)} - 1)(-\eta) d\eta \right] \quad (114)$$

Integrando por partes e efetuando uma mudança de variável ($1+\eta=\xi$), nos termos entre colchetes na equação (114) separadamente e posteriormente adicionando-os determina-se para o primeiro coeficiente de influência a seguinte expressão:

$$g_{ij}^1 = -\frac{2 - 2e^{(Pe.lj)} + lj.Pe(2 + lj.Pe)}{2(-1 + e^{Pe})lj.Pe^2} \quad (115)$$

$$g_{ij}^2 = \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 N_2 u^* d\eta = \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 N_2 \frac{e^{(Pe.x)} - 1}{e^{Pe} - 1} d\eta \quad (116)$$

Sendo:

$$N_2 = \frac{(1+\eta)}{2} \quad (117)$$

$$x = \frac{l_j}{2}(1+\eta) \quad (118)$$

Substituindo (117) e (118) em (116) encontra-se a seguinte expressão:

$$\frac{l_j}{4} \int_{-1}^1 \frac{e^{Pe.x} - 1}{e^{Pe} - 1} (1+\eta) d\eta = \frac{l_j}{4(e^{Pe} - 1)} \left[\int_{-1}^1 e^{(Pe.lj(1+n)/2)} - 1 d\eta + \int_{-1}^1 (e^{(Pe.lj(1+n)/2)} - 1)(\eta) d\eta \right] \quad (119)$$

Os termos entre colchetes da equação (119) podem ser integrados separadamente e posteriormente adicionados, o que nos permite escrever para o segundo coeficiente de influência a seguinte expressão:

$$g_{ij}^2 = \frac{4 - 2lj^2 Pe^2 + 4e^{(Pe.lj)}(-1 + lj.Pe)}{4(-1 + e^{Pe})lj.Pe^2} \quad (120)$$

Para o caso unidimensional, com número de Péclet variável, recomenda-se fazer o mesmo desenvolvimento para determinação dos coeficientes de influência, porém fazendo uso da solução fundamental unidimensional da equação da difusão-advecção calculada por GRIGOR'EV (1994) e representada pela expressão (56).

O procedimento para determinação dos coeficientes de influência para o caso bidimensional é análogo ao caso unidimensional, porém utilizando a solução fundamental correspondente dada pela expressão (59). Neste caso, assim como para solução fundamental dependente do tempo, uma alternativa é expandir em série de

Taylor o termo exponencial, utilizar a quadratura de Gauss e transformada de Telles para o cálculo da integração numérica da solução fundamental devido à complexidade desta.

$$g_{ij} = \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 N_i u^* d\eta = -\frac{l_j}{2} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1-\eta) \frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \ln(\mu r/2) d\eta \quad (121)$$

3.6 ACOPLAMENTO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO COM O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

O tratamento das derivadas no tempo será feito pelo Método das Diferenças Finitas. Supõe-se que a derivada no tempo, possa ser aproximada pelo quociente da variação dos potenciais pelo intervalo de tempo correspondente, admitindo um Δt suficientemente pequeno. Como os valores dos potenciais no tempo inicial são conhecidos, os valores finais, quando não prescritos, passam a ser incógnitas do problema.

Procedendo de forma análoga ao desenvolvimento para a equação de Laplace calculado por JESUS (2001), obtém-se a seguinte equação integral de contorno para pontos de colocação situados no contorno.

$$c(\xi, t)u(\xi, t) + \int_{\Gamma} u(x, t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \int_{\Gamma} p(x, t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Omega} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} u^*(\xi; x) d\Omega \quad (122)$$

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \quad (123)$$

Substituindo (123) em (122) obtemos:

$$\begin{aligned}
c(\xi)u(\xi, t + \Delta t) + \int_{\Gamma} u(x, t + \Delta t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) &= \int_{\Gamma} p(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) \\
- Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) - Pe \int_{\Omega} \left[\frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \right] u^*(\xi; x) d\Omega &
\end{aligned} \tag{124}$$

Desenvolvendo o termo da integral de domínio chegamos à:

$$\begin{aligned}
c(\xi)u(\xi, t + \Delta t) + \int_{\Gamma} u(x, t + \Delta t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) &= \int_{\Gamma} p(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) \\
- Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) - \frac{Pe}{\Delta t} \int_{\Omega} u(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Omega &+ \frac{Pe}{\Delta t} \int_{\Omega} u(x, t) u^*(\xi; x) d\Omega
\end{aligned} \tag{125}$$

Agrupando-se convenientemente os termos obtém-se:

$$\begin{aligned}
c(\xi)u(\xi, t + \Delta t) + \int_{\Gamma} u(x, t + \Delta t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) + \frac{Pe}{\Delta t} \int_{\Omega} u(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Omega &= \\
- Pe \int_{\Gamma} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) + \int_{\Gamma} p(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) + \frac{Pe}{\Delta t} \int_{\Omega} u(x, t) u^*(\xi; x) d\Omega &
\end{aligned} \tag{126}$$

3.7 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO INTEGRAL COM ELEMENTOS LINEARES NO CONTORNO E CÉLULAS TRIANGULARES NO DOMÍNIO

Para se obter a solução numérica da equação integral de contorno é necessário que se discretize o contorno Γ em elementos que sejam capazes de aproximar bem a geometria u e p ao longo do contorno. Diferentes tipos de elementos podem ser

utilizados, tais como elementos constantes, lineares ou quadráticos, sendo que na formulação que se apresenta emprega-se os elementos lineares.

Na discretização com elementos lineares o contorno é dividido em NE segmentos retos. As incógnitas são avaliadas nos pontos de interseção entre dois elementos consecutivos, isto é, em suas extremidades.

A equação integral (122) após discretização do contorno pode ser escrita como

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} u(x,t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} p(x,t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) \quad (127)$$

$$\sum_{j=1}^{NE} -Pe \int_{\Gamma_j} u^*(\xi; x) u(x) d\Gamma(x) - (Pe + k) \int_{\Omega} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} u^*(\xi; x) d\Omega$$

Introduzindo na equação (127) a aproximação funcional na qual os valores de u e p variam linearmente dentro de cada elemento Γ_j , utilizando as funções de interpolação N_1 e N_2 na forma matricial como definidas e implementadas no CAPÍTULO 2 tem-se:

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^{NE} \int [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) = \sum_{j=1}^{NE} \int [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) +$$

$$\sum_{j=1}^{NE} \int -Pe [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) - (Pe + k) \sum_{r=1}^{NC} \int_{\Omega_r} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} u^*(\xi; x) d\Omega \quad (128)$$

Conforme foi descrito, a solução numérica da equação integral parte da aplicação de uma aproximação geométrica e funcional no contorno, a qual foi feita com elementos lineares. Todavia, a presença da integral de domínio na equação (127) torna imperativo a necessidade de discretização do domínio, o qual foi feito com células triangulares lineares internas, onde o potencial é interpolado linearmente.

A equação (128) na forma discreta se escreve do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
c_i u_i + \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) + \sum_{j=1}^{NE} Pe \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) \\
+ \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \sum_{r=1}^{NC} \int_{\Omega_r} u(x, t+\Delta t) u^*(\xi; x) d\Omega = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) + \\
\frac{(Pe+k)}{\Delta t} \sum_{r=1}^{NC} \int_{\Omega_r} u(x, t) u^*(\xi; x) d\Omega \quad (129)
\end{aligned}$$

Onde NC é o número total de células no qual foi discretizado o domínio, r é o índice que se refere à célula que está sendo integrada. Admitindo que dentro de cada célula u varie linearmente com a coordenada intrínseca triangular η .

$$u = \phi \{u^c\} \quad (130)$$

Utilizando funções de interpolação $\phi = [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3]$, cujo detalhamento se faz na seção seguinte, obtém-se para a equação (129)

$$\begin{aligned}
c_i u_i + \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) + \sum_{j=1}^{NE} Pe \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) \\
+ \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \sum_{r=1}^{NC} \int_{\Omega_r} \phi u^*(\xi; x) \{u^c\}_{t+\Delta t} d\Omega = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) + \\
\frac{(Pe+k)}{\Delta t} \sum_{r=1}^{NC} \int_{\Omega_r} \phi u^*(\xi; x) \{u^c\}_t d\Omega \quad (131)
\end{aligned}$$

Onde $\{u^c\}$ é o vetor contendo os valores de potenciais nodais na célula.

Aplicando-se a equação discretizada na forma da equação (131) para todos os nós do contorno e dos pontos internos, pode-se escrever um sistema de equações com representação matricial do tipo:

$$[H] \{U\}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} [M] \{U\}_{t+\Delta t} = [G] \{P\}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} [M] \{U\}_t \quad (132)$$

A equação (132) pode ainda ser escrita da seguinte forma:

$$[H^*] \{U\}_{t+\Delta t} = [G] \{P\}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} [M] \{U\}_t \quad (133)$$

3.8 EQUAÇÃO INTEGRAL EM FORMA MATRICIAL

Tendo em vista que em razão da proposta de solução da equação, os potenciais nos pontos internos são calculados simultaneamente com as incógnitas do contorno, e objetivando melhor ilustrar a composição das matrizes que são termos da equação (133), esta também será obtida a partir da representação matricial.

Escrevendo-se a equação discretizada na forma da equação (133) para todos os nós do contorno e dos pontos internos, obtém-se:

$$[H] \{U\}_{t+\Delta t} = [G] \{P\}_{t+\Delta t} - [M] \left\{ \dot{U} \right\} \quad (134)$$

A equação integral pode ser representada por uma equação matricial do tipo:

$$\begin{bmatrix} \tilde{H}^{cc} & \tilde{H}^{ci} \\ \tilde{H}^{ic} & \tilde{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{G}^{cc} & \tilde{0} \\ \tilde{G}^{ic} & \tilde{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{p}^c \\ \tilde{0} \end{Bmatrix} - (Pe+k) \begin{bmatrix} \tilde{M}^{cc} & \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{M}^{ic} & \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\tilde{u}}^c \\ \dot{\tilde{u}}^i \end{Bmatrix} \quad (135)$$

Tendo em vista que a derivada temporal é aproximada por diferenças finitas tem-se:

$$\begin{Bmatrix} \dot{u} \\ \sim \\ \dot{u} \\ \sim \\ \dot{u} \\ \sim \end{Bmatrix} = \frac{1}{\Delta t} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} - \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_t \quad (136)$$

Substituindo (136) em (135) obtém-se

$$\begin{bmatrix} H^{cc} & H^{ci} \\ \sim & \sim \\ H^{ic} & I \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} G^{cc} & 0 \\ \sim & \sim \\ G^{ic} & 0 \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p \\ \sim \\ 0 \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} - \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} M^{cc} & M^{ci} \\ \sim & \sim \\ M^{ic} & M^{ii} \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} M^{cc} & M^{ci} \\ \sim & \sim \\ M^{ic} & M^{ii} \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_t \quad (137)$$

Reordenando os termos obtém-se um sistema de equações do tipo:

$$\begin{bmatrix} H^{cc} & H^{ci} \\ \sim & \sim \\ H^{ic} & I \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} M^{cc} & M^{ci} \\ \sim & \sim \\ M^{ic} & M^{ii} \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} G^{cc} & 0 \\ \sim & \sim \\ G^{ic} & 0 \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p \\ \sim \\ 0 \\ \sim \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} M^{cc} & M^{ci} \\ \sim & \sim \\ M^{ic} & M^{ii} \\ \sim & \sim \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \sim \\ u \\ \sim \end{Bmatrix}_t \quad (138)$$

Os superíndices c e i designam , respectivamente, o contorno e o domínio. Onde o primeiro superíndice corresponde à posição do ponto fonte e o segundo à posição do ponto campo.

Pode-se observar na equação acima que a matriz $[H]$ é formada a partir das sub-matrizes \tilde{H}^{cc} , \tilde{H}^{ci} , \tilde{H}^{ic} , \tilde{I} . Por sua vez, os coeficientes de influência destas são obtidos da interação entre os pontos de colocação situados sobre o contorno e o domínio.

A sub-matriz identidade \tilde{I} representa os coeficientes $c(\xi)=1$ associados aos pontos internos.

A matriz $[M]$ é formada pelas sub-matrizes \tilde{M}^{cc} , \tilde{M}^{ci} , \tilde{M}^{ic} e \tilde{M}^{ii} . É uma matriz cheia cujos coeficientes de influência resultam da interação entre os pontos de colocação situados no contorno e os pontos internos pertencentes ao domínio.

O cálculo dos coeficientes de influência das matrizes $[H]$ e $[G]$ se faz da mesma maneira análoga ao descrito no item (3.5) do CAPÍTULO 3. O cálculo dos coeficientes de influência da matriz $[M]$ se faz como descrito na seção a seguir.

A equação matricial dada por (138) pode ainda ser escrita como

$$\begin{bmatrix} \tilde{H}^{cc} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \tilde{M}^{cc} & \tilde{H}^{ci} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{H}^{ic} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \tilde{M}^{ic} & \tilde{I} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u^c \\ u^i \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{bmatrix} \tilde{G}^{cc} & 0 \\ \tilde{G}^{ic} & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} p^c \\ 0 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} \tilde{M}^{cc} & \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{M}^{ic} & \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u^c \\ u^i \end{Bmatrix}_t \quad (139)$$

O sistema de equação dado por (139) pode ser escrito de forma mais compacta como:

$$[H]\{U\}_{t+\Delta t} = [G]\{P\}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} [M]\{U\}_t \quad (140)$$

Ao impormos as condições de contorno do problema, as colunas correspondentes das matrizes $[H]$ e $[G]$ podem trocar de posição como descrito no CAPÍTULO 2.

Observa-se que o segundo termo do lado direito da equação (140) é conhecido uma vez que o vetor condição inicial $\{U\}_t$ é prescrito e resulta num vetor ora denominado $\{F2\}_t$. Após a aplicação das condições de contorno, o primeiro termo também é conhecido e gera o vetor $\{F1\}_{t+\Delta t}$. A soma de $\{F1\}_{t+\Delta t} + \{F2\}_t$ produz o vetor $\{F\}_{t+\Delta t}$. A equação (140) se escreve então da seguinte forma:

$$[A]\{y\}_{t+\Delta t} = \{F1\}_{t+\Delta t} + \{F2\}_t = \{F\}_{t+\Delta t} \quad (141)$$

onde: $\{y\}$ contém as incógnitas nos nós funcionais.

$\{F\}$ é o vetor de termos independentes, contém as contribuições dos valores conhecidos do contorno.

As condições de contorno são impostas da seguinte maneira: quando u_j é conhecido, a coluna j da matriz $[A]$ é igual a menos a coluna j da matriz $[G]$ e o vetor $\{F\}$ recebe uma contribuição igual a $-u_j$ multiplicado pela coluna j da matriz $[H]$; quando p_j é conhecido, a coluna j da matriz $[A]$ é igual a coluna j da matriz $[H]$ e o vetor $\{F\}$ recebe uma contribuição igual a p_j multiplicado pela coluna j da matriz $[G]$.

Para a solução do sistema de equações, o nível de tempo ou período de interesse é dividido em intervalos, e a equação da difusão-advecção é resolvida sucessivamente para cada intervalo de tempo discreto, determinando os potenciais finais do intervalo, os quais corresponderão aos valores iniciais na análise do intervalo seguinte.

Desse modo, o sistema de equações representado pela equação (141) é resolvido para as incógnitas do problema : potencial e derivada normal no contorno Γ , e potencial em Ω , no instante $(t + \Delta t)$. A solução para o instante seguinte é obtida atualizando-se o vetor condição inicial, ao qual é atribuído aos potenciais do tempo atual, e efetuando a mesma seqüência de operações.

3.9 INTEGRAÇÃO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL NO DOMÍNIO

Para o cálculo da integral presente na equação (131), adotou-se o procedimento da Quadratura de Hammer.

$$\int_{\Omega_j} u(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Omega \quad (142)$$

Definindo um sistema de coordenadas intrínseco (η_1, η_2) no subdomínio Ω_j , constituído por uma célula triangular como apresentado na Figura 3. Os potenciais em Ω_j são calculados em função dos valores nodais correspondentes.

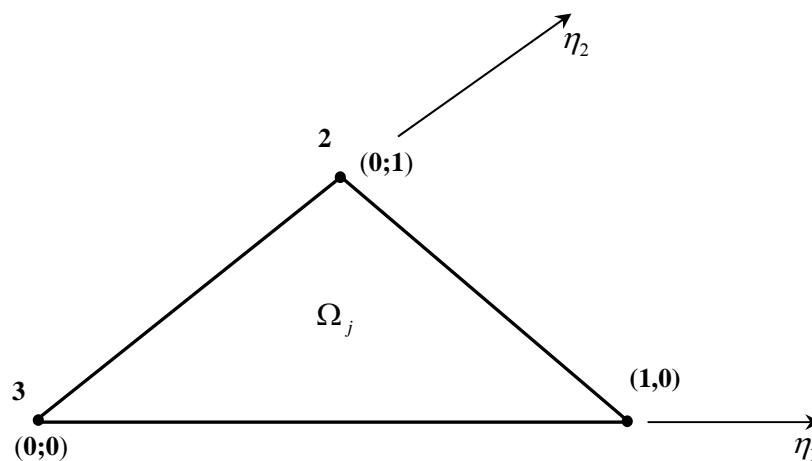


Figura 3 Célula triangular e sistema de coordenadas intrínseco.

Designando os eixos coordenados cartesianos por (x,y) , as coordenadas intrínsecas são definidas pela expressão (143), onde α representa o ponto ao qual se refere a função de interpolação:

$$\eta_{\alpha} = \frac{1}{2A} (2A_{\alpha}^0 + b_{\alpha} x + a_{\alpha} y) \quad (143)$$

$$a_{\alpha} = x_{\gamma} - x_{\beta}$$

$$b_{\alpha} = y_{\beta} - y_{\gamma}$$

$$A_{\alpha}^0 = x_{\beta} y_{\gamma} - x_{\gamma} y_{\beta} \quad (144)$$

$$A = (b_1 a_2 - b_2 a_1) / 2 \quad \text{é a área da célula}$$

com $\alpha = 1,2,3$ para $\beta = 2,3,1$ e $\gamma = 3,1,2$

Admitindo que o potencial u varie linearmente dentro do domínio Ω_j , pode-se escrever:

$$u = \underset{\sim}{\phi} \{ u^c \} \quad (145)$$

Em que $\underset{\sim}{\phi} = [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3]$ e $\{ u^c \}$ são as funções de interpolação na forma matricial e o vetor contendo os valores de potenciais nodais na célula respectivamente.

Tendo em vista que a soma das coordenadas triangulares soma 1, a terceira coordenada intrínseca será dada por $\eta_3 = 1 - \eta_2 - \eta_1$.

Substituindo (145) em (142) obtém-se:

$$\int_{\Omega_j} \phi u^*(\xi; \mathbf{x}) \{u^c\} d\Omega \quad (146)$$

Para a formação da matriz $[M]$, equação (146), cada célula Ω_j contribui com uma sub-matriz m_{ij} (o índice i refere-se ao ponto fonte ; o índice j , à célula) dada por:

$$m_{ij} = \int_{\Omega_j} [\eta_1 u^* \quad \eta_2 u^* \quad \eta_3 u^*] d\Omega \quad (147)$$

A integral dada por (147) pode ser calculada numericamente utilizando a Quadratura de Hammer, procedimento este adotado nesta implementação conforme a seguir:

$$m_{ij} = \int_{\Omega_j} \phi u^*(\xi; \mathbf{x}) d\Omega = \sum_{K=1}^K \left(\phi u^*(\xi; \mathbf{x}) \right)_K w_K A_j \quad (148)$$

Onde K é o número de pontos de integração, w_K é o peso associado a cada ponto, A_j é a área da célula.

As coordenadas intrínsecas ou triangulares que correspondem aos pontos de Hammer e seus respectivos pesos foram determinados por BREBBIA et al. (1984).

CAPÍTULO 4 - USO COMBINADO DE SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS

A linearidade da equação diferencial e das condições de contorno faz com que o histórico de temperaturas nos nós do contorno e do domínio seja igual ao histórico correspondente a um choque térmico unitário multiplicado pelo valor do choque térmico e começando no instante em que este ocorre.

A Figura 4 representa a distribuição de potencial na face interna e na face externa de um conduto (correspondente ao exemplo de transferência de calor por convecção em conduto, descrito na seção (6.3)). Esta apresenta dois pontos de interesse para fonte concentrada: o ponto de inflexão e o ponto de estabilização. O critério que define o ponto de inflexão é a mudança de sentido da reta tangente a curva, o que numericamente é determinado pela derivada segunda nula. Já o ponto de estabilização é o início do patamar em que o regime permanente foi alcançado, ou seja, que o potencial deixou de variar ao longo do tempo. Este é definido numericamente quando em todos os nós do contorno e do domínio o potencial num tempo t apresenta a derivada primeira nula.

O ponto pertencente ao domínio ou ao contorno no qual são efetuados os testes de derivada primeira e segunda é uma questão que merece destaque devido sua influência direta no número de intervalos de tempo gastos até que os pontos de inflexão e de estabilização sejam alcançados. Estes pontos serão determinados tão mais cedo quanto mais próximo estiver o ponto de análise do ponto de lançamento da fonte ou de maior potencial. No modelo ora proposto este ponto de análise das derivadas está livre para escolha do usuário (dado de entrada do modelo), porém os resultados dos

exemplos deste trabalho foram obtidos escolhendo o ponto central da geometria em estudo.

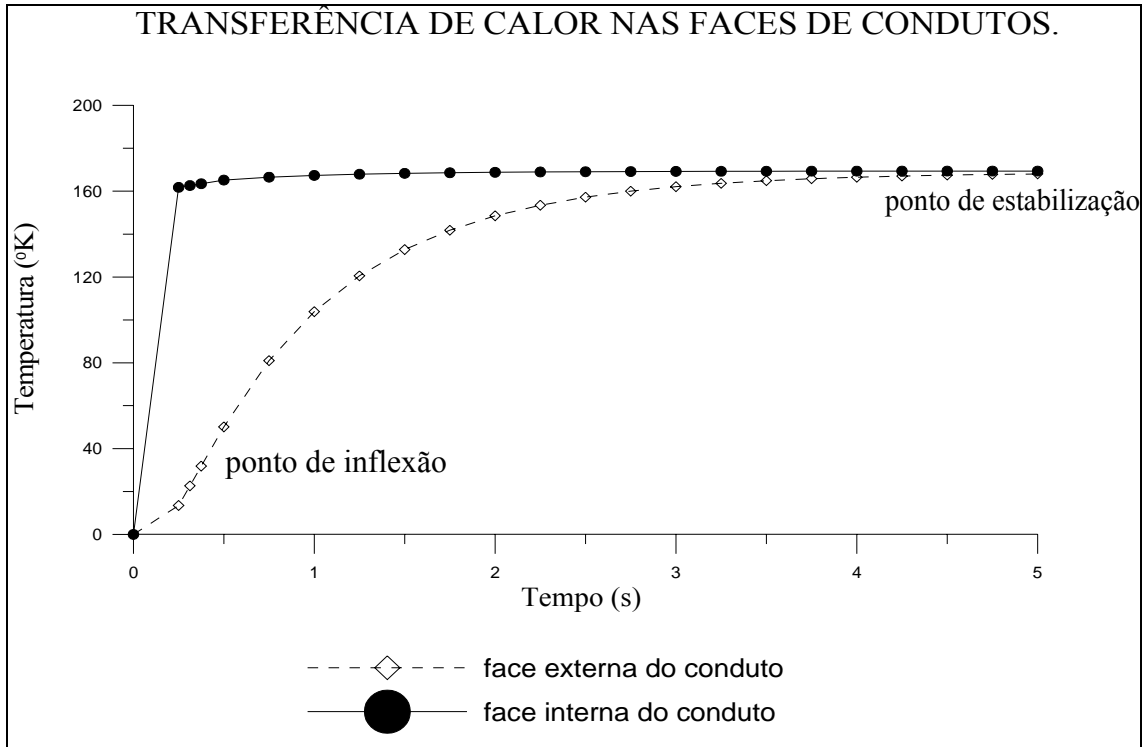


Figura 4 Distribuição de potencial para um choque térmico unitário.

Com essas informações e devido à solução fundamental dependente do tempo apresentar maior precisão e um maior consumo de tempo computacional, como determinado em SOUZA (1999), principalmente quando utilizamos solução numérica da equação da difusão-advecção (substituindo o resultado da integral analítica no tempo da solução fundamental e da sua derivada normal pela área correspondente) e que a solução fundamental independente do tempo possui menor precisão e menor consumo de tempo de processamento computacional, parece óbvio que uma forma eficaz de resolver problemas de difusão e de difusão-advecção é desenvolver um modelo que contemple estas duas soluções (esses dois modelos) e as utilize com critério nos

períodos de tempo onde cada uma demonstra ser melhor quanto a precisão ou ao tempo de processamento.

Dessa forma foi desenvolvido um modelo, o (MDASFDT), objetivando a solução da equação da difusão-advecção transiente bidimensional com solução fundamental dependente do tempo, que será utilizado até que se atinja o ponto de inflexão da distribuição de potenciais; e outro utilizando solução fundamental independente do tempo denominado (MDASFIT), aplicável do ponto de inflexão até o ponto de estabilização que caracteriza o regime permanente. Após atingido esse patamar a execução do programa é interrompida, cujo critério de “parada” é a determinação da derivada primeira nula. De forma análoga se obtém um modelo apenas para estudos de difusão anulando as variáveis correspondentes à velocidade.

Num primeiro momento poderia-se pensar que o modelo MDA apresenta valores idênticos aos do modelo com solução fundamental independente do tempo no período entre o ponto de inflexão até o ponto que caracteriza que o regime permanente foi alcançado, porém isso não ocorre, pois a implementação foi desenvolvida de forma que o cálculo dos potenciais e derivadas normais, no intervalo de tempo após ser atingido o ponto de inflexão, utilize como dados de entrada os potenciais e suas derivadas normais obtidas pelo modelo com solução fundamental dependente do tempo, o MDASFDT. Isto se justifica devido ao MDASFIT não necessitar o cálculo dos potenciais até o ponto de inflexão, o que já resulta em economia de tempo de processamento computacional e devido este passar a utilizar como dados de entrada a saída do modelo MDASFDT que apresenta resultados mais próximos da solução analítica, o que resultará em uma maior precisão nos resultados do ponto de inflexão até o ponto de estabilização.

CAPÍTULO 5 - IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL E DESCRIÇÃO DAS SUBROTINAS

O programa para solução de problemas de difusão-advectação transiente MDA foi elaborado em linguagem computacional FORTRAN 90 com o compilador *PowerStation* e consiste no gerenciamento de três alternativas de modelagem. A primeira utiliza somente solução fundamental dependente do tempo, a segunda utiliza apenas solução fundamental independente do tempo e a terceira possibilita o uso combinado das duas anteriores, aproveitando as melhores características de cada uma, de forma a se obter boa precisão e menor consumo de tempo de processamento computacional, ou seja, o programa principal gerencia dois modelos, a saber:

O MDASFDT que foi desenvolvido por SOUZA (1999) e o MDASFIT foi desenvolvido por SOUZA (2005), tendo para este último como referência o estudo da difusão determinado por JESUS (2001). A Figura 5 apresenta o fluxograma da estrutura de programação do programa principal e na seqüência está a descrição das subrotinas correspondentes.

O modelo ora desenvolvido apresenta três alternativas de cálculo:

- Resolver a equação da difusão e da difusão-advectação transiente utilizando apenas a solução fundamental dependente do tempo;
- Resolver a equação da difusão e da difusão-advectação transiente usando apenas a solução fundamental independente do tempo;
- Resolver a equação da difusão e da difusão-advectação transiente através do uso combinado da solução fundamental dependente e independente do tempo objetivando uma maior eficiência.

As três alternativas e a escolha desta é realizada através da definição de uma variável denominada (iflag), que pode ser 1, 2 ou 3 respectivamente. O modelo MDA ainda possui uma alternativa (iflag = 4) para comparar todas as alternativas de modelagens já descritas através de uma saída gráfica simplificada com o uso das “libraries” do compilador FORTRAN *PowerStation*.

Uma preocupação de engenheiros e pesquisadores é estabelecer mecanismos de proteção quanto ao uso de modelos computacionais, o prazo de validade de uma determinada versão e o número de instalações permitidas, dessa forma foram implementadas subrotinas no modelo ora proposto, com uma forma alternativa de “chave de tempo” que atenda a todas essas necessidades simultaneamente. Detalhes e implementações dessa proposta estão discutidas no APÊNDICE A.

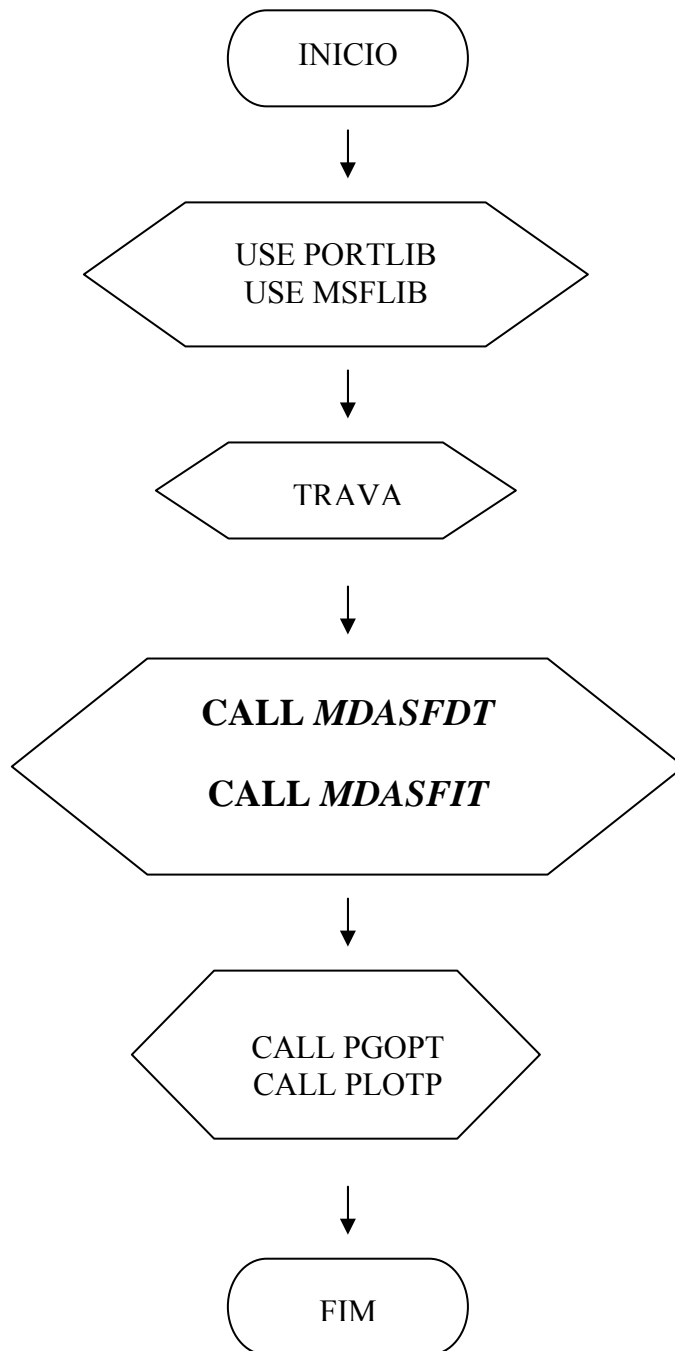


Figura 5 Fluxograma do programa principal.

PORTLIB – “*Library*” do FORTRAN *PowerStation* utilizada na avaliação do tempo de processamento do modelo e leitura da data do computador.

MSFLIB – “*Library*” do FORTRAN *PowerStation* necessária para elaboração da saída gráfica do modelo.

SUBROTINA TRAVA – É a responsável pelo gerenciamento da permissão de uso do modelo (chave de tempo). Consiste em testes verificando a data de instalação ou execução do modelo e a data atual do computador, conferindo estes valores com os previamente gravados no arquivo binário criptografado “chave.tmp” presente no diretório onde está o arquivo executável do modelo.

SUBROTINA MDASFDT – Esta sub-rotina apresenta a solução da equação da difusão-advecção transiente com solução fundamental dependente do tempo.

SUBROTINA MDASFIT – Esta contempla a solução da equação da difusão-advecção transiente com solução fundamental independente do tempo.

SUBROTINA PGOPT – Esta sub-rotina intrínseca do FORTRAN *PowerStation* é utilizada para elaboração do gráfico. Nela são especificados as dimensões e os limites dos eixos cartesianos.

SUBROTINA PLOTP – Esta sub-rotina intrínseca do FORTRAN *PowerStation* é utilizada para armazenamento dos dados de entrada (resultados do programa MDA) e para construção da saída gráfica.

5.1 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO, FLUXOGRAMA E DESCRIÇÃO DAS SUBROTINAS

Na implementação computacional do modelo MDASFDT são considerados elementos constantes tanto no espaço quanto no tempo.

No arquivo de dados, todos os valores prescritos (potencial, a derivada normal do potencial e convecção) são lidos e armazenados temporariamente num vetor denominado “{valor}”.

O tipo de condições de contorno em cada elemento é dado pelo vetor “{kode}”, que permite formar uma matriz [Fi] com valores de potencial e [Dfi] com valores de fluxo em todos os intervalos de tempo.

A condição de contorno de convecção é mais usual em problemas envolvendo transferência de calor, como no caso de aquecimento em interior de condutos, sendo que em problemas de avaliação de concentração de efluentes em rios esta condição de contorno geralmente não é utilizada.

As matrizes são preenchidas de acordo com o seguinte código:

$$\left. \begin{array}{l} (0) \text{ para potencial prescrito} \\ (1) \text{ para fluxo prescrito.} \\ (2) \text{ para convecção prescrita} \end{array} \right\}$$

As matrizes [Fi] e [Dfi] são preenchidas apenas com os valores prescritos e posteriormente receberão os valores calculados pelo programa.

Os coeficientes das matrizes [G] e [H] são calculados em todos os intervalos de tempo antes do cálculo das incógnitas para um passo de tempo constante, pois independem dos valores de potencial ou fluxo. Porém, os coeficientes de [G] e [H] do

primeiro intervalo de tempo, que multiplicam as incógnitas, são armazenados numa matriz intermediária [C] que possui uma cópia da matriz do sistema em todos os intervalos de tempo. Já os coeficientes que multiplicam valores prescritos são armazenados na matriz [B].

Os coeficientes H_{ij}^k são obtidos a partir das derivadas normais da soluções fundamentais integradas no tempo $p_1^*, p_2^*, p_3^*, \dots, p_{NT}^*$.

No primeiro intervalo de tempo o problema é resolvido como regime permanente, ocorrendo a troca das funções utilizadas devido à integração no tempo. Já nos demais passos de tempo, há necessidade de acrescentar os valores obtidos anteriormente no vetor de termos independentes. Os produtos [H]{U} e [G]{P} em toda a história do tempo são acrescidos, fazendo assim a convolução.

Para a resolução do sistema de equações, os valores da matriz [C] que multiplicam as incógnitas são transferidos para a matriz [A] e os valores prescritos de potencial e fluxo daquele intervalo de tempo são transferidos para um vetor de condições de contorno prescritas [Vpr].

O método de Gauss-Jordan desenvolvido (BREBBIA e DOMINGUEZ, 1989) é utilizado como *solver* para solução do sistema de equações e considera a matriz de coeficientes [A] e o vetor de termos independentes [F] como dados de entrada.

Os valores prescritos no nível de tempo em consideração são multiplicados pelos coeficientes da matriz [B], gerando o termo correspondente à influência do tempo atual do vetor de termos independentes [F], o qual será acrescido de toda a “história” passada da análise. Esta contribuição é calculada com os passos de tempo anteriores, multiplicando-se respectivamente os coeficientes de [H] e [G] pelos valores de potencial e fluxo já obtidos.

Após a solução do sistema de equações, o vetor [F] passa a conter os valores das incógnitas calculados para o intervalo de tempo. De acordo com o código de cada elemento (0,1 ou 2) estes valores serão armazenados nas matrizes de potencial [Fi] e de fluxo [Dfi].

O programa MDASFDT tem por objetivo inicial a resolução de problemas com a equação integral de contorno da difusão-advecção “numericamente”. Devido às dificuldades para se obter uma solução analítica geral desta equação, foi determinado por SOUZA (1999) um método mais adequado para substituição da integral no tempo da solução fundamental dependente do tempo pelo cálculo de áreas sob a curva representativa desta equação, sendo escolhido devido sua precisão o método da quadratura de Gauss.

A singularidade logarítmica existente em problemas de difusão e de difusão-advecção transiente, no primeiro intervalo de tempo, foi resolvida através de uma criteriosa divisão do primeiro intervalo de tempo e o uso da transformada cúbica de Telles, conforme descrito no APÊNDICE B e determinado em SOUZA (1999).

A Figura 6 apresenta o fluxograma do programa MDASFDT e em seguida estão descritas as subrotinas correspondentes.

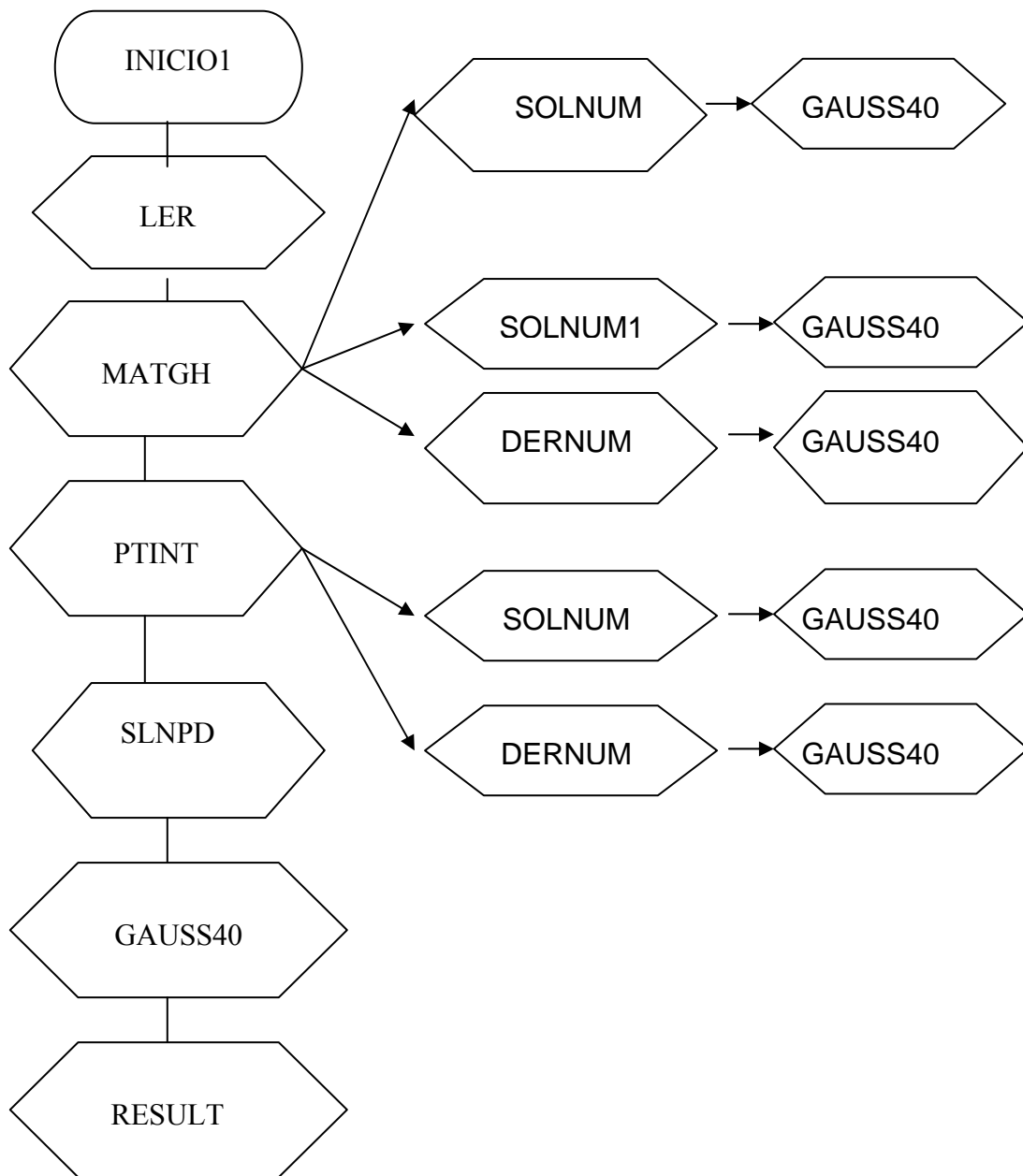


Figura 6 Fluxograma do programa MDASFDT.

SUBROTINA LER – tem a função de ler e carregar os dados gerais do problema para o programa MDASFDT.

SUBROTINA GAUSS40 – Esta sub-rotina inicializa coordenadas e pesos de Gauss que irão ser utilizados nas sub-rotinas MATGH, SOLNUM, DERNUM e SOLNUM1 tendo opção de até 40 pontos de Gauss.

SUBROTINA MATGH – Esta sub-rotina tem por finalidade gerar os coeficientes de influência das Matrizes $[H]$ e $[G]$, fazendo uso das sub-rotinas “solnum”, “dernum” e “solnum1”.

SUBROTINA SOLNUM – Esta sub-rotina resolve numericamente a solução fundamental dependente do tempo em substituição à integração analítica desta no tempo através do cálculo de área sob a curva da equação correspondente pelo método de Gauss, em trechos posteriores à primeira parte da divisão do primeiro intervalo de tempo.

SUBROTINA SOLNUM1 – Apresenta implementação similar à sub-rotina SOLNUM, porém na primeira parte da divisão do primeiro intervalo de tempo faz uso da transformada de Telles para solucionar a questão da singularidade logarítmica.

SUBROTINA DERNUM – Esta sub-rotina resolve numericamente a derivada da solução fundamental dependente do tempo em substituição à integração analítica desta no tempo através do cálculo de área sob a curva da equação correspondente pelo método de Gauss.

SUBROTINA SLNPD – Esta é utilizada para resolução do sistema de equações.

SUBROTINA PTINT – Esta sub-rotina gera os coeficientes de influência das Matrizes $[H]$ e $[G]$ para pontos de colocação situados em pontos internos utilizando para tal fim as sub-rotinas “solnum” e “dernum”.

SUBROTINA RESULT – Grava os resultados nos arquivos de saída e armazena as informações de potencial e de fluxo que serão transferidos para o MDASFIT.

5.2 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO, FLUXOGRAMA E DESCRIÇÃO DAS SUBROTINAS

A implementação computacional do Método dos Elementos de Contorno para solução da equação da difusão-advecção transiente utilizando solução fundamental independente do tempo faz uso do Método das Diferenças Finitas para o estabelecimento de um processo de marcha no tempo.

Partindo-se de um valor de potencial conhecido no instante inicial, o avanço no tempo é obtido resolvendo numericamente a equação da solução fundamental independente do tempo. Valores de potencial no instante seguinte são então calculados num número suficiente de pontos internos, que são fornecidos como condição inicial para análise do tempo seguinte.

Sendo um processo dinâmico a idéia principal é calcular as incógnitas de contorno (potencial e derivada normal no contorno) e potencial em pontos internos simultaneamente.

O programa contempla as soluções em regime permanente e em regime transiente.

O código do programa escrito utiliza alocação dinâmica de *arrays*, o que permite que estes sejam alocados em tempo real de execução, evitando seus prévios sub e superdimensionamentos. As matrizes com as integrais de contorno e domínio são calculadas uma única vez e armazenadas para serem utilizadas em todos os níveis de tempo da análise.

Considere a equação integral da difusão representada na forma matricial e aqui repetida por conveniência.

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} \tilde{H}^{cc} & \tilde{H}^{ci} \\ \tilde{H}^{ic} & \tilde{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} \tilde{M}^{cc} & \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{M}^{ic} & \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} = \\
 & \begin{bmatrix} \tilde{G}^{cc} & \tilde{0} \\ \tilde{G}^{ic} & \tilde{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{p}^c \\ \tilde{0} \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} \begin{bmatrix} \tilde{M}^{cc} & \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{M}^{ic} & \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix}_t \quad (149)
 \end{aligned}$$

sendo que os superíndices c e i designam , respectivamente, o contorno e o domínio. A utilização de duplo superíndice pode ser interpretada do seguinte modo: O primeiro superíndice corresponde à posição do ponto fonte, o segundo, à posição do ponto campo. A equação (149) em forma matricial pode ser escrita da seguinte forma:

$$[H] \{U\}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} [M] \{U\}_{t+\Delta t} = [G] \{P\}_{t+\Delta t} + \frac{(Pe+k)}{\Delta t} [M] \{U\}_t \quad (150)$$

A matriz $[H]$ é formada a partir das submatrizes \tilde{H}^{cc} , \tilde{H}^{ci} , \tilde{H}^{ic} , \tilde{I} . Os coeficientes de influência da submatriz \tilde{H}^{ci} são todos nulos. Os coeficientes de influência da submatriz \tilde{H}^{ic} são obtidos utilizando-se a mesma subrotina de integração no contorno, utilizada para cálculo da submatriz \tilde{H}^{cc} , permutando-se apenas o ponto fonte que agora é o ponto interno. A sub-matriz identidade \tilde{I} representa os coeficientes $c(\xi)=1$ associados aos pontos internos.

A matriz $[M]$ é formada das submatrizes \tilde{M}^{cc} , \tilde{M}^{ci} , \tilde{M}^{ic} , \tilde{M}^{ii} . Cada célula que é integrada contribui com uma submatriz \tilde{m}_{ij} que entra na formação da matriz $[M]$. O “espalhamento” dos elementos da submatriz \tilde{m}_{ij} na matriz $[M]$ se faz pelas conectividades, que são dados de entrada do programa, cujo detalhamento se faz em seguida.

$$\tilde{m}_{ij} = \int_{\Omega_j} [\eta_1 u^* \quad \eta_2 u^* \quad \eta_3 u^*] d\Omega \quad (151)$$

Para um ponto de colocação sobre o nó i , a contribuição para a i -ésima linha da matriz $[M]$, de uma j -ésima célula pertencente ao domínio discretizado Ω , quando integrada, com as conectividades descritas pela Figura 8, seria como mostrado pela Figura 7.

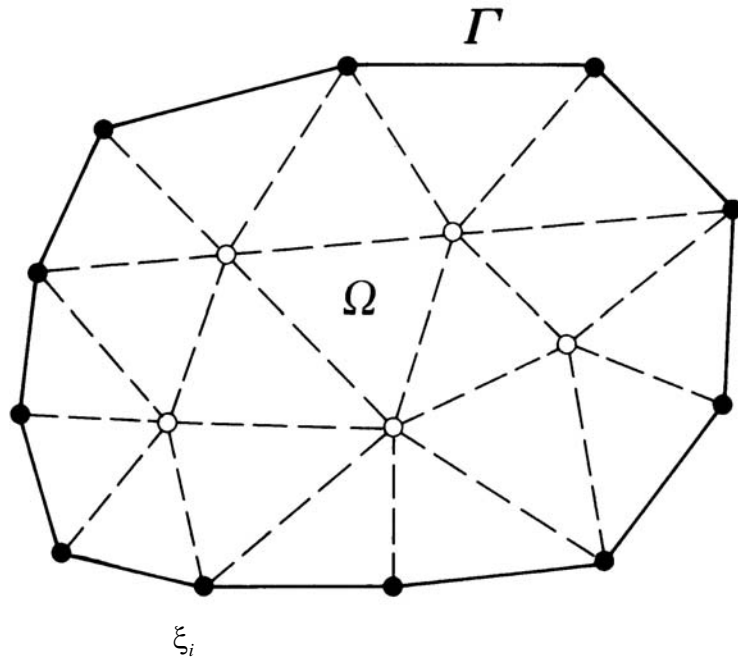
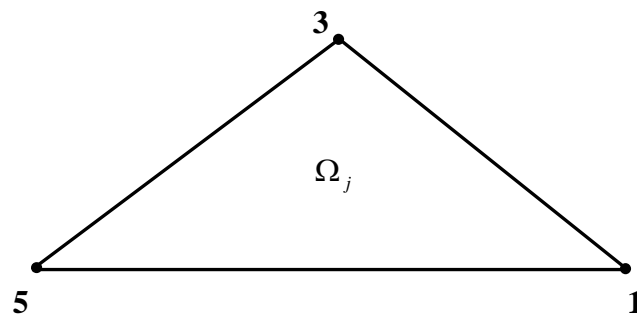


Figura 7 Ponto de colocação nos nós do contorno e pontos internos.



• ξ_i

Figura 8 Conectividades numa célula individual do domínio.

Naturalmente que quando se integra todas as células tem-se o preenchimento de toda i -ésima linha de $[M]$. Fazendo-se variar o ponto de colocação para os demais nós, obtém-se o preenchimento total da matriz.

Utilizaram-se os identificadores NNOG, NH, A, NPI, NECEL, NOC1, NOC2 e NOC3 para designar, respectivamente, o número de nós geométricos do contorno, número de pontos de integração de Hammer, área da célula, número de pontos internos, número de elementos de células internas, conectividade do primeiro nó da célula, conectividade do segundo nó da célula e conectividade do terceiro nó da célula.

Pode-se ter uma idéia de como gerar a matriz $[M]$ escrevendo-se um *loop* triplo conforme a seguir, onde estão escritos apenas os comandos mais importantes, de como distribuir os elementos das submatrizes m_{ij} na matriz $[M]$.

DO I=1,(NNOG + NPI)

DO J=1,NECEL

DO K=1,NH

$$u^*(\xi, x) = -\frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \cdot \ln(\mu r / 2) \quad (152)$$

$$M(i, noc1) = M(i, noc1) + \eta_1(k,1) * u^* * pesoha(k) * A$$

$$M(i, noc2) = M(i, noc2) + \eta_2(k,2) * u^* * pesoha(k) * A$$

$$M(i, noc3) = M(i, noc3) + \eta_3(k,3) * u^* * pesoha(k) * A$$

END DO

END DO

END DO

Aqui como no Método dos Elementos Finitos estabelece-se uma correspondência entre a numeração local e global em cada elemento de célula. Desse modo, obtém-se para $[M]$ uma matriz cheia quadrada de ordem (NNOG+NPI).

A Figura 9 apresenta o fluxograma para o MDASFIT e posteriormente estão descritas as subrotinas deste modelo.

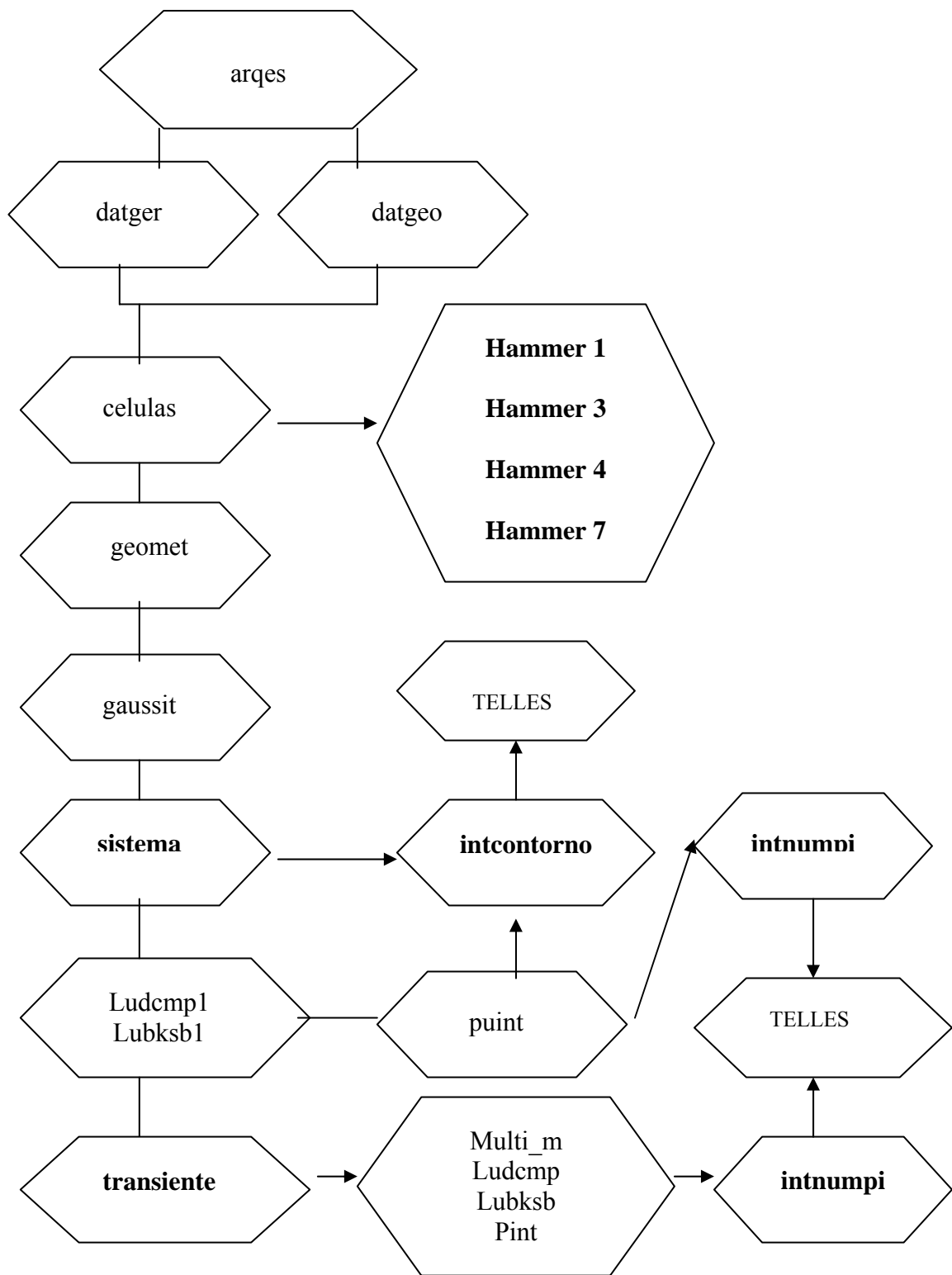


Figura 9 Fluxograma do programa MDASFIT.

SUBROTINA ARQES – Possui a finalidade de abrir os arquivos de entrada e saída de dados do programa, que por sua vez são escritos num outro arquivo previamente aberto denominado “INICIO2.DAT” que os armazena. Utilizando este procedimento é reduzido o número de intervenções no programa fonte MDASFIT que resultam em compilações desnecessárias.

SUBROTINA DATGER – Esta tem a função de ler e carregar o programa principal com os dados gerais do programa que servirão de indexadores para os comandos subsequentes.

SUBROTINA DATGEO – Tem a função de ler e carregar o programa principal com os dados do contorno tais como: coordenadas e incidências dos nós, KODE (vetor que armazena o código 0, 1 ou 2, conforme seja potencial, derivada normal ou convecção prescrito), valor de condição de contorno. Também as coordenadas dos pontos internos, e os dados das células tais como: coordenadas dos nós e conectividades. Ainda neste procedimento é lido o vetor condição inicial $\{B\}$.

SUBROTINA GEOMET – Calcula e armazena os parâmetros da geometria tais como comprimento dos elementos e vetor normal. Também é feita a transposição da condição de contorno de elementos para nós, apenas para o instante inicial.

SUBROTINA CELULAS – Gera a Matriz $[M]$ a partir de integrações de Hammer em células triangulares lineares no domínio.

SUBROTINA GAUSSIT – Esta sub-rotina incorpora as coordenadas e pesos de Gauss que irão ser utilizados na sub-rotina SISTEMA.

SUBROTINA SISTEMA – Esta tem por finalidade gerar os coeficientes de influência das Matrizes $[H]$ e $[G]$ e posicioná-los na matriz T do sistema. Para atingir este objetivo chamará a sub-rotina “INTCONTORNO”, quando da integração dos elementos de contorno. Neste procedimento ainda é calculado os valores de $c(\xi)$ pela soma dos demais elementos não pertencentes ao núcleo singular da linha da matriz.

SUBROTINA LUDCMP – É uma sub-rotina integrante do solver que faz a decomposição triangulação da matriz T do sistema.

SUBROTINA LUBKSB – Faz a retro-substituição do vetor $\{F\}$.

SUBROTINA PUINT – Esta sub-rotina gera os coeficientes de influência das Matrizes $[H]$ e $[G]$ para pontos de colocação situados em pontos internos, e aloca-os diretamente na Matriz $[T]$ do sistema.

SUBROTINA TRANSIENTE – Consiste de um *loop* transiente para a solução numérica do sistema de equações em cada intervalo de tempo discreto. Faz-se a reordenação do sistema a partir das condições de contorno que podem variar com o tempo. Em seguida, as sub-rotinas “LUDCMP” e “LUBKSB” para solução do tempo atual. Redistribui o vetor solução $\{F\}$ conforme a condição de contorno prescritas dos nós que estão armazenados no vetor “KODEF”. Desse modo os potenciais do tempo atual dado pelo vetor $\{U\}$ são copiados para o vetor condição inicial $\{B\}$ para o próximo intervalo de tempo. Ainda nesta sub-rotina chama-se o procedimento PINT que calcula os fluxos nos pontos internos.

CAPÍTULO 6 - SIMULAÇÕES

As formulações e implementações apresentadas nos capítulos 2, 3, 4 e 5 foram utilizadas em alguns exemplos de difusão e de difusão-advecção, onde a solução numérica por elementos de contorno é comparada com a solução analítica correspondente ou com as encontradas na literatura através de gráficos e tabelas. Foi utilizado para todas as aplicações deste trabalho um computador PENTIUM(R) IV CPU 2.66 GHz com 512 MB de memória RAM.

As seções (6.1) e (6.2) apresentam a simulação da difusão-advecção transiente unidimensional considerando apenas SFDT, SFIT e a solução combinada, com variáveis adimensionalizadas, efetuando-se comparações com a solução analítica referente à equação (152) apresentada por LIM, CHAN e CHANDRA (1994), com a finalidade de determinar a precisão dos modelos.

Objetivando avaliar a potencialidade e utilidade do modelo desenvolvido nesse trabalho em problemas térmicos, apresenta-se nas seções (6.3) e (6.4) a simulação da transferência de calor com condição de contorno de convecção em um conduto aquecido no seu interior e considerado perfeitamente isolado externamente. São realizadas comparações entre os resultados obtidos pelo modelo MDA e os calculados pelo modelo de difusão MD determinado em SOUZA e AZEVEDO (2003).

O uso do modelo MDA para simulações de transporte de efluente conservativo é apresentado nas seções (6.5) a (6.8), para o Rio Paraíba do Sul no trecho situado entre Volta Redonda e Barra do Piraí, e entre Volta Redonda e Santa Cecília. Os resultados do modelo são comparados com a solução analítica e os obtidos por BÜGE (1990).

6.1 DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE UNIDIMENSIONAL

Nesta seção estuda-se a difusão-advecção térmica, cujos dados estão adimensionalizados, para uma região quadrada de lado igual a 1.0, onde as condições de contorno e a discretização espacial para 40 elementos de contorno igualmente espaçados são mostradas na Figura 10.

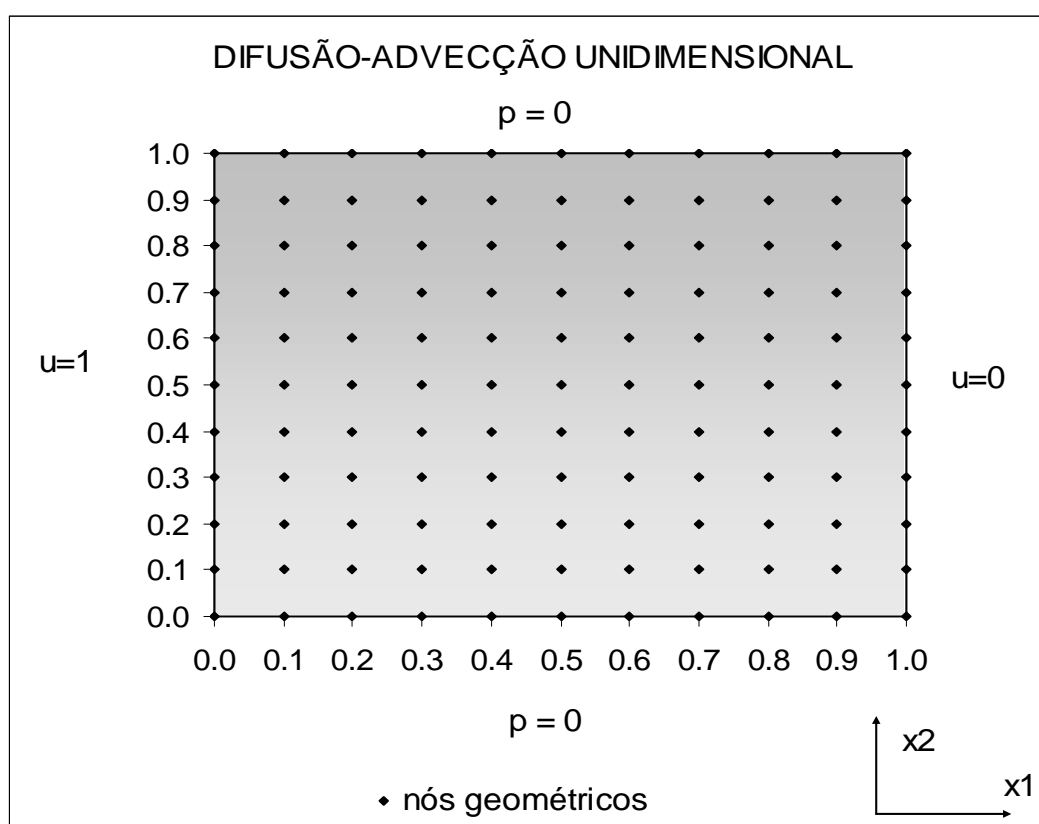


Figura 10 condições de contorno e informações geométricas.

Para discretização espacial, utilizou-se uma malha uniforme e para discretização temporal utilizou-se intervalo de tempo constante de 0,01 (para $Pe=0$ e 5) e 0,005 (para $Pe=20$), onde o arquivo de dados de entrada para o modelo que utiliza solução

fundamental dependente do tempo apresenta 40 elementos de contorno igualmente distribuídos e 81 pontos internos. Já no arquivo de dados de entrada para o modelo que utiliza solução fundamental independente do tempo têm-se 44 elementos de contorno igualmente distribuídos (dos quais 4 são nós duplos), 81 pontos internos, 125 nós de células, 200 elementos de células com discretização espacial de 0,1 e sendo considerado que a condição inicial é nula, embora este modelo permita a utilização de condição inicial não nula.

São analisadas três situações:

- $Pe = 0; \Delta t=0,01; \Delta X=0,1;$
- $Pe = 5; \Delta t=0,01; \Delta X=0,1;$
- $Pe = 20; \Delta t=0,005; \Delta X=0,1.$

Os resultados do MDA são comparados com os obtidos analiticamente pela equação (153), cujas variáveis estão todas adimensionalizadas, que corresponde a solução analítica deste exemplo apresentada por LIM, CHAN e CHANDRA (1994). As figuras 12, 13, 14, 15, 16 e 17 apresentam estas comparações.

$$u = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \pi \left(1 - e^{-\left((Pe^2 / 4) + n^2 \pi^2 \right) t} \right) e^{(Pe x / 2)} \text{sen}(n \pi x)}{(Pe^2 / 4) + n^2 \pi^2} \quad (153)$$

Objetivando avaliar a performance do modelo MDA com um menor refinamento utilizou-se também uma discretização espacial com 24 elementos lineares, com intervalos de tempo de 0.01, tendo sido dividido o domínio em 72 células triangulares lineares, conforme está apresentado na Figura 11.

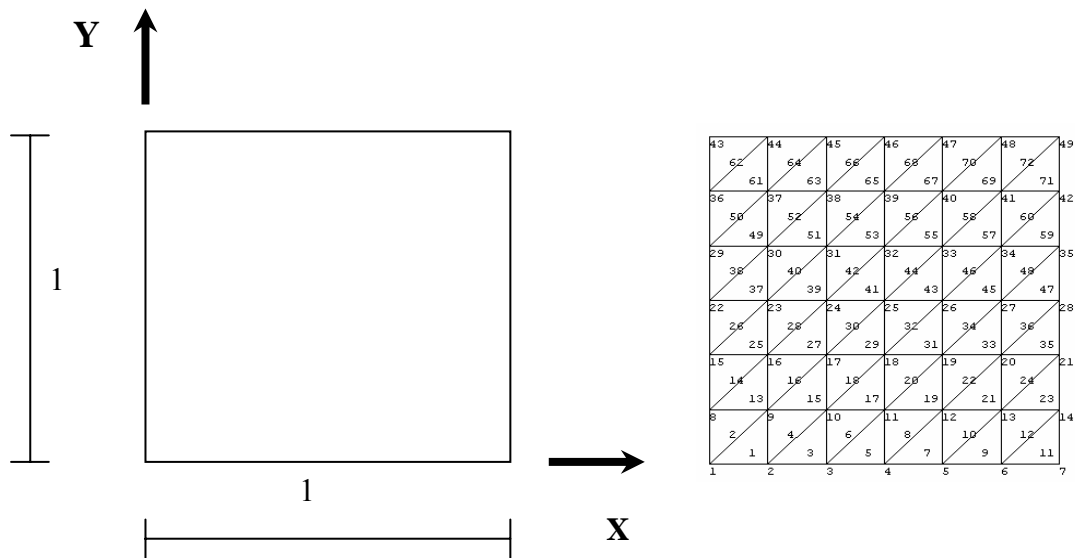


Figura 11 Discretização com 24 elementos de contorno.

6.2 RESULTADOS DA ANÁLISE UNIDIMENSIONAL

Para avaliar os resultados obtidos com o modelo MDA, utilizando 40 pontos de Gauss no MDASFDT e com 7 pontos de Hammer no MDASFIT, foi analisada a distribuição de potencial em alguns pontos pertencentes ao domínio e próximos aos pontos de maior potencial ou de aplicação do choque térmico. As figuras 12 a 20 apresentam estes resultados variando o número de Péclet de zero (0) até vinte (20).

Os resultados com número de Péclet igual a 5 foram utilizados para avaliar o erro do modelo MDA, e estão apresentados na Tabela 2, através do desvio ou raiz quadrada do erro médio quadrático dado pela equação (48), sendo feito também uma análise na direção x e ao longo do tempo, cujos resultados são apresentados na Tabela 3 para $Pe=5$, nas figuras 18, 19 e 20 para $Pe=20$, e nas figuras 21, 22 e 23 para $Pe=0$. Estes resultados permitem concluir que deve-se passar a utilizar a forma combinada de soluções fundamentais nas demais análises deste trabalho.

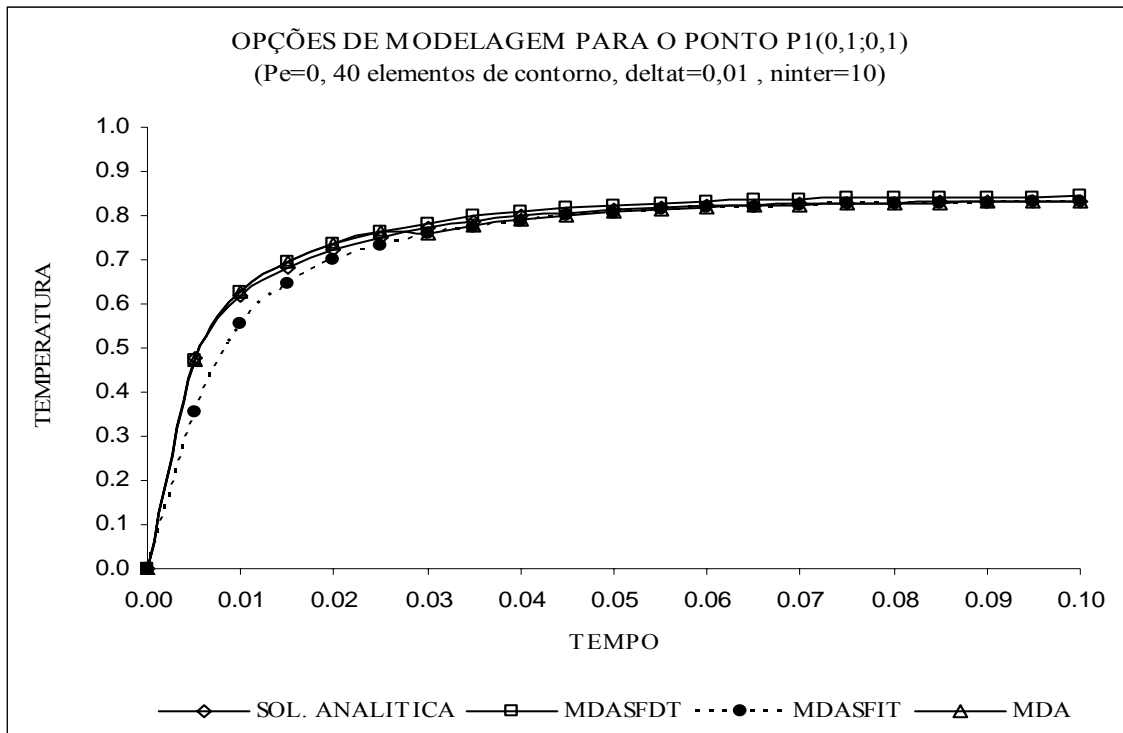


Figura 12 Análise para número de Péclet nulo no ponto P1(0,1;0,1).

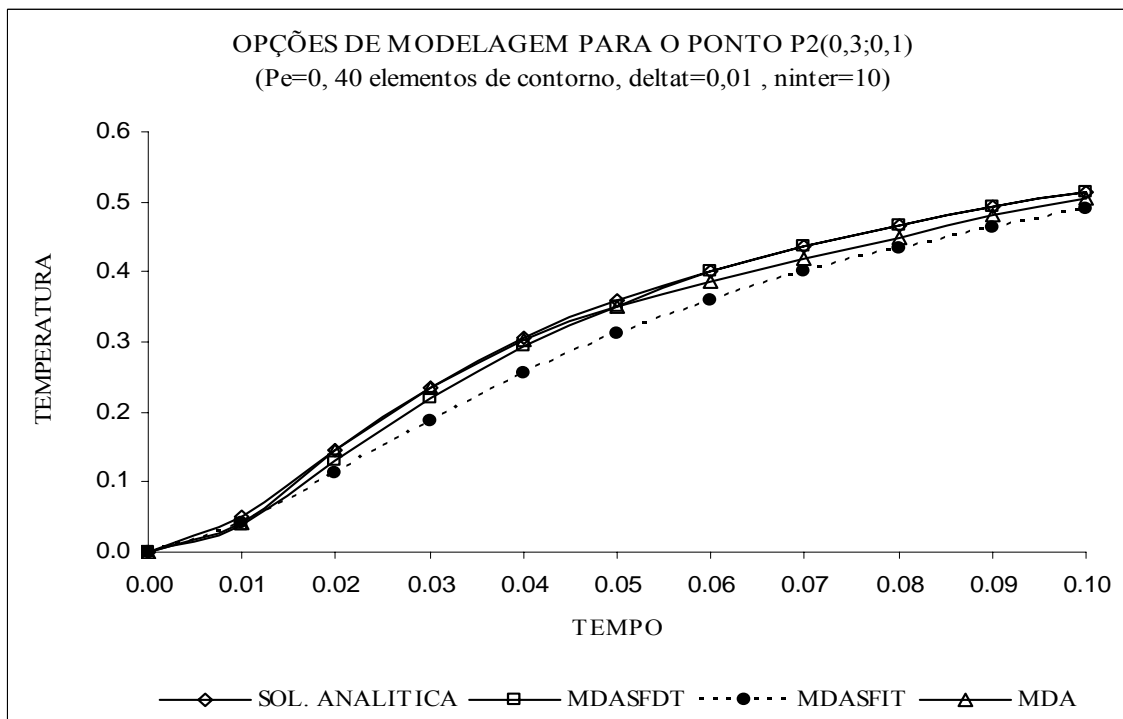


Figura 13 Análise para número de Péclet nulo no ponto P2(0,3;0,1).

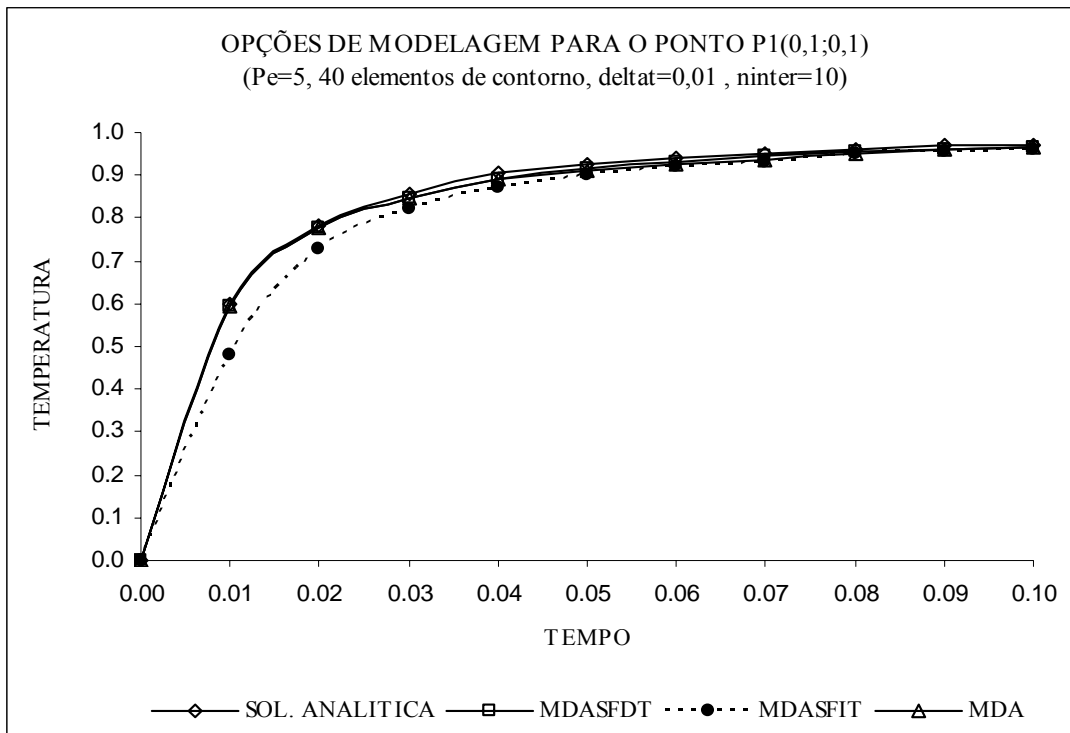


Figura 14 Análise para número de Péclet igual a 5 no ponto P1(0,1;0,1).

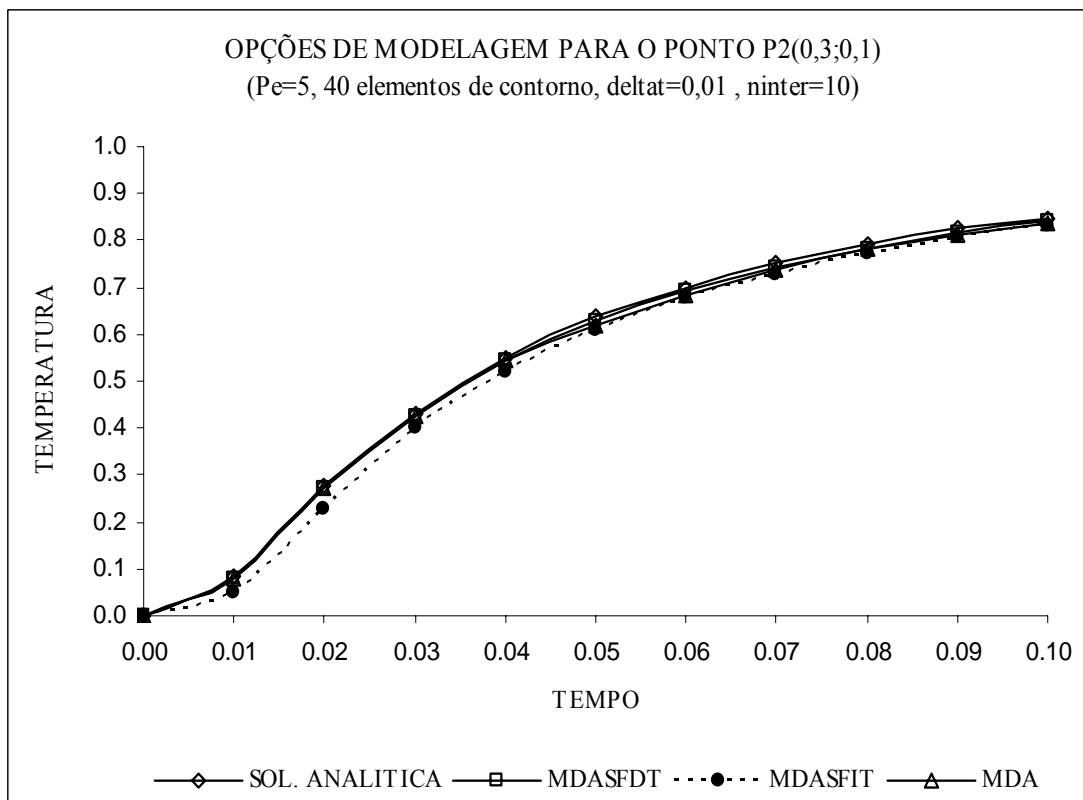


Figura 15 Análise para número de Péclet igual a 5 no ponto P2(0,3;0,1).

Tabela 2 - Desvio entre o MDA e o analítico a cada passo de tempo para $Pe = 5$.

Número de Péclet	tempo	Desvio
5	0,01	0,0208
5	0,03	0,0123
5	0,05	0,0086
5	0,07	0,0076
5	0,09	0,0072

Tabela 3 - Comparação entre os resultados analíticos e os obtidos pelo MDA Para $Pe=5$.

X	T=0,01 analítico	T=0,01 (MDA)	T=0,03 analítico	T=0,03 (MDA)	T=0,05 analítico	T=0,05 (MDA)	T=0,07 analítico	T=0,07 (MDA)	T=0,09 analítico	T=0,09 (MDA)
0,05	0,800	0,745	0,919	0,911	0,952	0,952	0,967	0,970	0,976	0,980
0,15	0,400	0,333	0,730	0,705	0,840	0,829	0,893	0,889	0,924	0,923
0,25	0,136	0,103	0,510	0,487	0,697	0,680	0,793	0,784	0,852	0,847
0,35	0,028	0,021	0,321	0,296	0,540	0,520	0,675	0,662	0,762	0,754
0,45	0,003	0,003	0,171	0,157	0,389	0,369	0,547	0,532	0,659	0,648
0,55	0	0	0,083	0,072	0,259	0,242	0,421	0,405	0,548	0,536
0,65	0	0	0,033	0,029	0,158	0,146	0,306	0,291	0,435	0,422
0,75	0	0	0,011	0,010	0,088	0,080	0,207	0,195	0,325	0,312
0,85	0	0	0,003	0,003	0,044	0,038	0,124	0,114	0,213	0,200
0,95	0	0	0	0	0,014	0,010	0,046	0,037	0,083	0,071
1,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

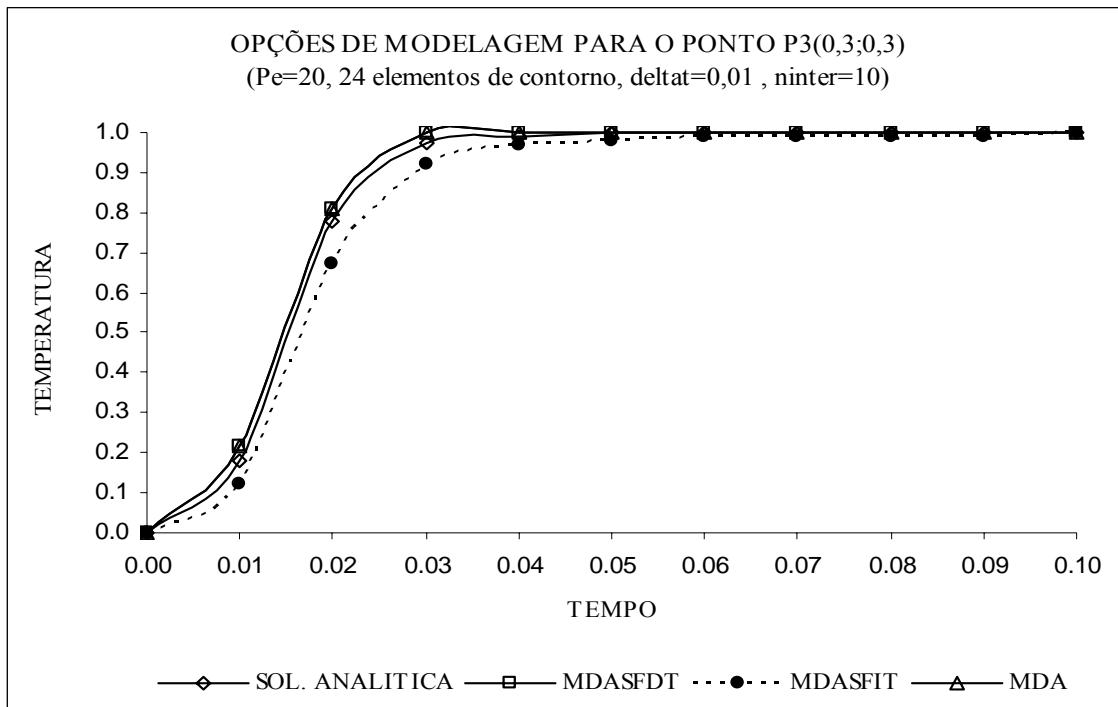


Figura 16 Análise para número de Péclet igual a 20 no ponto P3(0,3;0,3).

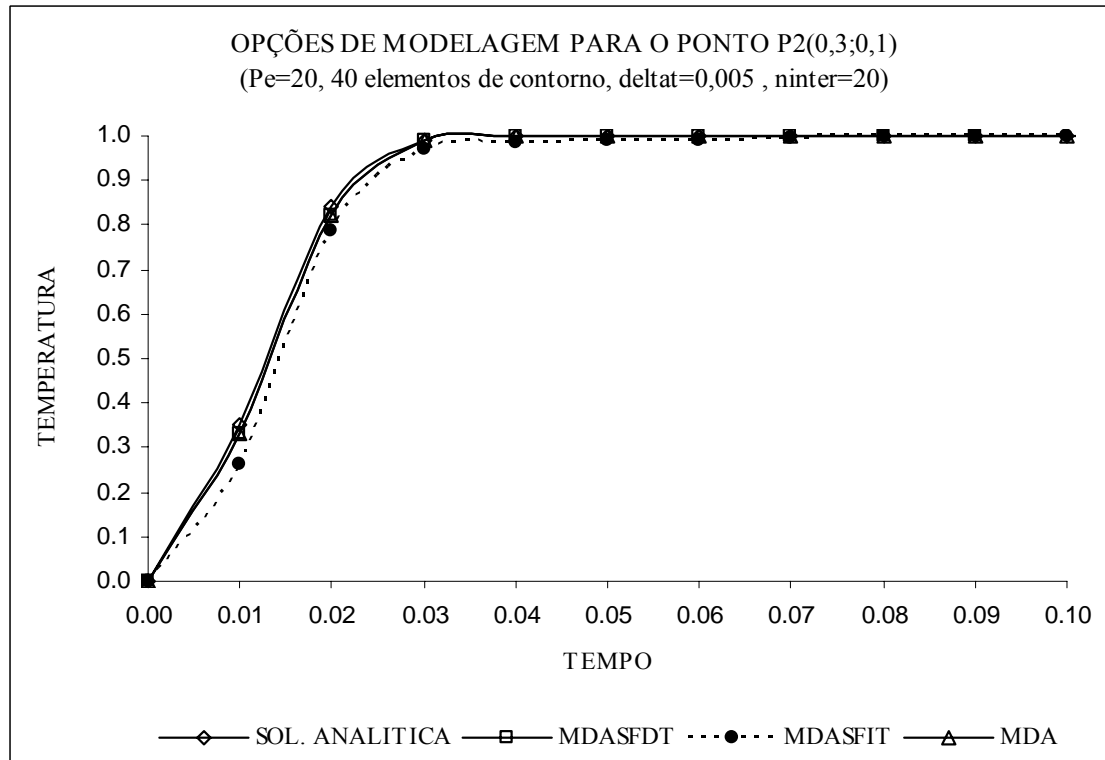


Figura 17 Análise para número de Péclet igual a 20 no ponto P2(0,3;0,1).

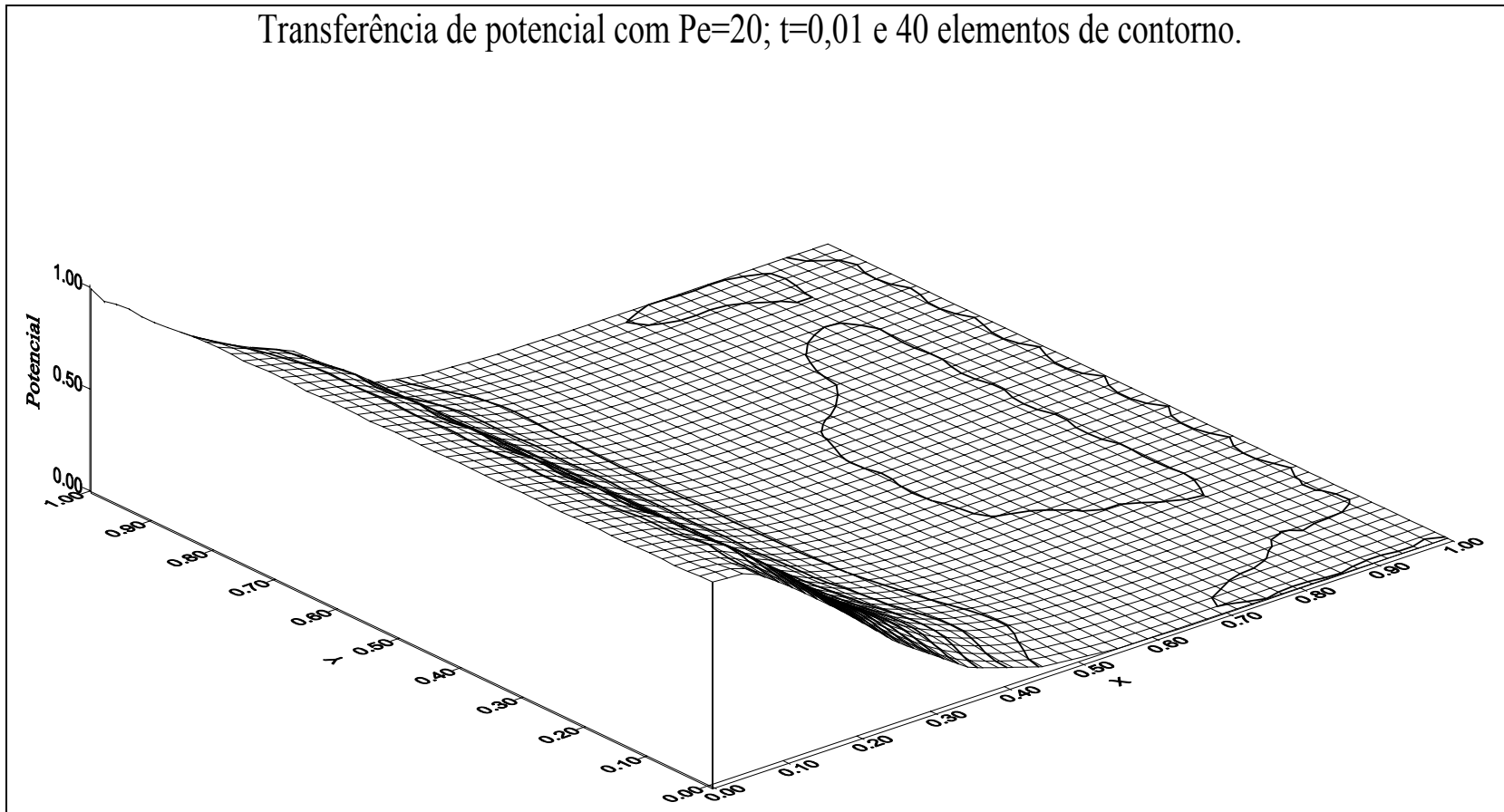


Figura 18 Análise com Péclet igual a 20, após $t=0,01$.

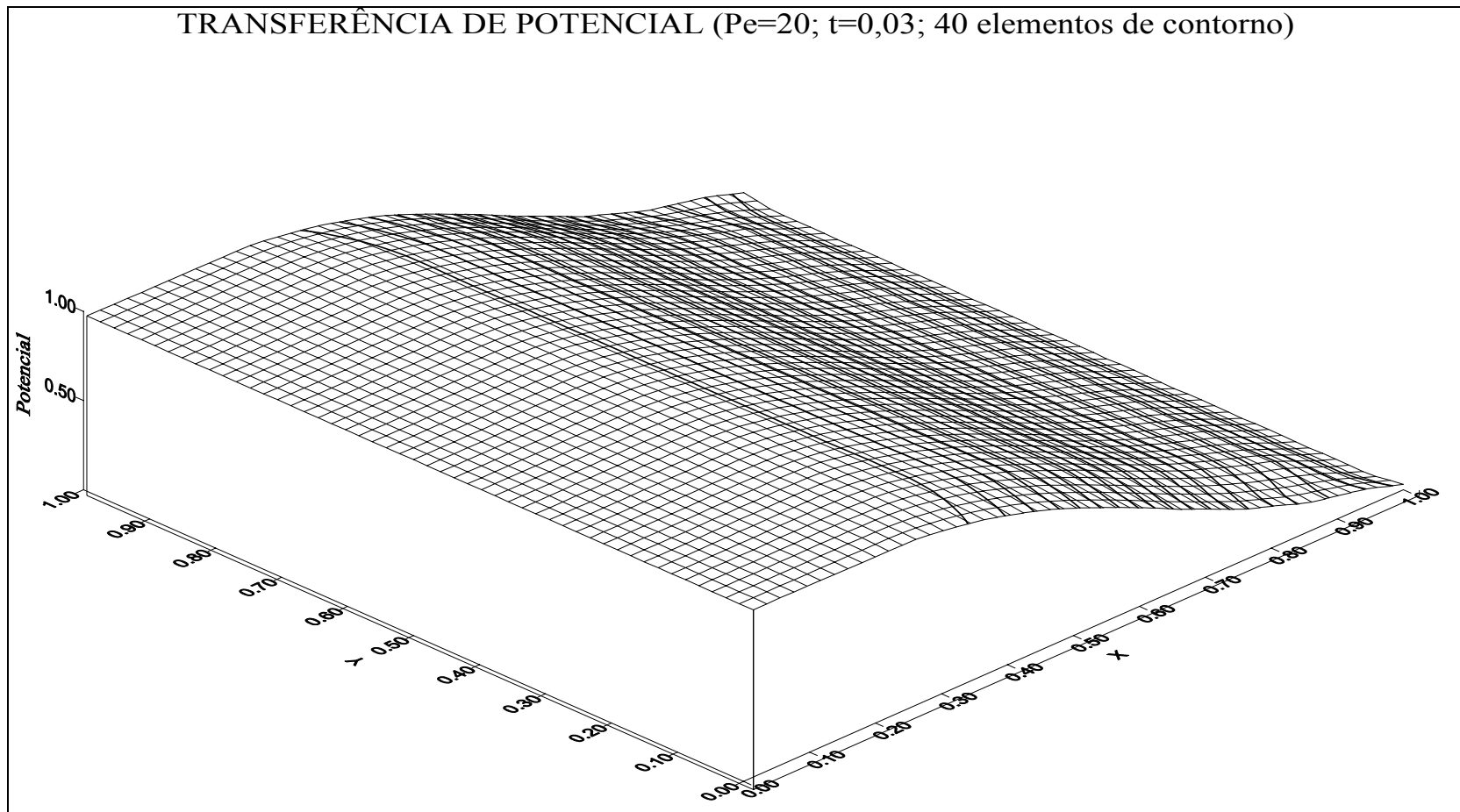


Figura 19 Análise com Péclet igual a 20, após t=0,03.

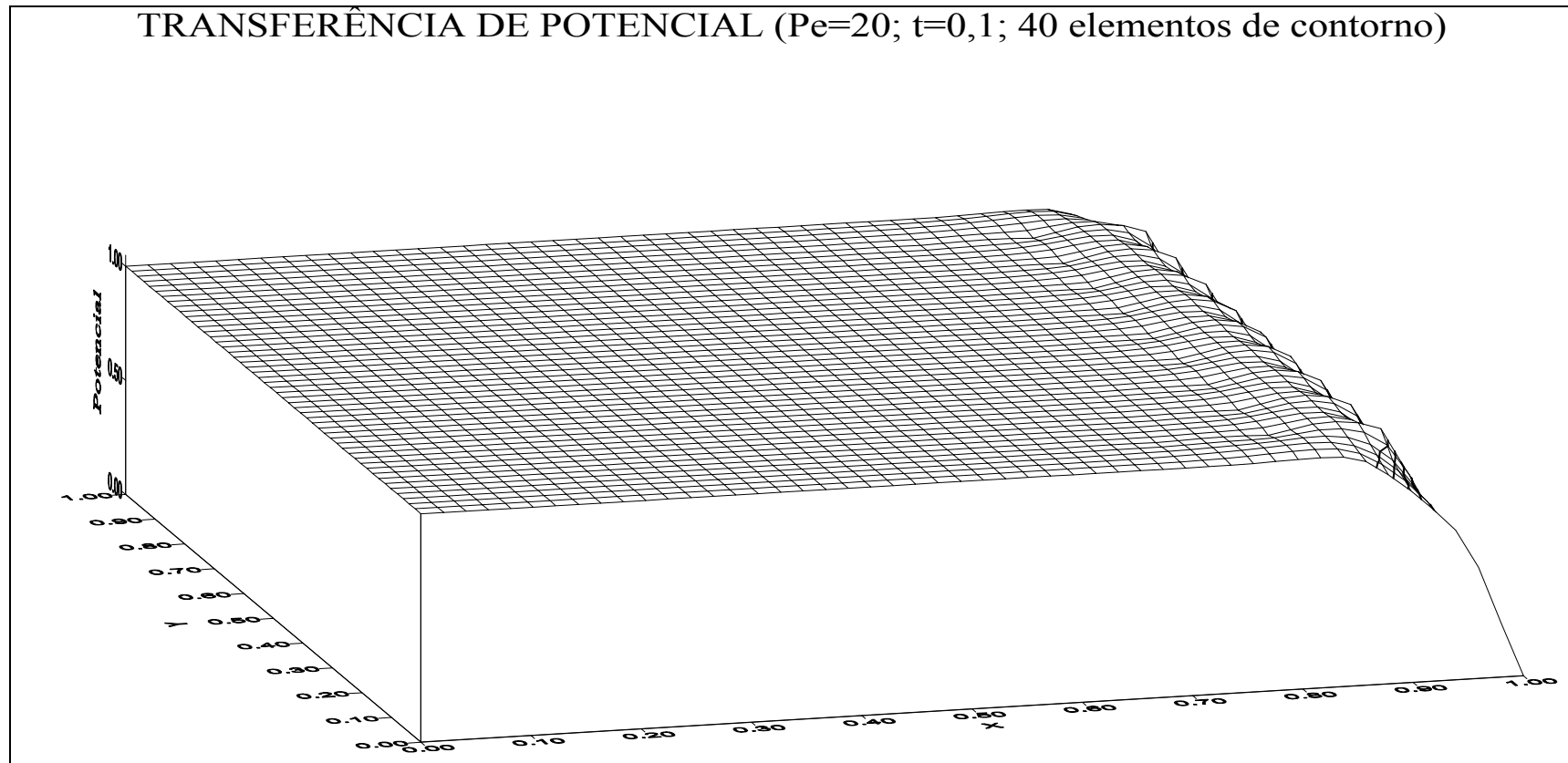


Figura 20 Análise com Péclet igual a 20, após t=0,1.

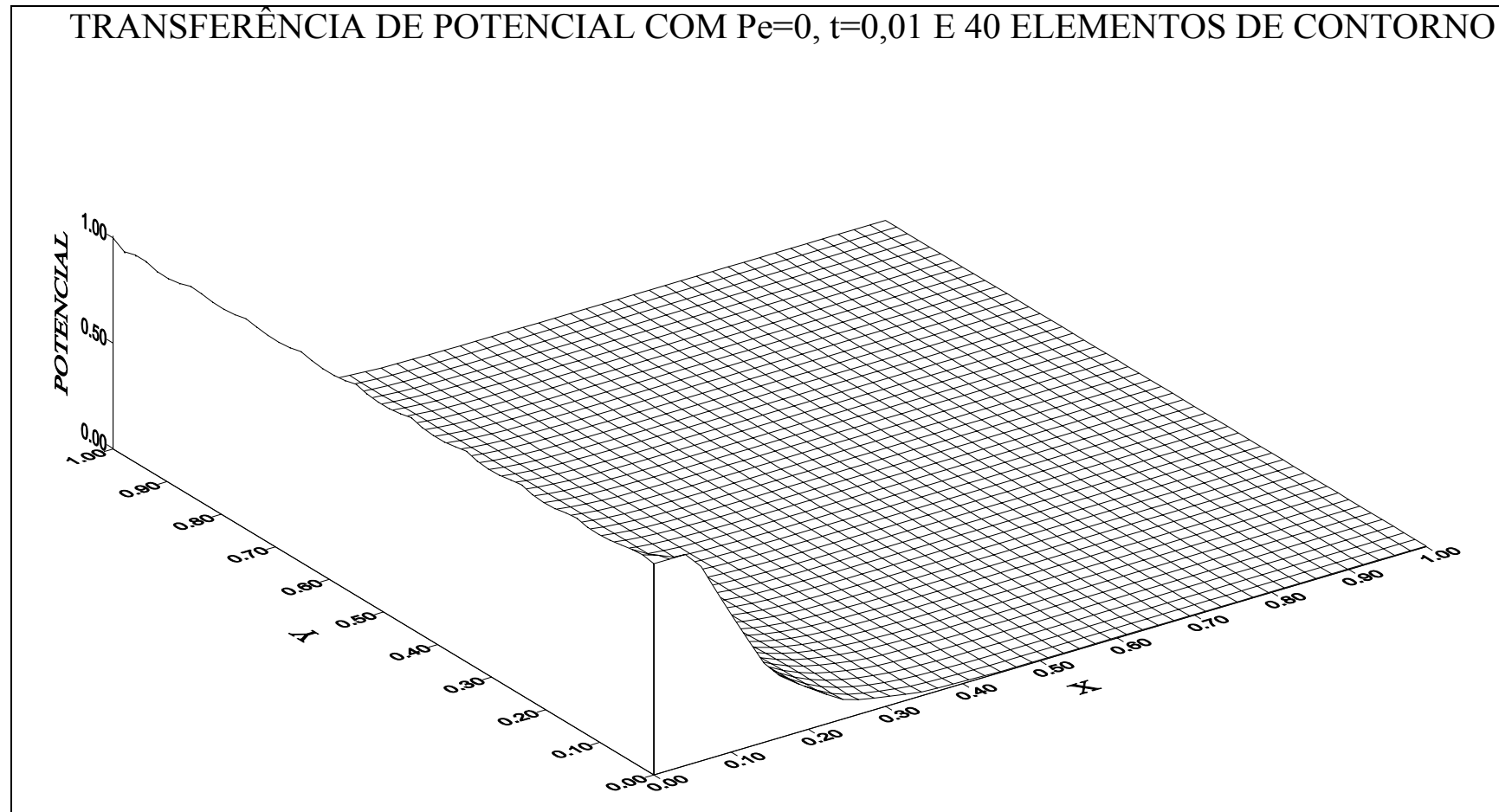


Figura 21 Análise com Péclet igual a 0, após $t=0,01$.

TRANSFERÊNCIA DE POTENCIAL COM $Pe=0$, $t=0,03$ E 40 ELEMENTOS DE CONTORNO

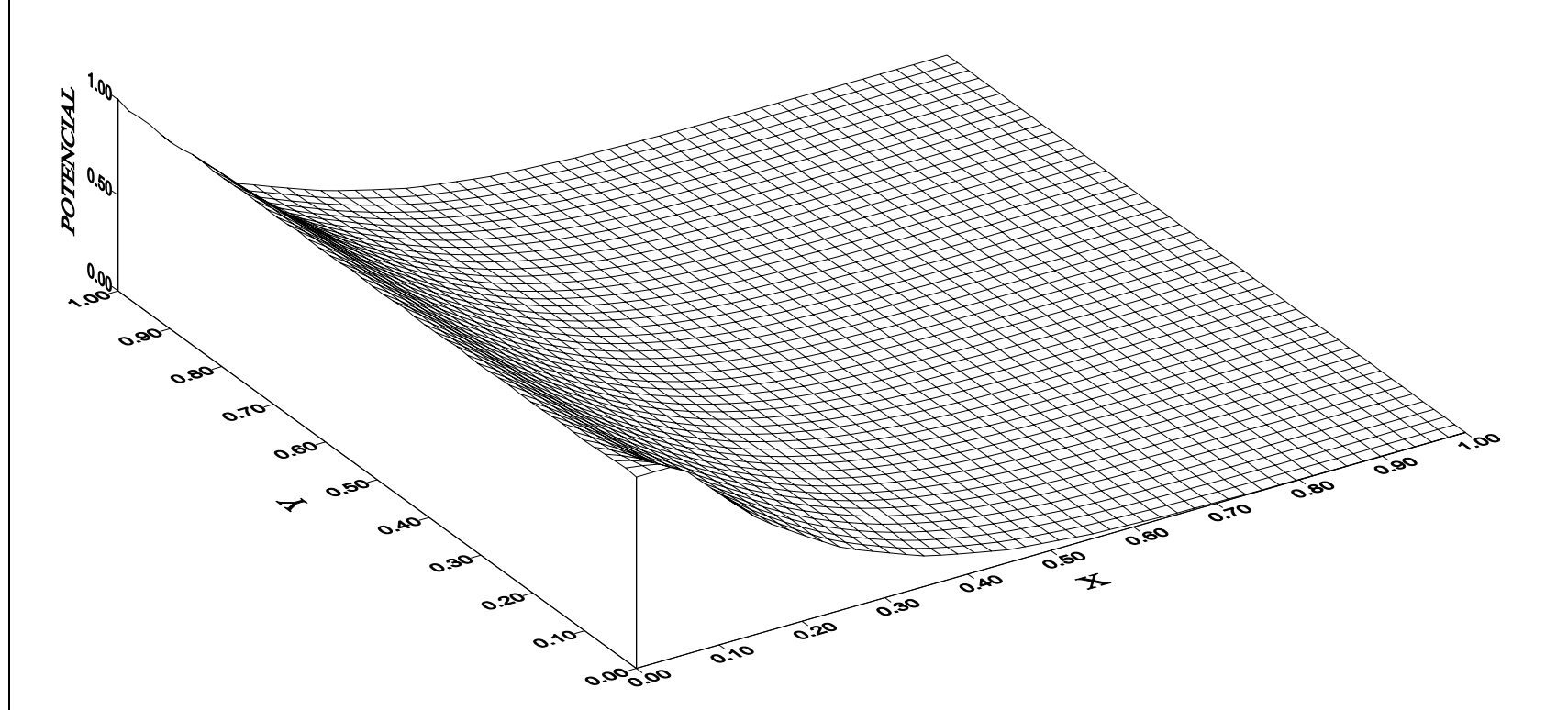


Figura 22 Análise com Péclet igual a 0, após $t=0,03$.

TRANSFERÊNCIA DE POTENCIAL COM $Pe=0$, $t=0,1$ E 40 ELEMENTOS DE CONTORNO

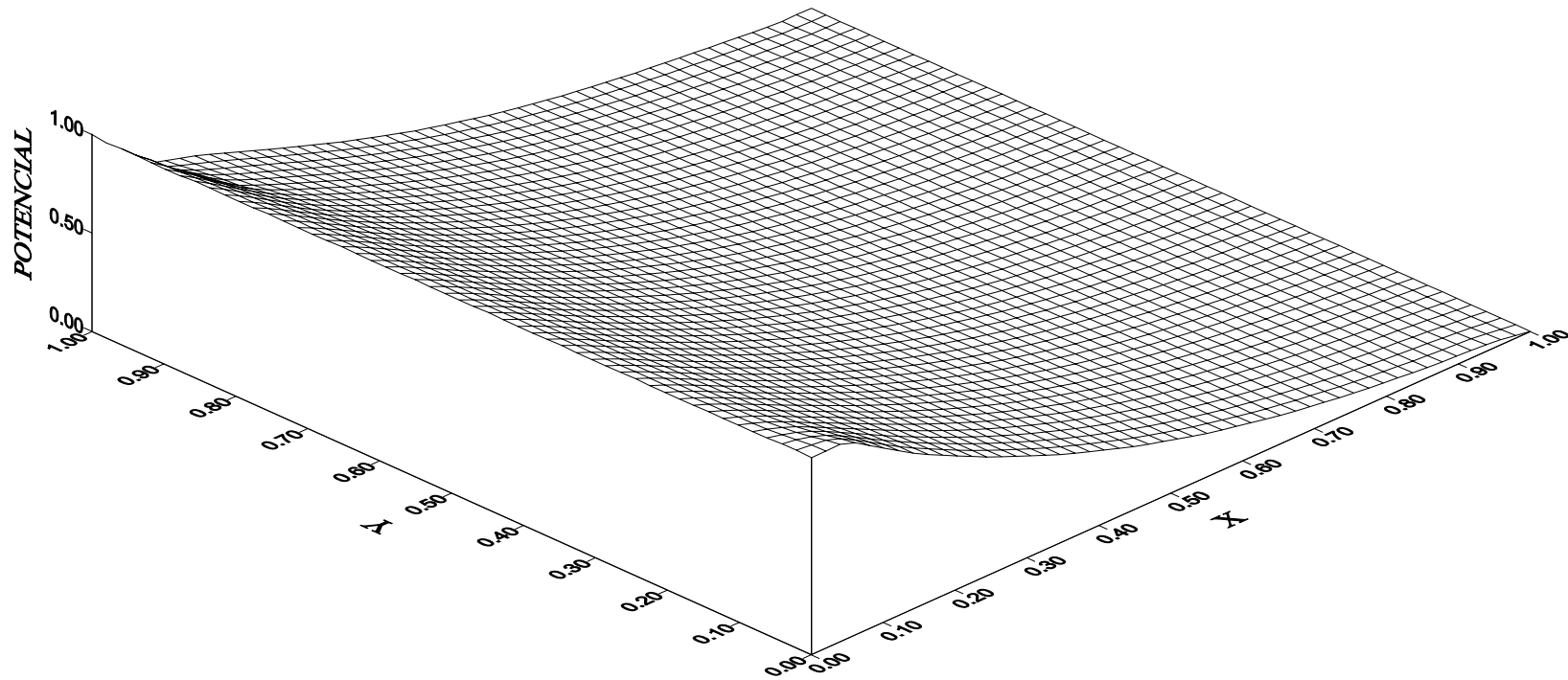


Figura 23 Análise com Péclet igual a 0, após $t=0,1$.

6.3 TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM CONDIÇÃO DE CONTORNO DE CONVECÇÃO EM CONDUTO

Nesta seção avalia-se a transferência de calor por condição de contorno de convecção em um conduto aquecido em seu interior e isolado termicamente na face externa. A velocidade de fluxo no domínio (entre as faces da tubulação) é considerada nula, portanto tem-se um problema puramente difusivo e para a correta utilização do modelo de difusão-advecção transiente é necessário e suficiente atribuir zero (0) ao número de Péclet.

O modelo computacional MDA utilizado nesta simulação teve seus resultados comparados com os calculados por SOUZA e AZEVEDO (2003) com o modelo computacional MD (modelo de difusão transiente bidimensional, com solução fundamental dependente e independente do tempo).

- **Características físicas:**

Coefficiente de convecção: $h_c = 43,50 \text{ kw/m}^2 \text{ }^\circ\text{K}$

Choque térmico: $U_c = 170,0 \text{ }^\circ\text{K}$

Coefficiente de difusividade: $k = 0,02077 \text{ kw/(m }^\circ\text{K)}$

- **Dados Geométricos:**

Diâmetro interno: $4'' = 101,6 \text{ mm}$;

Espessura: $0,53'' = 13,5 \text{ mm}$;

Espessura do isolamento: $2 \frac{1}{2}'' = 63,5 \text{ mm}$.

- **Hipóteses básicas para modelagem de condução de calor transiente unidimensional na tubulação:**

Não há estratificação térmica;

Isolamento externo considerado perfeito;

Perfil de temperaturas invariante ao longo do eixo da tubulação;

Geometria considerada bidimensional.

- **Condições de contorno:**

As discretizações espaciais foram realizadas utilizando 16 e 80 elementos de contorno igualmente espaçados e em ambos os casos no interior da tubulação, representada pela Figura 24, foi imposta a condição de contorno de convecção, também denominada condição mista, enquanto que na face externa admite-se isolamento perfeito.

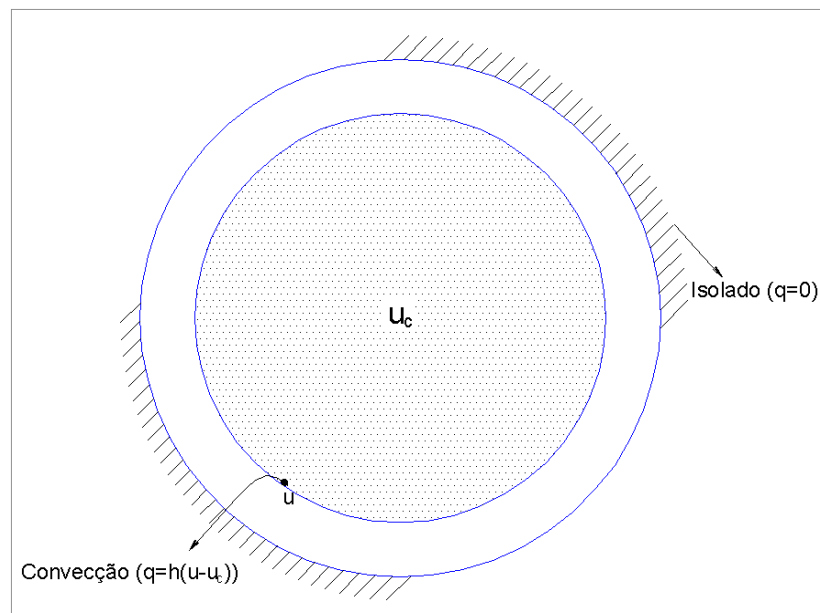


Figura 24 Seção transversal com isolamento externo perfeito.

6.4 RESULTADOS DA ANÁLISE NAS FACES DO CONDUTO

As figuras 25, 26 e 27 apresentam a comparação dos resultados obtidos, utilizando 40 pontos de Gauss, com o modelo MDA e o modelo de difusão pura MD para os nós pertencentes as faces interna e externa do conduto, com discretização espacial de 16 e 80 elementos de contorno. As figuras 28 e 29 apresentam uma análise da transferência de calor entre as faces do conduto em $t=0,25s$ e $t=5,0s$.

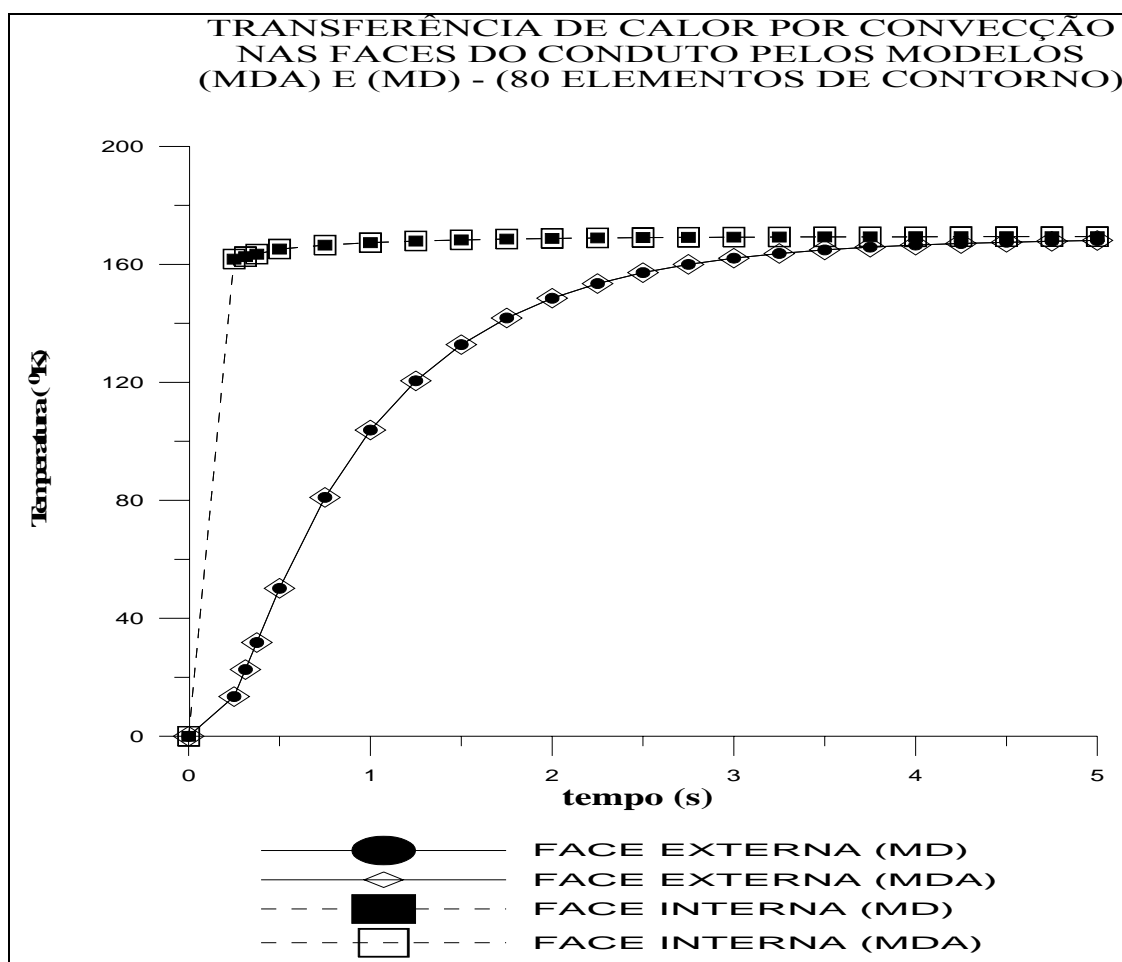


Figura 25 Temperatura nas faces do conduto (80 elementos).

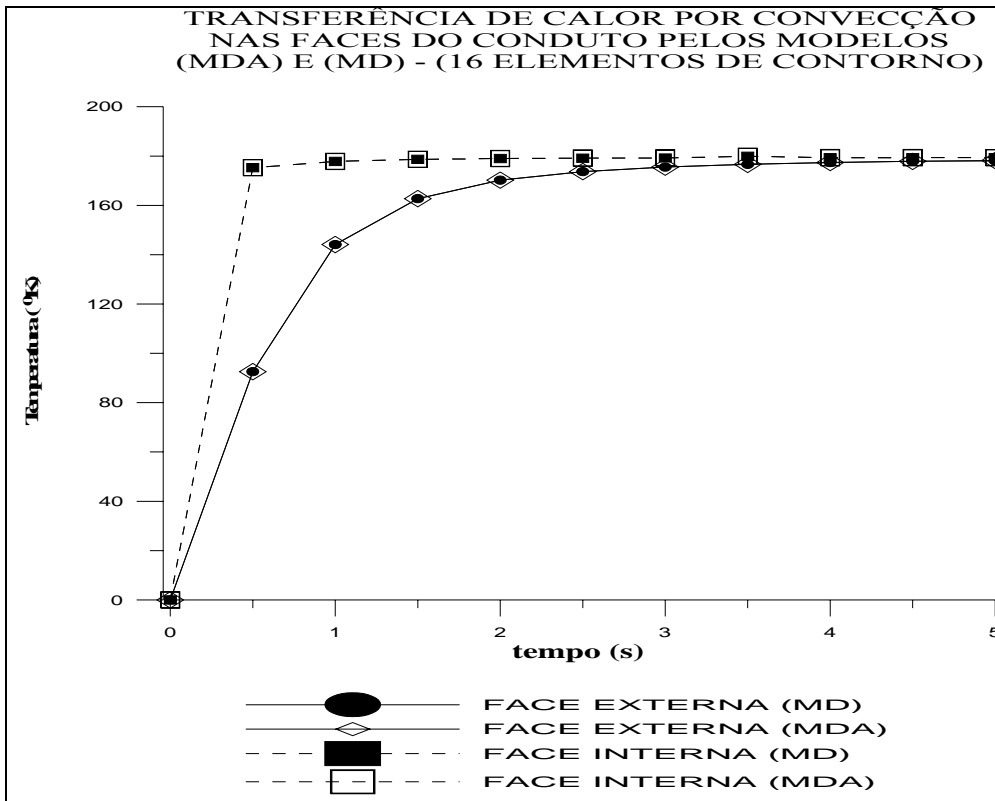


Figura 26 Temperatura nas faces do conduto (16 elementos).

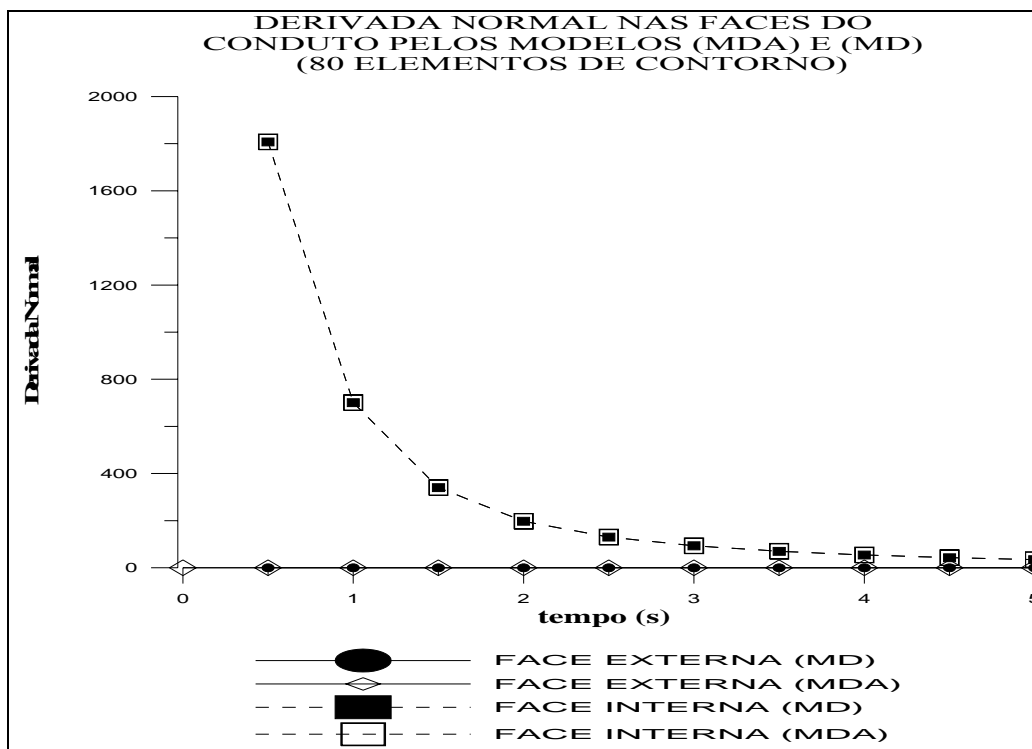


Figura 27 Derivada nas faces do conduto (80 elementos).

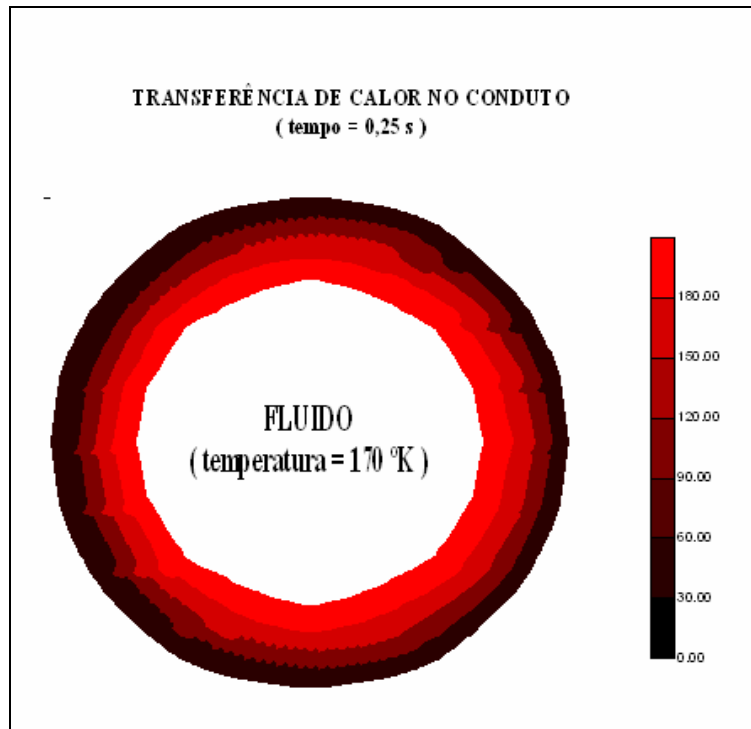


Figura 28 Transferência de calor no conduto para $t=0,25$ segundos.

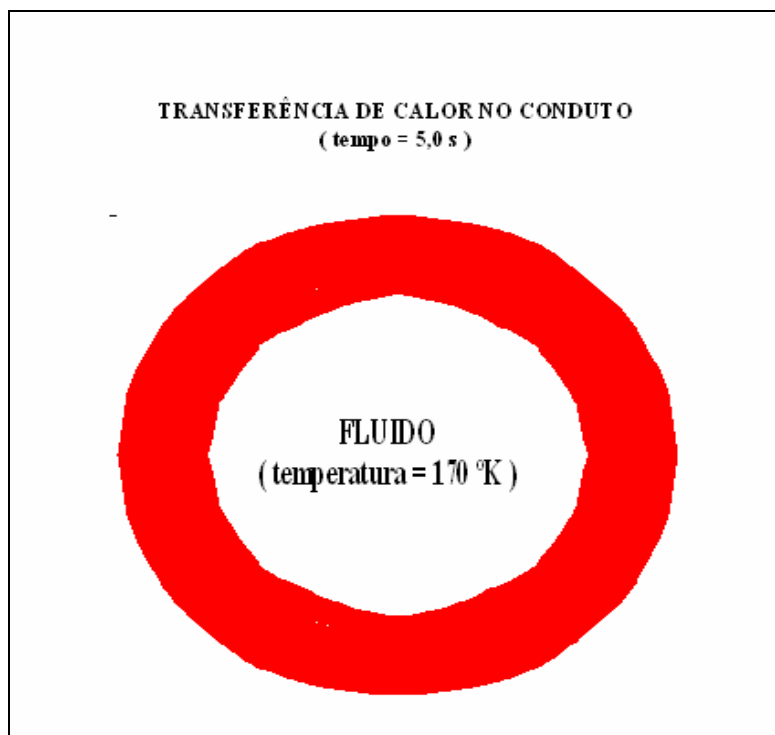


Figura 29 Transferência de calor no conduto para $t=5,0$ segundos.

6.5 TRANSPORTE DE EFLUENTE EM TRECHO DO RIO PARAÍBA DO SUL

Com o intuito de mostrar a potencialidade do modelo para simulação de transporte de efluentes conservativos em rios, serão apresentadas neste exemplo aplicações realizadas com dados obtidos no rio Paraíba do Sul nas campanhas de campo realizadas por ROLDÃO e SOARES (1988), no trecho situado entre Volta Redonda e Barra do Pirai, comparando os resultados do modelo proposto MDA com a solução analítica e os obtidos pelo Método das Diferenças Finitas (diferença regressiva, com modelagem unidimensional) determinado por BÜGE (1990).

A discretização espacial apresenta uma malha de 20.000 metros de comprimento por 500 metros de largura, divididos em 82 trechos (elementos de contorno) de 500 metros e a discretização temporal é de 60 passos de tempo de 240 segundos cada um. Serão analisados três casos particulares com variações da velocidade e do coeficiente de difusão. As condições iniciais e de contorno estão enumeradas e descritas a seguir:

1. Concentração inicial = 0,0 mg/l em todo trecho;
2. Injeção contínua a montante com concentração igual a 7,0 mg/l;
3. Duração da injeção = $60 \Delta t$;
4. Condição inicial $u(x,0)=0$, $0 < x < 40 \Delta x$;
5. Condição de contorno de montante;

$$u(0,t)=\begin{cases} 7 & 0 < t \leq 60\Delta t \\ 0 & t > 60\Delta t \end{cases}$$

6. Condição de contorno de jusante (infinito desta simulação).

$$\frac{\partial u}{\partial x}(40\Delta x,t) = 0 \quad , \quad t > 0 .$$

Serão analisados tres casos em que está ocorrendo a variação da velocidade do meio e do coeficiente de difusão, conforme descrito a seguir.

Caso 1 - A velocidade do meio é 0,50 m/s, com coeficiente de difusão K igual a 25 m^2 / s . Com os dados fornecidos pode-se calcular o número de Péclet da seguinte forma:

$$Pe = V.L / K = (0,50m/s) \times (500m) / 25 m^2 / s = 10$$

Caso 2 - A velocidade do meio é 0,40 m/s, com coeficiente de difusão 10 m^2 / s .

$$Pe = V.L / K = (0,40m/s) \times (500m) / 10 m^2 / s = 20$$

Caso 3 - A velocidade do meio é 1,0 m/s, com coeficiente de difusão 10 m^2 / s .

$$Pe = V.L / K = (1,0m/s) \times (500m) / 10 m^2 / s = 50$$

6.6 RESULTADOS DO TRANSPORTE DE EFLUENTE NO PARAIBA DO SUL

Os resultados para as simulações de transporte de efluente no rio Paraíba do Sul, utilizando 40 pontos de Gauss no MDASFDT, com 80 elementos de células e 7 pontos de Hammer no MDASFIT, para os casos 1, 2 e 3 descritos na seção (6.5) estão apresentados nas figuras 30, 31 e 32 respectivamente.

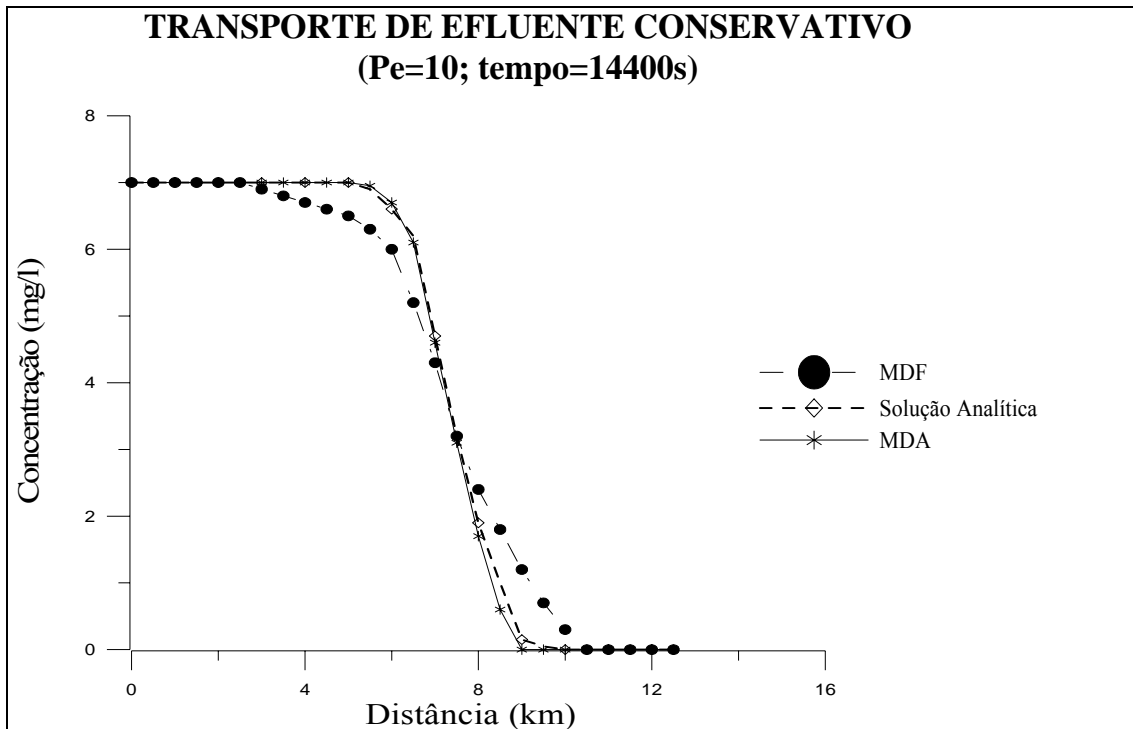


Figura 30 Transporte de efluente conservativo com $Pe = 10$ (caso 1).

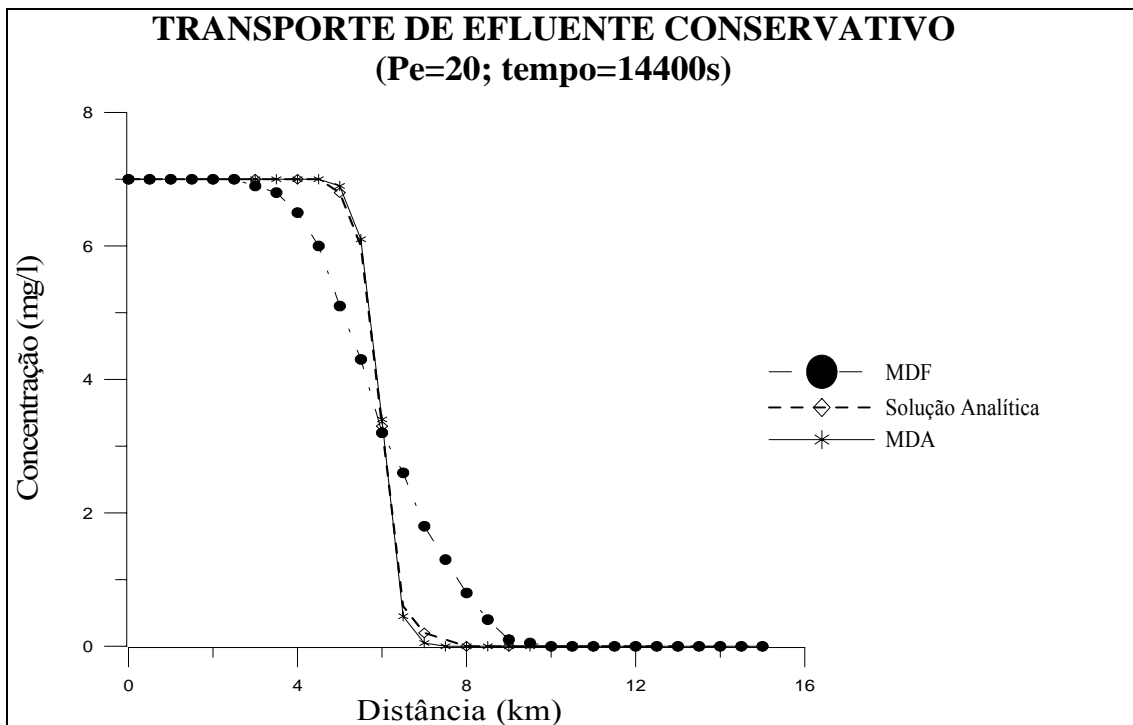


Figura 31 Transporte de efluente conservativo com $Pe = 20$ (caso 2).

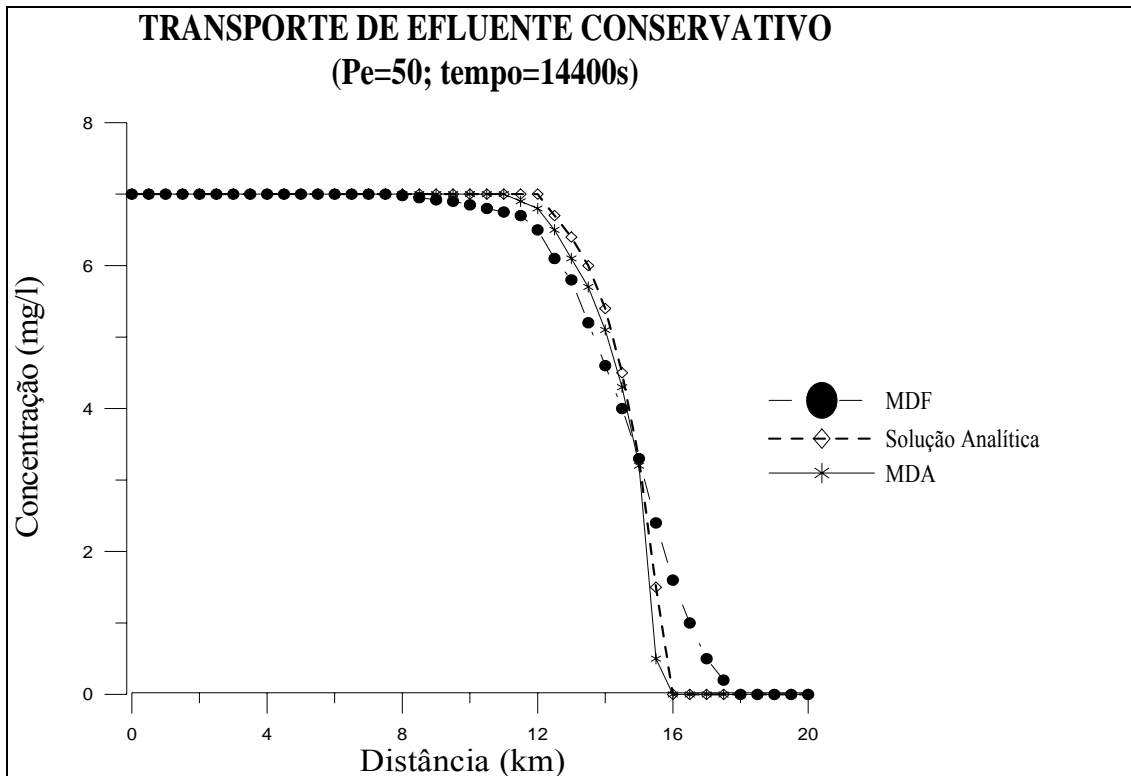


Figura 32 Transporte de efluente conservativo com $Pe = 50$ (caso 3).

Os resultados obtidos por BÜGE (1990), com o método das Diferenças Finitas, foram inferiores aos do modelo MDA com relação a solução analítica descrita no APÊNDICE D, isso ocorre devido a pequena discretização espacial adotada com o M.D.F. e ser utilizado uma modelagem unidimensional em toda sua extensão o que não corresponde a realidade do problema, conforme foi descrito no CAPÍTULO 1. Porém cabe destacar que com uma maior discretização espacial e temporal o M.D.F. apresenta bons resultados, como determinado por .

6.7 COMPARAÇÃO ENTRE O ESQUEMA DE DIFERENÇA CENTRAL E O MODELO MDA NO RIO PARAÍBA DO SUL

Esta simulação compara as soluções numéricas determinadas com o modelo MDA (para o uso combinado de soluções fundamentais) com as aproximações de diferenças finitas (diferença central, com modelagem unidimensional) e com a solução analítica descrita no APÊNDICE D, utilizando dados obtidos das campanhas de campo realizadas por ROLDÃO e SOARES (1988), entre Volta Redonda e Santa Cecília no rio Paraíba do Sul e descritos a seguir.

1. Concentração inicial = 0,0 mg/l em todo trecho;
2. Injeção contínua a montante com concentração igual a 7,0 mg/l;
3. Velocidade do meio $v = 0,80$ m/s;
4. Intervalos de espaço na direção principal do rio de $\Delta x = 500$ m;
5. Difusividade $k=40$ m²/s;
6. Intervalos de tempo $\Delta t=240$ s;
7. Duração da injeção = $60 \Delta t$;
8. Condição inicial $u(x,0)=0$, $0 < x < 80 \Delta x$;
9. Condição de contorno de montante;

$$u(0,t)=\begin{cases} 7 & 0 < t \leq 60\Delta t \\ 0 & t > 60\Delta t \end{cases}$$

10. Condição de contorno de jusante (infinito desta simulação).

$$\frac{\partial u}{\partial x}(80\Delta x,t) = 0 \quad , \quad t > 0.$$

A discretização espacial apresenta uma malha de 40.000 metros de comprimento por 500 metros de largura, divididos em 162 trechos (elementos de

contorno) de 500 metros e a discretização temporal é de 20, 40 e 60 passos de tempo de 240 segundos cada um.

Com estas informações pode-se calcular o número de Péclet por:

$$Pe = 0,8 \times 500 / 40 = 10.$$

6.8 RESULTADOS PARA 20, 40 E 60 PASSOS DE TEMPO

Os resultados para as simulações, utilizando 40 pontos de Gauss no MDASFDT e com 7 pontos de Hammer no MDASFIT, com os dados obtidos nas campanhas de campo utilizando o modelo MDA, os obtidos por BÜGE (1990) e a solução analítica presente no APÊNDICE D estão apresentados, nesta seção, para três passos de tempo: 20, 40 e 60.

A Figura 33, a Figura 34 e a Figura 35 contém os valores encontrados para esses três passos de tempo respectivamente, cuja precisão inferior (no início da simulação) obtida pelo M.D.F. se explica pelas mesmas razões descritas na seção (6.6).

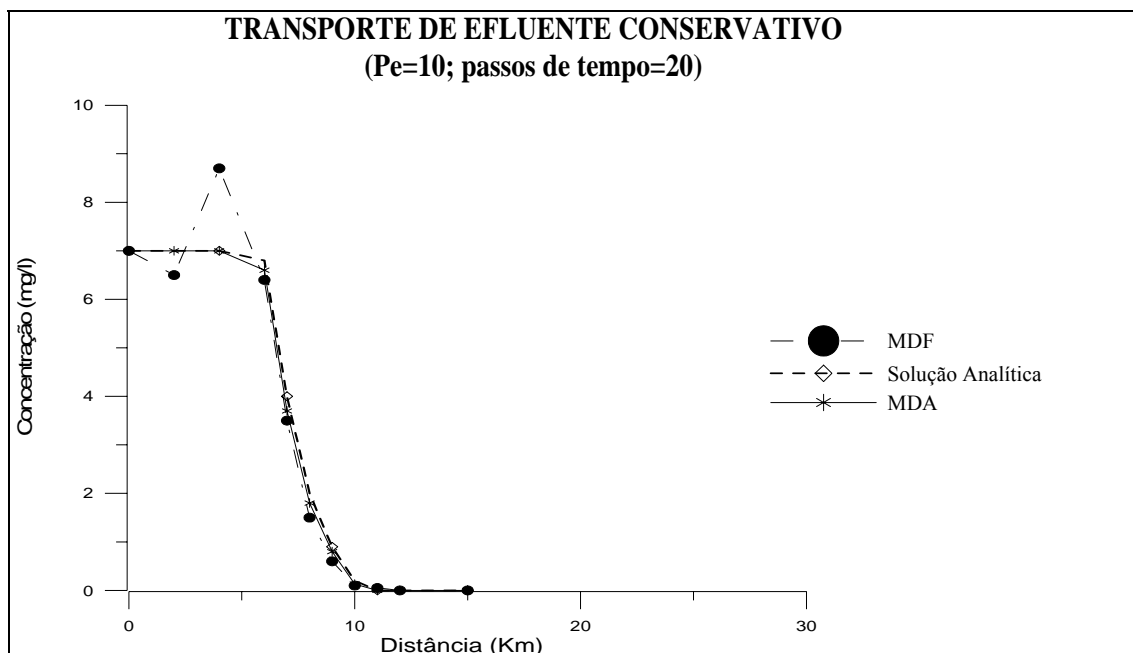


Figura 33 Transporte de efluente conservativo com Pe = 10 (20 passos).

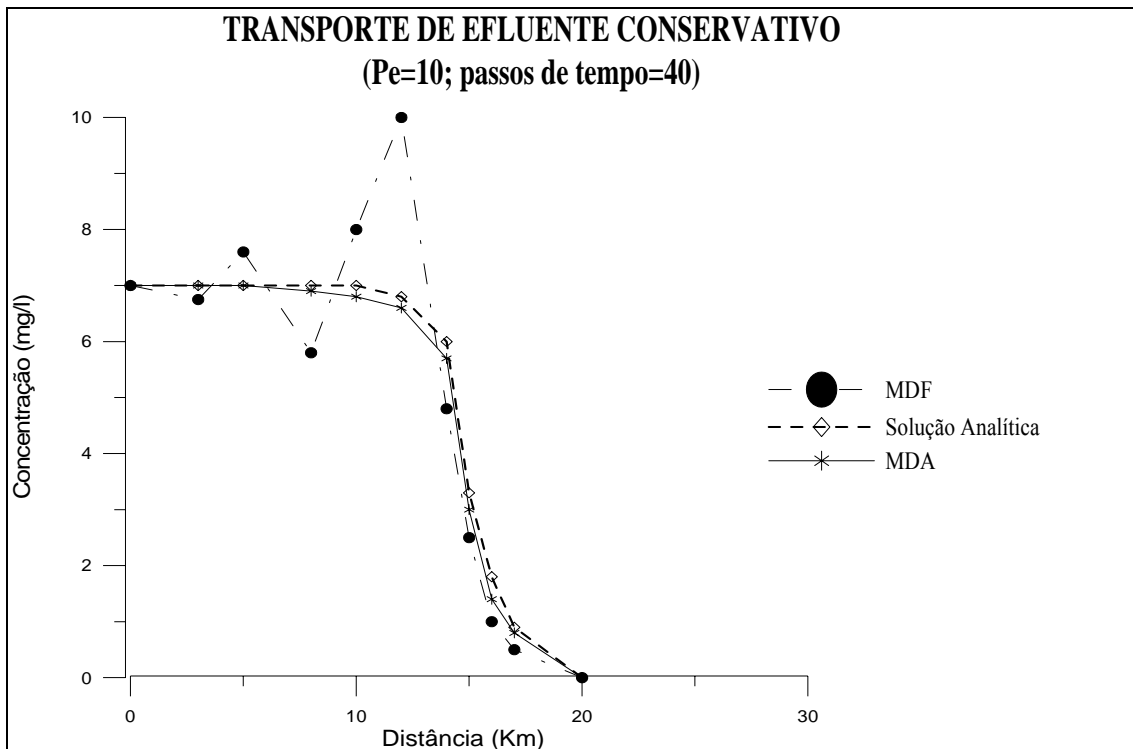


Figura 34 Transporte de efluente conservativo com $Pe = 10$ (40 passos).

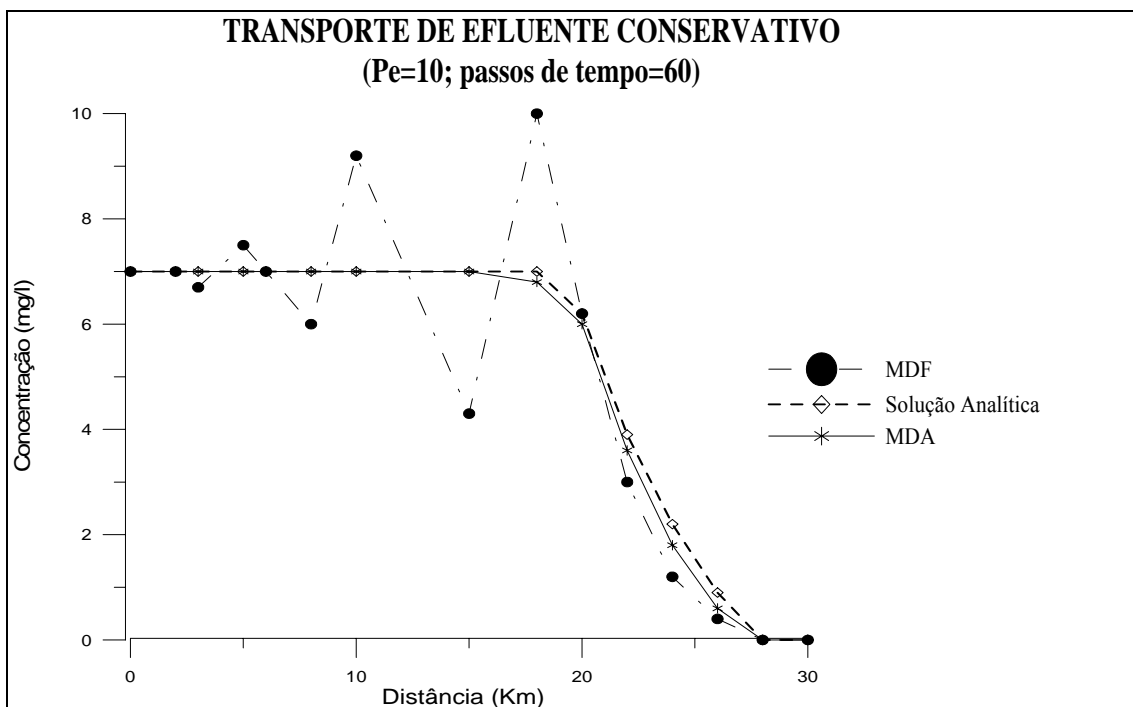


Figura 35 Transporte de efluente conservativo com $Pe = 10$ (60 passos).

CAPÍTULO 7 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O método dos elementos de contorno fazendo uso da solução fundamental dependente do tempo e da solução fundamental independente do tempo mostrou-se eficiente para simulações de transporte de efluentes em rios e na transferência de calor em condutos.

A integração numérica da solução fundamental dependente do tempo e da sua derivada normal apresentou bons resultados, sendo utilizado a quadratura de Gauss e a transformada de Telles para o cálculo de áreas em substituição a integração no tempo, no modelo que utiliza solução fundamental dependente do tempo.

A implementação e o uso da condição de contorno de convecção permitiu avaliar a transferência de calor nas faces de condutos vazados sujeitos à presença de fluido aquecido no seu interior e sendo considerados isolados externamente.

A transformada de Telles (1987) mostrou-se útil para problemas envolvendo singularidade logarítmica e um recurso capaz de reduzir o número de pontos de Gauss necessários nas integrações numéricas, o que a torna uma opção que diminui o tempo de processamento computacional e melhora os resultados das análises numéricas.

A utilização da correta relação entre número de Péclet e a discretização espacial e principalmente temporal conforme determinado em LIM, CHAN e CHANDRA (1994) é sempre necessária objetivando evitar a ocorrência de oscilações numéricas, assim como o tipo de função de Bessel utilizado deve estar de acordo com a velocidade do meio e a singularidade existente como calculado por QIU, WROBEL e POWER (1998).

O uso combinado de soluções fundamentais para problemas de difusão-advecção transiente propiciou uma redução no tempo de processamento computacional em torno

de 70% (para discretização da seção (6.1) deste trabalho com 24 elementos de contorno e apresentada no APÊNDICE A) em relação ao modelo que utiliza apenas solução fundamental dependente do tempo. Já a precisão da alternativa com o uso combinado de soluções fundamentais, no trecho em que o modelo MDA utiliza solução fundamental independente do tempo, foi superior a alternativa do modelo que considera apenas solução fundamental independente do tempo em todo o processamento.

O tempo de processamento computacional será proporcional às discretizações do tempo e o número de elementos utilizados. Porém, estas discretizações estão vinculadas às características do meio: como a difusividade, a velocidade e por conseqüência o número de Péclet, o que torna inviável utilizar grandes discretizações para melhorar os resultados do modelo que utiliza apenas soluções fundamentais independentes do tempo. Essa e a ótima precisão são as principais razões que aferem a utilização da solução fundamental dependente do tempo ao menos nos primeiros intervalos de tempo (até o ponto de inflexão).

As análises para o trecho entre Volta Redonda e Barra do Pirai e entre Volta Redonda e Santa Cecília, no rio Paraíba do Sul, demonstram a viabilidade da elaboração de um modelo numérico, utilizando o Método dos Elementos de Contorno, e de uma alternativa mais eficaz de resolver problemas de difusão-advectação transiente, desde que sejam respeitadas as simplificações ou condições pré-estabelecidas descritas no CAPÍTULO 1.

A escolha empírica do nó geométrico central para transferência de potenciais do modelo com solução fundamental dependente do tempo para o modelo com solução fundamental independente do tempo apresentou bons resultados, objetivando não utilizar a maior parte do tempo o MDASFIT (para nós próximos a fonte concentrada) ou

utilizar a maior parte do tempo o MDASFDT (para nós muito afastados da fonte concentrada), mas a implementação permite que o usuário do modelo escolha este nó.

A transferência de potenciais e derivadas normais do modelo MDASFDT para o MDASFIT ocorrerá em instantes menores de tempo quanto mais próximo do ponto de lançamento da fonte estiver o ponto ou nó escolhido, para avaliação das derivadas de primeira e de segunda ordem.

A solução fundamental independente do tempo apresentou resultados não satisfatórios para os primeiros intervalos de tempo quando a discretização temporal é pouco refinada, atestando a viabilidade da utilização da solução fundamental dependente do tempo nesta etapa da solução do problema.

Após ter sido determinado (na execução do modelo) o ponto de inflexão, o modelo que utiliza solução fundamental independente do tempo apresentou bons resultados, o que torna desnecessário a utilização da solução fundamental dependente do tempo neste trecho, sendo essa uma das razões para o uso combinado de soluções fundamentais.

A metodologia e o equacionamento do modelo proposto apresentaram resultados satisfatórios para as simulações realizadas como números de Péclet menores ou iguais a 50, desde que sejam obedecidas as discretizações dos intervalos de tempo da Tabela 1.

As “*libraries*” do FORTRAN *PowerStation* foram de grande utilidade no cálculo do tempo de processamento, nos testes quanto ao prazo de validade ou monitoramento de execução do modelo e na saída gráfica inicial dos resultados, sendo uma “ferramenta” de grande valor para reduzir e facilitar as implementações computacionais.

As principais sugestões para futuras pesquisas estão descritas a seguir:

- Incluir o termo do decaimento no equacionamento do modelo para simulações com efluentes não conservativos;
- Implementar velocidade variável no equacionamento da difusão-advectação;
- Implementar condições iniciais não nulas no modelo que considera apenas solução fundamental dependente do tempo com utilização de células;
- Testar outras possibilidades de truncamento;
- Procurar estimativas para passos de tempo ótimo;
- Implementar a análise inversa no modelo MDA para determinar o local de lançamento de um efluente que tenha causado poluição em rios;
- Ampliar as implementações para modelagem em três dimensões;
- Inclusão da Anisotropia ($k_x \neq k_y \neq k_z$);
- Desenvolver estudos determinando o “nó ideal” para transferência de potencial da solução fundamental dependente para solução fundamental independente do tempo;
- Inclusão de condições de contorno não lineares;
- Inclusão de propriedades físicas dependentes da temperatura;
- Implementar funções de Bessel de ordem superior como as descritas no APÊNDICE C para os casos de singularidade forte e hiper singular;
- Utilizar a metodologia ora desenvolvida para implementações computacionais com o Método dos Elementos Finitos;
- Inclusão de elementos de ordem superior.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRAMOWITZ, M. and STEGUN, I.A., 1965, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York.
- AZEVEDO, J.P.S., 1985, *Análise de Problemas Não Lineares de Transferência de Calor pelo Método dos Elementos de Contorno*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- BENZ, U.A. and RANCIS, J.J., 2002, "Coupling Two-dimensional and Axysimetric Boudary Element Zones for Transient Heat Transfer Applications", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26, p.p. 455-467.
- BOKOTA, A. and ISKIERKA, S., 1995, An Analysis of the Diffusion-convection Problem by the Boundary Element Method, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 15, pp. 267-275.
- BOZTOSUN, I. And CHARAFI, A., 2002, "An Analysis of the Linear Advection-diffusion Equation Using Mesh-free and Mesh-dependent Methods", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26, pp. 889-895.
- BOYCE, W.E. e DIPRIMA, R.C., 1979, *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, Editora Guanabara Dois, Rio de Janeiro.
- BREBBIA, C.A., 1978, *The Boundary Element Method for Engineers*, Pentech Press, London.
- BREBBIA, C.A., TELLES, J.C.F. and WROBEL, L.C., 1984, *Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering*, Springer-Verlag, Berlin.
- BREBBIA, C.A. and DOMINGUEZ, J., 1989, *Boundary Elements: an Introductory Course*, Computational Mechanics Publications and McGraw-Hill, Southampton.

- BÜGE, T.R.,1990, *Modelo Matemático para Simulação de Transporte e Dispersão de Poluentes em Rios: Aplicação ao Estudo de Lançamento Acidental no Rio Paraíba do Sul*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- CABRAL, J.J.S, 1996, *Simulação Computacional de Água Subterrânea utilizando Métodos de Elementos de Contorno*, UFPE-Recife-PE
- CARSLAW, H.S. & JAEGER, J. C., 1959, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, London.
- CAVENDISH, J.C., HALL, C.A. and PORSCHING, T.A., 1994, “A Complementary Volume Approach for Modelling Three-Dimensional Navier-Stokes Equations Using Dual Delaunay/Voronoi Tessellations”, *International Journal Method Heat Fluid Flow*, v. 4, pp.329-345.
- CHATWIN, P.C., 1980, “Presentation of Longitudinal Dispersion Data.”, *Journal of the Hydraulics Division*, ASCE, HY1, pp. 71-83.
- CHOLEWA, R., NOWAK, A.J., and WROBEL, L.C., 2004, “Application of BEM and Sensitivity Analysis to the Solution Governing Diffusion-convection Equation for a Continuous Casting Process” , *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28, p.p. 389-403.
- DEWITT, D. P., *Fundamentals of Heat Transfer*, New York, 1981.
- EFFREN, T.C., 1997, *Implementação Computacional do Método dos Elementos de Contorno para Solução de Problemas de Difusão*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- EIGER, S., 1988, *Some Aspects of Diffusion and Dispersion in Rectangular Open Channel Flow*, Ph.D. Thesis, University of California, Berkeley, USA.
- FLOREZ, W.F. and POWER, H., 2001, “Comparison Between Continuous and Discontinuous Boundary Elements in the Multidomain Dual Reciprocity Method

- for the Solution of the Two-dimensional Navier-Stokes Equations”, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 25, pp. 57-69.
- FISCHER, H.B., LIST, E.J., KOH, R.C.Y., IMBERGER, J. and BROOKS, N.H., 1979, *Mixing in Inland and Coastal Waters*. Academic Press, Inc., New York.
- GRIGOR’EV, M.M., 2001, “A Boundary Element Method for the Solution of Convective Diffusion and Burgers’ Equations”, *International Journal Method Heat Fluid Flow*, v. 4, pp.527-552.
- GRIGOR’EV, M.M. and DARGUSH, G.F., 2004, “Accuracy and Efficiency of Higher-order Boundary Element Methods for Steady Convective Heat Diffusion in Three Dimension” , *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28, pp. 1475- 1491.
- HON, Y.C. and WEI, T., 2004, “A Fundamental Solution Method for Inverse Heat Conduction Problem”, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28, pp. 489-495.
- JESUS, J.C., 1999, *Simulação Computacional para Solução da Equação da Difusão Transiente Bidimensional utilizando o Método dos Elementos Finitos e o Método dos elementos de Contorno*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- JESUS, J.C.,2001, *Implementação Computacional pelo Método dos Elementos de Contorno para Solução da Equação da Difusão Transiente 2D Utilizando Solução Fundamental Independente do Tempo*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- KREITH, F., 1973, *Princípios da Transmissão de Calor*, Editora Blucher Ltda, São Paulo.
- KREYSZIG, E., 1979, *Advanced Engineering Mathematics*, John Wiley & Sons, NewYork.

- LIM, J., CHAN, C.L., and CHANDRA, A., 1994, “ A BEM Analysis For Transient Conduction - Convection Problems ”, *International Journal Numerical Methods Heat Fluid Flow*, v.4, pp.31-45.
- LOEFFLER NETO, C. F., 1988, *Formulação Alternativa do Método dos Elementos de Contorno Aplicada a Problemas de Campo Escalar*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- LESNIC, D., ELLIOT L. and INGHAM D. B., 1995, Treatment of singularities in time-dependent problems using the boundary element method, *Engineering Analysis with Boundary Elements 16*, Elsevier Science Limited, Great Britain.
- MANSUR, W. J., PRODANOFF, J.H.A. e AZEVEDO, J.P.S., 1996, “Métodos dos Elementos de Contorno em Recursos Hídricos”. Em: Silva, R.V., *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos II*, 2 ed., capítulo 1, Porto Alegre, Brasil, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.
- MELLO, C.E.F., 2003, *Análise Numérica de Escoamento em Comportas de Fundo e Vertedores pelo Método dos Elementos de Contorno*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- OZGENER, B., OZGENER, H.A., 2000, Gaussian quadratures for singular integrals in BEM with applications to the 2D modified Helmholtz equation, *Engineering Analysis with Boundary Elements 24*, Elsevier Science Limited, Great Britain.
- PARTRIDGE, P.W. and SENSALÉ, B., 2000, “The Method of Fundamental Solutions with Dual Reciprocity for Diffusion and Diffusion-convection Using Subdomains”, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 24, pp. 633-641.
- PASQUETTI, R. and PETIT, D., 1995, Inverse diffusion by boundary elements, *Engineering Analysis with Boundary Elements 15*, Elsevier Science Limited, Great Britain.

- QIU, Z.H., WROBEL, L.C. and POWER, H., 1995, "Boundary element approach to mass and charge transport in electrochemical cells", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 15, pp. 299-312.
- QIU, Z.H., WROBEL, L.C. and POWER, H., 1998, "Numerical Solution of Convection-diffusion Problems at High Péclet Number Using Boundary Elements", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 41, pp.899-914.
- ROLDÃO, J.S.F. e SOARES, J.H.P., 1988, "*Determinação da Capacidade de Transporte e Dispersão do Rio Paraíba do Sul (RJ): Trecho Volta Redonda – Santa Cecília*", Projeto COPPETEC ET-15296, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SAMEC, N. and SKERGET, L., 2004, "Integral formulation of a Diffusive-convective Transport Equation for Reacting Flows", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28, pp. 1055-1060.
- SEZAI, I. And MOHAMAD, A.A., 1998, Three-dimensional Simulation of Natural Convection in Cavities with Side Opening, *International Journal Method Heat Fluid Flow*, v. 9, pp.800-813.
- SHI, Y. and BANERJEE, P.K., 1993, Boundary Element Methods for Convective Heat Transfer, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 105, pp.261-284.
- SINGH, K.M. and TANAKA, M., 1999, "Dual Reciprocity Boundary Element Analysis of Nonlinear Diffusion: Temporal Discretization", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 23, pp. 419-433.
- SINGH, K.M. and TANAKA, M., 2000, "On Exponential Variable Transformation Based Boundary Element Formulation for Advection-diffusion Problems", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 24, pp. 225-235.
- SMITH, I. M. 1982, *Programming the Finite Element Method with application to Geomechanics*, Great Britain, John Wiley & Sons.

- SOUZA, M.D.S., 1999, *Implementação Computacional do Método dos Elementos de Contorno para Solução Numérica de Problemas de Difusão-advecção Transiente Bidimensional*, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SOUZA, M.D.S., AZEVEDO, J.P.S., 2001, “Indicadores de Qualidade de Água em Rios”. *Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos*, v. 1, n.14 (Nov), pp.259-270.
- SOUZA, M.D.S., AZEVEDO, J.P.S., 2003, “Procedimento de Análise Inversa Aplicada a Condução de Calor Transiente na Presença de Condição de Contorno de Convecção Usando o Método dos Elementos de Contorno”. *Iberian Latin-American Congress on Computer Methods in Engineering* v. 1, n.22 (Nov), pp.326-340.
- SUTRADHAR, A., PAULINO, G.H. and GRAY, L.J., 2002, “Transient Heat Conduction in Homogeneous and Non-homogeneous Materials by the Laplace Transform Galerkin Boundary Element Method”, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26, pp. 119-132.
- TAIGBENU, E.A., 1999, “Three Green Element Models for the Diffusion-advection Equation and Their Stability Characteristics”, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 23, pp. 577-589.
- TAIGBENU, E.A., 2004, “Green Element Calculations of Nonlinear Heat Conduction with a Time-dependent Fundamental Solution”, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28, pp. 53-60.
- TELLES, J.C.F., 1986, *Implementation Of Triangular Elements Into the Beasy System*, Computational Mechanics Institute, Southampton.
- TELLES, J.C.F., 1987, “A self-adptive co-ordinate transformation for efficient numerical evaluation of general boundary element integrals”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.
- VAN GENUCHTEN, M.Th.; ALVES, W. J., 1982, *Analytical Solutions of The One-dimensional Convective-Dispersive Solute Transporte Equation*, Technical Bulletin, 1661, United States Department of Agriculture, Riverside, California, USA.

- WROBEL, L.C., 1981, *Potential and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method*, Ph.D. Thesis, Southampton University.
- ZIENIUK, E., 2001, "Potential Problems with Polygonal Boundaries by a BEM with Parametric Linear Functions", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 25, pp. 185-190.
- ZIENKIEWICZ, O.C., TAYLOR, R.L., 1989, *The Finite Element Method, VOL. 1-2*, Mc-Graw-Hill.
- ZIENKIEWICZ, O.C., TAYLOR, R.L., 1991, *The Finite Element Method*, 4 ed., United King , Mc Graw Hill International Editions.
- YOUNG, D.L., TSAI, C.C., FAN, C.M. and CHEN, C.W., 2004, "Thime-dependent Fundamental Solutions for Homogeneous Diffusion Problems", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28, pp. 1463-1473.
- YOUNG, G.L., MCDONALD, K.A., PALAZOGLU, A. and FORD, W., 1992, "Boundary Element Solutions for Free Boundary Convection-Diffusion Problems", *Numerical Heat Transfer*, v.21, pp. 299-311.

APÊNDICE A - TEMPO DE PROCESSAMENTO, SAÍDA GRÁFICA E MONITORAMENTO DOS MODELOS COMPUTACIONAIS

Neste trabalho o cálculo do tempo de processamento é efetuado utilizando a “*library*” PORTLIB do compilador FORTRAN *PowerStation*. Está colocada no início do programa principal e fazendo um contador para o tempo de processamento permite a leitura e impressão do tempo computacional gasto ao término da execução do programa ou a cada etapa que seja desejada a informação do tempo transcorrido. No modelo MDA após cada tipo de alternativa (MDASFDT, MDASFIT e uso combinado de soluções fundamentais) é apresentado o tempo transcorrido.

Para a elaboração de uma saída gráfica dos resultados, o modelo proposto faz uso da “*library*” MSFLIB e das funções externas CONST, PGOPT e PLOTP pertencentes ao FORTRAN *PowerStation*, onde os resultados das três diferentes alternativas de modelagem são armazenados em vetores que transferidos para a “*library*” em questão fornecem um gráfico em “DOS” para avaliação preliminar dos resultados do modelo. A elaboração dos gráficos apresentados nas simulações computacionais do CAPÍTULO 6 foi realizada com os *softwares* EXCEL, GRAPHER e SURFER, devido as suas boas apresentações.

As figuras A.1, A.2, A.3, A.4 e A.5 apresentam a execução do modelo MDA e a saída gráfica (onde “M” corresponde a coincidência de resultados) para a seção (6.1) deste trabalho. Foram utilizados 40 elementos de contorno, 200 elementos de células, 50 “passos de tempo” intervalados a cada 0,01 segundo e com número de Péclet igual a cinco. A discretização utilizada nesta seção, com o uso combinado de soluções

fundamentais, apresentou uma redução do tempo de processamento de aproximadamente 66 %.

```

MS Mda
Auto
MODELO DE DIFUSAO - ADVECCAO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL
SOLUCAO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO (SFDT) = (1)
SOLUCAO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO (SFIT) = (2)
USO SIMULTANEO DE SOLUCOES FUNDAMENTAIS (SCDA) = (3)
ESTUDOS GERAIS COM APRESENTACAO GRAFICA = (4)
4
MODELO DE DIFUSAO - ADVECCAO COM SOLUCAO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO
Intervalo de tempo      1/      50
Intervalo de tempo      2/      50
Intervalo de tempo      3/      50
Intervalo de tempo      4/      50
Intervalo de tempo      5/      50
Intervalo de tempo      6/      50
Intervalo de tempo      7/      50
Intervalo de tempo      8/      50
Intervalo de tempo      9/      50
Intervalo de tempo     10/      50
Intervalo de tempo     11/      50
Intervalo de tempo     12/      50
Intervalo de tempo     13/      50
Intervalo de tempo     14/      50
Intervalo de tempo     15/      50

```

Figura A.1 Execução do modelo MDA.

```

MS Mda
Auto
Intervalo de tempo      39/      50
Intervalo de tempo      40/      50
Intervalo de tempo      41/      50
Intervalo de tempo      42/      50
Intervalo de tempo      43/      50
Intervalo de tempo      44/      50
Intervalo de tempo      45/      50
Intervalo de tempo      46/      50
Intervalo de tempo      47/      50
Intervalo de tempo      48/      50
Intervalo de tempo      49/      50
Intervalo de tempo      50/      50
TEMPO DE PROCESSAMENTO (MDASFDT)= 3271.630 segundos
MODELO DE DIFUSAO - ADVECCAO COM SOLUCAO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO
Intervalo de tempo      2/      50
Intervalo de tempo      3/      50
Intervalo de tempo      4/      50
Intervalo de tempo      5/      50
Intervalo de tempo      6/      50

```

Figura A.2 Execução com solução fundamental dependente do tempo.

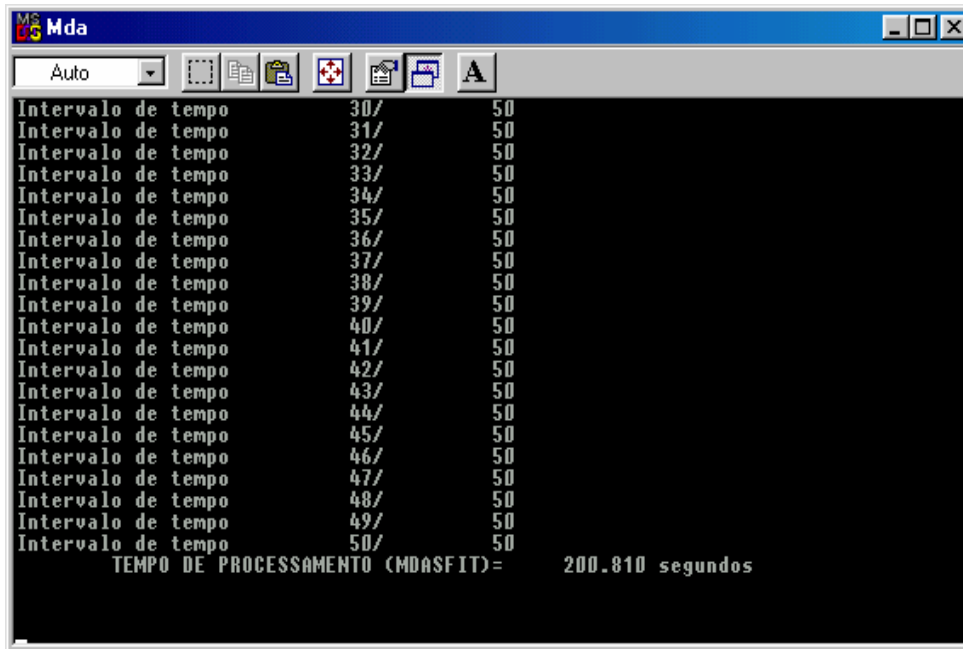


Figura A.3 Execução com solução fundamental independente do tempo.

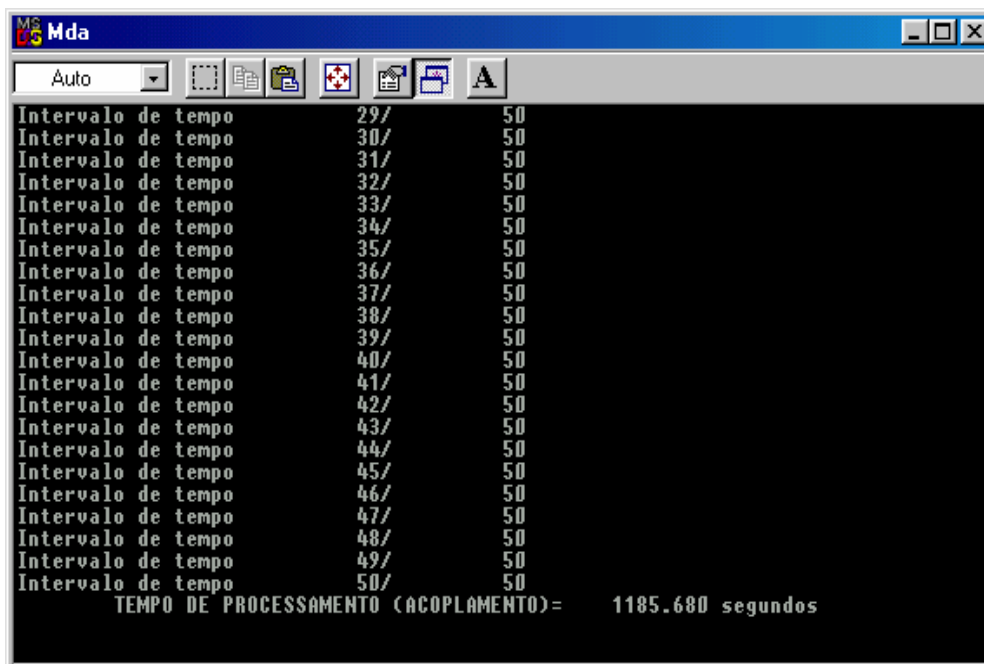


Figura A.4 Execução com uso combinado de soluções fundamentais.

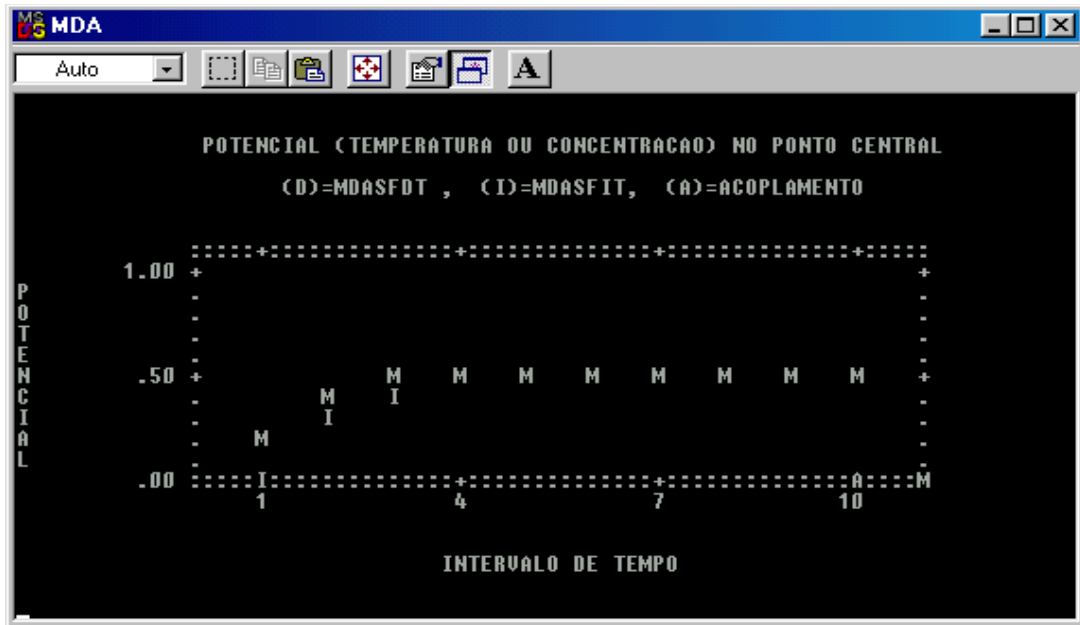


Figura A.5 Saída gráfica inicial do MDA.

Objetivando o controle e o monitoramento do uso dos modelos computacionais, foram analisadas algumas técnicas que permitissem um gerenciamento da utilização destes, onde dois são os aspectos a serem considerados: o tempo de validade do uso da versão do modelo computacional e o número de instalações realizadas.

Para solucionar a questão tempo de validade do uso de uma versão, é suficiente a criação de um arquivo binário criptografado que contenha um número, correspondente ao resultado de uma equação, utilizando as informações de uma determinada data limite até quando o modelo poderá ser utilizado.

Todas as vezes que executar o modelo, este através de uma rotina (PORTLIB), faz a leitura da data e hora do relógio do computador, e compara-se com o valor que está gravado no arquivo binário, sendo que este arquivo é automaticamente atualizado ou apagado no caso de ter sido expirado o prazo de validade, a cada execução do programa. Com isso garante-se que, mesmo o usuário retrocedendo a data do

computador, não possa mais utilizar o modelo, uma vez que a data limite de uso permitido tenha sido ultrapassada.

Deve-se observar que esta rotina efetua um teste para saber se a data da primeira execução do modelo não está menor do que a data em que foi gerado a instalação ou o arquivo executável, impedindo assim que o usuário retroceda a data do computador, antes da primeira instalação, para ter uso do modelo por um período maior de tempo.

Porém nada impede o usuário de desinstalar o modelo, apagar todos os arquivos gerados com a instalação, principalmente o arquivo binário, e retroceder a data do computador para uma data posterior e próxima a data que foi gerada a instalação do modelo. Com isso torna-se possível novamente a instalação e o uso do modelo até superar o prazo de validade.

O segundo problema a resolver é o controle do número de instalações de um modelo computacional, onde recomenda-se a utilização de senha no processo de instalação do programa. Fazendo uso de uma função intrínseca, que faz um sorteio de números aleatórios (URAND(SEED)) tendo como “semente” o valor resultante do equacionamento com os valores de data e hora do computador. Com esse valor, que sempre é diferente, utiliza-se uma fórmula de conhecimento apenas do proprietário do modelo computacional que irá calcular uma senha tendo como valor de entrada o resultado do sorteio gerado pela subrotina (GERA) e fornecido pelo usuário do modelo. Dessa forma em cada nova instalação necessita-se uma nova senha.

A seguir apresenta-se o código fonte para gerar número aleatório e conferir a senha utilizando a data e hora do computador com as “libraries” do FORTRAN *PowerStation*. Estas subrotinas devem ser chamadas no programa principal ou no processo de gerar a instalação de modelos computacionais.

```

C!   MODELO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE
      .PROGRAM MDA
      .
      CALL SENHA
      CALL MDASFDT
      CALL MDASFIT.
      .
      STOP
      END

C!   SUBPROGRAMA PARA GERAR NÚMERO ALEATÓRIO
C!   E CALCULAR SENHA DE INSTALAÇÃO DE PROGRAMAS
C!   APARTIR DA DATA E HORA ATUAL DO COMPUTADOR
      SUBROUTINE SENHA
      USE MSFLIB
      USE PORTLIB
      INTEGER*4 ANO,MES,DIA,HORA,MINUTO,SEG,ano1
      CHARACTER*8 dmae,hora1
      REAL NUMALE,SENHAATUAL,NOVA SENHA
      EXTERNAL RNEXP, RNSET, UMACH
      COMMON /DADOS/ HORA,MINUTO,SEG,MES,DIA,ANO1

101   DMAE = DATE()
      hora1 = clock ()
      read(dmae,2201)mes,dia,ano1

2201  format(i2,1x,i2,1x,i2)

```

```

if (ano1.eq.00) then
ano=2000
elseif (ano1.gt.00) then
ano=ano1+2000
end if

read(hora1,3301)hora,minuto,seg
3301 format(i2,1x,i2,1x,i2)
CALL GERA(NUMALE)
WRITE(*,511) NUMALE
511 FORMAT(9X,' NUMERO ALEATORIO = ',F20.10,/)

```

C! Teste para dar continuidade na instalação ou execução do modelo

```

SENHAATUAL=INT(3*NUMALE**5+6*NUMALE**4+2*NUMALE**3
#+4*NUMALE**2+33)
WRITE(*,*)'QUAL A SENHA PARA ESTA INSTALACAO?'
READ(*,*)NOVASENHA
IF(NOVASENHA.NE.SENHAATUAL)THEN
WRITE(*,*)'A SENHA INFORMADA NAO CONFERE
# INSTALACAO INTERROMPIDA'
STOP
ELSE IF(NOVASENHA.EQ.SENHAATUAL)THEN
WRITE(*,*)'SENHA INFORMADA CONFERE'
END IF

```

C! Teste para dar continuidade na instalação ou execução do modelo

```

RETURN
END

```

SUBROUTINE GERA(NUMALE)

INTEGER*4 MES,DIA,HORA,MINUTO,SEG,ano1,X

INTEGER ISEED, NOUT, NR

REAL R(2),NUMALE

EXTERNAL RNEXP, RNSET, UMACH

COMMON /DADOS/ HORA,MINUTO,SEG,MES,DIA,ANO1

CALL UMACH (2, NOUT)

X=INT((1*MES+2*DIA+3*HORA+4*MINUTO+5*SEG+6*ano1)/7)

NR = 2

ISEED = X

CALL RNSET (ISEED)

CALL RNEXP (NR, R)

NUMALE=(R(1)+R(2))/2

RETURN

END

APÊNDICE B - INTEGRAÇÃO QUASE-SINGULAR COM TRANSFORMAÇÃO CÚBICA PARA ELEMENTOS CONSTANTES

Com o intuito de obter maior exatidão em integrações quase-singulares, usando o mesmo número de pontos na quadratura de Gauss, bem como resolver o problema de singularidade logarítmica existente em problemas de difusão e de difusão-advecção transiente, utilizou-se o esquema de integração proposto por Telles (1987).

Neste esquema, a quadratura de Gauss é feita numa coordenada γ que se relaciona com a coordenada natural usual η pela transformação cúbica que concentra mais pontos de integração na região próxima ao ponto fonte. Este apêndice é baseado na implementação computacional do esquema de Telles (1987).

$$|\eta(\gamma)| = a\gamma^3 + b\gamma^2 + c\gamma + d \quad (\text{B.1})$$

O jacobiano da transformação é dado por:

$$|G(\gamma)| = \frac{\partial \eta}{\partial \gamma} = 3a\gamma^2 + 2b\gamma + c \quad (\text{B.2})$$

As integrações numéricas dos coeficientes H_{ij} e G_{ij} do elemento constante são feitas por quadratura de Gauss na variável γ por mudança da variável original Γ por η e em seguida por γ :

$$\begin{aligned} H_{ij}^k &= \int_{\Gamma} p^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j = \int_{-1}^1 p^*(\underline{\xi}, \underline{x}) |J| d\eta \\ &= \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 p^*(\underline{\xi}, \underline{x}) G(\gamma) d\gamma = \frac{l_j}{2} \sum_{g=1}^{NG} p^*(\underline{\xi}, \underline{x}(\eta(\gamma_g))) G(\gamma) \omega_g \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned}
G_{ij}^k &= \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j = \int_{-1}^1 u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) |J| d\eta \\
&= \frac{l_j}{2} \int_{-1}^1 u^*(\underline{\xi}, \underline{x}) |G(\gamma)| d\gamma = \frac{l_j}{2} \sum_{g=1}^{NG} u^*(\underline{\xi}, \underline{x}(\eta(\gamma_g))) |G(\gamma)| \omega_g
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Para o elemento constante o jacobiano da transformação de Γ por η do elemento de geometria reta é constante e igual a $l_j / 2$.

Onde γ_g são as coordenadas de Gauss e ω_g os pesos correspondentes para NG pontos de Gauss; a tabela pode ser vista em BREBBIA (1989). A distância mínima normalizada D é determinada em função da distância mínima (do ponto fonte $\underline{\xi}$ ao ponto campo $\underline{x}(\bar{\eta})$) R_{\min} e do comprimento do elemento $L=l_j$.

$$D = \frac{2R_{\min}}{L} \tag{B.5}$$

\bar{r} é um parâmetro livre determinado em Telles (1987) que depende da distância mínima normalizada D , objetivando minimizar o erro no método dos mínimos quadrados.

$$\begin{aligned}
\bar{r} &= 0 && \text{se } 0,0 \leq D \leq 0,05 \\
\bar{r} &= 0,85 + 0,24 \ln(D) && \text{se } 0,05 \leq D \leq 1,3 \\
\bar{r} &= 0,893 + 0,0832 \ln(D) && \text{se } 1,3 \leq D \leq 3,618 \\
\bar{r} &= 1 && \text{se } D \geq 3,618
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Convém observar que quando se $\bar{r}=1$, ou seja $D \geq 3,618$, as coordenadas η e γ são idênticas e o jacobiano $G=1$, ou seja, a transformada se degenera e recai-se no procedimento usual; quando $\bar{r}=0$ o ponto fonte está sobre o elemento sendo integrado.

A coordenada $\gamma = \bar{\gamma}$ do ponto do elemento campo mais próximo do ponto fonte é calculada em função de \bar{r} e $\bar{\eta}$ como:

$$\bar{\gamma} = \sqrt[3]{\left[-q + \sqrt{(q^2 + p^3)}\right]} + \sqrt[3]{\left[-q - \sqrt{(q^2 + p^3)}\right]} + \frac{\bar{\eta}}{1 + 2\bar{r}} \quad (\text{B.7})$$

$$q = \frac{1}{2(1 + 2\bar{r})} \left[\left(\bar{\eta}(3 - 2\bar{r}) - \frac{2\bar{\eta}^3}{1 + 2\bar{r}} \right) \frac{1}{1 + 2\bar{r}} - \bar{\eta} \right] \quad (\text{B.8})$$

$$p = \frac{1}{3(1 + 2\bar{r})^2} \left[4\bar{r}(1 - \bar{r}) + 3(1 - \bar{\eta}^2) \right] \quad (\text{B.9})$$

Os coeficientes do polinômio são determinados em função de \bar{r} e $\bar{\gamma}$ pela solução da equação cúbica:

$$Q = 1 + 3\bar{\gamma}^2 \quad (\text{B.10.a})$$

$$a = (1 - \bar{r})/Q \quad (\text{B.10.b})$$

$$b = -3(1 - \bar{r})\bar{\gamma}/Q \quad (\text{B.10.c})$$

$$c = (\bar{r} + 3\bar{\gamma}^2)/Q \quad (\text{B.10.d})$$

$$d = -b \quad (B.10.e)$$

Isto nos permite calcular η em função de γ .

Resumidamente:

Da geometria do elemento campo e fonte, calculamos $\bar{\eta}$ e D_{\min} .

As expressões (B.6) fornecem \bar{r} em função de D.

De posse de \bar{r} e $\bar{\eta}$ pode-se calcular q e p pelas expressões (B.8) e (B.9) que substituindo em (B.7) fornecem $\bar{\gamma}$.

Os parâmetros a, b, c e d são calculados em função de $\bar{\gamma}$ pelas expressões (B.10.a) – (B.10.e)

Nas integrações numéricas, cada ponto de Gauss é tabelado no intervalo $[-1, 1]$.

De posse de γ_g calculamos $|G(\gamma_g)|$ pela equação (B.2) e todas as funções de η são calculadas a partir da equação (B.1).

Se $(S_1 < 0)$ e $(S_2 \leq 0)$ então {para ξ_1 e ξ_2 }

$$R_{\min} = |r_2| \quad (B.11)$$

$$\bar{\eta} = 1$$

Se $(S_2 > 0)$ e $(S_1 \geq 0)$ então {para ξ_4 e ξ_5 }

$$R_{\min} = |r_1| \quad (B.12)$$

$$\bar{\eta} = -1$$

Se $(S_2 > 0)$ e $(S_1 < 0)$ então {para ξ_3 }

$$R_{\min} = \left\| \frac{1}{L} \underline{k}(r_1 X \underline{c}) \right\| = \det \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ x_1 - x_\xi & y_1 - y_\xi & 0 \\ \frac{x_2 - x_1}{L} & \frac{y_2 - y_1}{L} & 0 \end{vmatrix} = \det \begin{vmatrix} x_1 - x_\xi & y_1 - y_\xi \\ \frac{x_2 - x_1}{L} & \frac{y_2 - y_1}{L} \end{vmatrix} \quad (\text{B.13})$$

onde \underline{k} : vetor unitário na direção z; e L é o comprimento do elemento

$$R_{\min} = \left\| \frac{1}{L} [(y_2 - y_1)(x_1 - x_\xi) - (x_2 - x_1)(y_1 - y_\xi)] \right\| \quad (\text{B.14})$$

$$\bar{\eta} = 1 - \frac{|r_2 \underline{c}|}{L/2} = 1 - \left[(x_2 - x_\xi) * \left(\frac{x_2 - x_1}{L} \right) + (y_2 - y_\xi) * \left(\frac{y_2 - y_1}{L} \right) \right] * \frac{2}{L} \quad (\text{B.15})$$

onde:

x_1 e y_1 são as coordenadas do nó geométrico inicial;

x_2 e y_2 são as coordenadas do nó geométrico final;

x_ξ e y_ξ são as coordenadas do ponto fonte;

\underline{c} vetor unitário tangente ao elemento no sentido positivo de percurso do contorno;

\underline{r}_2 vetor que liga o ponto fonte ao nó geométrico final;

\underline{r}_1 vetor que liga o ponto fonte ao nó geométrico inicial;

APÊNDICE C - SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS UTILIZANDO ELEMENTOS DE CONTORNO PARA MEIOS PREDOMINANTEMENTE ADVECTIVOS

A equação da difusão-advecção apresenta um componente não dissipativo (advectivo) e outro dissipativo (difusivo). A relação entre os efeitos destes componentes é representado pelo número adimensional de Péclet, cujo valor numérico define quantas vezes o meio é mais advectivo do que difusivo, sendo matematicamente definido pela expressão (C.1), onde v é a velocidade em m / s , l é um comprimento de referência em metros e k é a difusividade em m^2 / s . Outras unidades podem ser utilizadas desde que a substituição das mesmas, na equação (C.1), torne o número de Péclet adimensional.

$$P_e = \frac{v.l}{k} \tag{C.1}$$

A solução fundamental da equação da difusão-advecção utilizando o método dos elementos de contorno apresenta singularidade logarítmica quando o ponto fonte coincide com o ponto campo. Para resolver este problema foi utilizado a transformada de Telles (1987) como descrito no APÊNDICE B. Porém, essa não é a única dificuldade para a implementação computacional desta solução; há também o problema de oscilações numéricas geradas pela componente da velocidade do meio.

A equação da difusão-advecção bidimensional, considerando por simplicidade os coeficientes constantes, pode ser apresentada pela equação (C.2).

$$\nabla^2 u - \frac{v_x}{k} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{v_y}{k} \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \tag{C.2}$$

Onde v_x e v_y são as componentes do vetor velocidade, k é o coeficiente de difusividade (considerando o meio isotrópico e homogêneo) e u é o potencial (temperatura ou concentração).

A equação integral equivalente que representa a equação diferencial (C.2) pode ser determinada utilizando a solução fundamental e as identidades de Green, sendo a expressão final para pontos internos representada pela equação (C.3).

$$u(\xi) = k \int_{\Gamma} u^*(\xi, x) \frac{\partial u(x)}{\partial n_z} d\Gamma(x) - k \int_{\Gamma} u(x) \frac{\partial u^*(\xi, x)}{\partial n_z} d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} u(x) u^*(\xi, x) v_n d\Gamma(x) \quad (\text{C.3})$$

As duas primeiras integrais da equação (C.3) representam o efeito difusivo e a terceira integral é referente ao efeito advectivo, onde v_n é o produto escalar entre o vetor velocidade e o vetor normal ao contorno.

Em meios predominantemente advectivos, o que numericamente é representado por um grande número de Péclet, temos presente o problema das oscilações numéricas, em que QIU, WROBEL e POWER (1998) e também SAMEC e SKERGET (2004) sugerem a utilização da solução fundamental correspondente a cada tipo de singularidade, podendo esta ser fraca, forte ou hiper singular. As expressões (C.4), (C.5) e (C.6) apresentam respectivamente as três soluções fundamentais.

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{2\pi k} \exp\left(\frac{-vR}{2k}\right) k_0(\mu r) \quad (\text{C.4})$$

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{2\pi k} \exp\left(\frac{-vR}{2k}\right) \left[\mu k_1(\mu r) \frac{r_x}{r} \right] \quad (\text{C.5})$$

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{2\pi k} \exp\left(\frac{-vR}{2k}\right) \left[\mu k_1 (\mu r) \frac{1}{r} \right] \quad (\text{C.6})$$

Nestas expressões k_0 e k_1 são as funções de Bessel de segunda classe de ordens 0 e 1 respectivamente, sendo $\mu = |v|/(2k)$ a velocidade média e $r = |R|$ a distância vetorial entre os pontos campo e fonte.

A implementação computacional destas três soluções fundamentais não é trivial devido às singularidades e quando se tem grandes números de Péclet. Este problema pode ser minimizado expandindo a função exponencial em séries de Taylor conforme a igualdade da expressão (C.7) e desenvolvendo as funções de Bessel correspondentes.

$$\exp(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad (\text{C.7})$$

O número de termos quando do truncamento da série de Taylor para solução fundamental dependente do tempo da equação da difusão-advecção transiente bidimensional (SOUZA, 1999), tendo-se concluído que é necessário e suficiente considerar os três primeiros termos da expansão, conforme está apresentado na Tabela 4 e na Figura C 1 .

C.1 – TRUNCAMENTO DA EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR PARA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE

Devido à dificuldade de se obter a integral analítica no tempo da solução fundamental da equação da difusão-advecção transiente, expandiu-se em série de Taylor a terceira exponencial da solução fundamental, a correspondente a convecção no tempo ou a advecção transiente, truncando no terceiro termo devido à influência dos termos seguintes ser muito pequena.

Posteriormente dividiu-se o primeiro intervalo de tempo em dois trechos, onde no primeiro trecho utilizou-se a transformada cúbica de Telles (1987) para retirar a singularidade logarítmica e no segundo foi calculada a solução fundamental como nos demais níveis de tempo.

Denominou-se por *SOLFUNDT* a solução fundamental dependente do tempo que foi utilizada para fins de implementação computacional (subrotina *solnum1*) na primeira parte do primeiro intervalo de tempo, sendo *r* a distância euclidiana.

$$SOLFUNDT = \frac{1}{4\pi\tau} \exp\left[\frac{-r^2}{4\tau}\right] \exp\left[-Pe(x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}))\right] \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{-Pe^2}{4}\right)^n}{n!} (\tau)^n \right] \quad (C.8)$$

Tabela 4 - Truncamento da solução fundamental dependente do tempo.

r	SOLFUNDT (1 termo)	SOLFUNDT (2 termos)	SOLFUNDT (3 termos)	SOLFUNDT (4 termos)	SOLFUNDT (5 termos)
0,001	0,789388	0,71062064	0,69092423	0,6909215	0,69010079
0,011	0,37254235	0,30222156	0,28440044	0,28439796	0,28365388
0,021	0,254235	0,19181862	0,17570127	0,17569902	0,17502214
0,031	0,1853306	0,12999811	0,11543767	0,1151264	0,11481779
0,041	0,1390985	0,08986581	0,07673631	0,07615321	0,07616863
0,051	0,10607282	0,06197376	0,050165578	0,04963112	0,04964417
0,061	0,0816592	0,04180177	0,03121859	0,0342513	0,0373774
0,071	0,06323276	0,02682313	0,01737776	0,0171354	0,0169331
0,081	0,04913818	0,01548744	0,00710068	0,0068581	0,00668825

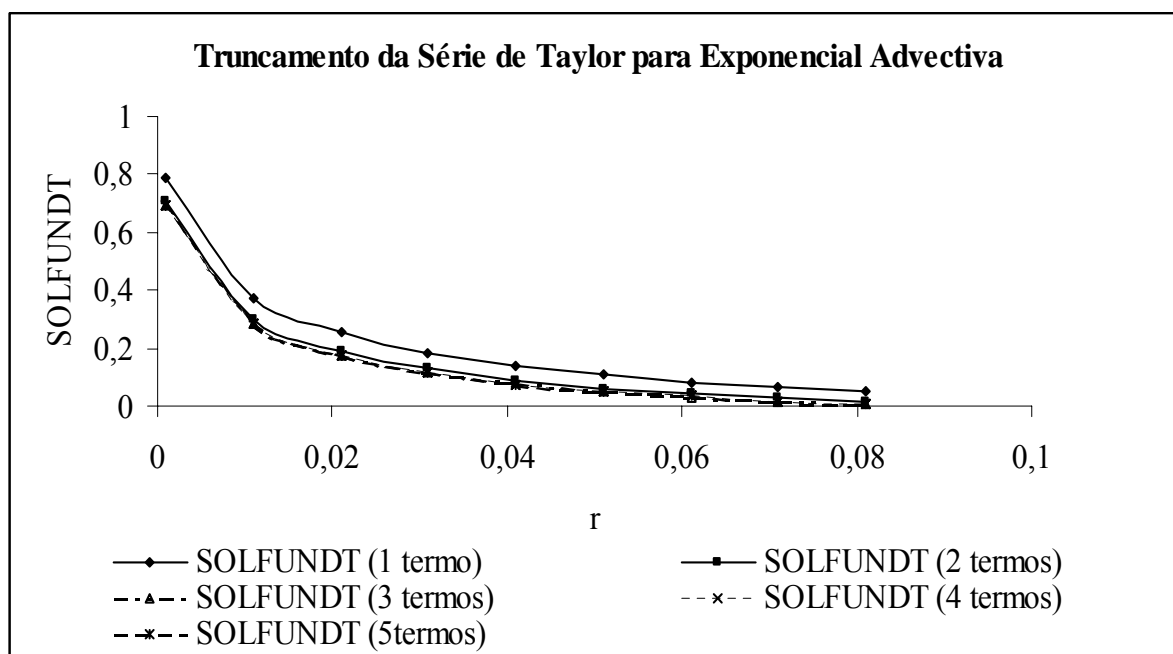


Figura C 1 - Truncamento da exponencial advectiva do MDASFDT.

QIU, WROBEL e POWER (1998) determinaram através do uso da expansão em série de Taylor e do desenvolvimento das funções de Bessel, soluções fundamentais para equação da difusão-advecção independente do tempo, estabelecendo uma forma diferente e de implementação computacional mais viável, a qual leva as equações (C.9), (C.10) e (C.11) correspondentes respectivamente às expressões (C.4) , (C.5) e (C.6), sendo estas expressões as soluções fundamentais para o caso bidimensional para diferentes tipos de singularidade.

$$u^*(\xi, x) = -\frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \cdot \ln(\mu r/2) \quad (\text{C.9})$$

$$u^*(\xi, x) = -\frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \cdot \left(\frac{r_x}{r^2} \right) \quad (\text{C.10})$$

$$u^*(\xi, x) = -\frac{1}{2\pi k} \left(1 + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)}{1!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^2}{2!} + \frac{\left(\frac{-vR}{2k}\right)^3}{3!} \right) \cdot \left(\frac{1}{r^2} + \frac{-v \cdot r}{r^2} + \ln(\mu r/2) \right) \quad (\text{C.11})$$

APÊNDICE D - SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS SIMULAÇÕES EM TRECHOS DO RIO PARAÍBA DO SUL

Com o objetivo de testar o modelo MDA em simulações em rios, analisou-se um problema com solução analítica determinada por VAN GENUCHTEN e ALVES (1982), e que foi utilizada na seção (6.5) e (6.7).

Seja a equação da difusão-advecção unidimensional apresentada pela expressão (D.1).

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial u}{\partial x} - \mu u \quad (\text{D.1})$$

com condições de contorno e iniciais definidas pelas equações (D.3) e (D.2) respectivamente.

$$u(x, 0) = u_i \quad \text{condição inicial.} \quad (\text{D.2})$$

$$u(0, t) = \begin{cases} u_o & 0 < t \leq t_0 \\ 0 & t > t_0 \end{cases} \quad \text{condições de contorno.} \quad (\text{D.3})$$

$$\frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = 0$$

onde a solução analítica é dada por:

$$u(x,t) = \begin{cases} u_i A(x,t) + u_0 B(x,t) & 0 < t \leq t_0 \\ u_i A(x,t) + u_0 B(x,t) - u_0 B(x,t-t_0) & t > t_0 \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

sendo u_0 e u_i constantes, e:

$$A(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} E(\beta m, x) \exp \left[\frac{ux}{2k} - \mu t - \frac{u^2 t}{4k} - \frac{\beta m^2 kt}{L^2} \right] \quad (\text{D.5})$$

onde

$$B_1(x,t) = 1 - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{E(\beta m, x) \frac{vL^2}{K} \exp \left\{ \frac{ux}{2k} \right\}}{\left[\beta m^2 + \left(\frac{uL}{2k} \right)^2 + \frac{uL^2}{K} \right]} \quad (\text{D.6})$$

$$B_2(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{E(\beta m, x) \left[\beta m^2 + \left(\frac{uL}{2k} \right)^2 \right] \exp \left[\frac{ux}{2k} - \mu t - \frac{u^2 t}{4k} - \frac{\beta m^2 Kt}{L^2} \right]}{\left[\beta m^2 + \left(\frac{uL}{2k} \right)^2 + \frac{uL^2}{K} \right]} \quad (\text{D.7})$$

$$E(\beta m, x) = \frac{2\beta m \sin \left[\frac{\beta mx}{L} \right]}{\left[\beta m^2 + \left(\frac{uL}{2k} \right)^2 + \frac{uL^2}{K} \right]} \quad (\text{D.8})$$

$$v = u \left(1 + \frac{4\mu k}{u^2} \right)^{\left(\frac{1}{2}\right)} \quad (\text{D.9})$$

sendo os valores característicos βm são raízes positivas de

$$\beta m \cot(\beta m) + \frac{vL}{2k} = 0 \quad (\text{D.10})$$

De uma forma alternativa, mais facilmente determinada, pode-se expressar o termo

$B_1(x)$ por:

$$B_1(x) = \frac{\exp\left(\frac{(u-v)x}{2k}\right) + \left(\frac{v-u}{v+u}\right) \exp\left\{\frac{(u+v)x}{2k} - \frac{vL}{k}\right\}}{\left[1 + \left(\frac{u-v}{u+v}\right) \exp\left\{-\frac{vL}{k}\right\}\right]} \quad (\text{D.11})$$

Alternativamente, pode-se empregar a seguinte solução aproximada:

$$A_1(x,t) = \exp(-\mu t) \left\{ \begin{aligned} & \left[1 - \frac{1}{2} \exp(ux/K) \operatorname{erfc}\left[\frac{x-ut}{2(Kt)^{1/2}}\right] - \frac{1}{2} \exp(ux/K) \operatorname{erfc}\left[\frac{x-ut}{2(Kt)^{1/2}}\right] \right] \\ & - \frac{1}{2} \left[2 + \frac{u(2L-x)}{K} + \frac{u^2 t}{K} \right] \exp(uL/K) \operatorname{erfc}\left[\frac{(2L-x)+ut}{2(Kt)^{1/2}}\right] + \\ & \left(\frac{u^2 t}{\pi K} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{uL}{K} - \frac{1}{4Kt} (2L-x+ut)^2\right] \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.12})$$

$$B(x,t) = B_3(x,t) / B_4(x) \quad (D.13)$$

onde:

$$\begin{aligned}
B_3(x,t) = & \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(u-v)x}{2K}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x-vt}{2(Kt)^{1/2}}\right] \\
& + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(u+v)x}{2K}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x-vt}{2(Kt)^{1/2}}\right] \\
& + \frac{(v-u)}{2(v+u)} \exp\left[\frac{(u-v)x-2vL}{2K}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{(2L-x)+vt}{2(Kt)^{1/2}}\right] \\
& + \frac{(v+u)}{2(v-u)} \exp\left[\frac{(u-v)x-2vL}{2K}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{(2L-x)+vt}{2(Kt)^{1/2}}\right] \\
& + \frac{(v)}{2\mu K} \exp\left[\frac{uL}{K} - \mu t\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{(2L-x)+vt}{2(Kt)^{1/2}}\right]
\end{aligned} \quad (D.14)$$

$$B_4(x) = 1 + \frac{(v-u)}{(v+u)} \exp(-vL/K) \quad (D.15)$$

Função EXF(A,B):

Esta função é definida como o produto de uma função exponencial (exp) e uma função erro complementar (erfc) como a seguir:

$$EXF(A,B) = \exp(A) \operatorname{erfc}(B) \quad (D.16)$$

onde:

$$\operatorname{erfc}(B) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_B^{\infty} \exp(-\tau^2) d\tau \quad (D.17)$$

Duas aproximações diferentes são usadas para EXF(A,B).

Para $0 \leq B \leq 3$

$$EXF(A,B) \approx \exp(A - B^2) (a_1\tau + a_2\tau^2 + a_3\tau^3 + a_4\tau^4 + a_5\tau^5) \quad (D.18)$$

onde:

$$\tau = \frac{1}{1 + 0,3275911B} \quad (D.19)$$

$$\begin{aligned} a_1 &= 0,2548296 \\ a_2 &= -0,2844967 \\ a_3 &= 1,421414 \\ a_4 &= 1,453152 \\ a_5 &= 1,061405 \end{aligned} \quad (D.20)$$

Para $B > 3$

$$EXF(A,B) \cong \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(A - B^2) / [(B + 0,5)(B + 1)(B + 1,5)(B + 2)(B + 2,5)] \quad (D.21)$$

Para valores negativos de B, a seguinte relação adicional é utilizada:

$$EXF(A,B) = 2 \exp(A) - EXF(A,-B) \quad (D.22)$$

A função EXF(A,B) não pode ser usada para valores muito pequenos ou muito grandes dos argumentos A e B. A função retorna zero para duas condições:

$$\begin{aligned} |A| > 170 & \quad B \leq 0 \\ \text{ou} & \\ |A - B^2| > 170 & \quad B > 0 \end{aligned} \quad (D.23)$$