



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO
DIFUSIONAL BIDIMENSIONAL TRANSIENTE PARA
SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS CONVECTIVOS
DIFUSIVOS

LUIZ CLÁUDIO ALVARENGA CRÊSPO

Belo Horizonte, 18 de Setembro de 2006.

LUIZ CLÁUDIO ALVARENGA CRÊSPO

**DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO
DIFUSIONAL BIDIMENSIONAL TRANSIENTE PARA
SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS CONVECTIVOS
DIFUSIVOS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas
Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de
Doutor em Engenharia Mecânica

Área de concentração: Calor e Fluidos

Orientadora: Prof^ª. Dr^ª. Wanyr Romero Ferreira

Belo Horizonte
Escola de Engenharia da UFMG
2006



Universidade Federal de Minas Gerais

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Av. Antonio Carlos, 6627 – Pampulha – 31.270-901 – Belo Horizonte – MG

www.demec.ufmg.br - E-mail: cpgmec@demec.ufmg.br

**DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO
DIFUSIONAL BIDIMENSIONAL TRANSIENTE PARA SOLUÇÃO
NUMÉRICA DE PROBLEMAS CONVECTIVOS DIFUSIVOS**

LUIZ CLÁUDIO ALVARENGA CRÊSPO

Tese defendida e aprovada em 18 de setembro de 2006, pela Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, como parte dos requisitos necessários à obtenção do Título de “Doutor em Engenharia Mecânica”, na área de concentração “Calor e Fluidos”.

Prof^a. Dr^a. Wanyr Romero Ferreira

Prof. Dr. Carlos Magno Fernandes

Dr. Alberto Avelar Barreto

Prof. Dr. Márcio Ziviani

Prof. Dr. Mauri Fortes

DEDICAÇÃO

A minha esposa Janaina, filhas Ana Luiza e Júlia, mãe Maria Angelina e irmã Érica pelo incentivo por sempre acreditarem na conclusão bem sucedida deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

A Profª Wanyr, minha orientadora, pelo incentivo, paciência e pelo compartilhamento de conhecimentos que possibilitaram meu aperfeiçoamento técnico.

Aos amigos Alberto e Mauri sem os quais este trabalho não seria completado.

Meus sinceros agradecimentos.

“Na medida em que as leis da matemática referem-se à realidade, elas não são exatas; e na medida em que elas são exatas, não se referem à realidade. A imaginação é mais importante que o conhecimento.”

Albert Einstein

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	ix
LISTA DE TABELAS.....	xii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xiii
RESUMO.....	xvi
ABSTRACT.....	xvii
CAPITULO 1. INTRODUÇÃO.....	1
CAPITULO 2. O MÉTODO DIFUSIONAL BIDIMENSIONAL.....	5
2.1 - Metodologia Numérica	5
2.2 Aplicação de Volumes Finitos à forma difusional da Equação Bidimensional de Convecção-Difusão Transiente	8
2.3 Aplicação de um Esquema Hiperbólico para Equação Bidimensional de Convecção-Difusão Transiente na Forma Difusional.	17
2.3.1 Análise do valor de α	19
2.4 A solução transiente para Equação Bidimensional de Convecção-Difusão na Forma Difusional.	20
2.5 Adaptação do Método Difusional Bidimensional Transiente, Através da Modificação do Programa CONDUCT	24
2.5.1 Adaptação do CONDUCT, para o Método Difusional.....	27
2.6 Parâmetros considerados na aplicação dos problemas.....	29
2.6.1 Análise do número de Fourier	29
2.6.2 Teste de malha.....	29
2.6.3 Critério de convergência.....	30
2.6.4 Não Linearidade e Relaxação	30
2.7 O esquema vetorial a montante (direcional), (Barreto, 2004).	31
CAPITULO 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO (PROBLEMAS BENCHMARK).....	36
3.1 Escoamento Laminar Envolvendo Convecção Pura	36
3.1.1 Aplicando o método difusional para o problema de falsa difusão	38
3.1.1.1 Escoamentos paralelos aos eixos de coordenadas	38

3.1.1.2 Transporte convectivo dominante, variando o ângulo de inclinação.....	41
Ângulo θ de 45°	41
Ângulo θ de $22,5^\circ$ e $67,5^\circ$	43
Comparação entre o método difusional e o esquema direcional aplicado ao método difusional.....	44
3.2 - Problema proposto por Smith & Hutton (1982)	49
3.2.1 Análise do perfil de entrada.....	51
3.2.2 Transporte convectivo dominante $Pe = 10^{+6}$	52
3.2.3 Transporte convectivo difusivo $Pe = 10^{+3}$	57
3.2.4 Transporte convectivo difusivo $Pe = 100$	58
3.2.5 Transporte convectivo difusivo $Pe = 10$	59
CAPITULO 4. ESCOAMENTO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA.....	61
4.1 - O escoamento de água subterrânea.....	61
4.2 – Modelamento matemático para o escoamento de água subterrânea.....	61
4.3 Transporte de poluentes em meios porosos saturados.....	65
Reações químicas	69
4.4 - Modelamento matemático para o transporte de poluentes em meios porosos saturados.....	69
CAPITULO 5. SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE TRANSPORTE.....	76
5.1 – Solução de um problema de transporte de poluentes	76
CAPITULO 6. CONCLUSÃO.....	83
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	85

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1	Volume de controle bidimensional.....	9
FIGURA 2.2	Aproximação dos valores de α	20
FIGURA 2.3	Fluxograma do CONDUCT.....	26
FIGURA 2.4	Rotação do volume de controle no primeiro quadrante.....	32
FIGURA 3.1	Domínio do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente....	37
FIGURA 3.2	Campo de velocidades paralelo a x ($\theta = 0^\circ$)	39
FIGURA 3.3	Campo de velocidades paralelo a x ($\theta = 0^\circ$)	39
FIGURA 3.4	Campo de velocidades paralelo a y ($\theta = 90^\circ$)	40
FIGURA 3.5	Campo de velocidades paralelo a y ($\theta = 90^\circ$)	40
FIGURA 3.6	Resultados obtidos para o problema de transporte convectivo dominante com campo de velocidade inclinado de 45°	42
FIGURA 3.7	Resultados obtidos para o problema convectivo dominante com campo de velocidades inclinado de 45° , aplicando-se volumes finitos juntamente com a técnica <i>upwind</i> (preto) e aplicando-se o método difusional (colorido).....	43
FIGURA 3.8	Resultados obtidos para o problema convectivos dominantes com campo de velocidades inclinado de $22,5^\circ$ e $67,5^\circ$	44
FIGURA 3.9	Comparação entre os métodos difusional, direcional e solução exata.....	45
FIGURA 3.10	Representação espacial da solução do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente aplicando-se o método difusional. Foi utilizada uma malha de 100×100 , Pe de 10^6 e com a orientação do escoamento em relação à x igual a $67,5^\circ$	46
FIGURA 3.11	Representação espacial da solução do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente aplicando-se o método difusional. Foi utilizada uma malha de 100×100 , Pe de 10^6 e com a orientação do escoamento em relação à x igual a 45°	46

FIGURA 3.12	Representação espacial da solução do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente aplicando-se o método difusional. Foi utilizada uma malha de 100x100, Pe de 10^6 e com a orientação do escoamento em relação à x igual a $22,5^\circ$	47
FIGURA 3.13	Especificações geométricas e linhas de correntes para o problema proposto.....	50
FIGURA 3.14	Representação do perfil de entrada.....	52
FIGURA 3.15	Comportamento do perfil de entrada e saída do problema de Smith & Hutton (1982), utilizando refinamentos sucessivos para $Pe = 10^{+6}$	53
FIGURA 3.16	Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10^{+6}$ comparando o método difusional, direcional e solução exata com alguns métodos citados pela tabela 5.3 para um melhor refinamento de malha.....	55
FIGURA 3.17	Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10^{+6}$ comparando o método difusional, direcional e solução exata com alguns métodos citados pela tabela 5.3 para malhas 20 x 10.....	55
FIGURA 3.18	Perfil de solução por todo o domínio para o problema de Smith & Hutton (1982), para $Pe = 10^{+6}$ para uma malha de 60 x 30.....	56
FIGURA 3.19	Perfil de solução por todo o domínio para o problema de Smith & Hutton (1982), para $Pe = 10^{+6}$ para uma malha de 120 x 60.....	56
FIGURA 3.20	Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10^{+3}$, comparando o método difusional, direcional e solução de Schonauer e os melhores resultados obtidos pelos vários pesquisadores citados na tabela 5.3.....	58
FIGURA 3.21	Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 100$ comparando o método difusional, direcional e solução de Schonauer e os melhores resultados obtidos por pesquisadores métodos citados na tabela 5.3.....	59
FIGURA 3.22	Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10$ comparando o método difusional, direcional e solução de Schonauer e os melhores resultados obtidos por pesquisadores métodos citados na tabela 5.3.....	60
FIGURA 4.1	Volume de controle para o escoamento em um meio poroso.....	62
FIGURA 4.2	Processo de diluição por dispersão mecânica em um meio poroso.....	66

FIGURA 4.3	Processos de dispersão – escala microscópica.....	67
FIGURA 5.1	Diagrama esquemático para a simulação bidimensional de um aquífero Homogêneo.....	76
FIGURA 5.2	Comparativo entre a solução analítica e os métodos SUTRA, FEFLOW, MT3D, MT3D TVD e RWPT.....	78
FIGURA 5.3	Perfil de solução para o transporte de poluentes em um aquífero bidimensional após 20 e 60 dias de aplicação de uma fonte de contaminação, comparando a solução pelo método difusional aplicado a uma malha de 100 x 20 elementos (em azul) com a solução analítica (em preto).....	79
FIGURA 5.4	Perfil de solução pelo método difusional para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 20 dias de aplicação de uma fonte de contaminação, considerando uma malha de 100 x 20 elementos.....	80
FIGURA 5.5	Perfil de solução pelo método difusional para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 60 dias de aplicação de uma fonte de contaminação, considerando uma malha de 100 x 20 elementos.....	80
FIGURA 5.6	Perfil de solução analítica para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 20 dias de aplicação de uma fonte de contaminação.....	81
FIGURA 5.7	Perfil de solução exata para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 60 dias de aplicação de uma fonte de contaminação.....	81
FIGURA 5.8	Comparação entre as concentrações calculadas pelo método difusional para malha de 80 x 16, 100 x 20 e 124 x 24 e a solução analítica ao longo do comprimento no eixo x aplicado nos tempos de 20 e 60 dias.....	82

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1	Relação ideal entre Pe e Fo para a convergência.....	29
TABELA 3.1	Dados relativos à difusão numérica.....	48
TABELA 3.2	Relação entre refinamento da malha e número de iterações.....	48
TABELA 3.3	Métodos e refinamentos utilizados na solução do problema de Smith & Hutton.....	51
TABELA 3.4	Redução da difusão numérica em relação ao refinamento sucessivo das malhas para $Pe = 10^{+6}$	53
TABELA 3.5	Resultados obtidos por Schonauer para o problema de Smith & Hutton (1982).....	57

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

b	termo independente da equação de volumes finitos
C	concentração de contaminantes dissolvidos na água
Co	número de Courant ($Co = V\Delta t/h$)
D	coeficiente de dispersão hidrodinâmica ou tensor de dispersão hidrodinâmica
e	face leste do volume de controle
E	ponto nodal leste na malha de volume finitos
Fo	número de Fourier ($Fo = \Gamma\Delta t/h^2$)
F_i	representa a massa total de soluto por unidade de área transversal transportada na direção i
h	carga hidráulica
k_d	coeficiente de distribuição
K	condutividade hidráulica
L_x	dimensão x do domínio (local)
L_y	dimensão y do domínio (local)
L	comprimento característico
n	face norte do volume de controle (Capítulo 3)
n	porosidade do meio (Capítulo 4)
N	ponto nodal norte na malha de volume finitos
P	pondo nodal central na malha de volumes finitos (Figura 3.1 – Capítulo 3)
P	Número de Peclet Local ($P_n = V_n h_n / 2\Gamma_n$)
Pe	Número de Peclet Global ($P = VL/2\Gamma$)
q	fluxo volumétrico de água por unidade de volume
Q	termo fonte
R	coeficiente de retardamento
s	face sul do volume de controle
S	ponto nodal sul na malha de volume finitos
S_s	armazenamento específico

t	variável representativa do tempo
$t_{1/2}$	meia vida do material radiativo ou biodegradável
u	componente da velocidade na direção x
v	componente da velocidade na direção y
V	vetor velocidade
x	variável espacial (abscissas)
y	variável espacial (ordenadas)
w	face oeste do volume de controle
W	ponto nodal oeste na malha de volume finitos

Letras Gregas

α	parâmetro definido na equação (3.42) em função de Peclet, para a função hiperbólica (Capítulo 3)
α	coeficiente de compressibilidade do meio poroso (Capítulo 4)
α_i	parâmetro de interpolação da variável dependente ϕ nas equações 2.1 e 3.63
β	coeficiente de expansão volumétrica
δ_x	comprimento do volume de controle em x
δ_y	comprimento do volume de controle em y
Δt	variação do tempo
ε	erro (valor definido para convergência do sistema)
$\hat{\phi}$	variável dependente
ϕ	valor aproximado para a variável dependente
Γ	coeficiente de difusão
ρ	densidade
θ	ângulo entre o eixo x e a linha de corrente
v	descarga específica
v_x, v_y, v_z	componentes de velocidade ao longo dos eixos x, y e z
$ v $	módulo do vetor velocidade

Sobrescritos

0	Tempo anterior
-----	----------------

Subscritos

x, y, z direção de x, y e z respectivamente

RESUMO

O estudo de contaminação da água subterrânea passa pela interpretação dos mecanismos relevantes envolvidos na migração do contaminante (problemas de transporte). Tais problemas são descritos por equações de convecção-difusão cuja solução numérica pode ser obtida por meio de técnicas discretas, quando o problema é dominado pela difusão. No entanto, quando tais problemas são dominados pela convecção, as técnicas numéricas clássicas apresentam dificuldades relacionadas com a dispersão e oscilações numéricas. A necessidade de aprimoramento desses métodos, principalmente, no tratamento de problemas predominantemente convectivos pode ser verificada pelos inúmeros métodos e técnicas *'ad hoc'* que têm sido desenvolvidos com este fim. Tais técnicas modificam os parâmetros da equação convectivo-difusiva, o que pode conduzir a erros de solução e dúvidas quanto ao problema que realmente se está resolvendo.

Recentemente, foi desenvolvida uma técnica, denominada método difusional, que propõe uma modificação na equação de convecção-difusão de forma a torná-la puramente difusiva, através de manipulação algébrica, sem perder as características da equação original, visando sua solução pelas técnicas clássicas de diferenças, volumes ou elementos finitos.

Este trabalho desenvolve o método difusional para solução de problemas bidimensionais convectivo-difusivos transientes acoplado à técnica de volumes finitos. O algoritmo numérico teve por base a adaptação de um esquema existente na literatura para a solução de problemas puramente difusivos o CONDUCT desenvolvido por Patankar (1991). Foram feitos testes com dois problemas benchmark, com objetivo de testar a performance do esquema proposto. Também aplicou-se a técnica para resolver um problema real e a solução obtida foi comparada com os resultados da literatura. Os resultados obtidos mostram que o método difusional é uma ferramenta eficiente para solução de problemas convectivo-difusivos bidimensionais transientes e é uma técnica de fácil implementação.

Palavras chaves: Método difusional, convecção-difusão, meios porosos, transporte de poluentes, contaminação de solos.

ABSTRACT

The study of groundwater contamination involves understanding the relevant mechanisms involved in the migration of pollutants (transport problems). Such problems are governed by convection-diffusion equations whose numerical solutions can be obtained through discrete techniques, when the problem is dominated by diffusion. However, when such problems are dominated by convection, classical numerical techniques present difficulties related to dispersion and numerical oscillations. The need for improving those methods, mainly in the study of convective problems, can be assessed by several methods and '*ad doc*' techniques that have been developed to solve this kind of problems. Such techniques modify the parameters of the convective diffusive equation, fact that lead to solution mistakes and to doubts about which problem is really being solved.

A recently developed technique, named diffusional method, proposes a modification of the convection-diffusion equation to a purely diffusive equation, through algebraic manipulation without losing the characteristics of the original equation, in such way that the resulting equation can be solved by means of the classical techniques of finite differences, finite volumes or finite elements.

This work develops the diffusional method to solve two-dimensional transient convective diffusive problems by the finite volumes technique. The numeric algorithm had for base the adaptação of an existent program in the literature for the solution of problems purely diffusives, CONDUCT developed by Patankar (1991). Tests with two benchmark problems, aiming to investigate the performance of the proposed technique were made. Also, the proposed technique was utilized to solve a real problem and the results obtained were compared against the literature values. The results show that the diffusional method is an efficient tool and simple tool for solving transient two-dimensional convective diffusive problems.

Keywords: Diffusional method, convection-diffusion, porous media, pollutant transport, soil contamination.

CAPITULO 1. INTRODUÇÃO

O crescimento econômico tem sido apontado como uma das principais causas de deterioração ambiental. O progresso deveria implicar no cuidado com os recursos que constituem a base de matéria e energia para os processos econômicos e para a manutenção e elevação da qualidade de vida no planeta (Ferreira, 1996). Entretanto, só recentemente a consciência ecológica começou a fazer parte do cotidiano deste planeta; a preocupação científica com a qualidade da água e do ar, o aquecimento global, o controle da camada de ozônio tem aumentado de forma exponencial nas duas últimas décadas. O interesse pelo estudo da camada saturada e não saturada do solo teve um aumento significativo em anos recentes, em grande parte devido à preocupação com a qualidade dos ambientes sub superficiais e subterrâneos. Grandes problemas ambientais estão diretamente relacionados com a água e têm recebido atenção de pesquisadores e responsáveis por políticas públicas em todo o mundo (Rebouças, 2004; Agenda 21, 2006; Riosvivos, 2006).

A maior preocupação diz respeito à avaliação dos riscos envolvidos nos episódios de contaminação. Algumas importantes fontes artificiais de contaminação são: os rejeitos radioativos, os rejeitos de mineração, os lixos urbanos e os agrotóxicos (Thunvik et al., 1984; Williams, 1992). No entanto, estas fontes que, em sua maioria, são geradas pelas atividades de grandes empresas privadas e órgãos governamentais, em geral, não têm recebido a devida monitoração.

O estudo de contaminação da água subterrânea passa pela interpretação dos mecanismos relevantes envolvidos na migração do contaminante. Mesmo para os casos mais simples, os processos envolvidos tendem a propiciar um estudo multidisciplinar, que exige, apesar das dificuldades inerentes, a interação entre pesquisadores de áreas distintas, caracterizando a abrangência desta linha de estudos (Ahuja, 1973; Bresler, 1973; Oduro et al., 1997; Bear, 1979; Montas, 1995).

Quando a água se infiltra no solo, avança verticalmente pela força de gravidade, através dos poros (espaços vazios) existentes entre os grãos até chegar ao reservatório subterrâneo. A camada situada sobre o reservatório subterrâneo é a zona não saturada. Nesta zona, os poros contêm água e ar; existem também, no reservatório subterrâneo, regiões onde todos os poros estão cheios de água, é a zona saturada (Ferreira, 1996).

O reservatório subterrâneo é denominado aquífero quando se pode extrair dele quantidades apreciáveis de água. As águas subterrâneas constituem cerca de 95% da água doce de nosso planeta. Apenas 5% formam todos os rios, lagos e outros (Carvalho, 1997). Esses números mostram a importância fundamental das águas subterrâneas. Portanto, a deterioração das águas subterrâneas por efeito de contaminação, pode acarretar conseqüências imprevisíveis e custosas, alcançando, em alguns casos, efeitos irreversíveis. Essa contaminação ocorre quando os agentes contaminantes chegam ao solo que, ao absorvê-los, pode permitir que eles alcancem o aquífero.

O interesse pelo estudo da camada saturada do solo vem tendo um aumento significativo nos anos recentes, em grande parte devido à crescente preocupação com a qualidade dos ambientes sub-superficiais e subterrâneo (Vogel et al, 1996). A disposição sub-superficial de elementos químicos residuais às atividades antrópicas, provenientes dos núcleos urbanos, agricultura e indústria, tem sido fiscalizada de forma cada vez mais crítica pela comunidade e órgãos ambientais. Fertilizantes e pesticidas aplicados em terras agrícolas se movem abaixo da zona radicular das plantas e podem contaminar lençóis da água subterrânea. O mesmo acontece com elementos químicos tóxicos presentes em esgotos domésticos e industriais que são lançados em lagoas de decantação. Nos Estados Unidos, por exemplo, a água consumida em 1993 e 1994 por 53 milhões de pessoas encontrava-se abaixo de padrões mínimo desejados de potabilidade (Brann, 1995, citado por Gurgel et al., 1995).

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos da engenharia e da física é, hoje, uma realidade graças ao desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de grande capacidade de armazenamento. Em função dessa disponibilidade computacional, que cresce exponencialmente, o desenvolvimento de algoritmos para a solução dos mais diversos problemas tem recebido enorme atenção dos analistas numéricos. A ampla aceitação dos modelos numéricos pela comunidade interessada na solução desses problemas explica-se pela grande versatilidade e relativa simplicidade de aplicação destas técnicas (Maliska, 1995).

Na década de 70 tornou-se freqüente o uso de modelos numéricos para simular o escoamento de fluidos e o transporte de massa na camada saturada e não saturada do solo (Van Genuchten, 1980). A literatura mostra o esforço aplicado no desenvolvimento destes modelos (Freeze, 1971; Pinder, 1973; Bresler, 1973; Vauclin et al., 1979; Zhang et al., 1993; Gurgel et al., 1995; Vogel et al., 1996).

Até o início dos anos 80, os métodos de Diferenças Finitas (MDF) e Volumes Finitos (MVF) (Patankar, 1980; Lapidus & Pinder, 1982; Hirsch, 1988; Hoffman, 1992;)

predominaram como técnicas para solução de problemas convectivo-difusivos. Entretanto estas técnicas eram aplicadas a problemas que envolviam geometrias relativamente simples. Com o desenvolvimento dos métodos de Elementos Finitos (MEF), para solução de problemas convectivos difusivos, (Hughes, 1978; Segerlind, 1984, Zienkiewicz et al., 1984 e Zienkiewicz e Taylor, 1989, 1991), este método passou a competir com os demais métodos numéricos.

A necessidade de aprimoramento desses métodos, principalmente, no tratamento de problemas predominantemente convectivos, levou ao desenvolvimento de novas técnicas de interpolação. Visando solucionar ou minimizar os problemas de falsa difusão e oscilações numéricas, diversos esquemas de interpolação foram criados. Entre outras estão:

- Esquema exponencial (Raithby e Torrance, 1974);
- WUDS – Weighted Upstream Differencing Scheme (Raithby e Torrance, 1974);
- Hybrid Schemes (Patankar and Spalding; 1970, citado por Patankar, 1980);
- Power-Law Schemes (Patankar, 1980);
- Streamline Upwind Petrov-Galerkin (Brooks e Hughes, 1982);
- Monotone Streamline Upwind (Rice and Schnipke, 1985; Schnipke and Rice, 1985, 1987);
- Segregated Streamline Upwind (Shaw, 1991; Crêspo, 1994);
- Consistent Approximate Upwind Petrov-Galerkin (Galeão & do Carmo, 1988; Almeida & Galeão, 1996).

As técnicas citadas acima não conduzem a soluções satisfatórias para problemas bidimensionais e exigem manipulações “especiais” para vários tipos de problemas, mesmo unidimensionais. Outras metodologias têm sido desenvolvidas objetivando a solução de problemas convectivo-difusivos em regime transiente. Dentre elas, podem-se citar as técnicas de acompanhamento de partículas: adaptativa (Neuman, 1984); adjustable hidden fine-mesh approach (Yeh, 1990) e adaptativa modificada (Zhang et al., 1993). Entretanto, novamente, encontram-se dificuldades para a extensão a problemas bidimensionais e tridimensionais. Todas essas aproximações conduzem a soluções únicas e são feitas por meio de manipulações, soluções ‘*ad hoc*’, que modificam alguns parâmetros da equação convectivo-difusiva, o que pode conduzir a erros de solução e dúvidas quanto ao problema que realmente se está resolvendo.

Com o avanço da tecnologia computacional, os métodos numéricos de solução aproximada das equações diferenciais parciais têm se mostrado bastante eficientes tanto em

relação à acurácia quanto em relação ao tempo de processamento. Recentemente, Fortes (1997) propôs o método difusional para a solução equações de convecção-difusão transiente, obtendo soluções ótimas¹ para aplicação em problemas unidimensional transiente. O método difusional consiste basicamente, na manipulação da equação de convecção-difusão de forma a transformá-la em uma equação puramente difusiva. A solução da equação de difusão já se mostrou eficiente e de fácil aplicação para os métodos de MDF, MVF e MEF em problemas uni e bidimensionais.

Entretanto, sabendo-se das dificuldades ainda existentes para obtenção de soluções ótimas para problemas de transporte convectivo difusivo, desenvolveu-se este trabalho com os seguintes objetivos:

- apresentar o desenvolvimento de uma metodologia para a solução de problemas convectivo-difusivos bidimensionais em regime transiente, o método difusional;
- implementar numericamente esta metodologia, usando por base a modificação de algoritmos, conhecidos na literatura, que resolvam a equação de condução/difusão, em particular o uso das bases do CONDUCT algoritmo desenvolvido por Patankar (1991), usado na solução de problemas bidimensionais transientes de condução de calor;
- aproveitar a maior performance dos computadores atuais (velocidade e capacidade de armazenamento) e a otimização do algoritmo CONDUCT, e aplicar refinamentos sucessivos às malhas fazendo desta forma uma solução cada vez mais acurada;
- apresentar soluções de problemas padrões (benchmark) puramente convectivos, obtidas com a aplicação do método difusional e comparar com outras soluções numéricas disponíveis na literatura.

O objetivo específico deste trabalho é avaliar o desempenho do método difusional na solução de problemas bidimensionais transientes de dispersão de poluentes em solos saturados. Para tanto, os resultados obtidos com a aplicação do método difusional serão comparados com os obtidos na literatura.

¹ Soluções ótimas são soluções que se aproximam e possuem um comportamento parecido com os da solução da exata.

CAPITULO 2. O MÉTODO DIFUSIONAL BIDIMENSIONAL

2.1 - Metodologia Numérica

Nos últimos anos houve muita controvérsia e confusão sobre a adequação (em termos de acurácia e estabilidade) de tratamento numérico de problemas de advecção (convecção-difusão). Vários esquemas foram propostos e vários outros continuam a aparecer, como pôde ser visto no capítulo 1. O método difusional aborda um novo enfoque na tentativa de solução de problemas de advecção, através da modificação da equação convectivo-difusiva, utilizando as soluções convencionais para soluções de problemas difusivos, sem forçar adaptação de soluções numéricas, do tipo upwind, híbrido, lei de potência e outros (Fortes, 1997).

O método difusional é um conceito simples e natural, recentemente introduzido como uma ferramenta para solução de problemas envolvendo equações convectivo-difusivas transientes multidimensionais (Fortes, 1997). Este método baseia-se no fato de problemas difusivos lineares e não-lineares (problemas elípticos e parabólicos) poderem, em geral, e na ausência de fortes não-linearidades, ser resolvidos por meio de quaisquer métodos numéricos clássicos, tais como, Diferenças Finitas, Volumes Finitos e Elementos Finitos. A idéia básica é transformar uma equação convectiva-difusiva, em uma equação puramente difusiva. O desenvolvimento do método difusional para problemas de transporte bidimensional transiente inicia-se a partir da equação de convecção-difusão bidimensional transiente na sua forma clássica dada por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \Gamma_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + Q = 0 \quad (2.1)$$

sendo ϕ a variável dependente, u e v são as componentes da velocidade em x e y respectivamente e Γ_x e Γ_y são os coeficientes difusivo em x e y e Q o termo fonte.

Partindo da equação 2.1, têm-se as seguintes igualdades:

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_x \frac{\partial \phi}{\partial x} = A_x \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_x B_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.2)$$

$$v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_y \frac{\partial \phi}{\partial y} = A_y \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_y B_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (2.3)$$

Nas equações 2.2 e 2.3 os termos da esquerda representam respectivamente, os termos convectivo e difusivo da variável de interesse ϕ , nas direções x e y . Resolvendo-se a equação 2.2, derivando o lado direito da mesma e considerando o coeficiente de difusão na direção x , Γ_x , constante tem-se:

$$u \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right] = A_x \frac{\partial B_x}{\partial x} \Gamma_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + A_x B_x \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right] \quad (2.4)$$

Comparando-se os dois lados da equação e reorganizando tem-se:

$$u = A_x \Gamma_x \frac{\partial B_x}{\partial x} \rightarrow \frac{u}{\Gamma_x} = A_x \frac{\partial B_x}{\partial x} \quad (2.5)$$

$$-1 = A_x B_x \rightarrow A_x = -\frac{1}{B_x} \quad (2.6)$$

Substituindo a equação 2.6 na equação 2.5 tem-se:

$$\frac{u}{\Gamma_x} = -\frac{1}{B_x} \frac{\partial B_x}{\partial x} \quad (2.7)$$

Separando-se as variáveis e integrando, obtém-se:

$$-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx = \int_{B_0}^{B_x} \frac{dB_x}{B_x} \rightarrow \ln B_x \Big|_{B_0}^{B_x} = -\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx \rightarrow \ln \left(\frac{B_x}{B_0} \right) = -\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx \quad (2.8)$$

$$B_x = B_{0x} e^{\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \quad (2.9)$$

$$A_x = \frac{-e^{\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx}}{B_{0x}};$$

sendo B_0 constante. Analogamente, para y tem-se:

$$B_y = B_{0y} e^{\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \quad (2.10)$$

$$A_y = \frac{-e^{\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy}}{B_{0y}};$$

Substituindo as equações 2.2 e 2.3 em 2.1 tem-se:

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} + A_x \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma_x B_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right] + A_y \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma_y B_y \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right] + Q = 0 \quad (2.11)$$

Das equações 2.9 e 2.10 em 2.11, e rearranjando tem-se a seguinte forma da equação de difusão convecção bidimensional transiente:

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} - e^{\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma_x \cdot e^{-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \cdot \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right] - e^{\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma_y \cdot e^{-\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \cdot \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right] + Q = 0 \quad (2.12)$$

É importante ressaltar que a aplicação de técnicas numéricas à equação 2.12 retornará à forma anterior da equação de convecção difusão. Logo, uma forma equivalente será obtida multiplicando-se a equação 2.12 por:

$$e^{-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \cdot e^{-\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy}$$

Assim, a nova forma “difusional” para a equação de convecção difusão bidimensional transiente será:

$$e^{-\left[\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx + \int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy\right]} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + Q \right] - e^{-\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - e^{-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.13)$$

Tendo por base o acima exposto, observa-se que a equação 2.13 apresenta a forma difusional da equação convectivo-difusiva bidimensional transiente, e possui uma estrutura semelhante a uma equação bidimensional transiente de difusão. A solução de problemas de difusão (problemas elíptico e parabólico) pode, em geral, e na ausência de uma forte não linearidade, ser obtida de maneira acurada por meio de algum método numérico clássico, tais como Diferenças, Volumes e Elementos Finitos.

As principais vantagens desta metodologia são:

- A equação 2.13 foi obtida de forma natural, sem nenhuma consideração relativa a algum método numérico. Em outras palavras, a formulação acima é independente do esquema numérico a ser utilizado;
- A equação 2.13, pode ser aplicada para problemas lineares e não lineares, fluxos compressíveis e incompressíveis;
- A equação na forma difusional 2.13 é igual à equação de convecção difusão 2.1;
- O método difusional pode ser aplicado para qualquer ordem de polinômios de interpolação;

Esta metodologia pode ser estendida a problemas tridimensionais.

2.2 Aplicação de Volumes Finitos à forma difusional da Equação Bidimensional de Convecção-Difusão Transiente

A aplicação do Método de Volumes Finitos (MVF) a problemas que envolvem as equações de convecção-difusão é relativamente direta e conduz a resultados satisfatórios

quando o problema é dominado pela difusão. Entretanto, para problemas dominados pela convecção, as soluções numéricas apresentam erros de falsa difusão e dispersão numérica (Fortes e Ferreira, 1998). Uma alternativa para resolver ou minimizar esses erros consiste na aplicação do MVF à equação de convecção difusão na forma difusional equação 2.13.

Seja um volume de controle dado por:

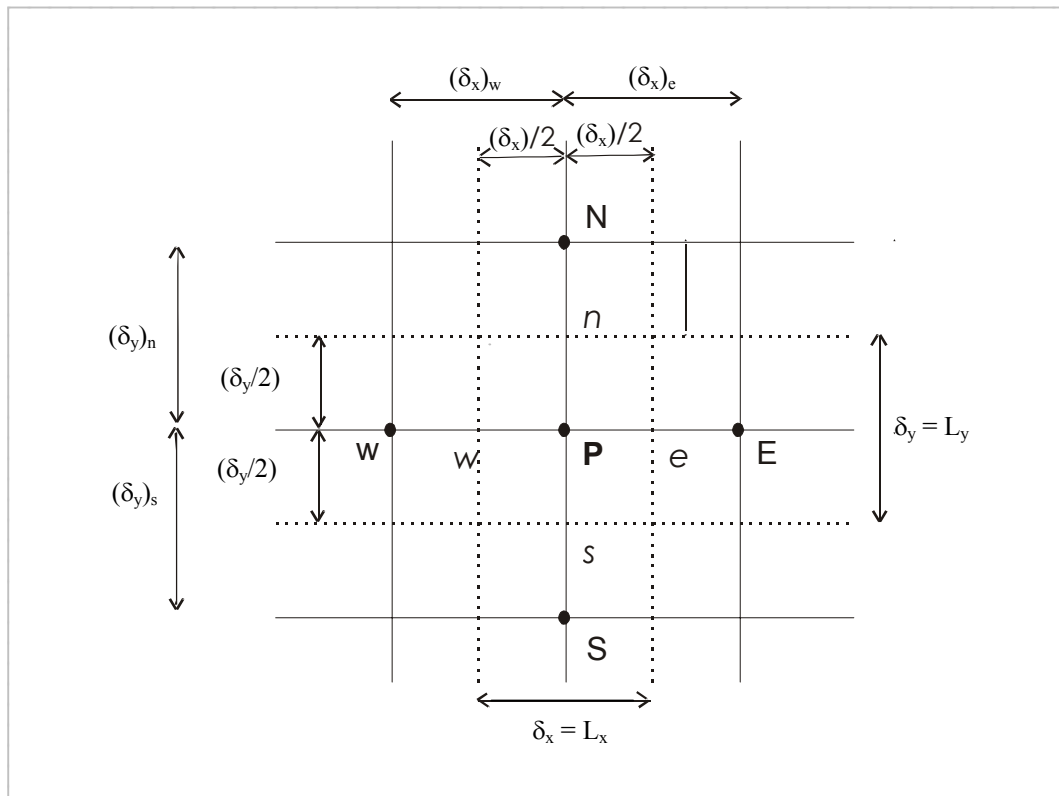


Figura 2.1 – Volume de controle bidimensional.

A forma difusional bidimensional da equação de convecção difusão transiente é dada por:

$$e^{-\left[\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx + \int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy\right]} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + Q \right] - e^{-\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - e^{-\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.14)$$

Assumindo u/Γ_x e v/Γ_y como constantes ou uma média dentro do intervalo de integração, L_x e L_y , comprimentos característicos nas direções x e y , respectivamente, então, os termos dos expoentes da equação acima podem ser escritos em função do número de Peclet local ($P_x = uL_x/2\Gamma_x$, na direção de x , e $P_y = vL_y/2\Gamma_y$, na direção de y), ou seja:

$$\int_0^x \frac{u}{\Gamma_x} dx = \frac{u}{\Gamma_x} x \Big|_0^x = \frac{u}{\Gamma_x} x \cdot \frac{2L_x}{2L_x} = 2 \cdot \left(\frac{uL_x}{2\Gamma_x} \right) \cdot \frac{x}{L_x} = \frac{2P_x x}{L_x} \quad (2.15)$$

$$\int_0^y \frac{v}{\Gamma_y} dy = \frac{v}{\Gamma_y} y \Big|_0^y = \frac{v}{\Gamma_y} y \cdot \frac{2L_y}{2L_y} = 2 \cdot \left(\frac{vL_y}{2\Gamma_y} \right) \cdot \frac{y}{L_y} = \frac{2P_y y}{L_y} \quad (2.16)$$

Finalmente, substituindo as equações 2.15 e 2.16 na equação 2.14, chega-se à seguinte forma para a equação de convecção difusão:

$$e^{-\left[\frac{2P_x}{L_x}x + \frac{2P_y}{L_y}y\right]} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + Q \right] - e^{-\frac{2P_y}{L_y}y} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2P_x}{L_x}x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - e^{-\frac{2P_x}{L_x}x} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\frac{2P_y}{L_y}y} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.17)$$

Inicialmente integrando a equação bidimensional difusional permanente ($d\phi/dt = 0$), em relação a x e y tem-se:

$$\int_s^e \int_w^e \left\{ \underbrace{-e^{-\frac{2P_y}{L_y}y} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2P_x}{L_x}x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)}_I - \underbrace{e^{-\frac{2P_x}{L_x}x} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\frac{2P_y}{L_y}y} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{II} + \underbrace{\left(e^{-\left[\frac{2P_x}{L_x}x + \frac{2P_y}{L_y}y\right]} [Q] \right)}_{III} \right\} dx \cdot dy = 0 \quad (2.18)$$

Integrando-se a equação 2.18, dividida em três partes I, II e III tem-se:

$$I = \int_s^e \int_w^e \left\{ -e^{-\frac{2P_y}{L_y}y} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2P_x}{L_x}x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right\} dx \cdot dy \quad (2.19)$$

Integrando-se a equação 2.19, em x tem-se:

$$I = \int_s^n \left\{ -e^{\frac{2.P_y}{L_y}.y} \left(\Gamma_x e^{\frac{2.P_x}{L_x}.x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \Big|_w^e \right\} dy = \int_s^n \left\{ -e^{\frac{2.P_y}{L_y}.y} \left[\left(\Gamma_x e^{\frac{2.P_x}{L_x}.x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma_x e^{\frac{2.P_x}{L_x}.x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \right\} dy \quad (2.20)$$

Aplicando-se diferenças centradas em $\partial\phi/\partial x$, obtém-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w^e = \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w = \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \right) \quad (2.21)$$

Da figura 2.1 tem-se que $x_e = \frac{\delta_x}{2}$ e $x_w = -\frac{\delta_x}{2}$, e substituindo a equação 2.21

na 2.20 obtém-se:

$$I = \int_s^n \left\{ -e^{\frac{2.P_y}{L_y}.y} \left[\left(\Gamma_x e^{\frac{2.P_x}{L_x} \left(\frac{\delta_x}{2} \right)} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \right) \right)_e - \left(\Gamma_x e^{\frac{2.P_x}{L_x} \left(-\frac{\delta_x}{2} \right)} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \right) \right)_w \right] \right\} dy \quad (2.22)$$

Sabendo que $L_x = \delta_x$, e simplificando a equação 2.22, tem-se:

$$I = \int_s^n \left\{ -e^{\frac{2.P_y}{L_y}.y} \left[\underbrace{\left(\Gamma_x e^{-P_x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \right) \right)_e - \left(\Gamma_x e^{P_x} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \right) \right)_w}_{\text{CONSTANTE EM RELAÇÃO A Y}} \right] \right\} dy \quad (2.23)$$

Integrando-se em y tem-se:

$$I = \left[\left(\Gamma_x e^{-P_x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \right) \right)_e - \left(\Gamma_x e^{P_x} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \right) \right)_w \right] \underbrace{\int_s^n \left\{ -e^{\frac{2.P_y}{L_y}.y} \right\} dy}_{I_y} \quad (2.24)$$

O próximo passo é fazer a integração em relação à y, ou seja, resolver a equação:

$$I_y = \int_s^n \left\{ -e^{\frac{2P_y}{L_y} \cdot y} \right\} dy \quad (2.25)$$

Para isto, faz-se $u = \frac{2P_y y}{L_y}$, cuja derivada em relação a y é: $\frac{du}{dy} = \frac{2P_y}{L_y}$.

Assim, a integral pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} I_y &= -\frac{L_y}{2P_y} \int_s^n e^u \cdot du = -\frac{L_y}{2P_y} \cdot e^u \Big|_s^n = -\frac{L_y}{2P_y} \cdot e^{\frac{2P_y y}{L_y}} \Big|_{-\delta_y/2}^{+\delta_y/2} \\ &= -\frac{L_y}{2P_y} \cdot \left(e^{\frac{2P_y \delta_y}{L_y \cdot 2}} - e^{\frac{2P_y \delta_y}{L_y \cdot 2}} \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Como $L_y = \delta_y$, simplificando a equação 2.26 tem-se:

$$I_y = \int_s^n \left\{ -e^{\frac{2P_y}{L_y} \cdot y} \right\} dy = -\frac{L_y}{2P_y} \cdot \left(e^{\frac{2P_y \delta_y}{L_y \cdot 2}} - e^{\frac{2P_y \delta_y}{L_y \cdot 2}} \right) = -\frac{L_y}{2P_y} \cdot (e^{-P_y} - e^{P_y}) \quad (2.27)$$

Analogamente, para a direção x tem-se:

$$I_x = \int_w^e \left\{ -e^{\frac{2P_x}{L_x} \cdot x} \right\} dx = -\frac{L_x}{2P_x} \cdot (e^{-P_x} - e^{P_x}) \quad (2.27a)$$

Substituindo-se a equação 2.27 na equação 2.24, chega-se à seguinte expressão:

$$I = \left[\left(\Gamma_x e^{-P_x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta_x)_e} \right) \right) - \left(\Gamma_x e^{P_x} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta_x)_w} \right) \right) \right] \frac{L_y}{2P_y} (e^{-P_y} - e^{P_y}) \quad (2.28)$$

Analogamente, para o termo II da equação 2.18 tem-se:

$$II = \int_s^e \int_w^e \left\{ -e^{\frac{2P_x}{L_x} \cdot x} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{\frac{2P_y}{L_y} \cdot y} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right\} dx \cdot dy \quad (2.29)$$

Integrando o termo II (equação 2.29), simplificando e substituindo a equação 2.27a na equação resultante tem-se a seguinte forma análoga à equação 2.28:

$$II = \left[\left(\Gamma_y e^{-P_y} \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta_y)_n} \right) \right) - \left(\Gamma_y e^{P_y} \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta_y)_s} \right) \right) \right] \frac{L_x}{2P_x} (e^{-P_x} - e^{P_x}) \quad (2.30)$$

Integrando-se o termo fonte (III) da equação 2.18, e considerando Q (termo fonte), constante dentro do domínio de integração tem-se:

$$III = \int_s^e \int_w^n \left\{ e^{-\left(\frac{2.P_x}{L_x} \cdot x + \frac{2.P_y}{L_y} \cdot y \right)} Q \right\} dx \cdot dy = \int_s^e \int_w^n \left[\underbrace{e^{-\left(\frac{2.P_y}{L_y} \cdot y \right)}}_{\text{Constante em relação a x}} \cdot \underbrace{e^{-\left(\frac{2.P_x}{L_x} \cdot x \right)}}_{\text{Constante em relação a y}} \right] dx \cdot dy \quad (2.31)$$

Portanto tem-se:

$$III = \int_s^e \int_w^n \left\{ e^{-\left(\frac{2.P_x}{L_x} \cdot x + \frac{2.P_y}{L_y} \cdot y \right)} Q \right\} dx \cdot dy = Q \cdot \int_s^e e^{-\left(\frac{2.P_y}{L_y} \cdot y \right)} \cdot dy \cdot \int_w^n e^{-\left(\frac{2.P_x}{L_x} \cdot x \right)} dx \quad (2.32)$$

Substituindo as equações 2.27 e 2.27a na equação 2.32 tem-se:

$$III = Q \frac{L_x \cdot L_y}{4 \cdot P_x \cdot P_y} (e^{-P_x} - e^{P_x}) (e^{-P_y} - e^{P_y}) \quad (2.33)$$

Finalmente, substituindo as soluções de I (Equação 2.28), II (Equação 2.30) e III (Equação 2.33), na equação 2.18 chega-se ao resultado final da integração dada por:

$$\begin{aligned}
& \left[\left(\Gamma_x e^{-P_x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta_x)_e} \right) \right) - \left(\Gamma_x e^{P_x} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta_x)_w} \right) \right) \right] \frac{L_y}{2P_y} (e^{-P_y} - e^{P_y}) + \\
& \left[\left(\Gamma_y e^{-P_y} \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta_y)_n} \right) \right) - \left(\Gamma_x e^{P_y} \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta_y)_s} \right) \right) \right] \frac{L_x}{2P_x} (e^{-P_x} - e^{P_x}) + \\
& Q \frac{L_x \cdot L_y}{4 \cdot P_x \cdot P_y} (e^{-P_x} - e^{P_x}) (e^{-P_y} - e^{P_y}) = 0
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Multiplicando-se a equação 2.34 por $\frac{4 \cdot P_x \cdot P_y}{(e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{P_y})}$ chega-se a:

$$\begin{aligned}
& \left. \left\{ \frac{4 \cdot P_x \cdot P_y}{(e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left[\left(\Gamma_x e^{-P_x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta_x)_e} \right) \right) - \left(\Gamma_x e^{P_x} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta_x)_w} \right) \right) \right] \right\} \right. \\
& \left. \frac{L_y}{2P_y} (e^{-P_y} - e^{P_y}) + \left[\left(\Gamma_y e^{-P_y} \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta_y)_n} \right) \right) - \left(\Gamma_x e^{P_y} \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta_y)_s} \right) \right) \right] \right. \\
& \left. \frac{L_x}{2P_x} (e^{-P_x} - e^{P_x}) + Q \frac{L_x \cdot L_y}{4 \cdot P_x \cdot P_y} (e^{-P_x} - e^{P_x}) (e^{-P_y} - e^{P_y}) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Simplificando a equação 2.35 chega-se à seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{2 \cdot P_x \cdot L_y \cdot \Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(e^{-P_x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta_x)_e} \right) - e^{P_x} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta_x)_w} \right) \right) \\
& + \frac{2 \cdot P_y \cdot L_x \cdot \Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(e^{-P_y} \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta_y)_n} \right) - e^{P_y} \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta_y)_s} \right) \right) + Q \cdot L_x \cdot L_y = 0
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Reorganizando a equação 2.36 de forma a explicitar os coeficientes das variáveis, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \phi_E - \frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \phi_P - \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \phi_P + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \phi_W \right) \\
& + \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \phi_N - \frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \phi_P - \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \phi_P + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \phi_S \right) + Q.L_x.L_y = 0
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Explicitando os coeficientes das variáveis tem-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \phi_E - \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \right) \phi_P + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \phi_W \right) \\
& + \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \phi_N - \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \right) \phi_P + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \phi_S \right) + Q.L_x.L_y = 0
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Reorganizando a equação 2.38, de forma a explicitar os coeficientes das variáveis ϕ , chega-se à seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \right) + \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \right) \right\} \phi_P = \\
& + \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \right) \phi_E + \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \right) \phi_W + \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \right) \phi_N \\
& + \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \right) \phi_S + Q.L_x.L_y = 0
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Seja a forma esquemática clássica da equação de difusão bidimensional discretizada por aplicação de volumes finitos descrita por Patankar (1980 e 1991) dada por:

$$a_p.\phi_p = a_E.\phi_E + a_W.\phi_W + a_N.\phi_N + a_S.\phi_S + b \tag{2.40}$$

Fazendo analogia entre as equações 2.39 e 2.4, pode-se representar a eq.2.39 na forma clássica da equação de Patankar por:

$$a_P \cdot \phi_P = a_E \cdot \phi_E + a_W \cdot \phi_W + a_N \cdot \phi_N + a_S \cdot \phi_S + b$$

$$a_E = \frac{2 \cdot P_x \cdot L_y \cdot \Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \right)$$

$$a_W = \frac{2 \cdot P_x \cdot L_y \cdot \Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \right)$$

$$a_N = \frac{2 \cdot P_y \cdot L_x \cdot \Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \right)$$

$$a_S = \frac{2 \cdot P_y \cdot L_x \cdot \Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \right)$$

$$b = Q \cdot L_y \cdot L_x$$

com

$$Q = S = S_C + S_P \cdot \phi_P$$

então

(2.41)

$$b = S_C \cdot L_x \cdot L_y$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_P \cdot L_x \cdot L_y$$

2.3 Aplicação de um Esquema Hiperbólico para Equação Bidimensional de Convecção-Difusão Transiente na Forma Difusional.

A avaliação das aproximações em termos de exponenciais oferece dificuldades para determinadas faixas do número de *Peclet* (em módulo). Isto se deve às limitações do cálculo computacional e podem levar a problemas numéricos como, por exemplo, a divisão por zero (*overflow*). Este problema é contornado utilizando-se um modelo hiperbólico (Fortes e Ferreira, 1999 e Zienkiewicz, 1989). Para tanto, define-se uma variável α , como sendo:

Seja α_x e α_y definidos como:

$$\alpha_x = \coth |P_x| - \frac{1}{|P_x|} \quad (2.42)$$

$$\alpha_y = \coth |P_y| - \frac{1}{|P_y|}$$

Através de diversas manipulações com o auxílio do software Mathcad, obtém-se, através da equação 2.42, os valores de e^{2P} e e^{-2P} , em relação à x como:

$$e^{2P_x} = \frac{P_x(\alpha_x + 1) + 1}{P_x(\alpha_x - 1) + 1} \quad (2.43)$$

$$e^{-2P_x} = \frac{P_x(\alpha_x - 1) + 1}{P_x(\alpha_x + 1) + 1}$$

e em relação à y como:

$$e^{2P_y} = \frac{P_y(\alpha_y + 1) + 1}{P_y(\alpha_y - 1) + 1} \quad (2.44)$$

$$e^{-2P_y} = \frac{P_y(\alpha_y - 1) + 1}{P_y(\alpha_y + 1) + 1}$$

Manipulando a equação 2.41 tem-se:

$$a_E = \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \right)$$

portanto tem - se :

$$a_E = \frac{2.P_x}{\left(\frac{e^{-P_x} - e^{P_x}}{e^{-P_x}} \right)} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) = \frac{2.P_x}{\left(1 - \frac{e^{P_x}}{e^{-P_x}} \right)} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) \quad (2.45)$$

logo

$$a_E = \frac{2.P_x}{(1 - e^{2P_x})} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right)$$

Substituindo as equações 2.43 em 2.45, tem-se:

$$a_E = \frac{2.P_x}{(1 - e^{2P_x})} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) = \frac{2.P_x}{\left(1 - \frac{P_x(\alpha_x + 1) + 1}{P_x(\alpha_x - 1) + 1} \right)} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) = \quad (2.46)$$

$$\left(\frac{2.P_x}{\frac{P_x(\alpha_x - 1) + 1 - P_x(\alpha_x + 1) - 1}{P_x(\alpha_x - 1) + 1}} \right) \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right)$$

Fatorando a equação acima se tem:

$$a_E = \frac{2.P_x.(P_x(\alpha_x - 1) + 1)}{P_x\alpha_x - P_x + 1 - P_x\alpha_x - P_x - 1} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) = \frac{2.P_x.(P_x(\alpha_x - 1) + 1)}{-2P_x} \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) \quad (2.46a)$$

Simplificando tem-se:

$$a_E = -(P_x(\alpha_x - 1) + 1) \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) \quad (2.46b)$$

Analogamente para a_W , a_N e a_S tem-se:

$$\begin{aligned}
 a_E &= -(P_x(\alpha_x - 1) + 1) \left(\frac{L_y \cdot \Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) \\
 a_W &= -(P_x(\alpha_x + 1) + 1) \left(\frac{L_y \cdot \Gamma_x}{(\delta_x)_W} \right) \\
 a_N &= -(P_y(\alpha_y - 1) + 1) \left(\frac{L_x \cdot \Gamma_y}{(\delta_y)_n} \right) \\
 a_S &= -(P_y(\alpha_y + 1) + 1) \left(\frac{L_x \cdot \Gamma_y}{(\delta_y)_S} \right)
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

2.3.1 Análise do valor de α

Os valores de α podem ser aproximados por um modelo hiperbólico em termos exponenciais conforme o valor de Peclet (em modulo) da seguinte forma:

$$|P| \geq \text{Limite Superior} \Rightarrow \alpha \cong \left(1 - \frac{1}{|P|} \right) [\text{sinal}(P)]$$

$$0.1 < |P| < \text{Limite Superior} \Rightarrow \alpha \cong \coth |P| - \frac{1}{|P|} \tag{2.48}$$

$$|P| \leq 0.1 \Rightarrow \alpha \cong \frac{P}{3}$$

A aplicação do modelo hiperbólico possibilita contornar as limitações em relação ao valor de Peclet sem prejuízo da acurácia dos resultados. As aproximações exponenciais e hiperbólicas são equivalentes e, evidentemente, levam aos mesmos resultados. Os parâmetros que fixam o limite superior (*Limite Superior*) variam de autor para autor (Barreto, 2004). Uma análise de duas dessas variações mostra que as aproximações se equivalem.

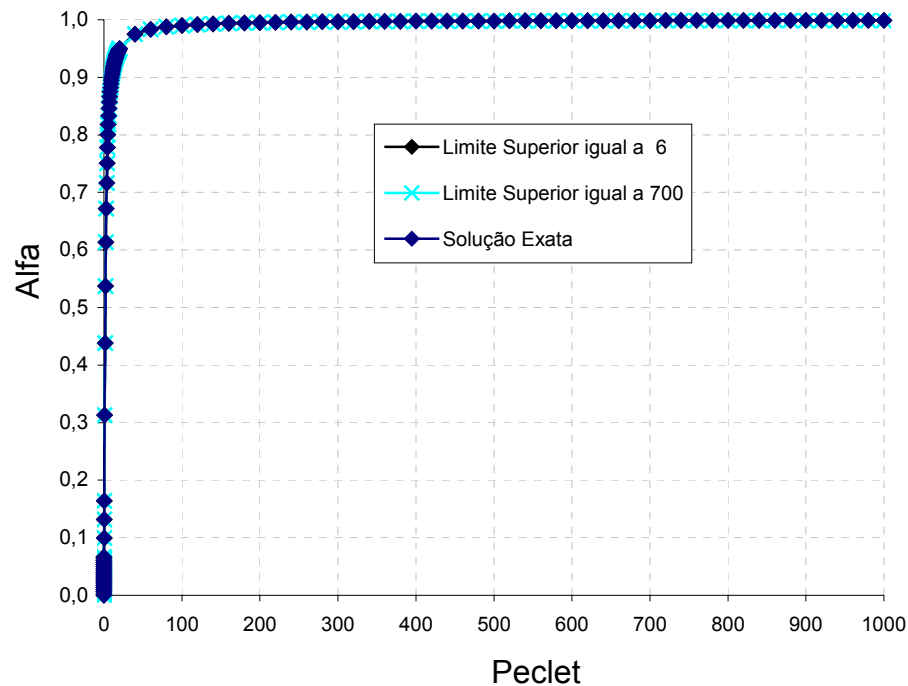


Figura 2.2 – Aproximação dos valores de α .

A figura 2.2 mostra a comparação dos valores da solução exata de α em relação ao Peclet, comparado com a aproximação onde o Limite Superior é igual a 6 (Fortes e Ferreira, 1999 e Zienkiewicz, 1989), e 700 (Barreto, 2004). Os resultados são equivalentes, visto que as três equações se sobrepõem. Neste trabalho foi utilizado o valor do Limite Superior de 6.

2.4 A solução transiente para Equação Bidimensional de Convecção-Difusão na Forma Difusional.

Depois de obtida a discretização espacial, a aproximação para a parte transiente da equação de convecção difusão é obtida integrando-se a equação 2.17 em relação a x , y e t (tempo) que fornece:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left\{ \begin{array}{l} e^{-\left[\frac{2.P_x.x+2.P_y.y}{L_x}\right]} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + Q \right] \\ - e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \end{array} \right\} dx.dy.dt = 0 \quad (2.49)$$

Da equação 2.49 tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left\{ \begin{array}{l} \underbrace{e^{-\left[\frac{2.P_x.x+2.P_y.y}{L_x}\right]} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]}_{\text{Variável em relação ao Tempo}} + \\ \underbrace{e^{-\left[\frac{2.P_x.x+2.P_y.y}{L_x}\right]} Q - e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)}_{\text{Fixo em relação ao Tempo}} - \\ \underbrace{e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{\text{Fixo em relação ao Tempo}} \end{array} \right\} dx.dy.dt = 0 \quad (2.50)$$

Integrando a parte fixa da equação 2.50 em relação ao tempo tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left\{ \begin{array}{l} e^{-\left[\frac{2.P_x.x+2.P_y.y}{L_x}\right]} Q - e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \\ e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \end{array} \right\} dx.dy.dt = \quad (2.51)$$

$$= \int_s^n \int_w^e \left\{ \begin{array}{l} e^{-\left[\frac{2.P_x.x+2.P_y.y}{L_x}\right]} Q - e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_x e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \\ e^{-\frac{2.P_x.x}{L_x}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_y e^{-\frac{2.P_y.y}{L_y}} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \end{array} \right\} dx.dy.\Delta t = 0$$

Resolvido na equação (3.41)

Resolvendo a parte variável em relação ao tempo da equação 2.50 em função de x e y , tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \underbrace{e^{-\left(\frac{2.P_x}{L_x}.x + \frac{2.P_x}{L_x}.x\right)}}_{\substack{\text{Igual a solução do} \\ \text{termo fonte Q em} \\ \text{relação a x e y,} \\ \text{Equação 3.33}}} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} dx \cdot dy \cdot dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{L_x \cdot L_y}{4.P_x \cdot P_y} \cdot (e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{-P_y}) \right] \cdot \frac{\partial \phi}{dt} dt \quad (2.52)$$

Resolvendo a equação 2.52 por uma aproximação no tempo por diferenças centradas tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{L_x \cdot L_y}{4.P_x \cdot P_y} \cdot (e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{-P_y}) \right] \cdot \frac{\partial \phi}{dt} dt = \left[\frac{L_x \cdot L_y}{4.P_x \cdot P_y} \cdot (e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{-P_y}) \right] \cdot (\phi_p - \phi_p^0) \quad (2.53)$$

onde ϕ_p representa a propriedade no ponto P no tempo atual ou seja no tempo $t + \Delta t$, e ϕ_p^0 representa a propriedade no ponto P, no tempo anterior t .

Dividindo-se as equações 2.51 e 2.53 por Δt , tem-se que a equação 2.51 passa a ter o formato da equação 2.18 cuja solução é dada na equação 2.41, e a equação 2.53 é dada por:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{L_x \cdot L_y}{4.P_x \cdot P_y} \cdot (e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{-P_y}) \right] \cdot \frac{\partial \phi}{dt} dt \cdot \frac{1}{\Delta t} = \left[\frac{L_x \cdot L_y}{4.P_x \cdot P_y} \cdot (e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{-P_y}) \right] \cdot \frac{(\phi_p - \phi_p^0)}{\Delta t} \quad (2.54)$$

Multiplicando-se a equação 2.54 por $\frac{4.P_x \cdot P_y}{(e^{-P_x} - e^{P_x})(e^{-P_y} - e^{-P_y})}$ tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[e^{-\left(\frac{2.P_x}{L_x}.x + \frac{2.P_x}{L_x}.x\right)} \right] \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} dx.dy.dt. \frac{1}{\Delta t} = L_x.L_y. \frac{(\phi_P - \phi_P^0)}{\Delta t} \quad (2.55)$$

Das equações 2.38 e 2.55 tem-se:

$$\begin{aligned} L_x.L_y. \frac{(\phi_P - \phi_P^0)}{\Delta t} + \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \phi_E - \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \right) \phi_P + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \phi_W \right) \\ + \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \phi_N - \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \right) \phi_P + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \phi_S \right) + Q.L_x.L_y = 0 \end{aligned} \quad (2.56)$$

Rearranjando os termos e colocando na forma clássica tem-se:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{L_x.L_y}{\Delta t}}_{a_p^0} \phi_P - \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \right) \phi_P - \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \right) \phi_P = \\ - \frac{2.P_x.L_y.\Gamma_x}{(e^{-P_x} - e^{P_x})} \left(\frac{e^{-P_x}}{(\delta_x)_e} \phi_E + \frac{e^{P_x}}{(\delta_x)_w} \phi_W \right) - \frac{2.P_y.L_x.\Gamma_y}{(e^{-P_y} - e^{P_y})} \left(\frac{e^{-P_y}}{(\delta_y)_n} \phi_N + \frac{e^{P_y}}{(\delta_y)_s} \phi_S \right) \\ + Q.L_x.L_y + \underbrace{\frac{L_x.L_y}{\Delta t}}_{a_p^0} \phi_P^0 = 0 \end{aligned} \quad (2.57)$$

Aplicando-se o esquema de aproximação hiperbólica das equações 2.47, sobre o resultado da equação 2.57, pode-se escrever:

$$a_p \cdot \phi_P = a_E \cdot \phi_E + a_W \cdot \phi_W + a_N \cdot \phi_N + a_S \cdot \phi_S + b \quad (2.58)$$

$$a_E = -(P_x(\alpha_x - 1) + 1) \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right) \quad (2.58a)$$

$$a_W = -(P_x(\alpha_x + 1) + 1) \left(\frac{L_y.\Gamma_x}{(\delta_x)_w} \right) \quad (2.58b)$$

$$a_N = -(P_y(\alpha_y - 1) + 1) \left(\frac{L_x \cdot \Gamma_y}{(\delta_y)_n} \right) \quad (2.58c)$$

$$a_S = -(P_y(\alpha_y + 1) + 1) \left(\frac{L_x \cdot \Gamma_y}{(\delta_y)_S} \right) \quad (2.58d)$$

$$b = Q \cdot L_y \cdot L_x + a_P^0 \cdot \phi_P^0$$

como

$$Q = S = S_C + S_P \cdot \phi_P$$

(2.58e)

então

$$b = S_C \cdot L_x \cdot L_y + a_P^0 \cdot \phi_P^0$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - a_P^0 - S_P \cdot L_x \cdot L_y$$

$$a_P^0 = \frac{L_x \cdot L_y}{\Delta t}$$

Os resultados obtidos nas equações 2.58, foram adaptados, ao programa CONDUCT, programa de volumes finitos, de condução bidimensional transiente descrito por Patankar (1991).

2.5 Adaptação do Método Difusional Bidimensional Transiente, Através da Modificação do Programa CONDUCT

O programa CONDUCT foi desenvolvido por Patankar (1991) com a intenção de analisar a condução de calor e a transferência de calor em dutos. Por essa razão, para o programa de computador foi dado o nome de CONDUCT, que significa CON, condução e DUCT, fluxo no duto.

O CONDUCT foi projetado para a solução de equação diferencial parcial de condução de calor. Ele pode calcular a distribuição de quantidades escalares tais como, a temperatura na equação de condução de calor, a concentração na equação difusão de massa, a velocidade e a temperatura em um escoamento totalmente desenvolvido em dutos, todos os fenômenos relacionados às equações de difusão bidimensional.

O CONDUCT foi desenvolvido para utilizar três sistemas de coordenadas bidimensionais, sendo:

- Cartesianas (x,y) ;
- Axissimétricas (x,r) ;
- Polares (θ, r) .

O programa é ideal para aplicação em domínios regulares em que possam ser aplicados esses sistemas de coordenadas.

O CONDUCT é construído em duas partes: uma parte fixa (invariant) e outra adaptação (adaptation). A parte fixa (invariant) contém todos os esquemas de cálculos gerais, que são comuns para todas as possíveis aplicações e com todas as restrições do problema. Esta parte é escrita sem nenhum conhecimento prévio ou suposição sobre algum detalhe particular dos problemas a serem resolvidos. Normalmente a parte fixa não sofre nenhuma modificação na solução de qualquer problema. A parte adaptação (adaptation) proporciona as especificações necessárias aos problemas a serem resolvidos, aqui os detalhes dos problemas tais como geometria, propriedade dos materiais, fonte de calor, condições de contorno, impressão de resultados são implementados (Figura 2.3).

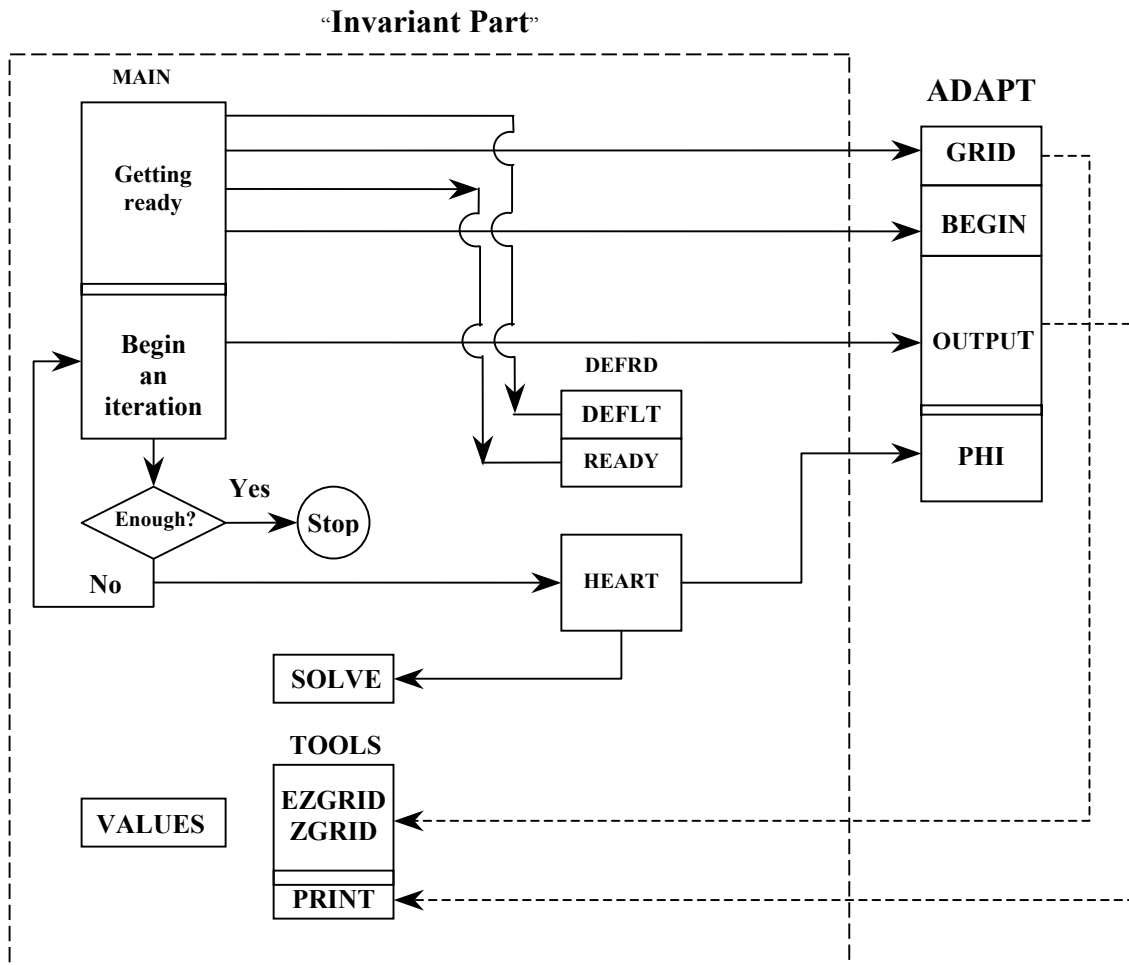


Figura 2.3 – Fluxograma do CONDUCT

Uma descrição sucinta do fluxograma mostrado na Figura 2.3 é dada a seguir:

A parte adaptativa ADAPT é dividida em:

- Sub-rotina GRID: Chama as sub-rotinas ZGRID e EZGRIG, que definem a malha dentro do domínio de integração;
- Sub-rotina BEGIN: Define os valores das variáveis e o tipo de condição de contorno (Fluxo, prescrita e derivativa);
- Sub-rotina OUTPUT: Imprime os resultados;
- Sub-rotina PHI: Define as variáveis.

A parte Invariant é dividida em:

- Sub-rotina DEFLT: Inicializa as variáveis.
- Sub-rotina READY: Calcula as diversas quantidades geométricas, que são utilizadas no restante do programa;
- Início do Looping:

- Sub-rotina OUTPUT: Definida no ADAPT;
- Sub-rotina HEART: Implementa o sistema de equação e condições de contorno, chama as sub-rotinas PHI e SOLVE.
- Sub-rotina SOLVE: resolve o sistema de equações pelo método TDMA.

2.5.1 Adaptação do CONDUCT, para o Método Difusional

A adaptação do CONDUCT pelo Método Difusional Bidimensional Transiente inicialmente parece ser simples fazendo-se apenas algumas alterações na parte fixa (invariant) do mesmo.

Partindo-se das equações 2.58 tem-se:

$$a_P \cdot \phi_P = a_E \cdot \phi_E + a_W \cdot \phi_W + a_N \cdot \phi_N + a_S \cdot \phi_S + b \quad (2.59)$$

$$a_E = -(P_x(\alpha_x - 1) + 1) \underbrace{\left(\frac{L_y \cdot \Gamma_x}{(\delta_x)_e} \right)}_{\text{JÁ IMPLEMENTADO}} \quad (2.59a)$$

$$a_W = -(P_x(\alpha_x + 1) + 1) \underbrace{\left(\frac{L_y \cdot \Gamma_x}{(\delta_x)_W} \right)}_{\text{JÁ IMPLEMENTADO}} \quad (2.59b)$$

$$a_N = -(P_y(\alpha_y - 1) + 1) \underbrace{\left(\frac{L_x \cdot \Gamma_y}{(\delta_y)_n} \right)}_{\text{JÁ IMPLEMENTADO}} \quad (2.59c)$$

$$a_S = -(P_y(\alpha_y + 1) + 1) \underbrace{\left(\frac{L_x \cdot \Gamma_y}{(\delta_y)_S} \right)}_{\text{JÁ IMPLEMENTADO}} \quad (2.59d)$$

$$b = Q \cdot L_y \cdot L_x + a_P^0 \cdot \phi_P^0 \quad (2.59e)$$

em que Q pode ser definido como:

$$Q = S = S_C + S_P \cdot \phi_P$$

então

$$b = \underbrace{S_C \cdot L_x \cdot L_y + a_P^0 \cdot \phi_P^0}_{\text{JÁ IMPLEMENTADO}} \quad (2.59f)$$

$$a_P = \underbrace{a_E + a_W + a_N + a_S - a_P^0 - S_P \cdot L_x \cdot L_y}_{\text{JÁ IMPLEMENTADO}}$$

$$a_P^0 = \frac{L_x \cdot L_y}{\Delta t}$$

No entanto, quando da adaptação do CONDUCT, diversos problemas ocorreram, o que ocasionou diversas modificações no algoritmo, que mudaram substancialmente as formas originais do programa. Tais modificações são listadas abaixo:

1. Transformação de todo o programa que foi escrito em precisão simples para dupla precisão;
2. Visando simplificar a implementação das condições de contorno, modificou-se do sistema de coordenadas de Prática B² para Prática A, definidas por Patankar (1980).
3. Redefinição das condições de contorno na sub-rotina HEART.
4. Criação de um sistema de transformação de coordenadas locais para global.
5. Implementação de um novo resolvidor de matriz resultante de TDMA usando um resolvidor direto JORDAN.

Portanto, após todas essas modificações criou-se uma rotina com o formato do CONDUCT, mas, sem as características iniciais do mesmo. Este programa que será daqui por diante, neste texto, denominado CONDUCT MODIFICADO.

² Prática A: Traçam-se os pontos nodais e depois se traçam os volumes de controle.

Prática B: Traçam-se os volumes de controle e depois se colocam os pontos nodais

2.6 Parâmetros considerados na aplicação dos problemas

2.6.1 Análise do número de Fourier

O número de Fourier (Fo) é um tempo adimensional muito utilizado para caracterizar problemas transientes, sendo conhecido como número de difusão (Hoffman, 1992). Em problemas envolvendo transporte de massa, o número de Fo representa a razão entre a taxa de difusão de massa e a taxa de acúmulo de massa e é definido como:

$$Fo = \frac{\Gamma_n \cdot \Delta t}{L_n^2} \quad (2.60)$$

sendo Γ_n o coeficiente de difusão na direção n , Δt o intervalo de tempo e L_n a dimensão característica do volume de controle na direção n .

Em problemas envolvendo convecção-difusão, o número de Fourier determina a velocidade de convergência. A relação ideal entre o número de Peclet (Pe) e o número de Fourier (Fo) é mostrada na Tabela 2.1 (Barreto, 2004).

TABELA 2.1

Relação ideal entre Pe e Fo para a convergência

Tipo do Problema	Valores de Peclet	Valores de Fourier
Problema difusivo dominante	$Pe \leq 0,1$	$Fo = 1,0$
Problema intermediário	$0,1 < Pe < 10$	$Fo = 0,7$ e $0,8$
Problema convectivo dominante	$Pe \geq 10$	$Fo = 0,5$

2.6.2 Teste de malha

O teste de malha consiste em se fazer refinamentos sucessivos nas malhas de modo a se obter, a cada refinamento, uma solução mais próxima da solução real até que o próximo refinamento não gere uma solução mais acurada que a anterior.

2.6.3 Critério de convergência

Foram criados dois critérios de convergência:

- O primeiro critério é definido pelo módulo da diferença entre a solução no tempo anterior e atual, o maior valor da diferença entre todos os pontos nodais deverá ser menor que um erro estipulado ($\varepsilon = 1 \times 10^{-15}$), ou seja:

$$|\phi - \phi^o| < \varepsilon \quad \text{onde } \varepsilon = 1 \times 10^{-15} \quad (2.61)$$

- O segundo critério é definido por:

$$\left| \frac{\phi - \phi^o}{\phi} \right| < \varepsilon \quad \text{onde } \varepsilon = 0,001 \quad (2.62)$$

2.6.4 Não Linearidade e Relaxação

Alguns problemas a serem resolvidos pelo CONDUCT MODIFICADO podem possuir não linearidades. Portanto, os coeficientes obtidos nas discretizações dependem da variável ϕ , que pode influenciar outros coeficientes de ϕ . Para abordagem deste tipo de problema pode ser necessária a implementação do uso de um coeficiente de relaxação que determina que esta influência seja amortecida e incrementada lentamente. Esta influência pode ser definida pela equação 2.63.

$$\phi = \alpha_i \phi_i + (\alpha_i - 1) \phi_{i-1} \quad \text{onde } 0 \leq \alpha_i \leq 1 \quad (2.63)$$

No caso dos problemas abordados, o coeficiente de α foi sempre considerado igual a 1, não foi aplicada relaxação.

2.7 O esquema vetorial a montante (direcional), (Barreto, 2004).

A aplicação do método difusional para a solução da equação de convecção difusão unidimensional apresentou excelentes resultados, mesmo para problemas convectivo dominantes (Fortes, 1997; Fortes e Ferreira, 1999). Sabe-se que em situações unidimensionais a direção do escoamento coincidirá com a direção da linha formada pelo ponto nodal (P) e seus vizinhos (W, E).

Para a solução de problemas bidimensionais, são utilizadas as contribuições dos quatro pontos nodais (W, E, N, S), vizinhos ao nó analisado (P), para a formação da matriz de rigidez, ver figura 2.1. Estes nós situam-se sobre um sistema de coordenadas cujos eixos não estarão, obrigatoriamente, na direção do escoamento.

O esquema vetorial utiliza a direção do vetor velocidade no ponto nodal P para definir um novo sistema de coordenadas, cujo eixo x se posicionará alinhado com a direção do escoamento. Assim, realiza-se uma rotação do sistema de coordenadas em torno do ponto P , ver figura 2.4. Esta modificação visa situar os pontos nodais vizinhos (W, E) exatamente na direção do escoamento, como acontece em problemas unidimensionais.

Além disto, é necessário garantir que somente os pontos nodais vizinhos na direção do escoamento (W, E) contribuam com a parte convectiva na formação da matriz de rigidez. Este objetivo é implementado através do valor adotado para o número de Peclet. Para a direção do escoamento, o número de Peclet (P_{dir}) será avaliado utilizando-se o módulo e o sentido (sinal) do vetor velocidade no ponto P (V_{dir}), o comprimento do volume de controle nesta direção (L_{dir}) e o valor do coeficiente de difusão na direção do escoamento (Γ_{dir}). Para a direção perpendicular ao escoamento, assume-se que a componente da velocidade nesta direção será igual a zero, logo o valor de Peclet será também igual a zero ($P_{perp}=0$). Desta forma elimina-se a contribuição convectiva dos pontos nodais vizinhos localizados sobre o eixo perpendicular à direção do escoamento (S, N).

Portanto, baseando-se nas condições descritas acima, os valores dos coeficientes dos pontos nodais vizinhos ao nó P serão obtidos por:

$$a_E = -[P_{dir} \cdot (\alpha_{dir} - 1) + 1] \left(\frac{L_{dir} \Gamma_{dir}}{\delta_{dir}} \right) \quad (2.64a)$$

$$a_W = -[P_{dir} \cdot (\alpha_{dir} + 1) + 1] \left(\frac{L_{dir} \Gamma_{dir}}{\delta_{dir}} \right) \quad (2.64b)$$

$$a_N = -\frac{L_{dir} \Gamma_{perp}}{\delta_{perp}} \quad (2.64d)$$

$$a_S = -\frac{L_{dir} \Gamma_{perp}}{\delta_{perp}} \quad (2.64e)$$

A aplicação da metodologia descrita acima dependerá das condições particulares do escoamento em relação à malha. No esquema representado na figura 2.4, verifica-se que não existem pontos nodais pertencentes à malha utilizada (azul) nas posições onde se situam os pontos W , E , S e N . Portanto, deverão ser utilizadas interpolações para avaliar alguns dos parâmetros necessários para a aplicação do esquema vetorial.

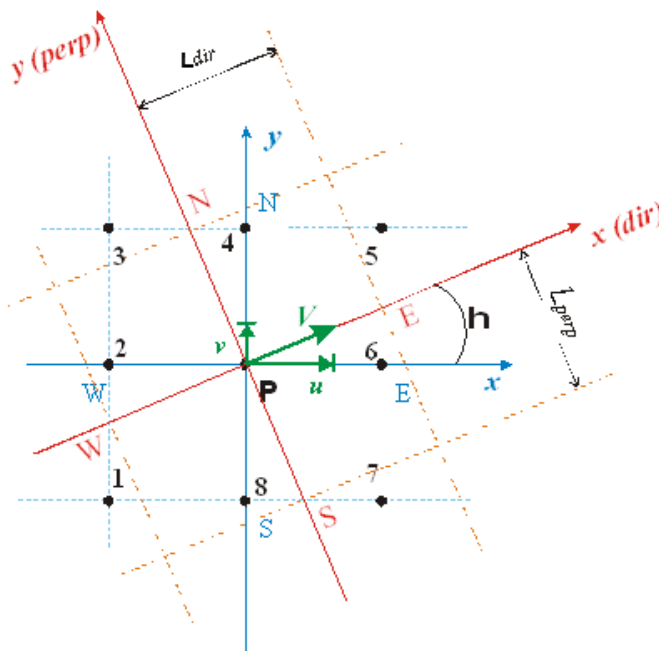


Figura 2.4– Rotação do volume de controle no primeiro quadrante.

Para descrever o procedimento adotado, consideraremos uma malha regular alinhada com os eixos de coordenadas, ver figura 2.4. Inicialmente divide-se o volume de controle em oito setores (octantes) visando separar as regiões de influência dos pontos nodais

da malha (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 e 8) sobre os pontos nodais do volume de controle adotado (W , E , S e N), pontos de referência. As seqüências de tarefas a serem realizadas para cada octante são muito semelhantes. Assim, utilizaremos o primeiro octante para detalhar o procedimento.

Para o primeiro octante ($0 \leq \eta < 45^\circ$), o ângulo entre o escoamento e a malha (η) será definido através da seguinte expressão:

$$\eta = \arcsen\left(\frac{|v|}{\sqrt{u^2 + v^2}}\right) = \arcsen(|v|/V_{dir}) \quad (2.65)$$

sendo u a componente da velocidade em x , v a componente da velocidade em y e V_{dir} o módulo do vetor velocidade.

Para a determinação dos parâmetros necessários à utilização da equação (2.41) realiza-se as seguintes tarefas:

1º) Avaliação dos valores da variável analisada ϕ nas posições E , W , N e S :

$$\bullet \quad \phi_E = \phi_6 \cdot P_2 + \phi_5 \cdot P_1 \quad (2.66a)$$

$$\bullet \quad \phi_W = \phi_2 \cdot P_2 + \phi_1 \cdot P_1 \quad (2.66b)$$

$$\bullet \quad \phi_N = \phi_4 \cdot P_2 + \phi_3 \cdot P_1 \quad (2.66c)$$

$$\bullet \quad \phi_S = \phi_8 \cdot P_2 + \phi_7 \cdot P_1 \quad (2.66d)$$

sendo:

ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 , ϕ_4 , ϕ_5 , ϕ_6 , ϕ_7 e ϕ_8 , os valores da variável analisada nos pontos nodais vizinhos ao ponto nodal P , pertencentes a malha utilizada;

P_1 e P_2 , os fatores de peso, que variam em relação ao ângulo de escoamento, ou seja:

$$\bullet \quad P_1 = \tan(\eta) \quad (2.67a)$$

$$\bullet \quad P_2 = 1 - \tan(\eta) \quad (2.67b)$$

2º) Avaliação das distâncias entre o ponto nodal central (P) e os pontos de referência E , W , N e S :

- $L_{dir} = L_{perp} = L / \cos(\eta)$ (2.68)

3°) Avaliação do coeficiente de difusão na direção do escoamento (Γ_{dir}) e na direção perpendicular ao escoamento (Γ_{perp});

- $\Gamma_{dir} = \Gamma_x / \cos(\eta)$ (2.69a)

- $\Gamma_{perp} = \Gamma_y / \cos(\eta)$ (2.69b)

4°) Avaliação do número de Peclet na direção do escoamento (P_{dir}) utilizando-se o valor de V_{dir} e de L_{dir} . O número de Peclet na direção perpendicular ao escoamento será igual a zero;

5°) Avaliação do coeficiente hiperbólico α na direção do escoamento (α_{dir}) – equações (2.48);

6°) Avaliação dos coeficientes a_W, a_E, a_N, a_S utilizando-se as equações (2.64);

7°) Distribuição dos valores de a_W, a_E, a_N, a_S para os pontos nodais da malha utilizada:

- $a_1 = a_1 + a_W \cdot P_1$ (2.70a)

- $a_2 = a_2 + a_W \cdot P_2$ (2.70b)

- $a_3 = a_3 + a_N \cdot P_1$ (2.70c)

- $a_4 = a_4 + a_N \cdot P_1$ (2.70d)

- $a_5 = a_5 + a_E \cdot P_1$ (2.70e)

- $a_6 = a_6 + a_E \cdot P_1$ (2.70f)

- $a_7 = a_7 + a_S \cdot P_1$ (2.70g)

- $a_8 = a_8 + a_S \cdot P_1$ (2.70h)

Procedimentos semelhantes serão adotados para as demais situações nas quais o escoamento se processará em direções que se enquadram nos demais octantes. Basicamente, as principais adaptações estarão na forma de avaliação do ângulo de escoamento e nas relações que determinam quais pontos nodais (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8) contribuirão para a definição dos parâmetros dos pontos de referências (W, E, S, N).

A utilização de um esquema vetorial, como apresentado, baseia-se na direção do vetor velocidade para a determinação da posição dos pontos de referência. Assim, este esquema supõe linhas de correntes retilíneas (escoamento unidirecional), no interior do volume de controle. Portanto, esta técnica apresentará melhores resultados quando utilizada em estudos que envolvam escoamentos com linhas de correntes aproximadamente retilíneas, ou seja, com curvatura pouco acentuada.

CAPITULO 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO (PROBLEMAS BENCHMARK)

O desempenho do método difusional foi avaliado, através do desenvolvimento de um software com a aplicação do método de volumes finitos, tendo por base o programa CONDUCT, (Patankar, 1991). Foram testados dois problemas benchmark na literatura, usados na avaliação das equações de convecção-difusão. Em todos os testes realizados para estes dois problemas não foi considerada a existência de termo fonte. Foram utilizadas malhas homogêneas, ou seja, espaçamentos em x e y constantes, o incremento no tempo também foi mantido constante. Os testes foram realizados analisando o comportamento da solução, convergência, acurácia e estabilidade por meio de refinamentos sucessivos da malhas. Através do maior número de pontos nodais (regiões), a solução tende a se aproximar da real, mostrando que não é necessária à aplicação de técnicas de soluções tipo upwind, streamline upwind, etc.

O programa foi desenvolvido em FORTRAN, e executado em um computador com um processador AMD Athlon (tm) XP 2400, 1,99 Ghz e 992 MB de memória “RAM”, rodando em um sistema operacional Windows XP.

3.1 Escoamento Laminar Envolvendo Convecção Pura

Este problema tem sido utilizado em diversas publicações para avaliar a acurácia e a estabilidade de métodos propostos para a resolução da equação de convecção-difusão, conforme pode ser visto em Patankar (1980), Rice & Schnipke (1985) e Versteeg & Malalasekera (1995). Objetiva-se avaliar o comportamento das soluções obtidas com a aplicação do método difusional, em problemas de transporte convectivo difusivo.

Este problema visa analisar o transporte puramente convectivo de uma propriedade ϕ qualquer ao longo das linhas de corrente. O coeficiente difusivo Γ_ϕ é suposto próximo a zero. O domínio de solução é uma região quadrada como está mostrada na Figura 3.1. O campo de velocidade é considerado uniforme sobre todo o domínio; entretanto, pode-se variar o ângulo de escoamento em relação à malha.

Os valores de ϕ ao longo das fronteiras de entrada do fluido são prescritos como sendo: $\phi = 0$ (inferior) e $\phi = 1$ (lateral esquerda). Para as demais fronteiras adotou-se condições de contorno derivativas: $\partial\phi/\partial x = 0$ (lateral direita) e $\partial\phi/\partial y = 0$ (superior). Nos problemas que envolveram transporte puramente convectivo, seria teoricamente dispensável a utilização de condições de contorno na saída, pois com $\Gamma \cong 0$ a equação diferencial se torna de primeira ordem (problema parabólico). Entretanto, testes realizados numericamente mostraram a necessidade da utilização de condições de contorno nas fronteiras de saída do fluido. Esta particularidade condiz com a “condição de difusividade” estabelecida ao se aplicar o método difusional.

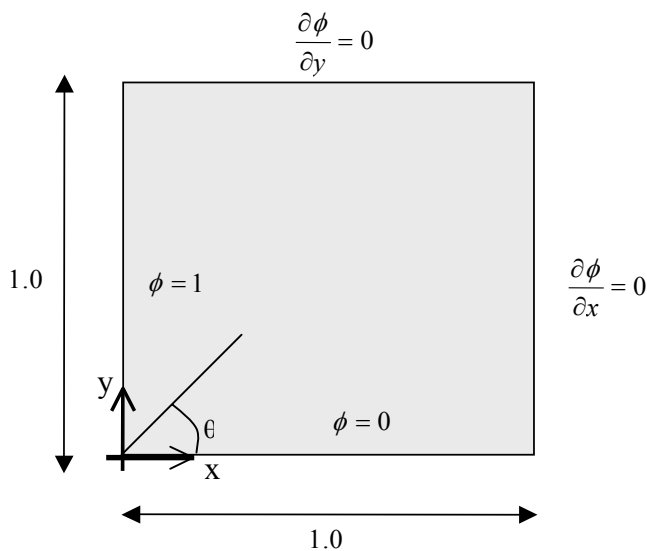


Figura 3.1 – Domínio do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente.

A equação diferencial para este problema é:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial x} + v \frac{\partial\phi}{\partial y} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \Gamma_x \frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_y \frac{\partial\phi}{\partial y} \right] + Q = 0 \quad (3.1)$$

onde, $\Gamma_x \rightarrow 0$ e $\Gamma_y \rightarrow 0$, e a região definida como:

$$0 \leq x \leq 1 \text{ e } 0 \leq y \leq 1 \quad (3.2)$$

O campo de velocidade é especificado analiticamente como:

$$u = V \cdot \cos \theta \quad e \quad v = V \cdot \sin \theta \quad (3.3)$$

onde V é o vetor velocidade e θ é o ângulo de inclinação do vetor velocidade em relação ao eixo de coordenadas x .

As condições de contorno são:

- Para $y = 0$, $0 \leq x \leq 1$ temos: $\phi = 0$;
- Para $x = 0$, $0 \leq y \leq 1$ temos: $\phi = 1$;

A região do escoamento foi discretizada utilizando elementos quadriláteros lineares. A malha gerada é regular, com elementos de mesma dimensão.

Utilizou-se o método difusional aplicado a volumes finitos, utilizando-se o programa CONDUCT MODIFICADO.

3.1.1 Aplicando o método difusional para o problema de falsa difusão

3.1.1.1 Escoamentos paralelos aos eixos de coordenadas

Inicialmente, foram realizados testes simulando situações nas quais o campo de velocidade é fixado perpendicular a uma das fronteiras do domínio. Ao se considerar o campo de velocidade paralelo a um dos eixos de coordenadas, fica implícito que uma das componentes da velocidade será igual a zero, o que torna o escoamento unidimensional, situação que já foi testada para problemas unidimensionais apresentando excelentes resultados (Fortes, 1997).

Nas figuras 3.2 e 3.3, o campo de velocidade está fixado paralelo ao eixo x ($\theta = 0^\circ$). Desta forma, o valor de ϕ na fronteira pela qual o fluxo entra no domínio é igual a 1 (um). Nas figuras 3.4 e 3.5, o campo de velocidade é fixado paralelo ao eixo y ($\theta = 90^\circ$). Desta vez, o valor de ϕ na fronteira pela qual o fluxo entra no domínio é igual a 0 (zero).

Assim, nestes testes iniciais, como o campo de velocidade está alinhado com a malha espera-se que não ocorra difusão numérica (“falsa difusão”) devido à geometria. O valor de Pe na direção do escoamento para estes dois casos ($Pe = 10^6$) determina uma condição puramente convectiva.

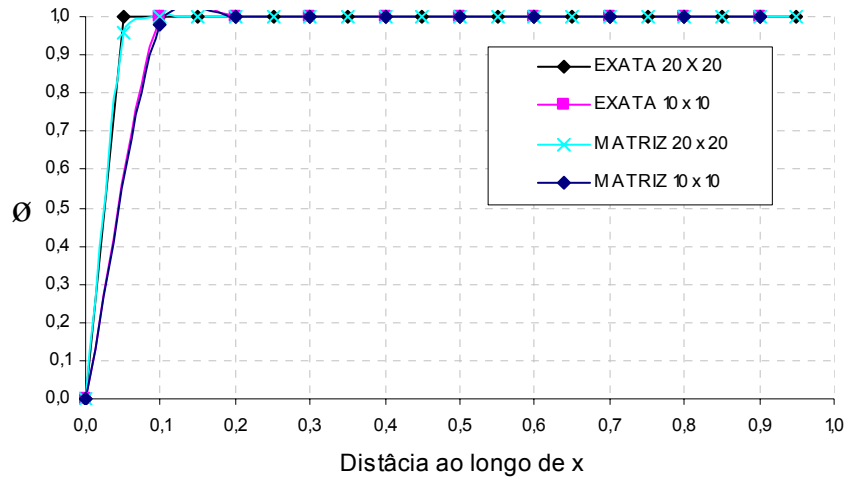


Figura 3.2 – Campo de velocidades paralelo a x ($\theta = 0^\circ$).

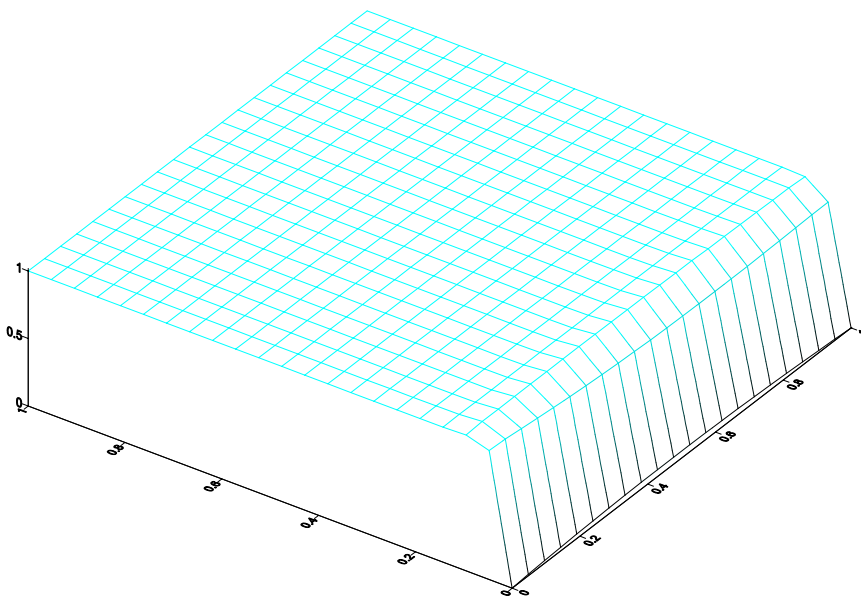


Figura 3.3 – Campo de velocidades paralelo a x ($\theta = 0^\circ$).

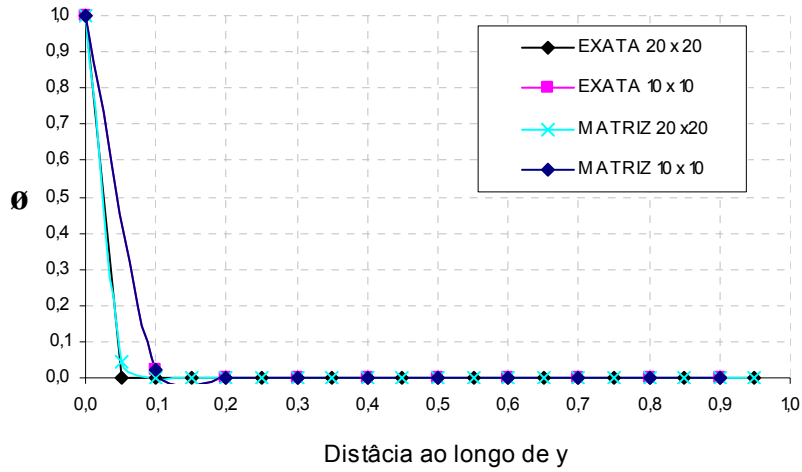


Figura 3.4 – Campo de velocidades paralelo a y ($\theta = 90^\circ$).

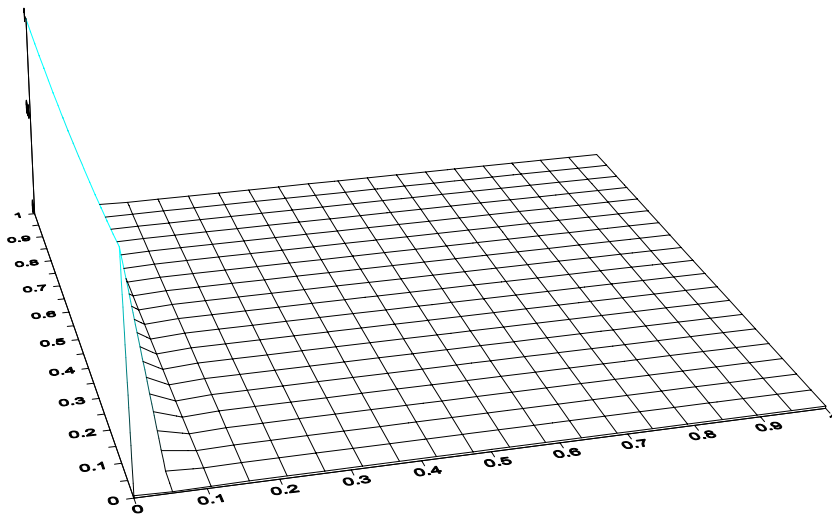


Figura 3.5 – Campo de velocidades paralelo a y ($\theta = 90^\circ$).

Das figuras acima podem-se tirar as seguintes conclusões:

- Os resultados coincidem com a solução exata, independente do refinamento das malhas. Tais resultados permitiram a calibração do programa, auxiliando na verificação de erros na discretização ou computacionais.

- A condição de contorno se propaga por todo o domínio, pois o fluxo de entrada é igual ao fluxo de saída, o que demonstra a conservação da propriedade transportada;
- O valor da propriedade transportada por todo o domínio não ultrapassa os valores das fronteiras. Tendo em vista que não foi considerada a existência de fontes no interior do domínio, o comportamento descrito mostra a estabilidade do modelo utilizado.

3.1.1.2 Transporte convectivo dominante, variando o ângulo de inclinação

Ângulo θ de 45°

O segundo teste tem por objetivo avaliar o comportamento do método difusional em relação a um problema com características convectivo dominante ($Pe \rightarrow +\infty$), sem difusão física ($\Gamma \cong 0$). Aplicando-se um escoamento em que as linhas de corrente passam pelos pontos nodais ($\theta = 45^\circ$), e uma malha regular com espaçamento iguais e constantes nas direções x e y , podemos avaliar a falsa difusão ao aplicarmos o método difusional.

Os testes foram realizados, com refinamentos sucessivos das malhas, visando avaliar a evolução dos resultados à medida que se incrementava o refinamento. As configurações utilizadas para as malhas foram de 10×10 , 20×20 , 50×50 , 80×80 , 100×100 , 110×110 e 124×124 .

As curvas representadas na figura 3.6 mostram a redução da falsa difusão à medida que se utilizam malhas com maiores refinamentos. Assim, é evidente a tendência de se obter soluções cada vez mais próximas da exata quando se incrementa o refinamento. Esta característica demonstra a consistência entre as equações diferenciais e as equações discretizadas (Hoffman, 1992).

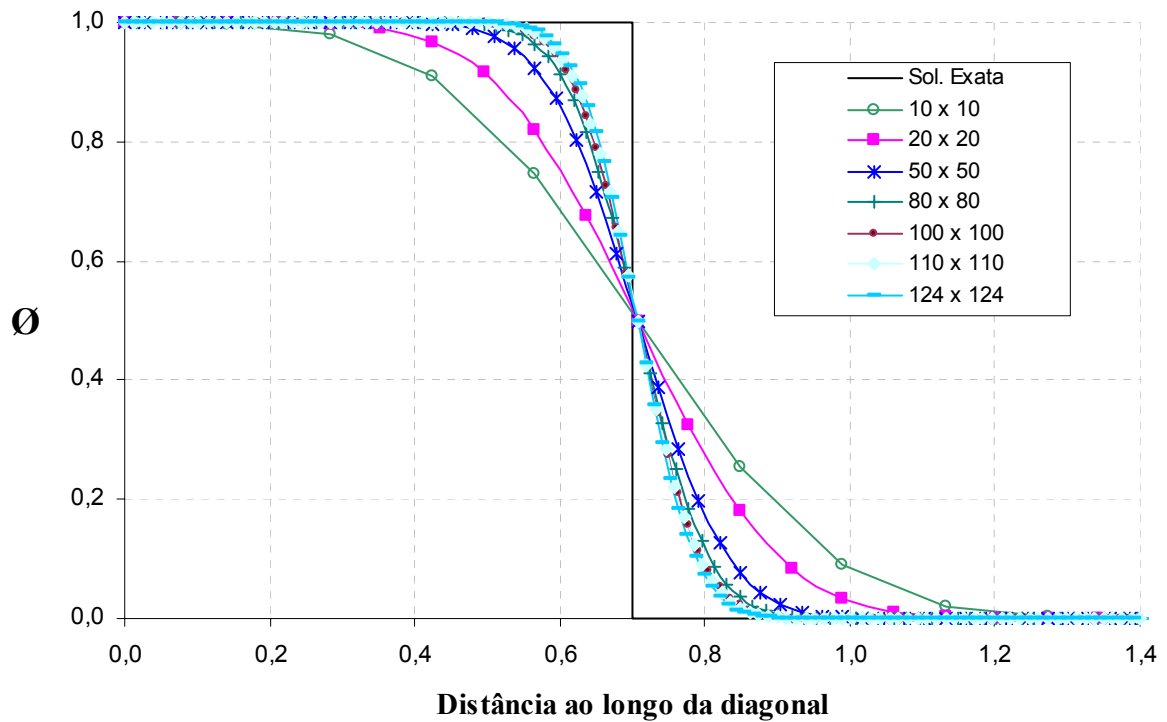


Figura 3.6 – Resultados obtidos para o problema de transporte convectivo dominante com campo de velocidade inclinado de 45°.

Barreto (2004) realizou um teste comparativo entre as aplicações do método difusional e um esquema *upwind* para solução da equação de transporte utilizando a técnica de volumes finitos (VF), obtidos por Versteeg & Malalasekera (1995), para uma condição convectivo dominante ($Pe \rightarrow +\infty$).

Na figura 3.7, as curvas coloridas são os resultados obtidos pela aplicação do método difusional ao longo da diagonal secundária, por este trabalho e por Barreto (2004), e as curvas em preto indicadas pelas setas representam os resultados obtidos por Versteeg & Malalasekera (1995).

Comparando-se estes resultados verifica-se que, ao se aplicar o método difusional à equação de convecção-difusão juntamente com a técnica de volumes finitos, obtêm-se resultados muito semelhantes aos encontrados por Versteeg & Malalasekera, quando estes aplicaram à equação de convecção-difusão na forma clássica, o método de volumes finitos aliado ao esquema *upwind*. Portanto, ao se aplicar o método difusional para solução de problemas de transporte, estamos “naturalmente” implantando uma condição *upwind* à

solução (Barreto 2004). No entanto, o método difusional é mais recomendado pois conserva as propriedades físicas da equação de convecção difusão, por ser um método natural que não faz adaptações às equações de convecção- difusão.

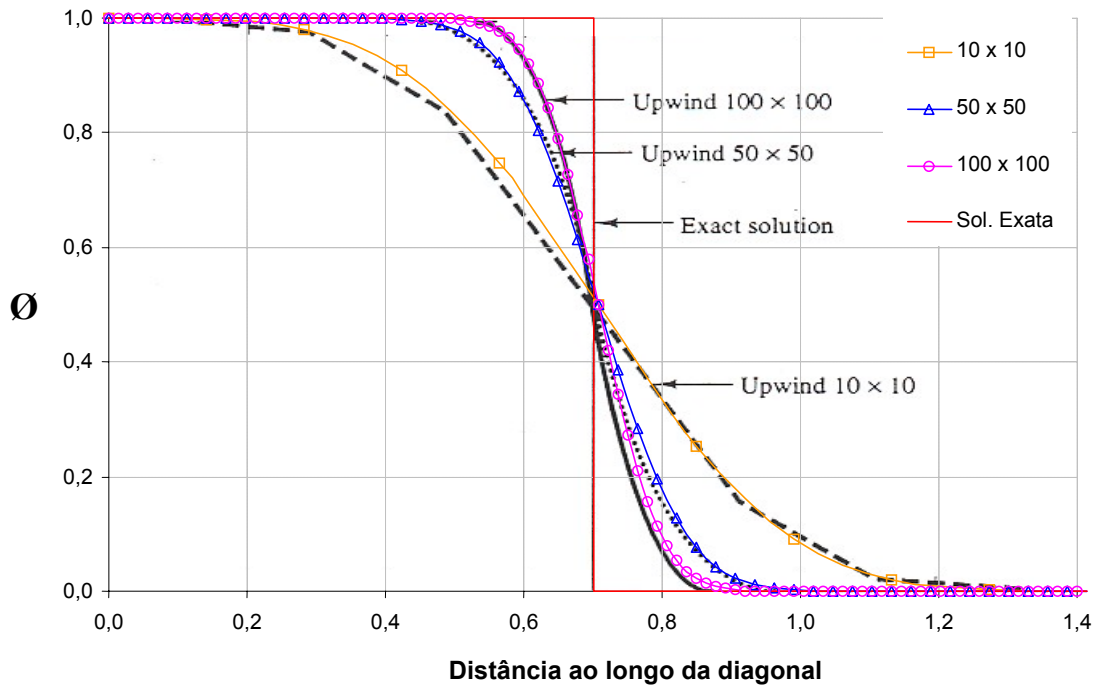


Figura 3.7 – Resultados obtidos para o problema convectivo dominante com campo de velocidades inclinado de 45° , aplicando-se volumes finitos juntamente com a técnica *upwind* (preto) e aplicando-se o método difusional (colorido).

FONTE: VERSTEEG & MALALASEKERA, (1995) (preto); BARRETO (2004) e este trabalho (colorido).

Ângulo θ de $22,5^\circ$ e $67,5^\circ$

Outro teste, considerando um processo convectivo dominante ($Pe \rightarrow +\infty$) sem difusão física ($\Gamma \cong 0$), foi realizado com o objetivo de avaliar a difusão quando se varia o ângulo formado entre a direção do escoamento e a malha utilizada.

Para o ângulo de 45° as linhas de corrente estarão coincidentes com os nós quando se utiliza uma malha regular. Assim, para investigar outras situações onde os nós não são alinhados com as linhas de corrente foram simulados escoamentos com ângulos de $22,5^\circ$ e $67,5^\circ$.

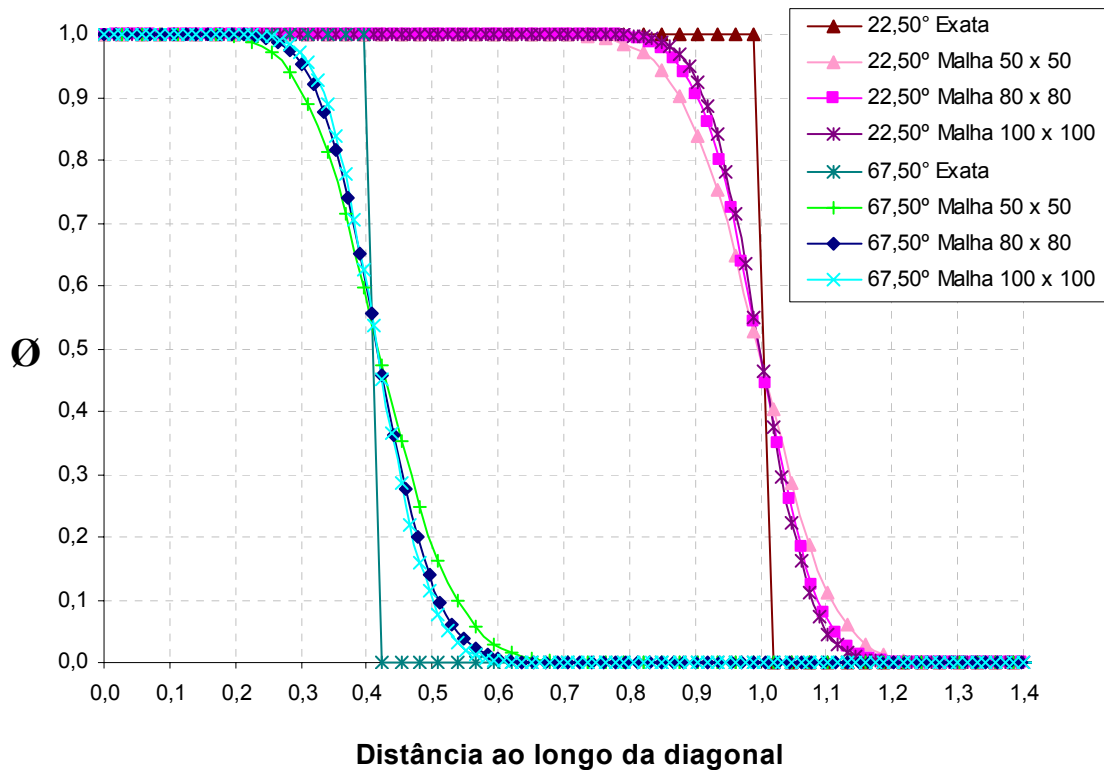


Figura 3.8 – Resultados obtidos para o problema convectivos dominantes com campo de velocidades inclinado de 22,5° e 67,5°.

Analisando-se os resultados obtidos na figura 3.8, com os diferentes refinamentos de malha, 50 x 50, 80 x 80 e 100 x 100, observa-se novamente que, à medida em que se incrementa o refinamento das malhas, o resultado caminha para a solução exata, caracterizando-se uma redução da falsa difusão.

Comparação entre o método difusional e o esquema direcional aplicado ao método difusional

O esquema direcional aplicado ao método difusional, proposto por Barreto (2004), utiliza a direção do vetor velocidade no ponto nodal P para definir um novo sistema de coordenadas, cujo eixo x se posicionará alinhado com a direção do escoamento. Assim realiza-se uma rotação do sistema de coordenadas em torno do ponto P . Esta modificação visa

situar os pontos nodais vizinhos (W , E) exatamente na direção do escoamento, como acontecem em problemas unidimensionais.

A figura 3.9 mostra uma comparação entre o método direcional e o esquema direcional aplicado ao método difusional.

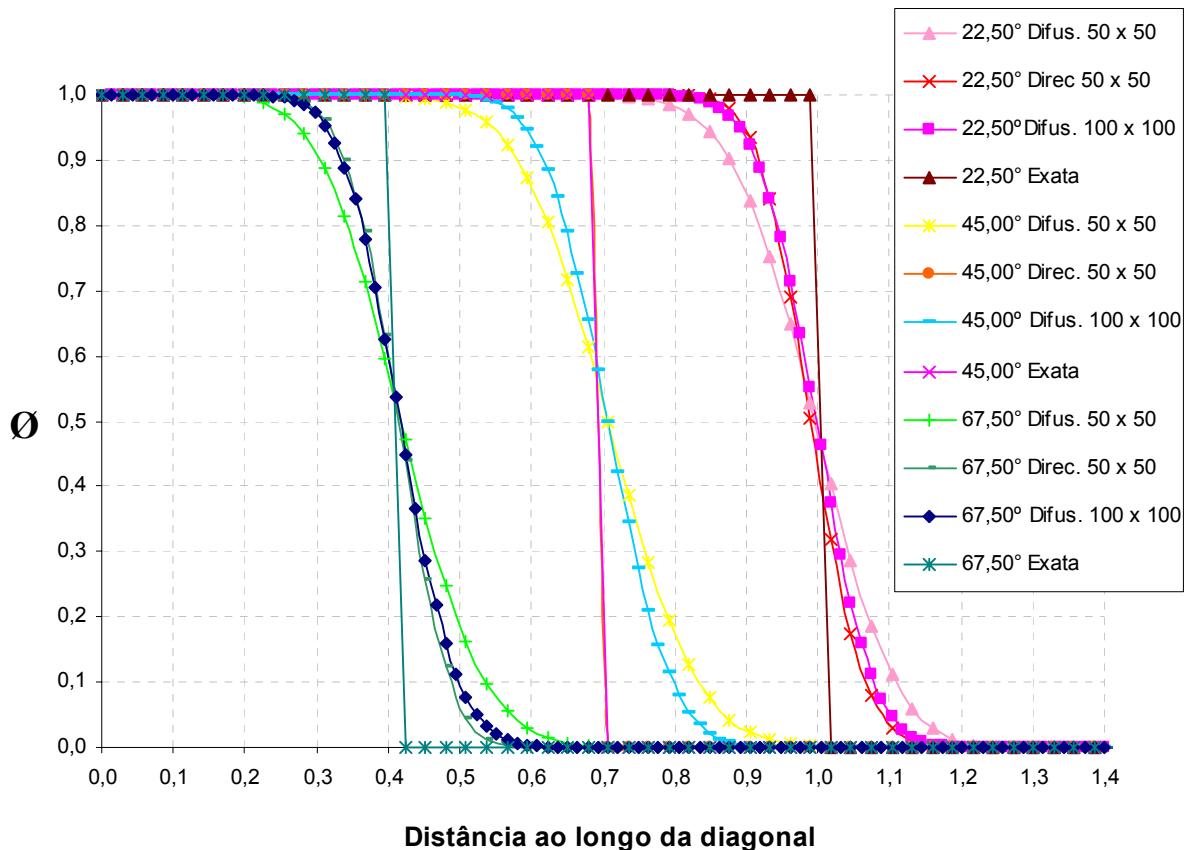


Figura 3.9 – Comparação entre os métodos difusional, direcional e solução exata.

Observando os resultados apresentados na figuras 3.9 quando o ângulo é igual a 45° o esquema direcional apresenta uma solução exata, pois o mesmo possui a malha exatamente alinhada com o fluxo, portanto, não apresenta difusão numérica. Para os ângulos de, $22,5^\circ$ e $67,5^\circ$ o esquema direcional perde acurácia proporcionando resultados com difusão numérica e bem menos acurados em relação ao método difusional.

Percebe-se claramente que à medida em que ocorre uma diminuição da difusão numérica com o aumento do refinamento para qualquer ângulo entre o escoamento e a malha.

Com o aumento do refinamento pode-se evitar a aplicação de métodos do tipo solução upwind, linha de corrente e direcional, aplicando-se apenas o método difusional.

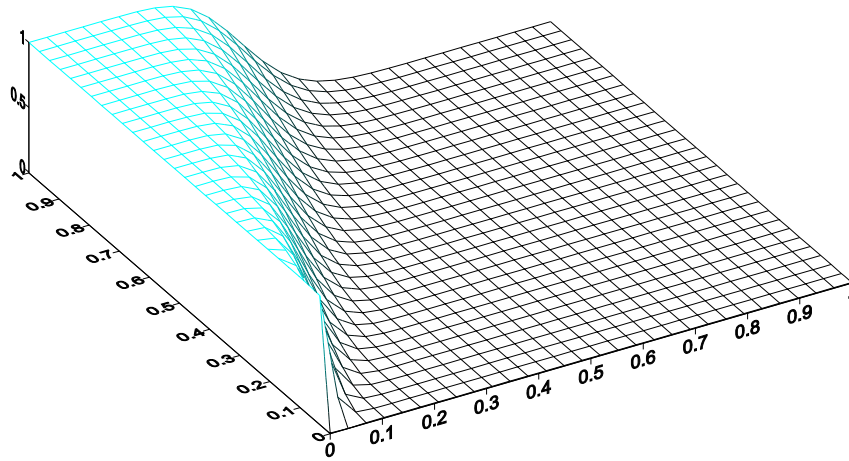


Figura 3.10 – Representação espacial da solução do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente aplicando-se o método difusional. Foi utilizada uma malha de 100×100 , P_e de 10^6 e com a orientação do escoamento em relação à x igual a $67,5^\circ$.

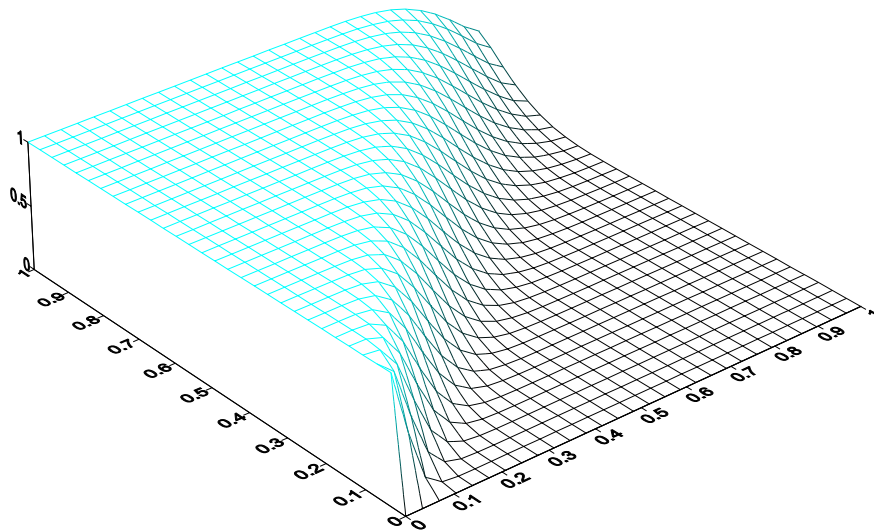


Figura 3.11 – Representação espacial da solução do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente aplicando-se o método difusional. Foi utilizada uma malha de 100×100 , P_e de 10^6 e com a orientação do escoamento em relação à x igual a 45° .

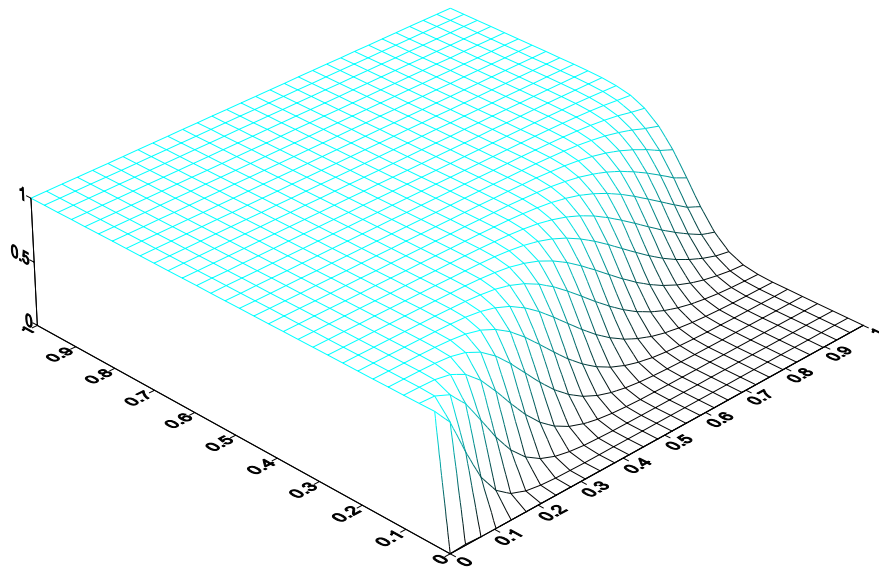


Figura 3.12 – Representação espacial da solução do problema de convecção pura ao longo da linha de corrente aplicando-se o método difusional. Foi utilizada uma malha de 100×100 , Pe de 10^6 e com a orientação do escoamento em relação à x igual a $22,5^\circ$.

Nas figuras 3.10, 3.11 e 3.12 estão representados os resultados ao longo do domínio para $Pe = 10^6$ obtidos com uma malha de 100×100 sendo os ângulos utilizados entre o campo de escoamento e o eixo horizontal respectivamente de $22,5^\circ$, $45,0^\circ$ e $67,5^\circ$.

A aplicação formulação difusional por meio do esquema CONDUCT MODIFICADO, não apresentou oscilações para os diversos testes, gerando resultados cada vez mais acurados em relação à solução exata à medida em que se refinava a malha e satisfaz o critério de convergência rapidamente e com número de iterações variando muito pouco a medida em que se refinava a malha, conforme mostrado na tabela 3.2.

O CONDUCT MODIFICADO, mostrou-se bastante competitivo em relação às técnicas numéricas de solução de problemas convectivos difusivos existentes na literatura. A comparação com esquemas tipo upwind, os resultados são praticamente iguais, figura 3.7. Em relação ao esquema direcional, o CONDUCT MODIFICADO apresentou soluções similares desde que houvesse um maior refinamento de malha figura 3.9.

À medida em que se varia o ângulo de inclinação θ , a difusão numérica varia conforme a tabela 3.1.

TABELA 3.1
Dados relativos à difusão numérica

Malha	Ângulo	Desvios em relação a solução exata	Percentual de redução da difusão a medida em que se muda o ângulo	
			45,00°	67,50°
20 x 20	22,50°	11,363%	8,79%	0,04%
	45,00°	12,459%	---	8,82%
	67,50°	11,359%	---	---
50 x 50	22,50°	7,169%	9,70%	0,00%
	45,00°	7,939%	---	9,70%
	67,50°	7,169%	---	---
100 x 100	22,50°	5,090%	9,60%	2,11 %
	45,00°	5,630%	---	7,63 %
	67,50°	5,200%	---	---

TABELA 3.2
Relação entre refinamento da malha e número de iterações

Ângulo	Malha	Número de Iterações
22,5°	60 x 60	9
	80 x 80	6
	100 x 100	6
45°	60 x 60	9
	80 x 80	7
	100 x 100	7
	120 x 120	8
	124 x 124	9
67,5°	60 x 60	10
	80 x 80	7
	100 x 100	7

3.2 - Problema proposto por Smith & Hutton (1982)

Este problema foi elaborado a pedido da IAHR (*International Association for Hydraulic Research*) com a finalidade de avaliar o comportamento de modelos numéricos no tratamento de problemas convectivo difusivos (Smith & Hutton, 1982). Este teste exhibe características comumente encontradas na prática em problemas que envolvam convecção-difusão, tais como: linhas de correntes curvas com acentuado grau de curvatura (uma característica geral de recirculação) e variação acentuada da variável transportada em uma pequena distância (possivelmente como consequência da presença de fontes ou a mistura de duas correntes fluidas com diferentes concentrações). Uma importante característica ausente é a presença da camada limite fina. O problema foi resolvido por diversos grupos de pesquisa utilizando diferentes técnicas, conforme mostrado em Smith & Hutton (1982).

A equação diferencial para este problema é dada por:

$$\mathbf{u} \cdot \text{grad } \phi - \frac{1}{Pe} \nabla^2 \phi = 0 \quad (3.4)$$

Sendo ϕ a variação de uma propriedade ao longo da linha de corrente, cujo domínio é dado por uma região retangular ($-1 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq 1$) e o campo de velocidade é conhecido, define-se:

$$u = 2y \cdot (1 - x^2) \quad (3.5)$$

$$v = -2x \cdot (1 - y^2) \quad (3.6)$$

onde u e v são os campos de velocidade ao longo das direções coordenadas x e y . A representação de um diagrama esquemático mostrando as principais características do problema é apresentada na figura 3.13.

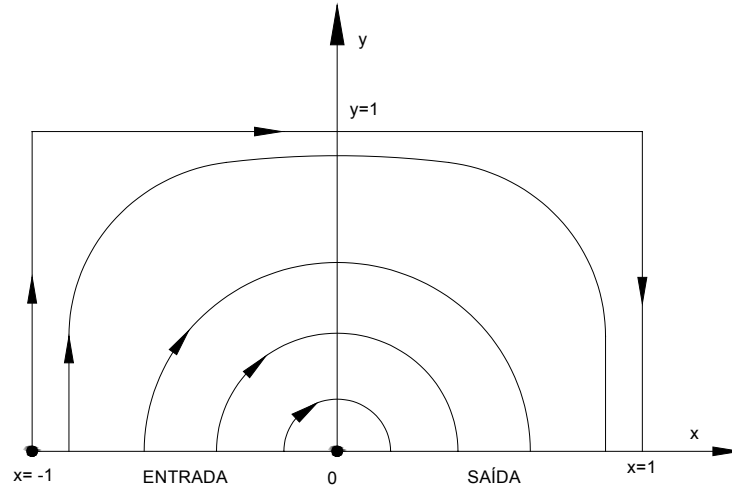


Figura 3.13 – Especificações geométricas e linhas de correntes para o problema proposto por Smith & Hutton (1982).

FONTE – SMITH & HUTTON, 1982.

Os valores de ϕ ao longo das fronteiras são especificados como sendo:

$$\phi = 1 + \tanh[(2x+1)\alpha] \quad y = 0 \quad -1 \leq x \leq 0 \quad (\text{Entrada do Fluido}) \quad (3.7)$$

$$\phi = 1 - \tanh[\alpha] \quad \begin{cases} x = -1 \rightarrow 0 \leq y \leq 1 \\ y = 1 \rightarrow -1 \leq x \leq 1 \\ x = 1 \rightarrow 0 \leq y \leq 1 \end{cases} \quad (3.8)$$

Para a região da fronteira onde o fluido sai do domínio foi adotada uma condição de contorno derivativa $\partial\phi/\partial y = 0$ e $y = 0$ e $0 \leq x \leq 1$.

Os resultados obtidos neste trabalho foram comparados com os obtidos por Schonauer (1981) para diversos Peclet, os quais foram considerados por Smith & Hutton (1982) como padrão entre os apresentados pelos grupos de pesquisadores, ver tabela 3.3, e com os resultados para o método difusional direcional de Barreto (2004). Foram simuladas situações para diversos para Peclet nos seguintes valores, $Pe = 10^{+6}$, $Pe = 10^{+3}$, $Pe = 100$, $Pe = 10$.

TABELA 3.3
Métodos e refinamentos utilizados na solução do problema de Smith & Hutton

Classificação	Número	Autores/Método	Maior Refinamento
Diferenças finitas (Centradas)	11.2	Lillington	21 x 11
	13.1	Orlandi	40 x 40
Elementos Finitos (Galerkin)	2	Cliffe	65 x 33
	3	Donea et al.	41 x 21
	7	Grandotto	21 x 11
	8	Hickmott et al.	41 x 21
Diferenças finitas + upwind (1ª ordem)	4.3	Elbahar et al / PATANKAR	41 x 21
	11.1	Lillington	21 x 11
	13.3	Orlandi	40 x 40
	14	Priddin	100 x 50
	18.1	Wada et al.	81 x 41
Diferenças finitas + upwind (ordem superior)	19.1	Wikes	100 x 50
	4.4	Elbahar et al / QUICK	41 x 21
	4.5	Elbahar et al / LLUE	41 x 21
	10	Hulme / QUICK	38 x 19
	19.2	Wilkes / LUE	80 x 40
Diferenças finitas + vecto upwind	11.3	Lillington / SUD	21 x 11
	11.4	Lillington / VUD	21 x 11
	11.5	Lillington / VUDCC	21 x 11
Elementos Finitos + upwind	12	Narusawa	21 x 11
Método das características	5	Esposito	41 x 21
	6	Glass & Rodi	41 x 21
	9	Huffenus & Khalitzky	21 x 11
Método analítico finito	1	Chen	81 x 41
Método do Tensor viscosidade	15	Ruel et al.	28 x 14
Método auto-adaptativo	16	Schonauer	52 x 26
Método da transformação da malha	17	Sykes	21 x 11
	18.2	Wada et al.	80 x 40

FONTE – SMITH & HUTTON, 1982.

3.2.1 Análise do perfil de entrada

Na figura 3.14 está representado o perfil de Θ ao longo da fronteira de entrada (fronteira inferior) para quaisquer Peclet. Sabe-se, que à medida em que o número de Peclet cresce, esta característica do perfil de entrada (condição de contorno) deve ser transportada ao longo do domínio até para a fronteira de saída. Assim, a segunda metade desta curva coincide com a condição de contorno na entrada do fluido para uma condição convectivo dominante. Observa-se a incidência de um intenso gradiente para Θ na fronteira de entrada, o que aumenta o grau de dificuldade para a modelagem numérica.

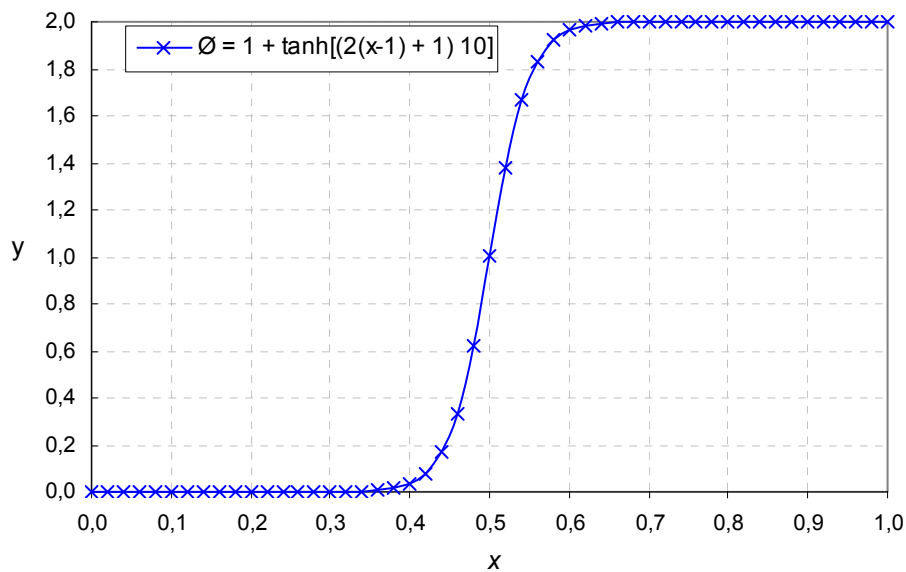


Figura 3.14 – Representação do perfil de entrada.

3.2.2 Transporte convectivo dominante $Pe = 10^{+6}$

O teste para um processo convectivo dominante possui características de Peclet infinito ($Pe = 10^{+6}$) e sem difusão física ($\Gamma \rightarrow 0$). Através de refinamentos sucessivos nas malhas, e avaliou-se a evolução dos resultados em relação a solução exata. As configurações de malhas foram de 20×10 , 60×30 , 100×50 e 160×80 .

A figura 3.15 apresenta os diversos refinamentos de malhas para $Pe = 10^{+6}$. Observa-se que ocorre a redução da difusão numérica à medida em que se refina a malha. Pela tabela 3.4, observa-se que houve uma redução na difusão numérica em relação a solução exata de 74% entre o refinamento da malha de 20×10 para 160×80 . Para uma mesma malha, a difusão numérica em relação a solução exata varia de 31% para uma malha de 20×10 até 8% para uma malha de 160×80 .

TABELA 3.4

Redução da difusão numérica em relação ao refinamento sucessivo das malhas para $Pe = 10^6$

Malha	Desvios em relação a solução exata	Difusão numérica						
		Percentual de redução da difusão						
		20 x 10	40 x 20	60 x 30	80 x 40	100 x 50	120 x 60	160 x 80
20 x 10	31%	---	34%	49%	55%	64%	68%	74%
40 x 20	21%	---	---	23%	33%	45%	52%	61%
60 x 30	16%	---	---	---	13%	29%	38%	49%
80 x 40	14%	---	---	---	---	19%	29%	42%
100 x 50	11%	---	---	---	---	---	13%	29%
120 x 60	10%	---	---	---	---	---	---	18%
160 x 80	8%	---	---	---	---	---	---	---

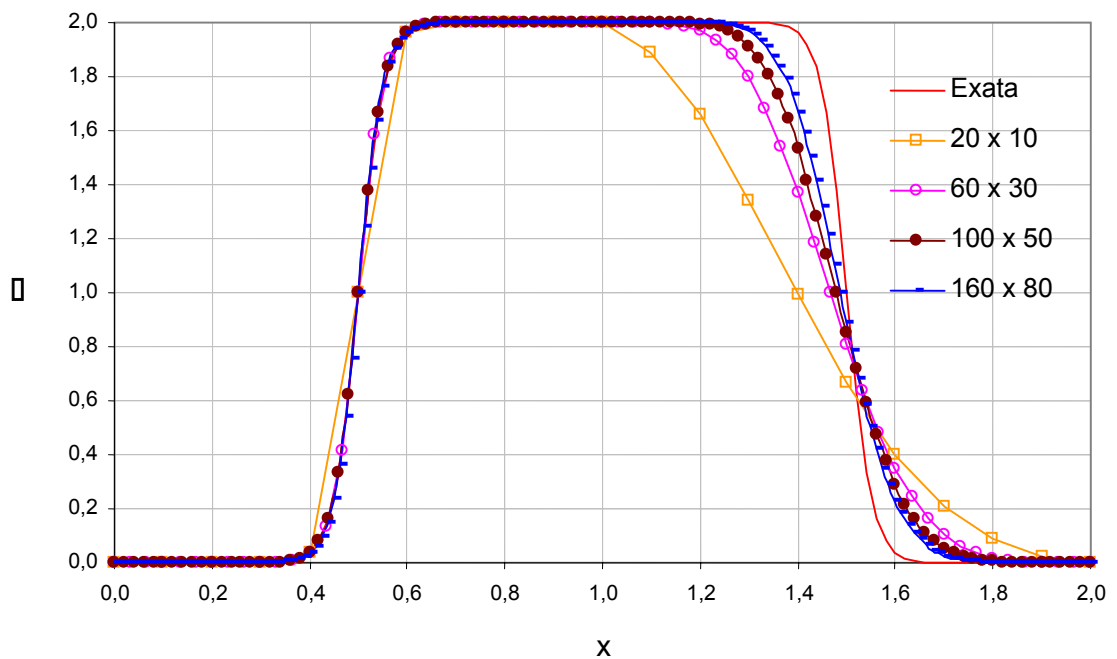


Figura 3.15 – Comportamento do perfil de entrada e saída do problema de Smith & Hutton (1982), utilizando refinamentos sucessivos para $Pe = 10^6$.

Nas figuras 3.16 e 3.17 estão representados os resultados apresentados por Smith & Hutton (1982). Na figura 3.16, os resultados são apresentados para a melhor configuração de malhas para cada método apresentado na tabela 3.3 e na 3.17 para malhas com refinamento 20×10 . O número de Peclet utilizado foi igual a 10^{+6} e os resultados apresentados por Smith & Hutton (1982) foram comparados com a solução exata com o método direcional para uma malha 20×10 e o método difusional para refinamentos 20×10 e 160×80 .

Na figura 3.16 estão representados os melhores resultados entre os apresentados por Smith & Hutton (1982), independentemente do refinamento da malha comparado com o método direcional para malha 20×10 e difusional para refinamentos de malha de 20×10 e 160×80 . Quando se utiliza refinamento de malha de 20×10 , tanto para as metodologias difusional e direcional, ocorre uma grande difusão numérica com soluções não acuradas. À medida em que se refina a malha, para o método difusional a solução se torna mais acurada em relação à solução exata, e se obtém um resultado compatível com o apresentado em Smith & Hutton (1982).

Na figura 3.17 o resultado obtido com a aplicação do método difusional para uma malha 20×10 apresentou bastante semelhança com o obtido por Lillington (11.1) que utilizou o método de diferenças finitas com aproximações de primeira ordem acoplado à técnica a montante (*upwind*), a partir da equação clássica de transporte. Estes resultados foram inferiores aos demais métodos apresentados por Smith & Hutton (1982). O resultado obtido com a aplicação do método direcional apresentou um comportamento distinto de todos os demais representados no gráfico da figura 3.17, apresentando uma qualidade inferior aos demais resultados. Os resultados obtidos com a aplicação do método difusional com malhas de 80×40 e 160×80 apresentaram um desempenho semelhante aos obtidos por Lillington (11.4;11.5) utilizando a técnica vetorial a montante (*vector upwind difference*) e aos obtidos por Elbahar (4.4; 4.5) que trabalharam com o método de diferenças finitas com aproximações de ordem superior aliado à técnica a montante (*upwind*).

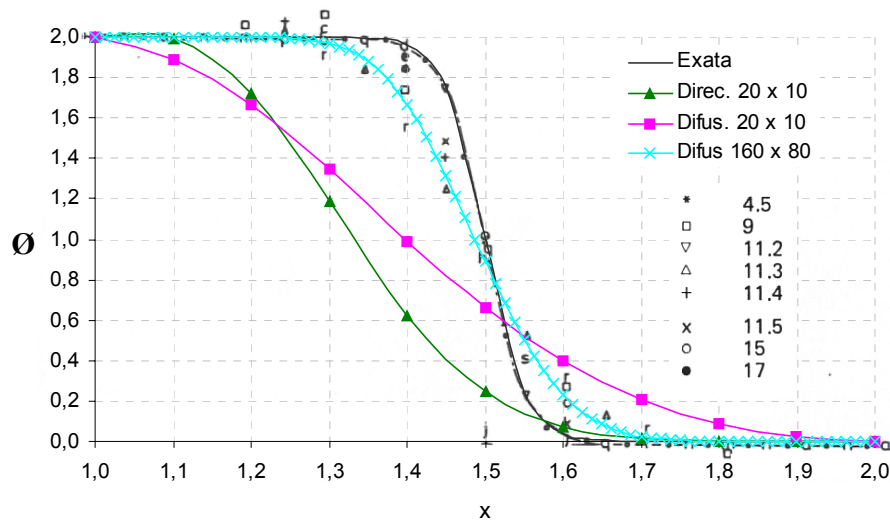


Figura 3.16 – Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10^6$ comparando o método difusional, direcional e solução exata com alguns métodos citados pela tabela 3.3 para um melhor refinamento de malha.

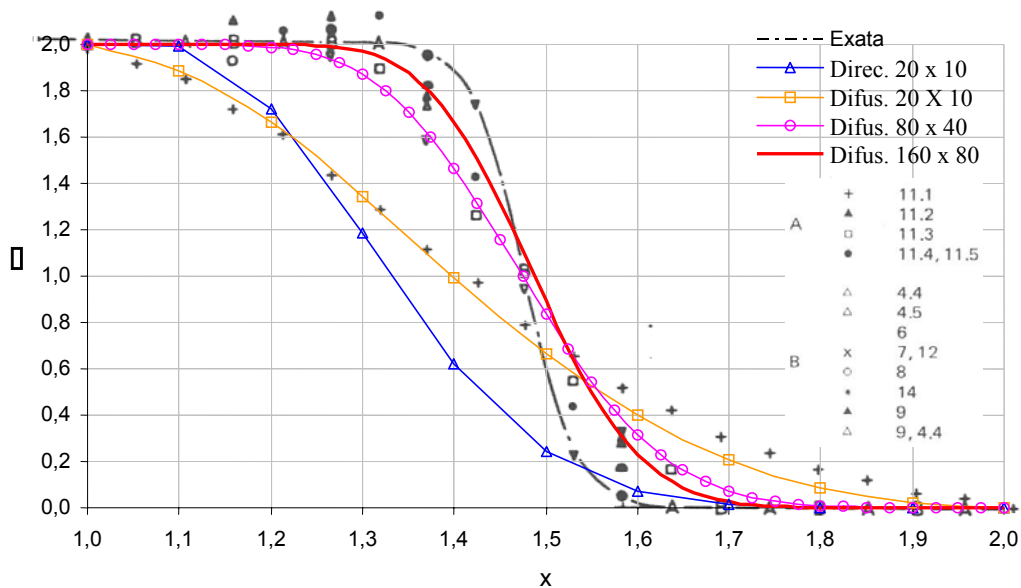


Figura 3.17 – Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10^6$ comparando o método difusional, direcional e solução exata com alguns métodos citados pela tabela 3.3 para malhas 20 x 10.

Nas figuras 3.18 e 3.19, são mostradas as distribuições espaciais representativas das soluções obtidas pelo método difusional, para malhas de 60×30 e 120×60 . No plano está representado o domínio do problema em relação aos eixos x e y e nas linhas curvas estão representadas a propagação da propriedade analisada da condição de entrada por todo o domínio analisado.

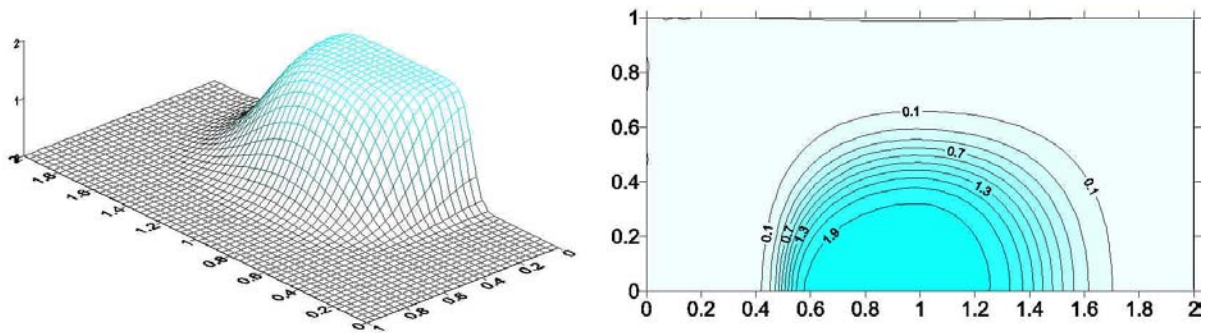


Figura 3.18 – Perfil de solução por todo o domínio para o problema de Smith & Hutton (1982), para $Pe = 10^6$ para uma malha de 60×30 .

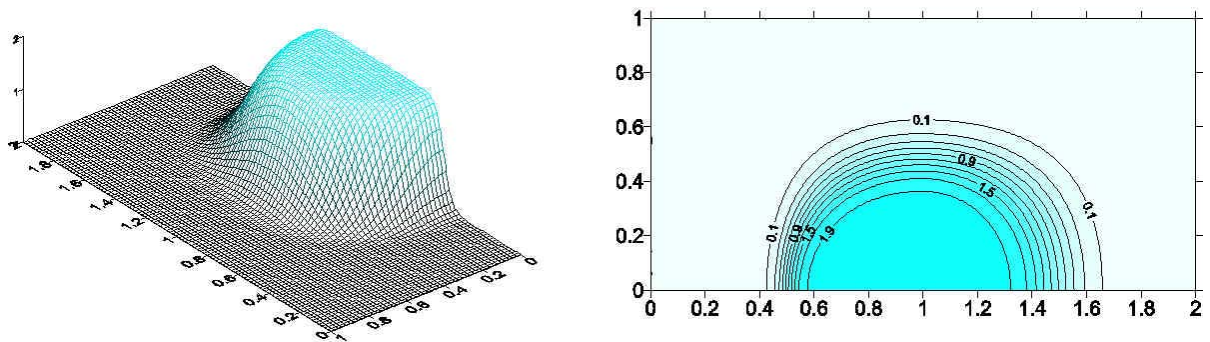


Figura 3.19 – Perfil de solução por todo o domínio para o problema de Smith & Hutton (1982), para $Pe = 10^6$ para uma malha de 120×60 .

Podemos notar que à medida em que o refinamento de malha aumenta o perfil de entrada tende a convergir para o perfil de saída, mostrando a eficácia do método difusional para problemas convectivo dominantes.

3.2.3 Transporte convectivo difusivo $Pe = 10^{+3}$

A solução exata existe somente para problemas de transporte totalmente convectivo ($Pe \rightarrow \infty$), utilizaram-se como parâmetros para aferição de soluções cujo Peclet não é totalmente convectivo, os resultados obtidos por Schonauer (1981), apresentados por Smith & Hutton (1982). Para se obter os resultados Schonauer (1981), utilizou-se um esquema auto-adaptativo. Na tabela 3.5, são mostrados os resultados para diversos valores de Peclet, as malhas utilizadas e tempo computacional gasto em cada caso.

TABELA 3.5

Resultados obtidos por Schonauer para o problema de Smith & Hutton (1982)

x	Peclet			
	1.0E+01	1.0E+02	1.0E+03	1.0E+06
1,00	1,989	2,000	2,000	2,000
1,10	1,402	1,940	1,999	2,000
1,20	1,146	1,836	1,999	2,000
1,30	0,946	1,627	1,985	1,999
1,40	0,775	1,288	1,841	1,964
1,50	0,621	0,869	0,951	1,000
1,60	0,480	0,480	0,154	0,036
1,70	0,349	0,209	0,001	0,001
1,80	0,227	0,070	0,000	0,000
1,90	0,111	0,017	0,000	0,000
2,00	0,000	0,000	0,000	0,000
Malha	42 x 14	50 x 24	52 x 26	50 x 22
CPU (t)	30,5	41,0	152,0	135,0

FONTE – SMITH & HUTTON, 1982 (preto).

Na figura 3.20, estão comparados os resultados obtidos aplicando-se os métodos difusional, direcional, Schonauer, e os melhores resultados obtidos por diversas metodologias apresentadas por Smith & Hutton (1981) descritos na tabela 3.3, aplicados a problemas com o valor de Peclet igual a 1000. Este problema apresenta o comportamento semelhante ao caso convectivo dominante. Os melhores resultados foram obtidos com a aplicação do método de Schonauer e as melhores metodologias descritas na tabela 3.3. Os resultados obtidos com a aplicação do método difusional se assemelharam aos obtidos com o método direcional, para um mesmo refinamento de malha (40 x 20). No entanto, esses resultados demonstraram ser bem inferiores aos demais resultados. Quando o método difusional é aplicado a um maior

refinamento de malha o mesmo tende a se aproximar da solução real e torna-se tão competitivo quanto os demais para solução deste problema.

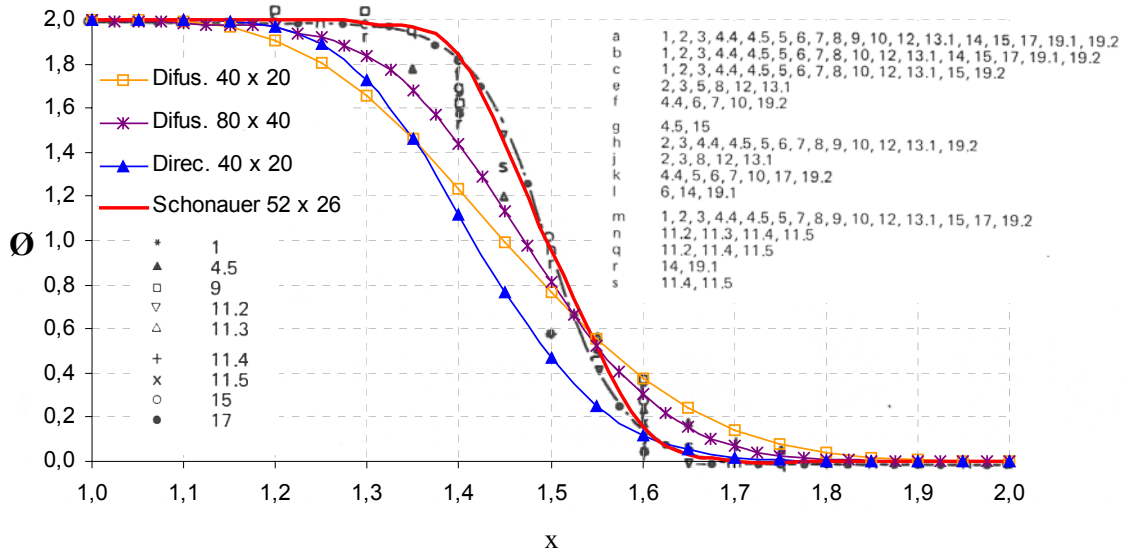


Figura 3.20 – Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10^{+3}$, comparando o método difusional, direcional e solução de Schonauer e os melhores resultados obtidos pelos vários pesquisadores citados na tabela 3.3.

3.2.4 Transporte convectivo difusivo $Pe = 100$

Na figura 3.21, estão comparados os resultados obtidos aplicando-se os métodos difusional, direcional, Schonauer e os melhores resultados obtidos por diversas metodologias apresentadas por Smith & Hutton (1981) descritos na tabela 3.3, aplicados a problemas com o valor de Peclet igual a 100. Este problema apresenta o comportamento de um problema convectivo difusivo. Os resultados das diversas metodologias aplicadas se equivalem, sendo que o método difusional apresenta um melhor resultado que o direcional para um mesmo refinamento de malha.

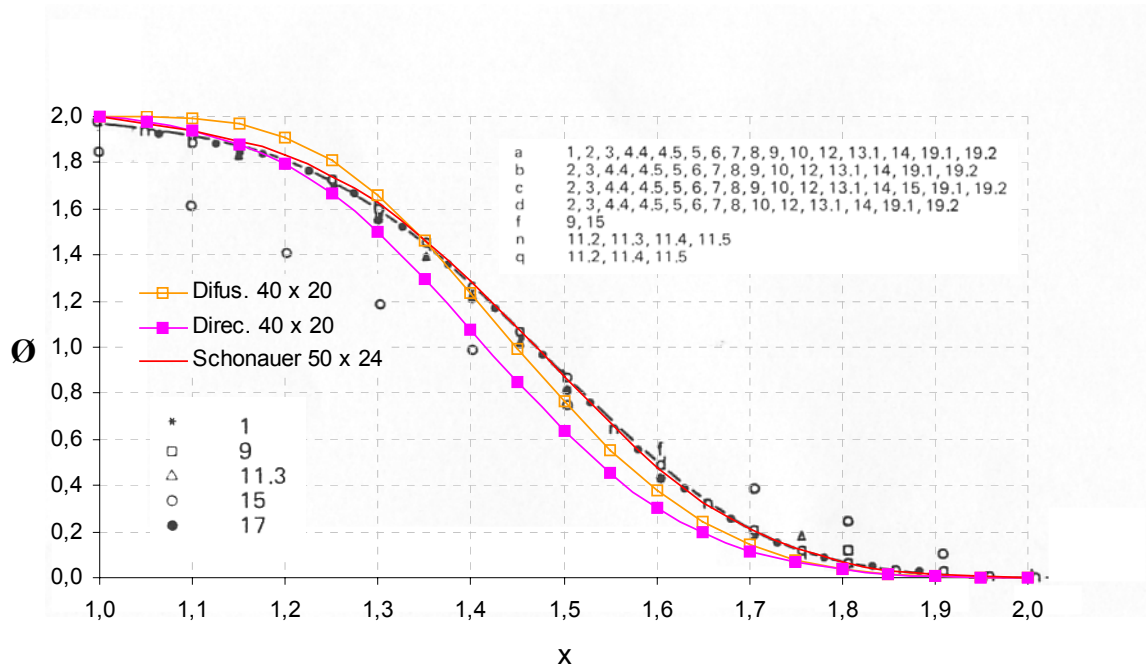


Figura 3.21 – Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 100$ comparando o método difusional, direcional e solução de Schonauer e os melhores resultados obtidos por pesquisadores métodos citados na tabela 3.3.

3.2.5 Transporte convectivo difusivo $Pe = 10$

Na figura 3.22, estão comparados os resultados obtidos aplicando-se os métodos difusional, direcional, Schonauer com os melhores resultados obtidos por diversas metodologias apresentadas por Smith & Hutton (1981) descritos na tabela 3.3, aplicados a problemas com o valor de Peclet igual a 10. Este problema apresenta o comportamento de um problema convectivo difusivo. Os resultados das diversas metodologias aplicadas se equivalem. Para os testes apresentados por Smith & Hutton (1982), uma observação deve ser destacada: entre os pesquisadores que utilizaram método de diferenças finitas (1ª ordem) junto com a técnica *upwind*, somente aparecem os resultados daqueles que utilizaram malhas de 100x50. Os resultados representados para os métodos difusional e direcional representados nesta figura foram obtidos para uma malha de 40x20. Assim, o método difusional apresentou resultados semelhantes aos do método de diferenças finitas com a técnica *upwind* quando da simulação de problemas convectivo dominantes. Entretanto, para problemas com maior

contribuição do termo difusivo, o desempenho do método difusional foi superior. Portanto, baseado na solução de Schonauer, verifica-se que os métodos difusional e difusional com a técnica direcional apresentaram excelentes resultados para problemas com baixos valores de Peclet, ou seja, com características difusivas mais pronunciadas.

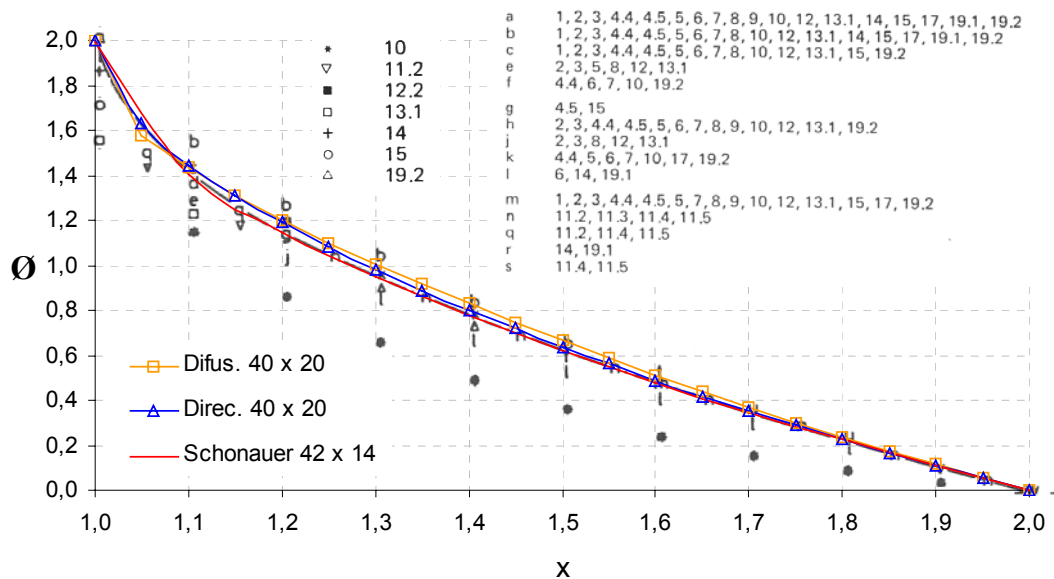


Figura 3.22 – Perfil de saída do problema de Smith & Hutton (1982) (preto), para $Pe = 10$ comparando o método difusional, direcional e solução de Schonauer e os melhores resultados obtidos por pesquisadores métodos citados na tabela 3.3.

Com base nas figuras 3.16 a 3.22, podemos concluir que o CONDUCT MODIFICADO, apresenta soluções competitivas comparados aos resultados da literatura. Sendo para Peclet abaixo de 100, problemas difusivos dominantes a solução tem o mesmo comportamento das soluções existentes na literatura para um mesmo refinamento de malhas. Com Peclet de 1000 e 10^{+6} , problemas convectivos dominantes a solução tem o mesmo comportamento das soluções existentes na literatura, no entanto deve-se fazer um maior refinamento de malhas.

CAPITULO 4. ESCOAMENTO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA

4.1 - O escoamento de água subterrânea

O termo *água subterrânea* é associado à água que ocorre abaixo de um determinado nível em solos e formações geológicas que estão completamente saturados. Esta é a definição clássica, entretanto, estudos sobre *água subterrânea* devem abranger outras situações, tais como, a compreensão dos processos sofridos pela água em um sentido mais amplo que descrevam o comportamento da água abaixo do solo (regiões saturadas e não-saturadas próximas à superfície e regiões mais profundas do terreno) (Freeze e Cherry, 1979). Estes estudos requerem conhecimentos interdisciplinares envolvendo diversas áreas, tais como, química e física, geologia e hidrogeologia, engenharia, etc. A importância destes estudos está relacionada à compreensão de problemas críticos para o meio ambiente e conseqüentemente para a humanidade.

4.2 – Modelamento matemático para o escoamento de água subterrânea

Em quase todos os campos da ciência e engenharia, as técnicas de análise são baseadas no entendimento dos processos físicos, e na maioria dos casos é possível descrever esses processos matematicamente. Escoamento de água subterrânea não é uma exceção. A lei básica de Darcy, quando colocada juntamente com a equação de continuidade que descreve a conservação de massa do fluido durante o escoamento em um meio poroso, resultando uma equação diferencial parcial deste fluxo para:

- Fluxo permanente em um meio saturado;
- Fluxo transiente em um meio saturado;
- Fluxo transiente em um meio não saturado;

O estudo do transporte de solutos durante o escoamento de um fluido em um meio poroso envolve a compreensão de um conjunto de processos que atuam simultaneamente: advecção (convecção), dispersão, fonte / sorvedouros e reações químicas.

Desenvolvimento das equações para fluxo em um meio saturado

O desenvolvimento das equações de escoamento teve como base a lei de conservação de massa aplicada ao volume de controle mostrado na Figura 4.1, para um fluxo permanente, através de um meio poroso saturado. Isso implica que a taxa de massa de fluido que entra no volume de controle seja igual a que sai.

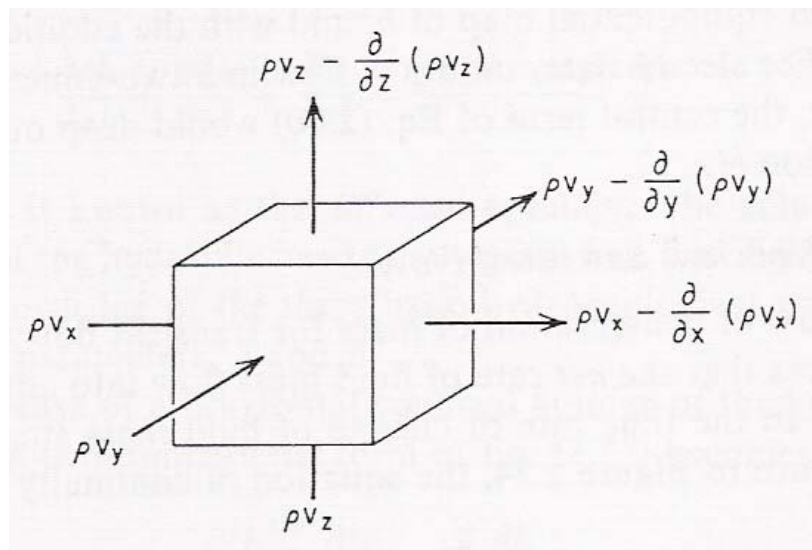


Figura 4.1 - Volume de controle para o escoamento em um meio poroso.

Aplicando a lei da conservação de massa ao volume de controle (VC), apresentado na figura 4.1, obteremos:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Massa que} \\ \text{entra no V.C.} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Massa que} \\ \text{sai do V.C.} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Massa} \\ \text{Gerada} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de variação da massa} \\ \text{fluida no V.C.} \end{array} \right]$$

$$-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} + \rho q_s = \frac{\partial(\rho n)}{\partial t} \quad (4.01)$$

os termos negativos do lado esquerdo representam a taxa líquida de massa de água que atravessa as fronteiras do VC. O último termo do lado esquerdo representa a vazão mássica de água por unidade de volume devido às fontes quando positivo, ou sorvedouros quando negativo. q_s é o fluxo volumétrico de água por unidade de volume. O termo do lado direito é a taxa de variação de massa fluida armazenada no interior deste VC.

Expandindo o lado direito da equação (4.01):

$$-\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} = n \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial n}{\partial t} \quad (4.02)$$

O primeiro termo do lado direito representa a variação do volume de água presente nos poros devido à expansão volumétrica desta água, representada pela variação de sua densidade (ρ). O segundo termo representa a variação do volume de água presente nos poros devido à compactação do meio poroso, representado pela variação da porosidade deste meio (n). Lembrando que a variação de volume de água é controlada pelo coeficiente de expansão volumétrica da água (β) e que a variação de volume do meio é controlada pelo coeficiente de compressibilidade do meio poroso (α). Uma variação na densidade (ρ), e na porosidade (n), produzem alterações na carga hidráulica (h). O volume de água produzido pela variação de uma unidade de h é denominado de armazenamento específico (S_s), que é definido por:

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta) \quad (4.03)$$

Sendo a taxa de variação de massa de água (mudança de armazenagem do fluido com o tempo) definida por $\rho S_s \partial h / \partial t$ portanto a equação 4.01 torna-se:

$$-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} + \rho q_s = \rho S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (4.04)$$

Expandido os termos do lado esquerdo da equação 4.04 temos:

$$-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = -\rho \frac{\partial v_x}{\partial x} - v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} - \rho \frac{\partial v_y}{\partial y} - v_y \frac{\partial \rho}{\partial y} - \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} - v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \quad (4.05)$$

Considerando que as variações das *descargas específicas* ($\rho \partial v_x / \partial x$; $\rho \partial v_y / \partial y$; $\rho \partial v_z / \partial z$) são muito maiores do que as variações da densidade ($v_x \partial \rho / \partial x$, $v_y \partial \rho / \partial y$, $v_z \partial \rho / \partial z$), o que nos permite desprezar os termos da variação de densidade, simplificando a expressão anterior temos:

$$-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = -\rho \frac{\partial v_x}{\partial x} - \rho \frac{\partial v_y}{\partial y} - \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (4.06)$$

Substituindo a relação acima na equação 4.04, tem-se:

$$-\rho \frac{\partial v_x}{\partial x} - \rho \frac{\partial v_y}{\partial y} - \rho \frac{\partial v_z}{\partial z} + \rho q_s = \rho S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

Finalmente, simplificando o termo de densidade e substituindo as descargas específicas pela lei de Darcy, obteremos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (4.07)$$

Esta é a equação para o escoamento transiente de um fluido através de um meio poroso anisotrópico saturado. Se o meio for homogêneo e isotrópico ($K_x = K_y = K_z = K$) e não houver fontes ou sorvedouros, a equação (4.07) torna-se:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S_s}{K} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (4.08)$$

Se, além disto, o escoamento for considerado permanente (*steady state*) não haverá variação da carga hidráulica com o tempo, portanto a equação 4.08 torna-se:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (4.09)$$

A equação 4.09, é a equação diferencial parcial de Laplace.

A solução da equação 4.08 [$h(x, y, z, t)$], descreve os valores de carga hidráulica em qualquer ponto do escoamento a qualquer instante. Para sua solução necessita-se conhecer os parâmetros relacionados com o meio poroso (K , α e n) e os parâmetros relacionados com o fluido (ρ e β).

4.3 Transporte de poluentes em meios porosos saturados

O estudo de problemas de transporte de solutos durante o escoamento de um fluido em um meio poroso envolve a compreensão de um conjunto de processos que atuam simultaneamente. Os principais são os fenômenos de advecção (convecção), dispersão hidrodinâmica, fontes/sorvedouros e reações químicas que serão mais bem explicados a seguir.

Advecção

A advecção é o processo que representa o transporte dos solutos promovido pelo movimento do fluido. É representado por meio da velocidade linear média do fluido (velocidade média de infiltração) definida por:

$$\bar{v}_i = \frac{Q_i}{nA} = \frac{v_i}{n} = \frac{K_i}{n} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (4.10)$$

onde Q_i a vazão volumétrica de água escoando através de uma área A do aquífero, v_i é a descarga específica, n é a porosidade já que o aquífero é considerado saturado, K_i é a condutividade hidráulica e h é a carga hidráulica.

Na equação de transporte de contaminantes o termo de advecção é definido por:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{v}_i C) \quad (4.11)$$

sendo C a concentração de contaminantes dissolvidos na água. O termo descrito na equação acima, descreve o transporte de contaminantes dissolvidos na água, quando este se desloca com a mesma velocidade da água. Em diversos problemas práticos relacionados com o transporte de contaminantes o termo de advecção torna-se predominante. Uma forma de avaliar o grau de domínio da advecção é a utilização do número de Peclet (adimensional), que é definido por:

$$Pe = \frac{|\bar{v}|L}{D} \quad (4.12)$$

sendo L um comprimento característico e D o coeficiente de dispersão. Em problemas dominados pela advecção o número de Peclet será alto, e em problemas puramente advectivos o número de Peclet será infinito.

Dois tipos de erros numéricos ocorrem frequentemente quando se tenta resolver problemas dominados pela convecção através da aplicação de técnicas numéricas. O primeiro tipo é conhecido como dispersão numérica pois tem um efeito similar ao da dispersão física, mas é causado por erros de truncamento. Esta “falsa dispersão” leva a alteração da aparência de frentes de concentração. O segundo tipo de problema numérico é denominado de oscilações numéricas, caracterizadas pelo aparecimento de alterações de resultados surgindo valores fora dos limites esperados.

Dispersão Hidrodinâmica

O fenômeno conhecido como dispersão hidrodinâmica ocorre simultaneamente ao processo de advecção. Este fenômeno é caracterizado pelo espalhamento do soluto em torno do caminho percorrido durante o escoamento. A dispersão hidrodinâmica origina-se devido a dois mecanismos:

- a) dispersão mecânica – ocorre uma mistura mecânica das partículas (fluidos + soluto) devido ao movimento diferenciado destas partículas.
- b) difusão molecular – este processo é importante quando o escoamento ocorre à baixa velocidade e quando existem gradientes intensos de concentração de solutos.

A figura 4.2 apresenta um exemplo de um processo de dispersão em um meio poroso homogêneo devido a uma fonte contínua.

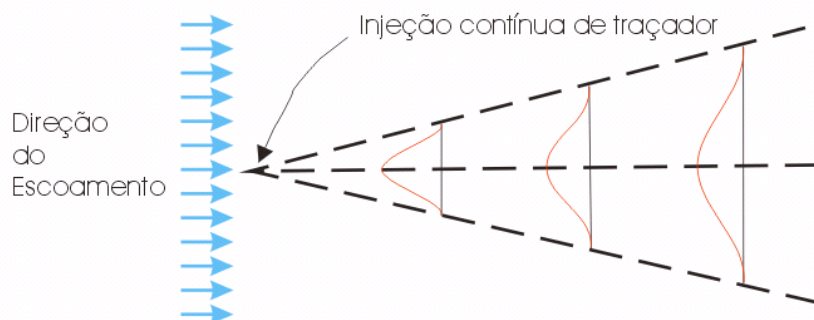


Figura 4.2 – Processo de diluição por dispersão mecânica em um meio poroso.

FONTE - FREEZE e CHERRY, 1979.

A figura 4.3 apresenta uma representação esquemática em escala microscópica dos mecanismos que provocam a dispersão mecânica. O primeiro esboço apresenta a formação de um perfil de velocidade em um canal (poros). Este perfil significa que partículas próximas ao centro do canal escoam com velocidade maiores, assim partículas de solutos transportadas pelo centro do canal viajam distâncias maiores do que as partículas próximas às paredes dos poros, promovendo um espalhamento do soluto. O segundo esboço evidencia as alterações no escoamento devido às diferenças dos tamanhos dos poros que podem apresentar diferentes áreas superficiais e diferentes rugosidades relativas. O terceiro esboço apresenta uma representação de um processo de difusão molecular. O espalhamento do soluto na direção principal do escoamento é denominado dispersão longitudinal. O espalhamento nas direções perpendiculares à direção principal é denominado dispersão transversal. Em geral, a dispersão longitudinal é superior à dispersão transversal.

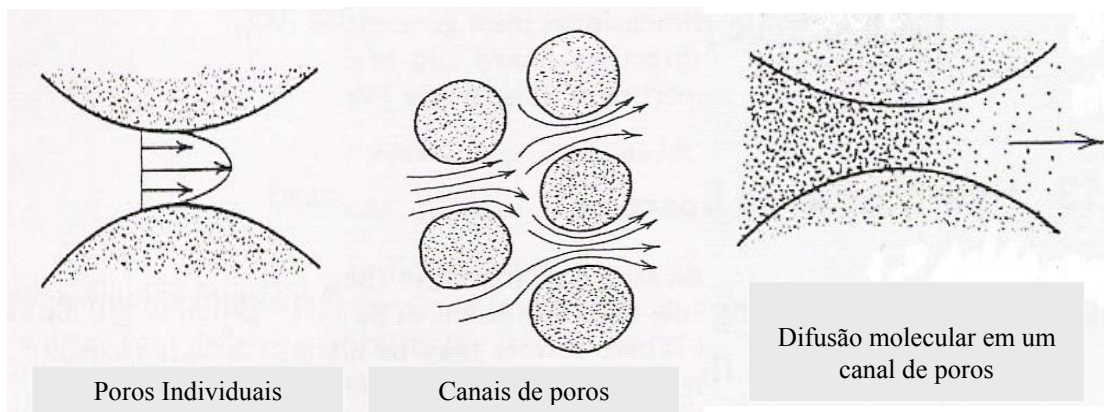


Figura 4.3 – Processos de dispersão – escala microscópica.

FONTE - FREEZE e CHERRY, 1979.

O termo que representa a dispersão na equação de transporte de contaminantes é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (4.13)$$

sendo D_{ij} o coeficiente de dispersão hidrodinâmica ou tensor de dispersão hidrodinâmica.

O tensor de dispersão hidrodinâmica para um meio poroso isotrópico é definido pelas seguintes componentes (Bear, 1979):

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (4.14)$$

$$D_{yy} = \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (4.14a)$$

$$D_{zz} = \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (4.14b)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (4.14c)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad (4.14d)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad (4.14e)$$

sendo:

α_L	a dispersividade longitudinal;
α_T	a dispersividade transversal;
D^*	o coeficiente efetivo de difusão molecular;
v_x, v_y, v_z	as componentes de velocidade ao longo dos eixos x, y e z;
$ v $	o modulo do vetor velocidade, que será definido por:

$$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} \quad (4.15)$$

As expressões para a dispersividade (equações 4.14) são válidas para um meio isotrópico. Se o meio for anisotrópico seria necessário avaliar cinco dispersividades diferentes. Entretanto, na prática esta avaliação é muito difícil de se obter, portanto torna-se necessário admitir que o coeficiente de dispersão isotrópico é aplicável para meios porosos anisotrópicos (Bear, 1979).

Fontes e sorvedouros

O termo fonte para a equação de transporte de contaminantes é definido como:

$$\frac{q_s}{n} C_s \quad (4.16)$$

sendo q_s o fluxo volumétrico de água por unidade de volume do aquífero (positivo para fontes e negativo para sorvedouros), C_s é a concentração de soluto na água que entra ou sai e n será a porosidade (meio saturado). Este termo representa a massa de soluto dissolvida na água que entra (positivo) através de fontes ou que sai (negativo) através de sorvedouros existentes no domínio. Estas fontes ou sorvedouros podem apresentar-se distribuídas espacialmente (recarga ou evapotranspiração), linearmente (rios) ou podem apresentar-se na forma pontual (poços, drenos ou rios).

Para as fontes, é necessário especificar a concentração de soluto da água (C_s). Para sorvedouros a concentração é, em geral, igual à concentração do aquífero no local onde ocorre a descarga de água. No caso de evapotranspiração, pode-se assumir que a água retirada é pura, ou seja, a concentração será igual a zero.

Reações químicas

As reações químicas freqüentemente incluídas nos modelos de transporte de poluentes são devidas às sorções (absorção/adsorção) lineares ou não lineares, a biodegradação ou ao decaimento radiativo. Entretanto, outras situações podem ser adicionadas quando necessário ao modelo de transporte utilizado sendo, necessário o conhecimento de seus equacionamentos.

4.4 - Modelamento matemático para o transporte de poluentes em meios porosos saturados

O desenvolvimento das equações de transporte de poluentes é baseado na lei de conservação de massa. Inicialmente serão assumidas as seguintes considerações:

- o meio poroso está completamente saturado;
- a lei de Darcy é válida durante todo o escoamento;
- são utilizadas coordenadas cartesianas (x,y,z) .

Para a aplicação da lei de conservação de massa será utilizado o volume de controle (VC) representado na figura 4.1. Este VC deve ser suficientemente grande para representar o comportamento médio de um escoamento através do meio poroso. As principais grandezas utilizadas serão:

- descarga específica (v);
- porosidade (n);
- velocidade linear média ($v = v/n$; m/s);
- concentração de soluto dissolvido na água (C ; g/m^3);
- massa de soluto por unidade de volume de meio poroso (nC);

Também será considerado que a variação da porosidade (n) será desprezível se comparada com a variação da concentração, tem-se:

$$\frac{\partial(nC)}{\partial x_i} = n \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{\partial n}{\partial x_i} \cong n \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (4.17)$$

O transporte de soluto será realizado através dos mecanismos de advecção e dispersão, assim, utilizando a simplificação acima e considerando uma direção i qualquer, tem-se:

$$F_i dA = \bar{v}_i n C dA - n D_{ii} \frac{\partial C}{\partial x_i} dA \quad (4.18)$$

F_i representa a massa total de soluto por unidade de área transversal transportada na direção i . O sinal negativo indica que o soluto desloca-se da região com maior concentração para a região com menor concentração. O parâmetro D_{ii} é coeficiente de dispersão na direção i .

Simplificando o termo de área e considerando um sistema xyz, teremos para cada direção as seguintes componentes para F :

$$\begin{aligned}
F_x &= \bar{v}_x nC - nD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \\
F_y &= \bar{v}_y nC - nD_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \\
F_z &= \bar{v}_z nC - nD_{zz} \frac{\partial C}{\partial z}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Para o cálculo da variação líquida total de soluto através das faces do VC considerado, teremos:

Fluxo entrando do VC:

$$F_x dzdy + F_y dzdx + F_z dxdy \tag{4.20}$$

Fluxo saindo do VC:

$$\left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} dx \right) dzdy + \left(F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} dy \right) dzdx + \left(F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} dz \right) dxdy \tag{4.21}$$

Os termos com derivadas parciais representam a variação da massa de soluto em uma determinada direção (x , y ou z) ao longo do VC. O fluxo líquido (saída – entrada) de massa de soluto será:

$$\left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) dxdzdy \tag{4.22}$$

As fontes (+) e os sorvedouros (-), que representam a quantidade de soluto (poluente) transportado pelos fluxos volumétricos de água por unidade de volume de aquífero (q_s), serão considerados através do termo:

$$q_s C_s dxdzdy$$

As reações químicas por unidade de volume serão representadas pelo termo:

$$\sum_{k=1}^N r_k dx dz dy$$

A taxa de variação da massa no interior do VC será:

$$- n \frac{\partial C}{\partial t} dx dz dy$$

Finalmente, utilizando os termos acima para a aplicação da conservação de massa para o VC, obtêm-se:

$$\left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) + q_s C_s + \sum_{j=1}^N r_j = -n \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.23)$$

Substituindo-se as expressões para os fluxos nas direções x , y e z , equação 4.19 e reorganizando, tem-se:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] - \left[\frac{\partial}{\partial x} (v_x C) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y C) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z C) \right] + \frac{q_s}{n} C_s + \sum_{j=1}^N R_j = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.24)$$

que por conveniência, será reescrita de forma esquemática:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{n} C_s + \sum_{j=1}^N R_j = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.25)$$

A equação 4.25 descreve o balanço de massa, ou seja, que o fluxo líquido de massa que atravessa as superfícies de controle do VC (fluxo que entra menos fluxo que sai), mais os termos fontes ou sorvedouros, mais o termo que leva em consideração as reações químicas, será igual à taxa líquida de variação de massa no interior do volume de controle (termo de acúmulo de soluto no VC).

O termo das reações químicas foi reescrito, pois leva em consideração a influência da porosidade. É importante destacar que somente absorções lineares e não-lineares com equilíbrio controlado e taxas de reações irreversíveis de primeira ordem são consideradas por este termo. Assim, este termo será expresso por (Grove e Stollenwerk, 1984):

$$\sum_{j=1}^N R_j = -\frac{\rho_b}{n} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{n} \bar{C} \right) \quad (4.26)$$

sendo:

ρ_b a densidade do meio poroso [g/m³];

\bar{C} a concentração de contaminantes absorvida pelo meio poroso [g/g];

λ taxa para o decaimento radioativo e biodegradação [s⁻¹];

O primeiro termo do lado direito da equação 4.26 será reescrito da seguinte forma:

$$\frac{\rho_b}{n} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \quad (4.27)$$

Substituindo a equação 4.27 na equação 4.26, e em seguida, substituindo a expressão resultante na equação 4.25, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{n} C_s - \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{n} \bar{C} \right) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.28)$$

Passando o quarto termo do lado esquerdo da equação 4.28 para o lado direito e reorganizando, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{n} C_s - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{n} \bar{C} \right) = \left[1 + \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \right] \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.29)$$

Finalmente, definindo o termo entre colchetes como sendo:

$$R = \left[1 + \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \right] \quad (4.30)$$

obtem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{n} C_s - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{n} \bar{C} \right) = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.31)$$

A equação 4.31 é a equação governante do processo de transporte de poluentes em meios porosos saturados utilizada pelo modelo numérico MT3D indicado pela EPA. Pode-se observar que sua aplicação necessita do conhecimento do campo de velocidade que define o escoamento no meio poroso.

Soluções analíticas de casos simplificados podem ser encontradas na literatura. Entretanto, na maioria das situações práticas encontradas em estudos de transporte de poluentes em meios porosos (sistema bi ou tridimensional anisotrópico), não será possível solucionar analiticamente a equação 4.31. Desta forma torna-se necessário à utilização de técnicas numéricas para obtermos soluções aproximadas em pontos discretos predefinidos através de uma malha.

Condições Iniciais

Sendo o processo de transporte de contaminantes um processo transiente é obviamente necessário fornecer a condição inicial do problema estudado, ou seja, a distribuição inicial de concentração para o domínio analisado:

$$C(x, y, z, t) = C_o(x, y, z, t_o) \quad (4.32)$$

Condições de contorno

Os três tipos de condição de contorno conhecidos podem ser encontrados ao se analisar problemas envolvendo transporte de contaminantes, ou seja:

a) concentração conhecida ao longo do contorno Γ (Dirichlet):

$$C(x, y, z, t) = C_p(x, y, z) \rightarrow \Gamma \quad (t \geq 0) \quad (4.33)$$

b) gradiente de concentração conhecido ao longo do contorno Γ (Neumann):

$$D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} = q(x, y, z, t) \rightarrow \Gamma \quad (t \geq 0) \quad (4.34)$$

c) uma combinação das condições a e b é conhecida ao longo do contorno Γ (mista):

$$D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_i C = g(x, y, z, t) \rightarrow \Gamma \quad (t \geq 0) \quad (4.35)$$

CAPITULO 5. SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE TRANSPORTE

5.1 – Solução de um problema de transporte de poluentes

Para testar o desempenho do método difusional aplicado a solução de problemas de transporte de poluentes, tomou-se um problema já analisado por Hassan & Mohamed (2003).

Um aquífero homogêneo, bidimensional é assumido com dimensões 48 metros x 16 metros (Figura 5.23) e uma velocidade constante na direção x (V_x) de 0,5 metros/dia. As dispersividades longitudinal e transversal são iguais, e tem um valor de 0,1 metros. Uma massa total de 4 kg é disparada como uma pequena fonte de contaminação com dimensões 0,2 x 0,2 metros.

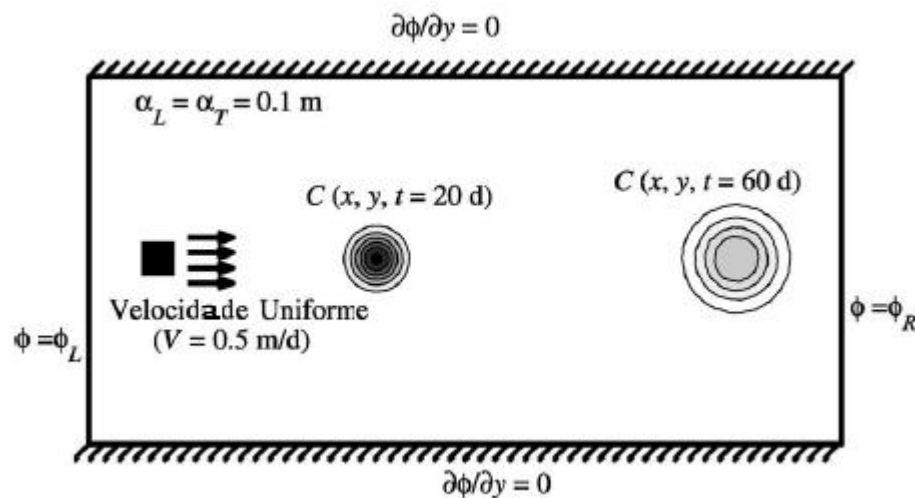


Figura 5.1 – Diagrama esquemático para a simulação bidimensional de um aquífero homogêneo

FONTE – HASSAN & MOHAMED, 2003.

A solução analítica para tal caso é dada com ((Ogata & Banks, 1961, citado por Hassan & Mohamed, 2003),

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 \cdot A}{4\pi t \sqrt{D_{xx} t}} \cdot \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2}{4D_{xx} t} - \frac{(y-y_0)^2}{4D_{yy} t} \right] \quad (5.1)$$

onde C_0 é a concentração inicial, A é área do termo fonte, e (x_0, y_0) é o centro da área da fonte. A distribuição bidimensional da concentração é obtida em dois tempos pré definidos, $t = 20$ dias e 60 dias, após a contaminação. A solução analítica para um disparo instantâneo para uma fonte retangular, com comprimentos L na direção do fluxo com largura W transversal a esta direção, pode ser aproximada pela equação 5.9 se $L^2/48.D_{xx}.t$ e $L^2/48.D_{yy}.t$ são ambos pequenos. (Charbeneau, 2000, citado por Hassan & Mohamed, 2003). Para os problemas aqui estudados, os dois valores são iguais e depois de 20 e 60 dias são 0,000833 e 0,000278 respectivamente. Estes valores são pequenos o suficiente para permitir o uso da equação 5.1 para este problema.

Vários pacotes de softwares foram usados para resolver este problema de transporte, sendo esses comparados com a solução analítica. Dois códigos são baseados no método de elementos finitos, SUTRA (Voss, 1984, citado por Hassan & Mohamed, 2003), e FEFLOW (Diersch, 1998, Hassan & Mohamed, 2003), um no método de diferenças finitas MT3D (Zeng, 1990, citado por Hassan & Mohamed, 2003) e MT3DMS (Zeng & Wang, 1999, citado por Hassan & Mohamed, 2003) e um baseado em um método estatístico físico usado na análise do processo de difusão dispersão em meio poroso ao longo do tempo Método de Monte Carlo (Hassan & Mohamed, 2003).

A figura 5.24, mostra uma comparação entre a solução analítica e os diversos métodos citados.

SUTRA é um bem conhecido modelo de elementos finitos que simula o fluxo e o transporte de solutos em uma superfície. O domínio de simulação foi discretizado em elementos de tamanho 0,2 x 0,2 metros. A comparação entre o SUTRA e solução analítica é dada na figura 5.24, e mostra que o SUTRA apresenta uma significativa dispersão numérica longitudinal que não ocorre com a solução analítica. Similarmente o FEFLOW possui a mesma imprecisão devido a dispersão numérica que o SUTRA.

O MT3D é outro bem conhecido modelo que usa o método de diferenças finitas. Foi usado o MT3D/MT3DMS e selecionado dois resolvedores que diferem na discretização do termo advectivo. O primeiro resolvidor (MT3D) usa diferenças centradas para o termo advectivo. O segundo resolvidor, usa uma aproximação de terceira ordem para a discretização do termo advectivo (MT3D-TVD). A figura 5.2, mostra que o método MT3D induz um maior dispersão numérica que o SUTRA e FEFLOW, no entanto, o resultado do MT3D-TVD, mostra uma excelente concordância com a solução analítica, eliminação da dispersão numérica.

A performance do método RWPT possui um comportamento similar ao MT3D-TVD, e têm uma excelente concordância com a solução analítica. No entanto, um grande número de partículas ($\sim 2,5$ milhões) foi necessário para se obter uma solução suave, caso contrário, ocorre oscilações ao redor dos contornos circulares. Essas oscilações são resultados da natureza discreta das partículas e do componente randômico do seu movimento.

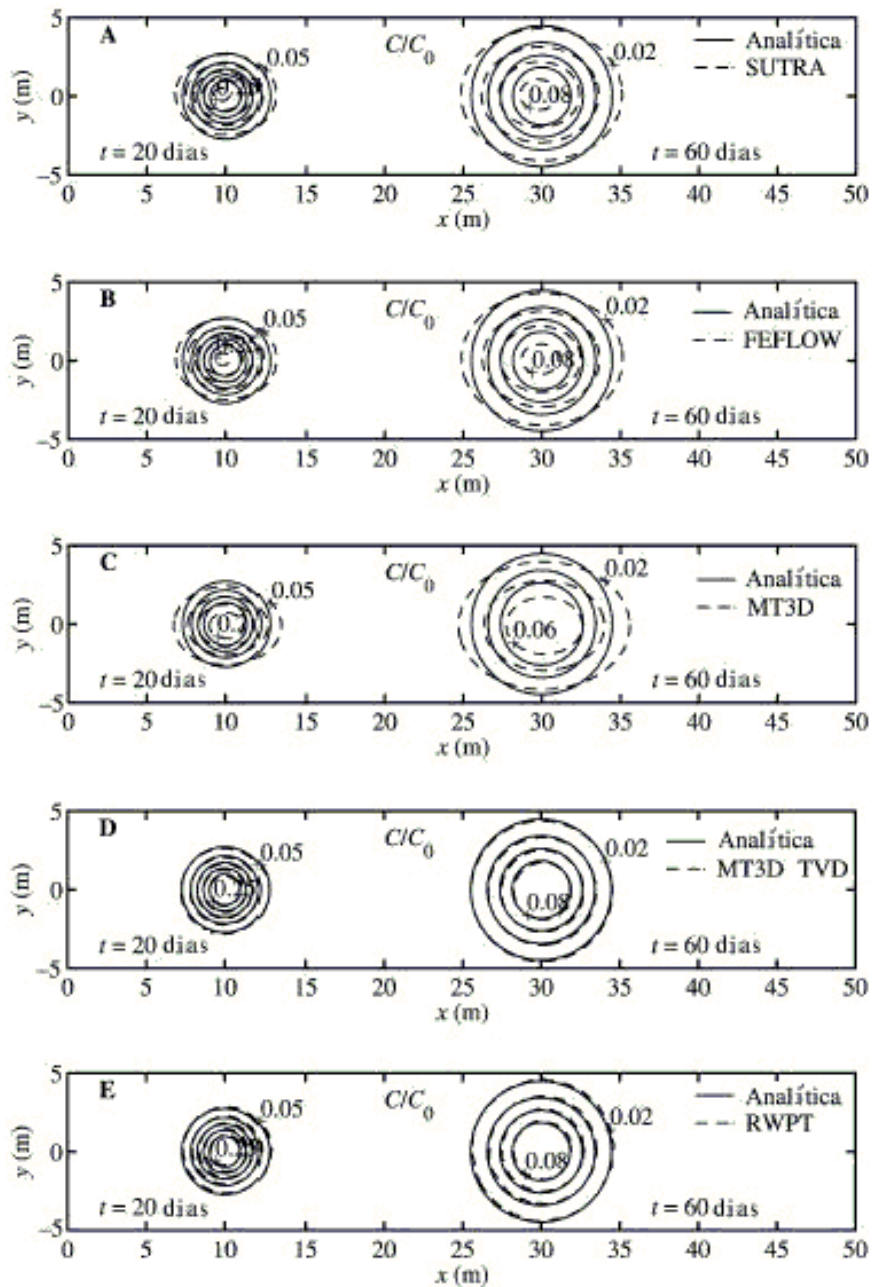


Figura 5.2 – Comparativo entre a solução analítica e os métodos SUTRA, FEFLOW, MT3D, MT3D TVD e RWPT.

FONTES – HASSAN & MOHAMED, 2003.

A figura 5.3 mostra a comparação entre isolinhas de concentração obtidas pela solução analítica e as obtidas pelo método difusional, para o problema de transporte em um aquífero homogêneo, bidimensional quando este sofre uma contaminação pontual. As isolinhas são traçadas para tempos de 20 e 60 dias após a contaminação. Os resultados obtidos são compatíveis com os métodos de SUTRA e FEFLOW apresentando uma pequena dispersão numérica tanto para os tempos de 20 como de 60 dias, e apresentam um comportamento superior ao método MT3D e inferior aos métodos MT3D TVD e RWPT.

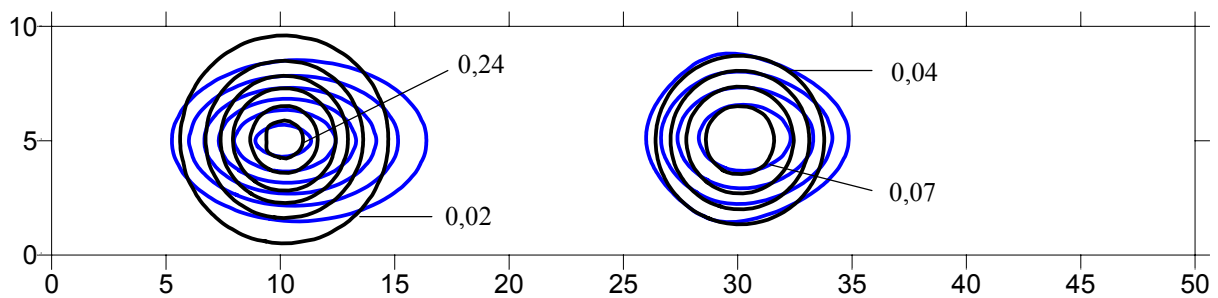


Figura 5.3 – Perfil de solução para o transporte de poluentes em um aquífero bidimensional após 20 e 60 dias de aplicação de uma fonte de contaminação, comparando a solução pelo método difusional aplicado a uma malha de 100 x 20 elementos (em azul) com a solução analítica (em preto).

As figuras 5.4 a 5.5 mostram a representação espacial da solução obtida para os tempos 20 e 60 dias. As figuras 5.4 e 5.5, representam a solução pelo método difusional para um malha de 100 x 20 elementos e as figuras 5.6 e 5.7 representam as soluções analíticas para os mesmos tempos. Pode-se notar que ocorre difusão numérica no sentido do fluxo.

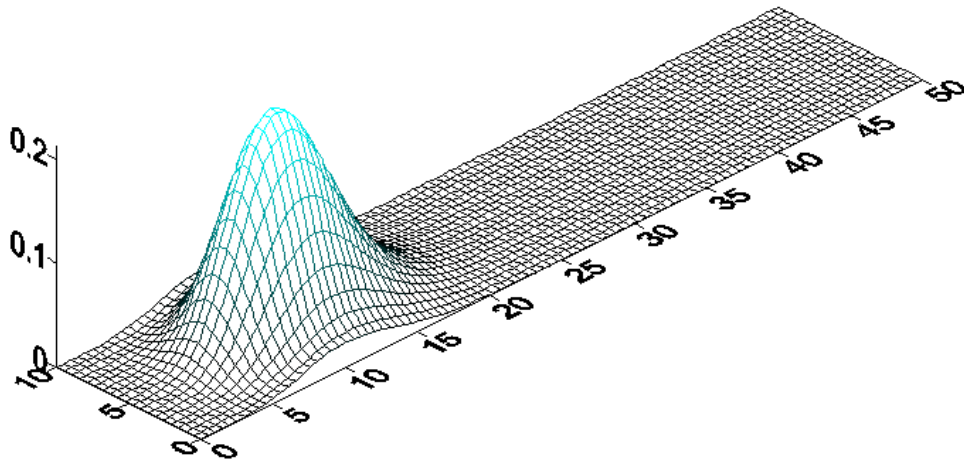


Figura 5.4 – Perfil de solução pelo método difusional para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 20 dias de aplicação de uma fonte de contaminação, considerando uma malha de 100 x 20 elementos.

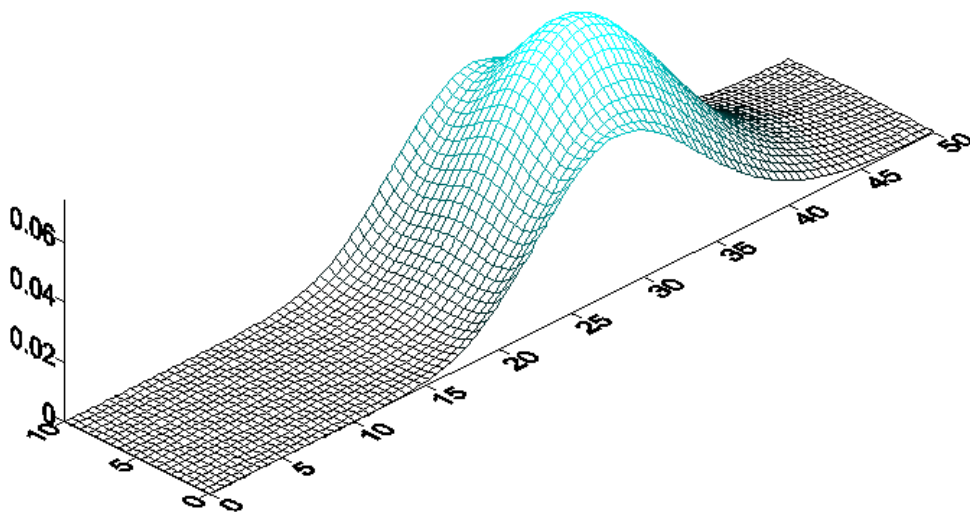


Figura 5.5 – Perfil de solução pelo método difusional para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 60 dias de aplicação de uma fonte de contaminação, considerando uma malha de 100 x 20 elementos.

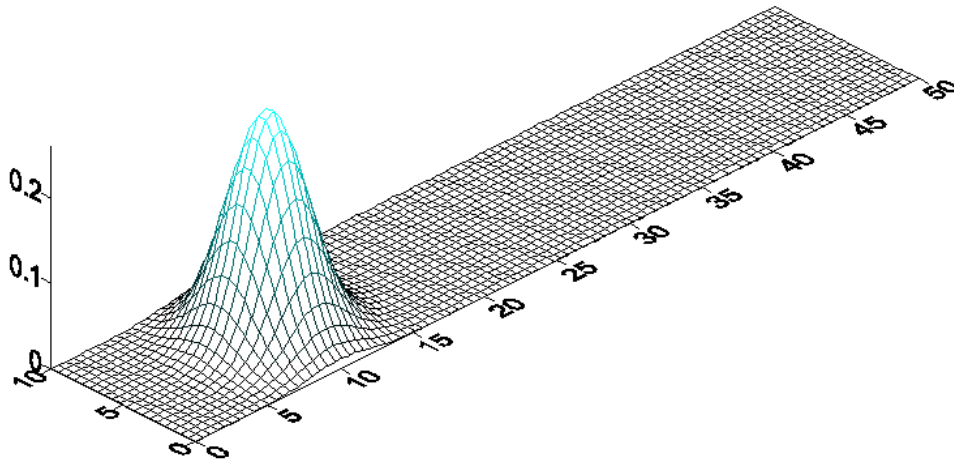


Figura 5.6 – Perfil de solução analítica para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 20 dias de aplicação de uma fonte de contaminação.

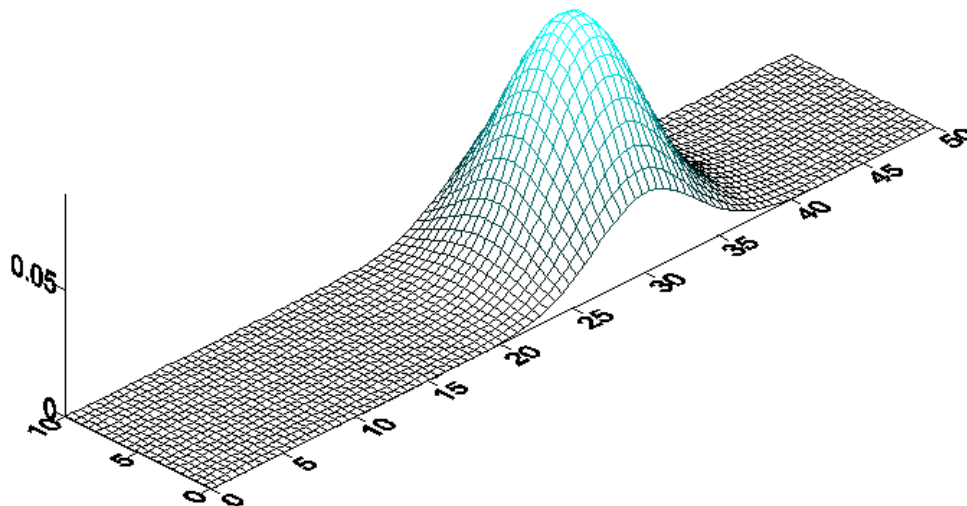


Figura 5.7 – Perfil de solução exata para o transporte de poluente em um aquífero bidimensional após 60 dias de aplicação de uma fonte de contaminação.

A figura 5.8 mostra a comparação entre a concentração distribuída ao longo do comprimento (eixo x) do domínio, para o ponto no centro do eixo y ($y = 5$ m). As soluções foram obtidas pelo método difusional para malhas de 80×16 e 100×20 elementos e solução analítica. Os tempos analisados foram de 20 e 60 dias. Pode-se observar que à medida que se refinou a malha, obteve-se uma solução com menor difusão numérica em relação à solução exata.

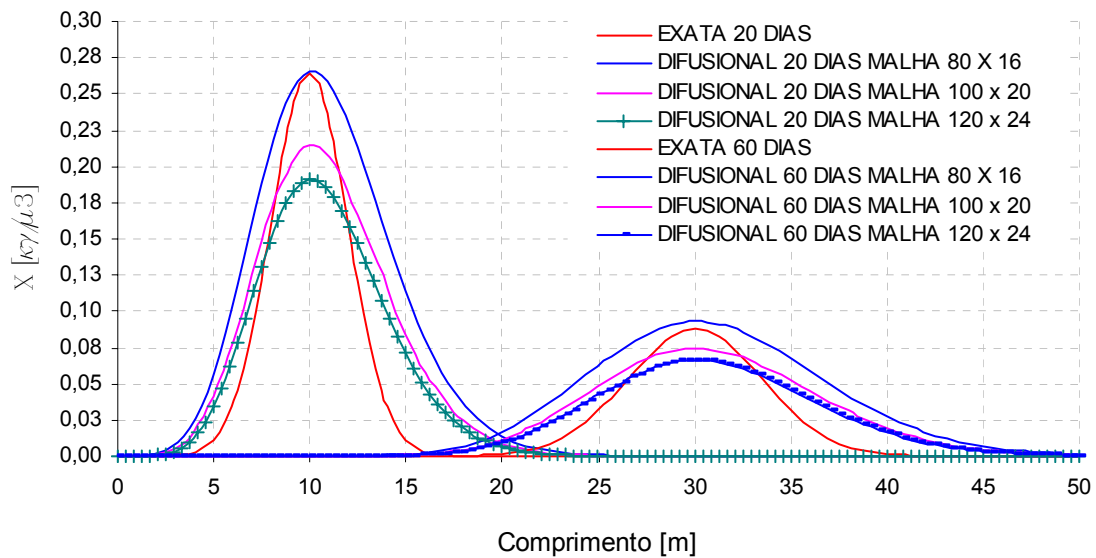


Figura 5.8 – Comparação entre as concentrações calculadas pelo método difusional para malha de 80×16 , 100×20 e 120×24 e a solução analítica ao longo do comprimento no eixo x aplicado nos tempos de 20 e 60 dias.

CAPITULO 6. CONCLUSÃO

Neste trabalho, desenvolveu-se e implementou-se o método difusional para problemas convectivos difusivos transientes bidimensionais. Esta implementação utilizou as bases do algoritmo CONDUCT desenvolvido por Patankar (1991), usado na solução de problemas bidimensionais transientes de condução de calor. Apresentou-se uma revisão dos métodos mais utilizados para solução de problemas convectivos difusivos sendo que a maioria desses problemas utiliza manipulações, soluções ‘*ad doc*’, que modificam alguns parâmetros da equação convectiva difusiva, podendo conduzir a erros de solução e dúvidas quanto ao problema que realmente se está resolvendo.

O software criado teve por base a técnica de volumes finitos. Os testes aplicados usaram problemas padrões (benchmark), puramente convectivos frequentemente utilizados na literatura para avaliação de novos métodos destinados à solução de problemas convectivos dominantes. Estes testes utilizaram a aplicação de refinamentos sucessivos de malhas, e demonstraram, entre outros resultados, que para problemas bidimensionais em condições de escoamento predominantemente convectivo, à medida em que se refina a malha a solução pelo método difusional tende para a solução exata. Também verificou-se que a medida em que o problema se torna difusivo a solução caminha para solução exata sem maior refinamento de malhas. Avaliou-se, também a aproximação de um esquema hiperbólico para substituir a forma exponencial de Peclet que aparece na equação de convecção difusão quando da aplicação do método difusional.

A comparação com outras técnicas utilizadas na literatura, comprovou que o método difusional fornece resultados tão acurados e desempenho tão bom quanto aquelas para resolver problemas convectivos-difusivos.

Os testes realizados, neste trabalho, para avaliar a performance do método difusional permitem concluir que:

- O método difusional pode ser acoplado a técnicas numéricas de solução de equações de difusão sem maiores dificuldades na solução;
- Diferentemente da aplicação direta das equações de convecção difusão, o método difusional transforma esta equação em uma puramente difusiva implicando na colocação de condição de contorno em todas as fronteiras do domínio, por se tratar agora de uma equação puramente difusiva;

- Para solução das diversas situações testadas neste trabalho, não foi necessária a implementação de nenhuma forma de relaxação das propriedades estudadas;
- O método difusional aplicado a refinamentos sucessivos de malhas caminha para a solução ótima do problema, ou seja, a falsa difusão diminui progressivamente à medida que se refina a malha;
- A utilização de valores para o número de Fourier menores que 1, garantiu a convergência do método, para quaisquer valores do número de Peclet. A utilização dos valores de Fourier próximos a 0,5 acelerou a velocidade de convergência dos problemas convectivos dominantes;
- Durante os testes realizados não houve limitações para utilização do número de Courant;
- O método difusional pode ser aplicado a situações tridimensionais, visto que se trata, em síntese, da solução de uma equação de condução.

Portanto, pode-se concluir que o método difusional gera um sistema de equações bem definidas, que pode ser resolvido por quaisquer dos métodos numéricos conhecidos, apresenta estabilidade dos resultados e a possibilidade de diminuição da difusão numérica. A partir desses resultados pode-se propor a continuidade dos estudos abordando os seguintes temas:

- Utilização de um esquema adaptativo para o tempo ou para a malha, dentre outros.
- Aplicações do método difusional em situações tridimensionais;
- Avaliação da aplicabilidade do método para diversos problemas com Peclet variável indo de 0 a $+\infty$;
- Implementação de um método de soluções mais otimizado, podendo fazer maiores refinamentos de malhas e gerar solução mais próximas da solução real;
- Implementação de um sistema de elementos finitos ou volumes finitos com malhas não estruturadas, com o objetivo de ampliar a aplicabilidade para uma gama maior de domínios.
- Aplicação do método difusional para casos reais de dispersão de poluentes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. AGENDA 21, Disponível em, <http://www.crescentefertil.org.br/agenda21/>, Acesso em 20 de janeiro, 2006.
2. AHUJA, L.R.. A numerical and similarity analysis of infiltration into crusted soils, **Water Resources Research**, V. 9, p. 987-994, 1973.
3. ALMEIDA, R. C.; GALEÃO, A. C. An adaptive Petrov-Galerkin formulation for the compressible Euler and Navier-Stokes equations. **Computer Methods in Applied Mechanics Engineering**. v. 129, p. 157-176, 1996.
4. BARRETO, A. A.. **Desenvolvimento e Implementação do Método Difusional Bidimensional para aplicação na solução bidimensional para aplicação na solução de problemas de transporte**. Dissertação (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais, 2004.
5. BEAR, J.. **Dynamics of Fluids in Porous Media**. New York: American Elsevier, 1976.
6. BEAR, J.. **Groundwater Hydraulics**. New York: McGraw-Hill, 1979.
7. BRESLER, E.. Simultaneous transport of solutes and water under transient unsaturated flow conditions. **Water Resources Research**, 9, 975-986, 1973.
8. 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. **Computer Methods in Applied Mechanics Engineering**. v. 32, p. 199-259, 1982.
9. CARVALHO, C. A.. **Caracterização Hidrogeológica da Bacia Hidrográfica do Campus da UFMG em Belo Horizonte**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Sanitária) – Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais, 1997.
10. CHOI, C.Y., KIM, S.J.. Modeling of Boundary Conditions at the Soil-Water Interface, **ASAE**, Paper no. 942551, 1994.
11. CRÊSPO, L. C. A.. **Transporte de calor e massa ao redor de um cilindro horizontal, sob condições de convecção natural e mista**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais, 1994.
12. FERNANDES, C. M. **Aplicação de uma técnica de volumes finitos, com discretização corrente acima, na direção das linhas de corrente, na solução do problema de escoamento de jato duplo paralelo**. Tese (Doutorado em Engenharia Aeronáutica) – Instituto Tecnológico da Aeronáutica, São José dos Campos, 1998.

13. FERREIRA, J.P.C.L.. **A Dispersão de Poluentes em Águas Subterrâneas (Análise Custo-Eficácia de Modelos Matemáticos e Ensaio de Traçadores para Realização de Estudos de Impacto Ambiental)**, Tese apresentada para concurso de obtenção de grau de especialista do LNEC, Lisboa (1996).
14. FORTES, M. The diffusional method for convection-diffusion equations: finite element one-dimensional solutions. In: **International Conference for Numerical Methods in Thermal Problems**, 10th. Pineridge Press, Swansea, UK, vol. 10, p. 57-68. 1997.
15. FORTES, M.; FERREIRA, W. R.. The one-dimensional transient diffusional method: finite element adaptive solutions to convection-diffusion problems. **International Journal of Thermal Sciences**. v. 38, p. 780-790, 1999.
16. FORTES, M.; FERREIRA, W. R.. Finite Volume Approach to Transport Equations by the Diffusional Method. **Simtec 98 – Simpósio Mineiro do Mecânica Computacional**, Ouro Preto, 1998.
17. FREEZE, R. A.; CHERRY, J.A..**Groundwater**. New Jersey: Prentice Hall, 1979.
18. FREEZE, R.A.. Three-dimensional, Transient, Saturated-Unsaturated Flow in a Groundwater Basin, **Water Resources Research**, v. 7, p. 347-366, 1971.
19. GALEÃO, A. C.; CARMO, E. G. A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems. **Computer Methods Applied Mechanic Engineering**. v. 68, p. 83-95, 1.998.
20. GURGEL, C. E. P. **Avaliação de um método de elementos finitos segregados, a montante, para a solução de problemas convectivos difusivos**. Tese (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais, 1993.
21. GURGEL, C.E.P.. SHIRMOHAMMADI, A., MADANI, A., HAGHIGHI, K., AGUIRRE, I., Finite Element Analysis of Water and Chemical Flow Through Porous Media, **Presented at the Summer Meeting (ASAE)**, Paper No. 952669, 1995.
22. HASSAN, AHMED E.; MOHAMED, M. MOHAMED, On Using Particle Tracking Methods to Simulate Transport in Single-Continuum and Dual Continuum Porous Media, **Journal of Hydrology**, v. 275, p. 242-260, 2.003.
23. HAYASE, T., HUMPHREY, J. A. C.; GREIF, R. A Consistently Formulated QUICK Scheme for Fast and Stable Convergence Using Finite-Volume Iterative Calculation Procedures. **Journal of Computational Physics** . v. 98, p. 108-118.1992.
24. HIRSH, C. **Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Numerical Discretization**, Wiley, Chichester, 1998. v. 1.

25. HIRSH, C. **Numerical Computation of Internal and External Flows: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows.** Chichester, 1998. v. 2.
26. HOFFMAN, J. D. **Numerical Methods for Engineers and Scientists.** New York: McGraw-Hill, 1992.
27. HUBBERT, M.K.. The theory of groundwater motion, **J. Geol.**, v. 48, p. 785-822, 1940.
28. HUGHES, T. J. R. A simple scheme for developing upwind finite elements. **International Journal for Numerical Methods in Engineering.** v. 12, p. 1359-1365, 1978.
29. LAPIDUS, L.; PINDER, G. F. **Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering.** New York: John Wiley & Sons, 1982.
30. LEONARD, B.P.. A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. **Computer Methods in Applied Mechanic and Engineering.** v. 19, p. 59-98, 1979.
31. LILLINGTON, J. N.. A vector upstream differencing scheme for problems in fluid flow involving significant source terms in steady-state linear systems. **International Journal for Numerical Methods in Fluids.** v. 1, p. 3-16, 1981.
32. MALISKA, C.R.. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1995.
33. NEUMAN, S. P. Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering.** v 20, p. 321-337, 1984.
34. ODURO, P., NGUYEN, H.V., NIEBER, J.L., Parallel Computing Applications in Groundwater Flow: an Overview, **ASAE** , Paper no. 973062, 1997.
35. PATANKAR, S.V.. **Numerical Heat Transfer and Fluid flow.** New York: Hemisphere Publishing Corporation, Taylor & Francis Group, 1980.
36. PATANKAR, S.V.. **Computation of Conduction and Duct Flow Heat Transfer.** Innovative Research, Inc., 1991.
37. PINDER, G.F., A Galerkin-finite element simulation of groundwater contamination on Long Island, New York, **Water Resources Research**, v. 9, p. 1657-1669, 1973.
38. RAITHBY, G. D.. Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow. **Computer & Fluids**. vol. 2, 191-206 (1974).

39. RAITHBY, G. D. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. v 9, p. 153-154, 1976.
40. RICE, J. G; SCHNIPKE, R. J. A monotone streamline upwind finite element method for convection-dominated flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. v. 48, p. 313-327, 1985.
41. RICE, J. G; SCHNIPKE, R. J. Examination of a new finite element method applied to convection heat transfer. **Finite Elements in Analysis and Design**. v. 1, p. 227-239, 1985.
42. RICE, J. G; SCHNIPKE, R. J. A finite element method for free and forced convection heat transfer. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**. v. 24, p. 117-128, 1987.
43. RIOSVIVOS, Portal de informações Ambientais - Coalizão Rios Vivos, [on line] Disponível em: www.riosvivos.org.br. Acesso em: 19 de janeiro de 2006.
44. REBOUÇAS, A. **Uso inteligente da água**. São Paulo: Escrituras, 2004.
45. SAMPAIO, P. A. B. A Petrov-Galerkin . Modified Operator Formulation for Convection-Diffusion Problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**. v. 30, p. 331-347, 1990.
46. SEGERLIND, L. J. **Applied Finite Element Analysis**. New York: John Wiley & Sons, 1984.
47. SHAW, C. T. Using a segregated finite element scheme to solve the incompressible Navier-Stokes equations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**. v. 12, p. 81-92, 1991.
48. SMITH, R. M.; HUTTON, A.G.. The numerical treatment of advection: A performance comparison of current methods. **Numerical Heat Transfer**. v. 5, p. 439-461, 1982.
49. THUNVIK, R.; BRAESTER, C.. Radioactive Waste Repositories in Hard Rock Aquifers – Hydrodynamic Aspects, **Nuclear Technology**, v. 67, p. 255-264, 1984.
50. VAN GENUCHTEN, M.Th.. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v. 44, p. 892-898, 1980.
51. VAUCLIN, M., KHAJI, D., VACHAUD, G.. Experimental and Numerical Study of a Transient, Two-Dimensional Unsaturated-Saturated Water Table Recharge Problem, **Water Resources Research**, v. 15, p. 1089-1101, 1979.
52. VERSTEEG, H.K; MALALASEKERA W.. **An introduction to computational fluid dynamic. The finite volume method**. Harlow – England: Longman Scientific & Technical, 1995.

53. VOGEL, T.; HUANG, K.; ZHANG, R.; VAN GENUCHTEN, M. Th.. The Hydrus Code for Simulating One-Dimensional Water Flow, Solute Transport, and Heat Movement in Variably-Saturated Media, **Research Report No, 140**, U.S. Salinity Laboratory, Riverside, California (1996).
54. YEH, G. T. A Lagrangian-Eulerian method with zoomable hidden fine-mesh approach to solving advection-dispersion equations. **Water Resources Research**. v. 26, p. 1133-1144, 1990.
55. WILLIAN, M.M.R., Stochastic Problems in the Transport of Radioactive Nuclides in Fractured Rock, **Nuclear Science and Eng.**, v. 112, p. 215-230, 1992.
56. ZHANG, R., Huang, K.; VAN GENUCHTEN, M.T. An efficient Eulerian-Lagrangian Method for solving solute problems in steady and transient flow fields. **Water Resources Research**. v. 29, p. 4131-4138, 1993.
57. Zheng, C.. A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reaction of Contaminants in Groundwater Systems, **United States Environmental Protection Agency (1990)**.
58. ZIENKIEWICZ, O. C.; LOEHNER, R.; MORGAN, K.; NAKAZAWA, S. Finite Elements in Fluid Mechanics – a Decade of Progress, R. H. Gallagher et al., Ed. **Finite Elements in Fluids**, v. 5, p. 1-26. J. Wiley: Chichester, 1984.
59. ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. **The Finite Element Method: Basic formulations and linear problems**. 4 ed. London: McGraw-Hill, 1989. v.1.
60. ZIENKIEWICZ, O.C.; TAYLOR, R. L. **The Finite Element Method: Solid and Fluid Mechanics and Non-linearity**. 4 ed. London: McGraw-Hill, 1991.v.2.