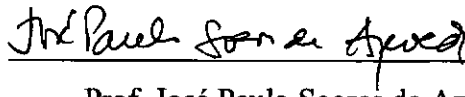


**IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO DOS ELEMENTOS
DE CONTORNO PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE
DIFUSÃO - ADVECCÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL**

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 OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS
(M.Sc.) EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:



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

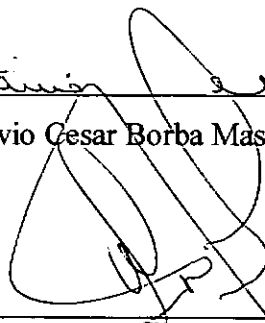
(Presidente)



Prof. Webe João Mansur, Ph.D.



Prof. Flávio Cesar Borba Mascarenhas, D.Sc.



Prof. Waldyr de Lima e Silva Jr., Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 1999

SOUZA, MARCOS DENICIO DA SILVA DE

Implementação Computacional
do Método dos Elementos de Contorno
para Solução Numérica de Problemas
de Difusão - Advecção Transiente

Bidimensional [Rio de Janeiro] 1999

VIII, 103 p.29,7 cm(COPPE/UFRJ,M.Sc.,

Engenharia Civil, 1999)

Tese - Universidade Federal do
Rio de Janeiro, COPPE

1.Elementos de Contorno

2.Métodos Numéricos

3.Problemas de Difusão - Advecção

I. COPPE/UFRJ II. Título(série)

IV

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que direta ou indiretamente tornaram possível este trabalho:

Ao professor orientador José Paulo Soares de Azevedo pela dedicação, incentivo, organização, entusiasmo, bem como por demonstrar ser um fiel cumpridor das regras pertinentes nesta instituição de ensino superior.

Aos professores Webe João Mansur e José Cláudio de Farias Telles pela disponibilidade, atenção e material didático fornecido.

Ao professor Waldyr de Lima e Silva Jr., da Universidade Federal do Paraná(UFPR), pela atenção e disponibilidade em participar da banca da tese.

A professora Maria do Carmo Cauduro Gastaldini, da Universidade Federal de Santa Maria, pela carta de recomendação, amizade e incentivo para fazer o mestrado.

Aos professores da Área de Recursos Hídricos pelo embasamento teórico.

Aos professores e funcionários do Programa de Engenharia Civil da COPPE/UFRJ.

A Coordenação de apoio a pesquisa de nível superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

À Fundação José Bonifácio (FUJB) da UFRJ pelos computadores e impressoras adquiridos pelo projeto nº7631/7.

Aos colegas dos cursos de Mestrado e Doutorado pelo incentivo e amizade, em especial a Carlos Eduardo Ferraz(Cadu), Rafael Kelman, Carlos de Oliveira Cardoso, Julio Cesar de Jesus, Jacqueline Moura Medina Diniz, Antônio Luiz, Marco Aurélio Ferro, Patrícia Fetter Marques.

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

A meus pais, pelo incentivo, paciência e carinho .

A Deus, que me deu a oportunidade de existir.

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

IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE
CONTORNO PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE DIFUSÃO -
ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL

Marcos Denicio da Silva de Souza

MARÇO, 1999

Orientador: Prof. José Paulo Soares de Azevedo

Programa: Engenharia Civil

No presente trabalho o Método dos Elementos de Contorno é usado para solução numérica da Equação da Difusão -Advecção para duas dimensões, adotando-se soluções fundamentais transientes. A equação integral de contorno é aproximada numa discretização em elementos constantes tanto no espaço quanto no tempo.

Os programas desenvolvidos consideram que em cada elemento do contorno é conhecido um valor de potencial ou de fluxo ao longo do tempo. Fazendo uso de um processo de marcha no tempo os valores de potencial e fluxo tornam-se conhecidos em todo o contorno, sendo possível a obtenção dos valores de potencial em pontos internos do domínio para cada intervalo de tempo.

A singularidade que surge no primeiro passo de tempo quando o ponto fonte pertence ao elemento campo é removida com um processo de repartição do primeiro nível de tempo e fazendo uso da transformada de Telles no primeiro trecho. Fazemos comparações entre os resultados numéricos e outros presentes na literatura.

Summary of the thesis presented to COPPE/UFRJ as part of the necessary requirements for obtaining the degree of master of science (M.Sc.)

COMPUTER IMPLEMENTATION OF THE BOUNDARY ELEMENT METHOD
FOR NUMERICAL SOLUTION OF TWO-DIMENSIONAL TRANSIENT
ADVECTION – DIFFUSION PROBLEMS

MARCOS DENICIO DA SILVA DE SOUZA

MARCH, 1999

Supervisor: Prof. José Paulo Soares de Azevedo

In the present work the Boundary Element Method is used for the numerical solution of the two – dimensional advection–diffusion equation employing transient fundamental solutions. The boundary integral equation is approximated by discretization the space and time dimensions using constant elements.

The developed programs consider that on every boundary element either a potential value or its normal derivative is known along the time. We make use of a time stepping process to compute the potential values and its normal derivative along the time. In time to compute potential values and its normal derivative known on the boundary out every time-step, being possible to obtain the potential and the gradient at internal points of the domain for each interval of time.

The singularity that appears in the first time-step when the source point belongs to the element field is removed analytically. The numerical results obtained with this formulation are compared with others available in the literature.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO TRANSIENTE	4
2.1 - Introdução	5
2.2 - Método dos Elementos de Contorno para a Equação da Difusão Transiente	7
2.2.1- Equação Integral de Contorno	7
2.2.2- Discretização Espacial usando Elementos Constantes	9
2.2.3- Expressão Matricial do MEC	11
CAPÍTULO 3 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO - ADVECÇÃO TRANSIENTE.....	14
3.1 - Introdução	15
3.2 - Método dos Elementos de Contorno para a Equação da Difusão- Advecção em Regime Permanente.....	16
3.3 - Método dos Elementos de Contorno para a Equação da Difusão – Advecção Transiente	18
3.3.1 - Equação Integral de Contorno	22
3.3.2 - Implementação Numérica	23
3.3.3 - Equação Integral de Contorno para pontos internos	27
3.3.4 - Detalhes da Implementação Computacional	28

CAPÍTULO 4 - APLICAÇÕES	32
4.1 - Introdução	33
4.2 – Difusão - Advecção Transiente Bidimensional em Região Quadrada...	34
4.3 - Simulação de Difusão - Advecção Unidimensional	38
4.4 - Difusão - Advecção Transiente Bidimensional em Região Retangular..	44
4.5 - Difusão - Advecção Transiente Bidimensional em Região Circular devido a Choques Térmicos Sucessivos.....	46

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES	49
-------------------------------	----

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	52
----------------------------------	----

APÊNDICES

APÊNDICE A –INTEGRAÇÃO QUASE - SINGULAR COM TRANSFORMAÇÃO CÚBICA PARA ELEMENTOS CONSTANTES	54
---	----

APÊNDICE B - COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS DA INTEGRAÇÃO ANALÍTICA E A NUMÉRICA PARA A DIFUSÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL	58
--	----

APÊNDICE C - ANÁLISE GRÁFICA E NUMÉRICA DO DECAIMENTO DAS MATRIZES [G] E [H] AO LONGO DO TEMPO PARA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO E DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL.....	61
---	----

APÊNDICE D - ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO - ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL COM O TRUNCAMENTO DA EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR	64
--	----

APÊNDICE E - ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DA DIFUSÃO E DA DIFUSÃO - ADVECÇÃO EM UM TRECHO DE RIO FICTÍCIO	67
APÊNDICE F - ANÁLISE GRÁFICA DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL AO LONGO DO TEMPO PARA DISTÂNCIAS FIXAS DO PONTO FONTE AO ELEMENTO CAMPO E NO PLANO INFINITO PARA TEMPOS DE MEDIÇÕES FIXOS PARA A DIFUSÃO E PARA DIFUSÃO - ADVECÇÃO	69
APÊNDICE G - LISTAGEM DO PROGRAMA DACC PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE EM DUAS DIMENSÕES PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO	71

Capítulo 1 - INTRODUÇÃO

1- INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos de Contorno (MEC) ganhou popularidade 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, dentre as quais podemos 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.

A Equação da Difusão-Advecção transiente representa a distribuição de potencial em um meio ao longo do tempo, podendo também ser aplicada a problemas de diluição de poluente em rios.

A ênfase deste trabalho é na extensão dos procedimentos de elementos de contorno da difusão transiente bidimensional e conseqüente descrição da implementação computacional, onde a contribuição de termos envolvendo integrais de domínio não foi considerada.

Utilizou-se um programa em linguagem Fortran para solução da Equação da Difusão-Advecção em duas dimensões empregando-se elementos constantes no espaço e no tempo, que chamamos de “DACC” (Difusão-Advecção, Elemento de contorno Constante no Espaço e Constante no Tempo).

No Capítulo 2, a Formulação Integral de Contorno é revista para o caso de Difusão em regime transiente onde o procedimento espacial é descrito para elementos constantes.

Posteriormente, no capítulo 3, os procedimentos são estendidos para o caso de Difusão-Advecção Transiente, usando soluções fundamentais dependentes do tempo, com uma aproximação que também considera o potencial e o fluxo constantes em cada intervalo de tempo.

No capítulo 4, são apresentados resultados do método obtidos para exemplos encontrados na literatura e comparações com o valor analítico destes.

O tratamento numérico da integral singular que aparece nos capítulos 2 e 3, a análise entre os resultados numéricos dos programas, a comparação entre as matrizes de influência, a análise dos fenômenos da Difusão e da Difusão-Advecção e a listagem do programa são incluídos nos apêndices.

**Capítulo 2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA
PROBLEMAS DE DIFUSÃO TRANSIENTE**

2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO

2.1 – INTRODUÇÃO

Neste capítulo é feita uma revisão do método dos elementos de contorno para a solução aproximada da equação da Difusão transiente bidimensional, cuja formulação Integral de Contorno correspondente pode ser obtida através do uso de uma sentença de resíduos ponderados e das identidades de Green como em Wrobel (1981), Effren (1997).

Na Seção 2.2, aplica-se o MEC na solução da Equação da Difusão em regime transiente, considerando que em cada trecho do contorno (elemento) a variação no tempo do potencial ou de sua derivada normal é conhecida *a priori*.

Na Seção 2.2.1, a Equação Integral de Contorno é aproximada substituindo-se a geometria real por segmentos de reta (elementos) e a variação das funções por valores nodais em cada elemento.

Na Seção 2.2.2, é abordada a discretização no tempo, que considera que o potencial ou sua derivada são constantes em cada intervalo de tempo dentro de cada elemento.

Na Seção 2.2.3, apresenta-se a expressão matricial para regime transiente. No primeiro intervalo de tempo, há uma singularidade quando o ponto fonte coincide com o elemento campo. Visando a inclusão da advecção, na implementação computacional faz-se uma repartição do primeiro intervalo de tempo e aplica-se a Transformada de Telles na integração da solução fundamental no primeiro trecho.

No caso permanente, a solução evidentemente independe das condições iniciais e as condições de contorno não variam com o tempo. Fisicamente, isto corresponde à difusão de calor em um sólido inicialmente com uma certa distribuição

de temperaturas no qual aplicamos condições de contorno em Γ_u, Γ_p que são mantidas inalteradas por um longo tempo quando a distribuição espacial de temperaturas passa a não se alterar.

A distribuição de temperaturas chegará a um regime permanente, qualquer que tenha sido a distribuição de temperaturas no início do processo.

Um processo de marcha no tempo é necessário para a solução porque a expressão integral para cada tempo depende de todos os valores obtidos em tempos anteriores.

O programa desenvolvido neste trabalho considera que em cada elemento do contorno conhece-se o valor de u ou de p ao longo do tempo e que o avanço no tempo é feito com passos de tempo constantes.

Resultados numéricos obtidos anteriormente por Effren (1997) são comparados com os obtidos pelo programa DCCNR (Difusão - Advecção com elemento de contorno constante no espaço e constante no tempo, integrado numericamente com repartição no primeiro nível de tempo) a fim de validar a implementação, que serviu de etapa intermediária para a implementação do método dos elementos de contorno para difusão - advecção transiente bidimensional.

2.2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO TRANSIENTE

2.2.1 - EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO PARA DIFUSÃO

A equação diferencial da difusão transiente é dada por Wrobel (1981):

$$\nabla^2 u - \frac{1}{\alpha} \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (2.1)$$

Onde α , aqui admitido constante, é a difusividade invariante no tempo e espaço possuindo dimensão ($L^2 T^{-1}$)

As condições de contorno diferem das correspondentes ao regime permanente apenas pelo fato de serem prescritas ao longo do tempo (conhecidas *a priori*):

$$u(x, t) = \bar{u}(x, t) \quad \text{em} \quad \Gamma_u \quad (2.2)$$

$$p(x, t) = \frac{\partial u(x, t)}{\partial n(x)} = \bar{p}(x, t) \quad \text{em} \quad \Gamma_p \quad (2.3)$$

Neste trabalho, as condições iniciais foram admitidas como nulas, isto é:

$$u(\underline{x}, 0) = \bar{u}(\underline{x}, 0) = 0 \quad \text{em} \quad \Omega \quad (2.4)$$

A consideração de condições iniciais não nulas não apresenta nenhuma dificuldade prática, podendo sempre ser feita através de uma subdivisão do domínio em células e integração de funções conhecidas nestas células, a exemplo do que se faz na consideração do termo independente para a equação de Poisson, Wrobel (1981), Effren (1997).

No entanto muitas vezes a proximidade dos valores de condições de contorno com a situação física real faz com que o processo numérico convirja mais rapidamente.

Como em EFFREN (1997), neste trabalho empregou-se a abordagem que faz uso de soluções fundamentais dependentes do tempo para transformar a equação diferencial em uma equação integral de contorno, válida para pontos do contorno e do domínio.

$$c(\underline{\xi})u(\underline{\xi}, t_f) = \alpha \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Gamma} p(x, t) u^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) d\Gamma(x) dt - \alpha \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Gamma} u(x, t) p^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) d\Gamma(x) dt \quad (2.5)$$

onde: $c(\underline{\xi})$ é a razão entre o ângulo interno no ponto $\underline{\xi}$ e 2π , como no caso permanente e α foi admitido constante no espaço e no tempo.

Em duas dimensões, a solução fundamental dependente do tempo u^* e sua derivada normal p^* , são dadas por:

$$u^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) = \frac{1}{4\pi\alpha\tau} \exp\left[\frac{-r^2}{4\alpha\tau}\right] \quad (2.6)$$

$$p^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) = \frac{-r}{8\pi\alpha^2\tau^2} \frac{\partial r}{\partial n} \exp\left[\frac{-r^2}{4\alpha\tau}\right] \quad (2.7)$$

onde: $-r \cdot \frac{\partial r}{\partial n} = [X_1(\underline{x}) - X_1(\underline{\xi})]n_1(\underline{x}) + [X_2(\underline{x}) - X_2(\underline{\xi})]n_2(\underline{x})$ é a projeção da distância r sobre a normal ao contorno.

Aqui: t é o tempo de aplicação da fonte, t_f é o tempo de observação e $\tau = t_f - t$.

2.2.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL USANDO ELEMENTOS CONSTANTES

Como no caso permanente, a aproximação geométrica substitui o contorno original por NE elementos retilíneos.

$$c(\underline{\xi})u(\underline{\xi}, t_f) = \alpha \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} \int_{t_0}^{t_f} p(x, t) u^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) dt d\Gamma_j(x) - \alpha \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} \int_{t_0}^{T_F} u(x, t) p^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) dt d\Gamma_j(x) \quad (2.8)$$

Para discretização funcional no tempo, considerou-se também que u e p são constantes em cada intervalo dentro de cada elemento Γ_j . Levando-se em conta também que o contorno é suave em $\underline{\xi}$, $C(\underline{\xi})=0,5$. Introduzindo estas aproximações na equação (2.8), e permutando a ordem de integração no espaço e no tempo, temos, para cada nó funcional:

$$0,5u_i^{NT} = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} \sum_{k=1}^{NT} p^k(x) \int_{t_0^k}^{t_f^k} \alpha u^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) dt d\Gamma_j(x) - \alpha \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} \sum_{k=1}^{NT} u^k(x) \int_{t_0^k}^{t_f^k} \alpha p^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) dt d\Gamma_j(x) \quad (2.9)$$

onde: NT é o número de intervalos em que o período de tempo considerado é dividido. $u_i^{NT} = u(\underline{\xi}, t_f)$ é o valor de u no tempo t^{NT} no ponto $\underline{\xi}$; t_0^k, t_f^k são os tempos inicial e final do intervalo de tempo k .

A discretização funcional espacial é feita, como no caso permanente, tomando-se $u^k(x)$ e $p^k(x)$ constantes em cada elemento. Introduzindo-se esta aproximação em (2.9) obtém-se:

$$0,5u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \sum_{j=1}^{NE} p_j^k \int_{\Gamma_j} \int_{t_0^k}^{t_f^k} \alpha u^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) dt d\Gamma_j(x) - \sum_{k=1}^{NT} \sum_{j=1}^{NE} u_j^k \int_{\Gamma_j} \int_{t_0^k}^{t_f^k} \alpha p^*(\underline{\xi}, x; t_f, t) dt d\Gamma_j(x) \quad (2.10)$$

o que depende dos valores de u e p nos nós funcionais do contorno de todos os tempos discretos t^1, t^2, \dots, t^{NT}

Após introduzir aproximação geométrica no espaço (elemento reto) e aproximação funcional (u e p constantes em cada elemento durante um intervalo de tempo discreto). Torna-se necessário um processo de marcha no tempo para calcularmos u_i^{NT} e p_m^{NT} .

Integrando-se no tempo, a equação (2.10) pode ser escrita como:

$$0,5u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} p_j^k \int_{\Gamma_j} u_k^*(\xi, x) d\Gamma_j(x) - \sum_{j=1}^{NE} u_j^k \int_{\Gamma_j} p_k^*(\xi, x) d\Gamma_j(x) \right) \quad (2.11)$$

Fizemos a integração numérica na difusão e comparada com a analítica obtida por Effren (1997), tendo encontrado bons resultados (APÊNDICE B). Objetivando, posteriormente, estender para advecção, em virtude de não possuímos a expressão analítica.

Onde:

$$U_k^*(\xi, x) = \frac{1}{4\pi} [E_1(a_0^k) - E_1(a_f^k)] \quad (2.12)$$

$$P_k^*(\xi, x) = \frac{1}{2\pi r} [\exp(-a_0^k) - \exp(-a_f^k)] \frac{\partial r}{\partial n} \quad (2.13)$$

$$a_0^k = \frac{r^2}{4\alpha(t_f - t_0^k)} \quad a_f^k = \frac{r^2}{4\alpha(t_f - t_f^k)} \quad (2.14)$$

e E_1 é a função Exponencial-integral.

As integrações de $U_k^*(\xi, x)$ e $P_k^*(\xi, x)$ são obtidas numericamente por quadratura de Gauss.

2.2.3 - EXPRESSÃO MATRICIAL DO MEC

Como no caso permanente, a equação (2.11) pode ser escrita em termos dos coeficientes de influência de H_{ij} e G_{ij} para cada ponto de colocação como:

$$0,5 u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left[\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k P_j^k - \sum_{j=1}^{NE} H_{ij}^k u_j^k \right] \quad (2.15)$$

Onde u_j^k e p_j^k são os valores de u e p , respectivamente, em cada intervalo de tempo para o nó funcional de cada elemento Γ_j , aqui admitidos constantes no elemento durante o intervalo de tempo.

$$G_{ij}^k = \int_{\Gamma_j} U_k^*(\xi, x) d\Gamma_j(x) \quad (2.16)$$

$$H_{ij}^k = \int_{\Gamma_j} p_k^*(\xi, x) d\Gamma_j(x) \quad (2.17)$$

No caso transiente, a integração de G é singular quando o ponto fonte pertence ao elemento campo para o primeiro intervalo de tempo ($k=1, i=j$), enquanto que a integração de H_{ij} se anula como no caso permanente.

Para esta integração, o termo logarítmico que aparece na expansão em série da exponencial integral pode ser subtraído e integrado analiticamente, como mostrado em Effren (1997), sendo acrescentado ao resultado da integração numérica da expressão restante, ou pode-se retirar essa singularidade com o processo de repartição do primeiro intervalo de tempo e aplicação da transformada de Telles no trecho singular (o 1º trecho), o que possibilita a redução do número de pontos de

Gauss necessário para a integração numérica e resolve o problema de singularidade logarítmica encontrado na Difusão - Advecção.

$$H_{ii}^1 = 0 \tag{2.18}$$

$$G_{ii}^1 = G_R + G_S \tag{2.19}$$

Onde: G_R é regular, calculado pela quadratura de Gauss sem o termo logarítmico e G_S , singular, com o termo logarítmico resolvido com auxílio da transformada de Telles no trecho singular.

Os coeficientes G_{ij} e H_{ij} nos demais casos são calculados pelas equações (2.16) e (2.17), empregando-se a quadratura de Gauss com transformada de Telles também por ser auto - adaptativo como no caso permanente.

Escrevendo-se a equação (2.15) para cada ponto fonte, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\sum_{k=1}^{NT} [H]^k \{u\}^{NT-k+1} = \sum_{k=1}^{NT} [G]^k \{p\}^{NT-k+1} \tag{2.20}$$

Para determinar os valores de (u) e (p) no tempo NT é necessário um esquema de marcha no tempo a partir de NT=1, já que não conhecemos a priori os valores de u_j e p_j em todos os tempos.

Uma vez conhecidos u_j e p_j em todo o contorno em NT=1, pode-se avançar no tempo e calcular u_j e p_j usando a expressão (2.20) particularizada para NT = 2 e assim sucessivamente.

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

$$[H]^1 \{u\}^{NT} = [G]^1 \{p\}^{NT} + \{h\}^{NT} \tag{2.21}$$

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

$$\{h\}^{NT} = \sum_{k=2}^{NT} \left([G]^k \{p\}^{NT-k+1} - [H]^k \{u\}^{NT-k+1} \right) \quad (2.22)$$

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

Aplicando-se as condições de contorno no tempo NT obtém-se mais uma vez um sistema de equações algébricas:

$$[A]^1 \{x\}^{NT} = \{f\}^{NT} + \{h\}^{NT} \quad (2.23)$$

que após sua solução fornece os valores de u_j e p_j em todo o contorno, no tempo NT.

Potenciais em pontos internos são obtidos introduzindo-se as aproximações geométricas e funcionais (espaciais e temporais) na equação (2.5) com $c(\underline{\xi}) = 1$:

$$u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k p_j^k - \sum_{j=1}^{NE} H_{ij}^k u_j^k \right) \quad (2.24)$$

A cada passo de tempo, todos os valores de u_j^k e p_j^k , no contorno são conhecidos até o nível de tempo atual. Os coeficientes G_{ij}^k e H_{ij}^k , são calculados para cada ponto interno pelas mesmas expressões (2.16) e (2.17).

Capítulo 3 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO

3 - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO

3.1- INTRODUÇÃO

Neste capítulo, apresenta-se o Método dos Elementos de Contorno para solução da equação da Difusão-Advecção, 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 3.2, o MEC 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 de soluções fundamentais dependentes do tempo.

Na Seção 3.2.2, é realizada a discretização no tempo, que considera que o potencial ou 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 3.2.3, é apresentada a expressão matricial 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 repartição no primeiro intervalo de tempo e o auxílio da transformada de Telles no primeiro trecho ao que chamamos de IUcedo nos programas DACC e DCCNR.

O sistema de equações é resolvido para cada intervalo de tempo, levando em consideração a influência dos valores obtidos nos passos de tempo anteriores.

Na Seção 3.2.4, a implementação computacional é descrita com as devidas considerações adotadas no programa DACC (Difusão-Advecção, elementos Constantes no espaço e Constantes no tempo).

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

No escoamento em regime permanente onde $V \neq 0$, neste caso a equação governante não será a de Laplace como é no caso da difusão em regime permanente, mas sim:

$$\rho C_p \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (3.1)$$

$$\text{Considerando uma substância incompressível: } C_v = C_p \quad (3.2)$$

Pela equação da continuidade temos que:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.3)$$

Sendo assim a Eq.(3.1) fica:

$$\left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{k}{\rho C_p} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \text{ como } \frac{k}{\rho C_p} = \alpha \quad (3.4)$$

Considerando como propriedades constantes do meio: ρ, C_p, K .

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \alpha \nabla^2 u \quad (3.5)$$

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

$$v_i \frac{\partial u}{\partial x_i} = \alpha \nabla^2 u \quad (3.6)$$

V_i é a velocidade convectiva, u é a temperatura, α é o coeficiente de dilatação térmica

Considerando na camada limite térmica que:

$$\frac{\partial T}{\partial y} \gg \frac{\partial u}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \gg \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

Considerando que na camada limite cinética: $u \gg v$ e

$$\frac{\partial u}{\partial y} \gg \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial v}{\partial x} \quad (3.8)$$

Introduzindo estas considerações na Eq. (3.5) temos:

$$\left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.9)$$

Adimensionalizada a Eq. (3.9) fica;

$$\left(u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) = \left(\frac{\alpha}{V L} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.10)$$

A adimensionalização é feita com uso de um comprimento característico L.

$$x^* = \frac{x}{L}; \quad y^* = \frac{y}{L}; \quad u^* = \frac{u}{y}; \quad v^* = \frac{v}{y} \quad e \quad u^* = \frac{u - u_s}{u_\infty - u_s} \quad (3.11)$$

Portanto temos para camada limite térmica:

$$\left(u^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) = \left(\frac{1}{P_e} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.12)$$

A equação da Difusão-Advecção em regime permanente adimensionalizada.

$$V_i^* \frac{\partial u^*}{\partial x_i} = \frac{1}{P_e} \nabla^2 u^* \quad (3.13)$$

A equação 3.13 fica adimensionalizada na coordenada x_1^*

$$Se: \left\{ \begin{array}{l} x_i^* = \frac{x}{L} \\ V^* = \frac{V_i}{V} \\ u^* = \frac{u}{u_{ref}} \end{array} \right. \quad (3.14)$$

3.3- MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL

FORMULAÇÃO DO ELEMENTO DE CONTORNO PARA DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL.

A equação que governa problemas de Difusão - Advecção transientes pode ser expressa como:

$$\left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + V_i \frac{\partial u(x,t)}{\partial X_i} \right) - k \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial X_i^2} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (3.15)$$

Aqui V_i é a velocidade convectiva e $k = K / \rho c$ é um termo difusivo. A formulação do método do elemento de contorno para problemas no plano (2D) é apresentada nessa seção. 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.

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

$$\frac{1}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{v_i}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x_i^2} = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{v_i}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial X_i} = \frac{v_i \cdot L}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial X_1} \quad (3.17)$$

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

$$-\frac{L}{k} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - Pe \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_1} + L \nabla^2 u(x,t) = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (3.18)$$

Sendo que a direção de x_1 é a mesma da resultante da velocidade de advecção. Pe é o número de Peclet ($Pe = V.L/k$), onde V é a velocidade convectiva na direção de x_1 , L é um comprimento característico e k é um termo difusivo.

CONDIÇÕES DE CONTORNO:

$$u(\underline{x}, t) = \bar{u}(\underline{x}, t) \quad \text{em } \Gamma_u \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial u(\underline{x}, t)}{\partial x_i} n_i = \bar{p}(\underline{x}, t) \quad \text{em } \Gamma_p \quad (3.20)$$

Onde o fluxo na superfície (p) inclui a contribuição das perdas convectivas, p^c pode ser escrita como:

$$p^c(\underline{x}, t) = Nu[u(\underline{x}, t) - u_\infty] \quad (3.21)$$

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

Neste trabalho estamos considerando as condições iniciais nulas ($u(\underline{x}, 0) = \bar{u}(\underline{x}, 0)$ 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.

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 pode ser eliminada tomando-se u_0 como origem de medição de temperatura.

EQUAÇÃO FUNDAMENTAL:

Para determinarmos a equação fundamental partimos da equação governante da difusão - advecção transiente bidimensional:

$$-\frac{\partial u^*(\underline{x}, t)}{\partial t} - Pe \frac{\partial u^*(\underline{x}, t)}{\partial X_1} = \nabla^2 u^*(\underline{x}, t) + \delta(\underline{x} - \underline{\xi})(t - \tau) \quad \text{em } \Omega^* \quad (3.22)$$

Onde $\underline{\xi}$ e \underline{x} são os pontos fonte e campo, respectivamente, no domínio, t_f é o tempo final e t é a variável tempo.

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

Aplicando o teorema da divergência, e assumindo que $u(\underline{x}, 0) = 0$ nos possibilita a obtenção da solução fundamental $u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t)$, como em Lim, J., Chan, C.L., and Chandra, A. (1994) expressa a seguir :

$$u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = \frac{1}{4\pi(\tau)} \exp \left[\frac{-\{[x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}) + Pe(\tau)]^2 + (x_2(\underline{x}) - x_2(\underline{\xi}))^2\}}{4(\tau)} \right] \quad (3.23)$$

Desenvolvendo os trinômios quadrados perfeitos obtém-se a solução fundamental no plano, ou seja em duas (2) dimensões:

$$u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = \frac{1}{4\pi(\tau)} \exp\left[-\frac{r^2}{4(\tau)}\right] \exp\left[-\frac{Pe}{2}(x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}))\right] \exp\left[-\frac{Pe^2}{4}(\tau)\right] \quad (3.24)$$

Onde r é a distância euclidiana entre o ponto fonte($\underline{\xi}$) e o ponto campo(\underline{x}). Em (3.24), a primeira exponencial representa o efeito condutivo. A segunda e terceira exponenciais representam o efeito devido a convecção no espaço e a convecção transiente, respectivamente.

De posse da solução fundamental u^* , podemos obter a derivada normal desta:

$$P^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) = \frac{-r}{8\pi\tau^2} \frac{\partial r}{\partial n} \exp\left[-\frac{r^2}{4\tau}\right] \exp\left[-\frac{Pe}{2}(x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}))\right] \exp\left[-\frac{Pe^2\tau}{4}\right] \quad (3.25)$$

Onde: $-r \frac{\partial r}{\partial n} = [x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi})]n_1(\underline{x}) + [x_2(\underline{x}) - x_2(\underline{\xi})]n_2(\underline{x})$ é a projeção da distância r sobre a normal ao contorno.

No Apêndice F encontram-se gráficos da solução fundamental ao longo do tempo para distâncias fixas e no plano para tempos de medição fixos, para Difusão e para Difusão-Advecção.

3.3.1 - EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO - ADVECCÃO TRANSIENTE:

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

$$C(\underline{\xi})u(\underline{\xi}, t_f) = \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) P(\underline{x}, t) - p^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) \right] d\Gamma \right\} dt - Pe \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) n_1(\underline{x}, t) d\Gamma \right\} dt \quad (3.26)$$

O coeficiente $C(\underline{\xi})$, depende da geometria na vizinhança de ξ ; se o contorno é suave junto a ξ , então $C(\underline{\xi})=1/2$ para problemas em duas dimensões. Para os pontos pertencentes ao domínio $C(\underline{\xi})=1$.

$$C(\underline{\xi}) = \begin{cases} 0 & \text{se } \underline{\xi} \notin (\Omega + \Gamma) \\ \beta / 2\pi & \text{se } \underline{\xi} \in \Gamma \\ 1 & \text{se } \underline{\xi} \in \Omega \end{cases} \quad (3.27)$$

onde β é o ângulo interno no ponto $\underline{\xi}$.

Quando o contorno é suave em $\underline{\xi}$, $\beta=\pi$ e portanto $C(\underline{\xi})=0,5$.

3.3.2 - IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA.

DISCRETIZAÇÃO: 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 dentro de 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 ($\xi \in \Gamma$), sendo assim $C(\xi) = 0,5$.

No caso transiente, utilizando elementos constantes no tempo, a equação Integral de Contorno discretizada em forma matricial fica:

$$0,5 u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} P_j^k \int_{\Gamma_j} U^*(\xi, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) - \sum_{j=1}^{NE} u_j^k \int_{\Gamma_j} P^*(\xi, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \right) + \sum_{k=1}^{NT} \left(- \sum_{j=1}^{NE} u_j^k \int_{\Gamma_j} \bar{U}^*(\xi, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \right) \quad (3.28)$$

$$0,5 u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k \cdot P_j^k - \sum_{j=1}^{NE} \hat{H}_{ij}^k u_j^k \right) \quad (3.29)$$

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

$$G_{ij}^k = \int_{\Gamma_j} U^*(\xi, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \quad (3.30)$$

$$\hat{H}_{ij}^k = \int_{\Gamma_j} P^*(\xi, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) + \int_{\Gamma_j} \bar{U}^*(\xi, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x}) \quad (3.31)$$

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 $\int_{\Gamma_j} \vec{U}^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ é formada a partir da influência da advecção.

$$H_{ij}^k = \begin{cases} \hat{H}_{ij}^k + 0,5 & \text{se } k=1 \text{ e } i=j \end{cases} \quad (3.32)$$

$$H_{ij}^k = \begin{cases} \hat{H}_{ij}^k & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (3.33)$$

Aqui:

$$U_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_0}^{t_f} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) dt \quad (3.34)$$

$$P_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_0}^{t_f} P^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) dt \quad (3.35)$$

$$\vec{U}^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_0}^{t_f} P e u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) n_1(\underline{x}, t) dt \quad (3.36)$$

No caso transiente, há uma integração singular quando o ponto fonte pertence ao elemento campo para o primeiro intervalo de tempo. Escrevendo a equação (3.29) para cada ponto fonte, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\sum_{k=1}^{NT} [H]^k \{u\}^{NT-k+1} = \sum_{k=1}^{NT} [G]^k \{p\}^{NT-k+1} \quad (3.37)$$

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 (3.37) para NT=1

$$[H]^1 \{u\}^1 = [G]^1 \{p\}^1 \quad (3.38)$$

Impondo-se as condições de contorno na equação (3.38) de maneira análoga ao caso permanente, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$[A]^1 \{X\}^1 = \{f\}^1 \quad (3.39)$$

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

Após 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 (3.37) particularizada para NT=2:

$$\sum_{k=1}^2 [H]^k \{u\}^{3-k} = \sum_{k=1}^2 [G]^k \{p\}^{3-k} \quad (3.40)$$

ou

$$[H]^1 \{u\}^2 + [H]^2 \{u\}^1 = [G]^1 \{p\}^2 + [G]^2 \{p\}^1 \quad (3.41)$$

Escrevendo a equação (3.38) de outra forma:

$$[H]^1 \{u\}^2 = [G]^1 \{p\}^2 + \{h\}^2 \quad (3.42)$$

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

$$\{h\}^2 = [G]^2 \{p\}^1 - [H]^2 \{u\}^1 \quad (3.43)$$

Aplicando as condições de contorno na expressão (3.28) obtém-se um sistema de equações:

$$[A]^1 \{X\}^2 = \{f\}^2 + \{h\}^2 \quad (3.44)$$

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:

$$[H]^1 \{u\}^{NT} = [G]^1 \{p\}^{NT} + \{h\}^{NT} \quad (3.45)$$

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

$$\{h\}^{NT} = \sum_{k=2}^{NT} \left([G]^k \{p\}^{NT-k+1} - [H]^k \{u\}^{NT-k+1} \right) \quad (3.46)$$

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 nos leva a:

$$\{A\}^1 \{x\}^{NT} = \{f\}^{NT} + \{h\}^{NT} \quad (3.47)$$

3.3.3 -EQUAÇÃO INTEGRAL DE CONTORNO PARA PONTOS INTERNOS.

É análoga a equação (3.12), porém nesse caso com $C(\underline{\xi}) = 1$, ou seja:

$$u(\underline{\xi}, t_f) = \int_0^{\tau} \left\{ \int_{\Gamma} \left[u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) P(\underline{x}, t) - P^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) \right] d\Gamma \right\} dt - Pe \int_0^{\tau} \left\{ \int_{\Gamma} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) u(\underline{x}, t) n_1(\underline{x}, t) d\Gamma \right\} dt \quad (3.48)$$

Para determinação dos potenciais em pontos internos, faz-se uso da forma discreta da equação (3.48):

$$u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k \cdot P_j^k - \sum_{j=1}^{NE} H_{ij}^k \cdot u_j^k \right) \quad (3.49)$$

Pode-se observar que esta equação é análoga à expressão (3.50).

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 (3.30) e (3.31).

3.3.4- DETALHES DA IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Na implementação computacional são considerados elementos constantes tanto no espaço quanto no tempo, como já descritos.

No arquivo de dados, todos os valores prescritos (potencial ou sua derivada normal) são lidos e armazenados temporariamente num vetor {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.

As matrizes são preenchidas de acordo com o seguinte código:

0 para potencial prescrito

1 para fluxo prescrito.

As matrizes [Fi] e [Dfi] são preenchidas apenas com os valores prescritos e posteriormente também conterão os valores calculados pelos programas.

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 das 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 acrescentados, 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 em 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 ou 1) estes valores serão armazenados nas matrizes de potencial $[Fi]$ e de fluxo $[Dfi]$.

Para implementação computacional posterior ao estudo dos fenômenos da Difusão e da Difusão - Advecção, tendo sido realizado uma correlação entre estes, por analogia com um programa sobre difusão já existente, EFFREN (1997).

Sendo compreendido e alterado este para nosso objetivo final que era a resolução de problemas com a equação integral de contorno da Difusão - Advecção "numericamente" via computador (construção do programa DACC), ou seja idéias que produzissem bons resultados num programa preliminar sobre difusão resolvida "numericamente" (DCCNR).

Isto feito com o auxílio do programa MATGH (erro percentual entre as matrizes G e H) eram transferidas para o programa DACC, num processo de assimilação de teorias e testes subsequentes destas, tais como a repartição do primeiro intervalo de tempo e o uso da transformada de Telles para a retirada da singularidade logarítmica existente em problemas de Difusão-Advecção Transiente Bidimensional.

Segundo LIM et all (1994) deve-se obedecer a seguinte relação entre Δt e o máximo valor para o número de Péclet.

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

(com $\Delta X=0,1$)

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

Na formulação incondicional estável do M.E.C. foi observado por LIM et all (1994), que o termo $(Pe^2 / 4)^n (\tau)^n$ em (3.35) e (3.36) tem uma tendência de criar um trasbordamento no cálculo para número de Péclet alto. Isto pode ser evitado escolhendo um incremento de tempo adequado.

Segundo LIM et all (1994), o incremento de tempo é limitado por um critério de estabilidade do Número de Courant sendo menor que 1^{23} . O número de Courant pode ser definido como $Pe(\Delta t/\Delta x)$, onde as variáveis foram adimensionalizadas.

Quando Pe aumenta, o tamanho da malha terá que ser diminuído para se obter gradientes altos. Consequentemente, o incremento de tempo deve ser limitado a:

$$\Delta t \approx Pe^{-2} \tag{3.50}$$

A fim de comparar a precisão do programa aqui usado (DACC) com os obtidos em literatura, definimos o erro de cada passo de tempo como:

$$E = \sqrt{\frac{\sum_{I=1}^n (u - u_I)^2}{N}} \quad (3.51)$$

onde: u é a solução analítica

u_I é solução aproximada

N é o Número de Nós.

CAPÍTULO 4 - APLICAÇÕES.

4 - APLICAÇÕES

4.1 - INTRODUÇÃO

A formulação apresentada no capítulo anterior foi utilizada em alguns exemplos de difusão-advecção bidimensional. A solução numérica por elementos de contorno é comparada com as da literatura através de gráficos e/ou tabelas. Em todos os exemplos estudados empregam-se elementos constantes tanto no espaço quanto no tempo e difusividade térmica é igual a $1 \text{ cm}^2 / \text{s}$, exceto no segundo exemplo que é de $1 \text{ m}^2 / \text{s}$.

O primeiro exemplo, que simula difusão-advecção transiente bidimensional, foi apresentado por Lim, Chan e Chandra(1994). A solução numérica para o regime transiente é comparada com os resultado analítico.

A seguir, um exemplo que simula difusão-advecção unidimensional, foi apresentado por Brebbia (1978) para regime permanente, é também examinado.

No terceiro exemplo, é apresentada a simulação da difusão-advecção transiente em uma região retangular. Exemplo este que foi apresentado por Wrobel (1981) e Loeffler Neto (1988) para o caso da difusão.

No último exemplo, foi analisada a difusão-advecção em uma região circular submetida a choques térmicos espaçados no tempo; para o caso de analisar apenas resultados do programa da difusão (DCCNR) estes são comparados com os obtidos por Wrobel (1981) e Loeffler Neto (1988).

4.2 - DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL EM REGIÃO QUADRADA. (EXEMPLO 1)

Neste exemplo estuda-se a difusão-advecção térmica para uma região quadrada de lado igual a 1,0 m , cujo diagrama esquemático, as condições de contorno e a discretização espacial adotada são mostradas na figura 4.2.1.

Para discretização espacial, usou-se uma malha uniforme e intervalo de tempo constante. Com 40 elementos igualmente distribuídos, incremento de tempo $\Delta t=0,01$, com discretização espacial de $\Delta X=0,1$.

São analisados os resultados para duas situações:

$Pe=20$; $\Delta t=0,01$; $\Delta X=0,1$; e

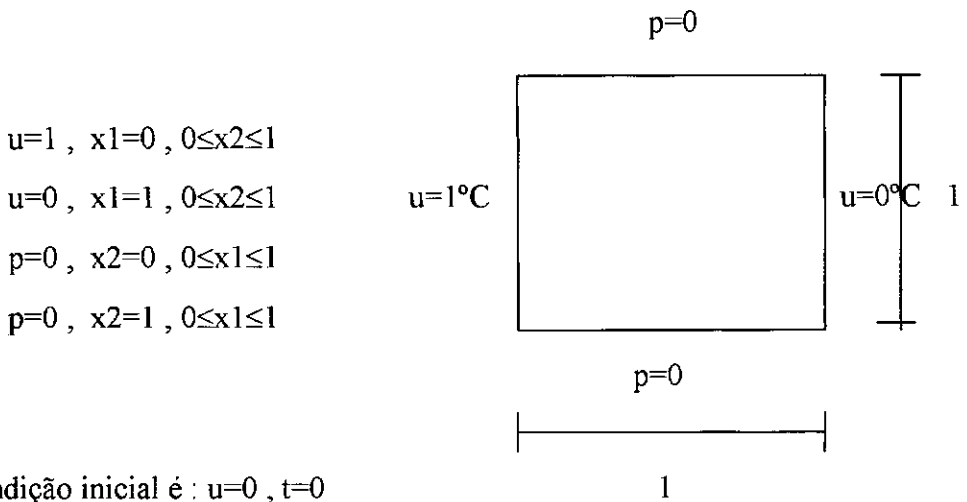
$Pe=5$; $\Delta t=0,01$; $\Delta X=0,1$.

Os valores obtidos são comparados com os obtidos analiticamente e por J. Lim, C. L. Chan e Chandra (1994) e mostrados nas figuras 4.2.2 e 4.2.3, bem como nas tabelas 4.2.1 e 4.2.2.

A solução analítica do exemplo 1, segundo LIM, J., CHAN, C.L., and CHANDRA, A.(1994) é determinada por:

$$u = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\pi \left(1 - e^{-(Pe^2/4) + n^2\pi^2} \right) e^{(Pe x/2)} \text{sen}(n\pi x)}{(Pe^2/4) + n^2\pi^2} \quad (4.1)$$

Os resultados obtidos por elementos de contorno ficam tão mais próximos do resultado analítico quanto maior for a discretização do espaço e do tempo, e menor for o número de Péclet, estes resultados são mostrados na tabela 4.2.2 , tendo portanto que levar sempre em consideração a tabela 1, que relaciona estas variáveis.



e a condição inicial é : $u=0, t=0$

Figura 4.2.1 - apresenta um diagrama esquemático do problema estudado.

Malha uniforme e com um total de 40 nós no contorno.

4.2.1 - Resultados obtidos:

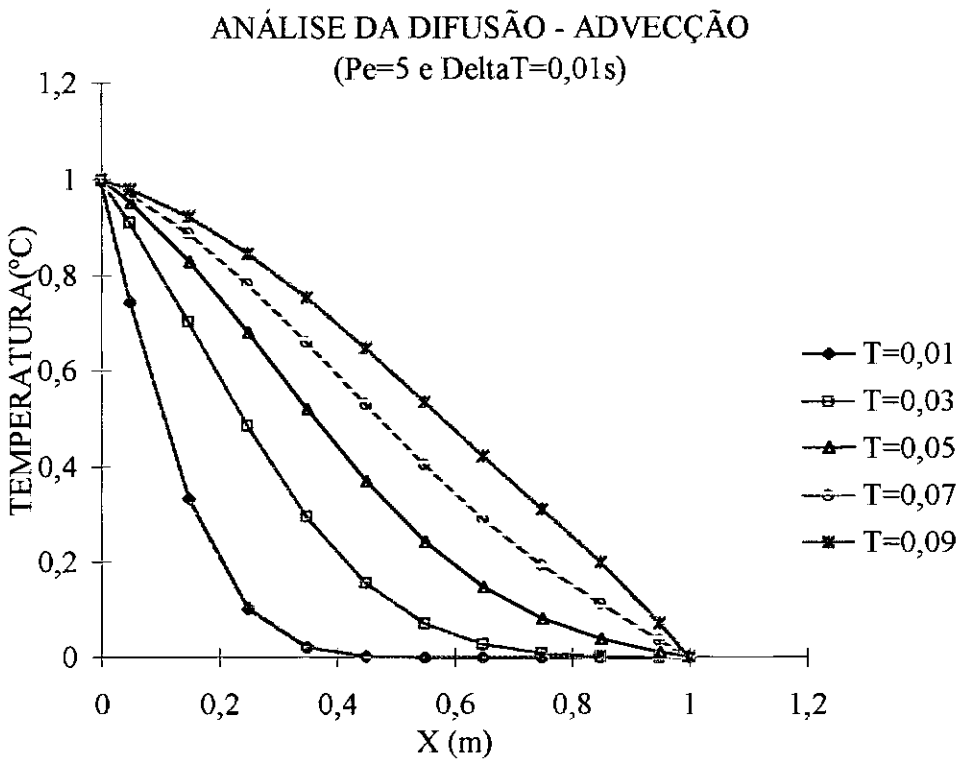


Figura 4.2.2 - Resultado numérico do exemplo 1, utilizando número de Péclet igual a 5 (cinco).

Determinação do erro do programa DACC		
Número de Péclet	tempo(s)	DESVIO PADRÃO
5	0,01	0,0208
5	0,03	0,0123
5	0,05	0,00856
5	0,07	0,00762
5	0,09	0,00715

Tabela 4.2.1 - Erro de cada passo de tempo para $Pe = 5$

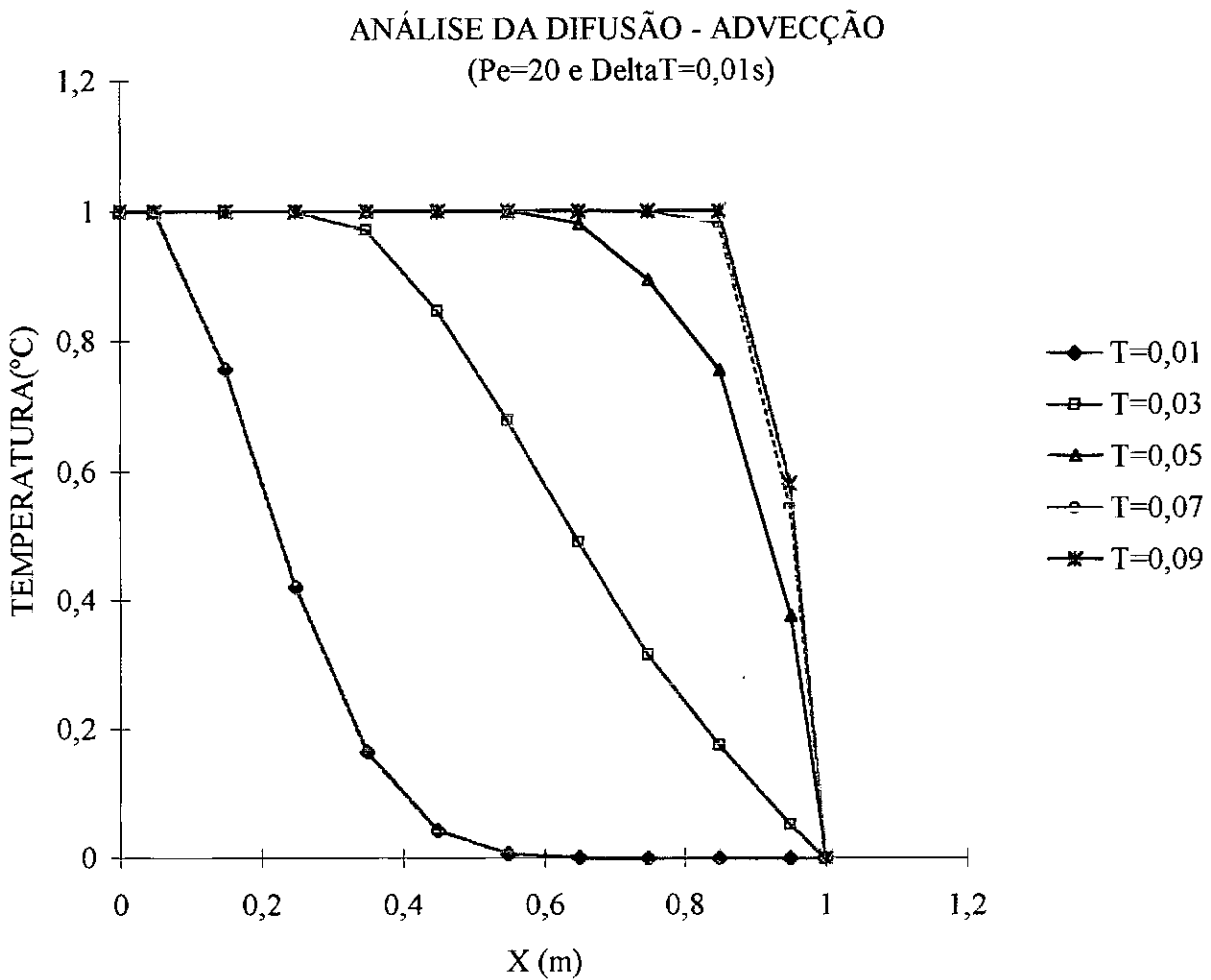


Figura 4.2.3 - Resultado numérico do exemplo 1, utilizando número de Péclet igual a 20 (vinte).

Tabela 4.2.2 - Comparação entre os resultados analíticos e os obtidos pelo programa

DACC Para Pe=5

X(m)	T=0,01s analítico	T=0,01s (DACC)	T=0,03s analítico	T=0,03s (DACC)	T=0,05s analítico	T=0,05s (DACC)	T=0,07s analítico	T=0,07s (DACC)	T=0,09s analítico	T=0,09 (DACC)
0,05	0,8	0,745	0,919	0,911	0,952	0,952	0,967	0,97	0,976	0,98
0,15	0,4	0,333	0,73	0,705	0,84	0,829	0,893	0,889	0,924	0,923
0,25	0,136	0,103	0,51	0,487	0,697	0,68	0,793	0,784	0,852	0,847
0,35	0,028	0,021	0,321	0,296	0,54	0,52	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	0,01	0,088	0,08	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	0,2
0,95	0	0	0	0	0,014	0,01	0,046	0,037	0,083	0,071
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,95	0	0	0	0	0,014	0,01	0,046	0,037	0,083	0,071
0,85	0	0	0,003	0,003	0,044	0,038	0,124	0,114	0,213	0,2
0,75	0	0	0,011	0,01	0,088	0,08	0,207	0,195	0,325	0,312
0,65	0	0	0,033	0,029	0,158	0,146	0,306	0,291	0,435	0,422
0,55	0	0	0,083	0,072	0,259	0,242	0,421	0,405	0,548	0,536
0,45	0,003	0,003	0,171	0,157	0,389	0,369	0,547	0,532	0,659	0,648
0,35	0,028	0,021	0,321	0,296	0,54	0,52	0,675	0,662	0,762	0,754
0,25	0,136	0,103	0,51	0,487	0,697	0,68	0,793	0,784	0,852	0,847
0,15	0,4	0,333	0,73	0,705	0,84	0,829	0,893	0,889	0,924	0,923
0,05	0,8	0,745	0,919	0,911	0,952	0,952	0,967	0,97	0,976	0,98
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

4.3 - SIMULAÇÃO DE DIFUSÃO - ADVECÇÃO TRANSIENTE

UNIDIMENSIONAL

(EXEMPLO 2)

Neste segundo exemplo, é estudada a difusão-advecção em uma região quadrada de lado igual a 0,6m , isolada nas faces $y=0$ e $y=0,6m$, inicialmente a $0^{\circ}C$. A temperatura da face $x=0$ é subitamente elevada para $300^{\circ}C$, enquanto a face $X=0,6m$ é mantida a $0^{\circ}C$.

Foram adotados as seguintes considerações:

24 elementos no contorno

$Pe=20$

$\Delta t=0,0025s$

$\Delta X=0,1m$

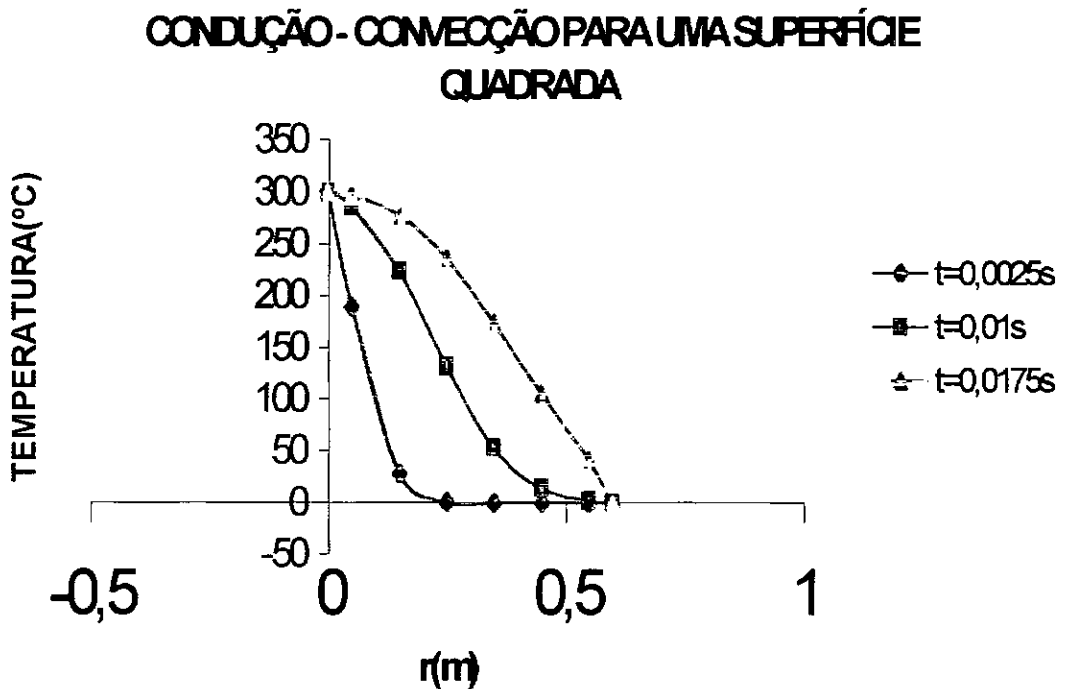
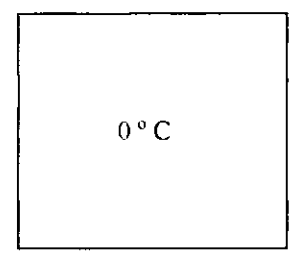
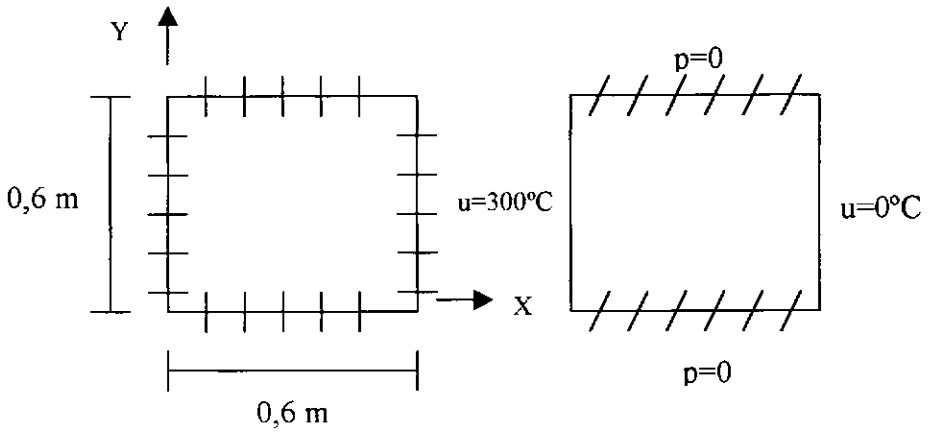


Figura 4.3.1 - Resultados numéricos do exemplo 2.



(c) condições iniciais

Figura 4.3.2 - Simulação de difusão - advecção transiente unidimensional

Análise gráfica para Difusão - Advecção adotando número de Péclet nulo ($Pe=0$)

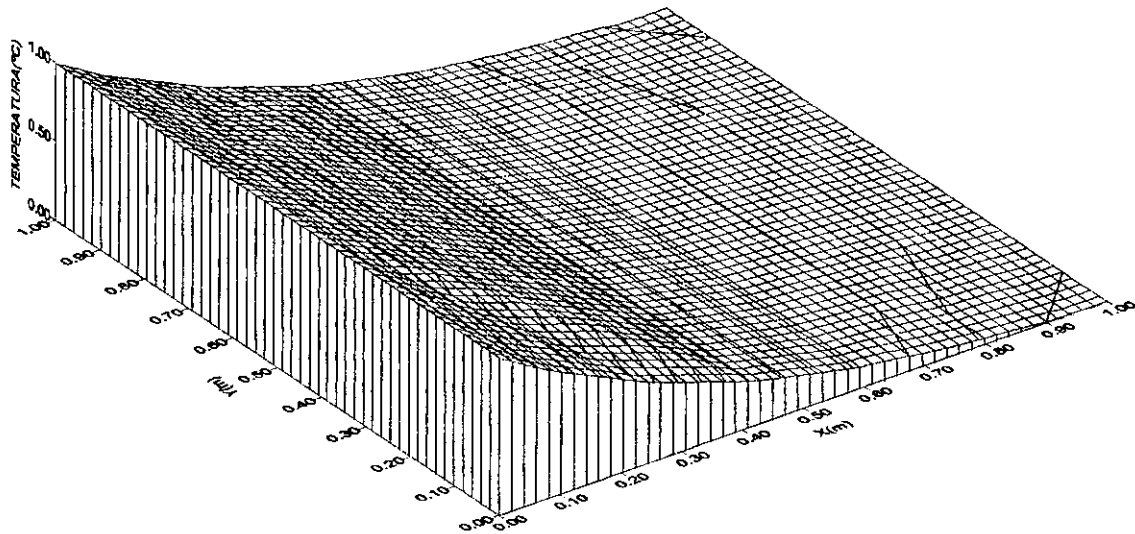


Figura 4.2.4 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,1$ s e $Pe=0$

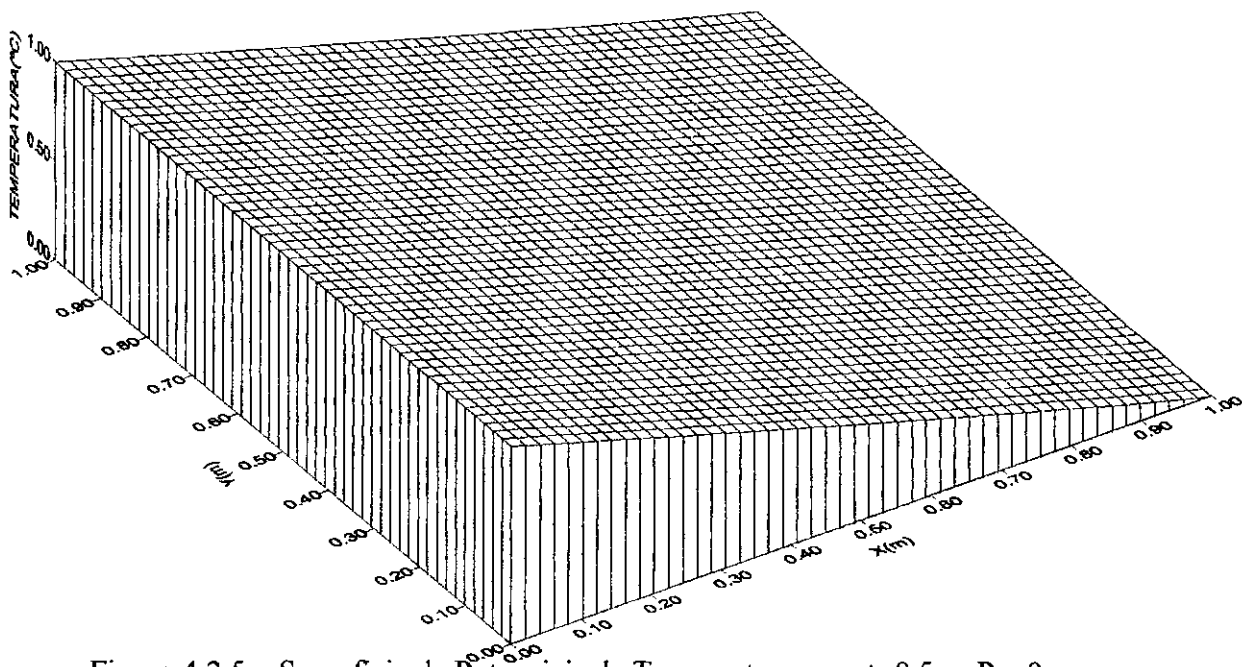


Figura 4.2.5 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,5$ s e $Pe=0$

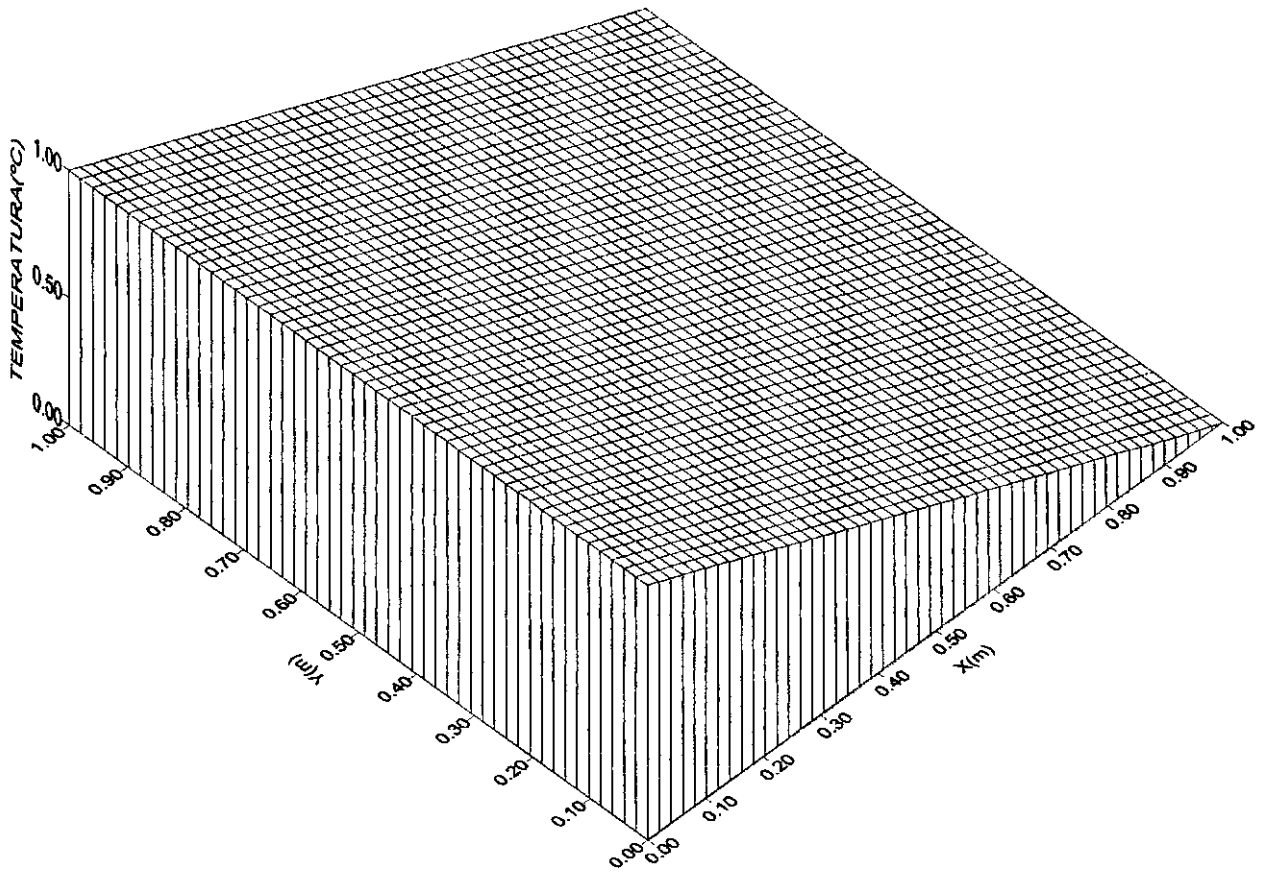


Figura 4.2.6 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=1s$ e $Pe=0$

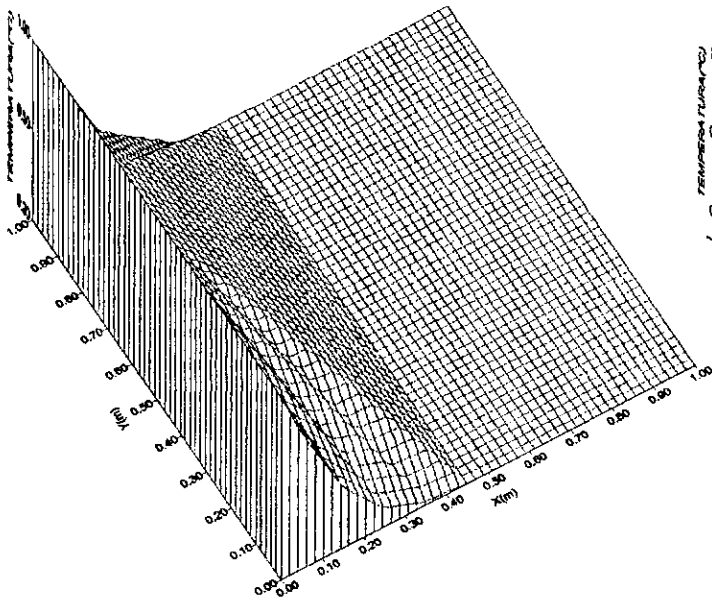


Figura 4.2.7 - Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,01s$ e $Pe=5$

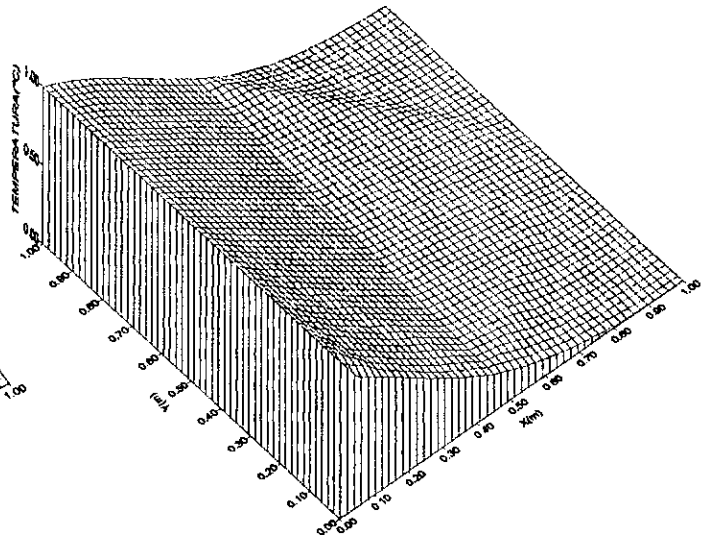


Figura 4.2.8 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,05s$ e $Pe=5$

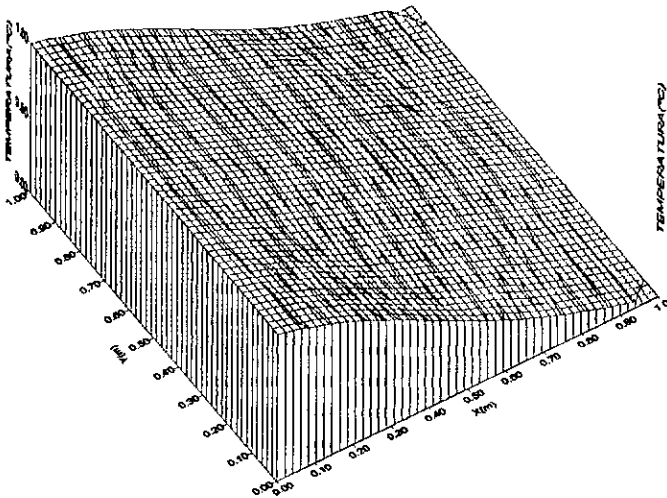


Figura 4.2.9 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,07s$ e $Pe=5$

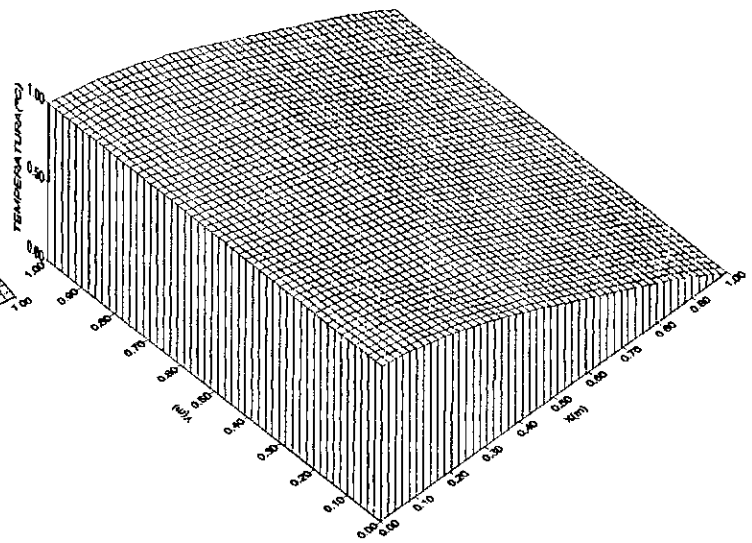


Figura 4.2.10 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,09s$ e $Pe=5$

Análise gráfica do comportamento da temperatura para o exemplo 1, com $Pe=5$:

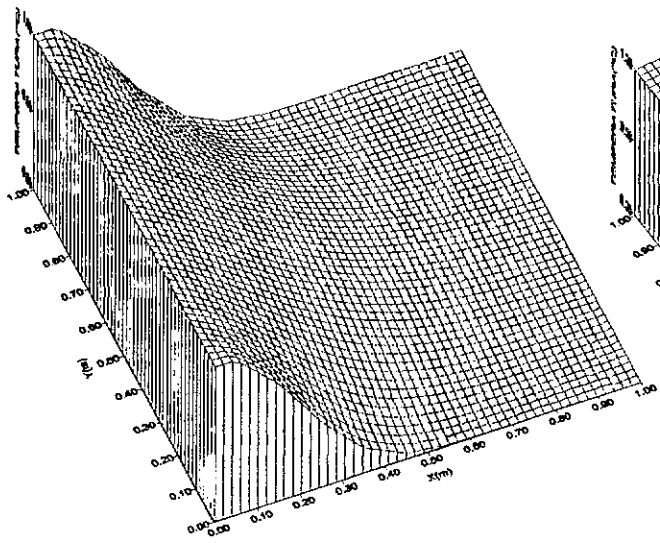


Figura 4.2.11 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,01s$ e $Pe=20$

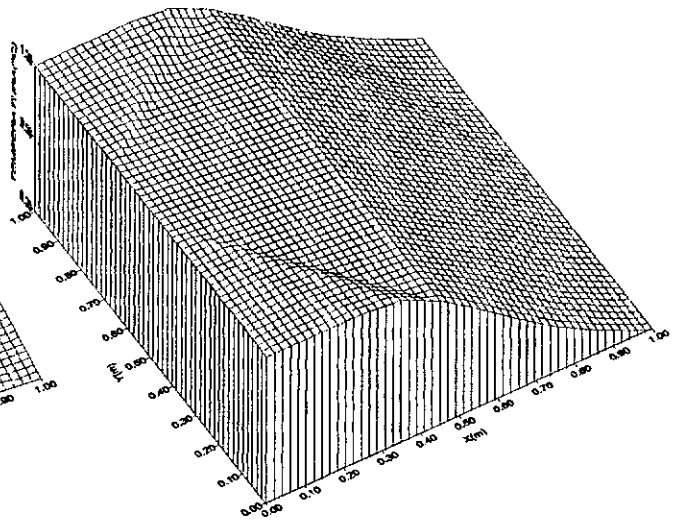


Figura 4.2.12 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,03s$ e $Pe=20$

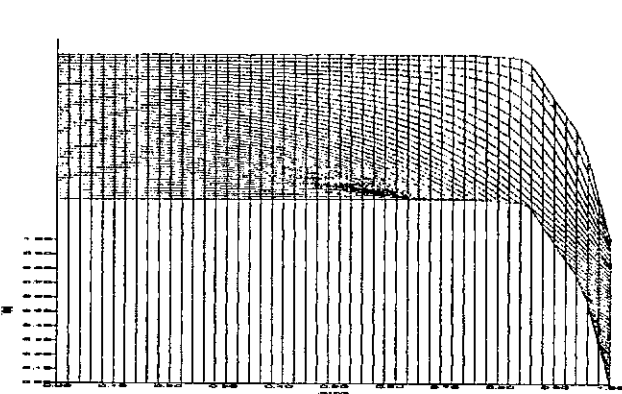


Figura 4.2.13 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,07s$ e $Pe=20$

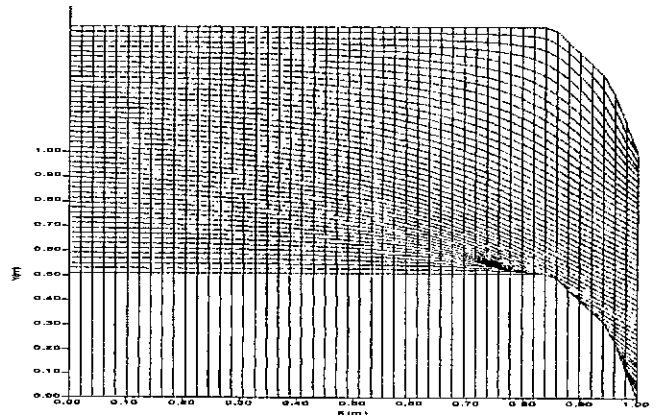


Figura 4.2.14 – Superfície de Potenciais de Temperatura para $t=0,09s$ e $Pe=20$

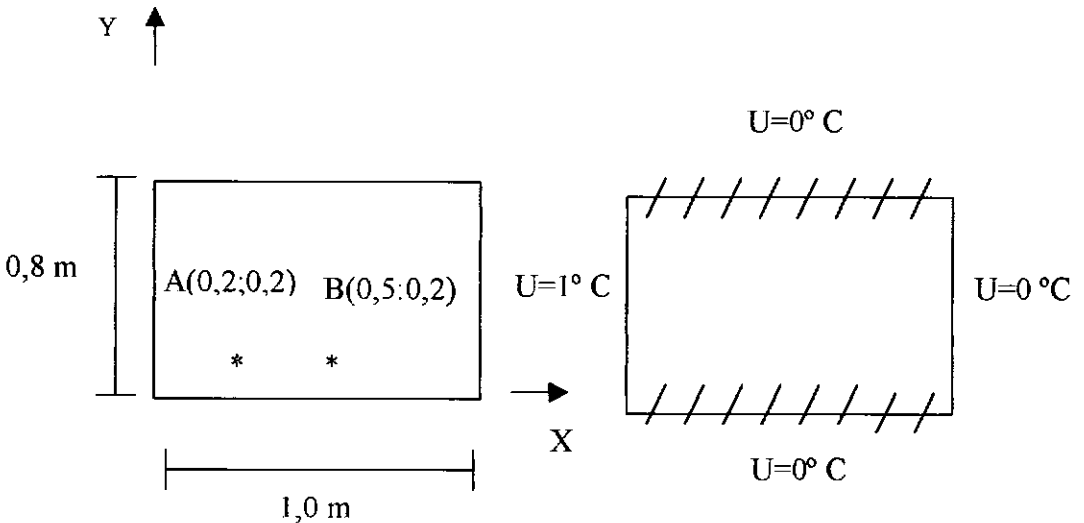
Análise Gráfica do comportamento da temperatura para o exemplo 1 (com $Pe=20$)

OBS. Os gráficos aqui mostrados terão uma conformação mais condizente com a realidade do exemplo 1, se aumentarmos o número de pontos internos para melhor interpolação do software, aqui foram usados apenas 3 pontos internos, por isso a aparência estranha.

4.4 - DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL EM
 REGIÃO RETANGULAR
 (EXEMPLO 3)

Uma chapa retangular de (0,8 cm X 1,0 cm), mantida inicialmente $0^{\circ}C$ é submetida a um choque de $1^{\circ}C$ na face $X=0$, sendo mantida a temperatura inicial nas demais faces.

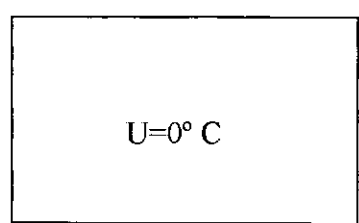
Neste exemplo, adota-se 36 elementos no contorno, com número de Péclet $Pe=20$, $\Delta t=0,0025s$, $\Delta X=0,1cm$ e observa-se através da figura 3.1 o comportamento da temperatura em dois pontos internos ao longo do tempo.



(a) Geometria

(b) Condições de contorno

Discretização espacial (36 elementos)



(c) Condições iniciais

Figura 4.4.1 – Simulação de Difusão-Advecção transiente em região retangular

DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRANSIENTE
BIDIMENSIONAL EM REGIÃO RETANGULAR

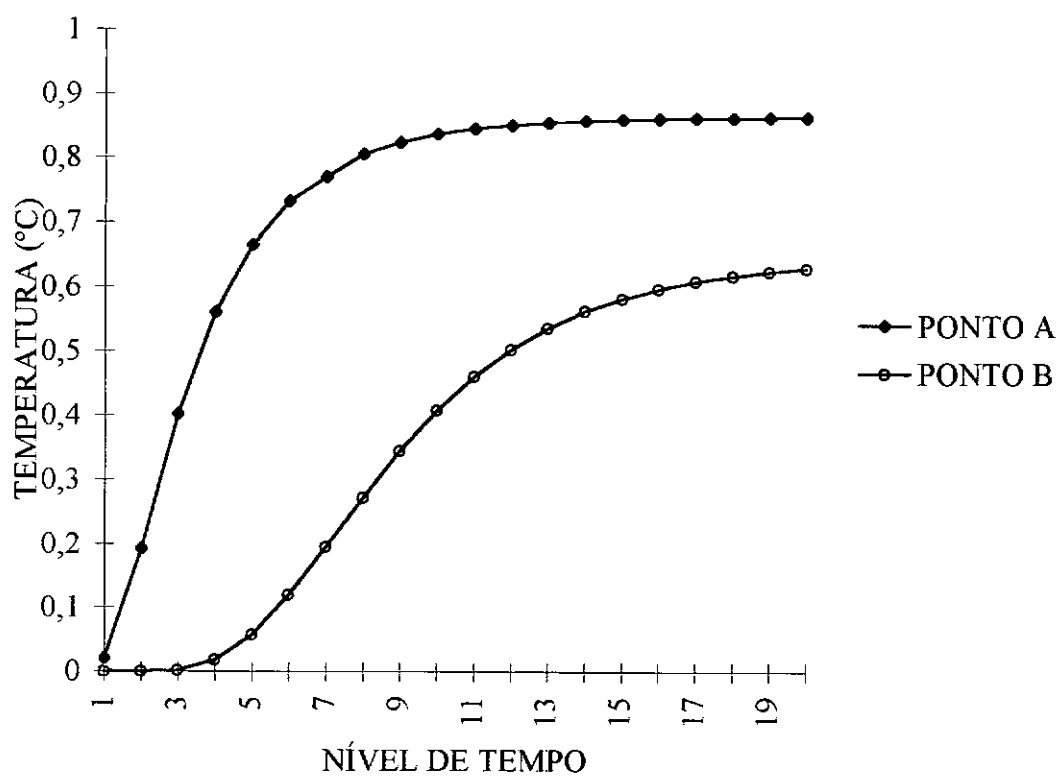
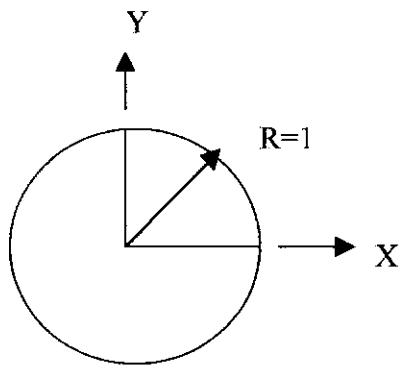
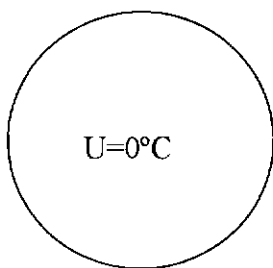


Figura 4.4.2 - Difusão - Advecção transiente bidimensional em região retangular. Choque térmico na face $X=0$.

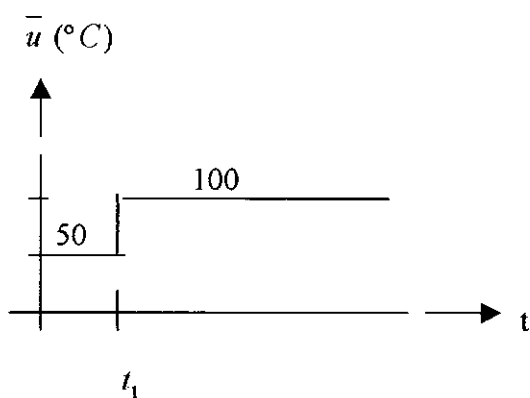
4.5 -DIFUSÃO-ADVECÇÃO EM REGIÃO CIRCULAR DEVIDO A CHOQUES
TÉRMICOS SUCESSIVOS (EXEMPLO 4)



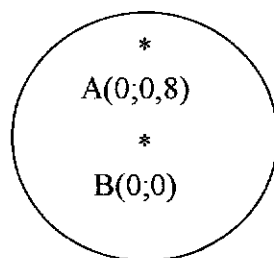
(a) Geometria



(b) Condições iniciais



(c) Condições de contorno



(d) Primeira discretização
(24 elementos)

Figura 4.5.1 – Difusão – Advecção em região circular devido a choques térmicos espaçados no tempo

Uma região circular de raio unitário, inicialmente a $0^{\circ}C$ é submetida a dois choques térmicos, em todo o seu contorno, nos instantes t_0 e t_1 .

A evolução da temperatura é analisada ao longo do tempo em dois pontos: $A(0;0,8)$ e $B(0;0)$. Duas situações são estudadas: a primeira é um choque térmico de $100^{\circ}C$ ao longo de todo tempo. A segunda é um choque térmico de $50^{\circ}C$ de t_0 até t_1 e um choque térmico de $100^{\circ}C$ a partir de t_1 .

Neste exemplo, adota-se número de Péclet $Pe=20$, $\Delta t=0,0025s$ e observa-se através das figuras 4.5.2 e 4.5.3 o comportamento da temperatura em dois pontos internos ao longo dos níveis de tempo.

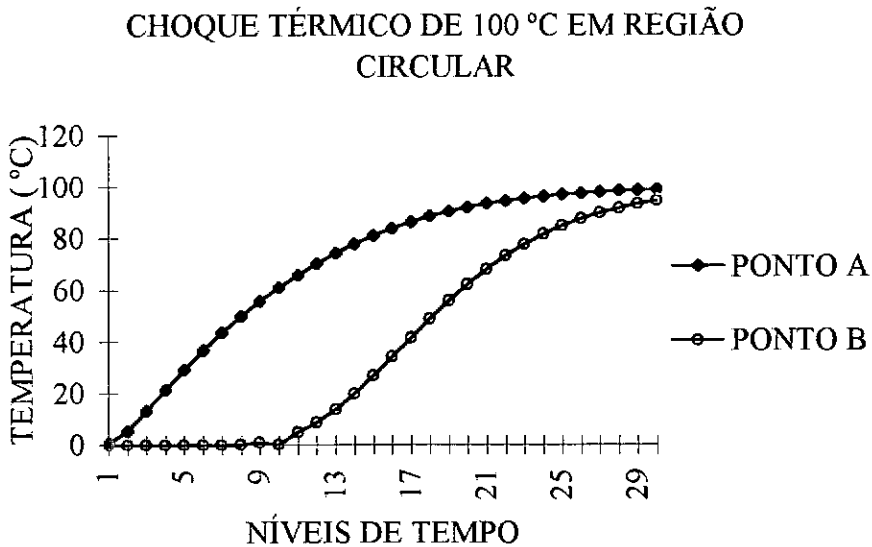


Figura 4.5.2 - Resultado numérico da Difusão - Advecção em dois pontos internos de uma região circular devido um choque térmico de $100^{\circ}C$ ao longo de todo tempo.

CHOQUE TÉRMICO DE 50°C E 100°C EM REGIÃO CIRCULAR

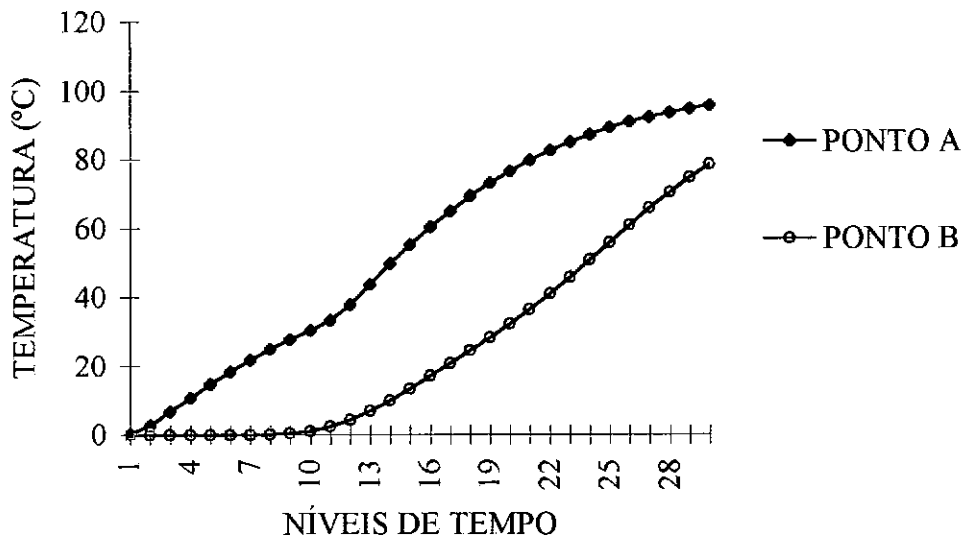


Figura 4.5.3 - Resultado numérico da Difusão-Advecção em dois pontos internos de uma região circular devido um choque térmico de 50°C de t_0 até t_1 e um choque térmico de 100°C a partir de t_1 .

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES

5 - CONCLUSÕES

A formulação do M.E.C. em duas dimensões para problemas de difusão-advectação transiente foi desenvolvida nesta tese. A formulação do M.E.C é baseada na solução dependente do tempo . A equação diferencial parcial parabólica governante é reduzida para o contorno evitando discretização de domínio. O algoritmo proposto é estável e não introduz difusão artificial.

Para verificar o programa de difusão-advectação, os resultados obtidos pelo programa DCCNR foram comparados com DACC com número de Péclet nulo, onde o segundo deveria reproduzir, nesse caso, o mesmo resultado do programa da difusão, e os resultados mostraram-se coincidentes.

Outro teste realizado, foi com os resultados obtidos pelo programa DCC e DCCNR, onde comparamos a integração analítica e a integração numérica, onde observou-se que os resultados mostraram uma boa aproximação.

O algoritmo do M.E.C bidimensional é aplicado para resolver um problema bidimensional da qual a solução numérica é conhecida da literatura. Todos esses resultados são comparados entre si. Observou-se que o M.E.C provê uma solução bastante precisa sendo obedecida as relações entre incremento de tempo e número de Péclet.

A utilidade da integração de Telles, demonstrou-se eficaz na redução do número de pontos de Gauss necessários para integração numérica por quadratura de Gauss, bem como para retirar a singularidade logarítmica existente quando o ponto fonte coincide com o elemento campo.

A apresentação da listagem no apêndice permite a reprodução dos resultados obtidos na tese e pode ser usado como ponto de partida para as possíveis complementações sugeridas a seguir.

Sugestões para futuros trabalhos:

Consideração de condições iniciais não-nulas usando células com outros esquemas alternativos, tais como reciprocidade dual, etc.

Inclusão de elementos lineares, quadráticos e cúbicos no espaço e interpolações lineares no tempo com a transformada de Telles para integrações quase-singulares e singulares (Telles, 1987).

Utilização de esquemas de truncamento de contribuições correspondentes a tempos muito afastados do atual.

Desenvolver formulação hiper-singular para problemas de difusão/advecção.

Inclusão de propriedades físicas dependentes da temperatura/concentração

Inclusão de condições de contorno não-lineares.

Aplicação em exemplos de difusão-advecção de poluentes em Recursos Hídricos.

Acoplamento com elementos finitos e diferenças finitas.

Formulação para propagação na direção \vec{n} .

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.

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. and DOMINGUEZ, J., 1989, Boundary Elements an Introductory Course, Computational Mechanics Publications and McGraw-Hill, Southampton.

BREBBIA, C.A., TELLES, J.C.F. and WROBEL, L.C., 1984, Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering, Springer-Verlag, Berlin.

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.

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.

MANSUR, W.J., PRODANOFF, J.H.A. e AZEVEDO, J.P.S., 1995, “Método dos Elementos de Contorno”. Em: Silva, R.V., Métodos Numéricos em Recursos Hídricos II, 2 ed., Capítulo 1, Rio de Janeiro, Brasil, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.

TELLES, J.C.F., 1987, “ A Self Adaptive Coordinate Transformation for the Efficient Evaluation of General Boundary Element Integrals”, International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 24, pp. 937-959.

WROBEL, L.C.,1981, Potential and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method, Ph.D. Thesis, Southampton University.

APÊNDICE A – 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 Advecção transiente bidimensional, 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), descrita em Sampaio(1994).

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

O jacobiano da transformação é dado por:

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

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 :

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

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

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 $L=l_j$.

$$D = \frac{2R_{\min}}{L} \quad (\text{A.5})$$

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

$$d = -b \quad (\text{A.10.e})$$

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 (A.6) fornecem \bar{r} em função de D .

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

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

Nas integrações numéricas, cada ponto de Gauss é tabelado no intervalo de -1 a 1 .

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

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

$$\begin{aligned} R_{\min} &= |r_2| \\ \bar{\eta} &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

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

$$\begin{aligned} R_{\min} &= |r_1| \\ \bar{\eta} &= -1 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

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

$$R_{\min} = \left\| \frac{1}{L} \underline{k}(\underline{r}_1 X \underline{c}) \right\| = \det \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ x_1 - x_\xi & y_1 - y_\xi & 0 \\ \frac{x_2 - x_1}{L} & \frac{y_2 - y_1}{L} & 0 \end{vmatrix} = \det \begin{vmatrix} x_1 - x_\xi & y_1 - y_\xi \\ \frac{x_2 - x_1}{L} & \frac{y_2 - y_1}{L} \end{vmatrix} \quad (\text{A.13})$$

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

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

$$\bar{\eta} = 1 - \frac{|\underline{r}_2 \underline{c}|}{L/2} = 1 - \left[(x_2 - x_\xi) * \left(\frac{x_2 - x_1}{L} \right) + (y_2 - y_\xi) * \left(\frac{y_2 - y_1}{L} \right) \right] * \frac{2}{L} \quad (\text{A.15})$$

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 B - COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS DA INTEGRAÇÃO ANALÍTICA E A NUMÉRICA PARA A DIFUSÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL

Nesta seção analisamos os resultados fornecidos pelos programas DCCNR (difusão, constante no espaço, constante no tempo, integrado numericamente com repartição do primeiro intervalo de tempo) e DCC (difusão, constante no espaço, constante no tempo, integrado analiticamente, feito por Effren(1997)).

Para esse estudo analisamos a difusão transiente bidimensional em uma região quadrada de lado igual a um (1), onde aplicamos um potencial unitário na face $X=0$ e um fluxo unitário na face $Y=0$, mantendo as demais faces do quadrado com valor nulo para potencial ou fluxo, como pode-se observar na figura abaixo.

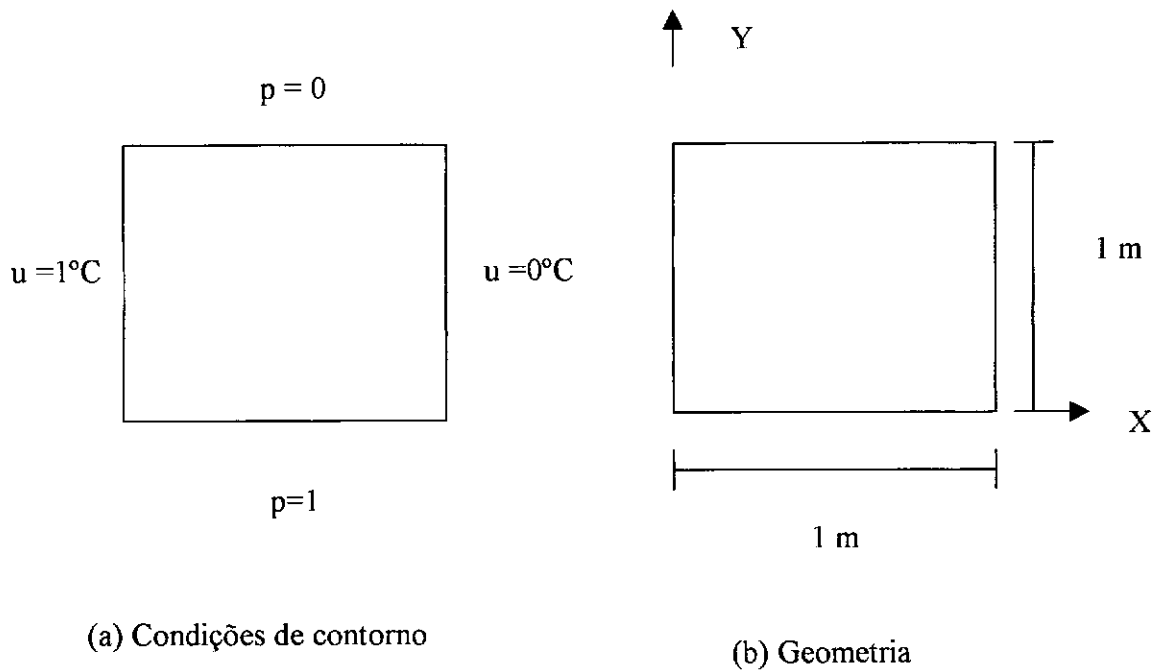


Figura B.1 - Desenho esquemático do exemplo utilizado para teste da coerência entre os programas DCCNR e DCC. Dividindo o contorno em 24 elementos igualmente distribuídos ($\Delta X = 0,083\text{m}$).

Tabela B.1 - Resultados Numéricos obtidos para difusão com integração analítica e integração numérica:

	DCC	DCCNR	DCC	DCCNR	DCC	DCCNR
X(m)	U* nível 1	U* nível 1	U* nível 5	U* nível 5	U* nível 10	U* nível 10
0,083	0,948	0,947	1,078	1,078	1,084	1,084
0,25	0,756	0,756	1,044	1,044	1,056	1,056
0,417	0,582	0,582	0,933	0,933	0,946	0,946
0,583	0,439	0,439	0,765	0,765	0,779	0,779
0,75	0,31	0,31	0,541	0,541	0,552	0,552
0,917	0,15	0,15	0,237	0,237	0,242	0,242
1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
0,917	0,01	0,011	0,082	0,082	0,087	0,087
0,75	0,063	0,063	0,261	0,261	0,271	0,271
0,583	0,151	0,151	0,435	0,435	0,448	0,448
0,417	0,294	0,294	0,602	0,602	0,615	0,615
0,25	0,51	0,51	0,764	0,764	0,775	0,775
0,083	0,808	0,808	0,923	0,923	0,929	0,928
0	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1

COMPARAÇÃO ENTRE A INTEGRAÇÃO
ANALÍTICA(DCC) E A NUMÉRICA(DCCNR) PARA A
DIFUSÃO

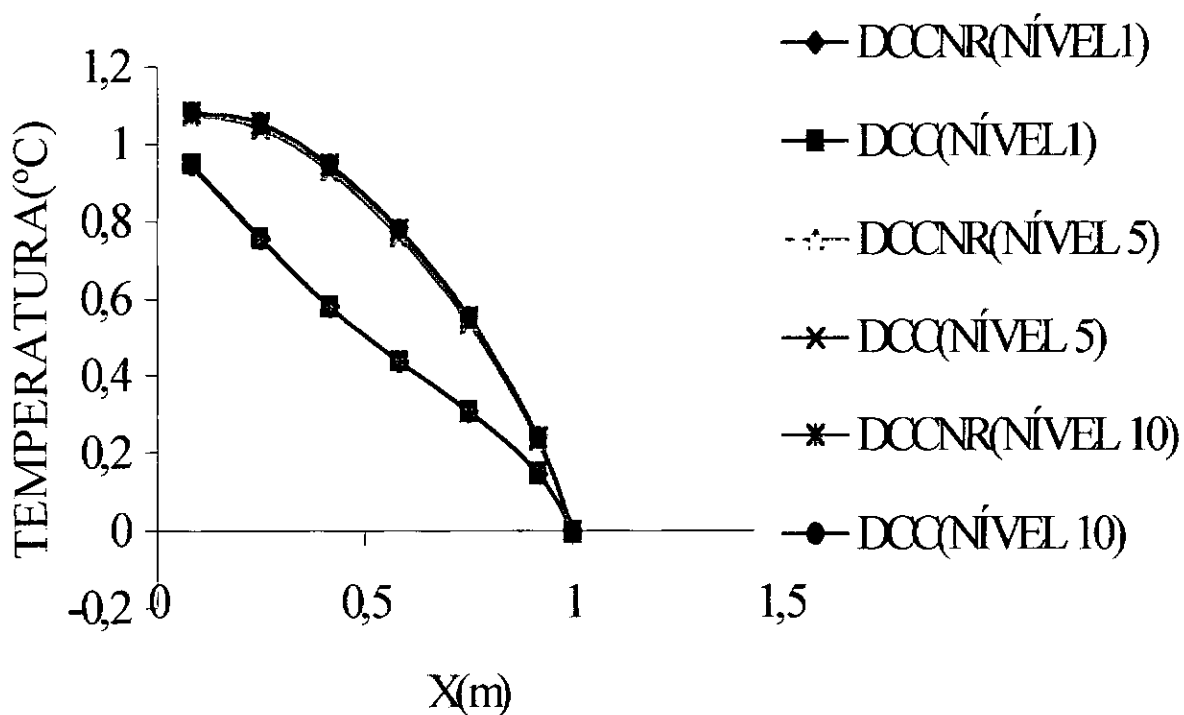


Figura B.2 - Comparação gráfica entre a integração analítica e a numérica para a equação da difusão transiente bidimensional

APÊNDICE C - ANÁLISE GRÁFICA E NUMÉRICA DO DECAIMENTO DAS MATRIZES [G] E [H] AO LONGO DO TEMPO PARA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO E DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO

C.1 – Análise Gráfica e Numérica das Matrizes [G] e [H] para a equação da Difusão Advecção Transiente, com número de Péclet igual a 20(vinte), para o elemento campo 9 e ponto fonte 3($\xi=3$, $\chi=9$), do exemplo do apêndice B(figura B.1).

Pe=20		
NÍVEL TEMPO	G(3,9,IT)	H(3,9,IT)
1	4,56249E-12	-1,44046E-10
2	1,68499E-09	-2,88017E-08
3	7,568E-09	-8,76121E-08
4	8,57393E-09	-7,23482E-08
5	5,60986E-09	-3,69086E-08
6	2,8609E-09	-1,53876E-08
7	1,28228E-09	-5,82774E-09
8	5,33872E-10	-2,10003E-09
9	2,12454E-10	-7,36529E-10
10	8,21145E-11	-2,54454E-11

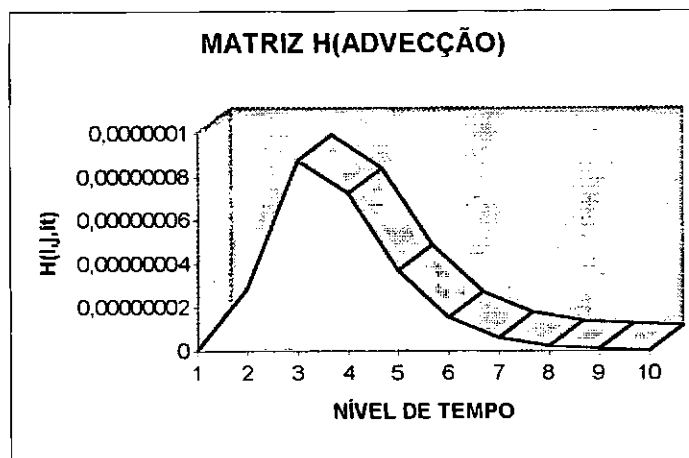
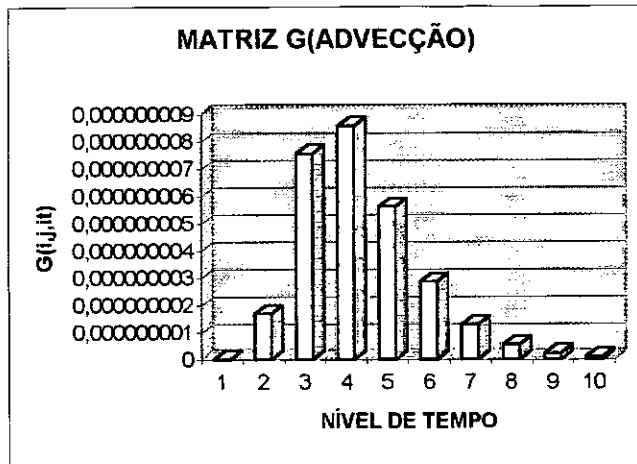
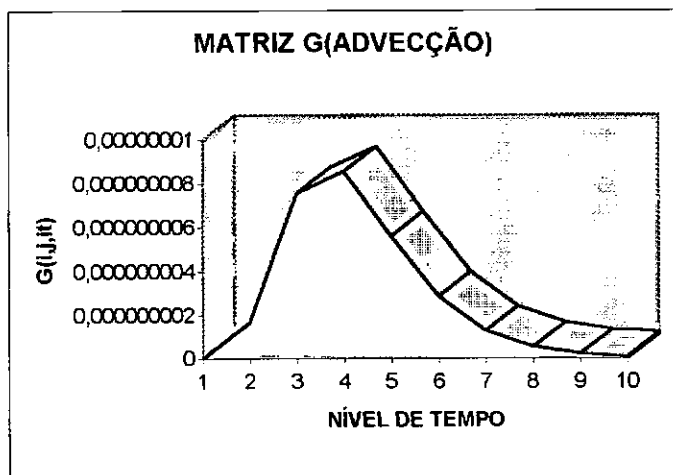


Tabela C.2 – Análise Gráfica e Numérica das Matrizes [G] e [H] para a equação da Difusão Advecção-Transiente, com número de Péclet igual a 5 (cinco), para o elemento campo 9 e ponto fonte 3 ($\xi=3$, $\chi=9$), do exemplo do apêndice B (figura B.1).

Pe=5		
NÍVEL TEMPO	G(3,9,IT)	H(3,9,IT)
1	0,000278072	-0,00132024
2	0,000343257	-0,000721143
3	0,000158787	-0,000192958
4	7,03568E-05	-6,01723E-05
5	3,17407E-05	-2,09583E-05
6	1,46231E-05	-7,86622E-06
7	6,85834E-06	-3,11313E-06
8	3,26383E-06	-1,28154E-06
9	1,57182E-06	-5,4381E-07
10	7,64438E-07	-2,36388E-07

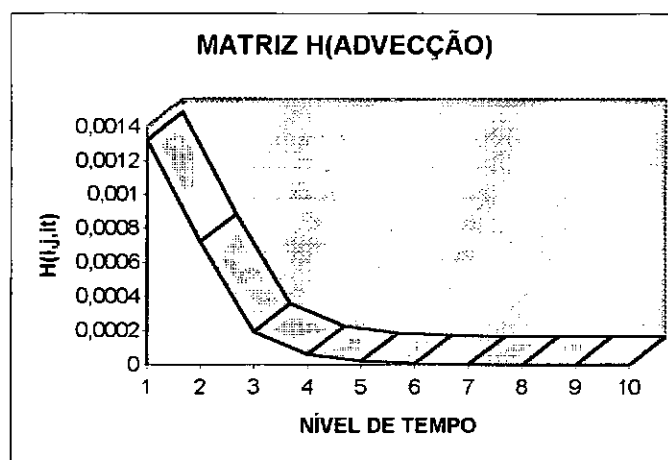
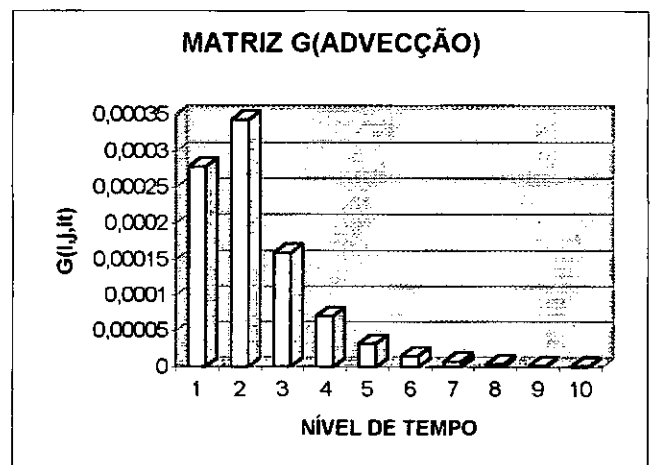
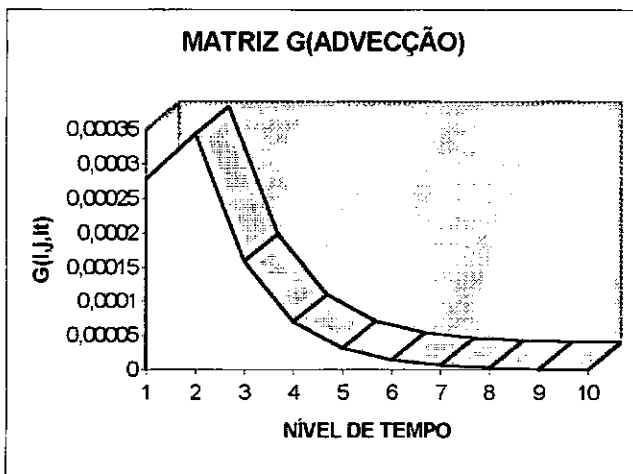
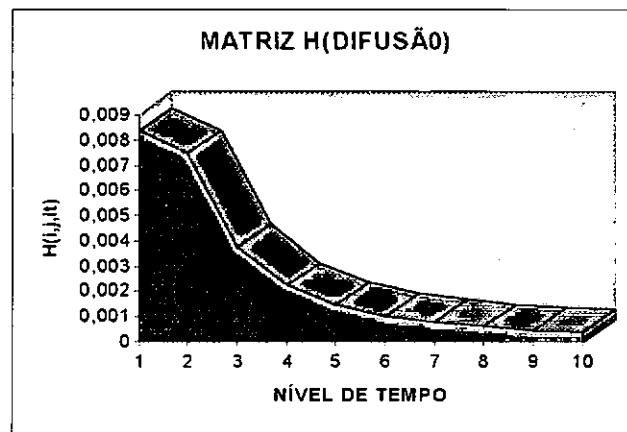
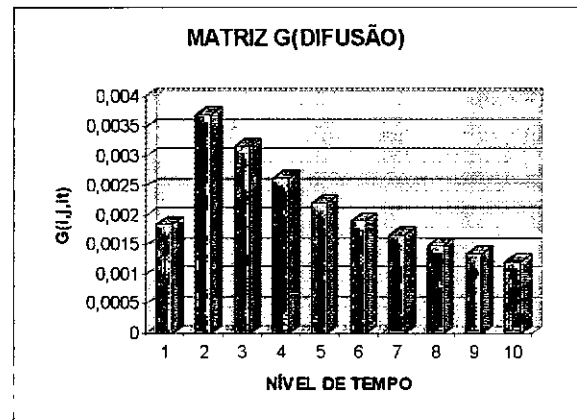
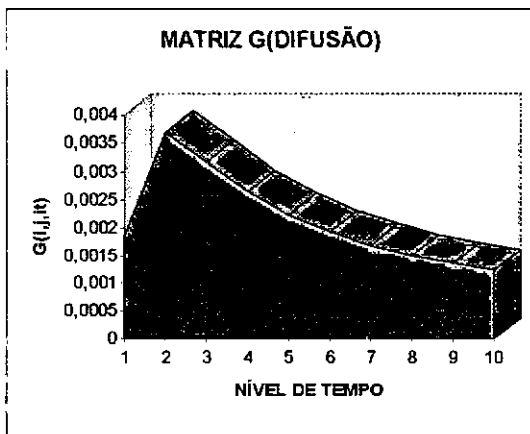


Tabela C.3 – Análise Gráfica e Numérica das Matrizes [G] e [H] para a equação da Difusão Transiente, para o elemento campo 9 e ponto fonte 3 ($\xi=3$, $\chi=9$), do exemplo do apêndice B (figura B.1).

Pe=0		
NÍVEL TEMPO	G(3,9,IT)	H(3,9,IT)
1	0,001848647	-0,008404752
2	0,003695696	-0,007497853
3	0,003173214	-0,003777121
4	0,002628327	-0,002214977
5	0,00221774	-0,001447691
6	0,00191074	-0,001018259
7	0,001675608	-0,000754581
8	0,001490755	-0,00058133
9	0,001342006	-0,00046149
10	0,001219904	-0,000375189



APÊNDICE D -ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DA SOLUÇÃO FUNDAMEN-
TAL DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO - ADVECÇÃO TRANSIENTE
BIDIMENSIONAL COM O TRUNCAMENTO DA EXPANSÃO
EM SÉRIE DE TAYLOR

Uma vez que não possuíamos a integral analítica no tempo da solução fundamental da equação da difusão-advecção transiente bidimensional, num primeiro momento expandimos em série de Taylor a terceira exponencial da solução fundamental, a devida a advecção transiente, e truncamos no terceiro termo devido a influência dos termos seguintes ser muito pequena.

Posteriormente repartimos o primeiro intervalo de tempo em dois trechos(cedo e tarde), onde no primeiro trecho utilizamos a transformada cúbica de Telles para retirar a singularidade logarítmica existente e no segundo foi calculada a solução fundamental como nos demais níveis de tempo.

$$IU_{CEDO} = \frac{1}{4\pi \tau} \exp\left[\frac{-r^2}{4\tau}\right] \exp\left[-Pe\left(x_1(x) - x_1\left(\frac{x}{\tau}\right)\right)\right] \left[1 + \sum_{n=1}^3 \frac{\left(\frac{-Pe^2}{4}\right)^n}{n!} (\tau)^n \right] \quad (4.1)$$

Tabela D.1 - Análise do truncamento da expansão em série de Taylor.

r (m)	IUcedo 1 termo	IUcedo 2 termos	IUcedo 3 termos	IUcedo 4 termos	IUcedo 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

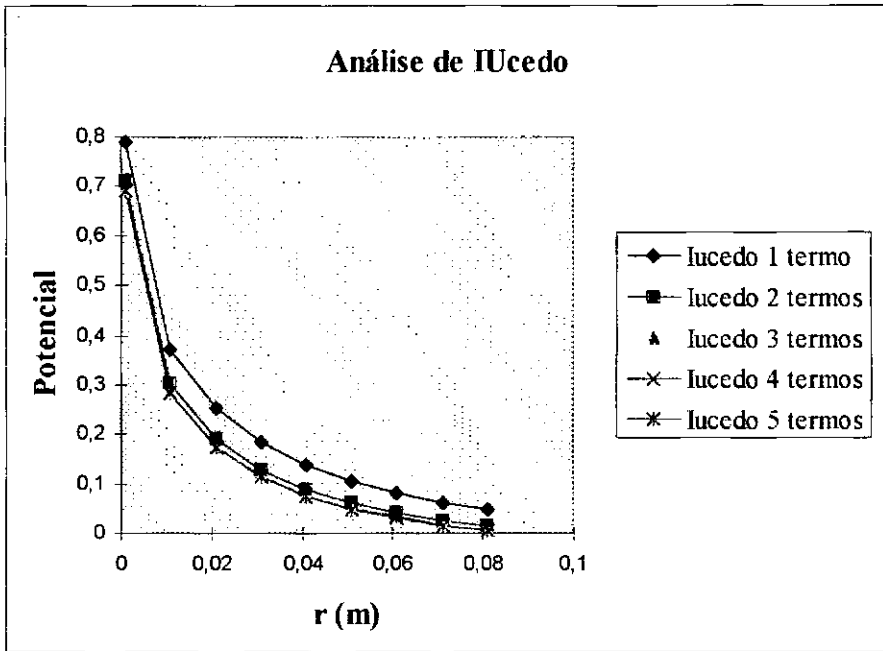


Figura D.1 - Solução Fundamental, expandida no tempo, da equação da Difusão - Advecção já integrada no tempo (IUcedo) para análise do truncamento da série de Taylor.

Tabela D.2 -Análise do comportamento da solução fundamental da equação da Difusão - Advecção transiente bidimensional com a variação do número de Péclet.

r (m)	IUcedo (Pe=0)	IUcedo (Pe=5)	IUcedo (Pe=20)
0,001	0,79732203	0,7902936	0,69010079
0,011	0,41592269	0,39978917	0,28365388
0,021	0,31364416	0,29296244	0,17502214
0,031	0,25268441	0,22940572	0,11481779
0,041	0,2095961	0,18492225	0,07616863
0,051	0,17664214	0,15138886	0,04964417
0,061	0,15028816	0,12502968	0,03073774
0,071	0,12861488	0,10375846	0,0169331
0,081	0,110450541	0,08628841	0,00668825

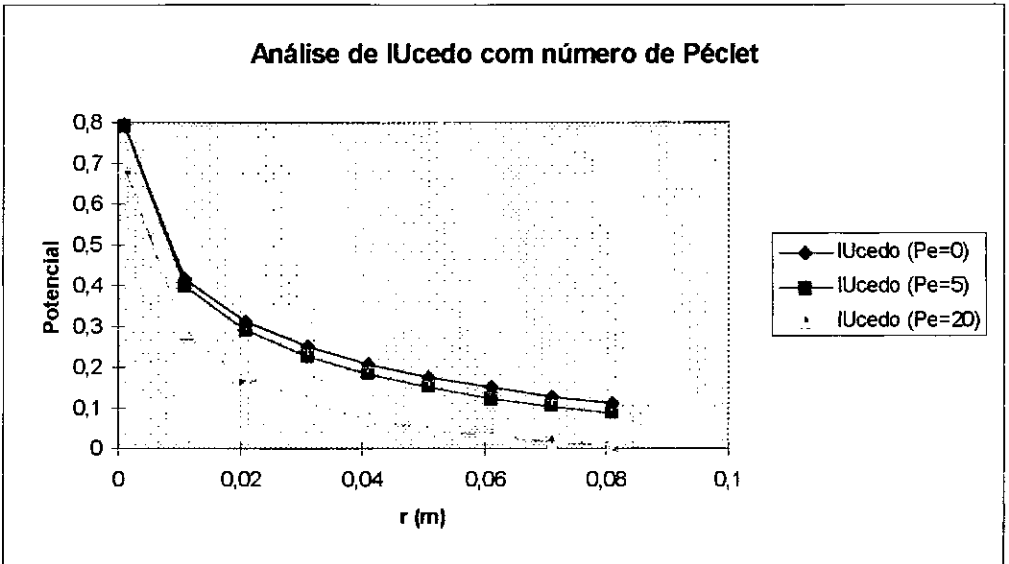


Figura D.2 - Solução Fundamental, expandida no tempo, da equação da Difusão - Advecção já integrada no tempo (IUcedo) para análise do seu comportamento com a alteração do número de Péclet.

APÊNDICE E - ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DA DIFUSÃO E DA ADVECÇÃO EM UM TRECHO DE RIO FICTÍCIO.

A figura E.1 mostra o gráfico da solução fundamental ao longo do espaço para um tempo fixo de 0,1 segundo, variando o número de Péclet.

Podemos observar que ao aumentarmos o valor do número de Péclet no gráfico ocorre uma translação da curva a jusante do trecho de rio em estudo.

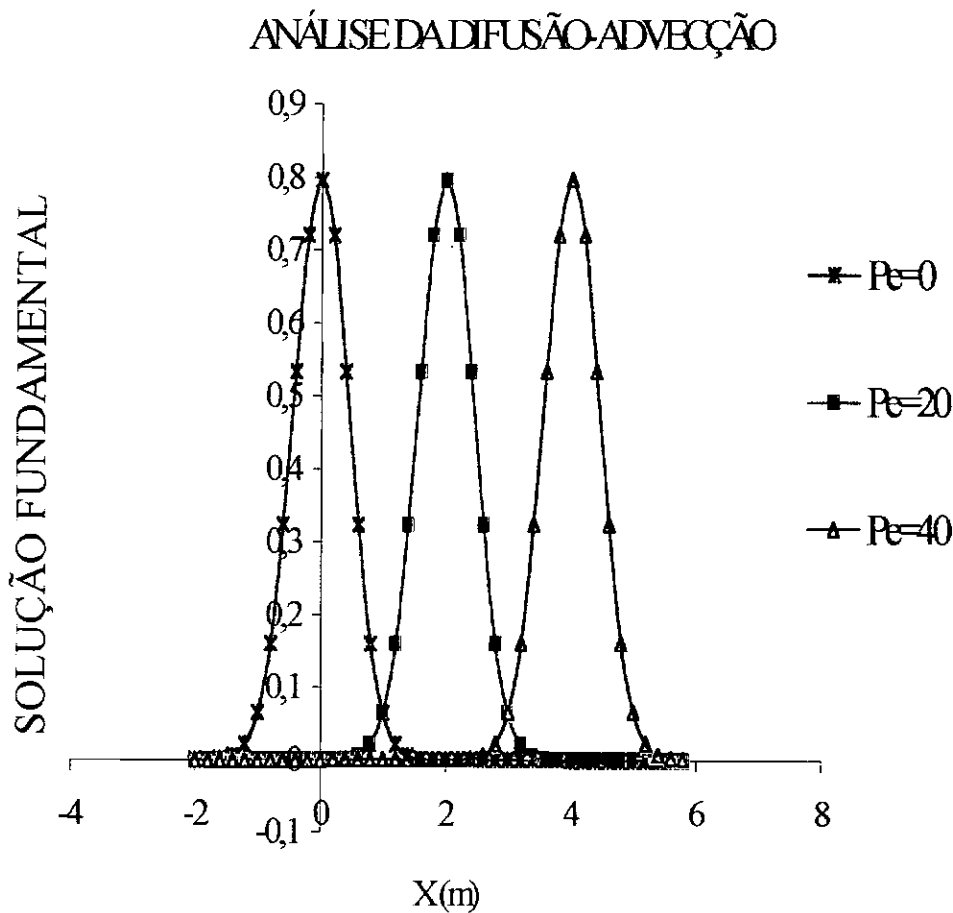


Figura E.1 - Solução Fundamental Transiente da equação da Advecção para número de Péclet variável ao longo do espaço.

A figura E.2 mostra o gráfico da solução fundamental ao longo do espaço para um número de Péclet fixo e igual a 3 (três), variando o tempo de 0,01; 0,05; 0,1; 0,2; 1,0 variando também o espaço. Podemos observar que a medida que o tempo passa no gráfico ocorre uma translação da curva a jusante do trecho de rio em estudo e redução do valor do potencial.

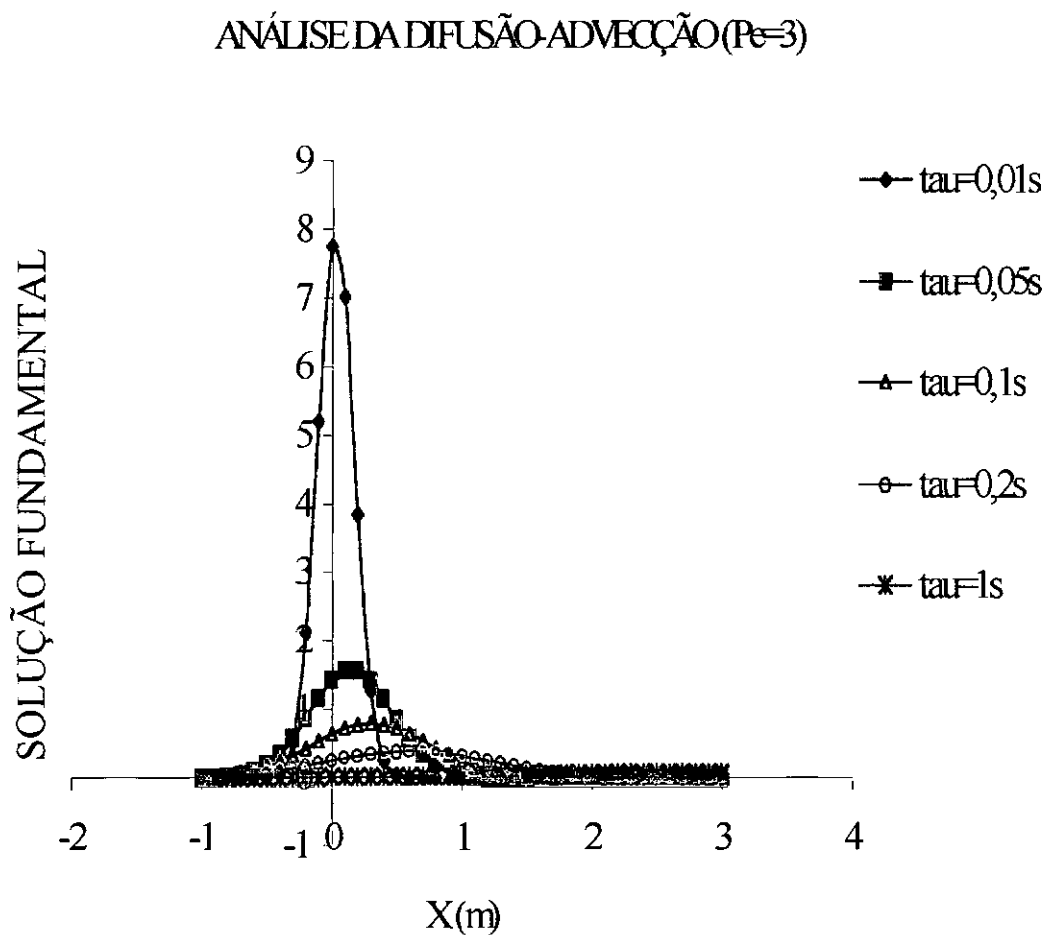


Figura E.2 - Solução Fundamental Transiente da equação da Difusão - Adveccção para tempos variáveis ao longo do espaço.

APÊNDICE F - ANÁLISE GRÁFICA DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL AO LONGO DO TEMPO PARA DISTÂNCIAS FIXAS DO PONTO FONTE AO ELEMENTO CAMPO E PARA TEMPOS DE MEDIÇÕES FIXOS PARA A DIFUSÃO E PARA DIFUSÃO - ADVECCÃO.

A figura F.1 mostra o gráfico da solução fundamental da equação da difusão transiente bidimensional ao longo do tempo para distâncias fixas do ponto fonte ao elemento campo. Já a figura F.2 contém o gráfico da solução fundamental para tempos de medição fixos.



Figura F.1 - Solução Fundamental Transiente - Distâncias fixas

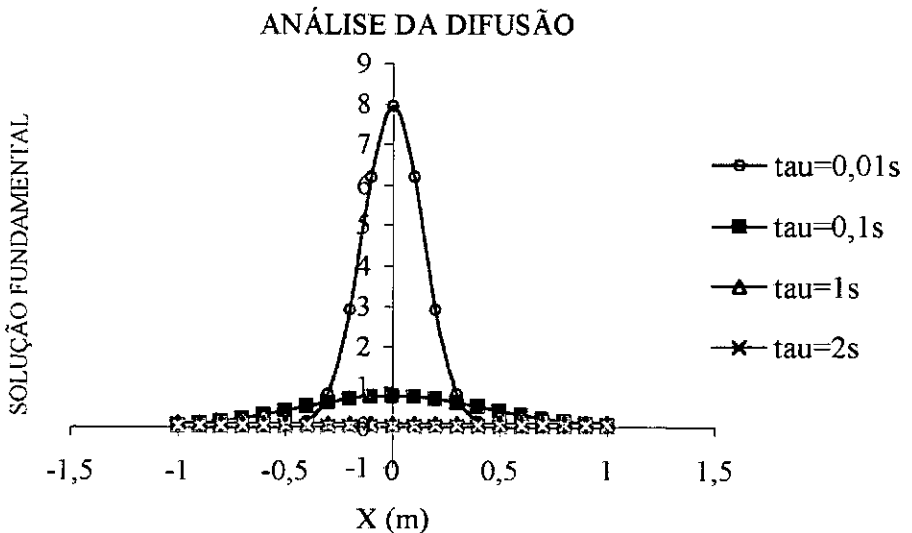


Figura F.2 - Solução Fundamental Transiente - Tempos fixos

A figura F.3 mostra o gráfico da solução fundamental da equação da Difusão – Advecção ao longo do tempo para distâncias fixas do ponto fonte ao elemento campo. Já a figura F.4 contém o gráfico da solução fundamental da Difusão–Advecção para tempos de medição fixos.

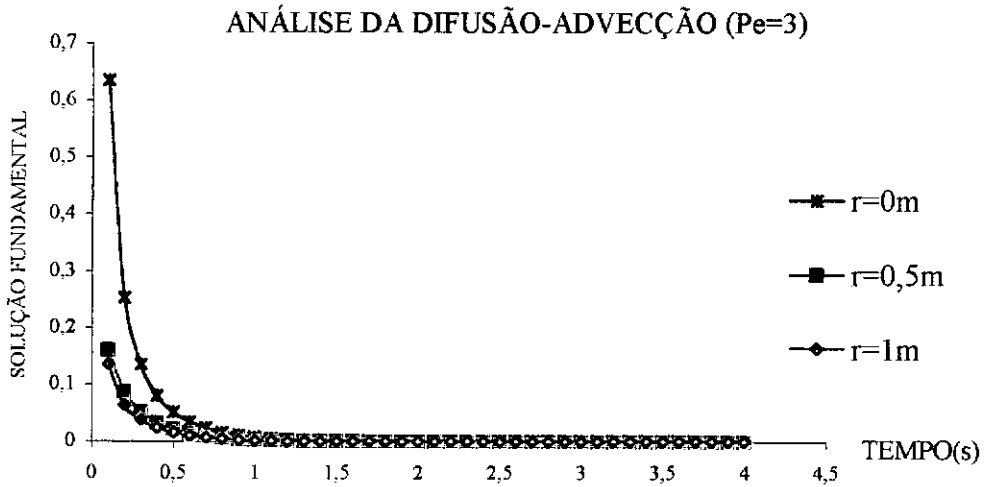


Figura F.3 – Solução Fundamental Transiente para Difusão-Advecção (Distâncias Fixas).

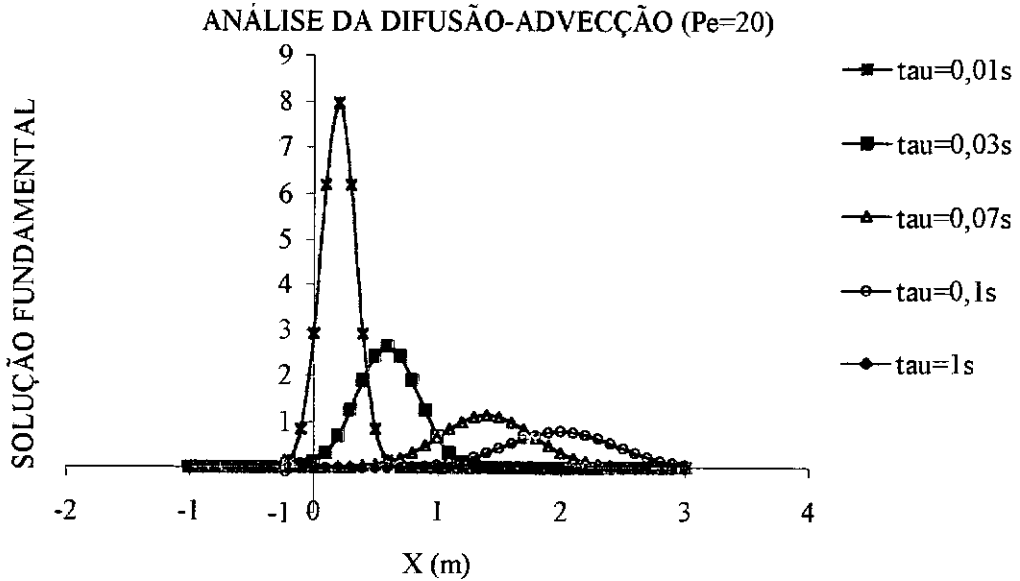


Figura F.4 – Solução Fundamental Transiente da Difusão-Advecção (tempos fixos).

APÊNDICE G

G.1 - Listagem do programa DACC para solução da equação da Difusão - Advecção transiente em duas dimensões pelo Método dos Elementos de Contorno.

```
C (* *****)
C (*
C (*      COPPE/UFRJ - PROGRAMA DE ENGENHARIA CIVIL
C (*
C (*              DIFUSÃO - ADVECÇÃO
C (*
C (*      Programa com elementos de contorno constantes
C (*
C (*              Marcos Denicio Souza
C (*
C (* *****)
```

```
C =====
      PROGRAM DACC
C =====
```

```
INTEGER NDELTM      ! No. Max. de Intervalos de Tempo
INTEGER NELMX       ! No. Max. de elementos
INTEGER NGAMX       ! No. Max. de pontos de Gauss
INTEGER NNGM        ! No. Max. de nós geométricos
INTEGER NPINTM      ! No. Max. de pontos internos

REAL*8 DeltaT       ! Intervalo de tempo em horas

CHARACTER*10 FILEIN      ! Nome do arquivo de entrada
CHARACTER*10 FILEOUT     ! Nome do arquivo de saída
```

INTEGER Inic	! Arquivo de inicialização
INTEGER Inp	! Arquivo de entrada
INTEGER It	! Intervalo de tempo atual
INTEGER Ipr	! Arquivo de saída
REAL*8 K	! Coeficiente
INTEGER NDMX	! No. máx. de intervalos de tempo
INTEGER Ne	! No. de elementos
INTEGER NEMX	! No. máx. de elementos
INTEGER NG	! No. de pontos de Gauss
INTEGER NGMX	! No. máx. de nós geométricos
INTEGER Ninter	! No. de intervalos tempo do arq.
INTEGER Nn	! No. de nos geométricos
INTEGER Npi	! No. de pontos internos
INTEGER NPIMX	! No. máx de pontos internos
REAL*8 Pi	! Valor de Pi
REAL*8 Pe	! Número de Péclet
COMMON Pe	
PARAMETER (NDELTM =40)	
PARAMETER (NELMX =60)	
PARAMETER (NGAMX =20)	
PARAMETER (NNGM = 61)	
PARAMETER (NPINTM = 10)	
PARAMETER (Pi = 3.141592654 D0)	
REAL*8 Ae(2)	! Argumento da exponencialintegral
REAL*8 Cg(NGAMX)	! Coordenadas de Gauss
REAL*8 F(NELMX)	! Vetor de termos indep. no tempo atual
INTEGER Kode(NELMX)	! Código do valor prescrito

REAL*8 length(NELMX)	! Comprimento de elemento
REAL*8 Ome(NGAMX)	! Pesos de Gauss
REAL*8 Tf(NDELTM)	! Tempo de contagem da resposta
REAL*8 Valor(NDELTM)	! Leitura de valores prescritos
REAL*8 Vpr(NELMX)	! Valores. prescritos no tempo atual
REAL*8 Xg(NNGM), Yg(NNGM)	! Coordenadas dos nos geométricos
REAL*8 Xi(NPINTM), Yi(NPINTM)	! Coordenadas dos pontos internos
REAL*8 Xk(NGAMX), Yk(NGAMX)	! Coord. dos pontos de Gauss no elem.
REAL*8 Xm(NELMX), Ym(NELMX)	! Coord. do ponto médio do elem.
REAL*8 A(NELMX,NELMX)	! Matriz do sist. que entra no solver
REAL*8 B(NELMX,NELMX)	! Multiplica os valores prescritos
REAL*8 C(NELMX,NELMX)	! Back-up da matriz [A]
REAL*8 Dfi(NELMX,NDELTM)	! Valores da der. normal(P)
REAL*8 Fi(NELMX,NDELTM)	! Valores de potencial(U)
REAL*8 Gpi(NELMX,NDELTM)	! Coef.influência G no ponto int.
REAL*8 Hpi(NELMX,NDELTM)	! Coef.influência H no ponto int.
REAL*8 G(NELMX,NELMX,NDELTM)	! Matriz de coeficientes Gijt
REAL*8 H(NELMX,NELMX,NDELTM)	! Matriz de coeficientes Hijt
INTEGER Inc(NELMX,2)	! Matriz de conectividades
REAL*8 Upi(NPINTM,NDELTM)	! Potencial dos pontos internos
NDMX = NDELTM	
NEMX = NELMX	
NPIMX = NPINTM	
NG = NGAMX	
NGMX = NNGM	

C Leitura dos arquivos

Inic= 4

Inp = 5

Ipr = 6

```

OPEN(Inic, FILE = 'INICIO.DAT')
READ(Inic, '(A)') FILEIN
READ(Inic, '(A)') FILEOUT
OPEN(Inp, FILE = FILEIN)
OPEN(11, FILE = 'MATRIZA.DAT')
CLOSE(inic)
CLOSE(11)

```

C LÊ OS DADOS DE ENTRADA

```

C -----
CALL LER (NDMX,NEMX,NGMX,NPIMX,
#      DeltaT,Inp,Ipr,K,Ne,Ninter,Nn,Npi,
#      Kode,length,Valor,Xg,Xm,Xi,Yg,Ym,Yi,
#      Dfi,Fi,Inc)

```

C -----
C VALORES DE COORDENADAS E PONTOS DE GAUSS

```

C -----
CALL GAUSS (NG,Cg, Ome)

```

```

C -----
DO 5 It=1,NInter
      write(*,*) 'Intervalo de tempo ',It,'',NInter
      Tf(It)= It*DeltaT

```

C CÁLCULO DOS TERMOS DAS MATRIZES H E G EM CADA
INTERVALO

```

C -----
CALL MATGH (NDMX,NEMX,NG,NGMX,DeltaT,It,K,Ne,Pi,
#      Ae,Cg,length,Ome,Tf,Xg,Xk,Xm,Yg,Yk,Ym,G,H,Inc)

```

C -----

5 CONTINUE

- C Preenchimento das matrizes C e B que multiplicam
- C as incógnitas e os valores prescritos

```
DO 20 j=1,Ne
    IF (Kode(j).EQ.0) THEN
        DO 10 i=1,Ne
            C(i,j)= -G(i,j,1)
            B(i,j)= -H(i,j,1)
10        CONTINUE
        ELSE
            DO 15 i=1,Ne
                C(i,j)= H(i,j,1)
                B(i,j)= G(i,j,1)
15        CONTINUE
            END IF
20 CONTINUE
```

- DO 900 It=1,Ninter
- C
- C Preenchimento da matriz que multiplica as incógnitas
- C e do vetor de condições de contorno prescritas (vpr)

```
DO 200 I= 1,Ne
    DO 100 J= 1,Ne
        A(I,J)=C(I,J)
100 CONTINUE

    IF (Kode(I).EQ.0) THEN
        Vpr(I)=Fi(I,It)
    ELSE
        Vpr(I)=Dfi(I,It)
    END IF
200 CONTINUE
```

C Cálculo do 1o. termo do vetor de termos independentes

C $B * VPR$

```
DO 400 I= 1,Ne
    F(i)= 0.0
    DO 300 J= 1,Ne
        F(i)=F(i) + B(i,j)*Vpr(j)
300    CONTINUE
400    CONTINUE
```

C Calculo da contribuição do passado no vetor

C de termos independentes

```
IF (It.GT.1) THEN
DO 700 I= 1,Ne
    DO 600 J= 1,Ne
        It1=It + 1
        DO 500 L= 2,It
            F(I) = F(I) - H(I,J,L)*Fi(J,It1-L)
#        + G(I,J,L)*Dfi(J,It1-L)
500    CONTINUE
600    CONTINUE
700    CONTINUE
END IF
```

C SOLVER PARA RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES

C -----

CALL SLNPD (NEMX, Ne, A, F)

C -----

C Preenchimento das matrizes de potencial(Fi) e fluxo(Dfi)

```
DO 800 I=1,Ne
    IF (Kode(I).EQ.0) THEN
```

```

                Dfi(I,It)=F(I)
            ELSE
                Fi(I,It)=F(I)
            END IF
800          CONTINUE
900 CONTINUE
    IF (Npi.GT.0) THEN

C    CALCULA O POTENCIAL DOS PONTOS INTERNOS

C    -----
    CALL PTINT (NDMX,NEMX,NG,NGMX,NPIMX, DeltaT,K,Ne,Ninter,Npi,
#          Ae,Cg, length, Ome,Tf,Xg,Xi,Xk,Yg,Yi,Yk,
#          Dfi,Fi,Gpi,Hpi, Inc,Upi)
C    -----
    END IF
    OPEN(Ipr, FILE = FILEOUT)

C
C  CRIAÇÃO DE UM ARQUIVO COM OS RESULTADOS
C
C  -----
    CALL RESULT (NDMX,NEMX,NPIMX,Ipr,Ne,Ninter,Npi,
#          Xi,Xm,Yi,Ym,Dfi,Fi,Upi)
C  -----
    CLOSE (Ipr)
    STOP
    END

C  *****
    SUBROUTINE GAUSS (NG, Cg, Ome)
C  *****

```

INTEGER NG

! Número de pontos de Gauss

REAL*8 Cg(NG)

! Coordenadas de Gauss

REAL*8 Ome(NG)

! Pesos de Gauss

C 20 PONTOS DE GAUSS

CG(1)=-.9931285991850949D00

CG(2)=-.9639719272779137D00

CG(3)=-.9122344282513259D00

CG(4)=-.8391169718222188D00

CG(5)=-.7463319064601507D00

CG(6)=-.6360536807265150D00

CG(7)=-.5108670019508270D00

CG(8)=-.3737060887154195D00

CG(9)=-.2277858511416450D00

CG(10)=-.0765265211334973D00

CG(11)=-CG(10)

CG(12)=-CG(9)

CG(13)=-CG(8)

CG(14)=-CG(7)

CG(15)=-CG(6)

CG(16)=-CG(5)

CG(17)=-CG(4)

CG(18)=-CG(3)

CG(19)=-CG(2)

CG(20)=-CG(1)

C

OME(1)=.01761400713915211D00

OME(2)=.04060142980038694D00

OME(3)=.06267204833410906D00

OME(4)=.08327674157670474D00

OME(5)=.10193011981724043D00

OME(6)=.11819453196151841D00

```

OME(7)=.13168863844917662D00
OME(8)=.14209610931838205D00
OME(9)=.14917298647260374D00
OME(10)=.15275338713072585D00
OME(11)=OME(10)
OME(12)=OME(9)
OME(13)=OME(8)
OME(14)=OME(7)
OME(15)=OME(6)
OME(16)=OME(5)
OME(17)=OME(4)
OME(18)=OME(3)
OME(19)=OME(2)
OME(20)=OME(1)

```

C

```

DO 150 I = 1,10
    J = I + 10
    Cg(J) = -Cg(I)
    ome(J) = ome(I)

```

150 CONTINUE

RETURN

END

C *****

REAL*8 FUNCTION EXPI (Af)

C *****

C CALCULA A FUNÇÃO EXPONENCIAL-INTEGRAL

REAL*8 Af

REAL*8 C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7,C8

REAL*8 C9,C10,C11,C12,C13,C14

```

PARAMETER (C1 = 0.57721566D0, C2 = 0.99999193D0)
PARAMETER (C3 = 0.24991055D0, C4 = 0.05519968D0)
PARAMETER (C5 = 0.00976004D0, C6 = 0.00107857D0)
PARAMETER (C7 = 8.5733287401D0, C8 = 18.0590169730D0)
PARAMETER (C9 = 8.6347608925D0, C10 = 0.2677737343D0)
PARAMETER (C11 = 9.5733223454D0, C12 = 25.6329561486D0)
PARAMETER (C13 = 21.0996530827D0, C14 = 3.9584969228D0)

```

```

IF (Af.GT.199) THEN

```

```

    ExpI=0.0D0

```

```

ELSE

```

```

    IF (Af.LE.1) THEN

```

```

        ExpI=-C1+C2*Af-C3*Af**2+C4*Af**3-C5*Af**4+C6*Af**5-

```

```

DLOG(Af)

```

```

    ELSE

```

```

        ExpI=(Af**4+C7*Af**3+C8*Af**2+C9*Af+C10)/

```

```

# ((Af**4+C11*Af**3+C12*Af**2+C13*Af+C14)*Af*EXP(Af))

```

```

    END IF

```

```

END IF

```

```

RETURN

```

```

END

```

```

C

```

```

C *****

```

```

REAL*8 FUNCTION E1S( Af )

```

```

C *****

```

```

C  CALCULA A FUNÇÃO EXPONENCIAL INTEGRAL SOMADA AO

```

```

C  LN (INTERVALO 1)

```

```

REAL*8 Af

```

```

REAL*8 C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7,C8

```

REAL*8 C9,C10,C11,C12,C13,C14

PARAMETER (C1 = 0.57721566D0, C2 = 0.99999193D0)

PARAMETER (C3 = 0.24991055D0, C4 = 0.05519968D0)

PARAMETER (C5 = 0.00976004D0, C6 = 0.00107857D0)

PARAMETER (C7 = 8.5733287401D0, C8 = 18.0590169730D0)

PARAMETER (C9 = 8.6347608925D0, C10 = 0.2677737343D0)

PARAMETER (C11 = 9.5733223454D0, C12 = 25.6329561486D0)

PARAMETER (C13 = 21.0996530827D0, C14 = 3.9584969228D0)

IF (Af.GT.199) THEN

 E1S=0.0D0

ELSE

 IF(Af.LE.1) THEN

 E1S=-C1+C2*Af-C3*Af**2+C4*Af**3-C5*Af**4+C6*Af**5

 ELSE

 E1S=(Af**4+C7*Af**3+C8*Af**2+C9*Af+C10)/

((Af**4+C11*Af**3+C12*Af**2+C13*Af+C14)*Af*EXP(Af))

+ DLOG(Af)

 END IF

END IF

C

RETURN

END

C

SUBROUTINE LER (NDMX,NEMX,NGMX,NPIMX,

DeltaT,Inp,Ipr,K,Ne,Ninter,Nn,Npi,

kode,length,Valor,Xg,Xm,Xi,Yg,Ym,Yi,

Dfi,Fi,Inc)

C

C ROTINA PARA LEITURA DOS DADOS DE ENTRADA

INTEGER NDMX, NEMX, NPIMX, NGMX

CHARACTER*80 TITLE

REAL*8 DeltaT,K

INTEGER Ke, Kn, Inp,Ipr,It

INTEGER Ne,Ninter,Nn,No1,No2,Npi

REAL*8 Xg1,Xg2,Yg1,Yg2

REAL*8 Pe

COMMON Pe

INTEGER Kode(NEMX)

REAL*8 length(NEMX)

REAL*8 Valor(NDMX)

REAL*8 Xg(NGMX),Yg(NGMX)

REAL*8 Xi(NPIMX), Yi(NPIMX)

REAL*8 Xm(NEMX),Ym(NEMX)

REAL*8 Dfi(NEMX,NDMX),Fi(NEMX,NDMX)

INTEGER Inc(NEMX,2)

C

C Lê e imprime titulo

C

READ(Inp,'(A)') TITLE

WRITE(Ipr,'(A)') TITLE

READ(Inp,*) Pe

WRITE(Ipr,*) Pe

READ(Inp,*) K

READ(Inp,*) DeltaT

READ(Inp,*) Nn

DO 100 I = 1,Nn

 READ(Inp,*) Kn, Xg(Kn), Yg(Kn)

100 CONTINUE

READ(Inp,*) Ne

DO 200 I= 1,Ne

 READ(Inp,*) Ke, Inc(Ke,1),Inc(Ke,2),Kode(Ke)

 No1 = Inc(Ke,1)

 No2 = Inc(Ke,2)

 Xg1 = Xg(No1)

 Xg2 = Xg(No2)

 Yg1 = Yg(No1)

 Yg2 = Yg(No2)

 Xm(Ke) = (Xg1 + Xg2) / 2.D0

 Ym(Ke) = (Yg1 + Yg2) / 2.D0

 length(Ke) = SQRT((Xg2-Xg1)**2 + (Yg2-Yg1)**2)

200 CONTINUE

 READ(Inp,*) Ninter

 DO 500 I = 1,Ne

 READ(Inp,*) (Valor(It), It=1,Ninter)

 IF (Kode(I).EQ.0)THEN

 DO 300 It = 1, Ninter

 Fi(I,It)= Valor(It)

300 CONTINUE

 ELSE

 DO 400 It = 1,Ninter

 Dfi(I,It)= Valor(It)

400 CONTINUE

 END IF

500 CONTINUE

 READ(INP,*) Npi

 DO 600 I = 1,Npi

 READ(INP,*) kn, Xi(kn), Yi(kn)

600 CONTINUE

 CLOSE(Inp)

RETURN

END

SUBROUTINE SOLNUM(AREAIU,XM,XK,YM,YK,TFIT,DELTAT,NG)

IMPLICIT LOGICAL (A-Z)

REAL *8 Pe,xM,xK,yM,yK,R,DELTAT,TFIT,tau,AREAIU

REAL *8 NETA,RMIN

REAL *8 D1,RBARRA,P1,Q1,P,Q,A,B,C,D,CGT,GG

REAL *8 GAMA,GAMA1,GAMA2,GAMA3,RAIZCUB

INTEGER NG,I ! Número de pontos de Gauss

REAL *8 Cg(NG) ! Coordenadas de Gauss

REAL *8 Ome(NG) ! Pesos de Gauss

COMMON Pe

$$r = \sqrt{((xK-xM)**2+(yK-yM)**2)}$$

CALL gauss(NG,cg,ome)

C {TRANSFORMACAO DE TELLES}

C {CALCULO DA DISTANCIA MINIMA E DE NETABARRA}

NETA=1.

RMIN= TFIT-DELTAT

C {CALCULO DE RBARRA}

D1=2.*RMIN/DELTAT

IF(D1.GE.0.AND.D1.LE.0.05) THEN

RBARRA = 0.0

ELSEIF(D1.GE.0.05.AND.D1.LE.1.3) THEN

RBARRA = 0.85 + 0.24*LOG(D1)

ELSEIF(D1.GE.1.3.AND.D1.LE.3.618) THEN

RBARRA = 0.893 + 0.0832*LOG(D1)

ELSE

```

RBARRA = 1.
ENDIF
C {CALCULO DE p E q}
P1=1.+2*RBARRA
Q1=((NETA*(3.-2*RBARRA)-2*NETA**3/P1)/P1-NETA)/(2*P1)
P=(4*RBARRA*(1.-RBARRA)+3*(1.-NETA**2))/(3*P1**2)
C {CALCULO DE GAMABARRA}
GAMA1=SQRT(Q1**2+P**3)
GAMA2=RAIZCUB(-Q1+GAMA1)
GAMA3=RAIZCUB(-Q1-GAMA1)
GAMA=GAMA2+GAMA3+NETA/P1
C {CALCULO DOS COEFICIENTES}
Q=1.+3*GAMA**2
A=(1.-RBARRA)/Q
B=-3*GAMA*A
C=(RBARRA+3*GAMA**2)/Q
D=-B

AREAIU=0.0
DO 12 I=1,NG
CGT = A*CG(I)**3+B*CG(I)**2+C*CG(I)+D
GG = 3*A*CG(I)**2+2*B*CG(I)+C
TAU=TFIT-(deltat/2)*(CGT+1)

AREAIU=AREAIU+(1/3.141592654*EXP(-(2*Pe*XK*(TAU)-
# 2*Pe*(TAU)*XM+R**2+Pe**2*(TAU)**2)/(TAU)/4)/(TAU)/4)*
# (deltat/2)*ome(i)*GG

12 CONTINUE
RETURN
END

SUBROUTINE DERNUM(AREAIQ, XM, XK, YM, YK, TFIT, DELTAT, NG)

```

IMPLICIT LOGICAL (A-Z)

REAL*8 Pe,xM,xK,yM,yK,R,DELTAT,TFIT,tau,AREAIQ

COMMON Pe

REAL*8 NETA,RMIN

REAL*8 D1,RBARRA,P1,Q1,P,Q,A,B,C,D,CGT,GG

REAL*8 GAMA,GAMA1,GAMA2,GAMA3,RAIZCUB

INTEGER NG,I ! Número de pontos de Gauss

REAL*8 Cg(NG) ! Coordenadas de Gauss

REAL*8 ome(NG) ! Pesos de Gauss

C

R=sqrt((xK-xM)**2+(yK-yM)**2)

C

CALL gauss(ng,cg,ome)

C

{TRANSFORMACAO DE TELLES}

C

{CALCULO DA DISTANCIA MINIMA E DE NETABARRA}

NETA=1.

RMIN= TFIT-DELTAT

C

{CALCULO DE RBARRA}

D1=2.*RMIN/DELTAT

IF(D1.GE.0.AND.D1.LE.0.05) THEN

RBARRA = 0.0

ELSEIF(D1.GE.0.05.AND.D1.LE.1.3) THEN

RBARRA = 0.85 + 0.24*LOG(D1)

ELSEIF(D1.GE.1.3.AND.D1.LE.3.618) THEN

RBARRA = 0.893 + 0.0832*LOG(D1)

ELSE

RBARRA = 1.

ENDIF

C

{CALCULO DE p E q}

P1=1.+2*RBARRA

Q1=((NETA*(3.-2*RBARRA)-2*NETA**3/P1)/P1-NETA)/(2*P1)

P=(4*RBARRA*(1.-RBARRA)+3*(1.-NETA**2))/(3*P1**2)

C {CALCULO DE GAMABARRA}

GAMA1=SQRT(Q1**2+P**3)

GAMA2=RAIZCUB(-Q1+GAMA1)

GAMA3=RAIZCUB(-Q1-GAMA1)

GAMA=GAMA2+GAMA3+NETA/P1

C {CALCULO DOS COEFICIENTES}

Q=1.+3*GAMA**2

A=(1.-RBARRA)/Q

B=-3*GAMA*A

C=(RBARRA+3*GAMA**2)/Q

D=-B

AREAIQ=0.0

DO 13 I=1,Ng

CGT = A*CG(I)**3+B*CG(I)**2+C*CG(I)+D

GG = 3*A*CG(I)**2+2*B*CG(I)+C

TAU=TFIT-(deltat/2)*(CGT+1)

AREAIQ=AREAIQ+(1/3.141592654/(TAU)**2*exp(-(r**2+2*Pe*(TAU)*
#xK-2*Pe*(TAU)*xM+Pe**2*(TAU)**2)/(TAU)/4)/8)*(deltat/2)*ome(i)*GG

13 CONTINUE

RETURN

END

C

C ESTA SUBROTINA CALCULA A ÁREAIU1 QUE É A INTEGRAÇÃO NO

C TEMPO PARA UM PERÍODO 'TARDE' DENTRO DA SINGULARIDADE

C

SUBROUTINE SOLNUM1(AREAIU1,XM,XK,YM,YK,TFIT,DELTAT,NG)

IMPLICIT LOGICAL (A-Z)

REAL*8 NETA,RMIN

REAL*8 D1,RBARRA,P1,Q1,P,Q,A,B,C,D,CGT,GG

REAL*8 GAMA,GAMA1,GAMA2,GAMA3,RAIZCUB

```

REAL*8 xM,xK,yM,yK,R,DELTAT,TFIT,tau,AREAIU1,deltat1
REAL*8 Pe
COMMON Pe
INTEGER NG,I                ! Número de pontos de Gauss
REAL*8 Cg(NG)              ! Coordenadas de Gauss
REAL*8 Ome(NG)             ! Pesos de Gauss
C
    R=sqrt((xK-xM)**2+(yK-yM)**2)
C
    CALL gauss(NG,cg,ome)
C
C   {TRANSFORMACAO DE TELLES}
C   {CALCULO DA DISTANCIA MINIMA E DE NETABARRA}
    NETA=1.
    RMIN= TFIT-DELTAT
C   {CALCULO DE RBARRA}
    D1=2.*RMIN/DELTAT
    IF(D1.GE.0.AND.D1.LE.0.05) THEN
        RBARRA = 0.0
    ELSEIF(D1.GE.0.05.AND.D1.LE.1.3) THEN
        RBARRA = 0.85 + 0.24*LOG(D1)
    ELSEIF(D1.GE.1.3.AND.D1.LE.3.618) THEN
        RBARRA = 0.893 + 0.0832*LOG(D1)
    ELSE
        RBARRA = 1.
    ENDIF
C   {CALCULO DE p E q}
    P1=1.+2*RBARRA
    Q1=((NETA*(3.-2*RBARRA)-2*NETA**3/P1)/P1-NETA)/(2*P1)
    P=(4*RBARRA*(1.-RBARRA)+3*(1.-NETA**2))/(3*P1**2)
C   {CALCULO DE GAMABARRA}
    GAMA1=SQRT(Q1**2+P**3)
    GAMA2=RAIZCUB(-Q1+GAMA1)

```

```

      GAMA3=RAIZCUB(-Q1-GAMA1)
GAMA=GAMA2+GAMA3+NETA/PI
C  {CALCULO DOS COEFICIENTES}
Q=1.+3*GAMA**2
A=(1.-RBARRA)/Q
B=-3*GAMA*A
C=(RBARRA+3*GAMA**2)/Q
D=-B
C
      AREAIU1=0.0
C
      DO 15 I=1,NG
C
      CGT = A*CG(I)**3+B*CG(I)**2+C*CG(I)+D
      GG = 3*A*CG(I)**2+2*B*CG(I)+C
C  VALOR FIXADO PARA O EXEMPLO EM QUESTÃO PARA DELTAT1
C  QUE FORMA IUtarde
      deltat1=0.001
      TAU=TFIT-deltat1-((deltat-deltat1)/2)*(CGT+1)
      AREAIU1=areaiu1+(1/3.141592654*EXP(-(2*Pe*XK*(TAU)
#2*Pe*(TAU)*XM+R**2+Pe**2*(TAU)**2)/(TAU)/4)/(TAU)/4)*
#((deltat-deltat1)/2)*ome(i)*GG
15      CONTINUE
      RETURN
      END
C
C  FORMAÇÃO DAS MATRIZES [G] E [H]
C
C  *****
C  SUBROUTINE MATGH ( NDMX,NEMX,NG,NGMX,DeltaT,It,K,Ne,Pi,
#      Ae,Cg,Length,Ome,Tf,Xg,Xk,Xm,Yg,Yk,Ym,G,H, Inc )
C  *****

```

C

C ROTINA PARA CÁLCULO DOS ELEMENTOS DAS MATRIZES H E G
IMPLICIT LOGICAL (A-Z)

REAL*8 R1X,R1Y,R2X,R2Y

REAL*8 CX,CY,MODR2,MODR1,S1,S2,NETA,RMIN

REAL*8 D1,RBARRA,P1,Q1,P,Q,A,B,C,D,CGT,GG

REAL*8 GAMA,GAMA1,GAMA2,GAMA3,RAIZCUB

INTEGER NDMX, NEMX, NG, NGMX

INTEGER I,I1,It,J,Km,Ne, No1, No2

REAL*8 Dn,DeltaT,G1,H1,IU,IQ, K,Pi, Ra,Tal

LOGICAL Singular

REAL*8 Ae(2) ! Argumento de entrada em Expl e EIS

REAL*8 Cg(NG),Ome(NG) ! Valor e peso dos pontos de Gauss

REAL*8 Length(NEMX) ! Comprimento do elemento

REAL*8 Ta(2) ! Tempo de injeção

REAL*8 Tf(NDMX) ! Tempo de contagem da resposta

REAL*8 Xg(NGMX),Yg(NGMX) ! Coord. dos nos geometricos

REAL*8 Xk(NG), Yk(NG) ! Coord. dos pontos de Gauss no elem.

REAL*8 Xm(NEMX),Ym(NEMX) ! Coord. do ponto medio do elem.

REAL*8 G(NEMX,NEMX,NDMX),H(NEMX,NEMX,NDMX)

REAL*8 AREAIU,AREAIQ

REAL*8 Pe ! Número de Peclet

COMMON Pe

INTEGER Inc(NEMX,2)

REAL*8 IUCEDO,IUTARDE,DELTAT1,EXPI,AREAIU1

C

C Início do cálculo das matrizes

C

DO 200 I= 1,Ne

DO 100 J= 1,Ne

Singular= (I.EQ.J).AND.(It.EQ.1)

```

C
C  INTEGRACAO PELA QUADRATURA DE GAUSS
C

  No1= Inc(J,1)
  No2= Inc(J,2)
  G1 = 0.0 D0
  H1 = 0.0 D0

C
C  {TRANSFORMACAO DE TELLES}
C  {CALCULO DA DISTANCIA MINIMA E DE NETABARRA}
  R1X=XG(NO1)-XM(I)
  R1Y=YG(NO1)-YM(I)
  R2X=XG(NO2)-XM(I)
  R2Y=YG(NO2)-YM(I)
  CX=(XG(NO2)-XG(NO1))/LENGTH(J)
  CY=(YG(NO2)-YG(NO1))/LENGTH(J)
  MODR1=SQRT(R1X**2+R1Y**2)
  MODR2=SQRT(R2X**2+R2Y**2)
  S1=R1X*CX+R1Y*CY
  S2=R2X*CX+R2Y*CY
  IF(S1.LT.0.AND.S2.LE.0) THEN
    NETA=1.
    RMIN= MODR2
  ELSEIF(S1.GE.0.AND.S2.GT.0) THEN
    NETA = -1.
    RMIN = MODR1
  ELSEIF(S1.LT.0.AND.S2.GT.0) THEN
    NETA=1.-2*S2/LENGTH(J)
    RMIN=ABS(CY*R1X-CX*R1Y)
  ENDIF
C  {CALCULO DE RBARRA}
  D1=2.*RMIN/LENGTH(J)

```

```

IF(D1.GE.0.AND.D1.LE.0.05) THEN
  RBARRA = 0.0
ELSEIF(D1.GE.0.05.AND.D1.LE.1.3) THEN
  RBARRA = 0.85 + 0.24*LOG(D1)
ELSEIF(D1.GE.1.3.AND.D1.LE.3.618) THEN
  RBARRA = 0.893 + 0.0832*LOG(D1)
ELSE
  RBARRA = 1.
ENDIF

```

```
C {CALCULO DE p E q}
```

```
P1=1.+2*RBARRA
```

```
Q1=((NETA*(3.-2*RBARRA)-2*NETA**3/P1)/P1-NETA)/(2*P1)
```

```
P=(4*RBARRA*(1.-RBARRA)+3*(1.-NETA**2))/(3*P1**2)
```

```
C {CALCULO DE GAMABARRA}
```

```
GAMA1=SQRT(Q1**2+P**3)
```

```
GAMA2=RAIZCUB(-Q1+GAMA1)
```

```
GAMA3=RAIZCUB(-Q1-GAMA1)
```

```
GAMA=GAMA2+GAMA3+NETA/P1
```

```
C {CALCULO DOS COEFICIENTES}
```

```
Q=1.+3*GAMA**2
```

```
A=(1.-RBARRA)/Q
```

```
B=-3*GAMA*A
```

```
C=(RBARRA+3*GAMA**2)/Q
```

```
D=-B
```

```
C
```

```
DO 50 I1=1,NG
```

```
C
```

```
CGT = A*CG(I1)**3+B*CG(I1)**2+C*CG(I1)+D
```

```
GG = 3*A*CG(I1)**2+2*B*CG(I1)+C
```

```
Xk(I1)= Xg(No1)*(1-CGT)/2.0D0 +
```

```
+ Xg(No2)*(1+CGT)/2.0D0
```

```
Yk(I1)= Yg(No1)*(1-CGT)/2.0D0 +
```

```
+ Yg(No2)*(1+CGT)/2.0D0
```

```

Ra= SQRT((Xk(I1)-Xm(I))**2+(Yk(I1)-Ym(I))**2)
Dn= ((Xm(I)-Xk(I1))*(Yg(No2)-Yg(No1)) -
#      (Ym(I)-Yk(I1))*(Xg(No2)-Xg(No1)))/LENGTH(J)
C
C      Calcula as integrais de u* e q* no tempo
C
DELTAT1=0.001
      Ta(1)= 0.0 D0
Ta(2)= DeltaT1
      DO 25 Km = 1,2
      Tal= Tf(It) - Ta(Km)
C
C      Caso Tal < 0.0 , ainda não houve efeito no ponto em análise
C
      IF ((K*Tal).LT.(0.000001)) THEN
        Ae(Km)= 200
      ELSE
        Ae(Km)= Ra**2/(4.0D0*K*Tal)
      END IF
25      CONTINUE
C
C      Calcula as integrais da solução e do fluxo fundamental
C
      IF (Singular) THEN
        IUcedo=((exp((-Pe/2)*(XK(I1)-XM(I)))/(4*Pi))*((EXPI(AE(1))
#-EXPI(AE(2)))*(1+(((RA*Pe)**2)/16)- (((RA*Pe)**4)/1024)))+
#((exp((-Pe/2)*(XK(I1)-XM(I)))/(4*Pi))*((EXP((-RA**2)/(4*TAL)))*
#((-TAL*(PE**2)/4)+((2*(RA**2)-(8*TAL))*TAL*
#(Pe**4)/512)-((32*(TAL**3))-4*(TAL**2)*(RA**2))))))
      CALL
SOLNUM1(AREAIU1,XM(i),XK(i1),YM(i),YK(i1),TF(IT),DELTAT,NG)
      IUtarde=AREAIU1

```

```

        IU= IUcedo+IUtarde
        IQ= 0.0D0
    ELSE
CALL SOLNUM(AREAIU,XM(i),XK(i1),YM(i),YK(i1),TF(IT),DELTAT,NG)
            IU=AREAIU

CALL DERNUM(AREAIQ,XM(i),XK(i1),YM(i),YK(i1),TF(IT),DELTAT,NG)
            IQ= Dn*AREAIQ
    END IF

G1= G1 + IU *Ome(I1)*LENGTH(J)*GG/2.0D0
H1= H1 + IQ *Ome(I1)*LENGTH(J)*GG/2.0D0
50  CONTINUE

    IF (Singular) THEN
        H1=0.5D0
    END IF
    G(i,j,it)= G1
    H(i,j,it)= H1
C
    WRITE(11,*)G(i,j,it),H(i,j,it),RA

100  CONTINUE
200 CONTINUE
    RETURN
    END

```

C SUBROTINA QUE CALCULA O POTENCIAL E FLUXO NOS PONTOS
C INTERNOS

C *****
SUBROUTINE PTINT(NDMX,NEMX,NG,NGMX,NPIMX,DeltaT,
#K,Ne,Ninter,Npi,Ae,Cg,Length,Ome,Tf,Xg,Xi,Xk,
#Yg,Yi,Yk,Dfi,Fi,Gpi,Hpi,Inc,Upi)

C *****

C
C ROTINA PARA CALCULO DO POTENCIAL DOS PONTOS INTERNOS

C
IMPLICIT LOGICAL (A-Z)
REAL*8 R1X,R1Y,R2X,R2Y
REAL*8 CX,CY,MODR2,MODR1,S1,S2,NETA,RMIN
REAL*8 D1,RBARRA,P1,Q1,P,Q,A,B,C,D,CGT,GG
REAL*8 GAMA,GAMA1,GAMA2,GAMA3,RAIZCUB

C
INTEGER NDMX, NEMX, NG, NGMX, NPIMX
INTEGER I1,It,It1,J,Km,Kn,L
INTEGER Ne,Ninter,No1,No2,Npi
REAL*8 Dn,DeltaT,G1,H1,IU,IQ
REAL*8 K, Ra,Tal

C
REAL*8 Ae(2) ! Argumento de entrada em ExpI e E1S
REAL*8 Cg(NG),Ome(NG) ! Valor e peso dos pontos de Gauss
REAL*8 Length(NEMX) ! Comprimento do elemento
REAL*8 Ta(2) ! Tempo de injeção
REAL*8 Tf(NDMX) ! Tempo de contagem da resposta
REAL*8 Xg(NGMX),Yg(NGMX) ! Coord. dos nos geométricos
REAL*8 Xi(NPIMX),Yi(NPIMX) ! Coord. dos pontos internos

REAL*8 AREAIU,AREAIQ

REAL*8 Pe

COMMON Pe

! Número de Péclet

REAL*8 Dfi(NEMX,NDMX),Fi(NEMX,NDMX)

REAL*8 Gpi(NEMX,NDMX), Hpi(NEMX,NDMX)

INTEGER Inc(NEMX,2)

REAL*8 Upi(NPIMX,NDMX)

! Potencial dos pontos internos

C

C Início do cálculo do potencial dos pontos internos

C

DO 400 Kn=1,Npi

DO 300 It=1,Ninter

 Upi(Kn,It)= 0.0D0

 DO 200 J= 1,Ne

C

C INTEGRAÇÃO PELA QUADRATURA DE GAUSS

C

 No1= Inc(J,1)

 No2= Inc(J,2)

 G1 = 0.0 D0

 H1 = 0.0 D0

C {TRANSFORMACAO DE TELLES}

C {CALCULO DA DISTANCIA MINIMA E DE NETABARRA}

 R1X=XG(NO1)-XI(KN)

 R1Y=YG(NO1)-YI(KN)

 R2X=XG(NO2)-XI(KN)

 R2Y=YG(NO2)-YI(KN)

```

CX=(XG(NO2)-XG(NO1))/LENGTH(J)
CY=(YG(NO2)-YG(NO1))/LENGTH(J)
MODR1=SQRT(R1X**2+R1Y**2)
MODR2=SQRT(R2X**2+R2Y**2)
S1=R1X*CX+R1Y*CY
S2=R2X*CX+R2Y*CY
IF(S1.LT.0.AND.S2.LE.0) THEN
  NETA=1.
  RMIN= MODR2
ELSEIF(S1.GE.0.AND.S2.GT.0) THEN
  NETA = -1.
  RMIN = MODR1
ELSEIF(S1.LT.0.AND.S2.GT.0) THEN
  NETA=1.-2*S2/LENGTH(J)
  RMIN=ABS(CY*R1X-CX*R1Y)
ENDIF
C  {CALCULO DE RBARRA}
D1=2.*RMIN/LENGTH(J)
IF(D1.GE.0.AND.D1.LE.0.05) THEN
  RBARRA = 0.0
ELSEIF(D1.GE.0.05.AND.D1.LE.1.3) THEN
  RBARRA = 0.85 + 0.24*LOG(D1)
ELSEIF(D1.GE.1.3.AND.D1.LE.3.618) THEN
  RBARRA = 0.893 + 0.0832*LOG(D1)
ELSE
  RBARRA = 1.
  ENDIF
C  {CALCULO DE p E q}
P1=1.+2*RBARRA
Q1=((NETA*(3.-2*RBARRA)-2*NETA**3/P1)/P1-NETA)/(2*P1)
P=(4*RBARRA*(1.-RBARRA)+3*(1.-NETA**2))/(3*P1**2)
C  {CALCULO DE GAMABARRA}
GAMA1=SQRT(Q1**2+P**3)

```

$$GAMA2=RAIZCUB(-Q1+GAMA1)$$

$$GAMA3=RAIZCUB(-Q1-GAMA1)$$

$$GAMA=GAMA2+GAMA3+NETA/P1$$

C {CALCULO DOS COEFICIENTES}

$$Q=1.+3*GAMA**2$$

$$A=(1.-RBARRA)/Q$$

$$B=-3*GAMA*A$$

$$C=(RBARRA+3*GAMA**2)/Q$$

$$D=-B$$

C

DO 50 I1=1,NG

C

$$CGT = A*CG(I1)**3+B*CG(I1)**2+C*CG(I1)+D$$

$$GG = 3*A*CG(I1)**2+2*B*CG(I1)+C$$

C

$$Xk(I1)= Xg(No1)*(1-CGT)/2.0D0 +$$

$$+ Xg(No2)*(1+CGT)/2.0D0$$

$$Yk(I1)= Yg(No1)*(1-CGT)/2.0D0 +$$

$$+ Yg(No2)*(1+CGT)/2.0D0$$

$$Ra= SQRT((Xk(I1)-Xi(Kn))**2+(Yk(I1)-Yi(Kn))**2)$$

$$Dn= ((Xi(Kn)-Xk(I1))*(Yg(No2)-Yg(No1)) -$$

$$- (Yi(Kn)-Yk(I1))*(Xg(No2)-Xg(No1)))/Length(J)$$

C

C Calcula as integrais de u* e q* no tempo

C

$$Ta(1)= 0.0 D0$$

$$Ta(2)= DeltaT$$

DO 25 Km = 1,2

$$Tal= Tf(It) - Ta(Km)$$

C

C Caso Tal < 0.0 , ainda não houve efeito no ponto em análise

C

IF ((K*Tal).LT.(0.000001)) THEN

```

    Ae(Km)= 200
ELSE
    Ae(Km)= Ra**2/(4*K*Tal)
END IF
25  CONTINUE
C
C    Calcula as integrais da solução e do fluxo fundamental
C

CALL SOLNUM(AREAIU,Xi(kn),XK(i1),Yi(kn),YK(i1),TF(IT),DELTAT,NG)
           IU=AREAIU
CALL DERNUM(AREAIQ,Xi(kn),XK(i1),Yi(kn),YK(i1),TF(IT),DELTAT,NG)
           IQ=DN*AREAIQ
C
    G1= G1 + IU *Ome(I1)*GG*Length(J)/2.0D0
    H1= H1 + IQ *Ome(I1)*GG*Length(J)/2.0D0
50  CONTINUE
C
    Gpi(j,it)= G1
    Hpi(j,it)= H1
    It1= It + 1
    DO 100 L= 1,It
        Upi(Kn,It)= Upi(Kn,It) - Hpi(J,L)*Fi(J,It1-L)
#           + Gpi(J,L)*Dfi(J,It1-L)
100  CONTINUE
200  CONTINUE
300  CONTINUE
400 CONTINUE
    RETURN
    END
C

```

C SUBROTINA SLNPD. ESTA SUBROTINA É UMA ROTINA PADRÃO
 C PARA RESOLVER MATRIZES NÃO POSITIVAS DEFINIDAS USANDO
 C ELIMINAÇÃO DE GAUSS . SE A MATRIZ TIVER UM ZERO NA
 C DIAGONAL A ROTINA TROCARÁ AS LINHAS , E SOMENTE
 C RESOLVERA QUE O SISTEMA DA MATRIZ É SINGULAR QUANDO
 C NENHUMA TROCA DE LINHA PRODUZA UM COEFICIENTE
 C DIFERENTE DE ZERO.
 C O RESULTADO SERÁ UM VETOR COM OS POTENCIAIS E
 C DERIVADAS DO CONTORNO E SERÁ SOBRE ESCRITO EM DFI.

SUBROUTINE SLNPD (MX,NN,A,B)

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

INTEGER K

C
 C A = MATRIZ DO SISTEMA
 C B = ORIGINALMENTE CONTEM OS COEFICIENTES
 C INDEPENDENTES DEPOIS DA SOLUCAO CONTERA OS VALORES
 C DESCONHECIDOS DO SISTEMA.
 C NN = NUMERO REAL DE DESCONHECIDOS
 C MX = DIMENSAO DAS COLUNAS E LINHAS DE A

DIMENSION A(MX,MX),B(MX)

N1 = NN - 1

DO 100 K = 1,N1

K1 = K+1

C = A(K,K)

IF(ABS(C) - 0.000001)1,1,3

1 DO 7 J = K1,NN

C
 C MUDANÇAS DE LINHAS ATE ACHAR UM COEFICIENTE NA
 C DIAGONAL DIFERENTE DE ZERO

C

```

C
IF(ABS(A(J,K))-0.000001)7,7,5
5 DO 6 L = K,NN
    C = A(K,L)
    A(K,L) = A(J,L)
6    A(J,L) = C
    C = B(K)
    B(K) = B(J)
    B(J) = C
    C = A(K,K)

    GO TO 3
7 CONTINUE
GO TO 8
C
C DIVISÃO DA LINHA PELO COEFICIENTE DA DIAGONAL
C
3 C = A(K,K)
DO 4 J = K1,NN
4 A(K,J) = A(K,J)/C
  B(K) = B(K)/C
C
C ELIMINAÇÃO DA INCÓGNITA DA LINHA I
C
DO 10 I = K1,NN
    C = A(I,K)
    DO 9 J = K1,NN
9      A(I,J) = A(I,J) - C*A(K,J)
10     B(I) = B(I) - C*B(K)
100 CONTINUE
C
C CÁLCULO DA ÚLTIMA INCÓGNITA
C

```

```

      IF(ABS(A(NN,NN))- 0.000001)8,8,101
101 B(NN) = B(NN)/A(NN,NN)
C
C  CÁLCULO DAS DEMAIS INCÓGNITAS PELO PROCESSO DE
C  RETROSUBSTITUIÇÃO
C
      DO 200 L = 1,N1
          K = NN - L
          K1 = K + 1
          DO 200 J = K1,NN
200  B(K) = B(K) - A(K,J)*B(J)
          GO TO 300
      8  WRITE (*,*) ('SINGULARIDADE NA COLUNA'),K
          WRITE (5,*) ('SINGULARIDADE NA COLUNA'),K
300  RETURN
      END

C
C  *****
SUBROUTINE RESULT(NDMX,NEMX,NPIMX,Ipr,Ne,
#    Ninter,Npi,Xi,Xm,Yi,Ym,Dfi,Fi,Upi )
C  *****
C  ROTINA PARA CRIAÇÃO DE UM ARQUIVO DE RESULTADOS
INTEGER NDMX,NEMX,NPIMX
INTEGER I,Ipr,It,Ne,Ninter,Npi
C
REAL*8 Xi(NPIMX),Yi(NPIMX)
REAL*8 Xm(NEMX),Ym(NEMX)
REAL*8 Dfi(NEMX,NDMX),Fi(NEMX,NDMX)
REAL*8 Upi(NPIMX,NDMX)
DO 300 It= 1,Ninter
      WRITE(Ipr,*)'Tempo: ',It
      WRITE(Ipr,*) ' Elem.   Xm       Ym       U       P'

```

```

DO 100 I= 1,Ne
    WRITE(Ipr,50) I,Xm(I),Ym(I),Fi(I,It),Dfi(I,It)
50    FORMAT(1x,I4,3(2x,F10.3),2x,F11.4)
100   CONTINUE
    IF (Npi.GT.0) THEN
        WRITE(Ipr,*) 'PInter.  Xi      Yi      U'
        DO 200 Kn= 1,Npi
            WRITE(Ipr,150)Kn,Xi(Kn),Yi(Kn),Upi(Kn,It)
150    FORMAT(1x,I4,3(2x,F10.3))
200    CONTINUE
        END IF
300 CONTINUE
    RETURN
    END

```

C

C ESTA SUBROTINA É UTILIZADA NA TRANSFORMAÇÃO CÚBICA DE

C TELLES

```

REAL*8 FUNCTION RAIZCUB(X)

```

```

IMPLICIT LOGICAL (A-Z)

```

```

REAL*8 X,Y

```

```

    IF (X.GT.0) THEN

```

```

        Y=LOG(X)/3

```

```

        RAIZCUB=EXP(Y)

```

```

        ELSEIF (X.LT.0) THEN

```

```

            Y=LOG(-X)/3

```

```

            RAIZCUB=-EXP(Y)

```

```

            ELSE

```

```

                RAIZCUB=0.

```

```

        ENDIF

```

```

    RETURN

```

```

    END

```