UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS DEPARTAMENTO DE HIDRÁULICA E SANEAMENTO PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA HIDRÁULICA

ALESSANDRO FIRMIANO DE JESUS

Um Estimador de Erro *a posteriori* para a Equação do Transporte de Contaminantes em Regime de Pequena Advecção

> São Carlos 2010

ALESSANDRO FIRMIANO DE JESUS

Um Estimador de Erro *a posteriori* para a Equação do Transporte de Contaminantes em Regime de Pequena Advecção

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia Hidráulica e Saneamento

Orientador: Prof. Assoc. Edson Cezar Wendland

São Carlos 2010

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

 Jesus, Alessandro Firmiano de Um estimulador de erro a posteriori para equação do transporte de contaminantes em regime de pequena advecção / Alessandro Firmiano de Jesus ; orientador Edson Cezar Wendland. -- São Carlos, 2010.
 Tese (Doutorado-Programa de Pós-Graduação e Área de Concentração em Engenharia Hidráulica e Saneamento) --Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2010.
 Águas subterrâneas. 2. Estimador residual.
 Equação parabólica. 4. Regime de transporte advectivo.
 Meio poroso saturado. 6. Código JAVA. 7. Métodos dos elementos finitos. 8. Indicador temporal. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato(a): Bacharel em Matemática ALESSANDRO FIRMIANO DE JESUS.

Tese defendida e julgada em 19/03/2010 perante a Comissão Julgadora:

Winstants.

20 vado

Prof. Associado EDSON CEZAR WENDLAND – (Orientador) (Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovado

Prof. Dr. JACKSON ROEHRIG (College University Applied Sciences/CUAS)

Prof. Dr. NORBERTO MANGIAVACCHI (Universidade do Estado do Rio de Janeiro/UERJ)

APROVADO

Dania

Aprovadio

Prof. Titular **SERGIO PERSIVAL BARONCINI PROENÇA** (Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

nol 10

Prof^a. Dr^a. **REGINA CÉLIA CERQUEIRA DE ALMEIDA** (Lab. Macional de Computacional Científica).

Prof. Associado **MARCELO ZAIAT** Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Hidráulica e Saneamento

Prof. Titular **GERALDO ROBERTO MARTINS DA COSTA** Presidente da Comissão da Pós-Graduação da EESC

Errata: O Prof. Dr. Jackson Roehrig pertence à instituição Cologne University of Applied Sciences - CUAS

Às minhas filhas Tamiris, Letícia e Bianca, pelos créditos que fortalecem minha inspiração.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por prover oportunidades que estimulam o conhecimento justo e correto das coisas.

Aos meus pais, Marciano e Izilda, que cultivam na minha personalidade as respectivas características de humildade e perseverança.

À minha esposa Patrícia, por compreender o meu conveniente estado de ausência e ainda alicerçar um lar harmonioso.

Ao Prof. Dr-Ing Edson Wendland, por conduzir a orientação deste trabalho com tenacidade para arrumar os meus desalinhos, com coerência para conceber a minha autonomia e com encorajamento para superação dos meus desânimos.

Ao Prof. Dr-Ing Jackson Roehrig, co-orientador no *ITT FH-Köln*, por desvendar os mistérios acerca de linguagem de programação e por apoiar o meu estágio na Alemanha durante o doutorado sanduíche.

Às funcionárias Rose, Sá e Pavi, do Departamento de Hidráulica e Saneamento – EESC/USP, pela cordialidade e atenção no tratamento de questões relevantes e cotidianas do PPG-SHS.

À Rosemeire Zambom, bibliotecária do ICMC/USP, pela amizade e pelos vários artigos científicos que me enviou para referenciar este trabalho.

Aos companheiros do LHC, Luis Henrique, Francisco Marcuzzo, Anderson, Mariano Alencar, Ivan Marin, pelas diversas contribuições pessoais durante uma convivência agradável e peculiar.

Aos Profs. Drs. do Depto. de Matemática da UFSCAR, os meus amigos Luís Antônio, Marcus Vinícios e Waldeck Schutzer por esclarecerem conceitos essenciais.

Aos docentes da AFA, dos quais as constantes trocas de experiências foram favoráveis à pesquisa. Ao Prof. Dr. Laércio que partilhou dos problemas às descobertas.

Aos demais familiares e amigos que opinavam, torciam, incentivavam, elogiavam e amparavam, somente pelo reconhecimento na importância que eu dava para a elaboração deste trabalho.

À Capes pelo apoio financeiro do projeto Probral processo Capes/DAAD BEX1017/07-1 para realizar o estágio de doutorado na Alemanha.

À Academia da Força Aérea – AFA/Pirassununga.

A todos, os meus sinceros agradecimentos.

Não há nada que conduza à verdade. Temos que navegar por mares sem roteiros para encontrá-la. Afirmo que a verdade é uma terra sem caminho.

Jiddu Krishnamurti

RESUMO

JESUS, A. F., (2010). **Um Estimador de Erro** *a posteriori* para a Equação do Transporte de Contaminantes em Regime de Pequena Advecção. 2010. 150 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2010.

Vários modelos computacionais que implementam o transporte de soluto em meio poroso saturado surgem constantemente em publicações científicas devido à suma importância dada à compreensão e previsão do transporte de constituintes dissolvidos em água subterrânea. As soluções numéricas obtidas por esquemas computacionais não estão imunes aos erros de discretização. No entanto, a confiabilidade nos resultados obtidos das complexas operações provenientes da dinâmica de fluidos computacional pode ser aumentada através de estimadores de erro a posteriori que indicam a precisão da solução numérica de um modelo matemático que simula o fenômeno físico de interesse. Neste trabalho é apresentado um estimador residual para a equação parabólica que descreve os fenômenos de advecçãodispersão-reação (ADR) em meio poroso saturado, considerando o transporte em regime de pequena advecção. A solução numérica da equação ADR é obtida pelo método dos elementos finitos que emprega termos upwind para minimizar as inconvenientes oscilações espúrias. A implementação do código computacional para obter essa solução numérica e o seu correspondente erro a posteriori, é feita em linguagem JAVA na plataforma Eclipse seguindo o paradigma da Programação Orientada a Objetos (Poo). A solução numérica da equação elíptica do fluxo subterrâneo e o seu estimador de erro com características de recuperação do gradiente, o estimador ZZ, também são implementados no código JAVA. Assim, a solução da equação do transporte é obtida em função da reusabilidade POO prevista na implementação da equação do fluxo. A comparação da solução numérica do modelo ADR 2D com a correspondente solução analítica disponível na literatura, demonstra que o estimador residual apresenta excelentes índices de eficiência. Os resultados numéricos obtidos mostraram que o estimador residual encontra-se limitado inferior e superiormente pelo erro real da solução em malha grosseira. O estimador ZZ mostrou-se inadequado para a análise do erro de aproximação das equações ADR. Os exemplos selecionados para verificação e aplicação do estimador residual abrangem, em diferentes escalas, modelos que descrevem reação de primeira ordem e modelos com fenômenos de sorção e retardamento na migração do contaminante em meio poroso saturado. Em conseqüência, o estimador residual proposto provou ser computável, eficiente e robusto no sentido de abranger uma grande variedade das aplicações dos fenômenos de transporte de contaminantes em meio poroso saturado e regime de pequena advecção.

Palavras Chave: Águas Subterrâneas, Estimador Residual, Equação Parabólica, Transporte Advectivo, Meio Poroso, Código JAVA, Método dos Elementos Finitos, Indicador Temporal.

ABSTRACT

JESUS, A. F., (2010). *A posteriori* Error Estimate for the Contaminant Transport Equation in Small Advection Regime. 2010. 150 f. Doctoral Thesis. Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2010.

Several computational models that implement the solute migration in saturated porous media constantly appear in scientific publications due to the great importance given to the understanding and forecast of the solute transport in groundwater. The numerical solutions obtained by computational schemes are not immune to errors related to the discretization process. However, the reliability of the results obtained by the complex operations of the computational fluids dynamics can be enhanced by a posteriori error estimates that indicate the accuracy of the numerical solution. In this work a residual error estimator is presented for the parabolic equation that describes the advection-dispersion-reaction phenomena (ADR) in saturated porous media, considering the transport in small advection regime. The numerical solution of the ADR equation is obtained by the finite element method using *upwind* terms to minimize the spurious oscillations. The computational code and the correspondent a posteriori error estimates are implemented in Java language following the Object Oriented Programming (OOP) paradigm in Eclipse platform. The numerical solution of the elliptic groundwater flow equation and the respective error estimates with gradient recovery characteristic, the ZZ-estimator, are also implemented in the JAVA code. The solution of the transport equation is obtained as a consequence of the OOP reusability intended in the implementation of the flow equation. The numerical solution of the ADR 2D simulation compared to the analytical solution available in the literature, demonstrate the excellent effectivity index presented by the residual error estimator. The obtained results indicate that the residual error estimator is lower and upper bounded by a solution in coarse mesh. The ZZestimator showed to be inadequate for the error analysis of the ADR equations. The examples selected for validation and application of the residual estimator include, in distinct scales, models that describe reaction of first order and models with sorption and retardation phenomena in the pollutant migration in saturated porous media. Therefore, the proposed residual error estimator proved to be computable, efficient and robust in the sense of solving a great variety of applications of transport phenomena in saturated porous media at small advection regime.

Keywords: Groundwater, Residual Error Estimator, Parabolic Equation, Advective Transport, Porous Media, JAVA Code, Finite Element Method, Temporal Error Indicator.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 -	- Determinação da velocidade real utilizando analogia de laboratório	.13
FIGURA 3.2 -	- Distinção entre os mecanismos de transporte em função do no. de Peclet e a distinção entre os regimes de transporte em função da constante C_c	.22
FIGURA 4.1 -	- Geometria da discretização do domínio global Ω utilizando elementos finitos quadriláteros	28
Figura 4.2 -	 (a) Elemento físico nas coordenadas cartesianas (x,y) (b) Elemento de referência quadrilátero em coordenadas locais (c) Elemento de referência triangular degenerado 	.30
FIGURA 4.3 -	- Relação entre consistência, estabilidade e convergência Adaptado de [OTTO, 2007 pg. 69]	.37
Figura 4.4 -	- (a) valores de $\hat{\sigma}^{(e)}$ calculados para cada elemento do <i>patch</i> (b) gradiente suavizado pela média $\overline{\sigma}$.37
Figura 4.5 -	- Valor da projeção independente da orientação do vetor normal	49
Figura 4.6 -	- Discretização do domínio global visando a minimização da banda das matrizes globais	54
Figura 4.7 -	- Atributos e métodos compartilhados entre o modelo computacional e a classe FE2DModel do pacote Fe2d	55
FIGURA 4.8 -	- Linhas de comando da implementação JAVA da solução analítica de Theis contidas em package org.arena.water.gwfem2d.flow2d.tests;	.58
Figura 4.9 -	- Interface entre a classe pública FE2DModelTransientZZ e as demais definições para o cálculo da solução numérica estabelecida no inicio do código pelo método run()	.58
FIGURA 4.10	 Rotina JAVA para determinar, em cada elemento da malha, o gradiente hidráulico descrito na equação (4.16) 	.59
FIGURA 4.11	 Rotina JAVA para calcular o erro numérico ZZ da equação do fluxo em cada elemento da malha 	.59
FIGURA 4.12	 Implementação da função erro complementar e o correspondente gráfico gerado pelo MAPLE 12 	.63
FIGURA 4.13	 Implementação JAVA de uma solução analítica 2D para o transporte de contaminantes em água subterrânea 	63
FIGURA 4.14	 Distribuição da concentração de contaminantes obtidas pela solução analítica e pela solução numérica 	65

FIGURA 4.15	– Interface entre a classe pública FE2DModelTransientRESIDUAL e as demais definições para o cálculo da solução numérica estabelecida no inicio do código pelo método run(). Os dois métodos são mantidos para futuros testes de eficiência do estimador de erro residual da equação do transporte
FIGURA 4.16	- Classe que retorna o menor autovalor da matriz de dispersão66
FIGURA 4.17	 Obtenção da contribuição espacial para o erro residual da equação parabólica do transporte de contaminantes
FIGURA 4.18	 Exemplo de malha inicial para a equação do fluxo subterrâneo com stepRef = 3
FIGURA 4.19	 Exemplo de malha inicial para a equação do transporte com <i>stepRef</i> = 2 e <i>delay</i> = 30%
FIGURA 4.20	 Performance do computador através dos anos Adaptado de [OTTO, 2007 pg. 19]
Figura 5.1 -	- Geometria do problema teste para o esquema <i>S</i> ³ adaptado de [WENDLAND, 2004]
FIGURA 5.2 -	- Comparação entre os esquemas de solução numérica da equação do transporte de contaminantes em regime de advecção dominante. Os gráficos (a), (b) e (c) foram adaptados de [WENDLAND e SCHMID, 2000] e o gráfico (d) foi obtido com a importação dos dados para o software <i>Maple</i> 1274
Figura 5.3 –	Malha inicial do domínio $\Omega = 1000mX800m$ indicando os $150m$ da frente de contaminação, os nós 337 e 532, onde serão obtidas as curvas BTC, o elemento 416 e o <i>patch</i> 661 para análise de erro
Figura 5.4 –	Comparação entre as curvas de passagem de soluto da solução Java e a correspondente solução analítica 2D de WEXLER (1992) para o transporte do ⁹⁰ Sr em malha grosseira DH significa difusão horizontal e DT significa difusão transversal
FIGURA 5.5 –	Eficiência do estimador de erro residual em função do passo de tempo. O estimador residual é assintoticamente estável e a sua taxa de convergência é da ordem de uma função potência com confiança de 98,04%. A eficiência do estimador ZZ é quase nula para todos os passo de tempo
FIGURA 5.6 –	Evolução do erro residual estimado no <i>patch</i> do nó adjacente 337 e no patch do nó central 532 da malha grosseira
FIGURA 5.7 –	Evolução do indicador temporal e a correspondente taxa de convergência exponencial
FIGURA 5.8 -	Comparação entre a solução analítica (a) e a solução numérica (b) do transporte do 90 Sr em aquífero confinado no instante <i>t</i> = 800 <i>d</i> 82

Figura 5.9 –	Ocorrência de erro máximo atual no nó 661 e captura desse erro, devido à simetria da solução, pelo estimador residual no elemento 41682
FIGURA 5.10 -	 Condição de ortogonalidade de Galerkin observada nos resíduos da solução numérica FEM
FIGURA 5.11 -	 Comparação entre a solução numérica ajustada e a solução analítica de WEXLER (1992) no nó 337 e no nó 532
FIGURA 5.12 -	 Obtenção dos limites inferiores 1,7 e e superiores 4,0 e do estimador de erro residual em malha grosseira
FIGURA 5.13 -	– Comparação entre as curvas de passagem de soluto da solução JAVA e a correspondente solução analítica 2D de WEXLER (1992) para o transporte do ⁹⁰ Sr em malha com atraso de 30% DH significa difusão horizontal e DT significa difusão transversal
FIGURA 5.14 -	 Eficiência do estimador de erro residual em função do passo de tempo. O estimador residual é assintoticamente estável e a sua taxa de convergência é da ordem de uma função potência com confiança de 93,4%. A eficiência do estimador ZZ é quase nula para todos os passo de tempo
FIGURA 5.15 -	 Análise do erro residual no <i>patch</i> do nó 536 e no <i>patch</i> do nó 344 da malha deformada
FIGURA 5.16 -	 Evolução do indicador de erro temporal e a sua taxa de convergência exponencial com 95,08% de confiança na malha com deformada
FIGURA 5.17 -	- Comparação entre a solução analítica (a) e a solução numérica (b) do transporte do ⁹⁰ Sr em aquífero confinado no instante $t = 700d$ em malha deformada
FIGURA 5.18 -	 Obtenção dos limites inferiores 1,0 e e superiores 2,0 e do estimador de erro residual em malha deformada91
FIGURA 5.19 -	- Mapa de elementos marcados pelo estimador residual para o refinamento na malha original para $t = 130d$
FIGURA 5.20 -	– Mapa dos elementos marcados pelo estimador residual para o refinamento na malha deformada, para $t = 130d$
FIGURA 5.21 -	– Análise do erro residual no <i>patch</i> de elementos da malha com atraso de 30% e refinamento adaptativo com $\tau = 0,595$
FIGURA 5.22 -	 Comparação da solução numérica sem refinamento adaptativo (a) com a solução numérica com refinamento adaptativo (b) do transporte do ⁹⁰Sr após 2000 dias de simulação
FIGURA 5.23 -	 Comparação do erro residual do <i>patch</i> 532 na malha original na malha deformada sem refinamento e com refinamento97

FIGURA 5.24 -	 Comparação do erro residual global na malha original e na malha deformada sem refinamento e com refinamento97
FIGURA 5.25 -	 Obtenção dos inferiores 0,55 e e superiores 0,90 e do estimador de erro residual em malha deformada combinada com estratégia de refinamento
FIGURA 5.26 -	– Frente de contaminante obtida com os parâmetros físicos adaptados de SOREK (1988), no instante $t = 5.000$ s em regime de pequena advecção101
FIGURA 5.27 -	 Relação linear entre o erro residual e o número de Peclet da malha inicial para a equação de advecção-dispersão102
FIGURA 5.28 -	 Solução numérica JAVA da equação de advecção-dispersão em malhas com diferentes valores de Peclet indicando regime de advecção dominante no passo de tempo igual a 50.000s103
FIGURA 5.29 -	 Solução numérica da equação de advecção-dispersão-reação (ADR) com parâmetros físicos adaptados de PARKHURST (2004) no instante t = 400d105
FIGURA 5.30 -	– Distribuição dos erros reais na aplicação do esquema de Crank-Nicolson106
FIGURA 5.31 -	– Distribuição dos erros reais na aplicação do esquema de Galerkin107
FIGURA 5.32 -	– Distribuição dos erros reais na aplicação do esquema de Euler Implícito107
FIGURA 5.33 -	– Solução numérica da equação de advecção-dispersão-sorção com parâmetros físicos adaptados de KUMAR e DODAGOUDAR (2008) no instante $t = 60d108$
FIGURA 5.34 -	- Transporte de atrazina em coluna saturada de solo arenoso com parâmetros físicos adaptados de HUANG <i>et al.</i> (2008) e $t = 20 min110$
FIGURA 5.35 -	– Relação entre o erro residual global da solução numérica e o correspondente acréscimo de massa no sistema computacional. Os parâmetros físicos da simulação foram adaptados do transporte de atrazina em solo saturado de adaptados de HUANG <i>et al.</i> (2008)
Figura A.1 –	- Relação entre o logaritmo natural na concentração de soluto (A.6) e o tempo

LISTA DE TABELAS

TABELA 4.1 -	 Pontos de Gauss e os respectivos pesos sobre um triângulo Adaptado de [RATHOD et al., 2004]
TABELA 4.2 -	 Parâmetros básicos da implementação do modelo de fluxo de água subterrânea
TABELA 4.3 -	 Parâmetros básicos da implementação do modelo de transporte de contaminantes
TABELA 5.1 -	 Variáveis do transporte de ⁹⁰Sr em aqüífero confinado, adaptadas de [WEXLER, 1992]76
TABELA 5.2 -	- Eficiência do estimador de erro residual na malha original e na malha deformada80
TABELA 5.3 -	- Convergência do estimador de erro temporal na malha original e na malha deformada89
TABELA 5.4 -	- Comparação dos elementos indicados para refinamento pelo estimador residual na malha original e na malha deformada, para $t = 130d$ 92
TABELA 5.5 -	 Análise do erro residual do estimador <i>a posteriori</i> em três tipos de malha que descreve o domínio do transporte de contaminante em regime de pequena advecção96
TABELA 5.6 -	 Desempenho do estimador de erro residual aplicado em malhas iniciais com quantidades distintas de elementos em regime de pequena advecção101
TABELA 5.7 -	– Desempenho do estimador de erro residual aplicado em malhas iniciais com distintos valores do parâmetro θ de discretização temporal e $C_c = 6,32106$
TABELA 5.8 -	 Proporcionalidade existente entre a concentração inicial na fronteira de Dirichlet e o erro residual espacial obtido pelo estimador109
TABELA 5.9 -	 Análise do erro da solução numérica do transporte de atrazina em coluna de solo arenoso saturado com parâmetros físicos adaptados de [HUANG et al., 2008] e a respectiva quantidade de massa no sistema112

DEFINIÇÃO DOS SÍMBOLOS

CARACTERES LATINOS

Símbolo	Dimensão	Definição
b	[L]	Espessura do aqüífero confinado.
BTC[]		Curvas de passagem de soluto.
c_{Ω}		Constante da desigualdade de Poincaré.
$c_{\mathcal{T}}$		Parâmetro de forma da partição de \mathcal{T} .
С	$\left[\frac{M}{L^2}\right]$	Concentração do contaminante na posição (x,y) e instante t
C_0	$\left[\frac{M}{L^2}\right]$	Concentração inicial do contaminante.
C_c		Constante característica do regime de transporte.
C_D	$\left[\frac{M}{L^2}\right]$	Concentração do contaminante na fronteira Γ_D .
C _h	$\left[\frac{M}{L^2}\right]$	Concentração obtida por solução numérica.
C_x		Número de Courant.
D	$\left[\frac{L^2}{T}\right]$	Tensor de dispersão hidrodinâmica.
D_x	$\left[\frac{L^2}{T}\right]$	Dispersão na direção longitudinal.
D_y	$\left[\frac{L^2}{T}\right]$	Dispersão na direção transversal.
delay		Porcentagem de atraso na malha regular.
е	$\left[\frac{M}{L^2}\right]$	Erro de aproximação da solução analítica.
E_f		Índice de eficiência do estimador de erro.
E_{f_K}		Índice de eficiência restrito ao elemento <i>K</i> .
erfc(x)		Função erro complementar.
f	$\left[\frac{M}{L^3}\right]$	Termo de fonte ou sorvedouro.
$f_{\mathcal{I}}$	$\left[\frac{M}{L^3}\right]$	<i>θ</i> -interpolação da função <i>f</i> .
g	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Função escalar não negativa,
$g_{\mathcal{I}}$	$\left[\frac{L}{T}\right]$	<i>θ</i> -interpolação da função <i>g</i> .
G		Aproximação do gradiente numérico.
h	[L]	Carga hidráulica total.
\hat{h}	[L]	Solução aproximada da equação do fluxo.
$\hat{h}^{(e)}$	[L]	Solução aproximada no elemento <i>e</i> .
h_S	[L]	Diâmetro de $S \in \mathcal{T} \cup \mathcal{E}_{\mathcal{T}}$.
h_D	[L]	Valor da carga hidráulica na fronteira Γ_D .

H_D^1		Espaço de Sobolev de funções C tais que $C = C_D$ em Γ_D .
${\mathcal I}$		Partição do intervalo de tempo [0,T].
I_2		Matriz identidade de ordem 2.
J_E	[L]	Operador salto através do lado $E \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}$.
$\left(J^{T} ight)^{\!\!-1}$		Inversa da matriz jacobiana transposta.
k	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Condutividade hidráulica.
K		Elemento finito.
K_d	$\left[\frac{L^3}{M}\right]$	Coeficiente de partição entre soluto dissolvido e adsorvido à fase sólida.
$K_{xx}, K_{yy} \in K_{zz}$	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Componentes principais do tensor da condutividade hidráulica.
[K],	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Tensor de condutividades hidráulica.
L	[L]	Comprimento característico.
n		Vetor normal exterior a Ω .
\mathbf{n}_{E}		Vetor normal exterior ao lado E.
N_a		Funções interpolantes Lagrangeanas.
Pe		Número de Peclet.
q	$\left[\frac{L^3/T}{L^2}\right]$	Taxa de fluxo volumétrico por unidade de área.
Q()		Quantidade de interesse.
Q_i	$\left[\frac{L^3}{T}\right]$	Taxa de bombeamento ou de injeção do poço <i>i</i> .
R		Fator de retardo do contaminante.
R^2		Coeficiente de determinação.
R_K		Indicador de erro residual local.
S		Coeficiente de armazenamento
S_s	$\left[\frac{1}{L}\right]$	Coeficiente de armazenamento específico.
s(r,t)	[L]	Rebaixamento da superfície potenciométrica.
stepRef		Parâmetro de bipartição da malha retangular.
⁹⁰ Sr		Elemento químico estrôncio 90.
au		Partição espacial do domínio Ω .
$T_{rac{1}{2}}$	[T]	Tempo de meia vida do contaminante.
T_{f}	[T]	Instante final da simulação computacional.
$T_{xx} e T_{yy}$	$\left[\frac{L^2}{T}\right]$	Transmissividades nas direções x e y.

и		Solução analítica.
u_h		Solução numérica.
\mathbf{u}_{e}^{h}		Solução aproximada pelo método de elementos finitos.
V	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Campo de velocidades de classe $C^1(\Omega)$.
v_x, v_y	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Componentes da velocidade do fluxo subterrâneo.
V_D	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Velocidade aparente no meio poroso.
V_R	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Velocidade intersticial (ou real).
W	$\left[\frac{L}{T}\right]$	Termos de fonte ou sorvedouro de água dentro do aqüífero,
Wi		Pesos aplicados nos pontos de Gauss.
$\omega_{\!\scriptscriptstyle N,k}$		Pesos aplicados nas raízes do polinômio de Legendre.
$\ w\ $		Norma de energia do problema variacional.
X_{min} e Y_{min}	[L]	Valores mínimos em cada direção da malha retangular.
X_{max} e Y_{max}	[L]	Valores máximos em cada direção da malha retangular.
Ζ		Variável de integração na solução de WEXLER (1992).
ZZ		Estimador de erro do método de recuperação.

CARACTERES GREGOS

Símbolo	Dimensão	Definição
$lpha_L$	[L]	Dispersividade Longitudinal.
$lpha_{S}$		Constante de ponderação do estimador residual.
α_{T_H}	[L]	Dispersividade horizontal transversal
α_{T_V}	[L]	Dispersividade vertical transversal
$\Gamma_{\rm D}$		Fronteira de Dirichlet.
$\Gamma_{\rm N}$		Fronteira de Neumann.
δ	$\left[\frac{1}{L}\right]$	Função delta de Dirac.
Е		Menor autovalor da matriz de dispersão D .
$arepsilon_K$		Erro exato no elemento <i>K</i> .
$\mathcal{E}_{ au}$		Conjunto de lados dos elementos de \mathcal{T} .
${\mathcal E}_{{\mathcal T}_n, ullet}$		Conjunto de lados contidos em •.
η		Erro global da malha.
$\eta_{_{ef}}$		Porosidade efetiva.

η_K		Erro no nível do elemento <i>K</i> .
η_{inf}		Limite inferior do erro.
η_{sup}		Limite superior do erro.
$\eta^n_{\mathcal{T}_n}$		Indicador de erro espacial.
η^n_t		Indicador de erro temporal.
$\eta_{\mathcal{I}}$		Estimador residual computável.
$\hat{\eta}_{\mathcal{I}}$		Estimador residual preliminar.
η_{zz}		Estimador de erro global obtido pela técnica SPR.
$\theta \in \left[\frac{1}{2},1\right]$		Parâmetro de aproximação temporal.
λ	$\left[\frac{1}{T}\right]$	Constante de decaimento de 1ª ordem.
(ξ,η)		Sistema de coordenadas locais.
π_0		Projeção L^2 sobre espaço de elementos finitos na malha inicial.
$ ho_b$	$\left[\frac{M}{L^3}\right]$	Densidade volumétrica do meio poroso.
σ e $\sigma_{_h}$		Gradiente da solução exata e gradiente da solução aproximada.
$\hat{\sigma}^{\scriptscriptstyle(e)}$		Gradiente numérico restrito ao elemento e.
τ		Tolerância do erro numérico.
$ au_n$	[T]	Amplitude do <i>n</i> -ésimo intervalo de tempo.
ϕ^a_e		Funções de aproximação sobre o elemento e.
$\left\ \left \boldsymbol{\varphi} \right \right\ _{*}$		Norma dual do problema variacional.
$\Phi_{_i}$		Função de ponderação do resíduo.
Ω		Domínio computacional.
Ω^h_e		Subdomínio de Ω restrito ao elemento <i>e</i> .
$\Omega 6$		Fronteira do domínio Ω .

SUMÁRIO

1	INT	ROD	UÇÃO	1
	1.1	Erre	os de Aproximação e Quantidade de Interesse	2
	1.2	Car	acterísticas Globais e Locais do Estimador de Erro	3
	1.3	Cla	ssificação dos Estimadores de Erro	4
	1.4	Out	ros Erros Numéricos	5
	1.5	Cor	nsiderações do Capítulo 1	7
2	Ов	JETI	VOS	9
	2.1	Obj	etivo Principal	9
	2.1	.1	Objetivos Intermediários	9
3	O Es	STAD	OO DA ARTE1	1
	3.1	Equ	ações Governantes do Fluxo Subterrâneo1	1
	3.1	.1	Campo de Velocidades do Fluxo Subterrâneo1	3
	3.1	.2	Solução Analítica de Theis1	5
	3.2	As	Equações Governantes do Transporte de Contaminantes1	6
	3.2	.1	Condições Iniciais e Condições de Fronteira1	8
	3.3	Apr	oximação da Equação do Transporte1	9
	3.4	ОΤ	ransporte em Regime de Pequena Advecção2	2
	3.5	Erro	o <i>a posteriori</i> da Equação Parabólica2	5
	3.6	Cor	nsiderações do Capítulo 32	8
4	O M	léto	do de Elementos Finitos e a Programação Java3	1
	4.1	Cor	nceitos Básicos do Método de Elementos Finitos	1
	4.1	.1	Consistência, Estabilidade e Convergência do Método	5
	4.2	Apr	oximação da Equação do Fluxo e o Estimador de Erro3	7
	4.2	.1	Gradiente Numérico da Equação do Fluxo4	0

4.2	.2	Estimador de Erro baseado na Recuperação do Gradiente	41
4.3	For	mulação Variacional da Equação do Transporte de Contaminantes	44
4.4	Ele	mentos Finitos Espaço-Temporal para a Equação Parabólica	46
4.5	Um	Estimador de Erro Residual para Equação do Transporte	48
4.5	.1	Estimando o erro no Regime de Pequena Advecção	50
4.6	Imp	plementação em Linguagem Java	52
4.6	.1	Implementação da Equação do Fluxo de Água Subterrânea	56
4.6	.2	Implementação do Estimador para a Equação do Fluxo	58
4.6	.3	Implementação da Equação do Transporte de Contaminantes	60
4.6	.4	Implementação de uma solução analítica para o problema do transporte	61
4.6	.5	Resultado Numérico versus Solução Analítica	64
4.6	.6	Implementação do Estimador de Erro Residual	65
4.7	Ger	ação de Malhas	67
4.8	4.8 Considerações do capítulo 470		

5	Res	SULT	TADOS E DISCUSSÃO	.73
	5.1	Ver	ificação do Estimador Residual	.75
	5.1.	1	Solução Numérica Ajustada no patch	.83
	5.1.	2	Limites Inferiores e Superiores do Estimador Residual	.84
	5.2	A iı	nfluência da malha no erro residual da solução numérica	.85
	5.3	Um	a estratégia de refinamento adaptativo	.91
	5.3.	1	Comparação do erro residual para diferentes estratégias	.96
	5.4	Apl	icação do Estimador de Erro Residual em Regime de Pequena Advecção	.99
	5.4.	1	Solução Numérica da Equação de Advecção-Dispersão	.99
	5.4.	2	Solução Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação	104
	5.4.	3	Solução Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Sorção	108
	5.4.	4	Transporte 1D de Atrazina em coluna de solo Saturado1	110

6	Co	ONCLUSÃO		
	6.1	Sugestões para Trabalhos Futuros		

ANEXO I - O Transporte de Contaminantes em Água Subterrânea			
Os Principais Mecanismos de Transporte122			
O Transporte Advectivo			
O Transporte Difusivo			
O Transporte por Dispersão Mecânica124			
O Transporte por Dispersão Hidrodinâmica125			
Reações Químicas de Primeira Ordem126			
Outros Processos Bio-Físico-Químicos do Transporte de Contaminantes127			

ANEXO II - Symmetrical Streamline Stabilization-	S ³ 129
--	--------------------

ANEXO III - Solução da Equação de Fluxo Subterrâneo a partir	
de Estimador de Erro <i>a posteriori</i>	

7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	14	5
---	----------------------------	----	---

1 INTRODUÇÃO

Resultados computacionais, mesmo quando obtidos de um apropriado modelo matemático que caracteriza um fenômeno físico de interesse, não estão inumes aos erros numéricos inseridos pelos processos de discretização. Equações diferenciais parciais ou equações integrais quando são manipuladas por dispositivos digitais perdem informações, uma vez que as aproximações numéricas diferem do modelo contínuo. Estes erros de aproximação, quando ultrapassam certa magnitude, invalidam a predição numérica do modelo matemático.

Embora ocorram com freqüência, os erros de aproximação são difíceis de identificar e de avaliar com medidas intuitivas ou heurísticas. Nos últimos 20 anos, teorias matemáticas e procedimentos computacionais foram desenvolvidos para estimar o erro de aproximação em soluções numéricas dos problemas de valores iniciais e de fronteiras em diversas áreas da Engenharia. Neste cenário surgem técnicas e demonstrações matemáticas para fundamentar os chamados estimadores de erro *a posteriori*.

As análises destes estimadores, baseadas em informações obtidas no pós-processamento das soluções numéricas, fornecem limites superiores e inferiores do erro de aproximação em uma norma apropriada. Assim, se o erro estimado pode ser controlado, é possível melhorar a qualidade da solução numérica ou pela modificação da malha que representa o domínio, ou pelo aumento da ordem da função de aproximação, ou otimização do passo de tempo ou por outro processo do algoritmo numérico capaz de reduzir o erro. Desta maneira, os estimadores de erro *a posteriori* são essenciais para conduzir os *métodos computacionais adaptativos*.

Na presente tese, é apresentado um estimador de erro *a posteriori*, com características adequadas para análise específica da solução numérica da equação de advecção-dispersão-reação (ADR) em regime de pequena advecção para o transporte de contaminantes.

Uma vez que modelos computacionais que implementam o transporte de soluto em meio poroso saturado surgem constantemente na comunidade científica, devido à suma importância dada à compreensão e previsão do transporte de constituintes dissolvidos em água subterrânea, é fundamental assegurar a qualidade da solução numérica das equações ADR. A finalidade das seções seguintes é caracterizar o erro numérico abordado neste trabalho, suas estimativas globais e locais, e apresentar os dois principais métodos da literatura que são base para implementação de um código computacional do estimador de erro *a posteriori*.

1.1 ERROS DE APROXIMAÇÃO E QUANTIDADE DE INTERESSE

Em uma situação computacional geral, o erro de aproximação é uma função da posição x e do tempo t, e é definido por:

$$e = u - u_h$$

sendo u a solução exata do modelo matemático do fenômeno de interesse e u_h a aproximação numérica de u obtida por algum método numérico.

Diversas aplicações da Engenharia, além de requerer uma magnitude desejável da parcela ||e||, representando a norma do erro da aproximação numérica, avaliam também o erro em uma quantidade de interesse Q que depende da solução u, isto é, avaliam a diferença:

$$\varepsilon = Q(u) - Q(u_h).$$

Essa estratégia, conhecida por estimativa *goal-oriented*, são direcionadas para o aprimoramento da aproximação das quantidades de interesse e têm recebido grande importância nestas últimas décadas [DEVLOO *et al.*, 2009]. O seu objetivo principal é obter limites inferiores (η_{inf}) e limites superiores (η_{sup}) , tais que:

$$\eta_{inf} \le Q(u) - Q(u_h) \le \eta_{sup}$$

Se Q(u) é um funcional linear, então

$$Q(u) - Q(u_h) = Q(e)$$
 ou $Q(u) = Q(u_h) + Q(e)$.

Uma vez que a solução u é, em geral, desconhecida ou dispendiosa para ser computada, uma boa aproximação para Q(e) é responsável pela boa aproximação para Q(u). E ainda, os limites $\eta_{inf} \in \eta_{sup}$ são obtidos através da solução numérica u_h . Outra característica do estimador é o processo de verificação dos resultados produzidos por modelos matemáticos, assegurado por uma tolerância $\tau > 0$ do erro numérico, fornecida pelo analista. Ou seja, um modelo será considerado adequadamente resolvido quando

$$|Q(u) - Q(u_h)| \le \tau.$$

Desta forma, se o erro ε é estimado por limites computáveis η_{inf} e η_{sup} , gerados pelo pós-processamento de u_h , a aproximação da quantidade de interesse é dada por

$$Q(u) \approx Q(u_h) + \eta,$$

sendo $\eta = \frac{1}{2}\eta_{inf} + \frac{1}{2}\eta_{sup} \approx \varepsilon.$

1.2 CARACTERÍSTICAS GLOBAIS E LOCAIS DO ESTIMADOR DE ERRO

Segundo ODEN (2002), maior requisito de um estimador η para aproximar ou limitar o erro real ||e||, é a existência de constantes positivas C_1 e C_2 tais que $C_1||e|| \le \eta \le C_2||e||$. Se o erro ||e|| é pequeno, então o estimador η é um valor pequeno, pois C_2 é considerado um valor não muito grande e, inversamente, se a estimativa η é um valor pequeno, então o erro real ||e||também será pequeno, pois C_1 é considerado como sendo um valor não muito pequeno.

Define-se ainda uma quantidade $E_f = \frac{\eta}{\|e\|}$ como sendo o índice de eficiência para medir a qualidade do estimador η [BABUSKA *et al*, 1994]. Quando $E_f \approx 1$, o estimador η encontra-se próximo do erro real $\|e\|$. Mesmo sendo rara a determinação da norma $\|e\|$ para a maioria dos modelos matemáticos, existem problemas padrão¹ onde o erro *e* ou a solução *u* são conhecidos ou são computados sob uma desejável precisão. Assim, a confiabilidade e a robustez de diversos estimadores podem ser numericamente asseguradas.

As desigualdades $C_1 ||e|| \le \eta \le C_2 ||e||$ representam uma estimativa do erro no sentido global e indicam o intervalo que contém o erro total sobre um domínio computacional. Em geral, para uma malha contendo N elementos, indicadores de erro η_K no nível de cada elemento K, são computados usando as restrições da solução aproximada u_h para cada elemento.

¹ Do inglês *benchmark problems* – Modelos matemáticos para verificação ou calibração de esquemas numéricos.

Assim, o estimador é dado por:

$$\eta = \left\{\sum_{K=1}^N \eta_K^2\right\}^{\frac{1}{2}}$$

Em cada elemento *K*, o respectivo índice de eficiência será dado por $E_{f_K} = \frac{\eta_K}{\|e\|_K}$, sendo $\|e\|_K$ a norma do erro restrito ao elemento *K* e η_K a contribuição do elemento *K* para o erro global estimado η [BABUSKA *et al*, 1994].

É importante ressaltar que os indicadores η_K não representam o erro local no elemento K, pois o erro $||e||_K$ é "*poluído*" por erros de outros elementos adjacentes a K. Neste sentido, o refinamento local da malha é útil na redução e controle, a um determinado limite, das fontes de poluições de erros do elemento. Ou seja, as quantidades η_K são eficientemente usadas como base dos processos adaptativos de malha para controlar e reduzir o erro global ||e||.

1.3 CLASSIFICAÇÃO DOS ESTIMADORES DE ERRO

Os vários métodos para computar o indicador² η_K são basicamente divididos em duas classes [ALMEIDA *et al.*, 2000]:

(1) Métodos Residuais e

(2) Métodos de Recuperação.

Considere um determinado problema físico modelado por Au = f, acrescido das condições iniciais e de contorno, sendo A um operador linear e f os valores de entrada. Na relação $u = u_h + e$ seguida da definição do resíduo $R = f - Au_h$ é visto que o erro e satisfaz Ae = R. O resíduo R é uma medida que descreve o quanto a solução aproximada u_h resolve o problema original. O estimador de erro baseado neste método residual determina uma solução aproximada para Ae = R [VERFÜRTH, 2008].

Os estimadores residuais são classificados ainda como estimadores explícitos ou implícitos.

² Estimadores de erro, em geral, referem-se a quantidades usadas nos critérios de parada de uma estratégia adaptativa, e o indicador de erro é a contribuição do elemento na estimativa sobre uma quantidade de interesse.

Os estimadores explícitos envolvem uma computação direta do resíduo no interior e fronteira do elemento para encontra uma estimativa para o erro real ||e|| [BABUŠKA E RHEINBOLT, 1978]. Esse método explícito produz estimadores η_K através de cálculos de funções ou substituições, sem envolver solução de um sistema linear de equações.

O método implícito envolve a solução local de um problema de valor de contorno e necessita de maior esforço computacional, no entanto, ainda disponibilizam estimativas precisas para o erro real ||e|| [AINSWORTH e ODEN, 2000].

Para estimar o erro da solução numérica do transporte de contaminantes em regime de pequena advecção, utiliza-se o método explícito. Caso contrário, se o regime é de o grande advecção, faz-se necessário o uso do método implícito para a estimativa *a posteriori* da solução numérica do transporte de contaminantes, conforme descrito na subseção 4.5.1, na página 47 deste trabalho.

Uma terceira classe de estimadores de erro é dada pelo método de recuperação do gradiente [ZIENKIEWICZ, 2004]. Nesta categoria, a solução aproximada u_h é pós-processada para obter uma solução melhorada u_h^* a qual é, presumidamente, mais precisa do que u_h . A expressão $e^* = u_h^* - u_h$ é uma aproximação computável do erro $e \approx e^*$. Em alguns casos, u_h^* é obtido por extrapolação e o método de recuperação mais popular é o conhecido Método Superconvergente de Recuperação do *Patch* [ZIENKIEWICZ E ZHU, 1996b]. Nesta técnica, um ajuste polinomial de alta ordem é realizado sobre os valores nodais de u_h (ou de ∇u_h) sobre um conjunto de elementos adjacentes que compartilham um nó da malha (o chamado *patch*). Na seqüência, é empregada uma regressão, através do método dos mínimos quadrados, para determinar uma aproximação melhorada *G* da quantidade ∇u . Assim, a norma L^2 da diferença $G - \nabla u_h$ sobre o elemento *K* é usada como indicador de erro local η_K , isto é,

$$\varepsilon_K \approx \eta_K = \sqrt{\int_K |G(u_h) - \nabla u_h|^2} dx.$$

Este indicador ZZ possui atrativas propriedades que são: facilidade de implementação e independência dos operadores que caracterizam o problema que está sendo resolvido, podendo ser aplicado tanto para problemas lineares quanto não lineares. No entanto, AINSWORTH e ODEN (2000, pg. 82) apontaram deficiências neste indicador, quando o erro numérico arbitrariamente grande de um problema específico foi estimado, pela técnica ZZ, como sendo nulo.

Segundo GRÄTSCH e BATHE (2005), outra característica importante de se observar na implementação do estimador de erro, para os problemas práticos da Engenharia, é que o seu custo computacional seja inferior ao custo de se obter a mesma aproximação numérica em uma segunda malha mais fina.

Maiores detalhes para outros procedimentos de obtenção das estimativas do erro numérico das técnicas de aproximações aplicadas aos diversos problemas práticos podem ser encontrados em [VERFÜRTH, 1996], [ESTEP *et al.*, 2000], [AINSWORTH E ODEN, 2000], [BABUŠKA E STROUBOULIS, 2001] ou [PRUDHOMME E ODEN, 2002].

1.4 OUTROS ERROS NUMÉRICOS

Os esforços concentrados neste trabalho são para estimar os erros de aproximação provenientes do processo de discretização, através do método de elementos finitos, da dimensão espacial da malha e da respectiva dimensão temporal.

Porém, outros erros numéricos são previstos em todo o procedimento computacional necessário para a resolução do modelo matemático. O surgimento destes erros pode ser resultado de diversas fontes, tais como: erros de modelagem, erros geométricos, erros de truncamento, erros de algoritmos, *etc.*, conforme descritos em [BRENNER E SCOTT, 2002].

Os erros de modelagem podem ser introduzidos quando uma abstração matemática representa uma determinada característica do evento físico. Às vezes, é necessário estabelecer algumas simplificações para amenizar a complexidade dos modelos matemáticos mais sofisticados. E esta tentativa de tornar o modelo mais praticável, seguramente, resulta em erros de modelagem.

Erros geométricos ocorrem quando a fronteira curva é aproximada por funções polinomiais por partes. Estas representações de funções contínuas por aproximações discretas são, para o analista, uma forma aceitável para a correspondente implementação digital, porém, "dobras" na fronteira de domínios côncavos perturbam o comportamento da solução em sua vizinhança.

Os erros de truncamento ocorrem em aproximações obtidas pelas regras de integração (*p. ex.* os métodos de Gauss e os de Legendre) e os erros de algoritmo surgem dos esquemas numéricos diretos ou iterativos de resolução dos imensos sistemas de equações (*p. ex.* a
decomposição de Cholesky para equações lineares ou o método de Newton para equações não lineares.).

Estes tipos de erros são considerados desprezíveis quando comparados aos erros de aproximação e podem ser controlados na verificação do modelo.

De acordo com J. TINSLEY ODEN (2002), a verificação é o processo que assegura se um modelo físico ou se uma aplicação particular de um sistema da Engenharia é resolvida corretamente quando estes eventos estão representados por modelos matemáticos. Isto significa que, fundamentalmente, assegurar a acurácia da aproximação numérica é atingir a essência do processo de verificação.

No seguinte trecho, ODEN (2002) relaciona conceitos do Processo de Verificação do modelo aos Estimadores de Erro *a posteriori*.

...Implícito na idéia de verificação é que os modelos, de alguma maneira, são obtidos e cabe a nós determinar em que grau estas simulações resolvem o modelo em estudo. Isto é um estimador de erro a posteriori.

1.5 CONSIDERAÇÕES DO CAPÍTULO 1

Os estimadores de erro *a posteriori* desenvolvidos na década de 90 foram direcionados para controlar e avaliar o erro global na norma de energia. Recentemente, a teoria foi estendida para estimar o erro em uma quantidade de interesse.

Basicamente, a presente tese contribui com a apresentação de um estimador de erro *a posteriori* que seja apropriado para as equações parabólicas do transporte de contaminantes em meio poroso saturado.

Esse trabalho inicia-se com o desenvolvimento de técnicas computacionais da dinâmica dos fluidos para determinar o campo de velocidade através das equações do fluxo subterrâneo e que poderiam ser utilizados nas equações do transporte de contaminantes. Um estudo do erro de aproximação das respectivas soluções é apresentado, no entanto, como estes modelos matemáticos possuem equações de naturezas distintas, as análises do erro numérico seguiram por metodologias diferentes.

A característica elíptica da equação do fluxo induz a utilização do método de recuperação do gradiente para estimativa do erro *a posteriori* da sua solução numérica.

Porém, esse método baseado na parte difusiva do operador diferencial não se aplica na equação parabólica do transporte com advecção dominante. Logo, o método residual citado na seção 1.3 é mais apropriado para estimar o erro da solução numérica do transporte de contaminantes em águas subterrâneas.

Para conduzir essas discussões, suas respectivas implementações, as contribuições relevantes e os resultados apresentados neste trabalho, a tese encontra-se organizada da seguinte forma:

O capítulo 2 descreve, de forma sucinta, os objetivos da tese.

O capítulo 3 apresenta o estado da arte, descrevendo algumas abordagens da equação do fluxo subterrâneo, a intrínseca relação com o transporte de contaminantes em meio poroso, os esquemas de discretização espacial e temporal discutidos na literatura, e o tratamento dos erros numéricos provenientes desses esquemas.

O capítulo 4 descreve a metodologia empregada na implementação computacional do método de elementos finitos para obter a solução numérica da equação do fluxo e do transporte de contaminantes. Esse capítulo descreve ainda a adequação para estimar o erro numérico em cada tipo de equação, seja de caráter elíptico ou parabólico. O capítulo 4 finaliza com uma proposta de malha inicial que influenciará fortemente a análise do erro *a posteriori* da equação do transporte de contaminantes.

O capítulo 5, o capítulo dos resultados e discussão, apresenta inicialmente, a verificação da solução numérica implementada no código JAVA e posteriormente, a verificação do estimador de erro *a posteriori* para a equação do transporte de contaminante.

Após estes processos de verificação, o estimador de erro é aplicado em situações de transporte de contaminantes discutidos na literatura e que abrangem, além dos processos clássicos de advecção e dispersão, os processos de reação de primeira ordem e os de sorção com fator de retardo R > 1.

O capítulo 6 conclui o trabalho acerca da computabilidade e eficiência do estimador de erro *a posteriori*, apresentado no corpo da tese e aplicado na estimativa de erros provenientes da equação do transporte de contaminantes em meio poroso saturado. Na seção 6.1 são descritos os trabalhos futuros alinhados com os estudos desenvolvidos e relevantes para a continuidade na geração do conhecimento obtido.

2 OBJETIVOS

Nesta página são descritos o objetivo principal e os objetivos intermediários deste trabalho científico orientado pela seguinte hipótese: "O estimador de erro a posteriori para a equação do transporte de contaminantes em meio poroso saturado pertence à classe dos métodos residuais".

2.1 **OBJETIVO PRINCIPAL**

"Obter um estimador de erro *a posteriori* para a equação do transporte de contaminantes em meio poroso saturado que seja eficiente, robusto e computável".

Para que o Objetivo Principal da tese seja alcançado, são delineados os seguintes objetivos intermediários:

2.1.1 Objetivos Intermediários

- elaborar um código computacional que resolve a equação do transporte de contaminantes usando o Método dos Elementos Finitos;
- verificar que o transporte de contaminantes em água subterrânea é realizado no regime de pequena advecção;
- implementar no código computacional um estimador de erro com características residuais e um estimador de erro com características de recuperação;
- apresentar uma verificação do estimador residual com a implementação de solução analítica da equação do transporte disponível na literatura;
- comparar as técnicas residuais com as técnicas de recuperação empregadas na estimativa do erro entre a solução numérica e a solução analítica da equação do transporte de contaminantes em águas subterrâneas, e
- aplicar o estimador residual em diferentes processos do transporte de contaminantes.

10

Introdução

3 O ESTADO DA ARTE

A equação do transporte de contaminante é vinculada ao modelo matemático que representa o fluxo de água subterrânea. A representação precisa de qualquer contaminante necessita, além de um modelo calibrado, da determinação precisa da velocidade e direção do fluxo de água subterrânea. O presente capítulo apresenta as equações governantes necessárias para obter os valores da velocidade real do fluxo de água subterrânea, com suas respectivas direções, seguidas das equações governantes necessárias para estabelecerem o modelo matemático do transporte de contaminantes no meio poroso saturado.

3.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO FLUXO SUBTERRÂNEO

O modelo matemático para a distribuição de cargas que regem o fluxo de água subterrânea, obtido pela lei de Darcy e pelo princípio da conservação de massa em um volume elementar representativo (REV) de um aquífero é dado por [CLEARY, 2007]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right] + W(x, y, z, t) = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$
(3.1)

sendo h a carga hidráulica total [L],

 K_{xx} , K_{yy} e K_{zz} os componentes principais do tensor da condutividade hidráulica $\left[\frac{L}{T}\right]$,

 S_s o coeficiente de armazenamento específico $\left[\frac{1}{L}\right]$,

W os termos de fonte ou sorvedouro de água dentro do aquífero $\begin{bmatrix} 1 \\ I \end{bmatrix}$,

Para o caso tridimensional, W poderia ser representado por:

$$W = \sum_{i=1}^{N} Q_i \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i)$$
(3.2)

sendo $Q_i \left[\frac{I^3}{T} \right]$ a taxa de bombeamento ou de injeção do poço *i* em (x_i, y_i, z_i) e

 δ é a função delta de Dirac com unidades $\left[\frac{1}{t}\right]$.

Considerando desprezíveis as variações de carga ao longo da dimensão vertical (*hipótese de Dupuit*), e que a dimensão horizontal dos aquíferos em escalas regionais pode ser da ordem de dezenas de quilômetros, o fluxo pode ser modelado por uma equação bidimensional em x e y dada por [CLEARY, 2007]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right] + W(x, y, t) = S \frac{\partial h}{\partial t}$$
(3.3)

sendo $T_{xx} = b.K_{xx}$, e $T_{yy} = b.K_{yy} \left[\frac{L^2}{T}\right]$ as transmissividades nas direções x e y do aquífero confinado,

b, a espessura do aquífero [L] e

 $S = S_s.b$, o coeficiente de armazenamento [*adimensional*].

W representa os termos de drenança dos fluxos verticais remanescentes em z = 0 (camada confinante inferior) e em z = b (camada confinante superior) acrescidos da atividade de um poço *i* na posição (x_i, y_i).

Para que as informações obtidas da equação do fluxo sejam aplicadas na equação do transporte de contaminantes, em aquíferos confinados, algumas hipóteses devem ser consideradas:

- o contaminante em estudo não irá influenciar na velocidade do fluxo da água subterrânea, caracterizando o aquífero em estudo como um campo conservativo;
- a temperatura média no meio poroso não sofrerá alterações significantes durante o tempo observado;
- a matriz do solo saturado em estudo é rígida, ou seja, não sofre deformações ou relaxamento e
- os poros estão todos conectados para a ocorrência do transporte de contaminante.

A condição de fluxo horizontal será adotada para simplificar o estudo de fluxo subterrâneo, pois, para grandes extensões do aquífero, efeitos das áreas de recarga, de descarga e de poços parcialmente penetrantes podem ser desconsiderados [CLEARY, 2007].

3.1.1 Campo de Velocidades do Fluxo Subterrâneo

A previsão da distribuição de poluentes importa do modelo de água subterrânea a velocidade real determinada pela velocidade aparente, dada pela lei de Darcy, pela distribuição da condutividade hidráulica K_{xx} e K_{yy} , e pela distribuição da porosidade efetiva³ η_{ef} .

É oportuno, no entanto, citar um trecho do livro Águas Subterrâneas de ROBERT CLEARY (2007, pg. 38), no qual distingue o conceito de velocidade intersticial (ou real) V_R e de velocidade aparente V_D :

[...] Embora a "velocidade" de Darcy $V_D = Q/A$, onde Q é a taxa volumétrica de fluxo $[L^3/T]$ e A é a área total da secção transversal perpendicular à direção de fluxo $[L^2]$, possua unidade de velocidade [L/T], não é na verdade uma velocidade. Na realidade, é a taxa volumétrica do fluxo por unidade total de área. Como Darcy não estava diretamente interessado no fluxo da água subterrânea, ele usou a área total da secção transversal da sua coluna de areia. Obviamente, a área ocupada pelos grãos de areia não está disponível para o fluxo e sua "velocidade", baseada na área total, deve ser modificada quando se deseja a velocidade verdadeira através do meio poroso. A velocidade real, também conhecida como velocidade de poro, é dada pela seguinte expressão: $V_R = V_D/n_{ef}$.

A relação entre a velocidade real V_R e a velocidade aparente V_D é obtida se considerar um experimento realizado em uma coluna dividida em três partes iguais e de comprimento *L*, conforme ilustrado na figura 3.1.



FIG 3.1 - Determinação da velocidade real utilizando analogia de laboratório

A parte central desta coluna, o cilindro II, quando preenchida por material geológico, apresentará uma taxa volumétrica de fluxo Q em estado estacionário, no qual um fluido entra e sai da coluna sem que ocorram perdas ou ganhos.

Nos cilindros I e III, as velocidades V_1 e V_3 são as velocidades aparentes. A velocidade V_2 é a velocidade real no meio geológico II.

³ Quantidade de espaços no meio poroso que permitem a transmissão de fluidos. Exprime-se como a relação entre o volume total de interstícios conectados e o volume total do meio poroso, incluindo os espaços vazios.

Da relação $Q = A_1V_1 = A_2V_2 = A_3V_3$, segue que

$$V_R = V_2 = \frac{V_1}{\underline{A}_2} = \frac{V_1}{\underline{A}_1 L} = \frac{V_D}{\underbrace{V_{disp}}_{till}} = \frac{V_D}{\eta_{ef}}$$
(3.4)

sendo A_1 a área da secção transversal do cilindro I, A_2 a área porosa e V_{disp} o volume de poros disponíveis para o fluxo. Assim a velocidade real é sempre maior que a velocidade de Darcy.

De acordo com INGEBRITSEN *et al.* (2006), a *lei de Darcy* é uma lei empírica que descreve adequadamente o fluxo subterrâneo para ser acoplado ao transporte de soluto por advecção e dispersão mecânica. Na forma diferencial, a lei de Darcy é expressa por:

$$V_D = q = -k \left(\frac{dh}{dL}\right) \tag{3.5}$$

sendo q a taxa de fluxo volumétrico por unidade de área $\left\lfloor \frac{L^2/T}{L^2} \right\rfloor$, k a condutividade hidráulica

 $\left[\frac{L}{T}\right] e \frac{dh}{dL}$ o gradiente hidráulico [*adimensional*]. O sinal negativo de (3.5) indica que o fluxo está na direção decrescente da carga hidráulica *h*.

De posse de uma solução numérica $\hat{h}^{(e)}$ em um elemento finito (*e*), e assumindo que as coordenadas cartesianas alinham-se com os eixos principais do tensor de condutividades hidráulicas [**K**], a velocidade real V_R no elemento (*e*), indicado por $\vec{v}_R^{(e)}$, em analogia à expressão (3.5), é dada por:

$$\vec{v}_{R}^{(e)} = \begin{pmatrix} v_{x} \\ v_{y} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\eta_{ef}} \begin{pmatrix} K_{xx} & 0 \\ 0 & K_{yy} \end{pmatrix} \nabla \hat{h}^{(e)}$$
(3.6)

A estimativa do parâmetro *b* da espessura do aquífero confinado e as relações $T_{xx} = b.K_{xx}$, e $T_{yy} = b.K_{yy}$, resultam na seguinte expressão para o campo de velocidade real nos elementos finitos da malha:

$$\vec{v}_{R}^{(e)} = -\frac{1}{\eta_{ef}.b} [T] \nabla \hat{h}^{(e)}$$
(3.7)

sendo $[T] = \begin{pmatrix} T_{xx} & 0 \\ 0 & T_{yy} \end{pmatrix}$, o tensor de transmissividade da equação (3.3).

3.1.2 Solução Analítica de Theis

No processo de verificação da solução numérica será empregada, para as futuras comparações, a solução analítica de Theis⁴ da equação do fluxo subterrâneo [SUTRA, 2003].

Esta solução analítica para a equação transiente do fluxo radial $\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial h}{\partial r} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t}$

considera as seguintes hipóteses [THEIS, 1935]:

- o aquífero confinado é homogêneo e a sua extensão é infinita;
- o aquífero é compressível e a água instantaneamente liberada da fonte quando a carga hidráulica é rebaixada;
- a taxa de bombeamento é constante;
- não existe recarga.

A solução do fluxo horizontal da água subterrânea, resultante da equação e hipóteses acima determina o valor do rebaixamento da superfície potenciométrica s(r,t) [L] a uma distância r [L] do centro do poço de extração constante $Q\left[\frac{l^3}{T}\right]$ e num determinado instante t:

$$s(r,t) = h(\infty) - h(t) = \frac{Q}{4\pi T} W(u)$$
 (3.8)

sendo $W(u) = \int_{u}^{\infty} \left(\frac{e^{-x}}{x}\right) dx$ para a variável $u = \frac{Sr^2}{4Tt}$,

S o coeficiente de armazenamento [adimensional] e

T a transmissividade $\left|\frac{L^2}{T}\right|$.

Quando u < 1, a função W(u) é aproximada pela expressão:

$$W(u) = -0.57721566 - \ln u + 0.9999193u - 0.24991055u^{2} + 0.05519968u^{3} - 0.00976004u^{4} + 0.00107857u^{5}$$

Quando $1 \le u < \infty$, a aproximação é dada por:

⁴ Charles Vernon Theis viveu de 27/03/1900 a 31/07/1987 e deixou importantes contribuições na área da Hidrogeologia.

$$W(u) = \frac{\left[\frac{u^4 + a_1u^3 + a_2u^2 + a_3u + a_4}{u^4 + b_1u^3 + b_2u^2 + b_3u + b_4}\right]}{ue^u} \text{ com } \begin{array}{c} a_1 = 8,5733287401 \\ a_2 = 18,059016973 \\ a_3 = 8,6347608925 \\ a_3 = 8,6347608925 \\ a_4 = 0.2677737343 \\ b_5 = 21,0996530827 \\ a_4 = 0.2677737343 \\ b_5 = 3.9584969228 \end{array}$$

As informações provenientes da distribuição de cargas hidráulicas de um aquífero podem ser utilizadas nos termos advectivo e difusivo da equação do transporte, fornecendo ao modelo matemático uma abrangência realista nos movimentos hídricos na zona de saturação. É neste sentido que o campo de velocidades do escoamento de água subterrânea representa a estreita relação entre a equação fundamental do fluxo e o transporte de contaminantes.

3.2 AS EQUAÇÕES GOVERNANTES DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

O transporte de contaminantes, ou de soluto ou de outros constituintes químicos dissolvidos, que são importantes componentes de vários processos geológicos, ocorrem devido aos fenômenos descritos no ANEXO I: a advecção, a difusão molecular, a dispersão mecânica e outras características físico-químicas relevantes do fenômeno.

Nesse anexo é visto que a advecção refere-se ao movimento de solutos transportados pelo movimento da água subterrânea. A difusão molecular é o fluxo difusivo do soluto no sentido contrário ao gradiente de concentração. Esse processo ocorre em função do movimento browniano dos íons na solução. Os íons de uma região de concentração alta tendem a se misturar com íons de uma região de baixa concentração, estabelecendo uma mesma distribuição no espaço. A dispersão mecânica tem o mesmo efeito da difusão, com a mistura resultando do movimento físico da água (diferenças de velocidade). Portanto, onde a concentração difere, o soluto é predominantemente transportado por difusão molecular quando a velocidade é relativamente baixa e por dispersão mecânica quando a velocidade é considerada alta [DYMINSKI, 2006].

Considerando a conservação de massa, com os fluxos advectivo e dispersivo associados às transformações químicas de primeira ordem e um termo de fonte ou sorvedouro $f^* \begin{bmatrix} M \\ L^3T \end{bmatrix}$, a equação do transporte de contaminantes em um sistema de fluxo não-uniforme em aquíferos gerais é descrita da seguinte forma [BEAR, 2001]:

$$\partial_t (\theta C + \rho_b K_d C) - div (\mathbf{D}^* \nabla \theta C) + \mathbf{v}^* \cdot \nabla C + \lambda (\theta C + \rho_b K_d C) = f^*$$
(3.9)

sendo: *C* a concentração de soluto (massa de soluto por unidade de volume do fluido) $\left[\frac{M}{I_{i}^{3}}\right]$.

- θ o conteúdo de umidade do solo [*adimensional*]
- ∇C o gradiente de concentração $\left\lfloor \frac{M}{I^4} \right\rfloor$,
- $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_d$ o tensor da dispersão hidrodinâmica⁵ $\left\lfloor \frac{L^2}{T} \right\rfloor$,
- \mathbf{v}^* vetor de velocidade aparente $\left[\frac{L}{T}\right]$,
- λ o coeficiente de decaimento de 1^a ordem $\left\lfloor \frac{1}{T} \right\rfloor$,
- ρ_b a densidade volumétrica⁶ do meio poroso $\left[\frac{M}{I^3}\right]$ e

 K_d o coeficiente de partição entre soluto dissolvido e adsorvido à fase sólida $\left[\frac{L^3}{M}\right]$.

Para aquífero confinado, o meio poroso é sempre saturado e, neste caso, o conteúdo de umidade θ terá o mesmo valor da porosidade efetiva η_{ef} [adimensional].

Definindo o fator de retardo por $R = 1 + \frac{\rho_b K_d}{\eta_{ef}}$, a equação (3.9) é reescrita por

$$\partial_t C - div(\mathbf{D}\nabla C) + \mathbf{v} \cdot \nabla C + \lambda C = f \tag{3.10}$$

sendo $\mathbf{D} = \frac{\mathbf{D}^*}{R}$, $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{v}^*}{\eta_{ef}R}$, $f = \frac{f^*}{\eta_{ef}R}$. A equação (3.10) é a equação de advecção-dispersão-

reação (ADR) que descreve o transporte de solutos no aquífero ou meio poroso.

Quando o fator de retardo é igual a 1, o campo de velocidades v da equação (3.10) representa a velocidade real do fluxo subterrâneo, esta velocidade também é conhecida por velocidade *seepage*.

⁵ Embora os respectivos parâmetros da dispersão mecânica e da difusão molecular, \mathbf{D}_m e \mathbf{D}_d , sejam provenientes de diferentes processos físicos, eles podem ser adicionados uma vez que possuem o mesmo efeito físico.

⁶ O bulk density ρ_b também é conhecido por densidade do solo seco $\left[\frac{M}{T^3}\right]$.

A razão entre o transporte advectivo e o transporte dispersivo é caracterizada pelo número de Peclet⁷ $Pe = \frac{\|\mathbf{v}\|}{\|\mathbf{D}\|} L$, sendo *L* um comprimento característico definido sobre o domínio da equação (3.10) e $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana.

O número de Peclet é um parâmetro adimensional e define o tipo predominante do transporte de soluto. Se o número de Peclet é maior que 1, o mecanismo de transporte predominante é o advectivo, caso contrário, se o número de Peclet é menor que 1, o transporte predominante é o dispersivo [BEAR, 2001].

3.2.1 Condições Iniciais e Condições de Fronteira

Para modelar o problema físico é necessário definir um conjunto coerente de condições iniciais e condições de fronteiras inicialmente especificadas.

As condições iniciais definem as concentrações do contaminante no aquífero em um determinado instante inicial. As condições de fronteira definem as restrições impostas sobre o contorno da malha do modelo que representa a interface existente entre o domínio discretizado e o ambiente do problema físico.

Três tipos de condições de fronteira poderiam ser considerados para a equação do transporte de contaminantes: a condição de Dirichlet, a condição de Neumann e a condição de Robin (ou condição mista)⁸.

A condição de Dirichlet ocorre quando o valor da concentração do contaminante é imposto sobre a fronteira (ou sobre parte dela, denominada fronteira de Dirichlet Γ_D) ou quando é imposto em um ponto específico do domínio, caso a contaminação seja pontual. Em termos matemáticos, esta condição é dada por:

$$C(x, y, t) = C_D$$
 sobre Γ_D (tipo I)

⁸ Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805-1859) foi um matemático alemão creditado com a moderna definição "formal" de função. Carl Gottfried Neumann (1832-1925) foi um matemático alemão.

⁷ Jean Claude Eugène Péclet (1793-1857) foi um físico francês.

Victor Gustave Robin (1855-1897) foi um matemático francês que contribuiu na área da termodinâmica.

A condição de Neumann ocorre quando existe uma imposição no gradiente da concentração normal sobre a fronteira, ou parte dela, denominada fronteira de Neumann Γ_N . Esta condição equivale dizer que o fluxo de massa dispersivo encontra-se fixo através desta parcela da borda (ou contorno), isto é:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \nabla C = g \text{ sobre } \Gamma_{\mathrm{N}}$$
 (tipo II)

sendo **n** o vetor unitário exterior à fronteira Γ_N e *g* o fluxo do contaminante por unidade de comprimento de Γ_N . Se a fronteira é impermeável, então $g \equiv 0$.

A condição de Robin ocorre quando o valor do fluxo total de massa é imposto sobre a fronteira. Neste caso, se C_e e g_e são, respectivamente, a concentração e o fluxo de massa do contaminante, a expressão é:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}C + \mathbf{D}\nabla C) = \mathbf{v}C_e \cdot \mathbf{n} + g_e \text{ sobre } \Gamma_{\mathrm{R}}$$
(tipo III)

Em particular, se $\mathbf{v} = 0$ sobre a fronteira, a condição acima será a condição de Neumann.

Existem autores⁹ que ainda consideram um quarto tipo conhecido por condição de fronteiras abertas. Esta condição de fronteira considera que o contaminante sai por dispersão através de fronteiras permeáveis. O valor do fluxo de contaminante que sai é dado pela seguinte expressão:

$$\int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \nabla C) \mathrm{d} \Gamma \qquad (\text{tipo IV})$$

A vantagem na utilização deste tipo de condição de fronteira é que o domínio numérico pode ser inferior ao domínio que impõem a condições do tipo II [BONILLO *et al.*, 1999].

3.3 APROXIMAÇÃO DA EQUAÇÃO DO TRANSPORTE

A metodologia para a estimativa do erro *a posteriori* da solução numérica é influenciada pelo método que é adotado para a discretização por elementos finitos.

⁹ BONILLO J. *et al.*, 1999 A 2D Numerical Model for the Transport of Pollutants. The Influence of Boundary Conditions 3rd International Symposium on Ecohydraulics. CD Proceedings. Salt Lake City, Utah, USA.

A natureza parabólica da equação do transporte advectivo-dispersivo contribuiu, nos últimos anos, ao desenvolvimento de controle de erro *a posteriori* da aproximação destas equações transientes com caráter dissipativo. A literatura apresenta três principais métodos de aproximações no tempo que poderiam ser empregados na equação do transporte de contaminante (3.10).

- Método das Linhas (*MoL*): Um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), cuja ordem é a mesma que a do grau de liberdade do espaço de elemento finito, é obtido da discretização da malha espacial da equação parabólica. O esquema Crank-Nicolson [AKRIVIS *et al.*, 2006] é adotado para resolver o sistema de EDO's com coeficientes transientes. Esquemas MEF-FCT (*Flux-Corrected Transport*) para o fenômeno de fluxo dominado pelo transporte advectivo seguem baseados no *MOL*¹⁰.
- Método de Rothe: Antes da discretização da variável espacial, é realizada uma partição no intervalo de tempo. Assim, em cada passo de tempo tem-se uma equação diferencial parcial estacionária, a qual é aproximada por um esquema de elementos finitos¹¹. Alguns autores implementaram o método de Rothe e desenvolveram um código adaptativo *multilevel* para a resolução de equações parabólicas lineares e não-lineares¹².
- Elementos finitos espaço-temporal: Nesta aproximação, o espaço e o tempo são discretizados simultaneamente. Segundo VERFÜRTH (2008) este tipo de aproximação da equação parabólica é superior em relação às duas anteriores e será detalhada na metodologia da presente tese (seção 4.4, pg. 46), pois este método de aproximação apóia o desenvolvimento do estimador de erro *a posteriori* da solução numérica do modelo ADR.

A aplicabilidade de um modelo preciso para o transporte de contaminantes em água subterrânea incorpora, atualmente, a análise de resultados laboratoriais dos processos de degradação microbiótica [COUTO e MALTA, 2007]. Estes processos de biodegradação podem

¹⁰ KUZMIN D. 2008 Explicit and Implicit FEM-FCT Algorithms with Flux Linearization Preprint submetido ao Elsevier (disponível em <u>http://www.mathematik.uni-dortmund.de/~kuzmin/linfct.pdf</u> acesso em 15/12/2008)

 ¹¹ AXELSSON O., FRANK L. S., Van der SLUIS A. 1980 Analytical and Numerical Approaches to Asymptotic Problems in Analysis Mathematics Studies 47 North-Holland

¹² BECK R., ERDMANN B., ROITZSCH R. 1995. KASKADE 3.0 An Object-Oriented Adaptive Finite Element Code, *Technical Report TR 95-4*, Konrad-Zuse- Zentrum, Berlin.

ser simulados descrevendo os fenômenos de transporte reativo com taxa de reação de 1^a ordem, ou reação do tipo *Monod* dentro de um poro simples [HEβE *et al.*, 2009]. Neste modelo, a descrição matemática do destino e da concentração das espécies simples emprega as equações de advecção-dispersão na fase de fluido e reações cinéticas na interface fluido-sólido do interior do poro.

De acordo com HOSSAIN e MIAH (1999), o método dos elementos finitos (MEF) possui crescente popularidade entre os modelos de transporte de contaminante em água subterrânea. Estes modelos numéricos, baseado no princípio de minimização de Galerkin (GMEF) [BOCHEV, 2001], apresentaram resultados de precisão espacial de segunda ordem quando comparados aos dos métodos de diferenças finitas. No entanto, para simulação de transporte transiente GMEF é necessário a utilização de pequenos passos de tempo, e ainda, quando a advecção é o tipo de transporte predominante, a solução numérica apresenta oscilações espúrias, pois o operador advectivo é não-simétrico [DONEA E HUERTA, 2004], fato que contribui para a perda de estabilidade deste tradicional método de Galerkin [PAPASTAVROU e VERFÜRTH, 2000].

Para eliminar as oscilações numéricas, responsáveis por soluções não-físicas, são introduzidas as chamadas funções de bases com termos $upwind^{13}$ e outras variações para adicionar uma estabilização linear à formulação de Galerkin tradicional [SANTOS E ALMEIDA, 2007]. Os modelos referenciados por Petrov-Galerkin-MEF (PGMEF) oferecem resultados numéricos livre de oscilação, porém, com uma significativa dispersão artificial [GALEÃO *et al.*, 2004] [KALASHNIKOVA *et al.*, 2009].

Com o desenvolvimento de critérios refinados para o esquema de Crank-Nicolson, quando aplicado no GMEF (CNGMEF) para o transporte de advecção-dispersão, foi possível a obtenção de resultados de precisão temporal de alta ordem [HOSSEIN e MIAH, 1999]. Estes esquemas CNGMEF de discretização da equação do transporte disponibilizam simulações precisas e livres de oscilação mesmo em situação de advecção predominante do transporte de contaminante em água subterrânea, ou seja, estes esquemas são incondicionalmente estáveis. Segundo LOZINSKI *et al.* (2009), até o presente, são poucos os trabalhos que empregam o popular método de Crank-Nicolson nas equações parabólicas. Neste método de reconstrução, funções quadráticas e contínuas por partes no tempo podem ser obtidas explicitamente da solução numérica.

¹³ O *upwind* é uma correção para a descrição numérica incorreta do processo físico.

Métodos livres de malha também foram desenvolvidos para modelos bidimensionais do transporte de contaminantes através do meio poroso saturado. Um método, conhecido por *Método Radial de Interpolação de Ponto* (RPIM) aproxima a solução em construções inteiramente em termos do conjunto de nós do domínio e nenhuma caracterização da interrelação entre estes nós é necessária [KUMAR E DODAGOUDAR, 2008]. O modelo RPIM apresentou uma adequada aplicabilidade para a equação de advecção-dispersão com fenômenos de sorção ou de degradação de 1^a ordem. Outros resultados numéricos foram utilizados na verificação dessa metodologia de aproximação e ainda foram gerados sem oscilações, demonstrando-se insensíveis às restrições do número de Peclet. O modelo RPIM para o transporte 2D de contaminantes considera o campo de velocidade em regime uniforme.

3.4 O TRANSPORTE EM REGIME DE PEQUENA ADVECÇÃO

Foi visto na seção 3.2 que o número de Peclet define o mecanismo de transporte com predominância dispersiva ou advectiva. Nesta seção, será definida uma constante característica (C_c) para separar o mecanismo de transporte em regime de pequena advecção e regime de grande advecção. Se o número de Peclet for maior que 1, o mecanismo de transporte possui predominância advectiva, caso contrário, a predominância será dispersiva. Se o valor da constante característica for superior a 10, o regime de transporte será considerado de grande advecção, caso contrário, o regime é considerado de pequena advecção. A figura 3.2 apresenta as duas formas para distinguir, respectivamente, o mecanismo e o regime de transporte. Ela ainda mostra a possibilidade de ocorrência de exemplos de transporte de contaminantes de predominância advectiva e em regime de pequena advecção ($Pe > 1, 0 \in C_c < 10$).

	Pe = 1.0	$C_{c} = 10.0$
predominância	predominância	predominância
dispersiva	advectiva	advectiva
pequena	pequena	grande
advecção	advecção	advecção



Para definir essa constante característica C_c , considere $\varepsilon > 0$, o menor autovalor da matriz de dispersão D da equação 3.10 e $\lambda \ge 0$ o coeficiente de decaimento de primeira ordem do contaminante em estudo, de acordo com VERFÜRTH (2008):

- se $\sup_{0 \le t \le T} \|\mathbf{v}(\cdot, t)\|_{L^{2}(\Omega)} \le \varepsilon^{\frac{1}{2}} \max\{\varepsilon, \lambda\}^{\frac{1}{2}}$ o regime é considerado de *pequena advecção*;
- se $\sup_{0 \le t \le T} \|\mathbf{v}(\cdot, t)\|_{L^{2}(\Omega)} >> \varepsilon^{\frac{1}{2}} \max{\{\varepsilon, \lambda\}}^{\frac{1}{2}}$ o regime é considerado de *grande advecção*.

Logo, considerando $\varepsilon \ge \lambda$ e fluxo de água subterrânea em regime permanente, ou seja, campo de velocidades **v**(*x*,*y*) constante, a *pequena advecção* é caracterizada quando

$$|\mathbf{v}| \le C_c \varepsilon^{\frac{1}{2}} max\{\varepsilon, \lambda\}^{\frac{1}{2}} \le C_c \varepsilon$$
(3.11)

sendo $C_c \ge \frac{|\mathbf{v}|}{\varepsilon}$, uma constante característica de tamanho moderado.

Na sequência, são analisados os regimes de advecção de quatro cenários do transporte de contaminantes em meio poroso saturado cujas escalas são: regional [SOREK, 1988], de campo [PARKHURST, 2004] e [KUMAR e DODAGOUDAR, 2008] e de laboratório [HUANG *et al.*, 2008]. Esses exemplos possuem a respectiva solução numérica cuja verificação e feita ou por soluções analíticas ou por métodos numéricos reconhecidos na literatura.

Exemplo 1.) Em SOREK (1988) um método adaptativo 2D Euler-Lagrangiano foi utilizado para o transporte de massa com distribuição espacial da velocidade. A equação de advecçãodispersão (EAD) para um constituinte efluente em um fluido incompressível considera: fator de retardo R > 1, tensor de dispersão hidrodinâmica simétrico e semi-positivo e decaimento radioativo de 1^a ordem.

Esse exemplo numérico para comparação com solução analítica e verificação do método proposto considerou os seguintes parâmetros físicos: $D_x = D_y = 2 m^2/s$ para as dispersões nas direções dos eixos coordenados e $v_x = 0,25 m/s$ e $v_y = 0 m/s$ como sendo os componentes da velocidade do fluxo subterrâneo [VAROGLU e FINN, 1982 *apud* SOREK, 1988]¹⁴. A malha adotada caracterizou o transporte em regime de advecção dominante, pois o número de Peclet na direção x, foi $P_x = \frac{v_x \Delta x}{D_x} = 25$ e $P_y = 0$ para a direção y.

¹⁴ Varoglu E., Finn W. D. L., "Utilization of the method of characteristics to solve accurately two dimensional transport problems by finite elements". *Inter J. Num Methods in Fluid*, **2**, 173-184, 1982.

Nesta situação, o menor autovalor do tensor *D* foi $\varepsilon = D_x = 2$ e a constante $C_C \ge \frac{0.25}{2} = 0,125$ era de tamanho moderado. Ou seja, o regime adotado neste exemplo numérico foi o de pequena advecção.

Exemplo 2.) No caso de fluxo unidimensional na direção x, PARKHURST (2004) apresenta uma simulação de transporte de espécies químicas nas três direções x, $y \in z$, com reações de decaimento de 1^a ordem.

Os parâmetros deste exemplo são: velocidade intersticial v = 0.2 m/dia, coeficiente de dispersividade longitudinal $\alpha_L = 1.5 m$, dispersividade horizontal transversal $\alpha_{TH} = 0.3 m$, dispersividade vertical transversal $\alpha_{TV} = 0.1 m$ e taxa constante de decaimento $\lambda = 0.05 d^{-1}$. Com estes valores, o tensor de dispersão é a matriz diagonal $D_{3x3} = diag(0.30 0.06 0.02)$.

Considerando que o menor autovalor da matriz D_{3x3} , $\varepsilon = 0,02$ é, neste caso, menor que o coeficiente $\lambda = 0,05$, pode-se determinar que

$$C_c \ge \frac{|v|}{\varepsilon^{\frac{1}{2}} max\{\varepsilon, \lambda\}^{\frac{1}{2}}} = \frac{0.2}{(0.02)^{\frac{1}{2}}(0.05)^{\frac{1}{2}}} = 6.32$$

é uma constante de tamanho moderado, ou seja, o exemplo encontra-se no regime de pequena advecção.

Exemplo 3.) Um método numérico livre de malha, chamado de método radial de interpolação de ponto (RPIM), foi apresentado por KUMAR e DODAGOUDAR (2008) para a resolução bidimensional da equação de advecção-dispersão-sorção em meio poroso saturado. Em regime de advecção dominante ($P_x = 2,86$) os autores consideraram um expressivo valor para o fator de retardo, R = 7,267.

O exemplo numérico gerou a solução RPIM para ser comparada com a respectiva resolução por elementos finitos sobre uma malha inicial de 400 elementos quadriláteros e apresentou boa concordância. Dos parâmetros físicos deste exemplo, pode-se obter $C_c \ge 0.57$ para caracterizar o regime de transporte em pequena advecção.

Exemplo 4.) Finalmente, para comparar uma EAD a sua correspondente equação de modelo fracionário (FADE¹⁵), HUANG *et al.* (2008) analisaram o processo do transporte de atrazina em uma coluna homogênea de solo arenoso saturado.

Dentre os parâmetros físicos adotados para o ajuste da EAD encontra-se: R = 1,825para o fator de retardo, $v = 1,9 \ cm/min$ para a velocidade no poro e $D = 1,304 \ cm^2/min$ para a dispersão longitudinal. Assim $C_c \ge \frac{1,9}{0,7145} = 2,659$, ou seja, o experimento foi realizado em regime de pequena advecção.

Os exemplos acima são fortes indícios de que o transporte de contaminantes em água subterrânea é realizado no regime de pequena advecção.

3.5 ERRO A POSTERIORI DA EQUAÇÃO PARABÓLICA

De forma prática, os estimadores de erro *a posteriori*, obtidos dos diferentes métodos de discretização das equações diferenciais parciais, asseguram importantes questões de como uma solução discreta u_h pode ser precisamente determinada da solução fraca u de um dado problema da Engenharia. Esse estimador é construído após a solução numérica pelo método de elementos finitos, u_h , ter sido computada e ainda utiliza os valores de entrada descritos no modelo matemático em questão. Outra característica fundamental reside na escolha da norma do erro $e = u - u_h$ para constituir os estimadores.

Segundo BABUŠKA e STROUBOULIS (2001), o estudo do estimador de erro *a posteriori* inicia-se no desenvolvimento do erro na norma global de energia. No entanto, em problemas práticos da Engenharia não é suficiente somente a estimativa deste tipo de erro, pois, um pequeno valor na norma de energia do erro não implica necessariamente que o erro na quantidade de interesse seja também pequeno [BABUŠKA E STROUBOULIS, 2001, pg. 471].

A análise de erro *a posteriori*, que estima o erro discreto real sem o conhecimento da solução exata *u*, serve de base dos processos de refinamento ou desrefinamento das técnicas de malhas adaptativas. Estes processos necessitam de uma estratégia que facilmente limita o erro computável, para assegurar o controle global da solução.

¹⁵ O modelo FADE (*fractional advection-dispersion equation*) considera que as anomalias do movimento de contaminantes no meio poroso são representadas por processos não-Fickianos.

Para os problemas elípticos, como a equação do fluxo subterrâneo em regime permanente, a teoria dos estimadores de erro *a posteriori* encontra-se particularmente bem desenvolvida [VERFÜRTH, 1996], [AINSWORTH e ODEN, 2000], e [CHIDYAGWAI e RIVIÈRE, 2010]. Verifica-se na literatura que para equações diferenciais elípticas a norma comumente usada para quantificar o erro *e* é a norma de energia ou a norma L^2 [KNABER E ANGERMANN, 2003].

Para os problemas parabólicos, nos quais estão inseridas as equações do transporte de contaminantes, é encontrado um crescente interesse em estimar o erro da solução numérica das equações de advecção-dispersão com predominância advectiva e de abordagens distintas.

O primeiro passo é a escolha da norma $\|\cdot\|$ que o erro numérico será estimado. No entanto, a questão para decidir qual é a norma apropriada do erro estimado para as equações de advecção-dispersão é uma discussão na comunidade científica [JOHN, 2000].

Além da prescrição da norma para estimar o erro, diferentes estratégias de discretização são apresentadas na literatura. Entre elas pode se destacar as seguintes abordagens da equação parabólica:

Estimadores de erro anisotrópicos baseados na recuperação da derivada segunda da solução por elementos finitos foram desenvolvidos por [ALMEIDA *et al.*, 2000] para conduzir uma eficiente geração de malhas para os domínios da equação de convecção-difusão e demais problemas que empregam as *técnicas computacionais para a dinâmica de fluidos*.

Em [PAPASTAVROU e VERFÜRTH, 2000], encontra-se uma comparação entre três estimadores *a posteriori* aplicados no problema estacionário da equação linear de convecçãodifusão: um estimador ZZ, um estimador residual e um estimador de Neumann (estimador baseado na resolução local de um problema auxiliar discreto). Para assegurar a estabilidade da solução aproximada, o esquema de discretização aplica o conhecido SUPG (*streamline upwind Petrov-Galerkin*) no método de Galerkin tradicional introduzindo difusão artificial com o uso modificado nas funções de testes [HUGHES *et al.*, 2009]. Nos problemas testes, da comparação realizada, conclui-se que o estimador ZZ não foi capaz de capturar os fenômenos de alta ordem, tais como, as regiões de singularidades. No entanto, tanto o estimador residual, quanto o estimador de Neumann, mostrou-se qualificados na localização destas regiões, fornecendo ainda informações quantitativas sobre o erro de aproximação.

Uma vez que os métodos de elementos finitos adaptativos baseados em estimadores de erro *a posteriori* tornaram-se um tema central na Engenharia e na Computação Científica, os esforços seguem direcionados para o desenvolvimento de algoritmos adaptativos eficientes para os vários tipos de equações diferenciais parciais parabólicas lineares ou não-lineares.

Para um caso linear, CHEN e FENG (2004) desenvolveram um algoritmo adaptativo, com estratégias de refinamento e desrefinamento que é capaz de reduzir o erro indicado abaixo de um valor tolerável usando um número finito de passos na resolução iterativa.

Estimadores *a posteriori* também são aplicados na avaliação do erro provenientes da discretização temporal da equação transiente de advecção-dispersão, tais como o já mencionado método de Crank-Nicolson.

Utilizando a reconstrução de Crank-Nicolson de segunda ordem em contínuas aproximações lineares por partes da solução numérica, [AKRIVIS *et al.*, 2006] obtiveram estimativas facilmente computadas e com apropriadas representações pontuais do erro observado na evolução temporal de uma equação parabólica.

Um estimador *a posteriori* do esquema de discretização com elementos finitos misto de Raviart-Thomas de mais baixa ordem, para as equações de convecção-difusão-reação, é apresentado em [VOHRALÍK, 2007]. Esse estimador computável e de características residuais, quando aplicados nos problemas de convecção dominante, obteve explicitamente os valores constantes dos limites superiores globais do erro de aproximação na norma de energia, confirmados por experimentos numéricos.

Utilizando na equação do calor, $\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f$, elementos finitos lineares para obter a discretização espacial e o método de Crank-Nicolson para a discretização temporal, [LOZINSKI *et al.*, 2009] desenvolveu um estimador de erro *a posteriori* com uma representação razoável do erro real. As parcelas que constituem o estimador, conhecidas por indicadores de erro, conduziram um algoritmo adaptativo no tempo e no espaço.

Em [HILHORST e VOHRALÍK, 2010] encontra-se um computável estimador de erro *a posteriori* baseado na discretização pelo Método de Volumes Finitos (FVM)¹⁶ [EYMARD *et al.*, 2003] das equações de convecção-difusão-reação. O algoritmo resultante para obter as estimativas apresenta boa eficiência para as contribuições do erro espacial e temporal.

Verifica-se, desta maneira que os estimadores de erro *a posteriori*, para os problemas parabólicos, são obtidos de diferentes metodologias e aplicados na avaliação dos esquemas de discretização numérica conforme o propósito que é estabelecido pelo pesquisador.

Neste trabalho serão adotados os esquemas θ A-estáveis [VERFÜRTH, 2008] que generalizam o método de Crank-Nicolson para obter a discretização temporal das equações de

¹⁶ Método de resolução de derivadas parciais baseado na resolução de balanços de massa, energia e quantidade de movimento a um determinado volume de meio contínuo.

advecção-difusão-reação, com advecção dominante. Acompanhados pelos esquemas de discretização espacial que utilizam elementos finitos conformes¹⁷, é possível obter um eficiente estimador de erro *a posteriori*, com características residuais, para os esquemas de discretização espaço-temporal.

VERFÜRTH (2006) demonstrou que o limite superior deste estimador residual é global no espaço e no tempo e que o limite inferior é global no espaço e local no tempo. O estimador desenvolvido é robusto no sentido que a razão entre o limite superior e inferior é uniformemente limitada no tempo e independe do tamanho da malha ou do passo de tempo adotado na discretização. Uma característica interessante deste estimador residual é que ele é uniformemente limitado em relação ao tamanho da advecção.

3.6 CONSIDERAÇÕES DO CAPÍTULO 3

Os modelos de transporte e dos processos de reação no meio poroso resultam na equação diferencial parcial dada por (3.10). Para os parâmetros físicos desta equação sobre um domínio poligonal limitado Ω , o número de *Péclet global* definido por:

$$Pe := \frac{\|v\|_{\infty} diam(\Omega)}{\|D\|_{\infty}}, \qquad (3.11)$$

é uma constante significativamente maior que uma unidade¹⁸. Isto caracteriza (3.10) como sendo uma equação de *advecção dominante* e como visto na literatura, para esta equação, os métodos convencionais de discretização (o Galerkin tradicional) apresentam limitações.

A aproximação *upwind* é uma alternativa para remediar a diminuição na precisão numérica quando o tamanho *h* da malha não é "suficientemente pequeno". Outra alternativa é contrabalancear a difusão numérica negativa introduzida pela aproximação obtida pelo método de Galerkin tradicional.

¹⁷ Uma aproximação FEM de uma equação elíptica de ordem 2m é conforme se: *I*- as funções de base são *m* vezes continuamente diferenciáveis em cada subregião e *II*- as funções de base são *m*-1 vezes continuamente diferenciáveis em todo domínio.

¹⁸ Especificamente para o transporte de substâncias dissolvidas em água subterrânea, o valor representativo do número de Péclet global é em torno de 25 [KNABNER e ANGERMANN, 2003].

De acordo com [DONEA e HUERTA, 2004] estas metodologias são equivalentes, ou seja, uma aproximação *upwind* induz a difusão numérica e vice versa.

Entre outros métodos especiais para resolver equações de advecção dominante citam-se:

- o método SUPG (*streamline upwind Petrov-Galerkin*) [BROOKS e HUGES, 1982], que basicamente adiciona apropriados resíduos ponderados na formulação variacional do problema estacionário para introduzir uma difusão extra na direção da velocidade (ou transporte advectivo). Quando métodos implícitos no tempo são acoplados com a discretização SUPG no espaço, o resultado são termos adicionais que oferecem consistência e acurácia na solução dos problemas de advecção dominante [BOCHEV *et al.*, 2004];
- o método de volume finito (MVF), que discretiza uma EDP integrando suas equações sob volumes de controle. O MVF é estável devido ao comportamento assintótico de suas funções de ponderação. Devido à sua generalidade, qualquer tipo de malha, estruturada¹⁹ ou não-estruturada, pode ser usada [EYMARD *et al.*, 2003];
- o método de Galerkin Descontínuo (GD) pode ser considerado como uma generalização do MVF em que as funções de aproximação e funções testes são funções polinomiais sobre os elementos, sem restrições de continuidade sobre a fronteira entre os elementos [DEVLOO *et al.*, 2005]. O método GD é consistente para a formulação dos problemas de advecção-dispersão;
- o método de Lagrange-Galerkin (MLG), que elimina o termo advectivo por uma transformação apropriada das coordenadas, permitindo a aplicação dos métodos tradicionais de discretização em situação onde a advecção é dominante. Alguns problemas com a estabilidade revelaram a necessidade de uma melhor fundamentação teórica do método MLG [MORTON *et al.*, 1988 *apud* KNABER E ANGERMANN, 2003]²⁰ e
- no método S³ (Symmetrical Streamline Stabilization) [WENDLAND e SCHIMD, 2000], a equação de advecção-dispersão é divida pela técnica de separação de operadores. Os termos advectivo e dispersivos são aproximados por técnicas FEM distintas e reagrupados a um único sistema de equações. O termo advectivo, que fica na parte implícita da equação, possui a sua matriz de coeficientes simétrica, propiciando a aplicação do *solver* conhecido por Gradiente Conjugado Pré-condicionado (PCG).

¹⁹ Malha estruturada apresenta uma estrutura, ou regularidade, na distribuição espacial dos pontos.

²⁰ Morton K. W., Priestley A., Süli E., **Stability of the Lagrange-Galerkin method with non-exact integration**. *RAIRO Model. Math.* Anal. Numer 22(4) 625-653, 1988

Para resolver numericamente a equação parabólica (3.10), diferentes métodos são desenvolvidos e aperfeiçoados. A quantificação dos resultados obtidos, revelando a precisão ou a deficiência do método, é possível mediante a aplicabilidade efetiva dos estimadores de erro *a posteriori*.

4 O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E A PROGRAMAÇÃO JAVA

O Método de Elementos Finitos – FEM é conhecido por suas aplicações nas diversas áreas das Engenharia. O uso de uma formulação variacional do modelo matemático e de uma técnica de discretização do domínio Ω das equações são frequentemente usadas para as aproximações dos problemas de valores de contorno [DEVLOO *et al.*, 2009]. A implementação do código numérico, baseada no FEM para a obtenção da solução aproximada da equação do fluxo e da equação do transporte, é realizada em linguagem JAVA em função da portabilidade e da reusabilidade facilitada pelo paradigma da programação orientada a objetos – POO.

Neste capítulo é apresentado o método de obtenção das aproximações FEM das equações governantes do fluxo de água subterrânea da seção 3.1, das equações governantes do transporte de contaminantes da seção 3.2 e das respectivas implementações computacionais JAVA que fornecem a solução numérica. O código numérico disponibiliza resultados de soluções analíticas para casos especiais de cada equação e implementa, principalmente, as apropriadas técnicas que estabelecem estimativas do erro *a posteriori*.

4.1 CONCEITOS BÁSICOS DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

No método FEM, um *subdomínio* de Ω será denotado por Ω_e^h , onde o subscrito *e* denota o "elemento *e*" e o sobrescrito *h* representa o "tamanho característico" do elemento discretizado.

O espaço de soluções que contêm \mathbf{u}_e é de dimensão infinita em todo ponto \mathbf{x} sobre o subdomínio e possui uma variável $\mathbf{u}_e(\mathbf{x})$ associada com o elemento. Na figura 4.1, esta variável de dimensão infinita $\mathbf{u}_e(\mathbf{x})$ é aproximada por um espaço de dimensão finita $\mathbf{u}_e^h(\mathbf{x})$, a qual depende do número finito dos valores nodais $\hat{\mathbf{u}}_e^a$ (o subscrito *a* é número do nó do elemento *e*, e o símbolo " ^ " representa o valor de \mathbf{u}_e calculado no nó *a* – o *valor nodal*).

Uma base ϕ_e^a de funções de aproximação para uma variável \mathbf{u}_e é definida em cada subdomínio de acordo com a expressão:

$$\mathbf{u}_{e} \cong \mathbf{u}_{e}^{h} \equiv \phi_{e}^{a} \hat{\mathbf{u}}_{e}^{a} \qquad a = 0, \dots, n_{node} - 1$$

$$(4.1)$$

sendo n_{node} o número de nós do elemento Ω_e^h e funções de aproximação.



FIG 4.1 – Geometria da discretização do domínio global Ω utilizando elementos finitos quadriláteros.

A função aproximada \mathbf{u}_{e}^{h} da equação 4.1 é definida por um conjunto de *funções de interpolação* ϕ_{e}^{a} sobre cada elemento *e*. O espaço gerado por estas funções é conhecido por *espaço de elementos finitos*.

A terna definida pelo conjunto $\{\Omega_e^h, \phi_e^a, \mathbf{u}_e^h\}$ representa um *elemento finito* que consiste do domínio Ω_e^h , da *função interpolante* ϕ_e^a e do *grau de liberdade* \mathbf{u}_e^h [CIARLET, 1978 *apud* WORKBOOK PG 268]²¹.

Para discretização das equações do fluxo e do transporte de contaminantes, serão utilizadas as clássicas funções Lagrangianas sobre elementos de quatro nós, de acordo com a seguinte formulação:

$$N_{a}(\xi,\eta) = \frac{1}{4} (1 + \xi_{a}\xi)(1 + \eta_{a}\eta)$$
(4.2)

²¹Ciarlet P. G., 1978 The finite element method for elliptic problems. North-Holland, Amsterdam.

sendo a = 0, 1, 2, 3 o número do nó do elemento e (ξ, η) o sistema de coordenadas locais cujos vértices (ξ_a, η_a) são, respectivamente, {(-1,-1),(1,-1),(1,1),(-1,1)} [PRUDHOMME e ODEN, 2002] (ver figura 4.2b).

Portanto, as formas explícitas para as funções interpolantes são:

$$\begin{cases}
N_{0}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta) \\
N_{1}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta) \\
N_{2}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta) \\
N_{3}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)
\end{cases}$$
(4.3)

No processo de refinamento, elementos triangulares poderiam ser utilizados. Assim, as funções interpolantes para elementos triangulares podem ser obtidos pela degeneração das equações 4.3, definindo $N_0^{tri} = N_0$, $N_1^{tri} = N_1$ e $N_2^{tri} = N_2 + N_3 = \frac{1}{2}(1+\eta)$, ou seja,

$$\begin{cases} N_{0}^{tri}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta) \\ N_{1}^{tri}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta) \\ N_{2}^{tri}(\xi,\eta) = \frac{1}{2}(1+\eta) \end{cases}$$
(4.4)

A transformação de coordenadas usando a equação (4.3) para elementos quadriláteros são mostradas na figura 4.2a, e a transformação usando a equação (4.4) para elementos triangulares são mostradas na figura 4.2c. Um *elemento de referência* $\overline{\Omega}_e$ pode ser definido na região normalizada de acordo com a regra de *transformação de coordenadas* $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}(\overline{\Omega}_e)$ que aplica $\overline{\Omega}_e$ no *elemento físico* Ω_e^h . Desta forma, o domínio normalizado nas coordenadas naturais (ξ, η) é transformado no domínio físico nas coordenadas $\mathbf{x} = (x,y)$.

As funções interpolantes para a transformação de coordenadas pode ser escolhida da mesma forma como foi definida a interpolação da função aproximada $\mathbf{u}_{e}^{h}(\mathbf{x})$ da equação (4.1), ou seja,

Metodologia

$$\mathbf{x}\left(\overline{\Omega}_{e}\right) \equiv \phi_{e}^{a} \hat{\mathbf{x}}_{e}^{a} \tag{4.6}$$

sendo $a = 0, ..., n_{node} - 1$ e $\hat{\mathbf{x}}_{e}^{a}$ a coordenada fixa do valor nodal.



FIG 4.2 – (a) Elemento físico nas coordenadas cartesianas (x,y)
(b) Elemento de referência quadrilátero em coordenadas locais
(c) Elemento de referência triangular degenerado

Um elemento finito com o mesmo conjunto de funções interpolantes para as funções de aproximação e para a transformação de coordenadas é conhecido por *elemento isoparamétrico*.

Uma vez que no método de elementos finitos as funções de interpolação são usadas para representar a aproximação de uma variável do modelo contínuo, é necessária a garantia de que esta aproximação FEM tradicional esteja convergindo para a solução exata quando o tamanho h da malha estiver diminuindo²². A convergência ocorre quando as funções de aproximação satisfazem as condições de completude e de continuidade. Estas condições de convergência são conhecidas por condições de *admissibilidade* das funções de aproximação e

²² Este tamanho *h* geralmente é definido como sendo o máximo dos diâmetros de cada elemento da malha.

quando alguma das condições acima não é satisfeita, os elementos serão ditos $não-conforme^{23}$.

4.1.1 Consistência, Estabilidade e Convergência do Método

Três propriedades fundamentais que todo método numérico deve possuir para a aproximação de uma equação diferencial parcial - EDP são: *consistência*, *estabilidade* e *convergência*.

Em linhas gerais, a consistência implica que a EDP pode ser recuperada por um sistema de equações algébricas. O conceito de estabilidade está relacionado ao crescimento ou diminuição dos erros introduzidos nos cálculos. E a convergência implica que a solução numérica aproxima a solução exata da EDP quando há um aumento no grau de liberdade²⁴ do método numérico [FORTUNA, 2000].

Considerando o método de Galerkin²⁵ no espaço com as funções de bases contínuas, como as representadas por (4.3) ou (4.4), e assumindo que a solução numérica C(t) é aproximada por funções lineares, em cada passo de tempo de acordo com (4.1), um esquema de médias ponderadas [HUGHES, 2000] para aproximar uma equação parabólica pode ser dado por:

$$\left[\mathbf{M} + \boldsymbol{\theta} \Delta t \mathbf{K}\right] \mathbf{C}^{n+1} = \left[\mathbf{M} - (1 - \boldsymbol{\theta}) \Delta t \mathbf{K}\right] \mathbf{C}^n + \Delta t \left[(1 - \boldsymbol{\theta}) \mathbf{F}^n + \boldsymbol{\theta} \mathbf{F}^{n+1}\right]$$
(4.7)

sendo M e K matrizes globais obtidas, respectivamente, da montagem (ou *assembling*) das matrizes locais de massa e de rigidez. O vetor F refere-se à montagem dos vetores de carga da equação. A constante $\theta é$ o parâmetro de discretização temporal.

As sensibilidades às pequenas perturbações, que implicam na ausência de estabilidade do método, podem ser expressas na seguinte definição [OTTO, 2007]:

²³ O método de Galerkin Descontínuo, que admite aproximação não-conforme, é convergente.

²⁴ **Graus de liberdade** é um termo genérico utilizado em referência a quantidade mínima de números reais necessários para determinar completamente o estado físico de um dado sistema.

²⁵ Boris Grigoryevich Galerkin (1871-1945) foi um importante matemático e engenheiro russo.

Definição 4.1.1 Um esquema numérico é *condicionalmente estável*, se uma perturbação de tamanho $\|\delta\|$ introduzida no instante t_n permanece limitada para os tempos subseqüentes para $t \leq T$ e para todo passo de tempo $\Delta t \leq \Delta t_0$.

Sem perda de generalidade, pode-se assumir que uma perturbação $\delta \epsilon$ introduzida no instante t = 0. Considere $\overline{\mathbf{C}}$ solução da equação (4.7) satisfazendo $\overline{\mathbf{C}}^0 = \mathbf{C}^0 + \delta$. Subtraindo o sistema perturbado $[\mathbf{M} + \theta \Delta t \mathbf{K}]\overline{\mathbf{C}}^{n+1} = [\mathbf{M} - (1 - \theta)\Delta t \mathbf{K}]\overline{\mathbf{C}}^n + \Delta t[(1 - \theta)\mathbf{F}^n + \theta \mathbf{F}^{n+1}]$ da equação (4.7), a seguinte expressão é obtida:

$$\left[\mathbf{M} + \boldsymbol{\theta} \Delta t \mathbf{K}\right] \boldsymbol{\delta}^{n+1} = \left[\mathbf{M} - (1 - \boldsymbol{\theta}) \Delta t \mathbf{K}\right] \boldsymbol{\delta}^{n}, \qquad \boldsymbol{\delta}^{0} = \boldsymbol{\delta}$$
(4.8)

sendo $\delta^n = \overline{\mathbf{C}}^n - \mathbf{C}^n$.

Assim, para problemas lineares é suficiente aplicar a definição 4.1 na versão homogênea do esquema numérico, apresentando a perturbação δ em suas condições iniciais. Com estas restrições, define-se estabilidade de uma maneira mais explícita [OTTO, 2007].

Definição 4.1.2 Um esquema numérico linear é *estável* se existe uma constante c > 0, que independe de Δt e tal que $\|\delta^n\| \le c \|\delta^0\|$ quando $n \to \infty$, $\Delta t \to 0$, $t \le T$.

Ambas as definições permitem que a perturbação inicial cresça, mas somente por uma quantidade limitada. Se uma condição mais forte é imposta na definição acima, ou seja, se $\|\delta^n\| \le \|\delta^0\|$, as soluções de sistemas contínuos serão *absolutamente estáveis* no sentido que C(t) é limitada para todo $t \ge 0$. Neste caso, não são permitidos os crescimentos das perturbações δ^n .

O detalhamento da propriedade de estabilidade é motivado pelo seguinte teorema de Equivalência de Lax, o qual expressa uma relação entre as três propriedades fundamentais [OTTO, 2007].

Teorema de Equivalência de Lax. Para um problema bem posto²⁶, sendo a formulação de dois níveis temporais consistente, a existência de estabilidade é uma condição necessária e suficiente para convergência de um sistema de equações lineares.

²⁶ Um problema de valor inicial é dito bem posto quando depende continuamente das condições iniciais.

Ou seja, se a formulação é consistente e estável, o esquema é convergente. Desta forma, a solução numérica \mathbf{C}^n convergirá para a solução exata \mathbf{C} quando os incrementos Δx , Δy e Δt tenderem para zero.

A figura 4.3 estabelece relações entre as três propriedades fundamentas do método numérico e sintetiza que a discretização é:

- CONSISTENTE se a formulação numérica é suficientemente próxima da EDP.
- ESTÁVEL se o problema discreto é bem posto.
- CONVERGENTE se \mathbf{C}^n é suficientemente próximo da solução exata \mathbf{C} .



FIG 4.3 – Relação entre consistência, estabilidade e convergência Adaptado de [OTTO, 2007 pg. 69]

4.2 APROXIMAÇÃO DA EQUAÇÃO DO FLUXO E O ESTIMADOR DE ERRO

Nesta seção, é usada uma formulação mista onde o domínio da equação do fluxo (3.3) é aproximado por elementos finitos, enquanto o tempo é discretizado por diferenças finitas. Uma malha estruturada de elementos quadriláteros é gerada para representar o domínio que corresponderá às dimensões horizontais do aqüífero confinado.

A formulação contínua da equação transiente do fluxo é dada por:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left[T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right] + W(x, y, t) = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{em } \Omega \ge (0, T) \\ h = h_D \quad \text{sobre } \Gamma_D \ge (0, T) \\ \mathbf{n} \cdot D \nabla h = g \quad \text{sobre } \Gamma_N \ge (0, T) \\ h(\cdot, t_0) = h_0 \quad \text{em } \Omega \end{bmatrix}$$

sendo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ o domínio poligonal limitado e com fronteira Lipschitz²⁷ Γ consistindo de duas partes disjuntas, Γ_D a fronteira de Dirichlet e Γ_N a fronteira de Neumann, tais que $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Omega$. O tempo final *T* é arbitrário, no entanto, precisa ser especificado.

O Método de Resíduos Ponderados permite a obtenção da solução aproximada \hat{h} . A contribuição em cada elemento para o resíduo da solução numérica, no nó *i*, pode ser obtida da formulação integral da equação do fluxo:

$$\int_{\Omega^{(e)}} \Phi_i \left(S \frac{\partial \hat{h}^{(e)}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[T_{xx} \frac{\partial \hat{h}^{(e)}}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[T_{yy} \frac{\partial \hat{h}^{(e)}}{\partial y} \right] - W(x, y, t) \right) d\Omega^{(e)} = 0$$
(4.9)

sendo Φ_i a função de ponderação do resíduo e $\Omega^{(e)}$ um elemento da malha uniforme.

Para cada elemento finito $\Omega^{(e)}$, a carga hidráulica $\hat{h}^{(e)}$ será obtida através da interpolação nodal das cargas $h_j^{(e)}$, utilizando as funções de bases $\Phi_j = \frac{1}{4} (1 + \xi_j \xi) (1 + \eta_j \eta)$ em coordenadas locais (ξ, η) , cujos vértices (ξ_j, η_j) são {(-1,-1),(1,-1),(1,1),(-1,1)} para j = 0, 1, 2, 3. Desta forma, para cada elemento:

$$\hat{h}^{(e)} = \sum_{j=0}^{3} \Phi_{j} h_{j}^{(e)}.$$
(4.10)

Substituindo a aproximação (4.10) na equação do resíduo (4.9) e aplicando a *Identidade de Green*²⁸ nas derivadas de 2ª ordem, a formulação fraca de Galerkin para a aproximação da equação do fluxo é:

²⁷ O termo é devido ao matemático alemão Rudolf Lipschitz (1832-1903). Um domínio Lipschitz, ou domínio com fronteira Lipschitz, é um domínio no espaço Euclidiano cuja fronteira é "suficientemente regular" no sentido que ela pode ser localmente representada como sendo um gráfico de uma função $f: X \rightarrow Y$ Lipschitz contínua (*ie*, existe $K \ge 0$ tal que $d_Y(f(x_1), f(x_2)) \le K d_x(x_1, x_2)$ para todo x_1 e x_2 em X). Vários teoremas de imersão em espaço de Sobolev pedem que o domínio de estudo seja um domínio Lipschitz. Conseqüentemente, vários problemas envolvendo equações diferenciais parciais ou formulações variacionais estão definidos sobre domínios Lipschitz.

$$S\mathbf{M}\left\{\frac{\partial \hat{h}}{\partial t}\right\} + \mathbf{K}\{\hat{h}\} = \left\{\mathbf{F}\right\}$$
(4.11)

sendo $\mathbf{M} = \int_{\Omega^{(e)}} \Phi_i \Phi_j d\Omega^{(e)}$ a matriz de massa local ou de armazenamento,

 $\mathbf{K} = \int_{\Omega^{(e)}} \nabla \Phi_i \cdot (T \nabla \Phi_j) d\Omega^{(e)} \text{ a matriz de rigidez local ou de mobilidade ,}$ $T = \begin{bmatrix} T_{xx} & 0 \\ 0 & T_{yy} \end{bmatrix} \text{ o tensor de transmissividade e}$ $\{\mathbf{F}\} = \int_{\Omega^{(e)}} W d\Omega^{(e)} + \int_{\Gamma} \Phi_i \vec{n} (T \nabla h_i) d\Gamma \text{ o vetor local de cargas nodais}^{29} \text{ ou de esforços.}$

A aproximação temporal da equação (4.11) será obtida pelo esquema de *Euler* progressivo aproximando o termo $\left\{\frac{d\hat{h}}{dt}\right\}$ por $\left(\frac{\hat{h}^{t+\Delta t} - \hat{h}^{t}}{\Delta t}\right)$ e aplicando as interpolações:

$$\{\hat{h}\} = (1-\theta)\{\hat{h}\}^{t} + \theta\{\hat{h}\}^{t+\Delta t} \ e \ \{F\} = (1-\theta)\{F\}^{t} + \theta\{F\}^{t+\Delta t}$$
(4.12)

A equação aproximada para cada passo de tempo Δt será dada pela expressão:

$$\left(S[M] + \theta \Delta t[K]\right)\left\{\hat{h}\right\}^{t+\Delta t} = \left(S[M] - (1-\theta)\Delta t[K]\right)\left\{\hat{h}\right\}^{t} + \Delta t\left((1-\theta)\left\{F\right\}^{t} + \theta\left\{F\right\}^{t+\Delta t}\right)$$
(4.13)

Os termos [M] e [K] representam as matrizes globais obtidas pela montagem (*assembling*) das matrizes locais nos elementos de uma malha inicial que discretiza o domínio Ω .

A solução do problema discreto (4.13) pode aplicar o método de *Crank-Nicolson* atribuindo $\theta = \frac{1}{2}$ e usando os valores $\{\hat{h}\}^{t_0}$ fornecidos pelas condições iniciais do problema em $t = t_0$.

Após a imposição das condições de contorno de Dirichlet $\{\hat{h}\} = h_D$, a qual especifica os valores das cargas hidráulicas na fronteira Γ_D , e as condições de contorno de Neumann $\nabla \hat{h} = 0$, para a representação de fluxo nulo nas fronteiras impermeáveis Γ_N do aqüífero

²⁸
$$\int_{\Omega} \left(\nabla A \cdot \nabla B + A \nabla^2 B \right) d\Omega = \int_{\Gamma} A \frac{\partial B}{\partial n} d\Gamma$$

²⁹ \vec{n} é o vetor unitário exterior a $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N = \partial \Omega$.

confinado, a solução da equação (4.13) fornece a solução numérica $\{\hat{h}\}^{t_0+\Delta t}$. De maneira sucessiva, determinam-se as soluções $\{\hat{h}(x_i, y_j)\}$ em cada nó (x_i, y_j) da malha inicial, no *n*-ésimo passo de tempo $t = t_0 + n.\Delta t$.

4.2.1 Gradiente Numérico da Equação do Fluxo

O gradiente hidráulico $\nabla \hat{h}$ da solução numérica é aplicado na obtenção do campo de velocidades do fluxo de água subterrânea e na análise de erro *a posteriori* dos processos adaptativos que utilizam técnicas de Recuperação do Gradiente [ZIENKIEWICZ, 2004].

As funções de interpolação lineares $\Phi_j = \frac{1}{4}(1 + \xi_j \xi)(1 + \eta_j \eta)$, com os parâmetros das coordenadas locais (ξ, η) e j = 0...3, conforme definidas na seção 4.1, relacionam o gradiente hidráulico em cada elemento finito por:

$$\nabla \hat{h}^{(e)}(x, y) = (J^T)^{-1} \cdot \nabla \hat{h}^{(e)}(\xi, \eta)$$
(4.14)

sendo J a matriz jacobiana da mudança de coordenadas.

Para uma malha inicial de (3.3) segue que $(J^T)^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$, e a substituição de (4.10) em (4.14) resulta na expressão $\nabla \hat{h}^{(e)} = 2.I_2 \sum_{i=0}^{3} (\nabla \Phi_i) h_i^{(e)}$.

Após simples operações matemáticas, obtém-se

$$\nabla \hat{h}^{(e)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1+\eta) (\hat{h}_{2}^{(e)} - \hat{h}_{3}^{(e)}) + (1-\eta) (\hat{h}_{1}^{(e)} - \hat{h}_{0}^{(e)}) \\ (1+\xi) (\hat{h}_{2}^{(e)} - \hat{h}_{1}^{(e)}) + (1-\xi) (\hat{h}_{3}^{(e)} - \hat{h}_{0}^{(e)}) \end{pmatrix}$$
(4.15)

Aplicando $(\xi, \eta) = (0, 0)$ em coordenadas locais, o gradiente obtido no centro do elemento $\Omega^{(e)}$ é especificado por

$$\nabla \hat{h}^{(e)}(x_c, y_c) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{h}_1^{(e)} + \hat{h}_2^{(e)} - \left(\hat{h}_0^{(e)} + \hat{h}_3^{(e)}\right) \\ \hat{h}_2^{(e)} + \hat{h}_3^{(e)} - \left(\hat{h}_0^{(e)} + \hat{h}_1^{(e)}\right) \end{pmatrix}$$
(4.16)

sendo x_c e y_c as coordenadas globais do ponto central do elemento finito.

4.2.2 Estimador de Erro baseado na Recuperação do Gradiente

A característica elíptica da equação fundamental (3.3) favorece a aplicação do estimador de erro *a posteriori* baseado em técnicas de recuperação do gradiente, conhecidas por técnica SPR (*Superconvergent Patch Recovery*) [ZIENKIEWICZ E ZHU, 1992b].

Quando o método de elementos finito (FEM) é usado para solucionar as equações diferenciais relacionadas a um funcional definido, para um problema discreto, erros são introduzidos pelo processo de discretização. O erro resultante da redução do modelo matemático contínuo para um modelo numérico discreto é dependente do número finito de graus de liberdade.

O erro da aproximação obtida pelo método dos elementos finitos u_h , em relação à solução exata u é dado por:

$$e = u - u_h \tag{4.17}$$

e o erro do fluxo (proporcional ao gradiente de u) é

$$e_{\sigma} = \sigma - \sigma_h \,. \tag{4.18}$$

sendo σ o gradiente da solução exata e σ_h o gradiente da solução aproximada.

Uma vez que as soluções exatas $u \in \sigma$ são quase sempre desconhecidas, faz-se necessário desenvolver uma metodologia apropriada para estimar o erro da solução numérica FEM.

O estimador de erro SPR, às vezes referenciado por estimador ZZ, provou ser efetivo e econômico tanto no cálculo do erro, quanto na condução do refinamento adaptativo da equação (3.3).

Segundo [ZHANG e VICTORY JR., 1995], o campo das derivadas e os fluxos σ_h computados da solução de elemento finito u_h não possuem continuidade entre os elementos e têm uma baixa precisão nos nós e nos elementos da fronteira. No entanto, existem pontos no interior dos elementos finitos, conhecidos como *pontos superconvergentes*, nos quais as derivadas e os fluxos são mais precisos nestes pontos do que em qualquer outro ponto no interior do elemento finito [ZIENKIEWICZ, 2004]. Os valores nos pontos superconvergentes convergem mais rapidamente³⁰ para o valor exato do que o decréscimo do tamanho do elemento.

É possível recuperar um valor nodal de $\overline{\sigma}$ mais preciso que σ_h , por interpolação destes pontos superconvergentes em pequenos conjuntos de elementos em volta do nó, chamado *patch* [AKIN, 2000]. Este procedimento de recuperação para obter $\overline{\sigma}$ utiliza a técnica de suavização dos valores nodais que determina uma média ponderada dos valores $\hat{\sigma}^{(e)} = \nabla \hat{h}^{(e)}$ obtidos de cada elemento adjacente ao nó, conforme ilustrado na figura 4.4.



FIG 4.4 – (a) valores de $\hat{\sigma}^{(e)}$ calculados para cada elemento do *patch* (b) gradiente suavizado pela média $\overline{\sigma}$

Na prática, o gradiente suavizado $\overline{\sigma}$ é aproximadamente dado pela expansão polinomial $\overline{\sigma} = \mathcal{P}\mathbf{a}$, sendo que \mathcal{P} contêm os termos polinomiais apropriados e \mathbf{a} é um conjunto de coeficientes desconhecido. Esta expansão é usada para cada componente do tensor $\overline{\sigma}$.

No caso do problema elíptico bidimensional (3.3) é recomendada uma aproximação por elementos finitos quadráticos [ZIENKIEWICZ e ZHU, 1992a]:

$$\mathcal{G} = [1, x, y, x^2, xy, y^2]$$
(4.19)

$$\mathbf{a} = [a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5]^{\mathrm{T}}$$
(4.20)

42

³⁰ Convergência da ordem $O(h^{1+p})$ sendo h o tamanho da malha e p a ordem do polinômio interpolador.
Os coeficientes do vetor **a** são obtidos através do método dos mínimos quadrados. Ajusta-se a expansão polinomial de σ para obter $\hat{\sigma}^{(e)}$, que são provenientes da solução por elementos finitos aplicadas em seus centróides – ou *sampling points*.

Na malhar quadrangular, o *patch* de elementos é definido como sendo a união dos elementos que compartilham um determinado nó. Estes *patches* de elementos são usados na performance local do ajuste do gradiente por mínimos quadrados.

Para ilustrar a técnica de recuperação superconvergente – SPR, considere os *sampling points* (4 pontos superconvergentes) no *patch* com coordenadas globais (x_i, y_i). Assim, o problema é reduzido à minimização do seguinte funcional:

$$\mathcal{G} = \sum_{i=1}^{m} [\hat{\sigma}(x_i, y_i) - \overline{\sigma}(x_i, y_i)]^2 = \sum_{i=1}^{m} [\hat{\sigma}(x_i, y_i) - \mathcal{G}(x_i, y_i)\mathbf{a}]^2$$
(4.21)

Este problema de minimização é resolvido com a condição $\partial \mathcal{G} / \partial \mathbf{a} = 0$, o que fornece o seguinte sistema de equações lineares algébricas

$$\mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{b} \tag{4.22},$$

sendo

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{m} [\mathcal{P}^{\mathrm{T}}(x_i, y_i) \mathcal{P}(x_i, y_i)] \quad \mathbf{e} \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{m} [\mathcal{P}^{\mathrm{T}}(x_i, y_i) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(x_i, y_i)]$$

A resolução do sistema (4.22) fornece a solução para os coeficientes de **a** e conseqüentemente a expressão de $\overline{\sigma}$ do gradiente, suavizada pelo ajuste dos mínimos quadrados.

Um estimador de erro *a posteriori* associado ao elemento $K \in \Omega$ para a equação do fluxo subterrâneo (3.3) pode ser definido por:

$$\eta_K^2 = \int_{\Omega} \left| \overline{\sigma} - \sigma^{(e)} \right|^2 dx dy$$
(4.23)

O erro global $\eta_{\rm ZZ}$ estimado pela técnica SPR é dado por:

$$\eta_{ZZ} = \left\{ \sum_{K \in \Omega} \eta_K^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(4.24)

Segundo VERFÜRTH (2008) o estimador ZZ fornece ainda os respectivos limites superiores e inferiores para o erro da solução numérica da correspondente equação elíptica.

4.3 FORMULAÇÃO VARIACIONAL DA EQUAÇÃO DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

Nesta seção, na equação governante do transporte de contaminantes, dada pela equação parabólica linear e de segunda ordem (3.10), é imposto as condições iniciais e de condições de fronteira. O modelo matemático é então representado por:

$$\begin{cases} \partial_{t}C - div(\mathbf{D}\nabla C) + \mathbf{v} \cdot \nabla C + \lambda C = f & \text{em } \Omega \ge (0,T] \\ C = C_{D} & \text{sobre } \Gamma_{D} \ge (0,T] \\ \mathbf{n} \cdot D\nabla C = g & \text{sobre } \Gamma_{N} \ge (0,T] \\ C = C_{0} & \text{em } \Omega \end{cases}$$
(4.25)

sendo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ o domínio poligonal limitado e com fronteira Lipschitz Γ consistindo de duas partes disjuntas, Γ_D a fronteira de Dirichlet e Γ_N a fronteira de Neumann, tais que $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Omega$. O tempo final *T* é arbitrário, no entanto, precisa ser especificado.

Assuma que os parâmetros da equação (4.25) satisfazem às seguintes condições:

a.) A difusão D é uma matriz continuamente diferenciável e simétrica, uniformemente definida positiva e uniformemente isotrópica, ou seja,

$$\varepsilon = \inf_{\substack{0 \le t \le T \\ x \in \Omega}} \min_{z \in \mathrm{IR}^2 \setminus \{0\}} \frac{z^T D(x,t) z}{z^T z} > 0 \quad \mathrm{e} \quad \kappa = \varepsilon^{-1} \sup_{\substack{0 \le t \le T \\ x \in \Omega}} \max_{z \in \mathrm{IR}^2 \setminus \{0\}} \frac{z^T D(x,t) z}{z^T z}$$

são constantes de tamanho moderado.

- **b.**) O termo de reação λ é uma função escalar contínua e não-negativa.
- **c.**) Existe uma constante $\beta \ge 0$ tal que:

$$\lambda - \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{v} \ge \beta$$
 para quase todo $x \in \Omega$ e $0 < t \le T$.

E ainda, existe uma constante $c_b \ge 0$ de tamanho moderado³¹ tal que $\sup_{\substack{0 < t \le T \\ x \in \Omega}} |\lambda(x, t)| \le c_b \beta$.

³¹ Se $\beta = 0$, então o contaminante é considerado um traçador ideal, ou seja, $\lambda = 0$.

Desta forma, para o modelo do transporte de contaminantes, o regime é:

difusão dominante se o
$$\sup_{\substack{0 < t \le T \\ x \in \Omega}} |\mathbf{v}(x,t)| \le c_c \varepsilon$$
 e $\beta \le c'_b \varepsilon$;
reação dominante se o $\sup_{\substack{0 < t \le T \\ x \in \Omega}} |\mathbf{v}(x,t)| \le c_c \varepsilon$ e $\beta >> \varepsilon$ ou
advecção dominante se o $\sup_{\substack{0 < t \le T \\ x \in \Omega}} |\mathbf{v}(x,t)| >> \varepsilon$.

Para fundamentar a discretização por elementos finitos da equação do transporte de contaminante que estabelecerá o estimador de erro *a posteriori*, é descrito a seguinte formulação variacional da equação parabólica (4.25):

Encontrar
$$C:(0,T) \to H^1_{D^*}$$
 tal que $\int_0^T \|\nabla C(x,t)\|^2_{L^2(\Omega)} < \infty$,

$$\int_{0}^{T} \left\{ \sup_{\substack{v \in H_{2}^{1}(\Omega) \setminus \{0\} \\ \|\nabla v\|_{L^{2}(\Omega)} = 1}} \int_{\Omega} \nabla C(x,t) \cdot \nabla w(x) dx \right\}^{2} dt < \infty, \quad C(\cdot,0) = C_{0}$$

e para quase todo $t \in (0,T)$ e para todo $w \in H^1_D(\Omega)$, tem-se

$$\int_{\Omega} \partial_{t} Cw + \int_{\Omega} \nabla C \cdot D\nabla w + \int_{\Omega} v \cdot \nabla Cw + \int_{\Omega} \lambda Cw = \int_{\Omega} fw + \int_{\Gamma_{N}} gw \quad (4.26)$$

sendo $H_{D^*}^1(\Omega) = \{ v \in H^1 : v = C_D \text{ sobre } \Gamma_D \}$ e $H_D^1(\Omega) = \{ v \in H^1 : v = 0 \text{ sobre } \Gamma_D \}.$

As hipóteses **a.**), **b.**), **c.**) e condições de regularidades sobre f e g, implicam que o problema (4.26) admite uma solução única [VERFÜRTH, 2008].

A norma de energia associada a este problema variacional é

$$\|\|w\| = \left\{ \varepsilon \|\nabla w\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \beta \|w\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(4.27)

sendo $\left\|v\right\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} = \int_{\Omega} \left|v\right|^{2} dx$.

A correspondente norma dual é dada por

$$\left\| \boldsymbol{\varphi} \right\|_{*} = \sup_{\boldsymbol{w} \in H_{D}^{1}(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{1}{\left\| \boldsymbol{w} \right\|} \int_{\Omega} \nabla \boldsymbol{\varphi} \cdot \nabla \boldsymbol{w}$$
(4.28)

A solução fraca é procurada no caso em que não é possível determinar a solução clássica do problema (4.25). Este é o caso de muitas aplicações cujos dados de entrada não apresentam a suavidade requerida ou apresentam descontinuidades do termo fonte f(x,t). Nestas circunstâncias, o problema fraco (4.26) precisa ser formulado.

4.4 ELEMENTOS FINITOS ESPAÇO-TEMPORAL PARA A EQUAÇÃO PARABÓLICA

Como foi visto na seção (4.2) para a equação do fluxo subterrâneo, a discretização por elementos finitos é baseada na partição do domínio Ω em subdomínios de formas simples que não se sobrepõem. A coleção destes subdomínios é chamada de partição \mathcal{T} e os seus membros

são os elementos K.

Nesta seção, para obter a aproximação da equação do transporte de contaminantes, algumas características e propriedades da partição \mathcal{T} precisam ser consideradas.

Uma partição ${\cal T}$ satisfaz às seguintes condições:

- i.) Da união de todos os elementos *K* de \mathcal{T} resulta o conjunto $\Omega \cup \Gamma$.
- ii.) *Equivalência Afim* Para $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, cada elemento $K \in \mathcal{T}$ é um triângulo ou um quadrilátero.
- iii.) Admissibilidade Quaisquer dois elementos de \mathcal{T} ou são disjuntos ou compartilham, no máximo, ou uma aresta completa ou um único vértice.
- iv.) *Forma Regular* Para todo elemento *K*, a razão entre o seu diâmetro h_K e o diâmetro ρ_K da circunferência inscrita em *K*, possui valor uniformemente limitado. A constante definida por $c_T = \max_{K \in \mathcal{T}} \frac{h_K}{\rho_K}$ é o *parâmetro de forma* da partição \mathcal{T} .

Esta condição de regularidade da partição \mathcal{T} implica que todos os elementos K e K', e todos as arestas E e E', nos quais compartilham no mínimo um vértice, possuem as razões $\frac{h_K}{h_{K'}}$, $\frac{h_E}{h_{E'}}$ e $\frac{h_K}{h_E}$ limitadas acima e abaixo por constantes que dependem unicamente do parâmetro de forma $c_{\mathcal{T}}$.

Para toda partição \mathcal{T} em \mathbb{R}^2 são associados aos seus elementos *K* os conjuntos:

 $\mathcal{N}_{K} \text{ conjunto dos vértices de } K;$ $\mathcal{E}_{K} \text{ conjunto das arestas de } K;$ $\mathcal{N}_{T} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}} \mathcal{N}_{K} \text{ conjunto dos vértices de todos os elementos de } \mathcal{T};$ $\mathcal{E}_{T} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}} \mathcal{E}_{K} \text{ conjunto das arestas de todos os elementos de } \mathcal{T};$ $\mathcal{N}_{E} \text{ conjunto dos vértices de uma aresta } E \in \mathcal{E}_{T};$ $\mathcal{N}_{T,\Gamma_{\Gamma}} \text{ conjunto de vértices sobre a fronteira;}$ $\mathcal{N}_{T,\Gamma_{D}} \text{ conjunto de vértices sobre a fronteira de Dirichlet;}$ $\mathcal{N}_{T,\Omega} \text{ conjunto de vértices no interior de } \Omega;$ $\mathcal{E}_{T,\Gamma} \text{ conjunto das arestas contidos na fronteira;}$ $\mathcal{E}_{T,\Gamma_{D}} \text{ conjunto das arestas contidos na fronteira de Dirichlet;}$ $\mathcal{E}_{T,\Gamma_{D}} \text{ conjunto das arestas contidos na fronteira de Neumann;}$ $\mathcal{E}_{T,\Omega} \text{ conjunto das arestas contidos na fronteira de Dirichlet;}$ $\mathcal{E}_{T,\Gamma_{D}} \text{ conjunto das arestas contidos na fronteira de Neumann;}$

interior de Ω .

A discretização temporal inicia com uma partição $\mathcal{I} = \{[t_{n-1}, t_n]: 1 \le n \le N_{\mathcal{I}}\}$ do intervalo [0,*T*] em subintervalos satisfazendo: $0 = t_0 < ... < t_{N_{\mathcal{I}}} = T$. Para todo *n* natural de $1 \le n \le N_{\mathcal{I}}$ considere $I_n = [t_{n-1}, t_n]$ o *n-ésimo* subintervalo de comprimento $\tau_n = t_n - t_{n-1} > 0$. A cada instante t_n com $0 \le n \le N_{\mathcal{I}}$ é associado:

- uma partição \mathcal{T}_n de Ω que é admissível, de equivalência afim e de forma regular;
- um espaço de elementos finitos X_n, que consiste das contínuas funções polinomiais por partes e
- a projeção π_n do espaço $L^2(\Omega)$ sobre o espaço X_n .

Se considerar o parâmetro $\theta \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]$ e as correspondentes abreviações $D^n = D(\cdot, t_n)$, $\mathbf{v}^n = \mathbf{v}(\cdot, t_n), \ \lambda^n = \lambda(\cdot, t_n), \ f^n = f(\cdot, t_n)$ e $g^n = g(\cdot, t_n)$, a aproximação totalmente discreto da equação (4.25) do transporte de contaminantes será dada por:

Encontrar
$$C_{\mathcal{T}_n}^n \in X_n$$
, $0 \le n \le N_{\mathcal{I}}$, tal que $C_{\mathcal{T}_0}^0 = \pi_0 C_0$ e para $n = 1, ..., N_{\mathcal{I}}$

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\tau_n} \left(C_{\mathcal{T}_n}^n - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) w_{\mathcal{T}_n} + \int_{\Omega} \left(\theta \nabla C_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta) \nabla C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) \cdot D^n \nabla w_{\mathcal{T}_n}$$

$$+ \int_{\Omega} \mathbf{v}^n \cdot \nabla \left(\theta C_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) w_{\mathcal{T}_n} + \int_{\Omega} \lambda^n \left(\theta C_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) w_{\mathcal{T}_n}$$

$$= \int_{\Omega} \left(\theta f^n + (1-\theta) f^{n-1} \right) w_{\mathcal{T}_n} + \int_{\Gamma_N} \left(\theta g^n + (1-\theta) g^{n-1} \right) w_{\mathcal{T}_n} \text{ para todo } w_{\mathcal{T}_n} \in X_n$$

$$(4.29)$$

A discretização acima é conhecida na literatura por esquema θ A estável [VERFÜRTH, 2008]. Segundo DONNEA e HUERTA (2004, pg 92), para valores de $\theta \ge \frac{1}{2}$ o método é incondicionalmente estável e ainda resulta no popular esquema de Crank-Nicolson se $\theta = \frac{1}{2}$, no esquema de Galerkin se $\theta = \frac{2}{3}$ e no esquema Euler implícito se $\theta = 1$.

As hipóteses enunciadas na seção 4.3 implicam que o problema discreto (4.29) admite uma única solução $(C^n_{\tau_n})_{0 \le n \le N_{\tau}}$.

4.5 UM ESTIMADOR DE ERRO RESIDUAL PARA EQUAÇÃO DO TRANSPORTE

A partir desta seção, $S \in \mathcal{T} \cup \mathcal{E}_{\mathcal{T}}$ denotará um elemento ou uma aresta e h_S o seu diâmetro. $J_E(\cdot)$ será o operador que determina o valor do salto da concentração do contaminante através da aresta $E \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}}$ na direção do vetor ortonormal \mathbf{n}_E .

Se a aresta $E \notin \Gamma$, a orientação do vetor \mathbf{n}_E não está fixa e, no entanto, $J_E(\cdot)$ dependerá desta orientação. Para evitar este tipo de problema, para φ o valor da concentração sobre a

aresta do elemento, será considerado o valor de $J_E(\mathbf{n}_E \cdot \boldsymbol{\varphi})$, pois este independe da orientação do vetor \mathbf{n}_E , conforme a figura 4.5.



FIG 4.5 – Valor da projeção independente da orientação do vetor normal

Sobre cada intervalo $[t_{n-1}, t_n]$ são definidas projeções $f_{\mathcal{I}}$ e $g_{\mathcal{I}}$ representadas pelas funções constantes por parte da seguinte maneira:

$$f_{\mathcal{I}}(\cdot,t) = \pi_n(\theta f(\cdot,t_n) + (1-\theta)f(\cdot,t_{n-1})) e$$
$$g_{\mathcal{I}}(\cdot,t) = \pi_n(\theta g(\cdot,t_n) + (1-\theta)g(\cdot,t_{n-1})),$$

o elemento residual representado por

$$R_{K} = f_{\mathcal{I}} - \frac{1}{\tau_{n}} \Big(C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \Big) + div \Big(D^{n} \nabla (\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) \Big) - \mathbf{v}^{n} \cdot \nabla \Big(\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \Big) - \lambda^{n} \Big(\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \Big)$$
(4.30)

os resíduos laterais representados por

$$R_{E} = \begin{cases} -\operatorname{J}_{E} \left(\mathbf{n}_{E} \cdot D^{n} \nabla (\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1 - \theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) \right) & \text{se } E \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}_{n},\Omega} \\ g_{\mathcal{I}} - \mathbf{n}_{E} \cdot D^{n} \nabla (\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1 - \theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) & \text{se } E \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}_{n},\Gamma_{N}} \\ 0 & \text{se } E \in \mathcal{E}_{\mathcal{T}_{n},\Gamma_{D}} \end{cases}$$
(4.31)

e a função de ponderação representada por $\alpha_s = \min\left\{h_s \varepsilon^{-\frac{1}{2}}, \beta^{-\frac{1}{2}}\right\}$ para todo elemento ou arestas $S \in \mathcal{T} \cup \mathcal{E}_{\tau}^{32}$.

³² Se $\beta = 0$ será convencionado $\beta^{-\frac{1}{2}} = \infty$.

De acordo com VERFÜRTH (2008), a parcela

$$\eta_{\tau_n}^n = \left\{ \sum_{K \in \tilde{\tau}_n} \alpha_K^2 \| R_K \|_{L^2(K)}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_{\tilde{\tau}_n}} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \alpha_E \| R_E \|_{L^2(E)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(4.32)

pode ser tomada como um indicador de erro espacial. E ainda acrescenta que o erro real, provenientes das contribuições espaciais e das contribuições temporais da aproximação totalmente discreta da equação parabólica (4.25) é dado pela seguinte expressão:

$$\hat{\eta}_{\mathcal{I}} = \left\{ \left\| C_0 - \pi_0 C_0 \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}} \tau_n \left[\left(\eta_{\mathcal{T}_n}^n \right)^2 + \left\| \left\| \mathbf{v}^n \cdot \nabla \left(C_{\mathcal{T}_n}^n - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) \right\|_*^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(4.33)

O estimador de erro residual (4.33) é apenas preliminar, pois a presença da norma dual $\|\cdot\|_{*}$, definida pela equação (4.28), torna impraticável a computação do erro da solução numérica. A obtenção de um estimador de erro mais prático será obtida através da substituição desta norma dual por uma quantidade equivalente e computável.

Para este fim, dois regimes de advecção serão considerados de acordo com a influência do termo advectivo: um regime de pequena advecção e um regime de grande advecção.

4.5.1 Estimando o erro no Regime de Pequena Advecção

Segundo VERFÜRTH (2008), a equação de advecção-difusão-reação pode ser subdividida em dois regimes principais, em função dos parâmetros da equação (4.25), o regime de pequena advecção e o regime de grande advecção.

- se $\sup_{0 \le t \le T} \|\mathbf{v}(\cdot, t)\|_{L^{2}(\Omega)} \lesssim \varepsilon^{\frac{1}{2}} \max \{\varepsilon, \beta\}^{\frac{1}{2}}$, o regime é considerado de *pequena advecção* e
- se $\sup_{0 \le t \le T} \|v(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} >> \varepsilon^{\frac{1}{2}} \max{\{\varepsilon, \beta\}}^{\frac{1}{2}}$ o regime é considerado de *grande advecção*.

Baseado no campo de velocidades do fluxo de água subterrânea, os exemplos numéricos da seção 3.4 mostraram que o regime apropriado ao transporte de contaminantes em meio saturado é o regime de pequena advecção. Uma vez que os problemas testes abordados neste trabalho possuem campo de velocidades uniforme \mathbf{v} , a condição $\lambda - \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{v} \ge \beta$ é satisfeita simplesmente se considerar $\lambda = \beta$, recaindo, desta maneira, na definição dos regimes apresentado na página 23.

Para o regime de pequena advecção, a utilização de técnicas de estimativas inversas³³ faz com que a norma dual da equação (4.29), que é o termo crítico $\| \mathbf{v}^n \cdot \nabla (C_{\tau_n}^n - C_{\tau_{n-1}}^{n-1}) \|_*$, seja limitada pela computável norma de energia $\| C_{\tau_n}^n - C_{\tau_{n-1}}^{n-1} \|$ definida por (4.27).

A obtenção dessa limitação considera a constante c_{Ω} que aparece na desigualdade de Poincaré, ou seja, a constante tal que:

$$\|w\|_{0} \leq c_{\Omega} \|\nabla w\|_{0} \qquad \forall w \in H_{D}^{1}(\Omega)$$
(4.34).

Com a estimativa (4.34) e a norma de energia (4.27) válida $\forall u, w \in H_D^1(\Omega)$ tem-se:

$$\left(\mathbf{v} \cdot \nabla u, w \right) < \left| \mathbf{v} \right| \left\| \nabla u \right\|_{0} \left\| w \right\|_{0} \le \left| \mathbf{v} \right| \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}} \left\| u \right\| \min \left\{ c_{\Omega} \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\beta}^{-\frac{1}{2}} \right\} \left\| w \right\|$$

$$\le \max \left\{ 1, c_{\Omega} \right\} \mathbf{v} \left| \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}} \min \left\{ \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\beta}^{-\frac{1}{2}} \right\} \left\| u \right\| \right\| \left\| w \right\|$$

$$= \max \left\{ 1, c_{\Omega} \right\} \underbrace{\mathbf{v} \left| \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}} \max \left\{ \mathcal{E}, \boldsymbol{\beta} \right\}^{-\frac{1}{2}} }_{\le c_{c}} \left\| u \right\| \left\| w \right\|$$

$$\le \max \left\{ 1, c_{\Omega} \right\} c_{c} \left\| u \right\| \left\| w \right\|$$

$$(4.35)$$

Aplicando a estimativa (4.35) na definição (4.28) da norma dual, tem-se:

$$\left\| \mathbf{v}^{n} \cdot \nabla \left(C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) \right\|_{*} \leq \max\{1, c_{\Omega}\} c_{c} \left\| C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right\|$$
(4.36)

E ainda, a norma de energia $\|C_{\tau_n}^n - C_{\tau_{n-1}}^{n-1}\|$ é um indicador de erro temporal [VERFÜRTH, 2008] dado por:

$$\eta_{t}^{n} = \left\| \left\| C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right\| \right\| = \left\{ \varepsilon \left\| \nabla \left(C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) \right\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \beta \left\| C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(4.37)

Desta forma, obtém-se o seguinte estimador de erro residual para a equação parabólica (4.25) em regime de pequena advecção:

33 Se
$$||u|| = \left\{ \varepsilon ||\nabla u||_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \beta ||u||_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right\}^{\frac{1}{2}}$$
 então $||\nabla u||_{0} ||w||_{0} \le \varepsilon^{-\frac{1}{2}} ||u|| \min \left\{ c_{\Omega} \varepsilon^{-\frac{1}{2}}, \beta^{-\frac{1}{2}} \right\} ||w|| \qquad \forall u, w \in H_{D}^{1}(\Omega)$

$$\eta_{\mathcal{I}} = \left\{ \left\| C_0 - \pi_0 C_0 \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}} \tau_n \left[\left(\eta_{\mathcal{T}_n}^n \right)^2 + \left(\eta_t^n \right)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(4.38)

Se o regime for o de grande advecção, estimativas inversas não limitam a norma dual. VERFÜRTH (2008) propõe que o erro da aproximação seja obtido também por contribuições de um estimador de erro para equações estacionárias de reação-difusão. Se comparado ao caso de pequena advecção, no regime de grande advecção é resolvido um problema elíptico discreto adicional, ou seja, o esforço computacional para obter o estimador de erro requer um passo de tempo adicional em cada nível temporal, pois é necessário determinar a solução de um problema auxiliar discreto estacionário da equação de reação-difusão [VERFÜRTH, 2006].

4.6 IMPLEMENTAÇÃO EM LINGUAGEM JAVA

Nesta seção são descritos os procedimentos necessários para a obtenção do código computacional que implementa a solução FEM das equações governantes do capítulo 3 e os seus respectivos estimadores de erro.

A aproximação da equação do fluxo emprega o método de Galerkin convencional e a aproximação da equação do transporte de contaminantes implementa o esquema S^3 (*Symmetrical Streamline Stabilization*) [WENDLAND E SCHMID, 2000] para a estabilização da solução numérica FEM, C(**x**,t), quando o regime do transporte de contaminantes for o de advecção dominante. Maiores detalhes sobre o esquema S^3 são descritos no ANEXO II.

Ambas as aproximações iniciam com a discretização do domínio Ω em elementos Ω_e^h . Estes elementos Ω_e^h serão freqüentemente descritos por simples áreas geométricas tais como triângulos ou quadriláteros. Os vértices destes simples objetos geométricos - os *nós*, possuem coordenadas nodais indicadas por $\hat{\mathbf{x}} = p[i][j]$.

Um objeto p é instanciado pelo seu construtor

sendo que a classe Point2D define a representação pontual da localização do $n \dot{o}$ na coordenada espacial (x,y).

O nó é então criado por:

```
public static Node2D createNode(Point2D p) {
    return new Node2D(p);
}
```

Se o elemento Ω_e^h é quadrilátero ele será criado por:

```
simplices.add(new Point2D[] {p[i-1][j-1],p[i][j-1],p[i][j],p[i-1][j]});
```

Se for triangular então serão criados dois a dois por:

```
simplices.add(new Point2D[] {p[i-1][j-1],p[i][j-1],p[i-1][j]});
simplices.add(new Point2D[] {p[i-1][j],p[i][j-1],p[i][j]});
```

A ordem da numeração global dos *nós* é no sentido anti-horário iniciando-se pelo *nó* inferior esquerdo (ordenação convencional utilizada no FEM).

A discretização do domínio global Ω^h basicamente consiste da coleção de todos os nós e elementos. A geração da malha inicial e a correspondente numeração dos elementos são obtidas por:

```
mesh = new Mesh(simplices, edges, constraintPoints);
mesh.enumerateElements();
```

A figura 4.6 ilustra a numeração de uma malha inicial que contém nove elementos quadriláteros e 16 nós.



FIG 4.6 - Discretização do domínio global visando a minimização da banda das matrizes globais

As condições de fronteira de Dirichlet, ou condições *essenciais* e as de Neumann, ou condições *naturais*, também fazem parte do código. Especificamente para o transporte de contaminantes, estas condições são impostas por:

```
concBC.put(node.id,solute); // poluição pontual
concBC.put(node.id,CONCL); // poluição difusa
flowBC.put(node.id,FLOW); // fluxo na fronteira
```

sendo estes objetos criados por classes predefinidas no *javadoc*, ou seja,

```
concBC = new HashMap<Integer, Double>();
flowBC = new HashMap<Integer, Double>();
```

Esses objetos indicam se os valores armazenados correspondem às condições de contorno essenciais em Γ_D e ou às condições de contorno naturais em Γ_N .

A vantagem desta metodologia POO está inserida no fato que qualquer atualização do código, relacionado à implementação não-estacionária, de heterogeneidades ou de uma possível criação de novos nós e elementos, podem ser obtidas por mudanças nas classes mais simples.

Em [WORKBOOK, pg 273] cita-se a importância desta modelagem fundamentada em estruturas hierárquicas:

[...] Em geral, o método de programação orientada a objetos não somente usa abstração para organizar dados e funções (...), ela também ajuda a classificar os módulos do software, os quais são objetos modelados do mundo real em uma estrutura hierárquica. Notemos que a classificação do pensamento em estrutura hierárquica é uma das mais poderosas ferramentas que o ser humano tem para a construção do conhecimento.

A essência do código de elementos finitos é a *formulação do elemento*. A parte relevante da formulação variacional da equação do transporte foi discutida na seção 4.3 e a formulação integral da equação do fluxo encontra-se na seção 4.2. Cada equação diferencial parcial possui uma formulação do elemento diferente. No entanto, existe um impacto no código ocasionado pela mudança de um problema para outro.

No paradigma da POO é reconhecido que uma *sub-rotina elemento* deva ser utilizada para adquirir um módulo de reposição. E esta flexibilidade para a formulação do elemento pode ser obtida através do *polimorfismo* suportado na linguagem de implementação JAVA.

A classe básica para grupo de nós, arestas e faces contidas no modelo é a classe pública FE2DAttributes. A classe FE2DFaces, do pacote Fe2d – conforme a figura 4.7, é um recipiente para as faces, para as montagens das matrizes globais de rigidez e de massa e é definida como uma extensão da classe FE2DAttributes.

A classe FE2DFaces contém um vetor de figuras geométricas (Simplex2D) que correspondem aos elementos triangulares ou quadriláteros, e contém um vetor com as funções de forma do elemento. As funções de forma são instanciadas de acordo com a geometria do elemento.

54

Java - jump1.1.2Arena/src/org/arena/water/gwfem2d/flow2d/tests/TestSuite.java - Eclipse SDK
File Edit Source Refactor Navigate Search Project Run Window Help
[□・□ △ □ □・Q・Q・ 20 = 00 - 20 - 10 - 10 - 10 - 10 - 10 - 10 -
📲 Package Explorer 🙁 🍃 Hierarchy
a 🕀 gwfem2d
fe2d
FE2DAttributes.java
FE2DEdges.java
FE2DFaces.java
FE2DLocalShapeFunction.java
FE2DModel.java
G FE2DModel
♦ edgeAttributes
faceAttributes
♦ globalLoadVector
🔶 globalMatrix
nodeAttributes
FE2DModel(FE2DFaces, FE2DEdges, FE2DNodes, Map <in< p=""></in<>
♦ createGlobalLoadVector()
♦ createGlobalMatrix()
getEdgeProperties()
getElemProperties()
getNodeProperties()
getValues()
📀 setBoundaryConditions()
♦ setCauchyBC()
🔶 setDirichletBC()
🔶 setNeumannBC()
💊 setValues(double[])
solve()
solveEquationsSystem()
FE2DModelTransient.java
FE2DNodes.java
FE2DShapeFunctionElement.java
FE2DShapeFunctionPoint.java
⊳ 🔠 flow2d
⊳ 🔠 transport2D
D GWInterface.iava

FIG 4.7 - atributos e métodos compartilhados entre o modelo computacional e a classe FE2DModel do pacote Fe2d

A integração em cada face é determinada nos pontos de Gauss.

. .

Para elementos quadriláteros, quatro pontos são estabelecidos para a integração numérica. De acordo com [SUTRA, 2003 PG. 84], as coordenadas destes pontos são:

$$\left\{ \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \right\}, \text{ todas com peso } 1.$$

Para elementos triangulares, os pontos escolhidos no interior do elemento estão exibidos na tabela 4.1.

A classe FE2DFaces é uma classe abstrata.

public abstract class FE2DFaces extends FE2DAttributes {

Peso w_i	Coord x_i	Coord y_i
0,197168783	0,211324865	0,166666667
0,197168783	0,211324865	0,622008467
0,052831216	0,788675134	0,044658198
0,052831216	0,788675134	0,1666666667

Tabela 4.1 – Pontos de Gauss e os respectivos pesos sobre um triângulo Adaptado de [RATHOD *et al.*, 2004]³⁴

Os atributos e os métodos compartilhados em todas as instâncias do modelo computacional estão contidos na classe FE2DModel. Estas instâncias podem ser obtidas da combinação de:

- caso estacionário ou caso transiente;
- região de solo saturado ou região de solo não-saturado;
- aqüífero livre ou aqüífero confinado e
- implementação da equação de fluxo subterrâneo ou da equação do transporte de contaminantes.

O preâmbulo da classe é:

```
public class FE2DModel extends Observable {
    protected FE2DEdges edgeAttributes;
    protected FE2DFaces faceAttributes;
    protected Matrix globalLoadVector;
    protected Matrix globalMatrix;
    protected FE2DNodes nodeAttributes;
```

e a figura 4.7 detalha os atributos e métodos da classe FE2DModel. A classe ainda contém uma lista de *simplices* (triângulos ou quadriláteros), arestas e nós (com os respectivos atributos), a matriz global e o vetor carga da equação aproximada.

4.6.1 Implementação da Equação do Fluxo de Água Subterrânea

A resolução numérica do modelo matemático do fluxo horizontal de água subterrânea descrito na seção 4.2 e dado pela equação (4.11) pg. 39, é implementado na seguinte classe pública: public class FE2DModelTransient extends FE2Dmodel {.

³⁴ Rathod H. T. *et al*, 2004 Gauss Legendre Quadrature over Triangle Journal Indian Inst. Sci., 84, 183-188.

Os principais parâmetros da classe, a descrição e a correspondente indexação numa malha inicial são apresentados na tabela 4.2.

PARÂMETRO	DESCRIÇÃO	INDEXAÇÃO	
elements	Vetor de elementos finitos 2D com <i>ids</i> de 0 a n_e -1	n _e é o número de elementos não é permitido intervalo na numeração elements[i].id = i	
edges	Vetor de elementos finitos 1D com <i>ids</i> de 0 a n_g -1	n _g é o número de arestas não é permitido intervalo na numeração edges[i].id = i	
nodes	Vetor de nós numerados de 0 a n_n -1	n _n é o número de nós não é permitido intervalo na numeração nodes[i].id = i	
conductivity	Vetor cujas entradas são matrizes 2x2 de condutividade para os elementos	<pre>elements[i].getConductivity () = conductivity[i]</pre>	
storage	Vetor contendo os coeficientes de armazenamento para os elementos	<pre>elements[i].getStorage() = storage[i]</pre>	
initialHeads	Vetor contendo o potencial hidráulico inicial em cada nó da malha	<pre>nodes[i].getInitialHead() = initialHead[i]</pre>	
concentratedLoads	Vetor de cargas concentradas	<pre>concentratedLoads. put(nodes.get(i).id, LOAD) // in the well coordinates</pre>	
basis	Vetor de elevação da base do aqüífero em cada nó da malha	<pre>basis.length == nodes.length nodes[i].getBasis() = basis[i]</pre>	
headBC	Aplica a condição essencial se o nó pertence à fronteira de Dirichlet	<pre>headBC.put(node.id,HEAD); // in Gama_D</pre>	
flowBC	Aplica a condição natural se o nó pertence à fronteira de Neumann	<pre>flowBC.put(node.id, FLOW); // in Gama_N</pre>	

1 a b c a = 1 a a a a c c b b a b c c b u a m b c m c a c a c u b m b c c c u c a c a c a c a c u b c c c c c c c c c c c c c c c c c	 Parâmetros básicos da implementação do modelo de fluxo de á 	gua subterrâi
---	---	---------------

package org.arena.water.gwfem2d.fe2d;

Para comparação da solução numérica da implementação JAVA com a correspondente solução analítica, a figura 4.8 apresenta as linhas de comando da implementação da solução de Theis, considerando um aqüífero confinado, homogêneo, de características isotrópicas e dimensão infinita (subseção 3.1.2).

A variável Theis é definida como sendo booleana para que a comparação entre as soluções seja realizada quando o propósito do cálculo é a verificação do código do fluxo subterrâneo. Neste caso, a variável é inicializada como verdadeira, ou seja, boolean Theis = true;. Caso contrário, se a implementação do código considera aqüíferos com outras características ou não necessita de uma verificação, a inicialização da variável é boolean Theis = false;.

Em linhas gerais, a implementação da solução analítica de Theis é obtida por:

```
if (Theis) {
       System.out.println(
       Head [m] Theis solution [m] value of u
for (int i = 0; i < nc; ++i) {</pre>
"Node
                                                     Error [m] Distance [m]
                                                                                coordinates");
               for (int j = 0; j < nr; ++j) {</pre>
                      int idx = (i * nc) + j;
                      Node2D p = nodes[idx];
                      double radius = Math.hypot(XWELL-p.x,YWELL-p.y);
                      if (radius == 0.0) radius = 0.314; // radius of well [m]
                       double u = radius*radius*SS/(4.0*TT*Step);
                      double Wu=0;
                      if (u<=1){
                               Wu = (-0.57721566-Math.log(u)+0.99999193*u
                                    -0.24991055*Math.pow(u,2)+0.05519968*Math.pow(u,3)
                                    -0.00976004*Math.pow(u,4)+0.00107857*Math.pow(u,5));
                      if (u>1){
                               Wu = (Math.pow(u,4)+8.5733287401*Math.pow(u,3)
                                   +18.059016973*Math.pow(u,2) +8.6347608925*u+0.267773743)
                                   /(Math.pow(u,4)+9.5733223454*Math.pow(u,3)
                                   +25.6329561486*Math.pow(u,2)
                                   +21.0996530827*u+3.9584969228)/(u*Math.pow(Math.E,u));
                      double drawDown = LOAD/(4.0*Math.PI*TT)*Wu;
                      double theisSolution = HINIT+drawDown;
                      double error = heads[idx]-theisSolution;
                                                                  " + df.format(heads[idx]));
                       System.out.print(dfl.format(idx) + "
                      System.out.print("
                                              "+ df.format(theisSolution) +"
                              df.format(u)+ "
                                                     "+ df.format(error));
                      System.out.println("
                                                    "+ df.format(radius) +"
                                                                                   (" +
                              dfl.format(p.x) + ";" + dfl.format(p.y) + ")");
               }
       Step = Step + timeStep;
}
                            FIG 4.8 – Linhas de comando da implementação JAVA
                              da solução analítica de Theis contidas em
```

package org.arena.water.gwfem2d.flow2d.tests;

4.6.2 Implementação do Estimador para a Equação do Fluxo

O estimador de erro *a posteriori* para a equação do fluxo de água subterrânea emprega as técnicas de recuperação do gradiente, descritas na subseção 4.2.2.

Quando código é iniciado pelo método JAVA descrito na figura 4.9, estabelece-se uma interface com a classe pública FE2DModelTransientZZ responsável pela determinação do erro numérico de acordo com as técnicas clássicas apresentadas por ZIENKIEWICZ e ZHU (1992).

```
public void run() {
    ArrayList<Simplex2D> elements = mesh.getElements();
    FE2DModelTransientZZ flowModel = new FE2DModelTransientZZ(
    new FL2DFacesTransientConfined(elements.toArray(new Simplex2D[elements.size()]),
    transmissivity, storage), new FL2DEdges(null),new FL2DNodesConfined(nodes.toArray(
    new Node2D[nodes.size()]),initialHeads, basis),concentratedLoads, headBC, flowBC);
    flowModel.addObserver(this);
    flowModel.setCalculationTime(time, timeStep);
    flowModel.solve();
}
    FIG 4.9 - Interface entre a classe pública FE2DModelTransientZZ
        e as demais definições para o cálculo da solução numérica
```

58

Desta forma, a cada passo de tempo, o potencial hidráulico do modelo de entrada é calculado e, se os elementos da malha são quadriláteros, o gradiente hidráulico é determinado pela rotina apresentada na figura 4.10, que implementa a equação (4.16).

```
for (int i = 0; i<n; i++) {
    int nodeID = sNodes[i].id;
    double head = nodesHeads[nodeID];
      gradu_x += (0.5)*(Math.pow(-1.0, (2*i+1)%3))*head;
      gradu_y += (-0.5)*(Math.pow(-1.0, (2*i+2)%5))*head;
}
det[elemID] = 2.0*ex*ey;
gradu[elemID] = new Point2D.Double(gradu_x, gradu_y);</pre>
```

FIG 4.10 – Rotina JAVA para determinar, em cada elemento da malha, o gradiente hidráulico descrito na equação (4.16)

Após a determinação do gradiente hidráulico nos elementos da malha, o erro da solução numérica é calculado, em cada passo de tempo, pela classe pública zz. A figura 4.11 especifica a rotina JAVA destinada à determinação do erro numérico da equação do fluxo.

```
for (Simplex2D s : simplices) {Node2D[] sNodes = s.getPoints();
        int n = sNodes.length;
       Point2D.Double sxy = new Point2D.Double();
       for (int i = 0; i<n ; i++) {</pre>
               Point2D.Double p = aver_grad[sNodes[i].id];
               sxy.setLocation(sxy.x + p.x, sxy.y + p.y);
       Point2D.Double ssxy = new Point2D.Double();
       for (int i = 0; i<n ; i++) {</pre>
               Point2D.Double p0 = aver_grad[sNodes[i].id];
               Point2D.Double p1 = aver_grad[sNodes[(i+1)%n].id];
               sxy.setLocation(sxy.x + (p0.x * p0.x), sxy.y + (p0.y * p0.y) );
sxy.setLocation(sxy.x + (p0.x * p1.x), sxy.y + (p0.y * p1.y) );
       int elemID = s.id;
       double area = 0.5*det[elemID];
       Point2D.Double p = gradu[elemID];
       Point2D.Double grad = new Point2D.Double (p.x / det[elemID], p.y / det[elemID]);
       double error = area*( grad.x * grad.x + grad.y * grad.y +
                        (1./6.)*(ssxy.x+ssxy.y) - (2./3.)*(sxy.x*grad.x + sxy.y*grad.y));
       error = Math.sgrt(Math.abs(error));
       if( error > etamax ){
            etamax = error;
            IDmax = elemID;
       if(error < etamin)
          etamin = error;
           IDmin = elemID;
       etasumm += error;
       etaquad += (error * error);
       eta[elemID] = error;
}
                       FIG 4.11 – Rotina JAVA para calcular o erro numérico ZZ
```

da equação do fluxo em cada elemento da malha

A verificação e aplicação do estimador de erro *a posteriori* para a equação do fluxo são apresentadas no ANEXO III [FIRMIANO e WENDLAND, 2009].

4.6.3 Implementação da Equação do Transporte de Contaminantes

A *reusabilidade* da POO para o transporte de contaminantes emerge naturalmente da *abstração* e *modularidade* da implementação FEM do fluxo das águas subterrâneas³⁵.

Uma vez que a *herança* POO disponibiliza partes comuns para a definição de uma *classe básica* mais geral na hierarquia de classes, os arquivos do pacote transport2D: TP2DModel.java e TP2DFacesTransient.java seguem, respectivamente, como extensões das classes FE2DModelTransient.java e FE2DFaces.java do pacote FE2D. Ou seja:

public class TP2DModel extends FE2DModelTransient {

e

public class TP2DFacesTransient extends FE2DFaces {

As classes do pacote **Transport2D** obtêm a solução numérica da equação parabólica (4.25) do transporte de contaminantes descrita na seção 4.3.

A herança POO é utilizada na geração e orientação dos nós e elementos da malha do domínio discretizado; na montagem (*assembling*) das matrizes de massa, de rigidez e do vetor de cargas nodais para a equação do transporte, e ainda, na implementação do esquema S^3 (*Symmetrical Streamline Stabilization*) [WENDLAND E SCHMID, 2000] (ANEXO II) para a estabilização da solução numérica FEM, C(**x**,t), quando o regime do transporte de contaminantes for de advecção dominante [NATVIG *et al.*, 2007].

Os principais parâmetros das classes públicas: TP2DModel e TP2DFacesTransient, e suas correspondentes descrições são apresentados na tabela 4.3. Com as extensões descritas acima, os atributos dos parâmetros da tabela 4.2 (com exceção de conducivity e storage) são herdados da classe FE2DModelTransient.

Inicialmente a implementação poderia considerar um aqüífero confinado cuja curva de rebaixamento encontra-se em regime permanente. No entanto, o fluxo de velocidades proveniente da implementação da subseção (3.1.1) seria útil para compor os dados de entrada para a resolução da equação do transporte de contaminantes.

³⁵ Maiores detalhes sobre reusabilidade, abstração, modularidade e herança POO para o método dos elementos finitos são encontrados em [ZEILER, 1999], [AKIN e SINGH, 2002] ou [HEIMSUND, 2005].

PARÂMETRO	DESCRIÇÃO	INDEXAÇÃO	
dispersivity	Vetor cujas entradas são matrizes 2x2 das dispersividades para os elementos	<pre>dispersivity[i] = new Matrix(new double[][]{{Dx,Dxy},{Dxy,Dy}});</pre>	
velocity	Vetor 2D contendo a velocidade real do fluxo de água subterrânea em cada elemento finito da malha.	<pre>velocity[i] = new Matrix(new double[][]{{Vx,Vy}});</pre>	
porosity	Vetor 1D de valores da porosidade efetiva do solo.	<pre>porosity[i] = poro; //uniform value</pre>	
lambda	Escalar que implementa o termo de decaimento de 1ª. ordem.	<pre>public double getLambda() { return lambda;</pre>	
theta	Escalar da aproximação temporal.	<pre>this.setTheta(1.0/2.0); //Crank-Nicolson</pre>	

Tabela 4.3 – Parâmetros básicos da implementação do modelo de transporte de contaminantes

package org.arena.water.gwfem2d.transport2D

4.6.4 Implementação de uma solução analítica para o problema do transporte

A verificação da solução numérica da equação do transporte conta com as seguintes hipóteses sobre o aqüífero em estudo:

- o aqüífero possui extensão infinita e a fonte não pontual de contaminação tem comprimento finito;
- a densidade e a viscosidade do fluido são constantes;
- o contaminante está sujeito a transformação química de primeira ordem (se o contaminante é conservativo, então λ = 0);
- o fluxo uniforme ocorre na direção *x* com velocidade constante *v*;
- os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal (D_x, D_y) são constantes.

Essas restrições visam a comparação da solução JAVA da equação do transporte de contaminantes com uma solução analítica 2D disponível na literatura [WEXLER,1992].

As condições iniciais e de contorno para obter a solução analítica do transporte de contaminantes em aqüíferos, que obedecem às considerações acima, são dadas por:

$$C = C_0, \qquad x = 0 \text{ e } Y_1 < y < Y_2$$

$$C = 0, \qquad x = 0 \text{ e } y < Y_1 \text{ ou } y > Y_2$$

$$C = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \qquad y = \pm \infty$$

$$C = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \qquad x = \infty$$

sendo Y_1 a ordenada do limite inferior da fonte de contaminante em x = 0 e

 Y_2 a ordenada do limite superior da fonte de contaminante em x = 0.

Assim, segundo WEXLER (1992) a solução analítica 2D é expressa por:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 x}{\sqrt{\pi D_x}} e^{\left[\frac{vx}{2D_x}\right]} \int_0^{t^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{Z^3} e^{\left[-\left(\frac{v^2}{4D_x} + \lambda\right)Z^4 - \frac{x^2}{4D_xZ^4}\right]} \left\{ erfc\left[\frac{Y_1 - y}{2Z^2\sqrt{D_y}}\right] - erfc\left[\frac{Y_2 - y}{2Z^2\sqrt{D_y}}\right] \right\} dZ \quad (4.39)$$

O termo referente à integral da solução acima é aproximado pela fórmula de translação Gauss-Legendre³⁶, ou seja, por:

$$\int_{a}^{b} f(t)dt = \int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) \frac{b-a}{2} dx$$

$$\approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^{N} \omega_{N,k} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x_{N,k}\right)$$
(4.40)

sendo $x_{N,k}$ as *n* raízes do polinômio de Legendre e $\omega_{N,k}$ os respectivos pesos.

Na implementação computacional adotou-se n = 8.

A função especial, a função erro complementar erfc(x), que aparece na solução analítica 2D, é dada por:

$$erfc(x) = 1 - erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x}^{\infty} e^{-t^{2}} dt$$
 (4.41)

sendo $erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{n!(2n+1)}$ a função erro que goza das propriedades:

³⁶ Mathews J. H., Fink K. K. Numerical Methods Using Matlab, Prentice Hall Inc, New Jersey, USA 2004,

$$erf(\infty) = 1 \ e \ erf(-x) = -erf(x) \tag{4.42}$$

A figura 4.12 ilustra as linhas de comando que implementam a função erro complementar erfc(x).



FIG 4.12 – Implementação da função erro complementar e o correspondente gráfico gerado pelo MAPLE 12

A figura 4.13 exibe as linhas de comando da implementação JAVA da solução analítica (4.41) nos referidos pontos de Legendre.

```
if (AnalyticalSolution){
    double[] legendrePoint; // 8 pontos de Legendre para integração numérica
    double[] legendreWeight; // 4 pesos de Legendre para integração numérica
    legendrePoint = new double[] {-0.1834346424956498049394761,-0.5255324099163289858177390,
      -0.7966664774136267395915539, -0.9602898564975362316835609, 0.1834346424956498049394761,
       0.5255324099163289858177390, 0.7966664774136267395915539, 0.9602898564975362316835609};
    legendreWeight = new double[] {0.3626837833783619829651504, 0.3137066458778872873379622,
       0.2223810344533744705443560\ ,\ 0.1012285362903762591525314\ ,\ 0.3626837833783619829651504
       0.3137066458778872873379622, 0.2223810344533744705443560, 0.1012285362903762591525314
    tt = tt + timeStep;
    double limSup = Math.pow(tt,0.24)/2; // b/2 da aproximação da integral
    double Y1 = YWELL-Ymed*YWELL/Math.pow(2, stepRef);
    double Y2 = YWELL+Ymed*YWELL/Math.pow(2, stepRef);
   DecimalFormat df1 = new DecimalFormat("##.##########");
    for (int i = 0; i < nc; ++i) {
       for (int j = 0; j < nr; ++j) {</pre>
               int idx = (i * nc) + j;
              Node2D p = nodes[idx];
              double cx = p.x;
               double cy = p.y;
               double integral = 0;
               for (int k = 0; k < legendrePoint.length; ++k){</pre>
                      double Z = limSup*(legendrePoint[k]+1); // Variável de Integração
                      integral += legendreWeight[k]/Math.pow(Z, 3)*Math.exp(-(Vx*Vx/(4*Dx)
                                  +lambda)*Math.pow(Z, 4)-cx*cx/(4*Dx*Math.pow(Z, 4)))
                                   *(erfc((Y1-cy)/(2*Z*Z*Math.pow(Dy, 0.5)))
                                   -erfc((Y2-cy)/(2*Z*Z*Math.pow(Dy, 0.5))));
               double conc2D = solute/Math.pow(Math.PI*Dx, 0.5)*cx
                               *Math.exp(Vx*cx/(2*Dx))*limSup*integral;
               double error = conc2D - concs[idx];
                 concs[idx] = conc2D; // Imprimir só a solução analítica
               System.out.print(df.format(concs[idx]) + ";");
       }
  }
}
```

FIG 4.13 – Implementação JAVA de uma solução analítica 2D para o transporte de contaminantes em água subterrânea

4.6.5 Resultado Numérico versus Solução Analítica

Nesta subseção é apresentada uma solução numérica sobre uma malha inicial de 1024 elementos quadriláteros dispostos sobre 1089 *nós* e com grau de liberdade³⁷ igual a 1056. A finalidade encontra-se na comparação da solução numérica com a respectiva solução analítica.

Os valores de entrada do modelo numérico da migração de contaminantes através de um aqüífero situado em Long Island, N.Y. estão disponíveis em PINDER [1973 *apud* WEXLER, 1992]³⁸. Estas variáveis são:

Limite inferior da fonte de contaminante $Y_1 = 635 m$ Limite superior da fonte de contaminante $Y_2 = 865 m$ Velocidade da água subterrânea v = 1,42 m/dia Dispersividade longitudinal $\alpha_L = 70 m$ Dispersividade transversal $\alpha_T = 14 m$ Fonte de concentração inicial $C_0 = 40 mg/L$

A distância entre as fronteiras laterais é suficiente para que a área de interesse considere o aqüífero como sendo de comprimento infinito. Para os valores acima, os termos da dispersão são dados por:

Dispersão na direção $x D_x = 100 m^2/d$ Dispersão na direção $y D_y = 20 m^2/d$

As concentrações determinadas pela solução analítica (4.41) estão distribuídas na figura 4.14 (a) ao considerar um domínio de extensões retangulares iguais a 3.000 *m* por 1.500 *m* e 5 anos de simulação (t = 1.826 dias).

A mesma simulação numérica foi implementada no código JAVA de modo que as concentrações obtidas são apresentadas na figura 4.14 (b).

³⁷ Uma vez que condições iniciais e de contorno foram impostas em 33 nós da fronteira esquerda do domínio retangular, as bibliotecas disponíveis no JAMA resolveram o sistema de equações lineares de ordem 1056x1056 utilizando o método direto de Decomposição LU. O Método de Cholesky também faz parte do JAMA.

³⁸ Pinder, G.F., 1973, A Galerkin-finite element simulation of groundwater contamination on Long Island, New York Water Resources Research, v. 9, no. 6, p. 1657-1669.



Evidentemente, a frente de contaminação da solução numérica (b) apresenta um atraso bastante considerável. A observação desta discrepância só foi possível com a disponibilização de uma solução analítica (a). No entanto, para a maioria dos problemas de transporte de contaminantes em água subterrânea, em função de heterogeneidades, anisotropias e domínios com formas irregulares, soluções analíticas não estão disponíveis na literatura. Este fato remete à grande importância do estudo dos estimadores de erros *a posteriori* para análise e verificação da qualidade da solução numérica de uma equação parabólica.

4.6.6 Implementação do Estimador de Erro Residual

Semelhante ao que foi apresentado para a equação do fluxo, o estimador residual para a equação do transporte de contaminantes é obtido pela interface com a classe pública FE2DModelTransientRESIDUAL, conforme a figura 4.15.

```
public void run() {
       ArrayList<Simplex2D> elements = mesh.getElements();
       FE2DModelTransientRESIDUAL concModelRes = new FE2DModelTransientRESIDUAL(
       new TP2DFacesTransient(elements.toArray(new Simplex2D[elements.size()]),
                                lambda, dispersivity, velocity),
       new FL2DEdges(null),
       new FL2DNodesConfined(nodes.toArray(new Node2D[nodes.size()]), initialConcs,
                              basis), concentratedLoads, concBC, flowBC);
       concModelRes.addObserver(this);
       concModelRes.setCalculationTime(time, timeStep);
       concModelRes.solve();
}
       // fim run
                FIG 4.15 – Interface entre a classe pública FE2DModelTransientRESIDUAL
                      e as demais definições para o cálculo da solução numérica
                      estabelecida no inicio do código pelo método run(). Os dois
                      métodos são mantidos para futuros testes de eficiência do
                         estimador de erro residual da equação do transporte.
```

O estimador baseado na recuperação do gradiente será empregado na solução numérica da equação do transporte para futuras comparações com os resultados obtidos pelo estimador residual em regime de pequena advecção. No entanto, estratégias adaptativas serão realizadas com o estimador residual, que é adequado à característica parabólica da equação (4.25).

Para verificação do tipo de regime de transporte, conforme descritos na subseção 4.5.1, o cálculo do menor autovalor da matriz de dispersão \mathbf{D}_{2x2} é realizado na classe JAVA inicial que fornece os dados de entrada para o código (figura 4.16).

A determinação dos autovalores da matriz $\mathbf{D}_{2x2} = \begin{pmatrix} Dx & Dxy \\ Dxy & Dy \end{pmatrix}$ é realizado com a implementação de um cálculo direto feito por:

```
eigenValue1 = (Dx+Dy+Math.sqrt((Dx-Dy)*(Dx-Dy)+4*Dxy*Dxy))/2.0;
eigenValue2 = (Dx+Dy-Math.sqrt((Dx-Dy)*(Dx-Dy)+4*Dxy*Dxy))/2.0;
```

sendo Dx, Dy e Dxy as respectivas dispersões direcionais.



O estimador de erro determinado pelo elemento residual (4.30) inserido na equação (4.38) é implementado na classe privada elementResidual cujas principais linha de comando estão descritas na figura 4.17. Neste método também é feito o balanço de massa tanto no nível do nó, quanto no nível do elemento, utilizando as funções de base. Este balanço determina a quantidade de contaminante na malha atual e compara com a quantidade calculada no passo de tempo anterior.

A cada iteração, os valores das concentrações concs[idx] determinadas são armazenadas no vetor concInit[idx], sendo o parâmetro inteiro idx o número da identificação do nó do elemento finito. Após a utilização no cálculo do estimador de erro dos

valores das concentrações no instante anterior, é realizada a atualização do vetor que armazena as concentrações atuais, ou seja, concInit[idx]:= concs[idx].

```
for (Simplex2D s : simplices) {
       int elemID = s.id;
       Node2D[] sNodes = s.getPoints();
       int n = sNodes.length;
       double gradu_x = 0.0;
       double gradu_y = 0.0;
       double divResidual = 0.0;
       double[] concElement = new double[n];
       double RESIDUO;
       double residuoGauss = 0.0;
       double[] massNode = new double[n];//variáveis para determinar a conservação
                                           //de massa no nível do nó
       for (int i = 0; i < n; i++) {
               int nodeID = sNodes[i].id;
               double conc = theta*concs[nodeID]+(1-theta)*concInit[nodeID];
               concElement[i] = -1.0*reaction*(conc-(concs[nodeID]-
                                  concInit[nodeID])/timeStep);
               gradu_x += (0.5) * (Math.pow(-1.0, (2 * i + 1) % 3)) * conc;
gradu_y += (-0.5) * (Math.pow(-1.0, (2 * i + 2) % 5)) * conc;
               divResidual += 2*Dxy*Math.pow(-1.0, i) * conc;
               massNode[i] = concs[nodeID]-concInit[nodeID]; //Qtde. de massa a cada time step
       RESIDUO = 0.0;
       for (int j = 0; j < n; j++) {//CÁLCULO NOS PONTOS DE GAUSS</pre>
               double csi = Math.sqrt(3.0)/3.0;
               double eta = Math.sqrt(3.0)/3.0;
                       csi = (Math.pow(-1.0, (2 * j + 1) % 3)) * csi;
                       eta = -1.0*(Math.pow(-1.0, (2 * j + 2) % 5)) * eta;
               double phi0 = 0.25*(1-csi)*(1-eta);
               double phi1 = 0.25*(1+csi)*(1-eta);
               double phi2 = 0.25*(1+csi)*(1+eta);
               double phi3 = 0.25*(1-csi)*(1+eta);
               baseFunction = new double[] {phi0, phi1, phi2, phi3};
               for (int k = 0; k < n; k++) {</pre>
                       RESIDUO += baseFunction[k]*concElement[k];
                       massElem += baseFunction[k]*massNode[k]; //massa no nível do elemento
               }
               residuoGauss += (RESIDUO+divResidual-(Vx*gradu_x+Vy*gradu_y))*
                        (RESIDUO+divResidual-(Vx*gradu_x+Vy*gradu_y));
       gradu[elemID] = new Point2D.Double(gradu_x, gradu_y);
       resQuad[elemID] = residuoGauss*alphaQuad;
}// fim for simplex2D
```

```
FIG 4.17 – Obtenção da contribuição espacial para o erro residual 
da equação parabólica do transporte de contaminantes
```

4.7 GERAÇÃO DE MALHAS

A geração da malha inicial de elementos finitos contribui significativamente para a precisão e confiabilidade da solução numérica da equação diferencial parcial do modelo. Neste trabalho foram utilizadas duas técnicas distintas para a geração automática de malhas.

Para a equação do fluxo subterrâneo foi utilizada uma malha retangular, com o mesmo número de nós na direção *x* e na direção *y*.

Os valores de entrada para esta malha são:

- *X_{min}* e *Y_{min}* valores mínimos em cada direção;
- X_{max} e Y_{max} valores máximos em cada direção;
- stepRef parâmetro de bipartição dos sub-intervalos de $[X_{min}, X_{max}]$ e $[Y_{min}, Y_{max}]$.

Após serem fornecidos, o código cria 2^{k+1} subintervalos com k = stepRef bipartições e instancia as seguintes variáveis médias $X_{well} = \frac{X_{max} - X_{min}}{2}$ e $Y_{well} = \frac{Y_{max} - Y_{min}}{2}$. Esses valores são utilizados no cálculo do número de Peclet e o do número de Courant ao definir o tamanho da malha avaliado na direção x e y por $\Delta x = \frac{X_{well}}{2^k}$ e $\Delta y = \frac{Y_{well}}{2^k}$, conforme ilustrado na figura 4.18.



FIG 4.18 – Exemplo de malha inicial para a equação do fluxo subterrâneo com stepRef = 3

Para o transporte de contaminantes, a estratégia de geração da malha inicial sofre uma pequena alteração na direção *x* em função de uma variável chamada *delay*. A mesma quantidade de nós da malha para a equação do fluxo é mantida para a equação do transporte, porém a sua distribuição terá outra metodologia. Nesta estratégia, os nós da malha podem ser movidos pelo usuário em função do valor atribuído para a variável *delay*. Uma vez que a pluma de contaminação avança da fronteira esquerda para a fronteira direita do domínio retangular, fez-se necessário o uso de uma malha inicial com elementos mais refinados nas proximidades da fonte de contaminação. A figura 4.19 ilustra a malha da estratégia 2.

	Xwell		Xmax

FIG 4.19 – Exemplo de malha inicial para a equação do transporte com *stepRef* = 2 e *delay* = 30%

O cálculo do número de Peclet e do número de Courant será baseado no tamanho da malha dado por $\Delta \hat{x} = \max_{x_i \in \Omega} \Delta x_i$ e determinado, neste caso, pela expressão:

$$\Delta \hat{x} = \frac{X_{well}}{2^{k}} \left(1 + delay \right)^{k+1}$$
(4.43)

Para o valor da variável delay = 0,0 %, a estratégia 2 fornecerá o refinamento uniforme apresentado inicialmente para o domínio da equação do fluxo. Para valores negativos do delay o modelo fornecerá um avanço nos elementos da malha de forma que a maior concentração dos elementos esteja na fronteira direita da malha quadrangular.

Segundo [YANG e MAVRIPLIS, 2008] o objetivo de uma estratégia adaptativa é aumentar a eficiência do código numérico, ou seja, obter a máxima redução do erro por unidade de custo computacional. Outros tipos de estratégias adaptativas são apresentados:

- O refinamento h que envolve o aumento/diminuição do número de elementos com o refinamento/desrefinamento da malha.
- O refinamento p que envolve o aumento/diminuição do grau do polinômio interpolador das funções de base.
- O refinamento r que envolve o movimento dos nós da malha e ajustes no tamanho do elemento para obter uma melhor resolução. A vantagem desta estratégia, que não aumenta o grau de liberdade do método numérico, situa-se na sua facilidade de implementação.

A combinação entre estas estratégias também é possível para obter, por exemplo, o refinamento *hp* ou refinamento *hr*.

A estratégia que modifica a malha inicial, conforme ilustrada na figura 4.9, é um caso particular do refinamento *r*. E a malha que empregar este tipo de adaptação será referenciada neste trabalho por *malha deformada*.

4.8 CONSIDERAÇÕES DO CAPÍTULO 4

O processo de discretização introduz outros tipos de erros provenientes de várias fontes, tais como: erros de arredondamento, erros de truncamento, erros da representação discreta devido aos recursos limitados do computador e erros obtidos com a acumulação sistemática da metodologia de certos métodos numéricos (interpolação, integração numérica, etc.).

Uma maneira de apresentar uma solução com a devida redução nas respectivas fontes de erros poderia ser através da implementação sobre malhas mais finas, empregando mais elementos finitos e aumentando o número de funções de base, enquanto o passo de tempo diminui. Em outras palavras, deve-se implementar um esquema que exige uma capacidade cada vez maior em relação a memória e velocidade dos computadores que hospedam os complexos códigos numéricos.

Uma vez que, através dos anos, os modelos numéricos e as diversas simulações foram significadamente beneficiados com um aumento contínuo na memória e na velocidade do computador, a otimização destes recursos tornou-se uma atividade viável.

Considerando que a velocidade pode ser mensurada pelo número de operações por segundo com pontos flutuantes – MFLOPS (*million floating point operations per second*), a declividade na figura 4.20 para os computadores pessoais (PC´s) demonstra que o aumento na velocidade de processamento é da ordem de 10 MFLOPS a cada 4 anos.



FIG 4.20 – Performance do computador através dos anos Adaptado de [OTTO, 2007 pg. 19]

Uma evolução similar ao gráfico acima é observada para o aumento de memória dos atuais computadores [OTTO, 2007].

Outros benefícios observados com a crescente capacidade de armazenamento de dados e da velocidade de processamento residem no emprego dos métodos indiretos na resolução dos imensos sistemas algébricos resultantes do código numérico.

Esses métodos indiretos, tais como o algoritmo que implementa o gradiente conjugado pré-condicionado para operadores simétricos, ou os algoritmos *Multigrid*, que são baseados em uma sequência de malhas obtidas por refinamento sucessivo, necessitam de uma grande quantidade de memória computacional e de operações aritméticas proporcionais tanto ao grau de liberdade do problema numérico quanto ao tamanho da faixa da matriz de banda determinadas nas matrizes globais do sistema.

De forma geral, as limitações devido às restrições dos recursos computacionais também são amenizadas com a crescente evolução tecnológica. Isto significa que, no processo de aproximação física ou numérica, as fontes de erros citadas no início desta seção podem ser negligenciadas em função dos testes realizados e da metodologia empregada. 72

Metodologia

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para análise do estimador de erro residual são apresentados processos do transporte de contaminantes, em meio poroso saturado e homogêneo, cujo regime é predominantemente advectivo. A técnica empregada na solução JAVA para evitar o surgimento de concentrações negativas e oscilações espúrias é o esquema *Symmetrical Streamline Stabilization* (S^3) [WENDLAND e SCHMID, 2000] (ANEXO II).

Visando a verificação da solução numérica do código JAVA com a correspondente solução numérica obtida por WENDLAND e SCHMID (2000) com o esquema S^3 , é simulado um vazamento de contaminante conservativo de um depósito em uma região de seção retangular de 100*m* de comprimento e 40*m* de largura, conforme a figura 5.1.



FIG 5.1 – Geometria do problema teste para o esquema S³ adaptado de [WENDLAND, 2004]

A fonte de contaminante está localizada na entrada de fluxo e os parâmetros físicos para o meio poroso são definidos de forma a estabelecer uma velocidade de fluxo de 1,0 *m/s*. As condições de contorno consistem de concentração normalizada $\left(\frac{c}{c_0}\right)$ no lado esquerdo do domínio e condições homogêneas de Neumann nas demais fronteiras para especificar fluxo nulo de soluto através do contorno. A concentração inicial é $C_0 = 0$ no interior do domínio Ω .

A discretização espacial da malha considera $\Delta x = \Delta y = 0,5m$. A discretização temporal emprega $\Delta t = 1,0s$ com instante final $T_f = 50s$, a formulação de integração consistente e o esquema de Euler implícito ($\theta = 1,0$). O número de Courant é $C_x = 2,0$.

Os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal são, respectivamente, $D_L = 0.02m^2/s$ e $D_T = 0.002m^2/s$, caracterizando o regime de advecção dominante, pois o número de Peclet é $Pe_x = 25$. Neste problema parabólico em que o transporte é dominado por advecção, dificuldades são esperadas devido à dispersão numérica, pois, critérios de estabilidades não foram respeitados.

Em razão da simetria da solução da equação (4.25), a figura 5.2 apresenta a frente de contaminação na metade superior do domínio computacional que foi obtida considerando:

- **a.**) solução analítica dada por LEIJ e DANE *apud* WENDLAND e SCHMID 2000³⁹;
- **b.**) solução numérica que emprega o esquema S^3 ;
- c.) solução tradicional de Galerkin e
- d.) solução numérica implementada no código JAVA.



74

³⁹Leij F. J. e Dane J. H. Analytical Solution of the One-Dimensional Advection Equation and Two- or Three-Dimensional Dispersion Equation, *Water Resour. Res.*, 26(7), 1475-1482, 1990.

Comparado com a solução analítica, verifica-se um maior espalhamento longitudinal nos três esquemas numéricos. Para o esquema de Galerkin é observado concentrações negativas fora da área da pluma e o maior espalhamento na frente de avanço do contaminante.

Verifica-se ainda uma boa concordância entre a solução do código JAVA (**d**), a solução do esquema S^3 (**b**) e a correspondente solução analítica (**a**) da equação do transporte (4.25), revelando que o código computacional encontra-se adequadamente implementado.

5.1 VERIFICAÇÃO DO ESTIMADOR RESIDUAL

Para a verificação do estimador de erro residual, da equação do transporte de contaminantes, é implementada uma fonte contendo o elemento ⁹⁰Sr (Estrôncio-90)⁴⁰ que migra facilmente de um armazenamento de resíduos radioativos para um aqüífero confinado.

A solução numérica é comparada com a solução analítica de WEXLER (1992), dada pela equação (4.41) da subseção 4.6.6, e as variáveis do modelo de transporte são as apresentadas na tabela 5.1.

Como visto na subseção 4.5.1, para um contaminante cujo coeficiente de decaimento de primeira ordem, $\lambda \ge 0$, que não supera o valor de $\varepsilon > 0$, o menor autovalor da matriz de dispersão D, a *pequena advecção* será caracterizada quando $|v| \le C_c \varepsilon^{\frac{1}{2}} max \{\varepsilon, \lambda\}^{\frac{1}{2}} \le C_c \varepsilon$, sendo $C_c \ge \frac{|v|}{\varepsilon}$ uma constante característica de tamanho moderado.

De acordo com os valores que foram fornecidos, a matriz definida positiva da dispersão hidrodinâmica é $D = \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 20 \end{pmatrix}$ e determina-se que o menor autovalor é dado por $\varepsilon = 20$.

Conforme os valores da velocidade uniforme, $v_x = 1,0 \ m/dia$, segue que a constante característica é $C_c = \frac{1}{20} = 0,05$, ou seja, a verificação do estimador que utiliza o transporte do contaminante ⁹⁰Sr é realizado em regime de pequena advecção.

⁴⁰ Entre os vários poluentes radioativos, um dos mais perigosos é o estrôncio-90 que, além de apresentar uma meia-vida relativamente alta, é um elemento metabolizado pelo organismo de forma semelhante ao cálcio. A radioatividade emitida pelo ⁹⁰Sr pode alterar a atividade da medula óssea na produção de células sangüíneas, com o perigo de levar o indivíduo a uma forte anemia ou mesmo a adquirir leucemia. O ⁹⁰Sr acumula no corpo.

VARIÁVEL	DESCRIÇÃO	INPUT DOS DADOS
Velocidade uniforme (m/dia)	Velocidade real do fluxo de água subterrânea na direção horizontal	<pre>double Vx = 1.0; // velocidade em x double Vy = 0.0; // velocidade em y</pre>
Dispersividade longitudinal (m)	Estima a dispersão longitudinal $D_x = \alpha_x V_x$ em função da pluma.	<pre>double longiDisp = 100.0; // de 0.1m a 100m - (Kumar, 2009)</pre>
Dispersividade transversal (m)	Estima a dispersão transversal $D_y = \alpha_y V_x$ em função da pluma	<pre>double transDisp = 20.0;</pre>
Porosidade efetiva	Define a porosidade efetiva do aquífero	<pre>double poro = 0.15; // porosity</pre>
Frente de contaminante (m)	Implementa a concentração na fronteira de Dirichlet de 150m.	<pre>int Ymed = 3; // nós acima e abaixo da contaminação pontual.</pre>
Concentração de ⁹⁰ Sr (mg/L)	Concentração constante estimada na fonte de 100 mg/L.	<pre>double solute = 100.0;</pre>
Decaimento de l ^a ordem (1/dia)	Escalar que implementa o termo de decaimento de 1 ^ª ordem do ⁹⁰ Sr.	<pre>double reaction = 0.0000678; // tempo de meia vida do ⁹⁰Sr = 28 anos.</pre>
Coeficiente theta	Escalar da discretização temporal.	double theta = 1.0/2.0; // método de Crank-Nicolson-Galerkin
Solução Analítica	Variável booleana para comparar a solução numérica com a analítica.	boolean AnalyticalSolution = true; // solução 2D de Wexler 1992

Tabela 5.1 – Variáveis do transporte de ⁹⁰Sr em aqüífero confinado, adaptadas de WEXLER (1992).

package org.arena.water.gwfem2d.transport2D

As dimensões do domínio retangular da figura 5.3 são 1000 m de comprimento por 800 m de largura. A malha inicial foi dividida de forma que os 1024 elementos retangulares sobrepõem os 1089 nós igualmente espaçados na direção x e na direção y.



FIG 5.3 – Malha inicial do domínio $\Omega = 1000mX800m$ indicando os 150m da frente de contaminação, os nós 337 e 532, onde serão obtidas as curvas BTC, o elemento 416 e o *patch* 661 para análise de erro

O tempo total de simulação é de 2000 dias (*d*) divididos em intervalos de tempo de 10 dias. As informações iniciais do código referentes aos parâmetros da malha e do regime de transporte são:

delta X = 31.2500 delta Y = 25.0000VALORES DE REFERÊNCIA Retardo R = 01.0000Peclet 2D = 00.400200.3125 (1D) <= 50.0 Courant 2D = 00.249900.3200 (1D) <= 1.0 <= 5.0 Pe.Cr = 00.100000.1000 (1D) Pe(1+Cr) = 00.500200.4125 (1D) << 2.0 QUANTIDADE DE NOS NO SISTEMA 1089 Menor Autovalor de D = 20.0000 Valor de Cc (regime) = 00.0500

A análise de erro e os gráficos desta seção consideram a distribuição da concentração normalizada $\left(\frac{c}{C_0}\right)$ do ⁹⁰Sr.

A solução numérica C_h é comparada com a solução analítica C de WEXLER (1992), dada pela equação 4.41 e implementada no código (figura 4.12). A norma euclidiana do erro real sobre todos os elementos da malha, $||e|| = ||C - C_h||$, foi obtida para cada passo de tempo e posteriormente aplicada no índice de eficiência do estimador, conforme descrito na seção 1.2 para avaliar a qualidade do estimador residual estipulado pela equação 4.32.

Os nós escolhidos para a obtenção das curvas BTC[] de passagem de soluto⁴¹ são os nós 337 e 532 devido à posição geográfica em que se encontram na figura 5.3. O nó central 532 avaliará a evolução da passagem de soluto influenciado pela dispersão horizontal, e o nó adjacente 337 avaliará também a influência da dispersão transversal. A figura 5.4 ilustra o comportamento das curvas BTC[337] e BTC[532] obtidas pela solução analítica e comparadas, respectivamente, às curvas BTC[] obtidas da solução numérica do código JAVA.



FIG 5.4 – Comparação entre as curvas de passagem de soluto da solução Java e a correspondente solução analítica 2D de Wexler (1992) para o transporte do ⁹⁰Sr em malha grosseira DH significa difusão horizontal e DT significa difusão transversal

⁴¹ Do inglês *Breakthrough Curves*, estas curvas descrevem a evolução da concentração do soluto em migração no nó de observação.

O erro entre estas curvas de passagem de soluto e o erro em toda malha inicial é estimado conforme a metodologia apresentada na subseção 4.5.1 pela equação 4.38.

Para cada passo de tempo t^n , o índice de eficiência sobre a malha grosseira é definido

por:
$$E_f = \frac{\eta_{\mathcal{T}_n}^n}{\|e\|}$$
(5.1).

sendo $\eta_{\mathcal{T}_n}^n$ o erro residual espacial da equação (4.32) sobre a malha \mathcal{T}_n e ||e|| a norma euclidiana do erro real.

A figura 5.5 exibe uma curva de ajustamento que apresenta boa interpolação dos valores do índice de eficiência E_f , equação (5.1), determinados em todos os passos de tempo da simulação numérica.

Nos primeiros passos de tempo, as oscilações iniciais da solução numérica são responsáveis por apresentar valores do índice de eficiência acima do especificado para a maioria dos problemas da Engenharia, ou seja, segundo AINSWORTH e ODEN (2000), valores acima de 3,0.

No entanto, verifica-se pela figura 5.5 que o índice de eficiência aproxima-se de 1,0 conforme o tempo avança, ou seja, o estimador residual espacial $\eta_{\mathcal{T}_n}^n$, dado pela equação 4.32, encontra-se cada vez mais próximo do erro real ||e||, sendo assim, caracterizado como um estimador *assintoticamente estável*, pois,

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\eta_x}{\|e\|}=1$$

O limite acima assegura a qualidade do estimador de erro residual espacial utilizado nos resultados deste capítulo.

O estimador ZZ, proveniente da técnica de recuperação do gradiente dado por ZIENKIEWICZ e ZHU (1992a) e validado para a equação elíptica do fluxo subterrâneo (3.3) [FIRMIANO e WENDLAND, 2009] (ANEXO III), também é analisado em todos os passos de tempo da simulação numérica e a sua eficiência avaliada.

Verificou-se que o índice de eficiência do estimador ZZ é quase nulo para todos os passos de tempo. A figura 5.5 também ilustra o valor de E_f para o estimador ZZ em apenas três instantes de tempo (t = 100d, t = 1000d e t = 2000d) mostrando que esse estimador não é adequado para o transporte de contaminantes, e ainda, o estimador ZZ subestima o erro real da solução numérica da equação parabólica (4.25)


FIG 5.5 – Eficiência do estimador de erro residual em função do passo de tempo. O estimador residual é assintoticamente estável e a sua taxa de convergência é da ordem de uma função potência com confiança de 98,04%. A eficiência do estimador ZZ é quase nula para todos os passo de tempo.

Valores adequados para o estimador residual espacial, $1,0 < \eta_{T_n}^n \le 2,0$, são observados a partir do 75° passo de tempo e a taxa de convergência no tempo do elemento residual de pode ser obtida pela curva de ajuste da figura 5.5, a função potência $y = 1,0 + 82,117t^{-0,933}$ com 98,04% de confiança, sendo *t* o número de passos de tempo da simulação.

O estimador de erro residual espacial também foi utilizado localmente para a avaliação do erro no *patch* dos nós 337 e 532. Verifica-se que esse erro estimado estabiliza-se, na concentração normalizada, em 0,18 para o nó adjacente 337 e em 2,3 para o nó central 532 (ver figura 5.6).

O objetivo desta análise é verificar a estabilidade do estimador residual aplicado no centróide de um elemento retangular da malha grossa. Assim, uma estratégia de refinamento

adaptativo [VERFÜRTH, 2008] poderia considerar a solução numérica no *patch* do nó indicado ao estimar os valores da concentração e compará-las às do passo de tempo do instante anterior ao refinamento.



FIG 5.6 – Evolução do erro residual estimado no *patch* do nó adjacente 337 e no patch do nó central 532 da malha grosseira

A contribuição do erro da discretização temporal da solução numérica em toda malha inicial também é verificada na comparação com a solução analítica de WEXLER (1992) para o transporte do ⁹⁰Sr.

O erro estimado pelo indicador temporal η_t^n , conforme descrito na equação 4.37, converge para zero com o avanço no tempo. A figura 5.7 ilustra a convergência no tempo do indicador temporal nos 100 últimos passos de tempo, ou seja, no intervalo compreendido entre o 1.000° dia de simulação e o 2.000° dia.

A taxa de convergência do indicador de erro temporal η_t^n é exponencial, conforme a sua curva de ajustamento $y = 1735,9e^{-0,044t}$, apresentada com 99,99% de confiança. A variável *t* é representa o número de passos de tempo da simulação.

Este indicador de erro temporal apresenta-se como uma ferramenta essencial para a obtenção de uma estratégia de refinamento adaptativo do intervalo de tempo da simulação, conforme apresentado em VERFÜRTH (2008, pg 77).

As isoconcentrações da solução analítica e da solução numérica no instante t = 800dsão fornecidas para comparação na figura 5.8. Os valores normalizados são agrupados em intervalos de 0,2 em 0,2 das concentrações calculadas $\left(\frac{c}{c_0}\right)$.



FIG 5.7 – Evolução do indicador temporal e a correspondente taxa de convergência exponencial

Verifica-se na figura 5.8 que a frente de contaminação da solução numérica encontra-se atrasada em relação à frente da solução analítica. O objetivo do estimador residual espacial é controlar esse erro de discretização, fornecendo uma estimativa confiável do erro real, para que estratégias adaptativas sejam conduzidas para que a qualidade da solução numérica esteja assegurada.

A análise de erro *a posteriori* apresentada pelo código JAVA no instante t = 800d é:

Verifica-se que no instante indicado (t = 800d) o estimador residual espacial possui um índice de eficiência dado por $E_f = \frac{\eta_{\tau_n}^n}{\|e\|} = \frac{11,2572}{5,6194} = 2,0033$. Esse valor ainda é considerado aceitável para vários problemas da Engenharia [AINSWORTH E ODEN, 2000, pg. 18].



FIG 5.8 – Comparação entre a solução analítica (a) e a solução numérica (b) do transporte do 90 Sr em aquífero confinado no instante t = 800d

Através da solução analítica, avaliou-se que o erro real máximo ocorre no nó 661. Descrevendo 661 = 20x33 + 1, segue que a posição desse nó situa-se na 21^{a} linha e 2^{a} coluna, conforme a figura 5.3. De acordo com as disposições dos 1024 elementos da malha fornecidos pela figura 5.16, o *patch* do nó 661 é simétrico ao *patch* do nó 397 = 12x33+1 (observe que 661 = (16+4)x33 + 1 e 397 = (16-4)x33 + 1).

O estimador residual espacial identificou que o erro máximo ocorre no elemento 416 que é formado pelos nós: 429, 430, 463 e 462. Uma vez que os nós 429 e 430 fazem parte do *patch* 397 e que a solução numérica é simétrica (figura 5.8), verifica-se que o estimador residual foi capaz de identificar a região que apresenta o maior erro numérico da equação do transporte de contaminantes em malha grosseira.



A figura 5.9 ilustra a região do domínio em que o estimador residual espacial capturou o valor do erro máximo.



5.1.1 Solução Numérica Ajustada no patch

Nesta subseção é realizada uma avaliação na distância entre as curvas de passagem de soluto – BTC[337] e BTC[532] da figura 5.4, obtidas localmente da solução analítica e da respectiva solução numérica do código JAVA.

A condição de ortogonalidade de Galerkin diz que o erro de discretização é perpendicular ao espaço das funções testes [HARBRECHT e SCHNEIDER, 2009] conforme indicado na figura 5.10.



FIG 5.10 – Condição de ortogonalidade de Galerkin observada nos resíduos da solução numérica FEM

Apesar de não analisar se o erro residual preserva ou não a ortogonalidade, pois o esquema de discretização adotado emprega termos *upwind* [WENDLAND, 2004], ao adotar os parâmetros empíricos da figura 5.10, como sendo $\alpha = 0,0 \text{ e } \beta = 1,3$ verifica-se uma excelente concordância entre a curva BTC[532] da solução numérica ajustada com a sua correspondente curva BTC[532] da solução analítica, conforme apresentado na figura 5.11.



FIG 5.11 – Comparação entre a solução numérica ajustada e a solução analítica de Wexler (1992) no nó 337 e no nó 532

Os parâmetros de ajuste para a curva BTC[337] da solução numérica são $\alpha = 0,0$ e $\beta = 2,5$ e a concordância com a correspondente BTC[337] da solução analítica é acentuada após o 100° passo de tempo, conforme visto na figura 5.11. Estes parâmetros empíricos podem variar de nó para nó e, até o momento, faz-se necessária uma fundamentação matemática para a sua obtenção.

5.1.2 Limites Inferiores e Superiores do Estimador Residual

Por simplicidade de notação, considere nesta subseção que o estimador residual espacial é denotado por $\eta = \eta_{T_n}^n$.

Segundo GRÄTSCH e BATHE (2005), o principal propósito do estimador de erro *a posteriori* é prover uma estimativa precisa e limitar o erro da solução numérica em uma norma específica.

Um estimador de erro eficiente inclui uma predição muito próxima do erro real, mesmo quando a solução analítica é desconhecida para a maioria dos problemas da Engenharia. A confiabilidade do estimador surge com a existência de limites superiores e inferiores do erro estimado que são viabilizados pela implementação computacional, conforme discutido na seção 1.2.

Através da disponibilização dos valores dos erros residuais e dos erros reais da solução numérica do transporte do ⁹⁰Sr, para a malha original e em todos os passos de tempo, determina-se as constantes $C_1 = 1,7$ e $C_2 = 4,0$, tais que:

$$C_1 \|e\| \le \eta \le C_2 \|e\| \tag{5.2}$$

A figura 5.12 apresenta o erro residual fornecido pelo estimador espacial 4.32 limitado pela norma euclidiana do erro real. Verifica-se que o limite inferior 1,7||e|| é válido para todos os passos de tempo da simulação numérica, enquanto que o limite superior aplica-se a partir do 40° passo de tempo.

Para limitar superiormente os passos de tempo anteriores ao 40°, basta aumentar o valor da constante C_2 .



FIG 5.12 – Visualização dos limites inferiores 1, 7||e|| e superiores 4, 0||e|| do estimador de erro residual em malha grosseira

As desigualdades (5.2) mostram que o erro residual tende a zero na mesma taxa de convergência em que o erro real tende a zero, e que na simulação do transporte do ⁹⁰Sr, o índice de eficiência é limitado por $1,7 \le E_f \le 4,0$, a partir do 40° passo de tempo.

5.2 A INFLUÊNCIA DA MALHA NO ERRO RESIDUAL DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos com a reorganização dos nós da malha inicial em uma estratégia que concentra os nós disponíveis junto à frente de contaminação, conforme descrito na seção 4.7 e ilustrado na figura 4.19 (pg 69). Para obter essa malha deformada é adotado o seguinte valor da correspondente variável:

double delay = 0.3;

Isto significa que a malha inicial sofrerá uma deformação que concentrará vários dos 1089 nós na região próxima margem esquerda da figura 5.3. Nesta nova configuração da malha, o nó central 536 recebe a posição geográfica do nó 531 e o nó adjacente 344 recebe a posição geográfica do nó 337, conforme atualizado no dado de entrada por:

int nodeBTC1 = 536; int nodeBTC2 = 344; A comparação entre as curvas BTC[536] e BTC[344] da solução numérica com as respectivas curvas BTC[] da solução analítica é ilustrada na figura 5.13.



FIG 5.13 – Comparação entre as curvas de passagem de soluto da solução JAVA e a correspondente solução analítica 2D de WEXLER (1992) para o transporte do ⁹⁰Sr em malha deformada DH significa difusão horizontal e DT significa difusão transversal

Se comparado com a figura 5.4, a melhora observada com a redistribuição dos nós da malha original, para a proximidade entre a solução numérica e a solução analítica nos nós indicados é muito pequena. No entanto, verifica-se, para o mesmo número de graus de liberdade, uma melhoria significativa no erro global da malha, no erro residual analisado no *patch* de elementos e no indicador de erro temporal quando a malha inicial se encontra com um atraso de 30% na redistribuição dos seus 1089 nós.

Para o erro global da malha, índice de eficiência é reavaliado e o correspondente estimador residual mostra-se assintoticamente estável com melhora significativa na sua taxa de convergência, conforme indicado na figura 5.14.

A tabela 5.2 confronta os valores da eficiência determinada na malha sem o atraso com os valores na malha deformada e mostra a boa resposta do estimador residual para o referido reposicionamento dos nós na obtenção da nova solução numérica.

na malha	na malha original e na malha deformada										
Passo	Delay = 0,0	Delay = 0,3									
<i>t</i> = 10	12,5093	4,1098									
<i>t</i> = 50	3,0622	1,5256									
<i>t</i> = 75	2,2856	1,2360									
t = 100	1,9687	1,1214									
<i>t</i> = 150	1,7703	1,0611									
<i>t</i> = 175	1,7478	1,0606									
t = 200	1,7439	1,0542									

Tabela 5.2 – Eficiência do estimador de erro residual na malha original e na malha deformada

Verifica-se, na figura 5.14, que o índice de eficiência do estimador residual aproxima-se de 1,0 logo após o 50° passo de tempo na malha deformada. Ou seja, o estimador residual demonstrou-se mais eficiente nesse tipo de malha para o transporte de contaminantes, em relação à malha original da seção 5.1.



FIG 5.14 – Eficiência do estimador de erro residual em função do passo de tempo. O estimador residual é assintoticamente estável e a sua taxa de convergência é da ordem de uma função potência com confiança de 93,4%. A eficiência do estimador ZZ é quase nula para todos os passo de tempo.

A taxa de convergência do estimador residual $\eta_{\mathcal{I}}$ pode ser estimada pela curva de ajustamento da figura 5.14, a função potência $y = 1,0 + 69,265t^{-1,35}$ com 93,4% de confiança. Verificou-se novamente que o índice de eficiência do estimador ZZ é quase nulo para todos os passos de tempo. A figura 5.14 também ilustra esses baixos valores dos índices de eficiências E_f para o estimador ZZ em apenas três instantes de tempo (t = 100d, t = 1000d) e t = 2000d).

O erro avaliado no *patch* do nó 536 (antigo nó 531 da malha original) e no *patch* do nó 344 (antigo nó 337 da malha original) é ilustrado no gráfico da figura 5.15.



FIG 5.15 – Análise do erro residual no *patch* do nó 536 e no *patch* do nó 344 da malha deformada

O erro residual do *patch* mensurado nos diferentes passos de tempo é visivelmente inferior em relação ao erro residual obtido na malha original (figura 5.6). Para o nó 536, o erro no *patch* estabiliza-se por volta de 1,2, mostrando uma melhora de 49%, e para o nó 344, o erro no patch estabiliza-se por volta de 0,068, mostrando uma melhora de 62% se comparado com a análise do erro na malha original.

Outro resultado favorável do estimador de erro residual na malha com atraso é a melhora observada na taxa de convergência do erro temporal. A figura 5.16 mostra esta convergência do erro temporal e a função de ajuste para os valores correspondentes aos 100 últimos passos de tempo da simulação.

A tabela 5.3 confronta as taxas de convergência dos estimadores de erro temporal obtidas da solução numérica na malha original e na malha deformada.

na maina original e na maina deformada											
Passos	Delay = 0,0	Delay = 0,3									
t = 100	22,3934	10,7257									
<i>t</i> = 125	7,2769	3,4719									
<i>t</i> = 150	2,4143	1,0995									
<i>t</i> = 175	0,8162	0,3604									
<i>t</i> = 200	0,2810	0,1159									

Tabela 5.3 – Convergência do estimador de erro temporal na malha original e na malha deformada

Verifica-se, na tabela 5.3, que o ajuste na distribuição espacial dos nós da malha original também é responsável pela melhora observada na velocidade de convergência do erro de discretização temporal para um valor nulo.



FIG 5.16 – Evolução do indicador de erro temporal e a sua taxa de convergência exponencial com 95,08% de confiança na malha deformada

O mapa das isoconcentrações da solução analítica e da solução numérica também foi recalculado e os seus resultados, para o instante t = 700 d, exibidos na figura 5.17. Verifica-se que estas soluções estão com um grau de proximidade superior ao que foi apresentado na figura 5.8. Os valores normalizados foram agrupados em intervalos de 0,2 em 0,2 das concentrações calculadas.



FIG 5.17 – Comparação entre a solução analítica (a) e a solução numérica (b) do transporte do 90 Sr em aquífero confinado no instante *t* = 700*d* em malha deformada

A análise de erro *a posteriori* apresentada pelo código no instante t = 700d é:

Verifica-se que no instante indicado, o estimador de erro residual possui um índice de eficiência dado por $E_f = \frac{\eta_x}{\|e\|} = 1,6259$. Isto significa que o estimador residual espacial, na malha deformada e t = 700d, encontra-se mais próximo do erro real do que na malha original para t = 800d, cuja eficiência era $E_f(800) \approx 2,0$.

Observa-se que índice de eficiência no passo de tempo t = 700d, da malha deformada, é superior ao índice de eficiência determinado em todos os passos de tempo da malha original pois, no último passo de tempo dessa malha original calcula-se $E_f(2000) = 1,7439$.

Os limites superiores e inferiores do erro residual estimado na malha deformada, conforme apresentado na figura 5.18 obedecem às desigualdades:

$$\|e\| \le \eta \le 2, 0. \, \|e\| \tag{5.3}$$

Desta forma, verifica-se que para limitar o erro residual, a partir do 40° passo de tempo, é necessário constantes $C_1 = 1,0$ e $C_2 = 2,0$, que determinam um intervalo de amplitude 1,0. Isto representa uma melhora de 57%, se comparado ao intervalo de amplitude 2,3 para limitar, a partir do 40° passo de tempo, o erro residual estimado na malha original.

E ainda, as desigualdades (5.3) mostram que o erro residual tende a zero na mesma taxa de convergência em que o erro real tende a zero e que na simulação do transporte do ⁹⁰Sr, o índice de eficiência do estimador residual na malha deformada é limitado por

$$1,0 \le E_f \le 2,0$$
,

a partir do 40° passo de tempo.

As análises feitas nesta seção mostraram a boa funcionalidade do estimador residual espacial sobre este tipo de malha adaptada.



FIG 5.18 – Obtenção dos limites inferiores 1, 0||e|| e superiores 2, 0||e|| do estimador de erro residual em malha deformada

5.3 UMA ESTRATÉGIA DE REFINAMENTO ADAPTATIVO

A aplicabilidade do estimador de erro *a posteriori* com características residuais para a equação parabólica 4.25 deve ser avaliada nas estratégias de refinamento adaptativo da malha de elementos finitos. O estimador residual espacial da equação 4.38, em regime de pequena advecção, conduzirá o refinamento adaptativo de acordo com a estratégia do máximo, descrita em VERFÜRTH (2008, pg. 81). Nesta estratégia, o elemento será refinado, se o seu resíduo superar em uma determinada porcentagem τ , o valor do erro máximo obtido nos elementos da malha. O valor de τ , geralmente indicada pelo usuário do código, será considerado neste trabalho como sendo $\tau = 0,5$, uma escolha popular e bem estabelecida (VERFÜRTH, 2008).

Sendo a malha original uma malha estruturada e com elementos quadriláteros, o elemento marcado para o refinamento será subdividido horizontalmente em dois elementos congruentes. Para evitar nós de enforcamento⁴², os elementos vizinhos da esquerda e da direita também serão refinados. Uma *malha regular* é uma malha sem estes nós de enforcamento [CARSTENSEN e HU, 2009]. A tabela 5.4 exemplifica uma captura do estimador de erro residual dos elementos que são indicados para o refinamento adaptativo pela estratégia do máximo.

⁴² Do inglês *hanging nodes*. Um nó será considerado de enforcamento se na malha existir pelo menos um elemento, tal que o nó pertence ao interior de uma aresta de K, mas não é vértice do elemento K.

Nesta captura escolheu-se arbitrariamente o tempo t = 130d para a malha original e para a malha deformada.

malha original	malha com <i>delay</i> 30%
O resíduo do elemento 352 é 1,6380	O resíduo do elemento 419 é 1,1314
O resíduo do elemento 416 é 3,1498	O resíduo do elemento 421 é 0,9114
O resíduo do elemento 417 é 2,2881	O resíduo do elemento 423 é 1,2715
O resíduo do elemento 418 é 1,7736	O resíduo do elemento 451 é 0,9006
O resíduo do elemento 419 é 1,4428	O resíduo do elemento 453 é 0,8568
O resíduo do elemento 448 é 1,8269	O resíduo do elemento 455 é 1,3728
O resíduo do elemento 449 é 1,8384	O resíduo do elemento 459 é 0,9102
O resíduo do elemento 450 é 1,7103	O resíduo do elemento 483 é 0,8411
O resíduo do elemento 451 é 1,5454	O resíduo do elemento 487 é 1,3328
O resíduo do elemento 452 é 1,3811	O resíduo do elemento 491 é 0,9373
O resíduo do elemento 480 é 1,7025	O resíduo do elemento 515 é 0,8410
O resíduo do elemento 481 é 1,6243	O resíduo do elemento 519 é 1,3324
O resíduo do elemento 482 é 1,5487	O resíduo do elemento 523 é 0,9368
O resíduo do elemento 483 é 1,4590	O resíduo do elemento 547 é 0,9002
O resíduo do elemento 484 é 1,3564	O resíduo do elemento 549 é 0,8561
O resíduo do elemento 512 é 1,7025	O resíduo do elemento 551 é 1,3717
O resíduo do elemento 513 é 1,6243	O resíduo do elemento 555 é 0,9087
O resíduo do elemento 514 é 1,5486	O resíduo do elemento 579 é 1,1307
O resíduo do elemento 515 é 1,4590	O resíduo do elemento 581 é 0,9103
O resíduo do elemento 516 é 1,3563	O resíduo do elemento 583 é 1,2698
O resíduo do elemento 544 é 1,8269	
O resíduo do elemento 545 é 1,8384	Erro residual máximo = 1,3728 (455)
O resíduo do elemento 546 é 1,7101	
O resíduo do elemento 547 é 1,5452	
O resíduo do elemento 548 é 1,3808	
O resíduo do elemento 576 é 3,1497	
O resíduo do elemento 577 é 2,2878	
O resíduo do elemento 578 é 1,7733	
O resíduo do elemento 579 é 1,4424	
O resíduo do elemento 640 é 1,6381	

Tabela 5.4 – Comparação dos elementos indicados para refinamento pelo estimador residual espacial na malha original e na malha deformada, para t = 130d

Erro residual máximo = 3,1498 (416)

double tau = 0.5;

Verifica-se que a quantidade de elementos que foram marcados para o refinamento é inferior na malha com 30% de atraso em relação aos da malha original, e ainda os erros residuais foram distribuídos pelos elementos da malha. Assim, o estimador residual não só identifica o erro espacial global da solução numérica da equação do transporte 4.25, como também é capaz de mensurar a contribuição para o erro de cada um dos seus elementos.

As figuras 5.19 e 5.20 exibem a distribuição simétrica dos elementos indicados para o refinamento nas duas malhas em estudo. Os mesmos elementos indicados nas figuras abaixo foram marcados em quase todos os passos de tempo da simulação numérica.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	0
	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	1
	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	2
	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	3
	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	4
	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	5
	192	193	194	195	196	197	198	199	200	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	6
_	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250	251	252	253	254	255	7
	256	257	258	259	260	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280	281	282	283	284	285	286	287	8
	288	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315	316	317	318	319	9
	320	321	322	323	324	325	326	327	328	329	330	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350	351	10
	352	353	354	355	356	357	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371	372	373	374	375	376	377	378	379	380	381	382	383	11
	384	385	386	387	388	389	390	391	392	393	394	395	396	397	398	399	400	401	402	403	404	405	406	407	408	409	410	411	412	413	414	415	12
1,0	416	417	418	419	420	421	422	423	424	425	426	427	428	429	430	431	432	433	434	435	436	437	438	439	440	441	442	443	444	445	446	447	13
1,0	448	449	450	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460	461	462	463	464	465	466	467	468	469	470	471	472	473	474	475	476	477	478	479	14
1,0	480	481	482	483	484	485	486	487	488	489	490	491	492	493	494	495	496	497	498	499	500	501	502	503	504	505	506	507	508	509	510	511	15
1,0	512	513	514	515	516	517	518	519	520	521	522	523	524	525	526	527	528	529	530	531	532	533	534	535	536	537	538	539	540	541	542	543	16
1,0	544	545	546	547	548	549	550	551	552	553	554	555	556	557	558	559	560	561	562	563	564	565	566	567	568	569	570	571	572	573	574	575	17
1,0	576	577	578	579	580	581	582	583	584	585	586	587	588	589	590	591	592	593	594	595	596	597	598	599	600	601	602	603	604	605	606	607	18
	608	609	610	611	612	613	614	615	616	617	618	619	620	621	622	623	624	625	626	627	628	629	630	631	632	633	634	635	636	637	638	639	19
	640	641	642	643	644	645	646	647	648	649	650	651	652	653	654	655	656	657	658	659	660	661	662	663	664	665	666	667	668	669	670	671	20
	672	673	674	675	676	677	678	679	680	681	682	683	684	685	686	687	688	689	690	691	692	693	694	695	696	697	698	699	700	701	702	703	21
_	704	705	706	707	708	709	710	711	712	713	714	715	716	717	718	719	720	721	722	723	724	725	726	727	728	729	730	731	732	733	734	735	22
	736	737	738	739	740	741	742	743	744	745	746	747	748	749	750	751	752	753	754	755	756	757	758	759	760	761	762	763	764	765	766	767	23
	768	769	770	771	772	773	774	775	776	777	778	779	780	781	782	783	784	785	786	787	788	789	790	791	792	793	794	795	796	797	798	799	24
	800	801	802	803	804	805	806	807	808	809	810	811	812	813	814	815	816	817	818	819	820	821	822	823	824	825	826	827	828	829	830	831	25
	832	833	834	835	836	837	838	839	840	841	842	843	844	845	846	847	848	849	850	851	852	853	854	855	856	857	858	859	860	861	862	863	26
	864	865	866	867	868	869	870	871	872	873	874	875	876	877	878	879	880	881	882	883	884	885	886	887	888	889	890	891	892	893	894	895	27
	896	897	898	899	900	901	902	903	904	905	906	907	908	909	910	911	912	913	914	915	916	917	918	919	920	921	922	923	924	925	926	927	28
	928	929	930	931	932	933	934	935	936	937	938	939	940	941	942	943	944	945	946	947	948	949	950	951	952	953	954	955	956	957	958	959	29
	960	961	962	963	964	965	966	967	968	969	970	971	972	973	974	975	976	977	978	979	980	981	982	983	984	985	986	987	988	989	990	991	30
	992	993	994	995	996	997	998	999	1000	1001	1002	1003	1004	1005	1006	1007	1008	1009	1010	1011	1012	1013	1014	1015	1016	1017	1018	1019	1020	1021	1022	1023	31

FIG 5.19 – Mapa de elementos marcados pelo estimador residual para o refinamento na malha original para t = 130d

Verifica-se, pelo estimador residual espacial, que os elementos com maior contribuição para o erro espacial global da solução estão posicionados próximos à fonte de contaminação constante quando a malha está sem o atraso. Verifica-se ainda que o estimador residual identifica uma diminuição de 56,4% do erro máximo.

	0	1	2	3	3 4 6	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	:17:	18	19	20	-21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	0
	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	- 61	62	63	1
	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	2
	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	3
	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	4
	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	5
	192	193	194	195	196	197	198	199	200	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	6
	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250	251	252	253	254	255	7
	256	257	258	259	260	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280	281	282	283	284	285	286	287	8
	288	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315	316	317	318	319	9
	320	321	322	323	324	325	326	327	328	329	330	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350	351	10
	352	353	354	355	356	357	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371	372	373	374	375	376	377	378	379	380	381	382	383	11
	384	385	386	387	388	389	390	391	392	393	394	395	396	397	398	399	400	401	402	403	404	405	406	407	408	409	410	411	412	413	414	415	12
1,0	416	417	418	419	420	421	422	423	424	425	426	427	428	429	430	431	432	433	434	435	436	437	438	439	440	441	442	443	444	445	446	447	13
1,0	448	449	450	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460	461	462	463	464	465	466	467	468	469	470	471	472	473	474	475	476	477	478	479	14
1,0	480	481	482	483	484	485	486	487	488	489	490	491	492	493	494	495	496	497	498	499	500	501	502	503	504	505	506	507	508	509	510	511	15
1,0	512	513	514	515	516	517	518	519	520	521	522	523	524	525	526	527	528	529	530	531	532	533	534	535	536	537	538	539	540	541	542	543	16
1,0	544	545	546	547	548	549	550	551	552	553	554	555	556	557	558	559	560	561	562	563	564	565	566	567	568	569	570	571	572	573	574	575	17
1,0	576	577	578	579	580	581	582	583	584	585	586	587	588	589	590	591	592	593	594	595	596	597	598	599	600	601	602	603	604	605	606	607	18
	608	609	610	611	612	613	614	615	616	617	618	619	620	621	622	623	624	625	626	627	628	629	630	631	632	633	634	635	636	637	638	639	19
	640	641	642	643	644	645	646	647	648	649	650	651	652	653	654	655	656	657	658	659	660	661	662	663	664	665	666	667	668	669	670	671	20
	672	673	674	675	676	677	678	679	680	681	682	683	684	685	686	687	688	689	690	691	692	693	694	695	696	697	698	699	700	701	702	703	21
	704	705	706	707	708	709	710	711	712	713	714	715	716	717	718	719	720	721	722	723	724	725	726	727	728	729	730	731	732	733	734	735	22
	736	737	738	739	740	741	742	743	744	745	746	747	748	749	750	751	752	753	754	755	756	757	758	759	760	761	762	763	764	765	766	767	23
	768	769	770	771	772	773	774	775	776	777	778	779	780	781	782	783	784	785	786	787	788	789	790	791	792	793	794	795	796	797	798	799	24
	800	801	802	803	804	805	806	807	808	809	810	811	812	813	814	815	816	817	818	819	820	821	822	823	824	825	826	827	828	829	830	831	25
	832	833	834	835	836	837	838	839	840	841	842	843	844	845	846	847	848	849	850	851	852	853	854	855	856	857	858	859	860	861	862	863	26
	864	865	866	867	868	869	870	871	872	873	874	875	876	877	878	879	880	881	882	883	884	885	886	887	888	889	890	891	892	893	894	895	27
	896	897	898	899	900	901	902	903	904	905	906	907	908	909	910	911	912	913	914	915	916	917	918	919	920	921	922	923	924	925	926	927	28
	928	929	930	931	932	933	934	935	936	937	938	939	940	941	942	943	944	945	946	947	948	949	950	951	952	953	954	955	956	957	958	959	29
	960	961	962	963	964	965	966	967	968	969	970	971	972	973	974	975	976	977	978	979	980	981	982	983	984	985	986	987	988	989	990	991	30
	992	993	994	995	996	997	998	999	1000	1001	1002	1003	1004	1005	1006	1007	1008	1009	1010	1011	1012	1013	1014	1015	1016	1017	1018	1019	1020	1021	1022	1023	31

FIG 5.20 – Mapa dos elementos marcados pelo estimador residual para o refinamento na malha deformada, para t = 130d

Resultados

Na sequência, são apresentados os resultados com as estratégias conjuntas da malha deformada acrescida do refinamento adaptativo com parâmetro $\tau = 0,5$. Com o refinamento dos elementos sugerido, os parâmetros da malha passam a ser:

delta X = 05.2522delta Y = 12.5000 VALORES DE REFERÊNCIA Retardo R = 01.0000Peclet 2D = 00.1356 00.0525 (1D) $\leq = 50.0$ Courant 2D = 00.7375<= 1.0 01.9040 (1D) Pe.Cr = 00.100000.1000 (1D) <= 5.0 Pe(1+Cr) = 00.235600.1525 (1D) << 2.0 QUANTIDADE DE NOS NO SISTEMA 1287

Os nós de observação para as curvas de passagem de soluto passam a ter a identificação 635 para o nó central e 344 para o nó adjacente⁴³. A quantidade de nós no sistema passa a ser de 1287. As variáveis de atualização do código numérico para as estratégias combinadas são:

boolean REFINA = **true**; **double** delay = 0.3; **int** nodeBTC = 635;

A comparação entre as curvas BTC[635] e BTC[344] obtidas da solução analítica com às obtidas da solução numérica JAVA apresenta um comportamento semelhante ao apresentado na figura 5.13. Ou seja, na posição indicada, estimador de erro residual espacial revelou que o refinamento adaptativo adotado não apresenta efeitos relevantes quando a malha se encontra deformada (delay = 30%) na disposição dos seus nós. No entanto, nessa estratégia, observa-se uma melhora de 72% em relação à diminuição do erro residual no *patch* do nó 635 (antigo nó 531), e uma melhora de 80% no *patch* do nó 344 (antigo nó 337), conforme mostra a figura 5.21.

A diminuição do erro espacial do *patch* 635, indicada pelo estimador de erro residual é esperada, uma vez que a disposição do nó escolhido para traçar as curvas de passagem de soluto está situada entre os elementos indicados para o refinamento adaptativo. Assim, os elementos do *patch* são refinados e a resolução numérica torna-se mais precisa. Desta forma, o estimador de erro espacial, com características residuais, avaliou adequadamente a diminuição do erro da solução numérica no conjunto de elementos que compartilham o nó 635. A diminuição considerável do erro residual no patch do nó 344 é devido à sua proximidade com os elementos indicados para o refinamento. Assim, a contribuição desses elementos, para o erro residual, conforme indicado pelo estimador, é inferior.

94

⁴³ O refinamento adotado não influenciou no endereço do nó 344, pois o mesmo encontra-se acima dos elementos refinados



FIG 5.21 – Análise do erro residual no *patch* de elementos da malha deformada e refinamento adaptativo com $\tau = 0, 5$

De acordo com o estimador residual, o erro no *patch* do nó 635 estabilizou-se em 0,64. O erro no *patch* do nó 344, na malha com refinamento, estabilizou-se em 0,036.

A figura 5.22 compara a solução numérica do código JAVA na malha sem refinamento adaptativo e na malha com refinamento adaptativo. As curvas das isoconcentrações, traçadas para o passo de tempo t = 2000d, revelam que a pluma do contaminante contendo ⁹⁰Sr é menos achatada para a solução com refinamento e, de acordo com a análise de erro *a posteriori* da tabela 5.5, é a solução mais precisa.



FIG 5.22 – Comparação da solução numérica sem refinamento adaptativo (a) com a solução numérica com refinamento adaptativo (b) do transporte do ⁹⁰Sr após 2000 dias de simulação

5.3.1 Comparação do erro residual para diferentes estratégias

Os resultados do estimador de erro residual, para o transporte de contaminantes em regime de pequena advecção, são apresentados na tabela 5.5 para as diferentes estratégias descritas nas seções anteriores, referentes à malha inicial sem atraso, malha inicial deformada (delay = 30%) e sem refinamento, e malha inicial deformada e com refinamento adaptativo.

Malha original (<i>delay</i> = 0,0)	Erro residual espacial da malha: 11.0642 Erro residual temporal do passo: 0.2810 Erro relativo da solução 0.0108 Erro residual máximo = 2.8804 no elemento 416 Erro residual mínimo = 0.0001 no elemento 1008
Malha deformada e sem refinamento	Erro residual espacial da malha: 6.0849 Erro residual temporal do passo: 0.1159 Erro relativo da solução 0.0059 Erro residual máximo = 0.8966 no elemento 455 Erro residual mínimo = 0.0001 no elemento 86
Malha deformada e com refinamento	Erro residual espacial da malha: 4.3797 Erro residual temporal do passo: 0.1206 Erro relativo da solução 0.0036 Erro residual máximo = 0.5021 no elemento 419 Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 86

Tabela 5.5 – Análise do erro residual do estimador *a posteriori* em três tipos de malha, que descrevem o domínio do transporte de contaminante em regime de pequena advecção

A análise apresentada na tabela 5.5 também contribui para a verificação do estimador de erro com características residuais para o transporte de contaminantes. As estratégias adotadas resultam numa diminuição real do erro espacial estimado. Verifica-se, através do estimador de erro, uma melhora na precisão da solução numérica JAVA da ordem de 38% com o emprego de uma malha deformada em comparação do erro na malha original. E verifica-se, ainda, uma melhora de 60%, se a técnica da malha deformada for combinada com a estratégia de refinamento adaptativo considerando o parâmetro $\tau = 0,5$.

O valor do erro residual determinado sobre o *patch* do nó central 532 é fortemente influenciado pelas estratégias apresentada neste capítulo. A figura 5.23 apresenta a evolução do erro residual observado no *patch* do nó 532, que foi calculado na malha original, na malha deformada e sem refinamento, e na malha deformada com refinamento.

Verifica-se que o estimador residual responde adequadamente na determinação precisa do erro no *patch* de elementos, quando são empregadas estratégias de otimização da malha inicial.



FIG 5.23 – Comparação do erro residual do *patch* 532 na malha original e na malha deformada, sem refinamento e com refinamento

O erro residual estimado em cada passo de tempo nas três malhas apresentadas neste capítulo, também foi agrupado em um único gráfico. A figura 5.24 apresenta a diminuição desse erro residual em função das estratégias combinadas que otimizam a malha inicial.



FIG 5.24 – Comparação do erro residual global na malha original na malha deformada sem refinamento e com refinamento

Verifica-se que, após as oscilações iniciais no erro residual, o comportamento assintótico é característico das três estratégias apresentadas neste capítulo.

Em relação aos limites superiores e inferiores já discutidos na subseção 5.1.2 (desigualdade 5.2), para a malha original, e na seção 5.2 (desigualdade 5.3), para a malha deformada e sem o refinamento, a figura 5.25 apresenta o estimador residual limitado pelo erro real da malha deformada combinada com a estratégia de refinamento.





Verifica-se que o erro residual é limitado pela desigualdade:

$$0,55||e|| \le \eta \le 0,90||e|| \tag{5.4}$$

Desta forma, para limitar o erro residual, a partir do 40° passo de tempo, é necessário um intervalo de amplitude 0,35, o que corresponde a uma melhora de 85% se comparado com a amplitude encontrada para limitar o erro residual na malha original.

E ainda, as desigualdades (5.4) mostram que o erro residual tende a zero na mesma taxa de convergência em que o erro real tende a zero e que na simulação do transporte do contaminante ⁹⁰Sr, o índice de eficiência do estimador residual espacial na malha deformada com refinamento passa a ser limitado por

$$0,55 \le E_f \le 0,90$$
,

a partir do 40° passo de tempo.

5.4 APLICAÇÃO DO ESTIMADOR DE ERRO RESIDUAL EM REGIME DE PEQUENA ADVECÇÃO

Conforme apresentado na seção 3.4, o regime de pequena advecção é o regime apropriado ao campo de velocidade do fluxo de água subterrânea quando modelos matemáticos descrevem os fenômenos de transporte que ocorrem nos aqüíferos em estudo. Desta forma, nesta seção, o desempenho do estimador de erro residual será avaliado, considerando algumas técnicas computacionais de transporte de contaminantes provenientes da dinâmica dos fluidos em meio poroso saturado.

Os exemplos numéricos para avaliação do erro espacial da solução por elementos finitos, através do estimador residual da equação 4.38 são adaptados da literatura e foram inicialmente apresentados na seção 3.4. Os cenários destes exemplos abrangem as diferentes escalas para o transporte de contaminantes no meio poroso. O primeiro exemplo considera a análise de erro num domínio em escala regional. Para os dois exemplos seguintes, que implementam, respectivamente, o transporte com reação de primeira ordem e o transporte com fenômenos de sorção, a análise de erro será realizada no domínio em escala de campo. No último exemplo, para o transporte unidimensional da atrazina em coluna de solo saturado, a análise será realizada em escala de laboratório.

5.4.1 Solução Numérica da Equação de Advecção-Dispersão

Nesta subseção é realizada a análise do estimador residual da solução numérica que será influenciada por diferentes discretizações do domínio retangular, ou seja, por diferentes valores para o número de Peclet da malha inicial.

Em SOREK (1988) um método adaptativo 2D Euler-Lagrangiano foi utilizado para o transporte de massa com distribuição espacial da velocidade. A equação de advecçãodispersão (EAD) para um constituinte efluente em um fluido incompressível considera: fator de retardo R > 1, tensor de dispersão hidrodinâmica simétrico e semi-positivo e decaimento radioativo de 1^a ordem. Esse exemplo numérico para comparação com solução analítica e validação do método proposto considerou os seguintes parâmetros físicos: $D_x = D_y = 2 \ m^2/s$, para as dispersões nas direções dos eixos coordenados e $v_x = 0.25 \ m/s$ e $v_y = 0 \ m/s$ como sendo os componentes da velocidade do fluxo subterrâneo [VAROGLU e FINN, 1982 *apud* SOREK, 1988]⁴⁴.

A malha adotada com $\Delta x = \Delta y = 200m$ caracterizou o transporte em regime de advecção dominante, pois o número de Peclet na direção x, foi $P_x = \frac{v_x \Delta x}{D_x} = 25$ e $P_y = 0$ para a direção y. Nesta situação, o menor autovalor do tensor D foi $\varepsilon = D_x = 2$ e a constante $C_c \ge \frac{0.25}{2} = 0.125$ era de tamanho moderado. Ou seja, o regime adotado neste exemplo numérico foi o de pequena advecção.

A solução numérica obtida pelo código JAVA foi calculada sobre um domínio retangular de 3.200*m* x 3.200*m* cuja malha inicial contém 289 nós para constituir 256 elementos quadriláteros. O tempo final da simulação é de $T_f = 50.000s$, dividido em intervalos de tempo $\Delta t = 5.000s$.

As condições iniciais adotadas são C(x, y, 0) = 0 no interior do domínio. As condições de fronteira são dadas pela expressão:

$$\frac{C(x, y, t)}{C_0} = \begin{cases} 1 - \frac{r}{800}, 0 \le r \le 800\\ 0, \quad caso \ contr\[array]rightarrow rightarrow rightarrow$$

sendo C_0 a concentração inicial e *r* a distância entre os nós da fronteira Γ_D e o nó central do lado que contém a frente inicial de contaminação, situado na fronteira esquerda do domínio da figura 5.26.

A implementação JAVA desta condição de contorno possui as seguintes linhas de comando:

```
for (int i = -Ymed; i <= Ymed; ++i){
    double DeltaY = YWELL+(i-desloca)*YWELL/Math.pow(2.0, stepRef);
    if (yy==DeltaY){ //Condição Inicial de Sorek, 1988
        solute = 1.0-(Ymed/Math.pow(2.0, stepRef-3))*Math.abs(i)*DeltaYY/YFINAL;
        concBC.put(node.id,solute);
        concInit[node.id]=solute;
    }
    DeltaY+=DeltaYY;
}</pre>
```

⁴⁴ Varoglu E., Finn W. D. L., "Utilization of the method of characteristics to solve accurately two dimensional transport problems by finite elements". *Inter J. Num Methods in Fluid*, **2**, 173-184, 1982.



FIG 5.26 – Frente de contaminante obtida com os parâmetros físicos adaptados de SOREK (1988), no instante *t* = 10.000s em regime de pequena advecção

A determinação da solução JAVA apenas na metade superior do domínio é uma das flexibilidades existentes no código implementado. Considerando essa simetria na solução numérica, a utilização do domínio computacional aumenta em 50%. A figura 5.26 ilustra a distribuição da concentração do contaminante, para o instante t = 10.000s, na metade superior do domínio computacional. As curvas de isoconcentrações são exibidas em intervalos de 0,2 em 0,2 dos valores normalizados e o comando de atualização é boolean simetria = true;

A análise de erro da solução numérica é realizada em domínios com os seguintes valores de bipartição:

- int stepRef = 3 (256 elementos e 289 nós);
- int stepRef = 4 (1024 elementos e 1089 nós);
- int stepRef = 5 (4096 elementos e 4225 nós).

Os resultados das simulações estão organizados na tabela 5.6.

Malha inicial com 256 elementos $Pe_r = 25 e C_r = 6,25$	Erro residual espacial da malha: 9.7597 Erro relativo da solução 0.0381 Erro residual máximo = 1.9124 no elemento 0 Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 251
x x ·	time: 50000.0
Malha inicial com 1024 elementos $Pe_x = 12,5$ e $C_x = 12,5$	Erro residual espacial da malha: 4.9027 Erro relativo da solução 0.0048 Erro residual máximo = 0.5217 no elemento 0 Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 997
Malha inicial com 4096 elementos $Pe_x = 6,25 e C_x = 25$	Erro residual espacial da malha: 2.4481 Erro relativo da solução 0.0006 Erro residual máximo = 0.1388 no elemento 0 Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 4095

Tabela 5.6 – Desempenho do estimador de erro residual aplicado em malhas iniciais com quantidades distintas de elementos em regime de pequena advecção ($C_c = 0,125$)

Verifica-se que o erro indicado pelo estimador residual diminui consideravelmente com o tipo de malha inicial adotada. O gráfico exibido na figura 5.27 demonstra a correlação perfeita ($R^2 = 1$) entre o valor do erro residual e o número de Peclet da malha correspondente quando o regime é de advecção dominante.



FIG 5.27 – Relação linear entre o erro residual e o número de Peclet da malha inicial para a equação de advecção-dispersão

A equação de regressão linear y = 2,5657x - 0,0502 é uma forte evidência de que o erro indicado pelo estimador residual η_x tende a zero quando o tamanho da malha Δx tende a zero, pois, se $y = Pe_x \rightarrow 0$ segue que $\Delta x \rightarrow 0$, logo

$$\lim_{\Delta x \to 0} \eta_x \approx 0 \tag{5.2}$$

A correlação observada entre os valores dos erros relativos das malhas iniciais acima e o respectivo número de Peclet foi de 97,3%. Para os valores dos erros máximos, determinou-se uma correlação de 99,2% com os correspondentes números de Peclet.

A figura 5.28 ilustra a solução numérica JAVA nas malhas iniciais indicadas na tabela 5.5 e no passo de tempo igual a 50.000*s* (tempo final da simulação). A malha inicial com 1024 elementos ($\Delta x = 100m$) é o refinamento uniforme da malha inicial com 256 elementos ($\Delta x = 200m$). E ainda, a malha inicial com 4096 elementos ($\Delta x = 50m$) é o refinamento uniforme da malha inicial com 1024 elementos ($\Delta x = 100m$).

Conforme os valores do erro máximo, especificados na tabela 5.5, o estimador de erro residual, para a equação do transporte de contaminantes, é adequado para conduzir uma estratégia de refinamento adaptativo, pois, foi capaz de identificar o elemento que apresenta o erro máximo – o elemento 0 – em todos os casos descritos na simulação numérica. Esse elemento identificado situa-se no canto inferior esquerdo dos mapas de isoconcentrações ilustrados na figura 5.26.



FIG 5.28 – Solução numérica JAVA da equação de advecção-dispersão em malhas com diferentes valores de Peclet indicando regime de advecção dominante no passo de tempo igual a 50.000s

Visualmente, não existem diferenças importantes entre as curvas de isoconcentração, no entanto, o valor normalizado é mais preciso quando calculado no nó da malha com 4096 elementos, pois, verifica-se que o erro residual máximo possui o menor valor nessa última malha inicial.

5.4.2 Solução Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Reação

Nesta subseção é realizada a análise do estimador de erro residual espacial da solução numérica que será influenciada pela mudança no parâmetro θ da aproximação da derivada temporal da equação 4.26.

No caso de fluxo unidimensional na direção x, PARKHURST (2004) apresenta uma simulação de transporte de espécies químicas nas três direções x, y e z, com reações de decaimento de 1^a ordem.

Os parâmetros deste exemplo são: velocidade intersticial v = 0.2 m/dia, coeficiente de dispersividade longitudinal $\alpha_L = 1.5 m$, dispersividade horizontal transversal $\alpha_{T_H} = 0.3 m$, dispersividade vertical transversal $\alpha_{T_V} = 0.1 m$ e taxa constante de decaimento $\lambda = 0.05 d^{-1}$. Com estes valores, o tensor de dispersão é a matriz diagonal $D_{3x3} = diag(0.30 \ 0.06 \ 0.02)$. Considerando que o menor autovalor da matriz D_{3x3} , $\varepsilon = 0.02$ é, neste caso, menor que o coeficiente $\lambda = 0.05$, pode-se determinar que

$$C_c \ge \frac{|\mathbf{v}|}{\varepsilon^{\frac{1}{2}} max\{\varepsilon, \lambda\}^{\frac{1}{2}}} = \frac{0.2}{(0.02)^{\frac{1}{2}}(0.05)^{\frac{1}{2}}} = 6.32$$

é uma constante de tamanho moderado, ou seja, o exemplo encontra-se no regime de pequena advecção, cujo número de Peclet é $Pe_x = 20,8$ e o de Courant é $C_x = 0,32$.

O domínio computacional de PARKHURST (2004) originalmente simulou uma região 3D de dimensões 100m de comprimento, 40m largura e 25m de altura, cuja adaptação espacial nas dispersividades do exemplo 2 da seção 3.4 (pg. 22) revelou que o menor autovalor de D_{3x3} , $\varepsilon = 0,02$, era menor que a taxa de decaimento $\lambda = 0,05 d^{-1}$. E ainda, o regime do transporte é de pequena advecção com $C_c = 6,32$ em uma malha inicial.

As condições iniciais são as mesmas da subseção 5.3.1 e a condição de fronteira descreve a concentração normalizada em exatamente 20*m* centrados no lado esquerdo do domínio retangular. Na solução numérica, com o código desenvolvido JAVA, é considerado um domínio 2*D* com matriz de dispersão $D = \begin{bmatrix} 0,06 & 0\\ 0 & 0,02 \end{bmatrix}$ e porosidade constante é igual a 0,1. A figura 5.29 ilustra os valores das concentrações normalizadas obtidas nos 289 nós do domínio 100*m* x 40*m* após a simulação de 400 dias.

0	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0,0008	0,0006	0,0004	0,0002	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0,0029	0,0025	0,0016	0,0009	0,0005	0,0003	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0,4311	0,1855	0,0802	0,0344	0,0149	0,0064	0,0028	0,0012	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4348	0,1887	0,0823	0,0356	0,0155	0,0067	0,0029	0,0013	0,0006	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4338	0,1879	0,0817	0,0353	0,0154	0,0067	0,0029	0,0013	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4341	0,1881	0,0819	0,0354	0,0154	0,0067	0,0029	0,0013	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4340	0,1880	0,0818	0,0353	0,0154	0,0067	0,0029	0,0013	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4341	0,1881	0,0819	0,0354	0,0154	0,0067	0,0029	0,0013	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4338	0,1879	0,0817	0,0353	0,0154	0,0067	0,0029	0,0013	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4348	0,1887	0,0823	0,0356	0,0155	0,0067	0,0029	0,0013	0,0006	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
1	0,4311	0,1855	0,0802	0,0344	0,0149	0,0064	0,0028	0,0012	0,0005	0,0002	0,0001	0	0	0	0	0
0	0,0029	0,0025	0,0016	0,0009	0,0005	0,0003	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0,0008	0,0006	0,0004	0,0002	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

FIG 5.29 – Solução numérica da equação de advecção-dispersão-reação (ADR) com parâmetros físicos adaptados de PARKHURST (2004) no instante t = 400d

O estimador residual para a equação de advecção-dispersão-reação (ADR), com parâmetros físicos fornecidos por PARKHURST (2004), em regime de pequena advecção, apresentou as estimativas do erro para os seguintes esquemas de aproximação da derivada temporal da equação (4.25):

- double theta = 1.0/2.0; //esquema de Crank-Nicolson
- double theta = 2.0/3.0; //esquema de Galerkin
- double theta = 1.0; //esquema de Euler ímplicito

O código JAVA aplica a solução analítica de WEXLER (1992) para obter o erro real da malha e o correspondente índice de eficiência no último passo de tempo, ou seja, em t = 400d.

A tabela 5.7 organiza os resultados obtidos após a simulação para 400 dias.

Verifica-se que a solução numérica obtida pelo esquema de Crank-Nicolson, mesmo numa margem tolerável do índice de eficiência, superestima o erro residual na malha inicial. Quando o esquema empregado é o Euler implícito, a solução numérica subestima o erro real e o índice de eficiência encontra-se um pouco abaixo do esperado.

A solução numérica do esquema de Galerkin, além de apresentar o menor erro residual espacial demonstrou uma excelente eficiência do estimador com índice igual a 1,0415.

Assim, verifica-se que, o erro real da solução numérica é menor quando é obtida pelo esquema de Crank-Nicolson (ver figura 5.30). No entanto, para este problema teste em que o valor de $\lambda = 0.05 d^{-1}$, supera o valor do menor autovalor da matriz de dispersão, $\varepsilon = 0.02$, o esquema de Galerkin é o esquema de discretização temporal com índice de eficiência mais próximo de 1.0. Logo, para as equações de advecção-dispersão-reação, cujos parâmetros físicos foram os adaptados de PARKHURST (2004), o erro residual espacial foi melhor estimado quando o esquema de discretização temporal foi realizado com parâmetro $\theta = \frac{2}{3}$.

	Erro real da malha: 00.8429
	Erro máximo de 00.0571 no nó: 53
Esquema de aproximação de	Erro residual espacial da malha: 1.7420
Esqueina de aproximação de	Erro residual temporal do passo: 0.0000
Crank-Nicolson,	Erro relativo da solução 0.0068
$\theta = 1/2$	Erro residual máximo = 0.5650 no elemento 64
0 = 1/2	Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 255
	$F_{1} = 02.0668$
	time: 400.0
	Erro real da malha: 01.2268
	Erro máximo de 00.0561 no nó: 223
Esquema de aproximação de	Erro residual espacial da malha: 1.2777
Calaulaiu ⁴⁵	Erro residual temporal do passo: 0.0002
Galerkin,	Erro relativo da solução 0.0050
$\theta = 2/3$	Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 255
,	
	Efic[40] = 01.0415
	time: 400.0
	Erro real da malha: 01.8751
	Erro máximo de 00.0544 no nó: 223
	Erro regidual especial de malha: 1 4245
Esquema de aproximação de	Erro regidual temporal do paggo: 0.0021
Fuler implícito	Erro relativo da solução 0.0056
Edici implicito,	Erro residual máximo = 0.3956 no elemento 160
$\theta = 1$	Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 15
	Efic[40] = 00.7597
	time: 400.0

Fabela 5.7 – Desempenho do	estimador de erro	residual aplicado) em malhas iniciais
com distintos valores do	parâmetro θ de d	iscretização temp	oral e $C_c = 6,32$

As figuras a seguir exibem os erros de discretização sobre a mesma malha inicial para os três esquemas de discretização temporais aplicados nesta subseção para as equações ADR.



FIG 5.30 - Distribuição dos erros reais na aplicação do esquema de Crank-Nicolson

⁴⁵ Para referenciar a nomenclatura do método em função do valor de θ ver [DONEA e HUERTA, 2004, pg. 92]

Os valores máximos observados nos picos da figura 5.30 referem-se aos erros reais determinados sobre os nós simétricos 53 e 223. A ocorrência destes valores máximos é ainda observada nesses nós quando se aplica os esquemas de discretização de Galerkin (conforme figura 5.31) e de Euler Implícito (conforme figura 5.32).



FIG 5.31 - Distribuição dos erros reais na aplicação do esquema de Galerkin

Verifica-se que o método de Crank-Nicolson é mais preciso por apresentar erro real da malha menor que os erros reais dos outros dois esquemas. Verifica-se ainda que no esquema de Galerkin, que possui melhor índice de eficiência entre os três esquemas, uma precisão mais apurada que no método de Euler Implícito.



FIG 5.32 - Distribuição dos erros reais na aplicação do esquema de Euler Implícito

5.4.3 Solução Numérica da Equação de Advecção-Dispersão-Sorção

Nesta subseção é realizada uma análise do estimador de erro residual espacial que examina a proporcionalidade existente entre os valores C_D da concentração na fronteira de Dirichlet e o valor do erro estimado.

Um método numérico livre de malha, chamado de método de interpolação de ponto radial, foi apresentado por KUMAR e DODAGOUDAR (2008) para a resolução bidimensional da equação de advecção-dispersão-sorção em meio poroso saturado. Em regime de advecção dominante ($P_x = 2,86$) os autores consideraram um expressivo valor para o fator de retardo, R = 7,267. Dos parâmetros físicos deste exemplo, pode-se obter $C_c \ge 0,57$ para caracterizar o regime de pequena advecção.

A solução numérica de KUMAR e DODAGOUDAR (2008) foi implementada em domínio retangular de dimensões 80*m* x 80*m* e velocidade do fluxo subterrâneo $v_x = 0,864 \text{ m/dia}$. Os valores das dispersividades longitudinal e transversal são, respectivamente, $\alpha_L = \alpha_T = 1,75 \text{ m}$. O tempo final da simulação foi $T_f = 60d$, dividido em passos de tempo $\Delta t = 10d$ (d = dia).

As condições iniciais deste problema teste são iguais às dos exemplos anteriores. Para as condições de fronteira, a frente inicial de contaminação de 20*m*, com $C_D = 1,0 \text{ g/m}^3$, está situada na região central da fronteira esquerda do domínio da figura 5.33. Essa figura exibe a solução numérica JAVA do transporte de contaminantes com parâmetros físicos descritos acima para t = 60d.



FIG 5.33 – Solução numérica da equação de advecção-dispersão-sorção com parâmetros físicos adaptados de KUMAR e DODAGOUDAR (2008) no instante t = 60d

O erro residual estimado da solução numérica da equação de advecção-dispersão-sorção com parâmetros físicos adaptados de KUMAR e DODAGOUDAR (2008) é apresentado na tabela 5.8 no instante $T_f = 60d$ para diferentes valores de C_D .

A análise realizada verificou uma proporcionalidade existente entre o resíduo estimado e o valor da concentração inicial na frente de contaminação. A proporção obtida verifica-se também para o erro relativo e para o erro residual máximo.

A proporcionalidade verificada no exemplo acima é uma característica intrínseca do estimador de erro residual e é observada em todos os passos de tempo da simulação. De forma geral, se η é a quantidade estimada do erro espacial (erro na malha inicial, erro relativo ou resíduo no nível elemento) para uma quantidade constante C_D da concentração na frente de contaminante, então para uma concentração inicial igual a kC_D a quantidade estimada passa a ser $k\eta$, revelando a característica de proporcionalidade do estimador de erro residual espacial.

	Erro residual espacial da malha: 0.8849 Erro relativo da solução 0.0009
$C_{-0.75}$	Erro residual máximo = 0.1284 no elemento 511
$C_D = 0.75$	Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 31
	time: 60.0
	Erro residual espacial da malha: 1.1798
	Erro relativo da solução 0.0012
C_{-10}	Erro residual máximo = 0.1711 no elemento 511
$C_D = 1.0$	Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 31
	time: 60.0
	Erro residual espacial da malha: 2.9495
	Erro relativo da solução 0.0029
C = 25	Erro residual máximo = 0.4279 no elemento 511
$C_D - 2.3$	Erro residual mínimo = 0.0000 no elemento 31
	time: 60.0

Tabela 5.8 – Proporcionalidade existente entre a concentração inicial na fronteira de Dirichlet e o erro residual espacial obtido pelo estimador

O indicador elemento residual R_K , que apresenta a proporcionalidade do estimador de erro, no qual é evidente na norma L^2 do erro real, é dado pela equação:

$$R_{K} = f_{\mathcal{I}} - \frac{1}{\tau_{n}} \Big(C_{\tau_{n}}^{n} - C_{\tau_{n-1}}^{n-1} \Big) + div \Big(D^{n} \nabla (\theta C_{\tau_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\tau_{n-1}}^{n-1}) \Big) \\ - \mathbf{v}^{n} \cdot \nabla \Big(\theta C_{\tau_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\tau_{n-1}}^{n-1} \Big) - \lambda^{n} \Big(\theta C_{\tau_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\tau_{n-1}}^{n-1} \Big)$$

descrita previamente na seção 4.5.

Verifica-se que a proporção quando imposta em C_D é repassada pelo código JAVA para $C_{\mathcal{T}_n}^n$ da equação acima e este, por sua vez, para o elemento residual R_K . O resultado sobre proporcionalidade foi observado em todos os testes numéricos empregados pelo código JAVA. Este comportamento sugere que o código JAVA encontra-se adequadamente implementado ao satisfazer estas mínimas condições que mantêm a proporcionalidade do erro estimado.

5.4.4 Transporte 1D de Atrazina em coluna de solo Saturado

Nesta subseção é realizada uma análise da evolução do erro residual global da solução numérica influenciada pela quantidade de massa de contaminante que é acrescida no domínio poligonal da equação para cada passo de tempo da simulação. Este erro residual global é dado por:

$$\eta_{\mathcal{I}} = \left\{ \left\| C_0 - \pi_0 C_0 \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}} \tau_n \left[(\eta_{\mathcal{T}_n}^n)^2 + (\eta_t^n)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}}$$

com os estimadores residuais $\eta_{T_n}^n$ e estimadores temporais η_t^n descritos na subseção 4.5.1.

Para os valores de entrada adaptados do modelo fracionário de HUANG *et al.* (2008) para o transporte de atrazina, foi realizado uma adequação no programa JAVA definindo a dispersividade transversal nula para caracterizar, desta forma, o problema do transporte de contaminante unidimensional. O domínio, em escala de laboratório, considera uma coluna de solo saturado de 20 *cm* de comprimento e 1 *mm* de largura.

O valor indicado por HUANG *et al.* (2008) para a porosidade foi 20% e o correspondente fator de retardo foi R = 1,825. Foram definidos $v = 1,9 \ cm/min$ para a velocidade no poro e $D = 1,304 \ cm^2/min$ para a dispersão longitudinal. Assim, $C_c \ge \frac{1,9}{0,7145} = 2,659$, ou seja, o experimento foi realizado em regime de pequena advecção.

Empregando as mesmas condições iniciais dos problemas anteriores e concentração normalizada para a condição de fronteira no topo da coluna, a solução numérica que fornece a distribuição da concentração da atrazina no instante final da simulação, t = 20 min, é apresentada na figura 5.34.



FIG 5.34 – Transporte de atrazina em coluna saturada de solo arenoso com parâmetros físicos adaptados de HUANG *et al* (2008) e t = 20 *min*.

A análise do erro residual global deste experimento 1D, realizado em regime de pequena advecção, verifica a correspondência existente entre os resultados do estimador em função da quantidade de massa acrescida nos nós do sistema.

Para isto, a malha inicial de 20*cm* de comprimento por 1*mm* de largura, com 63 nós, é implementada no código JAVA através dos comandos:

A quantidade de massa acrescida no sistema computacional é determinada pela diferença entre a massa total de contaminante observada em um instante t_n com a quantidade de massa total da malha no instante anterior t_{n-1} .

É determinada uma correlação negativa igual a -0,9165 entre o aumento de η_{τ} e a quantidade de massa que foi acrescida na malha a cada passo de tempo. Isto significa que, de acordo com a evolução de η_{τ} , o estimador residual dada pela tabela 5.9, o estimador residual global da solução numérica corresponde de forma adequada com a quantidade de massa acrescida no sistema computacional. A figura 5.35 exibe o gráfico com as disposições destas correspondências.



FIG 5.35 – Relação entre o erro residual global da solução numérica e o correspondente acréscimo de massa no sistema computacional. Os parâmetros físicos da simulação foram adaptados do transporte de atrazina em solo saturado de adaptados de HUANG *et al.* (2008)

Os valores das abscissas estão em ordem decrescente para ficar de acordo com o comportamento da quantidade de massa acrescida a cada passo de tempo.

Os resultados dos 20 passos de tempo da simulação estão organizados na tabela 5.9 e apresenta, para cada passo de tempo, os valores decrescentes da quantidade de massa do contaminante introduzidas nos nós da malha inicial.

Tabela 5.9 – Análise do erro da solução numérica do transporte de atrazina em coluna de solo arenoso saturado com parâmetros físicos adaptados de HUANG *et al.* (2008) e a respectiva quantidade de massa no sistema

Passo de tempo	Estimador residual $\eta_{_{\mathcal{I}}}$	Massa no sistema
time: 1,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 2,8162	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 2,8162	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 03,3254
time: 2,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 3,6794	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 2,3679	ACRESCIDA PELOS NOS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 02,8917
time: 3,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇAO: 3,8815	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da maina: 1,2360	NO SISTEMA - 01 9760
time: 1 0	EPPO PESIDIAL CLOBAL DA SOLUÇÃO: 3 9323	OUDNETDADE DE MASSA
cime: 4,0	Erro residual espacial da malha: 0 6305	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = $01,3242$
time: 5,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 3,9640	OUANTIDADE DE MASSA
, -	Erro residual espacial da malha: 0,5000	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,8913
time: 6,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 3,9720	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,2523	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,6043
time: 7,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 3,9843	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3127	ACRESCIDA PELOS NOS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = $00,4359$
time: 8,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇAO: 3,9921	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da maina: 0,2496	NO SISTEMA - 00 2954
time: 9 0	FREO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUCÃO: 4 0053	OUANTIDADE DE MASSA
cime: 9,0	Erro residual espacial da malha: 0 3243	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = $00,2200$
time: 10,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,0170	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3061	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,1457
time: 11,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,0323	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3516	ACRESCIDA PELOS NÓS
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,1165
time: 12,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇAO: 4,0466	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3394	ACRESCIDA PELOS NOS
time: 12 0	EPPO PESIDUAL CLOPAL DA SOLUÇÃO: 4 0632	OUDMEIDADE DE MACCA
cime: 13,0	Erro residual espacial da malha: 0 3671	ACRESCIDA DELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = $00,0656$
time: 14,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,0788	OUANTIDADE DE MASSA
, -	Erro residual espacial da malha: 0,3561	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,0513
time: 15,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,0959	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3741	ACRESCIDA PELOS NÓS
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,0397
time: 16,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇAO: 4,1120	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3643	ACRESCIDA PELOS NOS
timo: 17 0	EPPO PESIDUAL CLOBAL DA SOLUÇÃO: 4 1293	NO SISIEMA = $00,0337$
cime: 17,0	Erro residual espacial da malha: 0 3770	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = $00,0282$
time: 18,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,1457	QUANTIDADE DE MASSA
, -	Erro residual espacial da malha: 0,3683	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,0252
time: 19,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,1629	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3779	ACRESCIDA PELOS NÓS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = 00,0225
time: 20,0	ERRO RESIDUAL GLOBAL DA SOLUÇÃO: 4,1793	QUANTIDADE DE MASSA
	Erro residual espacial da malha: 0,3704	ACRESCIDA PELOS NOS
	Erro residual temporal do passo: 0,0000	NO SISTEMA = $00,0206$

Verifica-se nesta tabela 5.9 que o erro temporal η_t^n , dado pela equação 4.37, é um valor insignificante para a presente simulação do transporte da atrazina em coluna de solo saturado. Ou seja, considerando a amplitude de cada intervalo de tempo $\tau_n = 1,0$ e para $\eta_t^n \approx 0$, o erro residual global desta aplicação é simplificado para a expressão

$$\eta_{\mathcal{I}} = \left\{ \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}} \tau_n \left(\eta_{\mathcal{T}_n}^n \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Esta aplicação mostra que, após simples ajustes, o estimador a *posteriori* implementado possui características abrangentes, no sentido de ser capaz de computar o erro numérico do modelo de transporte de contaminantes unidimensional.

114

Resultados
6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentado um estimador de erro *a posteriori* para a solução numérica da equação do transporte de contaminantes em meio poroso saturado, cujas características são de uma equação diferencial parcial parabólica.

O código desenvolvido em linguagem JAVA, compara a solução numérica da equação de advecção-dispersão-reação com a sua correspondente solução analítica dada por WEXLER (1992), em meio isotrópico e homogêneo, com campo de velocidades uniforme e regime predominantemente advectivo. Conclui-se que o estimador de erro pertencente à classe dos métodos residuais apresenta performance superior ao estimador de erro da classe dos métodos de recuperação, o estimador ZZ, quando o regime de transporte é o de pequena advecção.

Para minimizar a ocorrência de oscilações espúrias da solução numérica da equação do transporte de contaminantes foi implementado o esquema S^3 [WENDLAND e SCHMID, 2000] (*Symmetrical Streamline Stabilization*) no código JAVA que obtém a solução pelo método de elementos finitos.

De simplicidade computacional, o estimador residual espacial dado por

$$\boldsymbol{\eta}_{\mathcal{T}_n}^n = \left\{\sum_{K\in\tilde{\mathcal{T}}_n} \boldsymbol{\alpha}_K^2 \|\boldsymbol{R}_K\|_{L^2(K)}^2\right\}^{\frac{1}{2}}$$

demonstrou-se assintoticamente estável para os problemas testes do transporte de contaminantes validados na literatura. O estimador ZZ, que emprega os métodos de recuperação, apresentou baixos índices de eficiência para os mesmos problemas.

Para avaliação do erro no patch de elementos finitos, o indicador elemento residual

$$R_{K} = f_{\mathcal{I}} - \frac{1}{\tau_{n}} \left(C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) + div \left(D^{n} \nabla (\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) \right)$$
$$- \mathbf{v}^{n} \cdot \nabla \left(\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) - \lambda^{n} \left(\theta C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right)$$

é convergente, com o avanço do tempo, tanto para os nós à frente da fronteira de Dirichlet, quanto para os nós adjacentes à fronteira de Dirichlet.

Conclui-se que o estimador residual, através da análise no *patch* de elementos, é capaz de capturar a região da malha grosseira que apresenta o maior erro numérico conforme apresentado em comparação com uma solução analítica da equação do transporte.

O valor do indicador erro temporal, ou norma de energia do erro,

$$\eta_{t}^{n} = \left\| \left\| C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right\| \right\| = \left\{ \varepsilon \left\| \nabla \left(C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right) \right\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \beta \left\| C_{\mathcal{T}_{n}}^{n} - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1} \right\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right\}^{\frac{1}{2}} \right\}$$

converge para zero com o avanço no passo de tempo. Este fato é um requisito mínimo para que o indicador temporal seja capaz de conduzir estratégias de refinamento adaptativo do intervalo de tempo da simulação numérica.

As curvas de passagem de soluto, ou curvas BTC[], provenientes da solução numérica e da solução analítica, para nós frontais e nós adjacentes à fronteira de Dirichlet, apresentam excelente concordância após a obtenção de parâmetros responsáveis pelos ajustes no erro fornecido pelo estimador residual espacial.

O estimador de erro residual η é limitado inferior e superiormente pela norma euclidiana do erro atual ||e||, ou seja, sobre a malha grosseira, é possível encontrar constantes C_1 e C_2 , tais que:

$$C_1 \|e\| \le \eta \le C_2 \|e\|$$

para todos os passos de tempo $t \ge t_i$. Desta forma, o erro residual tende a zero na mesma taxa de convergência que o erro atual tende à zero.

Com a reorganização dos nós da malha inicial em uma estratégia que concentra os nós disponíveis junto à frente de contaminação, o estimador residual demonstrou as seguintes melhorias:

- diminuição do erro global e do erro residual analisado no *patch* de elementos;
- aumento na taxa de convergência do índice de eficiência para o valor 1;
- aumento na taxa de convergência do estimador de erro temporal para o valor 0 e
- diminuição da amplitude do intervalo (C_1, C_2) formado pelas constantes positivas que limitam o erro residual na desigualdade $C_1 ||e|| \le \eta \le C_2 ||e||$.

Na estratégia de refinamento adaptativo com parâmetro $\tau = 0,5$, o estimador residual correspondeu com as seguintes contribuições:

- menor quantidade na indicação de elementos para o refinamento de malhas com atraso;
- diminuição do erro máximo e do erro espacial no patch de elementos;
- diminuição do erro espacial global da malha com atraso e
- diminuição da amplitude do intervalo (C_1, C_2) para limitar o erro na malha com atraso.

Em regime de pequena advecção, o estimador residual apresentou-se de forma adequada na análise do erro da solução numérica do transporte de contaminantes em água subterrânea em escala regional, em escala de campo e em escala de laboratório. Nos problemas testes analisados da literatura, que apresentam diferentes fenômenos de transporte para modelar o transporte de contaminante em meio poroso saturado, o estimador residual corresponde satisfatoriamente aos testes realizados, conforme descrito abaixo:

• O erro residual estimado da solução numérica da equação de advecção-dispersão (EAD), em escala regional, apresenta valor proporcional ao número de Peclet local, que é caracterizado pelo grau de refinamento uniforme da malha inicial. Isto significa que o estimador residual espacial tende a um valor nulo quando o tamanho da malha tende a zero. Ou seja, o erro residual espacial é assintoticamente correto no sentido de tender a zero na mesma taxa que o erro real tende a zero quando o tamanho da malha diminui.

• Com a implementação do termo de reação de 1^a ordem, o estimador residual para a equação de advecção-dispersão-reação (ADR), em escala de campo e com os parâmetros físicos fornecidos por PARKHURST (2004), mostrou que as estimativas do erro são sensíveis aos esquemas de aproximação da derivada temporal tais como: Crank-Nicolson, Galerkin ou Euler Implícito.

• Ainda em escala de campo, a análise do erro da solução numérica da equação de advecção-dispersão-sorção (ADR) em meio poroso saturado, com parâmetros físicos adaptados de KUMAR e DODAGOUDAR (2008), apresentou estimativas residuais proporcionais à concentração inicial na fronteira de Dirichlet. Esta característica, evidente na norma L^2 do erro atual, pode ser estendida para qualquer problema teste que emprega o estimador residual em regime de pequena advecção.

• O estimador residual do código JAVA abrange a solução numérica dos problemas do transporte unidimensional de contaminantes em meio poroso saturado. A adequação do estimador no transporte de atrazina em coluna de solo saturado, com os parâmetros físicos de HUANG *et al.* (2008) em escala de laboratório, apresentou uma boa correlação entre a quantidade de massa de soluto acrescida no sistema computacional e o erro global

da solução dado por
$$\eta_{\mathcal{I}} = \left\{ \left\| C_0 - \pi_0 C_0 \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{I}}} \tau_n \left[(\eta_{\mathcal{T}_n}^n)^2 + (\eta_t^n)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Com a descrição acima, conclui-se que o estimador residual proposto é robusto no sentido de abranger uma grande variedade de aplicações dos fenômenos de transporte de contaminantes em meio poroso saturado e regime de pequena advecção. Para esses problemas, a confiabilidade no método empregado para a obtenção da solução numérica é garantida ao verificar-se que o estimador residual é assintoticamente exato, ou seja, ao verificar-se que o erro estimado aproxima-se do erro atual da solução em malha grosseira.

De forma geral, o estimador residual espacial proposto, além de indicar a precisão da solução numérica avaliada, mensurou a distribuição do erro local sobre o domínio computacional, para cada passo de tempo das simulações apresentadas.

Do ponto de vista da Engenharia, o estimador de erro *a posteriori* deste trabalho possui custo computacional menos expressivo do que aquele necessário para recalcular a solução numérica em uma malha totalmente refinada. Este fato pode ser observado se comparar a grande quantidade de classes da POO que compõem o código JAVA para obter a solução numérica da equação do transporte com o número reduzido de classes, do mesmo código, para obter a correspondente estimativa do erro residual.

6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Esta seção descreve as sugestões para trabalhos futuros que poderiam complementar os assuntos abordados nesta tese ou, de forma mais específica, permitir a continuidade nas discussões dos tópicos alinhados com as metodologias para estimativa *a posteriori* do erro de aproximação da solução numérica da equação de advecção-dispersão-reação em meio poroso.

Com o desenvolvimento do código JAVA até o presente, torna-se viável o acoplamento entre a solução numérica da equação do fluxo subterrâneo e a solução numérica do transporte de contaminantes em águas subterrâneas. A primeira equação fornece o campo de velocidades de um domínio computacional, em função da descrição das condutividades hidráulicas, e é posteriormente aplicada na equação de advecção-dispersão-reação, fornecendo caráter realista aos fenômenos de transporte no aquífero que está sendo modelado. Ambas as soluções já possuem os seus respectivos estimadores de erros *a posteriori* implementadas no código JAVA favorecendo o emprego, de forma independente, das estratégias de refinamento adaptativo que poderiam ser empregadas.

A otimização do código JAVA poderia resultar com a implementação de um *solver* mais eficiente do ponto de vista computacional, pois, métodos iterativos disponíveis na literatura permitem a resolução de imensos sistemas algébricos de equações. Entre esses métodos, citase: o método do gradiente conjugado pré-condicionado, algoritmo do gradiente bi-conjugado estabilizado, algoritmos *multigrid*, etc.

Uma comparação de desempenho entre o estimador residual com o estimador ZZ para as soluções numéricas do modelo de fluxo subterrâneo poderia unificar o emprego do estimador de erro. Uma vez que o estimador residual também se aplica na equação do transporte com difusão dominante, a avaliação de adequação e robustez do estimador residual para a equação do fluxo parece ser muito promissora.

Em relação às funções de aproximação da solução por elementos finitos, seria interessante a verificação do estimador residual na análise em funções polinomiais de grau 2. Estas funções aumentam a precisão da solução numérica, e assim, é esperado que o estimador residual responda com valores menores para os erros de aproximação, indicando melhorias na solução numérica.

É possível, ainda, desenvolver e implementar uma estratégia de refinamento adaptativo temporal. Esta estratégia seria conduzida pela norma de energia do código JAVA para discretizar o intervalo de tempo da simulação dos processos transientes da equação do transporte de contaminantes em meio poroso e regime de pequena advecção. Assim, o código asseguraria a qualidade da solução numérica minimizando o correspondente erro temporal.

As técnicas desenvolvidas para obtenção da solução numérica da equação do fluxo e do transporte de contaminantes, seguidas dos seus respectivos estimadores de erro, e integradas com um código aberto de Sistema de Informações Geográficas (SIG), possibilitará uma adequação nas representações das características físicas e geométricas do aquífero confinado.

O desenvolvimento do código em linguagem JAVA encontra-se propício para essa integração e a avaliação do proposto estimador residual poderia se estender para as condições heterogêneas e anisotrópicas do meio poroso saturado.

Outra extensão proposta poderia ser para as condições do meio poroso não-saturado, empregando o estimador residual na solução numérica da equação de Richards.

ANEXO I - O TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM ÁGUA SUBTERRÂNEA

O movimento de contaminantes dissolvidos em aqüíferos poderia seguir na direção dos poços de abastecimentos públicos. Na existência de uma fonte contínua de contaminação movendo pela água subterrânea, forma-se uma área contaminada, chamada de pluma de contaminação. Esta combinação do movimento da água subterrânea com a fonte contínua de contaminação poderia, no entanto, atingir grandes extensões do aqüífero, condenando-o em grandes áreas e em vastos volumes.

Algumas substâncias perigosas são dissolvidas de modo muito lento na água. Sendo substâncias que extravasam mais rápido que o aqüífero pode dissolver, estes contaminantes permanecem em sua forma líquida. Se o líquido é menos denso que a água (ex. o óleo), o poluente flutua sobre o topo do lençol freático. Estes poluentes são chamados de LNAPLs (*light non-aqueous phase liquids*). Caso contrário, se o líquido é menos denso que a água, os poluentes são chamados de DNAPLs (*dense non-aqueous phase liquids*). Os DNAPLs tendem a concentrar no fundo do aqüífero. Estas concentrações que contaminam o aqüífero dissolvem-se muito vagarosamente e são transportadas, predominantemente, de acordo com o movimento da água subterrânea. Às vezes, pequenos glóbulos de DNAPLs aderem aos espaços entre as partículas sólidas, ocasionando a chamada *contaminação residual* da água subterrânea.

Vários modelos que simulam o transporte de contaminantes dissolvidos em água subterrânea são descritos por equações de transporte de soluto por advecção-difusão. Esta equação diferencial parcial deriva do princípio da conservação de massa – a equação da continuidade, no qual afirma que, a taxa de variação da massa de soluto dentro de um volume de controle do meio poroso é igual a diferença entre o fluxo de soluto que entra e o fluxo que sai do volume, ajustados por perdas ou ganhos da massa de soluto devido a reações químicas ou degradação biológicas. O fluxo do soluto entrando no volume de controle é caracterizado por dois processos principais: a advecção e a dispersão hidrodinâmica⁴⁶. Esse segundo processo físico é ainda representado pelo efeito combinado de outros dois processos: a difusão molecular e a dispersão mecânica.

⁴⁶ Dispersão de uma solução que flui através de um meio poroso, devido à difusão molecular e à não homogeneidade de velocidades microscópicas.

Outros processos secundários contribuem para o espalhamento ou retardamento na propagação de substâncias perigosas no aqüífero que são a sorção⁴⁷ e a degradação bioquímica. A sorção ocorre quando o contaminante adere às partículas do solo. Este tipo de contaminação é muito difícil de remover. A degradação bioquímica acontece quando microorganismos, tais como bactérias e fungos, degradam substâncias orgânicas ou inorgânicas que contaminam a água subterrânea. Neste processo natural, as substâncias perigosas freqüentemente tornam-se menos nocivas.

OS PRINCIPAIS MECANISMOS DE TRANSPORTE

Nesta seção serão descritas, com pouco mais de detalhes, os principais processos físicoquímicos responsáveis pelo transporte de contaminantes em água subterrânea. O interesse neste detalhamento refere-se à obtenção do modelo matemático que descreve o transporte do contaminante em solo saturado.

O Transporte Advectivo

Quando a água está se movendo no solo, o contaminante é conduzido por um processo físico conhecido por *fluxo convectivo* ou *fluxo advectivo de massa*. A melhor maneira de visualizar este transporte advectivo é através de um procedimento conhecido por *fluxo tipo pistão*, em que a frente de água avança deslocando o contaminante como um pistão [YANOSIK e MCCRACKEN, 1979].

Em aqüíferos livres ou confinados, o transporte advectivo é a principal forma de transporte de contaminante. O movimento das partículas de soluto, ao longo da direção média do fluxo, ocorre na mesma taxa de variação da velocidade intersticial⁴⁸ média da água no meio poroso.

⁴⁷ Termo genérico utilizado para indicar o processo pelo qual o soluto é repartido entre a fase líquida e a superfície das partículas sólidas.

⁴⁸ Velocidade do movimento das partículas de água no interior dos poros, bem como de um poro para outro.

Em meio saturado, a densidade de fluxo da água no solo, ou *velocidade aparente*, é determinada pela lei de Darcy⁴⁹, no caso estacionário por:

$$\mathbf{v}^* = -\mathbf{K}\nabla h \tag{A.1}$$

sendo \mathbf{v}^* a velocidade aparente $\left[\frac{L}{T}\right]$,

K o tensor de condutividade hidráulica do meio $\left[\frac{L}{T}\right]$ e

 ∇h o gradiente hidráulico [*adimensional*].

Assim, cada componente do transporte de soluto que ocorre por advecção será dada pelo produto entre a concentração do soluto $C\left[\frac{M}{L^3}\right]$ e a correspondente componente v_x , v_y ou $v_z\left[\frac{L}{T}\right]$ da velocidade aparente da água subterrânea. Ou seja, para $\mathbf{v}^* = (v_x, v_y, v_z)$ segue:

$$\mathbf{J}_a = \mathbf{v}^* C \tag{A.2}$$

O Transporte Difusivo

A difusão molecular refere-se ao fluxo difusivo do soluto na direção do gradiente de concentração. Este processo ocorre em função do movimento browniano dos íons na solução. Os íons de uma região de concentração alta tendem a se misturar com os íons de uma região de baixa concentração, estabelecendo uma mesma distribuição no espaço. Este fluxo difusivo é dado por uma relação empírica conhecida como a primeira lei de Fick,

$$\mathbf{J}_d = -\Theta \mathbf{D}_d \nabla C \tag{A.3}$$

sendo \mathbf{D}_d o tensor diagonal da difusão molecular $\left\lfloor \frac{L^2}{T} \right\rfloor$,

 θ conteúdo de umidade do solo [*adimensional*],

 ∇C o gradiente de concentração $\left\lfloor \frac{M}{L^4} \right\rfloor$, e

C a concentração de soluto (massa de soluto por unidade de volume do fluido) $\left[\frac{M}{r^3}\right]$.

⁴⁹ Henry Philibert Gaspard Darcy (1803-1858) foi um engenheiro francês que forneceu importantes contribuições à hidráulica.

O tensor de difusão contém as medidas de velocidades em que as moléculas ou íons estão difundindo através da substância porosa e trata-se de um coeficiente de transporte estacionário. Ele quantifica a dificuldade em que as moléculas ou íons possuem para se difundir enquanto movimentam-se através do meio poroso. O valor destes coeficientes tende a aumentar com o aumento da temperatura do solo ou do conteúdo de umidade e diminuem com o aumento da massa atômica do soluto.

A difusão no solo é relativamente um processo de transporte muito lento e opera sobre pequenas distâncias. Em situações em que o movimento de água é vagaroso, a difusão é o mecanismo de transporte dominante.

Transporte de contaminantes no solo por difusão é complicado pelo fato que os íons deveriam manter-se eletricamente neutro quando se difundirem.

O Transporte por Dispersão Mecânica

A tendência da molécula de soluto tornar-se mais difusa com o tempo quando a água move-se no solo é conhecido por *dispersão mecânica*. A dispersão ocorre quando existe uma zona de transição entre duas soluções de diferentes composições químicas. A variação da pluma de contaminação é devida tanto à difusão quanto à dispersão mecânica. Portanto, em geral, não é possível separar os efeitos destes dois processos de transporte.

Especificamente, a dispersão mecânica, ou dispersão hidráulica, descreve a mistura e espalhamento do soluto ao longo da direção direta ou da direção transversal do fluxo em resposta à variação na velocidade intersticial do fluido. Para escalas microscópicas, estas flutuações da velocidade ocorrem em função da tortuosidade no caminho que o fluxo percorre dentro do poro, e para escalas macroscópicas, a dispersão mecânica é devido à variação local da condutividade hidráulica e à presença de heterogeneidades no interior do aqüífero⁵⁰.

Testes de laboratórios em colunas de solos demonstram que o fluxo de soluto por dispersão mecânica também pode ser descrito pela primeira lei de Fick,

$$\mathbf{J}_{m} = -\Theta \mathbf{D}_{m} \nabla C \tag{A.4}$$

sendo que \mathbf{D}_m é o tensor simétrico da dispersão mecânica $\left\lfloor \frac{L^2}{T} \right\rfloor$.

⁵⁰ BEAR J. 2001 Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport Copyright © 2000 by Jacob Bear, Haifa, Israel disponível em <u>http://www.cmdlet.com/demos/mgfc-course/mgfctoc.html#toctoc</u>

A magnitude do tensor de dispersão depende da velocidade da água no poro e do coeficiente de difusão do soluto. Uma vez que os efeitos da difusão e da dispersão mecânica, sobre a distribuição da concentração, são semelhantes, estes processos provenientes de mecanismo de transporte distintos são freqüentemente combinados em um mecanismo chamado de *dispersão hidrodinâmica*.

O Transporte por Dispersão Hidrodinâmica

A dispersão hidrodinâmica é o fluxo de soluto devido aos efeitos combinados da difusão molecular e da dispersão mecânica. A sua formulação é dada por

$$\mathbf{J}_{h} = \mathbf{J}_{m} + \mathbf{J}_{d} = -\theta \mathbf{D}^{*} \nabla C \tag{A.5}$$

sendo que $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_d$ é o tensor da dispersão hidrodinâmica⁵¹ $\left\lfloor \frac{L^2}{T} \right\rfloor$.

A difusão molecular independe da velocidade da água subterrânea e, em função do pequeno tamanho do tensor \mathbf{D}_d , a contribuição do transporte de soluto por difusão é usualmente negligenciado quando comparado com a contribuição do transporte de soluto por advecção ou por dispersão mecânica para velocidades não muito pequenas do fluxo de água subterrânea.

A mistura ou dispersão que ocorre na direção do caminho do fluxo é chamada de *dispersão longitudinal*. A dispersão na direção normal do caminho do fluxo é chamada de *dispersão transversal*. Estas duas direções da dispersão mecânicas possuem seus coeficientes como resultados da velocidade linear do fluido na direção principal do fluxo e da propriedade do solo conhecida por *dispersividade*. Expressões matemáticas que descrevem os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal estão largamente disponíveis na literatura onde é possível citar: [ISTOK,1989, pg. 472], [WEXLER,1992, pg. 4] e [SUTRA,2003, pg. 36].

No solo, a distribuição de velocidade depende da geometria do solo, do conteúdo de umidade, da própria concentração de soluto e, portanto, relações empíricas entre o tensor \mathbf{D}^* e outros parâmetros macroscópicos observáveis têm sido estabelecidas.

⁵¹ Embora os parâmetros \mathbf{D}_m e \mathbf{D}_d sejam provenientes de diferentes processos físicos, eles podem ser adicionados uma vez que possuem o mesmo efeito físico.

A relação $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_d$ resulta de considerações estatísticas do transporte de soluto como conseqüência da distribuição randômica da velocidade de água no meio poroso.

Reações Químicas de Primeira Ordem

Um processo químico, tal como o decaimento radioativo ou a decomposição bioquímica, geralmente envolve a conversão irreversível do soluto A no soluto B. A taxa de degradação (química ou biológica) é freqüentemente expressa por modelos de ordem zero ou de primeira ordem. No segundo modelo, a descrição da taxa de degradação é considerada proporcional à concentração do soluto, isto é, o processo químico é dado pela expressão

$$\frac{d[A]}{dt} = -\lambda[A] \tag{A.6}$$

sendo λ o coeficiente de decaimento ou de degradação $\left[\frac{1}{T}\right]$. Este coeficiente, que representa a declividade da reta na figura A.1, pode ser expresso em termos do tempo de meia vida⁵² do soluto, $T_{\frac{1}{2}}$, da seguinte forma:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{\frac{1}{2}}} = \frac{0.693}{T_{\frac{1}{2}}}$$



⁵² Tempo necessário para que a concentração inicial de espécies no soluto seja reduzida pela metade.

Outras equações para o modelo cinético da taxa de degradação são encontradas na literatura, no entanto, o modelo (1.6), apesar da simplicidade, é aplicável à maioria dos contaminantes conhecidos para a água subterrânea [DYMINSKI, 2006].

A taxa de produção de soluto devido as reações de sorção (ou dessorção) entre o soluto e o meio poroso dentro do volume de controle pode ser obtido se considerar a combinação $[A] = [\theta C + \rho_b K_d C]$ sendo ρ_b a densidade volumétrica⁵³ do meio poroso e K_d [*adimensional*] é o coeficiente de partição entre a reação progressiva e a reação reversa [QUEIROZ, 2002].

Outros Processos Bio-Físico-Químicos do Transporte de Contaminantes

Outros processos poderiam envolver complexas interações bio-física-químicas para propiciar tanto o retardo quanto a aceleração do movimento de uma substância química através da água subterrânea.

De acordo com DYMINSKI (2006), os principais tipos de reações que causam a *transferência de substância* para a estrutura sólida retardando a frente de contaminação são: adsorção, absorção ou sorção hidrofóbica.⁵⁴

Entre as principais reações causadoras de *atenuação das substâncias* no solo, por perdas ou transformação em outras substâncias citam-se: biodegradação, degradação abiótica, volatização e decaimento radioativo.

Enfim, as reações que *aumentam a mobilidade* dos contaminantes através do solo são: dissolução, formação de complexos ou quelação, co-solvência e ionização.

Outras características do contaminante que influenciam o transporte são: concentração, densidade, polaridade, solubilidade, pressão de vapor, pH, potencial iônico, demanda bioquímica de oxigênio (DBO) e demanda química de oxigênio (DQO), teor e finura de sólidos em suspensão e a toxidez.

O meio poroso influencia o transporte de contaminantes devido às características de: tipo de matéria orgânica, distribuição granulométrica, mineralogia, distribuição de vazios, capacidade de troca iônica e grau de saturação.

⁵³ O *bulk density* ρ_b também é conhecido por densidade do solo seco [*adimensional*].

⁵⁴ Adsorção refere-se à adesão de íons ou moléculas em uma camada extremamente fina da superfície sólida na qual está em contato. A absorção ocorre quando o contaminante se difunde no interior sólido da matriz porosa ocasionando um fenômeno volumétrico.

Alguns dos processos acima, apesar de sua importância nos fenômenos de transporte dos contaminantes, não foram considerados no modelo matemático em razão da ausência, até o presente, de uma literatura mais ampla para validar, verificar ou até mesmo estimar os parâmetros que descrevem as leis destas reações em meio poroso saturado.

ANEXO II – SYMMETRICAL STREAMLINE STABILIZATION-S³

O esquema *Symmetrical Streamline Stabilization* (S^3) fornece um algoritmo robusto para resolver a equação de advecção-dispersão, assegurando uma solução estável mesmo para problemas dominados por advecção. Para evitar as indesejáveis oscilações espúrias ocasionadas pela instabilidade numérica dos processos desses transportes dominados por advecção, o desenvolvimento matemático do esquema de estabilização S^3 se baseará no procedimento de separação de operadores descritos em [WENDLAND e SCHMID, 2000].

Sem perdas de generalidades, o esquema de estabilização S^3 inicialmente considerará a seguinte equação governante do transporte por advecção-dispersão:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_a \nabla c - \nabla (\boldsymbol{D} \nabla c) = Q \delta(c^* - c)$$
(A.7)

sendo c(x,t) a concentração do contaminante na posição x e tempo t, $v_a(x)$ o vetor velocidade, D(x) o tensor de dispersão hidrodinâmica, Q a fonte pontual com concentração c^* e δ a função delta de Dirac⁵⁵.

Quando a técnica de separação de operadores (*operator splitting*) é aplicada na equação (A.7), são produzidos os mesmos efeitos que a aproximação Euler-Lagrangiana: a separação da advecção e da dispersão. A aproximação numérica pelo método de elementos finitos (FEM) conduz a um único sistema de equações, com efeito inerente de *upwind* [WENDLAND, 2004].

A equação diferencial (A.7) pode ser aproximada no tempo, considerando uma aproximação por diferença finita⁵⁶ de primeira ordem com fator peso θ

$$\frac{c^{+}-c^{-}}{\Delta t} + \theta(L_1 + L_2)c^{+} + (1-\theta)(L_1 + L_2)c^{-} = f$$
(A.8)

sendo

 c^+ a concentração do contaminante no instante $(t + \Delta t)$;

 c^{-} a concentração do contaminante no instante (t);

⁵⁵ Segundo [WENDLAND, 2004, p. 114], reações químicas ou decomposições de 1ª ordem são facilmente incorporadas ao modelo matemático e numérico.

⁵⁶ O objetivo do método das diferenças finitas é transformar um problema composto por equações diferenciais em um problema formado por equações algébricas, utilizando a expansão da função em série de Taylor em torno de um ponto dado.

 Δt o intervalo de tempo;

$$L_{1} = -\nabla (\mathbf{D}\nabla c) + Q\delta s$$
$$L_{2} = v_{a}\nabla e$$
$$f = Q\delta c^{*}.$$

Segundo [WENDLAND e SCHMID, 2000], com a aproximação adotada, a equação (A.8) pode ser separada em uma parte dispersiva que depende somente do operador linear L_1

$$\frac{c^d}{\Delta t} + \theta L_1 c^d = \frac{c^-}{\Delta t} - (1 - \theta) L_1 c^- + f \tag{A.9}$$

e uma parte advectiva, que depende somente do operador linear L_2

$$\frac{c^+}{\Delta t} + \theta L_2 c^+ = \frac{c^d}{\Delta t} - (1 - \theta) L_2 c^d \tag{A.10}$$

O componente dispersivo de concentração c^d foi introduzido como uma incógnita provisória. As derivadas espaciais são discretizadas de acordo com a técnica proposta por KÖNIG (1994)⁵⁷: a solução exata para cada etapa é aproximada pelo FEM usando o esquema tradicional de interpolação

$$c(x, y, z, t) \approx \sum_{j=1}^{N} \varphi_j(x, y, z) c_j(t)$$
(A.11)

sendo φ_i uma função de interpolação linear.

Para a parte dispersiva dada pela equação (A.9), a solução é obtida usando a aproximação de Galerkin tradicional. O mínimo é obtido ponderando o resíduo com respeito à função-teste φ_i

$$\int_{\Omega} \varphi_i \left[\frac{\sum \varphi_j c_j^d}{\Delta t} + \theta L_1 \sum \varphi_j c_j^d \right] d\Omega = \int_{\Omega} \varphi_i \left[\frac{\sum \varphi_j c_j^-}{\Delta t} - (1 - \theta) L_1 \sum \varphi_j c_j^- + \mathbf{F} \right] d\Omega \quad (A.12)$$

que pode ser reescrita em notação matricial como

$$\left[\frac{M}{\Delta t} + \theta \boldsymbol{B}\right] c^{d} = \left[\frac{M}{\Delta t} - (1 - \theta)\boldsymbol{B}\right] c^{-} + \boldsymbol{F}$$
(A.13)

⁵⁷ König, C. **Operator Split for Three Dimensional Mass Transport Equation**, *Proceedings of Computational Methods in Water Resources X*, 1, 309-316, Heidelberg, 1994.

sendo

$$\begin{split} \boldsymbol{M} &= \int_{\Omega} \varphi_{i} \varphi_{j} d\Omega; \\ \boldsymbol{B} &= \int_{\Omega} \boldsymbol{D} \nabla \varphi_{i} \nabla \varphi_{j} d\Omega + \int_{\Omega} Q \delta \varphi_{i} \varphi_{j} d\Omega \ \mathrm{e} \\ \boldsymbol{F} &= \int_{\Omega} Q \delta c^{*} \varphi_{j} d\Omega. \end{split}$$

A parte advectiva, dada pela equação (A.10), pode ser aproximada pelo método dos mínimos quadrados. O resíduo da aproximação é minimizado, através de ponderação com função-teste $\frac{\varphi_i}{\Delta t} + \theta v_a \nabla \varphi_i$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\varphi_i}{\Delta t} + \theta v_a \nabla \varphi_i \right) \left[\frac{\sum \varphi_j c_j^+}{\Delta t} + \theta L_2 \sum \varphi_j c_j^+ \right] d\Omega =$$
$$\int_{\Omega} \left(\frac{\varphi_i}{\Delta t} + \theta v_a \nabla \varphi_i \right) \left[\frac{\sum \varphi_j c_j^-}{\Delta t} + (1 - \theta) L_2 \sum \varphi_j c_j^d \right] d\Omega$$
(A.14)

Em notação matricial, a operação (A.14) resulta em:

$$\left[\frac{M}{\Delta t} + \theta (\boldsymbol{V} + \boldsymbol{V}^{T}) + \boldsymbol{U}^{*}\right] c^{+} = \left[\frac{M}{\Delta t} - (1 - \theta)\boldsymbol{V} + \theta \boldsymbol{V}^{T} - \frac{(1 - \theta)}{\theta}\boldsymbol{U}^{*}\right] c^{d}$$
(A.15)

sendo

$$V = \int_{\Omega} v \varphi_i \nabla \varphi_j \, d\Omega \, \mathrm{e}$$
$$U^* = \theta^2 \Delta t \int_{\Omega} v_a^T v_a \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j \, d\Omega$$

O procedimento tradicional da técnica de separação de operadores consiste em resolver a equação (A.13) e substituir, então, a concentração c^d na equação (A.15), obtendo a solução desejada no novo instante.

O vetor $\frac{M}{\Delta t}c^d$ aparece em ambas as expressões (A.13) e (A.15), através do qual ambas podem ser acopladas em uma única equação. Após extrapolação para a eliminação da concentração provisória c^d , a seguinte formulação acoplada da equação governante é obtida:

$$\left[\frac{M}{\Delta t} + \theta (\boldsymbol{B} + \boldsymbol{V}) + \theta \boldsymbol{V}^{T} + \boldsymbol{U}^{*}\right] c^{+} = \left[\frac{M}{\Delta t} - (1 - \theta)(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{V}) + \theta \boldsymbol{V}^{T} - \frac{(1 - \theta)}{\theta} \boldsymbol{U}^{*}\right] c^{-} + \boldsymbol{F} \quad (A.16)$$

A análise da equação (A.16) apresenta as vantagens do método. Usando o método dos mínimos quadrados, a matriz de coeficientes resultante é sempre simétrica, mesmo quando o

termo advectivo aparece no lado implícito da equação. A simetria resulta da presença do termo $\theta V^T c^+$ no lado esquerdo da equação.

Outra característica é o efeito de *upwind* no termo advectivo, responsável pela estabilização da solução numérica. O *upwind* resulta da combinação dos termos $V \in U^*$, como mostrados na figura A.2.



FIG A.2 – Função peso para o termo advectivo (adaptado de [WENDLAND, 2004, p. 122])

Esse termo de *upwind* $U^* = \theta^2 \Delta t v_a^2$ pode ser interpretado em termos de critérios de estabilidade para o caso uni-dimensional. Considerando o número de Courant $C_o = \frac{v_a \Delta t}{\Delta l}$, o caso uni-dimensional pode ser transformado em

$$U^* = \theta^2 C_o \Delta l v_a \tag{A.17}$$

Após a introdução do número de Peclet $P_e = \frac{v_a \Delta l}{D}$, obtém-se:

$$\boldsymbol{U}^* = \theta^2 C_o P_e \boldsymbol{D} \tag{A.18}$$

O termo de *upwind* aparece como uma fração da dispersão natural de problema, através da qual a solução numérica é estabilizada, evitando a oscilação espúria. No procedimento S³, a difusão artificial introduzida pelo método numérico é controlada pela discretização temporal (θ, C_o) e espacial (P_e) . Devido ao produto vetorial $v^T v$, a estabilização atua somente na direção de fluxo, evitando o surgimento de difusão transversal [WENDLAND, 2004] e essa transformação pode ser derivada para qualquer sistema de coordenadas.

A comparação do esquema desenvolvido pela equação (A.16) com um método de resíduos ponderados, que utiliza função-peso assimétrica para todos os termos, leva à observação de que algumas derivadas de ordem superior (por exemplo, termo de difusão) faltam na aproximação S^3 . No entanto, BROOKS e HUGHES (1982) mostraram que, se elementos retangulares com funções lineares de interpolação são usados, a parte assimétrica da função peso não afeta os termos de difusão. Conseqüentemente, as derivadas de ordem superior desaparecem naturalmente e não afetam a solução. O esquema S^3 é, portanto, consistente com o problema físico. Geralmente, esse não é o caso para as funções quadráticas

ou cúbicas de interpolação para as quais os termos de ordem superior podem ser significativos. Assim mesmo, em situações dominadas pela advecção, pode-se também negligenciar essas contribuições.

Outra característica interessante é o comportamento do método para campos de fluxos sem divergente. Nesse caso, a simetrização conduz a uma aproximação explícita do termo advectivo e oscilações podem ser esperadas para números de Courant elevados. No entanto, essas oscilações não ocorrem devido à estabilização gerada pelo efeito de *upwind*.

Em relação esforço computacional, testes numéricos mostram que o esquema S³ apresenta boa vantagem se comparado com o método tradicional. O método de Galerkin conduz a uma matriz assimétrica, para o qual poderia ser escolhido um método de solução direta. Assim, a matriz cheia tem de ser armazenada usando a técnica de armazenamento por bandas. Para o esquema S³, pode ser usado um esquema de solução baseado no *solver* conhecido por gradiente conjugado pré-condicionado (PCG), com armazenamento esparso. E de acordo com [WENDLAND e SCHMID, 2000] este *solver* apresenta grande economia de memória para modelos cujas larguras da matriz de banda são bem maiores que 15.

134

Universidade de São Paulo – EESC

ANEXO III – ARTIGO TEMA 2009

TEMA Tend. Mat. Apl. Comput., 10, No. 1 (2009), 11-20.
(b) Uma Publicação da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional.

Solução da Equação de Fluxo Subterrâneo a partir de Estimador de Erro *a posteriori*¹

A. FIRMIANO? E. WENDLAND? Departamento de Hidráulica e Saneamento SHS/EESC/USP, Cx.P. 359, 13560-970 São Carlos, SP, Brasil.

Resumo A determinação do campo de velocidades em aqüíferos é essencial para o gerenciamento de recursos hídricos subterrâneos e a avaliação do transporte de solutos dissolvidos na fase aquosa. O presente trabalho apresenta uma solução para a equação de fluxo de água subterrânea em aqüífero confinado a partir de uma implementação do método de elementos finitos em linguagem Java. A solução consiste na aproximação da equação de Poisson válida em domínio irregular, com meio heterogêneo e anisotrópico. Neste trabalho foi implementado um estimador de erro, baseado no pós-processamento do gradiente hidráulico, foi capaz de identificar a região do domínio que contém a singularidade. A distribuição de carga hidráulica calculada foi comparada com soluções analíticas apresentadas na literatura. O modelo de fluxo de água subterrânea apresentou boa concordância do campo de velocidades em regime transiente. A solução para a curva de rebaixamento convergiu para a solução em regime permanente.

1. Introdução

O campo de velocidades da água subterrânea estabelece uma estreita relação entre a equação fundamental do fluxo e o transporte de contaminantes no meio poroso saturado. As informações provenientes da distribuição de cargas hidráulicas, de um aqüífero em que se está modelando, poderiam ser utilizadas nos termos advectivo e difusivo da equação do transporte, fornecendo ao modelo matemático uma abrangência um pouco mais realista nos movimentos hídricos na zona de saturação.

Este transporte de contaminantes, ou de soluto ou de outros constituintes químicos dissolvidos, que são importantes componentes de vários processos geológicos, ocorrem devido aos fenômenos de advecção, difusão molecular e dispersão mecânica regidos no meio poroso.

A advecção refere-se ao movimento de solutos conduzidos pelo movimento da água subterrânea. A difusão molecular é o fluxo difusivo do soluto na direção do gradiente de concentração. Este processo ocorre em função do movimento browniano dos fons na solução. Os fons de uma região de concentração alta tendem a se misturarem com fons de uma região de baixa concentração estabelecendo uma mesma

¹Apoio financeiro do projeto PROBRAL - processo CAPES/DAAD BEX 1017/07-1

² lezandro@sc.usp.br

³ew@se.usp.br, www.shs.cose.usp.br, albatroz.shs.cose.usp.br

Firmiano e Wendland

distribuição no espaço. A dispersão mecânica ocorre pela diferença na concentração do soluto com a mistura resultando do movimento físico da água. Portanto, onde a concentração difere, o soluto é transportado por difusão molecular quando o fluxo de velocidade é relativamente baixo e por dispersão mecânica quando a velocidade é considerada alta.

O presente trabalho apresenta uma metodologia para obter os valores da velocidade real, com suas respectivas direções, em cada elemento finito de uma malha de elementos quadriláteros. A resolução numérica da equação fundamental do fluxo da água subterrânea, utiliza a linguagem de programação JAVA para implementar o gradiente hidráulico de um aqüífero confinado interagindo com drenança vertical. Velocidades aparentes, provenientes da lei de Darcy, junto com estimativas do parâmetro físico que representam a porosidade efetiva do aqüífero em escala regional, determinam as velocidades reais do fluxo da água subterrâneas.

Para que as informações obtidas da equação do fluxo sejam aplicadas na equação do transporte de contaminantes algumas ponderações devem ser consideradas. Por exemplo, o contaminante em estudo não irá influenciar na velocidade do fluxo da água subterrânea, caracterizando o aqüífero em estudo como um campo conservativo. E ainda, a temperatura média no meio poroso não sofrerá alterações significantes durante o tempo observado.

A condição de fluxo horizontal é adotada para simplificar o estudo de água subterrânea, pois, para grandes extensões do aqüífero, efeitos das áreas de recarga, de descarga e de poços parcialmente penetrantes podem ser desconsiderados [4].

A superfície potenciométrica é definida pela carga hidráulica dos pontos no interior do domínio. A curva de rebaixamento analisada no presente estudo é dada pela variação da carga hidráulica, ao longo do tempo, no nó que corresponde o poço.

1.1. Equações governantes

O modelo matemático para a distribuição de cargas que regem o fluxo de água subterrânea, obtido pela lei de Darcy e pelo princípio da conservação de massa em um volume elementar representativo (REV) de um aqüífero é dado pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right] + W(x, y, z, t) = S_s \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (1.1)$$

sendo h a carga hidráulica [m]; K_{xx} , K_{yy} e K_{zz} os componentes principais do tensor da condutividade hidráulica $\left[\frac{m}{s}\right]$; S_s o coeficiente de armazenamento específico $\left[\frac{1}{m}\right]$ e W os termos de fonte ou sumidouros de água dentro do aqüífero $\left[\frac{1}{s}\right]$.

Se considerar desprezíveis as variações de carga ao longo da dimensão vertical, uma vez que a dimensão horizontal dos aqüíferos em escalas regionais pode ser da ordem de dezenas de quilômetros, o fluxo h pode ser modelado pela seguinte equação bidimensional em $x \in y$ [4]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right] + W(x, y, t) = S \frac{\partial h}{\partial t}, \tag{1.2}$$

Solução da Equação do Fluxo Subterrâneo

sendo $T_{xx} = b.K_{xx}$, e $T_{yy} = b.K_{yy} \left[\frac{m^2}{s}\right]$ as transmissividades nas direções x e y do aqüífero confinado de espessura $b \left[m\right]$ e $S = S_{s}.b$ o coeficiente de armazenamento [adimensional]. W representa os termos de drenança em z = 0 (camada confinante inferior) e em z = b (camada confinante superior) acrescidos da atividade de um poço i na posição (x_i, y_i) .

2. Metodologia

2.1. Método de Elementos Finitos

Uma malha de elementos quadriláteros é gerada para representar o domínio correspondente às dimensões horizontais do aqüífero. O Método dos Resíduos Ponderados permite a obtenção de uma solução aproximada \hat{h} .

Para cada elemento finito $\Omega^{(e)}$ do domínio discretizado Ω , a carga hidráulica $\tilde{h}_{i}^{(e)}$ será obtida através da interpolação das cargas nodais $\hat{h}_{j}^{(e)}$, utilizando as funções de base $\Phi_{j} = \frac{1}{4} (1 + \xi_{j} \xi) (1 + \eta_{j} \eta)$ em coordenadas locais (ξ, η) , cujos vértices (ξ_{j}, η_{j}) são {(-1, -1), (1, -1), (1, 1), (-1, 1)}. Desta forma, para cada elemento finito:

$$\hat{h}^{(e)} = \sum_{j=0}^{3} \Phi_j \hat{h}_j^{(e)},$$
 (2.1)

A contribuição em cada elemento para o resíduo da solução numérica no nó *i* pode ser obtida, ao considerar na equação (1.2), a formulação integral :

$$\int_{\Omega^{(e)}} \Phi_t \left(S \frac{\partial \hat{h}^{(e)}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[T_{xx} \frac{\partial \hat{h}^{(e)}}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[T_{yy} \frac{\partial \hat{h}^{(e)}}{\partial y} \right] - W(x, y, t) \right) d\Omega^{(e)} = 0,$$
(2.2)

sendo Φ_i a função de ponderação do resíduo e $\Omega^{(e)}$ um elemento finito da malha inicial.

Substituindo a aproximação (2.1) na equação do resíduo (2.2) e aplicando a Identidade de Green nas derivadas de 2^a ordem, a formulação fraca para a equação discreta do fluxo é:

$$S[M]\left\{\frac{\partial \hat{h}}{\partial t}\right\} + |K|\{\hat{h}\} = \{F\}, \qquad (2.3)$$

sendo $[M] = \int_{\Omega^{(e)}} \Phi_i \Phi_j d\Omega^{(e)}$ a matriz de massa; $[K] = \int_{\Omega^{(e)}} \nabla \Phi_i \cdot (T \nabla \Phi_j) d\Omega^{(e)} \text{ a matriz de rigidez;}$ $T = \begin{bmatrix} T_{xx} & 0\\ 0 & T_{yy} \end{bmatrix} \text{ o tensor transmissividade e}$

Firmiano e Wendland

$$\{F\} = \int_{\Omega^{(s)}} \Phi_t W d\Omega^{(e)} + \int_{\Gamma^{(e)}} \Phi_t \vec{n} \left(T \nabla h_t\right) d\Gamma^{(e)} \text{ o vetor de cargas nodais}^4.$$

$$A \text{ deriveds} \left\{ \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \right\} \text{ de acuscão } (2.3) \text{ A sprovimede rate corressão} \left(\frac{\hat{h}^{t+\Delta t}}{\partial t} - \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} \right)$$

 $\left(\begin{array}{c} \partial t \end{array} \right)$ Considerando $\omega \in [0, 1]$ um parâmetro da discretização temporal [2], as seguintes interpolações são obtidas:

$$\{\hat{h}\} = (1-\omega)\{\hat{h}\}^{t} + \omega\{\hat{h}\}^{t+\Delta t} \in \{F\} = (1-\omega)\{F\}^{t} + \omega\{F\}^{t+\Delta t}$$

A equação discretizada para cada passo de tempo Δt será dada pela expressão:

$$(S[M] + \omega \Delta t[K]) \{\tilde{h}\}^{t+\Delta t} = (S[M] - (1 - \omega) \Delta t[K]) \{\tilde{h}\}^{t} + \Delta t ((1 - \omega) \{F\}^{t} + \omega \{F\}^{t+\Delta t}).$$

$$(2.4)$$

Os termos [M] e [K] representam as matrizes globais obtidas pelo assembly das matrizes locais dos elementos de uma malha inicial que discretiza o domínio Ω . A solução iterativa (2.4) pode usar o método de *Crank-Nicholson* atribuindo $\omega = \frac{1}{2}$ e usando os valores $\{\dot{h}\}^{t_0}$ fornecidos pelas condições iniciais do problema em $t = t_0$.

Após a imposição das condições de contorno de Dirichlet $\{\hat{h}\} = h_D$, a qual especifica os valores das cargas hidráulicas na fronteira Γ_D , e as condições de contorno de Neumann $\nabla \hat{h} = 0$, para a representação de fluxo nulo nas fronteiras impermeáveis Γ_N do aqüífero confinado⁵, a solução da equação (2.4) fornece a solução numérica $\{\hat{h}\}^{i_0+\Delta t}$. De maneira sucessiva, determinam-se as soluções $\{\hat{h}(x_t, y_t)\}$ em cada nó (x_t, y_t) da malha inicial, no *n-ésimo* passo de tempo $t = t_0 + n\Delta t$.

2.2. Gradiente da solução numérica

O gradiente ∇h da solução numérica é usado na análise de erro *a posteriori* dos processos adaptativos que utilizam técnicas de recuperação do gradiente [10].

As funções de interpolação lineares, com os parâmetros das coordenadas locais, relacionam o gradiente em cada elemento finito por:

$$\nabla \hat{h}^{(c)}(x,y) = (J^{T})^{-1} \nabla \hat{h}^{(c)}(\xi,\eta), \qquad (2.5)$$

sendo J a matriz jacobiana da mudança de coordenadas.

A malha inicial usada neste trabalho fornece $(J^T)^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$, e a substituição de (2.1) em (2.5) resulta na expressão $\nabla \hat{h}^{(e)} = (J^T)^{-1} \sum_{j=0}^{3} (\nabla \Phi_j) \hat{h}_j^{(e)}$.

Após simples operações matemáticas, obtém-se:

$$abla \hat{h}^{(e)} = rac{1}{2} \left(egin{array}{c} (1+\eta) \left(\hat{h}_2^{(e)} - \hat{h}_3^{(e)}
ight) + (1-\eta) \left(\hat{h}_1^{(e)} - \hat{h}_0^{(e)}
ight) \ (1+\xi) \left(\hat{h}_2^{(e)} - \hat{h}_1^{(e)}
ight) + (1-\xi) \left(\hat{h}_3^{(e)} - \hat{h}_0^{(e)}
ight) \end{array}
ight).$$

14

⁴ ff é o vetor unitário exterior à fronteira $\Gamma^{(a)} = \partial \Omega^{(a)}$.

 $^{{}^{5}\}Gamma = \Gamma_{D} \cup \Gamma_{N} \in \Gamma_{D} \cap \Gamma_{N} = \emptyset.$

Solução da Equação do Fluxo Subterrâneo

Aplicando $(\xi, \eta) = (0, 0)$ em coordenadas locais, o gradiente obtido no centro do elemento $\Omega^{(c)}$ é especificado por

$$\nabla \hat{h}^{(e)}(x_e, y_e) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\hat{h}_0^{(e)} + \hat{h}_1^{(e)} + \hat{h}_2^{(e)} - \hat{h}_3^{(e)} \\ -\hat{h}_0^{(e)} - \hat{h}_1^{(e)} + \hat{h}_2^{(e)} + \hat{h}_3^{(e)} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

sendo $x_c \in y_c$, as coordenadas globais do ponto central do elemento finito.

2.3. O pós-processamento do gradiente

O gradiente (2.6) fornece, através da lei de Darcy, o campo de velocidades do fluxo da água subterrânea e, simultaneamente, estabelece uma análise de erros utilizando a técnica de recuperação do gradiente sobre o patch⁶ de elementos finitos [10]. Este estimador de erro a posteriori, conhecido por estimador ZZ, é adequado para a condução de uma estratégia de refinamento adaptativo sobre a malha de elementos finitos para aproximar a solução da equação elíptica (1.2).

O procedimento de recuperação para obter σ (um gradiente médio sobre o *patch*), utiliza a técnica de suavização dos valores nodais que determina uma média ponderada dos valores $\dot{\sigma} = \nabla \dot{h}^{(e)}$ obtidos de cada elemento adjacente ao nó central do *patch*.

Uma vez que as funções de interpolação nodais dos elementos quadriláteros são lineares, esta técnica de recuperação de *patches* é adequada [5]. E ainda, segue da literatura que o estimador ZZ apresenta aceitáveis níveis de estabilidade e de consistência para vários problemas práticos da engenharia [6]

A vantagem deste método de recuperação situa-se na facilidade da implementação computacional deste estimador para os elementos lineares. No entanto, observa-se que soluções aproximadas, das equações diferenciais parciais de segunda ordem, pelo método *FEM-Galerkin*, tipicamente resultam em derivadas que são descontínuas nos elementos de fronteira. Embora estas descontinuidades possam ser suavizadas pelos valores médios, os gradientes resultantes ainda serão menos precisos nos nós da malha e nos elementos da fronteira. Vários esquemas de projeção local ou global para recuperar o gradiente com precisão adequada tem sido proposto [7]. Porém, estes esquemas ou são sensíveis em relação ao tipo de elemento ou possuem alto grau de dificuldade para serem implementados.

A previsão da distribuição bidimensional de um poluente importa do modelo de água subterrânea a velocidade real determinada pela velocidade aparente dada pela lei de Darcy, pela distribuição da condutividade hidráulica, $K_{xx} \in K_{yy}$ e pela distribuição da porosidade efetiva η_{ef} . Em cada elemento finito, assumindo que as coordenadas cartesianas alinham-se com os eixos principais do tensor de condutividades hidráulicas |K|, segue que a velocidade real $v_r^{(e)}$ é dada pela expressão:

$$\vec{v}_{\rm F}^{\rm (c)} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = -\frac{1}{\eta_{ef}} \left(\begin{array}{cc} K_{xx} & 0 \\ 0 & K_{yy} \end{array} \right) \nabla \hat{h}^{\rm (c)}.$$

139

⁶Node-based patch: Grupo adjacente de elementos associados a um nó particular [1].

Firmiano e Wendland

A estimativa do parâmetro b da espessura do aqüífero confinado e as relações $T_{xx} = b.K_{xx}$, e $T_{yy} = b.K_{yy}$, fornecem a seguinte expressão para o campo de velocidade real nos elementos da malha:

$$\vec{v}_{r}^{(e)} = -\frac{1}{b.\eta_{ef}} [T] \nabla \hat{h}^{(e)},$$
 (2.7)

sendo $T = \begin{bmatrix} T_{xx} & 0 \\ 0 & T_{yy} \end{bmatrix}$ tensor de transmissividade implementada na matriz de rigidez da equação (2.3).

3. Resultados e Discussão

A implementação JAVA considera um aqüífero confinado, sob condições de fluxo horizontal no domínio bidimensional $\Omega = (1000m) \ge (1000m)$. As condições iniciais impõem $\hat{h}(x,y,0) = 100m$, para todos os pontos de Ω no tempo t = 0, e fixa as condições de Dirichlet $\hat{h}(x_f,y_f,t) = 100m$ em todos os pontos (x_f,y_f) da fronteira $\Gamma_D = \partial \Omega$, com $t \in [0; 150]$ dias (d).

A simulação considera que a camada confinante superior do aqüífero possui 10m e está a 50m do datum, assim, a espessura constante do aqüífero é b = 50m. Uma malha inicial de 256 elementos quadriláteros é gerada em torno de um poço totalmente penetrante cujo raio possui valor infinitesimal. A vazão constante é dada por $Q = -100 \ m^3/d$ e $(x_p, y_p) = (500; 500)$ são as coordenadas do poço. Com isto, o termo de extração da equação (1.2) é igual a $W = \begin{cases} -100 \ m/d$, se $x = y = 500 \ 0 \ m/d$, caso contrário

A ordem de grandeza dos demais parâmetros físicos desta simulação transiente, tais como: a porosidade e o coeficiente de armazenamento, baseou-se na ocorrência de aqüíferos confinados, citados no Relatório de Qualidade das Águas Subterrâneas do Estado de São Paulo 2001-2003 [3]. Neste relatório, identificam-se os seguintes valores para as componentes do tensor transmitividade: $Txx = Tyy = 10^{-3}m^2/s$.

A distribuição das cargas hidráulicas, obtidas pela solução iterativa (2.4) nos nós de cada elemento compõe o gradiente hidráulico no centro do elemento finito, conforme estipulado na equação (2.6) para todos os 150 passos da simulação.

Para os nós eqüidistantes à coordenada (x_p, y_p) , o modelo identificou o mesmo valor de carga hidráulica, ou seja, a solução numérica encontrada sob condições isotrópicas e homogèneas é um solução radial para cada passo de tempo. E além disso, de acordo com o quadro 1, apresentou uma hoa concordância com a solução analítica de Theis [9]. Esta solução analítica considera um poço de raio r = 3, 14m, valor freqüentemente utilizado na literatura.

A geometria da malha inicial situa a singularidade (x_p, y_p) no nó 144, que é o nó comum aos elementos 119, 120, 135 e 136 (*patch* do nó 144). Os nós do quadro 1 são os contidos no corte transversal do domínio bidimensional $\Omega = (1000m) \times (1000m)$ que contém a singularidade. O quadro 01 mostra que, além da boa concordância com a solução analítica, a solução numérica suaviza o valor da carga hidráulica na singularidade. E esta adequação às situações físicas foi observada em todos os 150 passos de tempo da simulação, pois a solução de Theis não converge para o regime permanente num número finito de $t = t_0 + n\Delta t$.

16

Solução da Equação do Fluxo Subterrâneo

	t = 2d		t = 15d		t = 45d	
Nó	JAVA [m]	Theis	JAVA [m]	Theis	JAVA [m]	Theis
136	100,00	100,00	100,00	99,463	100,00	98,782
137	99,996	99,999	99,760	99,315	99,738	98,593
138	99,989	99,995	99,504	99,129	99,461	98,370
139	99,973	99,979	99,216	98,890	99,153	98,098
140	99,934	99,927	98,870	98,579	98,790	97,758
141	99,837	99,785	98,428	98,156	98,334	97,312
142	99,565	99,428	97,803	97,536	97,698	96,675
143	98,912	98,532	96,862	96,448	96,750	95,577
144	94,030	90,183	93,234	88,028	93,120	87,154
145	98,912	98,532	96,862	96,448	96,750	95,577
146	99,565	99,428	97,803	97,536	97,698	96,675
147	99,837	99,785	98,428	98,156	98,334	97,312
148	99,934	99,927	98,870	98,579	98,790	97,758
149	99,973	99,979	99,216	98,890	99,153	98,098
150	99,989	99,995	99,504	99,129	99,461	98,370
151	99,996	99,999	99,760	99,315	99,738	98,593
152	100,00	100,00	100,00	99,463	100,00	98,782

Quadro 1 - Comparação da solução aproximada obtida na implementação JAVA com a solução analítica de Theis em t = 2, t = 15 e t = 45 dias.

A característica radial da carga hidráulica foi herdada para o gradiente hidráulico, conforme o quadro 2. Este gradiente ainda apresenta amplitude decrescente na direção da singularidade para os nós da fronteira. Isto significa que a velocidade do fluxo aumenta à medida que a água subterrânea atravessa os elementos mais próximos à fonte de extração constante.

Resultados numéricos mostraram que o sentido do vetor deslocamento no movimento da água subterrânea, obtido em cada elemento da malha, é do centro do elemento em direção à singularidade (poço). Esta abstração refere-se apenas a uma tendência, pois o movimento dispersivo da água, por ocorrer em meio poroso, encontrará as suas barreiras naturais. Ao realizar alterações com aumento ou diminuição na vazão do poço, o modelo respondeu com valores diretamente proporcionais para as velocidades reais em todos os elementos da malha.

O quadro 2 apresenta, além dos valores dos gradientes hidráulicos, a respectiva intensidade no centro dos elementos quadriláteros próximos ao patch do nó 144 no tempo 60d.

A simulação mostrou que, após 45 passos da solução iterativa (2.4), o valor da carga hidráulica estabiliza (p. ex., h = 93, 120m em (x_p, y_p)), ou seja, o modelo computacional identificou o equilíbrio entre a vazão constante do poço e a recarga atribuída pela condição de contorno de Dirichlet. Assim, nos passos de tempo seguintes o regime passou a ser permanente.

Firmiano e Wendland

2					
elem.165:	elem.166:	elem.167:	elem. 168;	olem.169:	elem. 170:
(-0,34;0,34)	(-0,28;0,49)	(-0,12;0,61)	(0,12;0,61)	(0,28;0,49)	(0,34;0,34)
valor 0,48	valor 0,56	valor 0,62	valor 0,82	valor 0,56	valor 0,48
elem.149:	elem. 150:	olom.151:	alom. 152;	olem.153:	elem.154:
(-0,49;0,28)	(-0,62;0,62)	(-0,20;0,93)	(0,20;0,93)	(0,62;0,62)	(0,49;0,28)
valor 0,56	valor 0,88	valor 0,96	valor 0,95	valor 0,88	valor 0,56
elem.133:	elem.134:	eletn.135:	elem.138:	elem.137:	elem.167:
(-0,61;0,12)	(-0,93;0,20)	(-1,99;1,99)	(-1,99;1,99)	(-0,93;0,20)	(0,61;0,12)
valor 0,62	valor 0,95	valor 2,82	valor 2,82	valor 0,95	valor 0,62
elem.117:	elem.118:	elem.119:	eiem. 120	olem.121:	elem.122:
(-0,61;-0,12)	(-0,93;-0,20)	(-1,99;-1,99)	(1,99;1,99)	(0,93;-0,20)	(0,61;-0,12
valor 0,62	valor 0,95	valor 2,82	valor 2,82	valor 0,95	valor 0,62
elem.101:	elem. 102:	elem.103:	elem.104:	elem.106:	elem. 166:
(-0,49;-0,28)	(-0,62;-0,62)	(-0,20;-0,93)	(0,20;-0,93)	(0,62;-0,62)	(0,49;-0,28
valor 0,66	valor 0,88	valor 0,96	valor 0,95	valor 0,88	valor 0,56
elem.85:	elem.86:	elem.87:	elem.88:	olem.89:	elem.90:
(-0,34;-0,34)	(-0,28;-0,49)	(-0,12;-0,61)	(0,12;-0,61)	(0,28;-0,49)	(0,34;-0,34
valor 0,48	valor 0,56	valor 0,62	valor 0,62	valor 0,56	valor 0,48

Quadro 2 - Característica radial do gradiente da solução aproximada FEM nos elementos próximos à singularidade.

A análise de erro realizada pela técnica de reconstrução do gradiente [10] está apresentada na tabela 1:

Tabela 1 - Análise de erro a posteriori da equação do fluxo subterrâneo.

Estimador	tempo 2.0	tempo 15.0	tempo 45.0
Erro Global	0,0391	0,0590	0,0609
Erro Relativo	0,0002	0,0002	0,0002
Soma Total	0,3286	0,7797	0,8187
Erro Máximo	0,0087 (elem. 119)	0,0099 (elem. 119)	0,0100 (elem. 119)
Erro Mínimo	0,0000 (elem. 0)	0,0004 (elem. 0)	0,0004 (elem. 0)

O estimador de erro a posteriori capturou adequadamente a singularidade identificando o elemento que apresentou o maior erro no domínio discretizado. O erro global apresentou uma leve evolução devido à contribuição do erro temporal, no entanto, o erro relativo permaneceu constante. Estas caraterísticas apresentadas pelo estimador de erro direcionam a estratégia de refinamento adaptativo sobre a malha de elementos finitos.

Solução da Equação do Fluxo Subterrâneo

4. Conclusão

E obtido a solução numérica do modelo matemático que descreve a distribuição das cargas hidráulicas de um aqüífero confinado. A solução aproximada para a curva de rebaixamento em regime transiente convergiu para a solução em regime permanente. O gradiente hidráulico proveniente do pós-processamento da implementação JAVA, além de descrever o campo de velocidades, estabeleceu um estimador de erro *a posteriori* baseado nas técnicas de recuperação do gradiente. As simulações demonstraram que este estimador de erro foi capaz de capturar a singularidade do domínio discretizado. Assim, é adequado para conduzir uma estratégia de refinamento adaptativo para a equação do fluxo subterrâneo.

Abstract The determination of the flow in aquifers is essential for manage of groundwater and the evaluation of the contaminant transport. This work presents a solution for the equation of flow in confined aquifers with the implementation of the method of finite elements in language Java. The solution consists in the approach of the equation of Poisson valid in irregular domain, with medium heterogeneous and anisotropic. In this work was implemented an error estimator in agreement with the technique proposed for Zienkiewicz and Zhu. This error estimator, based on the post-processing of the hydraulic gradient, it was able of to identify the patch that contains the singularity. The distribution of hydraulic head was compared with analytical solutions of the literature. The model of flow yielded a good agreement of the flow in transient regime. The solution for the potentiometric curve converged for the solution in permanent regime.

Referências

- J.E. Akin, "Finite Element Analysis with Error Estimation", Butterworth-Heinemann Elsevier Ltd, 2005.
- [2] J. Bear, "Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport", Haifa, Israel, 2001.
- [3] CETESB, "Relatório de Qualidade de Águas Subterrâneas do estado de São Paulo, Secretaria do Estado do Meio Ambiente", Companhia de Tecnologia de Sancamento Ambiental, 2004.
- [4] R.W. Cleary, "Águas Subterrâneas", ed ABRH, Porto Alegre RS, 2007.
- [5] A. Nagórka, N. Sczygiol, Implementation Aspects of a Recovery-Based Error Estimator in Finite Element Analysis, *Parallel Processing and Applied Mathematics*, Lecture Notes in Computer Science, vol. 3019/2004, pp 722-729, Springer Berlin, 2004.
- [6] D.M. Hawken, P. Townsend, M.F. Webster, A comparison of gradient recovery methods in finite element calculations, *Communications in Applied Numerical Methods*, 7 (1991), 195-204.

Firmiano e Wendland

- [7] B.O. Heimsund, X.C. Tai, J. Wang, Superconvergence for the gradient of finite element approximations by L2-projections, SIAM Journal on Numerical Analysis, 40, No. 4 (2002), 1263–1280.
- [8] T.C. Lee, "Applied Mathematics in Hydrogeology", CRC Press, 1999.
- SUTRA, "A Model for Saturated-Unsaturated Variable-density Groundwater Flow with Solute or Energy Transport", Water-Resources Investigations Report 02–4231, 2003.
- [10] O.C. Zienkiewicz, The background of error estimation and adaptivity in finite element computations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **195** (2006), 207– 213.

7 **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

Ainsworth M., Oden J.T. A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis, Editora Wiley-IEEE, 2000.

Akin J.E. Finite element analysis with Error Estimation Butterworth-Elsevier Ltd. 2005.

Akin J.E., Singh M. Object-Oriented Fortran 90 P-adaptive Finite Element Method Advance. Eng. Software (33) 7-10, p. 461-468 Elsevier Science Ltd. 2002.

Akrivis G., Makridakis C., Nochetto R. A Posteriori Error Estimates for the Crank-Nicolson Method for Parabolic Equations. *Mathematics of Computation*, vol 75, 511-531, 2006.

Almeida, R. C., Feióo R. A., Galeão A. C., Padra C., Silva R. S., Adaptive Finite Element Computational Fluid Dynamics using an Anisotropic Error Estimator. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, n 182, 379-400. 2000.

Babuška I., Rheinboldt, W. C. A posteriori Error Estimates for the Finite Element Methods. *Int. J. Numer. Methods Engng.* v. 12, 597-615. 1978.

Babuška I., Strouboulis T., Upadhyay C.S., Gangaraj S.K., Copps K. Validation of a posteriori error estimators by numerical approach, Int. J. Numer. Methods Engrg. v. 37, p. 1073–1123, 1994.

Babuška L., Strouboulis W. The Finite Element Method and its Reliability. Oxford University Press, 2001

Bear J. **Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport**, Copyright © 2000 by Jacob Bear, Haifa, Israel (2001). Disponível em <u>http://www.cmdlet.com/demos/mgfc-course/mgfctoc.html#toctoc</u>, acesso em 15/07/2006.

Bochev P. Finite Element Methods Based on Least Squares and Modified Variational **Principles**. University of Texas at Arlington, Texas, USA, p 163, 2002. Disponível em http://com2mac.postech.ac.kr/Lecture/Lec-5.pdf, acesso em 13/08/2009.

Bochev P., Gunzburger M. D., Shadid J. N. **Stability of the SUPG finite element method** for transient advection-diffusion problems *Computer methods in applied mechanics and engineering*. v 193, pp 2301-2323. 2004

Brenner, S. C., Scott, L. R. **The matemathical theory of finite element methods**. Springer-Verlag, New York, Inc. 2002.

Bonilla J. J., Puertas J., Fe J., Vellando P. A 2D numerical model for the transport of pollutants. The influence of Boundary Conditions. *Proceedings of the 3rd International Symposium on Ecohydraulics*, 12-16 July 1999, Salt Lake City, Utah. 1999.

Brooks A. N., Hughes T. J. R., Streamline-upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Math. Appl. Mech Engrg.*, 32:199-259, 1982.

Carstensen C.; Hu J. Hanging Nodes in the Unifying Theory of a posteriori Finite Element Error Control. J. Comput. Math. v. 27, pp 215-236, 2009.

Chen Z., Feng J. An adaptive finite element algorithm with reliable error control for linear parabolic problems. *Math. Comp.*, 73 (247): 1167-1193, 2004.

Chidyagwai P., Rivière B. Numerical modelling of coupled surface and subsurface flow systems. *Advances in Water Resources* 33, 92–105, 2010.

Devloo, P. R. B. *et al.* **Pesquisas em Hidráulica de Poços Desenvolvidas no LABMEC-FEC-Unicamp**. Anais do III Encontro Nacional de Hidráulica de Poços, 07 a 10 de junho de 2009, Campos do Jordão – SP, 2009.

Devloo, P. R. B., Forti T., Gomes S. M. **Métodos de Elementos Finitos Contínuos e Descontínuos Aplicado a Problemas de Convecção-Difusão**. *CILAMCE 2005 – ABMEC&AMC*, Guarapari – ES, 19 a 21 de Outubro de 2005.

Donea J., Huerta A. Finite Element Methods for Flow Problems John Wiley & Sons. 2004.

Eckel B. **Thinking in JAVA Prentice-Hall**. 2000. disponível em http://www.mindview.net/Books/TIJ/. Acesso em 15/08/2007.

Estep D., Larson M., Williams R. Estimating the error of numerical solutions of systems of reaction-diffusion equations. *Americal Mathematical Society*. N 696. 2000.

Eymard R., Gallouët T., Herbin R., **Finite Volume Methods** which appeared in Handbook of Numerical Analysis vol 7 pp 713-1020, Ciarlet&Lions ed. Elsevier, 2003.

Firmiano A., Wendland E. Solução da Equação do Fluxo Subterrâneo a partir de Estimador de Erro *a posteriori*. *Tend. Mat. Apl. Comput* – TEMA/SBMAC, v 10, n 01, 11-20, 2009.

Fortuna A. O. Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos. Edusp, São Paulo, 2000.

Galeão A. C, Almeida R. C., Malta S. M. C., Loula A. F. D., **Finite element analysis of convection dominated reaction-diffusion problems**. *Applied Numerical Mathematics*, vol 48, issue 2, pg 205-222, 2004.

Grätsch T., Bathe K. J., A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis. Computers and Structures 83, pg 235-265, 2005.

Harbrecht H., Schneider R. On Error Estimation in Finite Element Methods without having Galerkin Orthogonality. SFB-611, University of Bonn, preprints/publications, 2009, disponível em <u>http://sfb611.iam.uni-bonn.de/publications.php?lang=en</u> acesso em 26/11/2009.

Heβe F., Radu F. A., Thullner M., Attinger S. **Upscaling of the advection-diffusion-reaction** with Monod reaction. Advances in Water Resources, 32, 1336-1351, 2009.

Heimsund B.O. **High performance numerical libraries in Java** - Paper G in Mathematical and Numerical Methods for Reservoir Fluid Flow Simulation, Doctor Scientiarum thesis Department of Mathematics University of Bergen. Norway. 2005. disponível em <u>http://www.uib.no/People/nmabh/art/hpj.pdf</u>. Acesso em 17/03/2006.

Hilhorst D., Vohralík M. A posteriori error estimates for combined finite volume-finite element discretizations of reactive transport equations on nonmatching grids. Preprint disponível em <u>http://www.ann.jussieu.fr/publications/2010/R10007.php</u>. 2010. Acesso em 08/02/2010.

Hossain M. A., Miah A. S., Crank-Nicolson-Galerkin model for transport in groundwater: Refined criteria for accuracy, *Applied Mathematics and Computation*, 105 pp 173-181, 1999.

Huang Q, Huang G., Zang H., A finite element solution for the fractional advectiondispersion equation, *Advances in Water Resources*, 1578-1589, 2008.

Hughes T. J. R., The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis. Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 2000.

Hughes T. J. R., Scovazzi G., Tezduyar T. E., **Stabilized methods for compressible flows** *Journal of Scientific Computing*. Springer Netherlands. 2009. disponível em <u>www.springerlink.com/content/a5210x3405242767</u>, acesso em 10/02/2010.

Ingebritsen S. E., Sanford W. E., Neuzil C. E., **Groundwater in Geologic Processes**, Second Edition Cambridge University Press, United Kingdom, 2006.

Istok J. Groundwater Modeling by the Finite Element Method, American Geophysical Union, Water Resources Monograph 13, Wash., D.C., 1989.

John V. A numerical study of a posteriori error estimators for convection-diffusion equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* v 190, 757-781. 2000.

Kalashnikova I., Farhat C., Tezaur R. A discontinuous enrichment method for the finite element solution of high Péclet advection-diffusion problems. *Finite Elements in Analysis and Design* 45, 238-250, 2009.

Knabner P., Angermann L., Numerical methods for elliptic and parabolic partial differential equations. *Texts in Applied Mathematics*, 44, p 415, Springer, 2003.

Kumar B. P., Dodagoudar G. R., **Two-dimensional modeling of contaminant transport trough saturated porous media using the radial point interpolation method (RPIM)**, *Hydrogeology Journal*, 16 pp 1497-1505, 2008.

Lozinski A., Picasso M., Prachittham V. **An Anisotropic Error Estimator for the Crank-Nicolson Method:** Application to a Parabolic Problem. SIAM J. Sci. Comput. 31 (4) pp 2757-2783, 2009. Natvig *et al.* An efficient discontinuous Galerkin method for advective transport in porous media *Advances in Water Resources* 30, p. 2424-2438, Elsevier Science Ltd. 2007.

Oden J. T., **A Posteriori Error Estimation**, Verification and Validation in Computational Solid Mechanics, Hans Maier, ASME/USACM Standards, 2002.

Otto A. **Methods of Numerical Simulation**, Course Sillabus, University of Alaska, Fairbanks 2007. Disponível em: <u>http://what.gi.alaska.edu/ao/sim/#Notes</u> . Acesso em 06/02/2008.

Parkhurst D. L. *et al.* **PHAST – A Program for Simulating Groundwater Flow, Solute Transport and Multicomponent Geochemical Reactions**, USGS, Denver, Colorado, 2004.

Patzak B. and Bittnar Z. **Object Oriented Finite Element Modeling**, *Acta Polytechnica*, 39, 2/1999, p. 99-113. 1999. disponível em http://www.oofem.org/resources/doc/paper-actap/paper-actap.html. Acesso em 18/09/2007.

Prudhomme S. e Oden, J. T. **Computable Error Estimators and Adaptive Techniques for Fluid Flow Problems**, in TICAM Report 02-07, The University of Texas at Austin, Austin, Texas, 2002 disponível em <u>www.ices.utexas.edu/research/reports/2002/0207.ps.gz</u>. Acesso em 21/07/2008.

Queiroz P. I. B. **Um método numérico para análise de adensamento e transporte de contaminantes no solo** CTA/Instituto Tecnológico da Aeronáutica São José dos Campos-SP, Brasil. Tese de Doutorado. 2002. disponível em http://www.bd.bibl.ita.br/tde_busca/arquivo.php?codArquivo=200. Acesso em 12/11/2008.

Santos I. P.e Almeida R. C., **Um modelo subgrid para a equação de transporte com imposição fraca das condições de contorno de Dirichlet**. Publicação nos Anais do XXX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC). 2007.

Sorek S., Two-Dimensional Adaptive Eulerian-Lagrangian Method for Mass Transport with Spatial Velocity Distribution, *Transport in Porous Media*, 3, 473-489, 1988.

SUTRA A model for Saturated-Unsaturated Variable-Density Ground-Water Flow with Solute or Energy Transport *Water-Resources Investigations Report* 02-4231. 2003. Disponível em <u>http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/sutra/sutra.html</u>. Acesso em 08/08/2007.

Theis, C.V. The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate of duration of discharge of a well using groundwater storage. *Trans. Amer. Geophys. Union*, Vol. 16, 519-524. 1935.

Verfürth R. A Review of a Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh Refinement Techniques. Wiley and Teubner 8. 1996.

Verfürth R. Robust a posteriori error estimates for non-stationary convection-diffusion equations. SIAM Journal on Numerical Analysis, 43 n 4, pp 1783-1802, 2005.

Verfürth R. Adaptive Finite Element Methods Lecture Notes Winter Term 2007/08 Fakultät für Mathematik, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland, 2008.

Vohralík M., A posteriori error estimates for lowest-order mixed finite element discretizations of convection-diffusion-reaction equations. *SIAM J. Numer Anal.*, n 4, 1570-1599. 2007.

Wendland E., **Contribuições à Simulações de Processos em Meios Porosos**. Monografia de livre docência junto ao Departamento de Hidráulica e Saneamento apresentada na Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2004.

Wendland E., Schmid G. A Symmetrical Streamline Stabilization Scheme for High Advective Transport, Intern Journal for Analytical and Numerical Methods in Geomechanics, 24(1), p. 29-45. 2000.

Wexler E. J. Applications of Hydraulics Analytical Solutions for One-, Two- and Three-Dimensional solute Transport in Groundwater Systems with Uniform Flow – Chapter B7 Techniques of Water-Resources Investigations of the USGS. Denver USA. 1992.

Workbook of Applications in VectorSpace C++ Library disponível em <u>http://vector-space.com/services.htm#Online%20Workbook</u>. Acesso em 20/01/2008.

Yang Z.; Mavriplis D.J. **Development of An Adaptive Space-Time Method for High-Order Resolution of Discontinuities**. *Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc.*, 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 7-10 January 2008, Reno, Nevada. American., 2008.

Yanosik J. L., McCracken T. A. A nine-point, finite difference reservoir simulator for realistic prediction of adverse mobility ratio displacements. *SPE Journal*. V. August 1979, pp 253-262. 1979,

Zeiler M. **Modeling our World** The ESRI Guide to Geodatabase Design Environmental System Research Institute, Inc. California. 1999.

Zhang Z., Victory Jr. Mathematical analysis of Zienkiewicz-Zhu's derivative patch recovery technique. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. v. 12 issue 4, p. 507 – 524 Wiley Inter Science. 1995.

Zienkiewicz O.C. and. Zhu J.Z. The Superconvergent patch recovery and a posteriori error estimators. Part 1. The recovery technique, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 33, 1331-1364. 1992a.

Zienkiewicz O.C. and. Zhu J.Z. The Superconvergent patch recovery and a posteriori error estimators. Part 2. Error estimates and adaptivity. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 33, 1365-1382. 1992b.

Zienkiewicz O.C. The background of error estimation and adaptivity in finite element computations Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 195 (2006) 207–213 Elsevier Science Ltd. 2004.

150

Universidade de São Paulo – EESC