

MARCELO FRANCO DE OLIVEIRA

**ANÁLISE DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM
DOMÍNIOS BIDIMENSIONAIS UTILIZANDO O MÉTODO
DOS ELEMENTOS DE CONTORNO**

CURITIBA

Março 2015

MARCELO FRANCO DE OLIVEIRA

**ANÁLISE DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM
DOMÍNIOS BIDIMENSIONAIS UTILIZANDO O MÉTODO
DOS ELEMENTOS DE CONTORNO**

Tese apresentada como requisito parcial à
obtenção do grau de Doutor em Métodos
Numéricos em Engenharia, pelo Programa de
Pós-Graduação em Métodos Numéricos em En-
genharia, Universidade Federal do Paraná.

Orientadora: Cynara de L. N. Cunha

CURITIBA

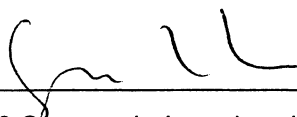
Março 2015

TERMO DE APROVAÇÃO

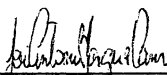
MARCELO FRANCO DE OLIVEIRA

ANÁLISE DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM DOMÍNIOS BIDIMENSIONAIS UTILIZANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

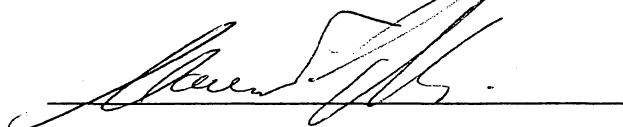
Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de doutor no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:



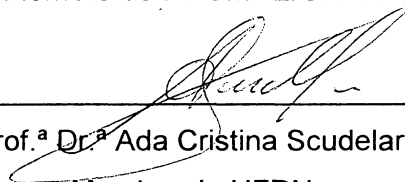
Prof.^a Dr.^a Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha
(Orientadora) Membro do PPGMNE/UFPR



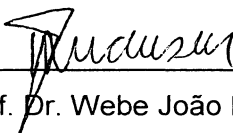
Prof. Dr. José Antonio Marques Carrer
Membro do PPGMNE/UFPR



Prof. Dr. Mauricio Felga Gobbi
Membro do PPGMNE/UFPR



Prof.^a Dr.^a Ada Cristina Scudelari
Membro da UFRN



Prof. Dr. Webe João Mansur
Membro da COPPE/UFRJ

Curitiba, 27 de março de 2015.

Dedicatória

Dedico esse trabalho à minha esposa.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço profundamente a Deus, que com sua infinita graça e bondade esteve junto comigo me dando ânimo, forças e consolo nas horas de angústias, me ensinando a ter paciência, persistência e determinação para que eu pudesse cumprir mais essa etapa de minha jornada pela vida.

Aos meus pais, Dirceu e Olga que sempre estiveram me dando forças, apoio e muito incentivo para que eu não desanimasse durante essa etapa.

A minha amada esposa Débora, que teve muita paciência e sabedoria para entender todos os momentos em que estive ausente devido ao meu estudo. Agradeço a Deus por ter colocado essa pessoa abençoada em minha vida para estar ao meu lado em todos os momentos.

Agradeço aos meus amigos e companheiros do CESEC, que sempre estiveram dispostos a me ajudar nas dificuldades que encontrei.

A minha orientadora Cynara, que me deu a oportunidade de desenvolver esse trabalho, me dando todo o apoio, me ajudando a construir o conhecimento necessário para que esse trabalho pudesse ser realizado, e tendo paciência no decorrer de todo o processo.

Epígrafe

”É desonroso para os homens sábios desperdiçarem seu tempo como escravos no trabalho de cálculo, que poderia ser relegado, com segurança, a qualquer um que usasse uma máquina.”

(Leibnitz, 1646-1716)

Sumário

Lista de Figuras	vii
Lista de Símbolos	xii
Resumo	xiii
Abstract	xiv
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Objetivos.....	4
1.2 Objetivos específicos	4
2 JUSTIFICATIVA	5
3 MODELO DE TRANSPORTE DIFUSIVO-ADVECTIVO	10
3.1 Princípio de Conservação de Massa de Solutos.....	10
3.2 Lei de Fick	12
3.2.1 Difusão turbulenta	13
3.3 Condições de Contorno e Inicial	17
3.3.1 Modelos Numéricos para a Equação de Advecção e Difusão	19
3.3.1.1 Método dos Elementos Finitos	19
3.3.1.2 Equações do SisBaHiA [®]	19
3.3.1.3 O Método dos Elementos de Contorno	24
3.4 Formulação Fraca e Formulação do Método dos Elementos de Contorno	25
3.4.1 Solução Fundamental.....	26

3.5	O Método dos Elementos de Contorno Aplicado à Equação da Difusão-Advecção	27
3.6	Formulação do MEC com velocidade variável	34
4	SIMULAÇÕES NUMÉRICAS	35
4.1	Simulação 1	36
4.2	Simulação 2	44
4.3	Simulação 3	48
4.4	Simulação 4	50
4.5	Simulação 5	58
5	CONCLUSÕES	61
	Referências	64
6	Anexo A	67
7	Anexo B - Produção bibliográfica	70

Lista de Figuras

Figura 1	Fluxo no volume de controle	11
Figura 2	Ângulo α usado para o cálculo de $f(\xi)$	29
Figura 3	Campo de velocidades parabólico	30
Figura 4	Perfil de velocidade parabólico.	34
Figura 5	Malha utilizada nas formulações do MEC	36
Figura 6	Malha utilizada na formulação do MEF	36
Figura 7	Geometria do canal e condições de contorno impostas	37
Figura 8	Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1a.	39
Figura 9	Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1b.	39
Figura 10	Canal unidimensional com carga contínua: Caso 1b. Resultados ao longo do eixo x, para os pontos $y=0.5$ m.	40
Figura 11	Erro absoluto, em mg/L, entre soluções numéricas e analítica para o Caso 1b.	40

Figura 12	Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1c.	41
Figura 13	Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1d.	42
Figura 14	Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1d com $\Delta t = 4$ s.	42
Figura 15	Concentração, em mg/L no instante $t=2$ s para o caso 1a	43
Figura 16	Concentração, em mg/L no instante $t=28$ s para o caso 1a	43
Figura 17	Concentração, em mg/L no instante $t=56$ s para o caso 1a	43
Figura 18	Concentração, em mg/L no instante $t=112$ s para o caso 1a	43
Figura 19	Concentração, em mg/L no instante $t=120$ s para o caso 1a	43
Figura 20	Geometria e condições de contorno para o experimento 2	44
Figura 21	Valores de concentração no canal, considerando: $D = 2m^2/s, v_x = 0.1m/s, v_y = 0.01m/s$, nos pontos A(3; 1), B(6; 1) e C(9; 1)	45
Figura 22	Diferença entre resultados do MEC e MEF para o problema representado na figura 21 para o ponto A	46
Figura 23	Valores de concentração no canal, considerando: $D = 0.05m^2/s, v_x = 0.1m/s, v_y = 0.01m/s$ nos pontos A(3; 1), B(6; 1) e C(9; 1)	46

Figura 24	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=2$ s, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$	47
Figura 25	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=10$ s, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$	47
Figura 26	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=50$ s, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$	47
Figura 27	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=80$ s, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$	47
Figura 28	Geometria e condições de contorno para o experimento 3	48
Figura 29	Canal com carga contínua lançada lateralmente: evolução temporal da concentração nos pontos B e C.	49
Figura 30	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=2$ s .	49
Figura 31	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=28$ s	50
Figura 32	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=100$ s	50
Figura 33	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=112$ s	50
Figura 34	Domínio quadrado: geometria, condições de contorno e posição do subdomínio com condição inicial não nula	51
Figura 35	Malha utilizada no MEF	51

Figura 36	Malha utilizada no MEC	52
Figura 37	Domínio quadrado: evolução temporal da concentração do contaminante nos pontos A e B.	52
Figura 38	Domínio quadrado: evolução temporal da concentração do contaminante nos pontos A e B com a malha mais refinada.	53
Figura 39	Espalhamento do contaminante no ponto de lançamento: Comparação entre MEC e MEF no nó $x = 5\text{m}$ e $y = 5\text{m}$	54
Figura 40	Concentração, em mg/L, no instante $t=0\text{s}$	55
Figura 41	Concentração, em mg/L, no instante $t=2\text{s}$	55
Figura 42	Concentração, em mg/L, no instante $t=10\text{s}$	56
Figura 43	Concentração, em mg/L, no instante $t=20\text{s}$	56
Figura 44	Concentração, em mg/L, no instante $t=40\text{s}$	57
Figura 45	Concentração, em mg/L, no instante $t=100\text{s}$	57
Figura 46	Perfil de velocidades parabólico: evolução temporal da concentração do contaminante nos pontos A e B.	59
Figura 47	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=2\text{s}$.	59
Figura 48	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=10\text{s}$	59

Figura 49	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=20s$	59
Figura 50	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=50s$	60
Figura 51	Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=55s$	60

Lista de Símbolos

D	Coefficiente de Difusão turbulenta
v_x	Velocidade na direção x
v_y	Velocidade na direção y
C	Concentração do escalar de interesse
C^*	Solução Fundamental
q	Derivada Normal de C
q^*	Derivada Normal de C^*
\dot{C}	Derivada temporal
K_0	Função modificada de Bessel do segundo tipo e ordem 0
K_1	Função modificada de Bessel do segundo tipo e ordem 1

Resumo

Modelos matemáticos são utilizados para representar sistemas físicos, de maneira que se possam quantificar as informações obtidas com esse modelo, entendendo melhor o que acontece nesse sistema. A equação de difusão-advecção pode ser utilizada para descrever o transporte de poluentes, auxiliando na solução de problemas ambientais, como por exemplo, o estudo da distribuição espacial de contaminantes em reservatórios ou rios. O modelo matemático de transporte difusivo-advectivo bi-dimensional, que descreve o transporte de certa substância em um meio fluido, será resolvido aqui utilizando o Método dos Elementos de Contorno (MEC). Os princípios fundamentais para a formulação básica do MEC serão apresentados para o problema proposto. Também serão incluídos alguns exemplos numéricos para verificação e validação do método. Duas formulações são desenvolvidas, em uma delas é possível considerar uma forma generalizada para campos de velocidades variável no espaço. Com a presença de integrais de domínio, é requerida sua discretização, que é feita com o emprego de células triangulares. Os resultados obtidos com o MEC serão comparados com resultados numéricos obtidos com o SisBaHiA[®] que utiliza o Método dos Elementos Finitos (MEF) na discretização espacial.

Palavras-chave: Difusão-Advecção, Elementos de Contorno, Transporte de Contaminante.

Abstract

Mathematical models are used to represent physical systems, so that one can quantify the information obtained from this model, better understanding of what happens in this system. The advection-diffusion equation can be used to describe the transport of pollutants, helping to solve environmental problems, such as the study of the spatial distribution of contaminants in rivers or reservoirs. The mathematical model for diffusion-advective transport two-dimensional, which describes the transport of a substance in a fluid medium, here will be resolved using the Boundary Element Method (BEM). The fundamental principles for the BEM basic formulation will be presented to the proposed problems. Also included are some numerical examples for verification and validation of the method. Two formulations are developed in one of them can be considered a generalized form for variable velocity fields in space. With the presence of field integrals, a discretization is required, which is made with the use of triangular cells. The results obtained are compared with the Finite Element Method (FEM) with the numerical results of SisBaHiA[®] using the MEF to spatial discretization.

Key-words: Convection-Diffusion, Boundary Elements Methods, Contaminant Transport.

1 INTRODUÇÃO

Diversos fenômenos físicos têm sido, ao longo da história, objeto de estudos e pesquisas. Do ponto de vista matemático, os fenômenos físicos podem ser representados através de equações diferenciais; de acordo com Leithold (1990a), as equações diferenciais têm uma importância muito grande nas aplicações da matemática. A indagação sobre a evolução de um dado fenômeno susceptível de tratamento matemático está ligada, quase sempre, a uma equação diferencial. Muitos fenômenos que ocorrem na óptica, eletricidade, ondulatória, magnetismo, mecânica dos fluidos e na biologia, podem ser descritos através de uma equação diferencial parcial. Em Greenberg (1998), lê-se: As formulações matemáticas de problemas em ciência e engenharia são geralmente direcionadas por equações envolvendo derivadas de uma ou mais funções desconhecidas. Tais equações são chamadas de equações diferenciais. Essas equações, ou um conjunto de equações, são frequentemente chamadas de modelos matemáticos.

Os modelos matemáticos são simplificações feitas a partir da realidade e podem ser expressos em forma de equações matemáticas, para analisar alguns aspectos dos sistemas de interesse. O modelo que simula o transporte de uma substância é uma equação diferencial que é conhecida como equação de advecção-difusão, e é utilizada para descrever o transporte de poluentes, auxiliando na solução de problemas ambientais como, por exemplo, o estudo da distribuição espacial de contaminantes em reservatórios ou rios.

Para uma gestão eficaz dos recursos hídricos é necessário monitorar os sistemas para assim entender melhor como atuam os agentes que provocam a degradação desses recursos, e com isso, desenvolver uma melhor gestão integrada para minimizar os danos causados por essa degradação (CUNHA et al., 2006). A introdução de constituintes prejudiciais em corpos d'água deve ser controlada para que suas concentrações permaneçam abaixo de limites estabelecidos pelos órgãos ambientais para seu uso.

No caso de um sistema de gerenciamento ambiental, isso pode ser feito utilizando um modelo matemático que tenha a capacidade de simular as condições de transporte

do constituinte de interesse. Neste contexto, modelos numéricos que tenham capacidade de simular a dispersão de poluentes podem ser empregados como suporte na escolha de estratégias mais eficazes relacionadas aos estudos dos impactos do lançamento de efluentes de esgotos em rios e em áreas costeiras, por exemplo.

Rios e estuários são locais onde geralmente ocorrem lançamentos de efluentes nos processos de deposição dos resíduos gerados pela atividade humana. Conseqüentemente, pode ser de grande importância conhecer com antecipação quais os danos que podem ocorrer em determinados locais em função do despejo de cargas poluidoras nestes ambientes aquáticos (PORTO et al., 1991, p.69).

Modelos matemáticos são utilizados para representar sistemas ambientais, de maneira que seja possível quantificar as informações obtidas, para que se possa entender o que acontece no sistema que está sendo analisado. A equação de transporte difusivo-adectivo pode ser utilizado no estudo de qualidade de água, importante ferramenta no gerenciamento e planejamento ambiental, tendo tais modelos apresentado um grande avanço com o desenvolvimento dos computadores (FRAGOSO; MARQUES; FERREIRA, 2009).

Obter uma solução exata para o sistema de equações gerado por estas formulações matemática, em geral, não é algo trivial, devido ao grande número de parâmetros presentes nesses modelos, segundo Fragoso, Marques e Ferreira (2009).

A vasta gama de fatores e processos físicos, químicos e biológicos dificulta a análise quantitativa de ecossistemas aquáticos. Devido a isso tem surgido nos últimos anos diversas soluções numéricas para modelos de transporte de poluentes em corpos de água.

Os computadores têm fundamental importância nas soluções numéricas das formulações matemáticas: Petres (2014) cita que com o desenvolvimento dos computadores e o aumento na capacidade de processamento e armazenamento tornou-se possível analisar a dinâmica complexa de muitos fenômenos através de simulações cada vez mais realistas.

Modelos numéricos para a solução dos modelos de escoamento de fluídos, em sua grande maioria, foram inicialmente desenvolvidos utilizando o Método das Diferenças Finitas (MDF). Posteriormente o Método dos Volumes Finitos (MVF) surgiu como uma poderosa ferramenta nessa área (MALISKA, 1995). Após a década de 70, o Método dos Elementos Finitos (MEF) começou a ganhar espaço na solução desse tipo de problema por sua capacidade de lidar com malhas em domínios com geometrias complexas. Atualmente

o Método dos Elementos de Contorno (MEC) também tem sido empregado na solução de diversos problemas complexos de transporte com grande sucesso.

Este trabalho mostra o desenvolvimento e a implementação de duas soluções numéricas da equação de difusão-advecção transiente bi-dimensional utilizando o MEC. A primeira formulação utiliza como solução fundamental uma função que considera os termos advectivos da equação em questão: essa solução fundamental utilizada pode ser encontrada em Romero e Benitez (2008). A segunda formulação utiliza a solução fundamental da equação de difusão pura, apresentada por Brebbia e Dominguez (1989). Nas duas formulações, a presença de uma integral de domínio impõe a necessidade da discretização do domínio. Devido à presença dessa integral a formulação desenvolvida será denominada MEC-D, onde a letra D representa domínio.

Em uma das formulações apresentadas para o MEC, foi implementado um campo de velocidades variável no espaço, considerando uma distribuição do tipo parabólica ao longo da secção transversal. Os modelos que consideram o campo de velocidades variável espacial e/ou temporalmente são em sua grande maioria, desenvolvidos utilizando o MEF e o MDF. Observe-se que o MEC também tem mostrado potencialidades na solução desses problemas; porém, a dificuldade na obtenção da solução fundamental que considera o campo de velocidades variável é um dos fatores que barra os avanços de formulações para o MEC. A principal contribuição desse trabalho é que, no desenvolvimento dessa formulação, não é necessário determinar uma função que descreva o perfil de velocidades; os valores das componentes de velocidades em cada nó do domínio e do contorno são informados para o sistema, e dessa forma, possibilitando a aplicação de qualquer tipo de campo de velocidade.

Os princípios fundamentais para a formulação básica do MEC serão apresentados para o problema proposto. Também serão incluídos alguns exemplos numéricos para verificação e validação do método. Os resultados são comparados com a solução do MEF e com a solução analítica, quando disponível.

Alguns pesquisadores apresentaram trabalhos referentes à solução dessa equação para o caso permanente, ou seja, independente do tempo. Uma característica comum a esses trabalhos é a consideração somente da componente v_x do vetor velocidade, isto é, os exemplos apresentados consideram que $v_y = 0$, ou seja, o transporte advectivo em questão é meramente unidimensional. O campo de velocidades com variação temporal e/ou espacial também é um tópico que não é abordado nas pesquisas com o MEC.

1.1 Objetivos

Esta tese tem como objetivo desenvolver a solução da equação de transporte transiente de substâncias, através da aplicação do Método dos Elementos de Contorno para análise do transporte de escalares conservativos em domínios bi-dimensionais, apresentar seus principais aspectos numéricos e comparar os resultados obtidos com a solução analítica, quando existir, e também com os resultados obtidos com o MEF, para os casos nos quais a solução analítica não é conhecida.

1.2 Objetivos específicos

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de duas formulações para o MEC, sendo uma delas mais generalizada para solução da equação de difusão-advecção com a possibilidade de utilização de campos de velocidades variável em todo o domínio. Os objetivos específicos propostos são: desenvolver e apresentar duas formulações do MEC para a equação de transporte de escalares em domínios bi-dimensionais, implementar em uma das formulações, o campo de velocidades variável no domínio, comparando os resultados numéricos obtidos com as formulações propostas para o MEC com os resultados do MEF, e com a solução analítica, quando disponível, para verificação dos resultados obtidos com o MEC.

2 JUSTIFICATIVA

Para uma gestão eficaz dos recursos hídricos é necessário monitorar os sistemas aquáticos, entender melhor como atuam os agentes que provocam sua degradação e, com isso, desenvolver uma melhor gestão integrada para minimizar as consequências dessa degradação (CUNHA; ROSMAN; FERREIRA, 2006). A introdução de constituintes prejudiciais em corpos d'água deve ser controlada para que suas concentrações permaneçam abaixo de limites estabelecidos.

Uma descrição que tenha uma boa acurácia na previsão dos processos de transporte de poluentes é extremamente importante para o efetivo gerenciamento dos processos que ocorrem (ZOPPOU; KNIGHT, 1999). De acordo com Dhawan, Kapoor e Kumar (2012) a equação de transporte difusivo-advectivo possui muitas aplicações físicas, tais como dispersão de sal dissolvido em águas subterrâneas, espalhamento de poluentes em rios e canais e muitos outros.

Pode-se resolver a equação de transporte por duas maneiras; analiticamente ou numericamente. Os métodos analíticos têm a desvantagem de serem aplicáveis apenas em problemas cujas hipóteses simplificadoras os desviam demasiadamente do fenômeno físico real. Além disso são aplicados, normalmente, a geometrias simples e condições de contorno também simples (MALISKA, 1995).

Devido à dificuldade na obtenção de soluções analíticas e às simplificações que devem ser introduzidas nos modelos, métodos numéricos têm sido empregados na solução desses problemas. A solução numérica de um modelo é mais versátil, pois é possível fazer considerações mais complexas dos problemas físicos e resolve-los em domínios com geometrias mais complexas, fazendo com que o modelo represente o fenômeno de interesse de maneira mais próxima da realidade. Maliska (1995) afirma que a experimentação numérica, ou técnicas numéricas de solução, praticamente não apresenta restrições, fornecendo resultados com grande rapidez.

Atualmente existem diversos métodos numéricos para solução de equações di-

ferenciais, mas os primeiros trabalhos foram desenvolvidos basicamente por Isaac Newton (1643-1729), Gottfried W. Leibniz (1643-1716) e posteriormente por Leonhard Euler (1707-1783): foi sobre os trabalhos desses pesquisadores que surgiram novos métodos mais modernos e com maior capacidade de solução. Atualmente os métodos mais difundidos na solução de problemas de engenharia, dentre outros, são: o Método das Diferenças Finitas (MDF) (BOYCE; DIPRIMA, 1986), o Método dos Volumes Finitos (MVF) (MALISKA, 1995), o Método dos Elementos Finitos (MEF) (BATHE, 1996) e o Método dos Elementos de Contorno (MEC) (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1989). O MEC tem sido empregado na solução de diversos problemas de várias áreas devido às potencialidades de suas aplicações.

Até a década de 70, o Método das Diferenças Finitas (MDF) era empregado com grande sucesso na solução de problemas de escoamentos de fluidos, mas havia limitações com relação ao tratamento de geometrias complexas, enquanto o MEF era mais empregado na área de estruturas na solução de problemas de elasticidade, pois era possível aplicar esse método em geometrias complexas mas, em contra partida, as ferramentas necessárias para tratar os termos convectivos que aparecem na equação não estavam bem desenvolvidas (MALISKA, 1995).

O surgimento do Método dos Volumes Finitos teve um grande impacto na solução dos problemas relacionados com a mecânica dos fluidos, pois a análise mais detalhada dos aspectos físicos de cada termo das equações estudadas permitiu o desenvolvimento de métodos mais robustos para tais aplicações. De acordo com Maliska (1995) a possibilidade de associar a interpretação física com a matemática influenciou de modo considerável para que muitos analistas envolvidos com o MDF passassem a usar o MVF. Por isso, o MVF tem sido muito utilizado na solução de problemas de escoamento de fluidos, pois Maliska (1995) afirma que a maioria dos pacotes computacionais desenvolvidos nos últimos anos para a solução de problemas de fluidos com transferência de calor utilizam o MVF.

Encontrar a solução numérica da equação de advecção-difusão não é uma tarefa simples devido à natureza da equação, que contém um termo não dissipativo, o termo advectivo. Os efeitos, difusivo e advectivo, podem ser relacionados através do número de Péclet, que é dado por (QIU; WROBEL; POWER, 1998):

$$P_e = \frac{v\Delta l}{D} \quad (2.1)$$

onde v é a componente da velocidade e Δl é a mínima escala espacial utilizada e D é o coeficiente de difusão molecular dado em m^2/s . Note que é necessário calcular o

número de Péclet na direção x (P_{ex}), na direção y (P_{ey}) e na direção z (P_{ez}), sendo x , y e z coordenadas cartesianas. A equação 2.1 descreve a razão entre o balanço dos fluxos advectivo e difusivo de massa. O termo de velocidade v tem uma escala geralmente da ordem de 10^{-1} m/s, o coeficiente D na escala molecular é da ordem de 10^{-6} a 10^{-10} m²/s.

Experimentalmente verificou-se que, para se ter estabilidade na solução da equação de transporte, o valor de P_e deve ser tal que $P_e < 1$ (WROBEL et al., 1989). Como v é uma propriedade do escoamento e D , uma propriedade físico-química do contaminante e do fluido, o único parâmetro que é possível alterar é o comprimento $\Delta x, y$ da escala espacial utilizado na discretização; sendo assim, para que o modelo esteja em uma escala resolvível o coeficiente D utilizado deve estar na escala turbulenta, onde seu valor é na ordem de 10^0 m²/s.

Alguns pesquisadores apresentaram trabalhos referentes à solução da equação de advecção-difusão utilizando o MEC. Grigoriev e Dargush (2005) propõem a solução da equação em domínios bi-dimensionais no estado transiente, mas os resultados apresentados trazem somente os valores espaciais, não apresentando a evolução temporal da solução obtida. Outra característica importante do trabalho é que seu foco que é voltado para a difusão de calor com o termo convectivo, mas a velocidade do fluxo convectivo é pequena, fazendo com que nos problemas apresentados a difusão seja predominante. Situação semelhante acontece no trabalho desenvolvido por Romero e Benitez (2008), onde a equação de transporte é abordada considerando os termos difusivo e advectivo. Esse trabalho apresenta um problema cujo número de Péclet é aproximadamente 10, um valor elevado, mas esse problema é resolvido somente para regime permanente, ou seja, trata a equação independente do tempo. A mesma situação ocorre no segundo problema analisado. O último exemplo apresentado por Romero e Benitez (2008) considera o problema transiente, mas os resultados apresentam somente os valores dos gradientes nas direções longitudinal e transversal, não apresentando resultados das concentrações no domínio.

Li e Evans (1991) publicaram um trabalho com a equação para transporte de calor com convecção em regime permanente, e resolveram o problema fazendo uma transformação na equação original. Posteriormente Qiu, Wrobel e Power (1998) apresentaram soluções para regime permanente, ou seja, independente do tempo, também em domínios bi-dimensionais, mas nesse trabalho a proposta é a solução das integrais singulares que aparecem na formulação do MEC, para elevados valores do número de Péclet, com variação entre 10^4 e 10^7 , encontrados em eletromagnetismo, onde as velocidades são muito altas.

Uma característica comum a todos esses trabalhos citados é que são consideradas apenas a componente v_x do vetor velocidade, isto é, os exemplos apresentados consideram que $v_y = 0$ e, com isso, o transporte advectivo em questão é meramente unidimensional. Bozkaya e Tezer-Sezgin (2007) apresentam o desenvolvimento da equação para o problema dependente do tempo, utilizando uma solução fundamental dependente do tempo.

Em relação à solução numérica do problema em questão, outros métodos têm sido usados. O Método das Diferenças Finitas tem sido abordado com sucesso durante os últimos anos e alguns trabalhos podem ser citados Zhao, Xu e Valliappan (1994), Lowry e Li (2005) e Prieto, Munoz e Corvinos (2011) para a solução de problemas em domínios bi e tridimensionais. Outro método que tem sido utilizado com sucesso é o MEF, para equação bi-dimensional é apresentada no trabalho de Dhawan, Kapoor e Kumar (2012), que empregam o MEF aplicando funções B-spline para aproximações espaciais.

A busca por soluções analíticas para a equação de difusão-advectação também tem atraído pesquisadores, Lowry e Li (2005) apresentam uma solução analítica da equação bidimensional transiente, aplicando transformada de Laplace. Nesse trabalho, o método aplicado requer que o domínio seja discretizado, empregando um número finito de pontos. Outro trabalho que apresenta solução analítica para o mesmo problema com coeficientes variáveis é apresentado por Zoppou e Knight (1999), para domínios bi e tridimensionais. No trabalho apresentado por Yada, Kumar e Kumar (2012), a solução é para domínios bi-dimensionais, considerando um pulso inicial no domínio.

Os trabalhos que apresentam soluções analíticas são importantes, principalmente para a validação dos modelos numéricos, mas do ponto de vista de aplicações práticas eles são limitados pois os trabalhos citados apresentam soluções para alguns casos específicos, onde apenas condições de contorno e inicial para casos particulares são apresentadas. Assim, a busca por modelos numéricos que apresentem maior potencial de aplicação para vários tipos de situações e condições, continua sendo essencial.

Nesse trabalho, a proposta é aplicar o MEC na solução da equação de difusão-advectação para diversos problemas, entre os quais aqueles onde o perfil de velocidade é variável.

Como a maioria dos problemas propostos não possuem solução analítica, os resultados obtidos com as formulações do MEC serão comparados com os resultados numéricos obtidos com o MEF. O objetivo dessas comparações não é levantar discussões sobre qual método é mais eficaz, mas sim validar os resultados numéricos do MEC com um modelo denominado SisBaHiA[®].

O SisBaHiA[®], é um software de propriedade da fundação Coppetec, órgão da Universidade Federal do Rio de Janeiro. É um sistema de hidrodinâmica ambiental, que conta com módulos para a solução da equação de transporte e também das reações cinéticas que podem ocorrer em escoamentos de sistemas ambientais. O software resolve as equações dos modelos empregando o MEF na discretização espacial e o MDF na discretização temporal. Os resultados desse sistema serão utilizados para validar os resultados obtidos com o MEC, pois o modelo que já foi validado em vários trabalhos. Por exemplo, Cunha, Monteiro e Rosman (2002) apresentam a modelagem bi-dimensional para a equação de transporte em rios: neste trabalho é desenvolvido um modelo bi-dimensional de transporte Euleriano, aplicado a escalares passivos e não-conservativos. Em Cunha, Ferreira e Rosman (2006) discute-se a capacidade de previsão de um modelo de qualidade de água, a ser utilizado como instrumento tecnológico capaz de avaliar impactos do lançamento de carga poluidora. Cunha et al. (2006) aplicam o sistema na solução dos modelos de qualidade de água e hidrodinâmica na baía de Sepetiba, para simular a poluição devido a efluentes de esgoto. Valores de medições em campo foram utilizados para calibrar o modelo, e os resultados numéricos obtidos foram consistentes com os dados amostrais, mostrando que o modelo foi corretamente calibrado. Outros trabalhos podem ser verificados na página do modelo, disponível em <http://www.sisbahia.coppe.ufrj.br/>.

3 MODELO DE TRANSPORTE DIFUSIVO-ADVECTIVO

A equação da difusão-advecção é uma equação diferencial parcial de segunda ordem, que descreve o balanço de massa de um soluto. Para iniciar o estudo dos modelos são necessárias algumas definições. Concentração é a forma adotada para se expressar a distribuição de um constituinte no fluido que está sendo analisado e advecção é o nome dado ao transporte de um constituinte pelo campo de velocidades do meio fluido que o contém. Difusão molecular surge do movimento decorrente da agitação das moléculas de um fluido, promovendo o espalhamento das partículas do constituinte e a difusão turbulenta é análoga à difusão molecular mas com origem no movimento turbulento dos fluidos. Para mais detalhes sobre essas definições e outros parâmetros, é indicado ao leitor Porto et al. (1991).

3.1 Princípio de Conservação de Massa de Solute

De acordo com Porto et al. (1991), "quando um constituinte é imerso em um meio fluido ele é sujeito a processos de transporte por advecção e/ou difusão, geração e extinção através de reações com outras grandezas ou com o próprio fluido". Assim a lei de conservação de massa diz que a variação da massa de um soluto deve ser igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída mais as reações de perda ou ganho de massa.

Considerando um volume de controle delimitado por uma superfície S definida em um sistema de coordenadas (x, y, z) , conforme ilustra a figura 1. Porto et al. (1991) define o fluxo (F) como sendo a quantidade elementar de massa dM que passa através de um elemento dS da superfície durante um intervalo infinitesimal de tempo dt . O fluxo é representado por:

$$\vec{F} = \frac{dM/dt}{d\vec{S}} \quad (3.1)$$

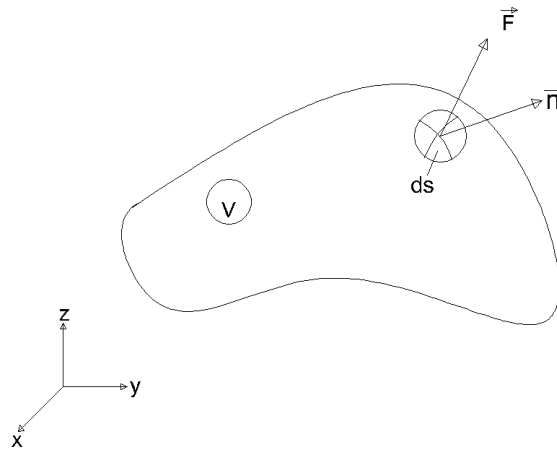


Figura 1: Fluxo no volume de controle

Assim, o fluxo total $J(t)$ que atravessa a superfície S em um dado instante de tempo pode ser obtido como Leithold (1990b)

$$J(t) = \int_S (\vec{F} \cdot \vec{n}) dS \quad (3.2)$$

A equação 3.2 pode ser escrita para todo o volume V se for aplicado o teorema da divergência, conforme descrito por Leithold (1990b)

$$\int_S (\vec{F} \cdot \vec{n}) dS = \int_V (\nabla \cdot \vec{F}) dV \quad (3.3)$$

Se $C(x, y, z, t)$ for a concentração do soluto, então a quantidade total de massa desse soluto presente no volume de controle será

$$M(t) = \int_V C(x, y, z, t) dV \quad (3.4)$$

Se não ocorrer perda ou ganho de massa do soluto dentro do volume de controle, para a conservação de massa a seguinte relação dever ser satisfeita

$$J(t) + \frac{\partial M(t)}{\partial t} = 0 \quad (3.5)$$

Agora, substituindo as equações 3.2, 3.3 e 3.4 na equação 3.5 o que se tem é:

$$\int_V \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F} \right) dV = 0 \quad (3.6)$$

Para a igualdade da equação 3.6 ser satisfeita, o integrando deve ser nulo, logo

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F} = 0 \quad (3.7)$$

A equação 3.7 é de extrema importância nos estudos de transporte de poluente, desde que o fluxo \vec{F} seja conhecido.

3.2 Lei de Fick

Em 1855 o fisiologista alemão Adolph Fick propôs a lei que leva seu nome para descrever o fenômeno da difusão molecular de um material em um solvente. Fick propôs a seguinte equação para representar o fluxo difusivo de massa (PORTO et al., 1991)

$$\vec{F} = -D \cdot \nabla C \quad (3.8)$$

onde D é uma grandeza escalar que representa a difusão molecular.

A equação 3.8 descreve somente o fluxo devido à difusão que ocorre no meio, mas quando o fluido que recebe o soluto possui velocidade, o transporte não ocorre apenas por difusão, mas também por advecção, assim a parcela advectiva deve ser adicionada à parcela difusiva, e o fluxo considerando as parcelas difusiva e advectiva é escrito como

$$\vec{F} = \vec{V}C - D \cdot \nabla C \quad (3.9)$$

onde \vec{V} é o vetor velocidade, com componentes v_x , v_y e v_z nas direções x , y e z , respectivamente.

Substituindo a equação 3.9 na equação 3.7 tem-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}C - D \cdot \nabla C) = 0 \quad (3.10)$$

Desenvolvendo a equação 3.10 tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial(v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z C)}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (3.11)$$

Desenvolvendo somente as derivadas espaciais do lado esquerdo de 3.11 tem-se:

$$\frac{\partial(v_x C)}{\partial x} + \frac{\partial(v_y C)}{\partial y} + \frac{\partial(v_z C)}{\partial z} = v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} + C \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \quad (3.12)$$

Considerando a condição de incompressibilidade, dada pela equação 3.13 abaixo (SCHLICHTING, 1979).

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (3.13)$$

o transporte de massa, que considera os efeitos difusivo e advectivo, pode ser representado pela seguinte equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (3.14)$$

A equação 3.14 é utilizada na modelagem de problemas de qualidade de água, para simular o transporte de substâncias dissolvidas em rios, estuários e águas subterrâneas. Frequentemente têm sido utilizados modelos numéricos para sua solução, formados por uma ou mais equações diferenciais que descrevem a evolução de processos físicos como o de transferência por advecção e por difusão. Essa equação é também frequentemente utilizada para descrever fenômenos complexos de processos de transporte físico-químico (ROMERO; BENITEZ, 2008).

3.2.1 Difusão turbulenta

De acordo com Porto et al. (1991), os escoamentos que acontecem em rios e estuários são turbulentos pois, de forma geral, um escoamento turbulento caracteriza-se, entre outras coisas, por ser desorganizado e variável no tempo. Esse conceito de turbulência está ligado ao fato de que não é possível prever com exatidão o que acontece nesse escoamento. Nesse sentido, conclui-se que não é possível determinar de maneira exata qual a concentração do contaminante em um ponto do domínio em um determinado instante de tempo. Para lidar com essa situação, Reynolds propôs uma abordagem para esse problema, a hipótese de que uma variável turbulenta em um certo ponto do espaço

pode ser decomposta em duas parcelas, uma parcela é o valor médio em uma escala de um intervalo de tempo Δt e a outra parcela é uma flutuação turbulenta que oscila de maneira imprevisível em torno dessa média. Para a concentração é possível escrever:

$$C = \bar{C} + c' \quad (3.15)$$

onde C é o valor instantâneo, \bar{C} é o valor médio temporal e c' é a flutuação turbulenta da concentração. Essa proposta foi feita em 1851 e é empregada até os dias de hoje (TENNEKES; LUMLEY, 1983).

Substituindo 3.15 em 3.14 e fazendo a mesma consideração para os termos de velocidade tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{C} + c')}{\partial t} + (\bar{v}_x + v'_x) \frac{\partial(\bar{C} + c')}{\partial x} + (\bar{v}_y + v'_y) \frac{\partial(\bar{C} + c')}{\partial y} + (\bar{v}_z + v'_z) \frac{\partial(\bar{C} + c')}{\partial z} = \\ D \left(\frac{\partial^2(\bar{C} + c')}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\bar{C} + c')}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(\bar{C} + c')}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Agora integrando a equação 3.16 em um intervalo Δt , cada termo da equação 3.16 pode ser escrito como:

$$\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\bar{C} + c')}{\partial t} dt = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\Delta t} \left(\int_t^{t+\Delta t} \bar{C} dt + \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} c' dt}_{=0} \right) \right] = \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} (\bar{v}_x + v'_x) \frac{\partial(\bar{C} + c')}{\partial x} dt = \\ \frac{1}{\Delta t} \left(\bar{v}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \int_t^{t+\Delta t} dt + \underbrace{\bar{v}_x \frac{\partial}{\partial x} \int_t^{t+\Delta t} c' dt}_{=0} + \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} v'_x dt}_{=0} + \int_t^{t+\Delta t} v'_x \frac{\partial c'}{\partial x} dt \right) = \\ \bar{v}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} v'_x \frac{\partial c'}{\partial x} dt = \bar{v}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \overline{v'_x \frac{\partial c'}{\partial x}} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial^2 (\overline{C} + c')}{\partial x^2} dt = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{\Delta t} \left(\int_t^{t+\Delta t} \overline{C} dt + \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} c' dt}_{=0} \right) \right] = \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x^2} \quad (3.19)$$

Aplicando os mesmos procedimentos para os outros termos da equação e substituindo 3.17, 3.18 e 3.19 em 3.16 resulta em:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{v_x} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2} \right) - \left(\overline{v'_x \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v'_y \frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{v'_z \frac{\partial c'}{\partial z}} \right) \quad (3.20)$$

O último termo que está entre parenteses na equação 3.20 pode ser reescrito como:

$$\left(\overline{v'_x \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v'_y \frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{v'_z \frac{\partial c'}{\partial z}} \right) = \left(\frac{\partial \overline{v'_x c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z c'}}{\partial z} \right) - c' \left(\frac{\partial \overline{v'_x}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z}}{\partial z} \right) \quad (3.21)$$

O último termo da equação 3.21, que está multiplicando c' , é a condição de incompressibilidade, sendo que essa parcela é igual a zero; assim a equação 3.20 fica:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{v_x} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2} \right) - \left(\frac{\partial \overline{v'_x c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z c'}}{\partial z} \right) \quad (3.22)$$

De acordo com Porto et al. (1991) os fluxos de flutuações turbulentas possuem caráter difusivo, assim é possível adotar a seguinte representação para esses fluxos:

$$\overline{v'_x c'} = -\epsilon_x \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} \quad (3.23)$$

$$\overline{v'_y c'} = -\epsilon_y \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} \quad (3.24)$$

$$\overline{v'_z c'} = -\epsilon_z \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} \quad (3.25)$$

onde ϵ_x , ϵ_y e ϵ_z são conhecidos como coeficientes de difusão turbulenta. Substituindo 3.23, 3.24 e 3.25 em 3.22 e agrupando os termos semelhantes, a equação resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{v_x} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[(D + \epsilon_x) \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(D + \epsilon_y) \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(D + \epsilon_z) \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

Fazendo $D + \epsilon_x = D_x$, $D + \epsilon_y = D_y$ e $D + \epsilon_z = D_z$, a equação 3.26 pode ser escrita de maneira mais simplificada.

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{v_x} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} \right) \quad (3.27)$$

Os processos que ocorrem na natureza são em sua grande maioria complexos e os parâmetros da equação podem variar muito com a posição espacial e/ou temporal assim como com as condições de contorno. Assim, as velocidades e o coeficiente de difusão podem ser da forma $\overline{v_x} = \overline{v_x}(x, y, z, t)$, $\overline{v_y} = \overline{v_y}(x, y, z, t)$, $\overline{v_z} = \overline{v_z}(x, y, z, t)$ e $D_i = D_i(x, y, z, t)$, com $i = 1, 2, 3$; devido a isso, a equação 3.27, no caso mais geral, é uma equação não linear.

Se o campo de velocidades e o coeficiente de difusão são uniformes e permanentes, a equação pode ser escrita como:

$$D \nabla^2 \overline{C} - \vec{V} \cdot \nabla \overline{C} = \frac{\partial \overline{C}}{\partial t} \quad (3.28)$$

A solução dessa equação apresenta uma grande possibilidade de aplicações, como na análise de dispersão de poluentes em áreas costeiras apresentado por Solheid, Gobbi e Torii (2010), simulações em baías pode ser visto em Cunha, Rosman e Ferreira (2006), estudos de variações de temperatura em colunas de água, que podem ter efeitos nos processos químicos e biológicos em lagos (ANTONOPOULOS; GIANNIOU, 2003). Problemas interessantes na eletroquímica aparecem em um trabalho apresentado por Qiu, Wrobel e Power (1998). Estudos para análise da dispersão de poluentes na atmosfera, dentre outros

problemas, podem ser modelados utilizando a equação em questão.

A equação 3.27 é uma equação tri-dimensional; nesse trabalho os problemas propostos são em domínio bi-dimensional, ou seja, considera-se que a concentração \bar{C} não dependente de z ; para isso, definindo um sistema de coordenadas onde $z = h$ é a posição da superfície livre da água e $z = 0$ corresponde ao fundo, é possível considerar uma concentração média ao longo de z , conforme apresentado por Porto et al. (1991), como:

$$\bar{\bar{C}}(x, y, t) = \frac{1}{h} \int_0^h \bar{C}(x, y, z, t) dz \quad (3.29)$$

onde $\bar{\bar{C}}$ é a concentração média na direção z . Integrando na direção z a equação 3.27 e aplicando a equação 3.29 tem-se

$$\frac{\partial \bar{\bar{C}}}{\partial t} + \bar{v}_x \frac{\partial \bar{\bar{C}}}{\partial x} + \bar{v}_y \frac{\partial \bar{\bar{C}}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{\bar{D}}_x \frac{\partial \bar{\bar{C}}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{\bar{D}}_y \frac{\partial \bar{\bar{C}}}{\partial y} \right) \quad (3.30)$$

onde $\bar{\bar{D}}_x$ e $\bar{\bar{D}}_y$ são os coeficientes de dispersão nas direções x e y . Considera-se que os processos dispersivos nas direções x e y são iguais, ou seja, $\bar{\bar{D}}_x = \bar{\bar{D}}_y = D$. Desse ponto do texto em diante, os valores médios definidos até aqui serão representados sem as barras superiores; por exemplo, a concentração será representada somente por C . Assim, a equação 3.30 fica:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (3.31)$$

3.3 Condições de Contorno e Inicial

Um dos pontos críticos dos métodos numéricos e análises computacionais, principalmente de escoamentos, é a imposição das condições de contorno. Em modelos numéricos é necessário que o contorno do problema seja truncado, ou seja, estabelecido um domínio fictício em problemas com domínios infinitos ou semi-infinitos, gerando assim contornos artificiais onde condições aproximadas devem ser impostas.

Nas aplicações mostradas neste trabalho, dois tipos de contornos devem ser considerados: contornos de terra e contornos abertos. Em geral, contornos de terra representam as margens do corpo d'água em questão e possibilitam pontos de entrada ou saída

de fluxo como, por exemplo, rios e pequenos afluentes. Contornos abertos representam os limites do domínio na água, tais como entradas em baías, estuários ou reservatórios; nos contornos abertos os fluxos difusivos são desprezados. Condições de contorno de terra podem ser escritas de maneira generalizada como:

$$U_n C - D \frac{dC}{dn} = F_n^* \quad (3.32)$$

onde o sub-índice n indica a direção normal, F_n^* é o fluxo normal prescrito e U_n é a componente normal da velocidade. Em entradas de rios, normalmente F_n^* e U_n são diferentes de zero. Quando U_n e F_n^* são nulos, a equação 3.32 é reduzida a:

$$D \frac{dC}{dn} = 0 \quad (3.33)$$

a condição inicial, sobre todo o domínio, é:

$$C(x, y, 0) = C_0(x, y) \quad (3.34)$$

3.3.1 Modelos Numéricos para a Equação de Advecção e Difusão

Como soluções analíticas só são possíveis em alguns casos particulares para problemas simplificados, são utilizados métodos numéricos para solução das equações dos modelos, como pode ser verificado em Szabo e Babuska (1991) “Por causa de suas complexidades, modelos matemáticos generalizados não permitem soluções exatas”. Neste trabalho, nas aplicações analisadas os resultados serão comparados com a solução analítica, quando disponível, e com o MEF, quando a solução analítica não pode ser desenvolvida.

3.3.1.1 Método dos Elementos Finitos

Neste trabalho os resultados do MEF serão obtidos utilizando o SisBaHiA[®] – Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental, que é um sistema profissional de modelos computacionais registrado pela Fundação Coppetec, órgão gestor de convênios e contratos de pesquisa do COPPE/UFRJ - Instituto Aberto Luiz Coimbra de Pós Graduação e Pesquisa de Engenharia (COPPE) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) (ROSMAN, 2005). O modelo SisBaHiA[®] utiliza o MEF na discretização espacial das equações.

No MEF o domínio a ser estudado, representado por Ω , é dividido em N subdomínios, representados por Ω_s , e a integração em todo o domínio pode ser obtida pela soma das integrais em cada subdomínio (WROBEL et al., 1989). As integrais podem ser representadas por:

$$\int_{\Omega} R d\Omega = \sum_{s=1}^N \int_{\Omega_s} R d\Omega_s \quad (3.35)$$

Segundo esse método, as funções base são construídas a partir de funções definidas em cada um dos elementos (subdomínios) no qual o domínio foi dividido. As funções definidas em cada elemento são denominadas funções de forma.

3.3.1.2 Equações do SisBaHiA[®]

A equação de transporte Difusivo-Advectivo que o SisBaHiA[®] utiliza é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(H \left[D_{ij} \delta_{jk} + \frac{\Lambda_k^2}{12} \left| \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \right| \right] \frac{\partial C}{\partial x_k} \right) \quad (3.36)$$

onde v_i são as componentes da velocidade na direção x_i promediadas na direção vertical, H é a altura da coluna d'água, D_{ij} é o tensor que representa o coeficiente de difusão turbulenta de massa e δ_{jk} representa o delta de Kronecker, com $i, j = 1, 2$, $k = 1, 2, 3$, quando $k = 3$ indica a dimensão do tempo, e Δ_k é a largura espacial e temporal do filtro Gaussiano utilizado no SisBaHiA[®], (CUNHA; ROSMAN; FERREIRA, 2006).

A equação utilizada no SisBaHiA[®] considera o transporte difusivo em duas parcelas; uma parcela anisotrópica e outra variável, com a advecção. No entanto, simulações simplificadas podem ser feitas desabilitando alguns termos, o modelo utilizado pelo SisBaHiA[®] considera a difusão isotrópica e uniforme, sendo possível a comparação entre as formulações numéricas do MEC e do MEF. Após essas considerações, a equação resolvida pelo no SisBaHiA[®] passa a ser:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} \quad (3.37)$$

com $i = 1, 2$.

A discretização temporal é feita seguindo os procedimentos do método do fatoramento implícito descrito por Beam e Warming (1978). Para uma equação não linear conforme segue:

$$\frac{\partial}{\partial t}[C(x, y, t)] = L_1(C)L_2(C) \quad (3.38)$$

onde L_1 e L_2 são operadores lineares. A derivada é aproximada por:

$$\frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (L_1^{n+1}L_2^n + L_1^nL_2^{n+1}) \quad (3.39)$$

Aplicando a formulação do MEF à equação 3.36, discretizando temporalmente e integrando por partes uma vez, tem-se:

$$\sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^{NN} \{W_{ij}C_j^{n+1}\} = \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^{NN} \{Z_{ij}C_{ij}^n\} + (F_N^{n+1} + F_N^n)_j \int_{\Gamma} \phi_i \phi_j d\Gamma \quad (3.40)$$

sendo as matrizes W_{ij} e Z_{ij} dadas por:

$$W_{ij} = (A + B + C + D + E + F)_{ij}$$

$$Z_{ij} = (A - B - C - D - E - F)_{ij}$$

e:

$$A_{ij} = \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{2}{\Delta t} \varphi_i \varphi_j \sum_{k=1}^{NN} P_{t_k} \varphi_k \right\} d\Omega_e \quad (3.41)$$

$$B_{ij} = \int_{\Omega_e} \left\{ \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \sum_{k=1}^{NN} P_{x_k} \varphi_k \right\} d\Omega_e \quad (3.42)$$

$$C_{ij} = \int_{\Omega_e} \left\{ \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \sum_{k=1}^{NN} P_{y_k} \varphi_k \right\} d\Omega_e \quad (3.43)$$

$$D_{ij} = \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \sum_{k=1}^{NN} P_{xx_k} \varphi_k \right\} d\Omega_e \quad (3.44)$$

$$E_{ij} = \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \sum_{k=1}^{NN} P_{xy_k} \varphi_k \right\} d\Omega_e \quad (3.45)$$

onde:

$$P_t = 1 - u_{xt} - v_{yt}, \quad P_x = U - u_{xx} - v_{yx}, \quad P_y = V - u_{xy} - v_{yy}$$

$$P_{xt} = \frac{T_{xt}}{H}, \quad P_{xx} = \frac{T_{xx}}{H}, \quad P_{yy} = \frac{T_{yy}}{H}$$

$$P_{yt} = \frac{T_{yt}}{H}, \quad P_{xy} = \frac{T_{xy}}{H}, \quad P_{yx} = \frac{T_{yx}}{H}$$

e

$$T_{xx} = H \left[D_{xx} + \frac{\Delta_x^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial x} \right| \right] \quad T_{xy} = H \left[D_{xy} + \frac{\Delta_y^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \right]$$

$$T_{yy} = H \left[D_{yy} + \frac{\Delta_y^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial y} \right| \right] \quad T_{yx} = H \left[D_{yx} + \frac{\Delta_x^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \right]$$

$$T_{xt} = H \frac{\Delta t^2}{12} \left| \frac{\partial U}{\partial t} \right| \quad T_{yt} = H \frac{\Delta t^2}{12} \left| \frac{\partial V}{\partial t} \right|$$

$$u_{xx} = \frac{1}{H} \frac{\partial T_{xx}}{\partial x} \quad u_{xy} = \frac{1}{H} \frac{\partial T_{xy}}{\partial x}$$

$$u_{yy} = \frac{1}{H} \frac{\partial T_{yy}}{\partial y} \quad u_{yx} = \frac{1}{H} \frac{\partial T_{yx}}{\partial y}$$

$$u_{xt} = \frac{1}{H} \frac{\partial T_{xt}}{\partial x} \quad u_{yt} = \frac{1}{H} \frac{\partial T_{yt}}{\partial y}$$

Nas equações 3.41 a 3.45 NN é o número de nós por elemento e N é o número de elementos. Na equação 3.40 n representa o passo de tempo. Nas equações acima u_{xx} , u_{xy} , u_{xt} , u_{yx} , u_{yy} , e u_{yt} são denominadas de velocidades difusivas. O último termo do lado direito da equação 3.40 traz as informações das condições de contorno do problema e, a partir dessa equação, é formado um sistema de equações lineares, no qual as incógnitas presentes são as concentrações, ou seja, os valores de C nos pontos internos e nos nós de contorno.

O conjunto de funções de interpolação φ_i quadráticas para os elementos quadrilaterais utilizados na discretização espacial do SisBaHiA[®] é dado por Wrobel et al. (1989)

$$\varphi_1 = \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 - \eta) \quad (3.46)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 - \eta) \quad (3.47)$$

$$\varphi_3 = \frac{1}{4}(\xi^2 + \xi)(\eta^2 + \eta) \quad (3.48)$$

$$\varphi_4 = \frac{1}{4}(\xi^2 - \xi)(\eta^2 + \eta) \quad (3.49)$$

$$\varphi_5 = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta^2 - \eta) \quad (3.50)$$

$$\varphi_6 = \frac{1}{2}(\xi^2 + \xi)(1 - \eta^2) \quad (3.51)$$

$$\varphi_7 = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta^2 + \eta) \quad (3.52)$$

$$\varphi_8 = \frac{1}{2}(\xi^2 - \xi)(1 - \eta^2) \quad (3.53)$$

$$\varphi_9 = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2) \quad (3.54)$$

com ξ e η representam as coordenadas locais do elemento.

3.3.1.3 O Método dos Elementos de Contorno

As técnicas de resolução com o emprego de equações integrais de contorno surgem como procedimentos numéricos alternativos para a resolução dos diversos problemas físicos usuais da engenharia, pois a solução do problema é determinada em pontos no contorno do problema, de onde surge a denominação do método. Em alguns problemas, integrais de domínio também são envolvidas no método; em geral, isso acontece devido à presença de forças de corpo, leis constitutivas não lineares e condições iniciais em problemas dependentes do tempo (OCHIAI; SLADEK; SLADEK, 2006).

Nas últimas décadas, o MEC recebeu atenção especial de pesquisadores do mundo todo; em decorrência, tem se tornado uma importante técnica numérica para resolver muitos problemas físicos. Devido ao intenso trabalho de pesquisa, um grande número de formulações foi desenvolvido para o MEC.

Uma tendência, evidenciada em vários trabalhos, por exemplo Soares (2009), é o acoplamento entre o MEC e o MEF. Mas o interesse em utilizar o MEC na solução de diversos problemas aplicados tem crescido consideravelmente, como pode ser observado pelo estudo feito por Li e Evans (1991), que afirmam que um dos motivos desse crescente interesse está relacionado à redução da dimensão do problema.

Além da redução de dimensão, também se pode citar outras vantagens da formulação do MEC, como o bom condicionamento das equações discretizadas, alta acurácia e estabilidade da solução numérica devido à utilização de uma solução fundamental (OCHIAI; SLADEK; SLADEK, 2006).

No trabalho desenvolvido por Taguti (2010) essa afirmação da redução da dimensão do problema também é apresentada. “Essa característica do Método leva sempre a uma redução das dimensões dos problemas analisados, o que significa menor quantidade de dados de entrada, diminuição do tempo de processamento e menor área auxiliar de armazenamento das informações necessárias no processamento, que o torna bastante útil”.

Alguns pesquisadores apresentaram trabalhos referentes à solução da equação 3.28 utilizando o MEC; porém na maioria dos trabalhos são apresentados aspectos particulares do problema, caracterizando-os como trabalhos de cunho puramente acadêmico. O trabalho apresentado por Grigoriev e Dargush (2005) propõe a solução da equação 3.28 em domínios bi-dimensionais no estado transiente, mas os problemas apresentados são exemplos simples com condições de contorno simplificadas. Situação semelhante acontece

no trabalho desenvolvido por Romero e Benitez (2008). Já os trabalhos apresentados por Li e Evans (1991) e posteriormente por Qiu, Wrobel e Power (1998) apresentam soluções para o regime estacionário, ou seja, soluções independentes do tempo. Uma característica comum a todos esses trabalhos citados é que são consideradas apenas a componente v_x do vetor velocidade, isto é, os exemplos apresentados consideram que $v_y = 0$; com isso a característica do movimento do fluido, ou do meio em questão, é meramente uni-dimensional. O trabalho desenvolvido por Bozkaya e Tezer-Sezgin (2007) utiliza a solução fundamental dependente do tempo, considerando variação constante das funções nos elementos de contorno e no tempo.

Sendo assim a principal motivação do presente trabalho é a solução da equação de difusão-advecção utilizando o MEC, considerando as duas componentes do vetor velocidade diferentes de zero e a análise da evolução temporal das variáveis. Além disso, mostrar a viabilidade de aplicações práticas do método.

3.4 Formulação Fraca e Formulação do Método dos Elementos de Contorno

Os princípios básicos do MEC podem ser analisados como a combinação do método dos resíduos ponderados e a técnica de integração por partes conforme apresentado por Brebbia e Dominguez (1989). A integração por partes, após feita a ponderação, reduz a ordem do operador diferencial da equação estudada. Esse processo transfere as derivadas da função aproximada para a função de ponderação, que pode ser escolhida como uma função que satisfaz a equação diferencial governante do problema, na sua forma homogênea, ou como um tipo especial de função que possibilita reduzir o problema apenas ao contorno.

A função de ponderação do MEC adotada nesse trabalho é a solução fundamental do problema correlato ao problema permanente; Li e Evans (1991) destacam que alguns pesquisadores também consideram o método como uma generalização da formulação método dos resíduos ponderados, sendo a solução fundamental considerada como uma função peso especial.

3.4.1 Solução Fundamental

Dada a equação diferencial linear não-homogênea:

$$Lf(x) = g(x) \quad (3.55)$$

na qual as funções f e g são definidas em todo domínio do problema e L é um operador diferencial, pode-se resolver a equação 3.55 utilizando uma função de Green, $G(x, \xi)$, que é a solução da equação:

$$LG(x, \xi) = \delta(x - \xi) \quad (3.56)$$

A função $G(x, \xi)$ representa o efeito, em um ponto x , devido a uma fonte que age em um ponto escolhido ξ ; essas fontes são denominadas delta de Dirac (PRESS et al., 2007), representadas como $\delta(x - \xi)$. Na ausência de condição de contorno, $G(x, \xi)$ é denominada solução fundamental.

Com base na equação 3.56, a solução fundamental utilizada neste trabalho é a solução da equação:

$$D\nabla^2 C^* + \vec{v} \cdot \nabla C^* = -\delta(\xi, X) \quad (3.57)$$

onde X é um ponto de coordenadas (x, y) e ξ é um ponto de coordenadas (ξ_x, ξ_y) . Note-se a ausência da variável tempo, o que não impede que problemas no domínio do tempo possam ser resolvidos com o MEC. A formulação resultante é denominada usualmente como MEC-D, D indicando domínio. A solução fundamental é dada por:

$$C^*(\xi, X) = \frac{K_0(Ar)}{2\pi D} e^{\frac{-\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \quad (3.58)$$

onde K_0 é a função de Bessel modificada de segundo tipo, e ordem zero (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972), \vec{v} é o vetor velocidade, \vec{r} é o vetor distância entre os pontos X e ξ . O argumento A é dado por:

$$A = \frac{|\vec{v}|}{2D} \quad (3.59)$$

Os procedimentos adotados para o desenvolvimento da solução fundamental para

equação 3.57 são apresentados no anexo A.

A derivada normal em relação ao contorno, da solução fundamental é dada por:

$$\frac{\partial C^*}{\partial n} = \frac{\partial C^*}{\partial x} n_x + \frac{\partial C^*}{\partial y} n_y \quad (3.60)$$

onde n_x e n_y são as componentes do vetor normal exterior ao domínio nas direções x e y , respectivamente. Desenvolvendo as derivadas tem-se:

$$\frac{\partial C^*}{\partial n} = -\frac{1}{2\pi D} e^{\frac{-\vec{v}\cdot\vec{r}}{2D}} \left[AK_1(Ar) \frac{\partial r}{\partial n} + \frac{v_n}{2D} K_0(Ar) \right] \quad (3.61)$$

onde K_1 é a função de Bessel do segundo tipo de ordem 1 (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1972).

3.5 O Método dos Elementos de Contorno Aplicado à Equação da Difusão-Advecção

Considera-se um campo de velocidades constante, e de acordo com os procedimentos usuais do método dos resíduos ponderados, como apresentado por Brebbia e Dominguez (1989), para a equação 3.28, sujeita às seguintes condições de contorno, essenciais $C = \hat{C}$ em Γ_C e naturais $\frac{\partial C}{\partial n} = \frac{\partial \hat{C}}{\partial n}$ em Γ_q . A substituição de uma solução aproximada na equação governante gera um resíduo no domínio do problema. Se a solução aproximada também não atende as condições de contorno, outros resíduos são gerados em Γ_c e em Γ_q . Esses resíduos podem ser ponderados como apresentado pela equação 3.62. A sentença de resíduos ponderados para a equação 3.28 é:

$$\int_{\Omega} \left(D\nabla^2 C - \vec{v}\cdot\nabla C - \frac{\partial C}{\partial t} \right) C^* d\Omega = (C - \hat{C}) \bar{w}|_{\Gamma_C} + \left(\frac{\partial C}{\partial n} - \frac{\partial \hat{C}}{\partial n} \right) \bar{\bar{w}}|_{\Gamma_q} \quad (3.62)$$

onde C^* é a solução de 3.57 e desempenha o papel de função de ponderação, e \bar{w} e $\bar{\bar{w}}$ são funções de ponderação a serem escolhidas de maneira a simplificar a equação resultante. Note-se que, para evitar sobrecarregar a notação, foi utilizada a mesma letra, C , para a solução aproximada. Assim, no que segue, C deve ser interpretada como a solução aproximada do problema e não como a solução exata.

Após todas as manipulações usuais, a equação do MEC é:

$$C(\xi, t) = D \int_{\Gamma} C^* \frac{\partial C}{\partial n} d\Gamma - D \int_{\Gamma} C \frac{\partial C^*}{\partial n} d\Gamma - v_x \int_{\Gamma} C C^* d\Gamma - v_y \int_{\Gamma} C C^* d\Gamma - \int_{\Omega} \dot{C} C^* d\Omega \quad (3.63)$$

Note-se a presença de uma integral de domínio no último termo do lado direito da equação 3.63. Com a presença dessa integral de domínio faz necessário a discretização do domínio do problema, o que justifica a notação MEC-D mencionada anteriormente.

Fazendo $\frac{\partial C^*}{\partial n} = q^*$, $\frac{\partial C}{\partial n} = q$ e $\frac{\partial C}{\partial t} = \dot{C}$ a equação 3.63 é reescrita como:

$$C(\xi, t) = D \int_{\Gamma} C^*(\xi, X) q(X, t) d\Gamma - D \int_{\Gamma} C(X, t) q^*(\xi, X) d\Gamma - \\ v_x \int_{\Gamma} C(X, t) C^*(\xi, X) d\Gamma - v_y \int_{\Gamma} C(X, t) C^*(\xi, X) d\Gamma - \\ \int_{\Omega} \dot{C}(X, t) C^*(\xi, X) d\Omega \quad (3.64)$$

Para nós do contorno, a equação 3.64 é escrita como:

$$f(\xi) C(\xi, t) + D \int_{\Gamma} C(X, t) q^*(\xi, X) d\Gamma + \\ v_x \int_{\Gamma} C(X, t) C^*(\xi, X) d\Gamma + v_y \int_{\Gamma} C(X, t) C^*(\xi, X) d\Gamma = \\ D \int_{\Gamma} C^*(\xi, X) q(X, t) d\Gamma - \int_{\Omega} \dot{C}(X, t) C^*(\xi, X) d\Omega \quad (3.65)$$

sendo o coeficiente $f(\xi)$ calculado com:

$$f(\xi) = \frac{\alpha}{2\pi} \quad (3.66)$$

onde o ângulo α é representado na figura 2. Para pontos internos $f(\xi) = 1$ e para pontos que não pertencem ao domínio, $f(\xi) = 0$.

Para a solução numérica da equação 3.64 o contorno é dividido em elementos lineares, sobre os quais admite-se que tanto C quanto q variam linearmente. O domínio

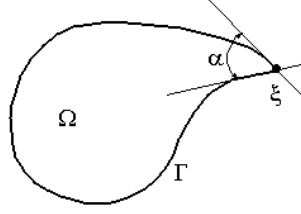


Figura 2: Ângulo α usado para o cálculo de $f(\xi)$.

é dividido em células triangulares lineares, nas quais \dot{C} varia linearmente.

Aplicando a equação 3.65 a todos os nós do contorno e pontos internos obtém-se um sistema de equações lineares. As integrais podem ser avaliadas numericamente utilizando quadratura de Gauss. Utilizando a notação habitual do MEC, os termos do lado esquerdo da equação 3.65 formam a matriz \mathbf{H} . O primeiro termo do lado direito da equação forma a matriz \mathbf{G} . As matrizes trazem as informações do contorno. A última integral da equação, isto é, a integral de domínio, forma a matriz \mathbf{M} . Assim o seguinte sistema de equações é formado:

$$\mathbf{H} \mathbf{C} = \mathbf{G} \mathbf{q} - \mathbf{M} \dot{\mathbf{C}} \quad (3.67)$$

O sistema de equações lineares 3.67 pode ser reescrito mais detalhadamente como:

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{H}^{dd} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{cc}) & \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{cd} \\ \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{dc} & (\mathbf{I} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{dd}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{n+1}^c \\ \mathbf{C}_{n+1}^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{cc} \\ \mathbf{G}^{dc} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^c \\ \mathbf{q}_{n+1}^d \end{bmatrix} + \frac{1}{D\Delta t} \begin{bmatrix} \mathbf{M}^{cc} & \mathbf{M}^{cd} \\ \mathbf{M}^{dc} & \mathbf{M}^{dd} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_n^c \\ \dot{\mathbf{C}}_n^d \end{bmatrix} \quad (3.68)$$

onde o subíndice $n + 1$ representa o passo de tempo e os superíndices c e d representam contorno e domínio, respectivamente. As matrizes \mathbf{H} , \mathbf{G} e \mathbf{M} são formadas pelas integrais conforme descrito:

$$\mathbf{H} = f(\xi)C(\xi, t) + D \int_{\Gamma} [q^*(\xi, X) + v_x + v_y] C(X, t) d\Gamma \quad (3.69)$$

$$\mathbf{G} = D \int_{\Gamma} q(X, t) C^*(\xi, X) d\Gamma \quad (3.70)$$

$$\mathbf{M} = - \int_{\Omega} \dot{C}(X, t) C^*(\xi, X) d\Omega \quad (3.71)$$

Essa abordagem aparece em alguns trabalhos, por exemplo, Li e Evans (1991), Qiu, Wrobel e Power (1998), Bozkaya e Tezer-Sezgin (2007) dentre outros.

Essa formulação apresenta uma restrição quanto ao tipo de campo de velocidades, isto é, é válida para um campo de velocidades uniforme. No caso de problemas mais generalizados, onde o campo de velocidades é variável, por exemplo, é do tipo parabólico como mostra a figura 3, as componentes de velocidade no contorno lateral são nulas, o que gera um argumento nulo na função de Bessel, como pode ser verificado pela equação 3.59.

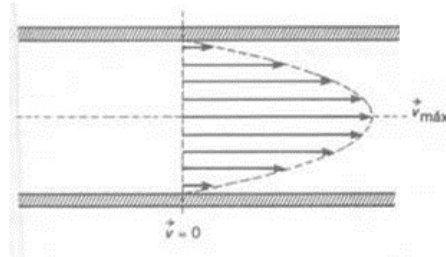


Figura 3: Campo de velocidades parabólico

Como a função K_0 não é definida para argumento nulo, dentro do âmbito do MEC é possível evitar esse problema tratando o termo advectivo como um termo fonte da equação. Assim, a equação 3.28 pode ser escrita como:

$$D\nabla^2 C = \frac{\partial C}{\partial t} + F \quad (3.72)$$

onde F é dado por:

$$F = \vec{V} \cdot \nabla C \quad (3.73)$$

Seguindo os procedimentos adotados anteriormente, obtém-se a equação integral abaixo, onde o termo advectivo aparece em outra integral de domínio.

$$\begin{aligned}
f(\xi)C(\xi, t) + \int_{\Gamma} C(X, t)q^*(\xi, X) d\Gamma = \int_{\Gamma} C^*(\xi, X)q(X, t) d\Gamma + \\
\frac{1}{D} \int_{\Omega} \dot{C}(X, t)C^*(\xi, X) d\Omega + \\
\frac{1}{D} \int_{\Omega} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} C(X, t) \cdot C^*(\xi, X) d\Omega \quad (3.74)
\end{aligned}$$

A solução fundamental utilizada agora é dada por Brebbia e Dominguez (1989):

$$C^*(\xi, X) = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{1}{r} \right) \quad (3.75)$$

e é a solução da equação:

$$\nabla^2 C^* = -\delta(\xi - X) \quad (3.76)$$

Além disso, sua derivada normal é dada por:

$$q^*(\xi, X) = \frac{dC^*(\xi, X)}{dn(X)} = -\frac{1}{r} \frac{dr}{dn} \quad (3.77)$$

É importante notar que, com essa abordagem, se a velocidade for nula em qualquer ponto do contorno ou do domínio, a segunda integral de domínio que aparece na equação 3.74 é anulada, o que não gera qualquer dificuldade ou produz singularidade na formulação.

Após algumas manipulações a equação 3.74 é reescrita como:

$$\begin{aligned}
f(\xi)C(\xi, t) - \int_{\Gamma} C^*(\xi, X)q(X, t) d\Gamma(X) = \\
\int_{\Gamma} [q^*(\xi, X) + (v_x n_x + v_y n_y) C^*(\xi, X)] C(X, t) d\Gamma(X) + \\
\int_{\Omega} \left(v_x \frac{\partial C^*(\xi, X)}{\partial x} + v_y \frac{\partial C^*(\xi, X)}{\partial y} \right) C(X, t) d\Omega(X) + \\
\int_{\Omega} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) C^*(\xi, X) C(X, t) d\Omega(X) + \\
\frac{1}{D} \int_{\Omega} \dot{C}(X, t) C^*(\xi, X) d\Omega(X) \quad (3.78)
\end{aligned}$$

Note-se que o termo $f(\xi)$ é o mesmo da equação 3.65.

O sistema de equações resultante da aplicação da equação 3.78 a todos os nós do contorno e pontos internos é escrito como segue:

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} (\mathbf{H}^{cc} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{cc} - \mathbf{N}^{cc}) & (\frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{cd} - \mathbf{N}^{cd}) \\ (\mathbf{H}^{dc} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{dc} - \mathbf{N}^{dc}) & (\mathbf{I} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{dd} - \mathbf{N}^{dd}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{n+1}^c \\ \mathbf{C}_{n+1}^d \end{bmatrix} \\
= \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{cc} \\ \mathbf{G}^{dc} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^b \end{bmatrix} + \frac{1}{D\Delta t} \begin{bmatrix} \mathbf{M}^{bb} & \mathbf{M}^{cd} \\ \mathbf{M}^{db} & \mathbf{M}^{dd} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_n^c \\ \dot{\mathbf{C}}_n^d \end{bmatrix} \quad (3.79)
\end{aligned}$$

Na equação 3.79, as matrizes adicionais que aparecem do lado esquerdo e são representadas por \mathbf{N} são calculadas através da primeira integral de domínio que aparece no lado direito da equação 3.78.

Comparando a equação 3.68 com a equação 3.79, é possível perceber que não existem grandes diferenças entre elas; com isso, a implementação computacional dessa formulação não traz grandes dificuldades.

A função $\dot{\mathbf{C}}$ representa a derivada primeira em relação ao tempo e é calculada (aproximada) utilizando a fórmula de diferença finita, como apresentada por Boyce e DiPrima (1986):

$$\dot{C} = \frac{C_{n+1} - C_n}{\Delta t} \quad (3.80)$$

Os índices que aparecem na equação 3.79 são interpretados da mesma maneira que na equação 3.68.

Nesse trabalho a formulação apresentada inicialmente, que utiliza como solução fundamental a função dada pela equação 3.58, será denominada MEC-DK, onde a letra K representa a função de Bessel, e a formulação que utiliza como solução fundamental dada pela equação 3.75 será denominada MEC-DL, onde a letra L representa a função que contém o logaritmo. Como observado anteriormente, a letra D refere-se às integrais de domínio.

3.6 Formulação do MEC com velocidade variável

Considerar o campo de velocidades variável no espaço possibilita a modelagem e análise de problemas com características mais próximas do que acontece na natureza, por exemplo, em escoamentos de rios ou dutos, onde o perfil de velocidades que se obtém é variável na seção transversal.

A formulação apresentada na equação 3.78 permite a utilização de qualquer tipo de campo de velocidades, tanto constante quanto variável no espaço ou no tempo, pois essa formulação utiliza os valores nodais das componentes de velocidade (v_x, v_y) , e não uma função que descreva o perfil desejado. Sendo assim um perfil de velocidade parabólico foi aplicado na equação para verificação da formulação (figura 4). Considerando $v_x = v_x(y)$, os valores da componente v_x da velocidade, para cada ponto do domínio, foram obtidos através da equação:

$$v_x = \frac{2v_{max}}{h} \left(y - \frac{y^2}{2h} \right) \quad (3.81)$$

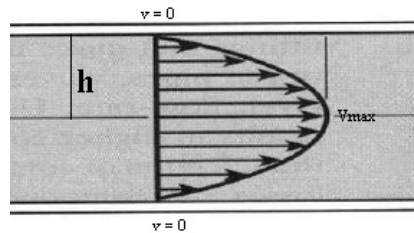


Figura 4: Perfil de velocidade parabólico.

Considerando que a velocidade máxima é $v_{max} = 0.1$ m/s e sendo a largura do canal igual a 2 m, a equação 3.81 fica:

$$v_x = 0.2 \left(y - \frac{y^2}{2} \right) \quad (3.82)$$

Empregando a equação 3.82, um campo de velocidades é gerado para todos os pontos internos e no contorno do problema, e é utilizado no momento em que a integração de domínio é efetuada.

A integração sobre cada célula é realizada considerando que a velocidade possui variação linear. Para mais detalhes reacionados à integração no domínio podem ser encontrados em Mansur (1983), Carrer (1991) e Brebbia e Dominguez (1989).

4 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Modelos numéricos precisam ser testados e validados quanto à sua acurácia, consistência e estabilidade. Normalmente estas validações são feitas comparando as respostas obtidas pelo modelo com soluções analíticas conhecidas ou valores medidos em laboratório. Neste trabalho foram desenvolvidos cinco experimentos numéricos, comparando os resultados com a solução analítica e, nos casos onde a solução analítica não é conhecida, comparando com os resultados obtidos com o SisBaHiA[®]. No primeiro experimento proposto, a solução analítica foi apresentada por Romero e Benitez (2008) para um caso simplificado unidimensional para simulação do transporte de escalares. Para os outros experimentos propostos, a solução analítica não é conhecida pelo autor do presente trabalho; assim, os resultados do MEC serão comparados somente com os resultados do MEF. O último experimento utiliza um perfil de velocidades variável, ou seja, somente os resultados da formulação MEC-DL são comparados com os do MEF.

O primeiro experimento usado para validação dos modelos numéricos simula um canal com velocidade constante na direção longitudinal, submetido a uma carga contínua aplicada em toda a extremidade $x = 0$, com velocidade constante e diferente de zero na direção x e nula na direção y ; neste teste, os resultados numéricos dos modelos são comparados com a solução analítica e o MEF. O segundo experimento simula o lançamento de uma carga contínua em um canal com velocidades constantes nas direções x e y e diferentes de zero. O terceiro experimento simula um lançamento contínuo em um ponto do contorno, com velocidade constante diferente de zero na direção x e velocidade nula na direção y . O quarto experimento simula uma fonte instantânea, lançada no meio do domínio, em uma região quadrada, com velocidades constantes nas direções x e y . O quinto e último experimento simula um lançamento contínuo aplicado em toda a extremidade $x = 0$, com velocidade nula na direção y e um perfil de velocidades variável do tipo parabólico aplicado na direção x .

4.1 Simulação 1

Esse experimento consiste em um canal de comprimento igual a 12 m e largura igual a 2 m, com um lançamento contínuo na extremidade $x = 0$, conforme ilustra a figura 7.

A malha utilizada nas duas formulações do MEC tem 125 nós, sendo 56 nós de contorno e 69 nós no domínio, gerando 56 elementos lineares no contorno e 192 células triangulares no domínio. Os valores de Δx e Δy são iguais, sendo $\Delta x = \Delta y = 0.5$ m. A malha utilizada no MEF tem 1377 nós, sendo 194 nós de contorno e 1185 nós no domínio, gerando 320 elementos quadrangulares, com espaçamentos de $\Delta x = 0.3$ m e $\Delta y = 0.25$ m.

As malhas utilizadas nesse experimento são apresentadas nas figuras 5 e 6: a figura 5 mostra a malha utilizada nas formulações do MEC e a figura 6, a malha utilizada na formulação do MEF. Essas malhas também foram utilizadas nos experimentos 2, 3 e 5.

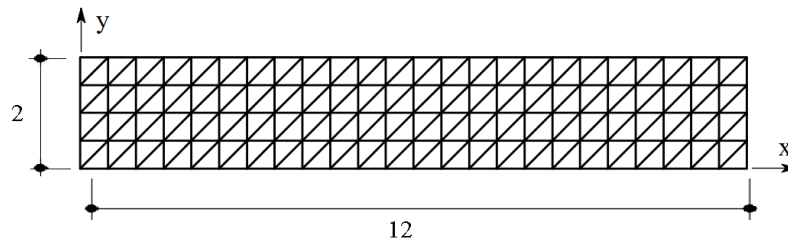


Figura 5: Malha utilizada nas formulações do MEC

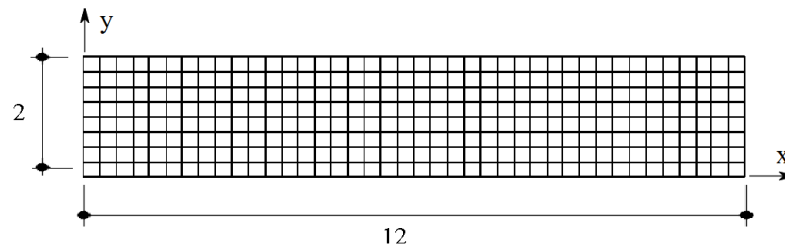


Figura 6: Malha utilizada na formulação do MEF

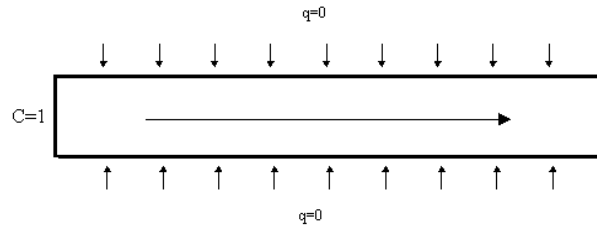


Figura 7: Geometria do canal e condições de contorno impostas

Com o objetivo de verificar a estabilidade do modelo, o experimento foi realizado para diferentes valores do coeficiente D e, conseqüentemente, diferentes valores do número de Péclet, mostrando assim a capacidade das formulações em responder às mudanças dos valores dos parâmetros. Os valores utilizados nos quatro casos, são apresentados na tabela 1:

Tabela 1: Parâmetros utilizados no experimento 1

Caso	V_x (m/s)	V_y (m/s)	D (m/s ²)	Péclet x
1a	0.1	0.0	0.1	0.75
1b	0.1	0.0	0.05	1.5
1c	0.1	0.0	1	0.075
1d	0.1	0.0	2	0.0375

A solução analítica para esse problema, apresentada por Romero e Benitez (2008), é:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_x t}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v_x t}{2\sqrt{Dt}} \right) e^{\frac{v_x x}{D}} \right) \quad (4.1)$$

onde erfc é a função erro complementar. As condições de contorno e inicial para esse problema são:

$$C(0, y, t) = C_0 = 1mg/L$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=\infty} = 0$$

$$C(x \neq 0, y, 0) = 0$$

Nas análises desse problema, para as duas formulações do MEC foi utilizado $\Delta t = 1$ s e, para o MEF, $\Delta t = 0.2$ s. Nas figuras 8, 9, 12, 13 e 14, é mostrada a evolução da concentração do escalar ao longo do tempo no ponto $x = 6$ e $y = 1$, que corresponde ao centro do canal. A figura 8 mostra os resultados para o caso 1a, onde o número de Péclet ficou próximo de 1, mas ainda inferior a 1. A figura 9 mostra os resultados para o caso 1b, onde o valor do número de Péclet é maior que um; nota-se que neste caso houve uma diferença entre os resultados numéricos (MEC e MEF) e a solução analítica, e essa diferença é mais evidente nas regiões onde os gradientes de concentração são maiores. Já

as figuras 12 e 13 mostram os resultados para os casos 1c e 1d respectivamente. Nestes casos, os valores para o número de Péclet são baixos, os resultados numéricos, para os dois casos, foram muito próximos aos obtidos pela solução analítica.

É possível observar que as soluções obtidas com o MEC estão em boa concordância em relação à solução analítica; somente no caso 1b, apresentado na figura 9, as soluções numéricas obtidas com o MEC e o MEF apresentaram uma diferença: isso acontece quando o número de Péclet é superior a 1.0. Devido à presença do termo advectivo, quando o número de Péclet aumenta o erro também aumenta, como o número de Péclet tem seu valor definido de acordo com as características do problema, pois a velocidade e o coeficiente de dispersão são características do escoamento, para ajustar seu valor objetivando uma redução de erros, é necessária a alteração da malha. Nesse trabalho foram alterados os valores do coeficiente de dispersão D para verificar o comportamento das formulações numéricas.

A figura 10 apresenta valores da concentração ao longo do canal para o caso 1b, no instante de tempo $t = 50$ segundos, para os pontos localizados em $y = 0.5$ m. Como é possível observar, os resultados numéricos obtidos com o MEC e o MEF estão em boa concordância com os obtidos pela solução analítica.

Outro fator importante que deve ser destacado é o passo de tempo utilizado nas análises. Note-se que o valor utilizado no MEC foi cinco vezes maior que o valor utilizado no MEF e mesmo assim o MEC apresentou resultados estáveis. A figura 14 mostra a estabilidade do MEC quando o intervalo de tempo usado na análise é relativamente grande. Utilizando $\Delta t = 4$ s, valor maior do que o utilizado anteriormente, o MEF mostrou oscilações numéricas, e essas oscilações ocorreram na região onde os gradientes de concentração são maiores, enquanto o MEC continuou estável. Deve-se mencionar ainda que a malha utilizada nas análises do MEF é bem mais refinada que a malha utilizada nas análises do MEC.

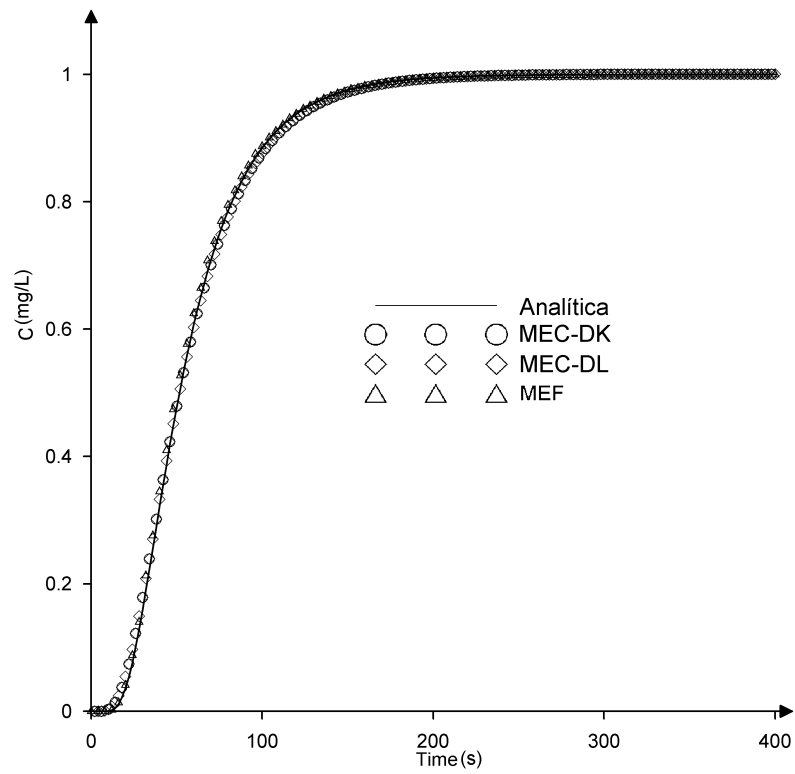


Figura 8: Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1a.

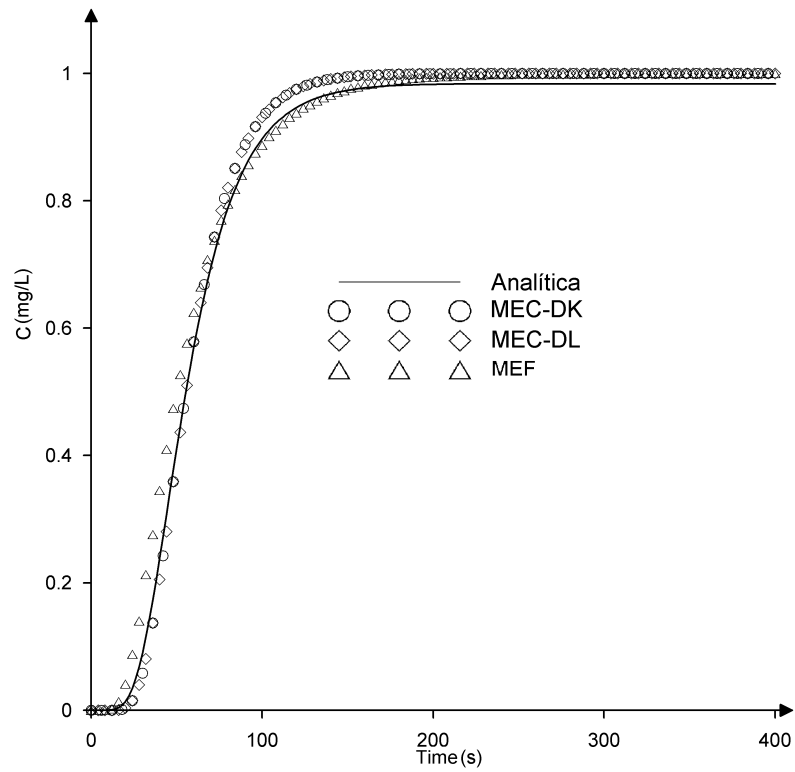


Figura 9: Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1b.

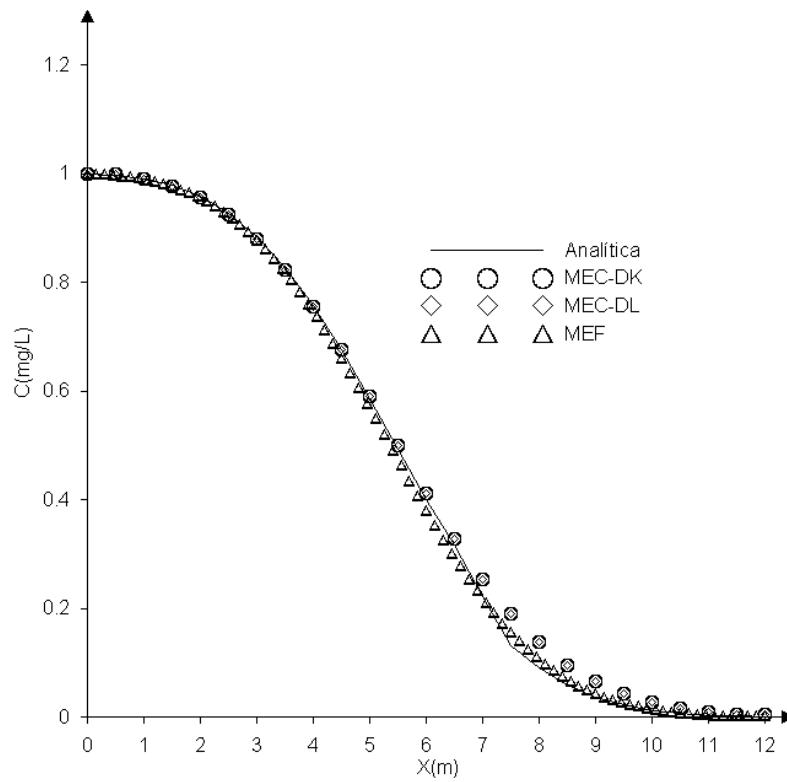


Figura 10: Canal unidimensional com carga contínua: Caso 1b. Resultados ao longo do eixo x , para os pontos $y=0.5$ m.

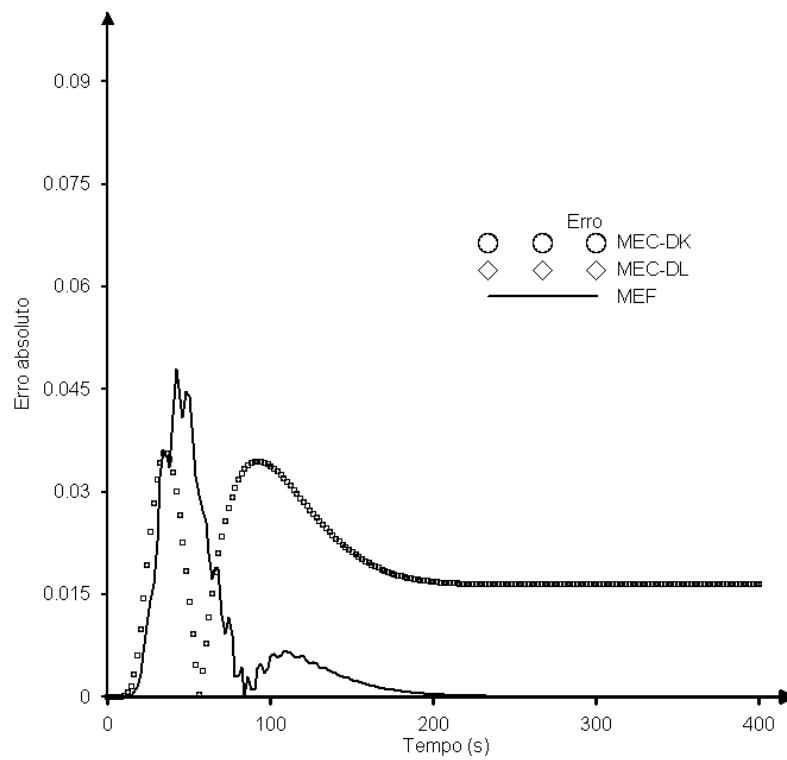


Figura 11: Erro absoluto, em mg/L, entre soluções numéricas e analítica para o Caso 1b.

É possível verificar na figura 11 que os erros são maiores onde os gradientes de concentração são mais severos. Os erros decorrentes do emprego do MEC e MEF são mais evidentes, enquanto entre as duas formulações do MEC (MEC-DK e MEC-DL) apresentam a mesma ordem de grandeza. Os erros apresentados pelo MEF mostram oscilações de pequena escala, principalmente nas regiões de gradientes de concentração maiores. Isso indica que as formulações desenvolvidas para o MEC conseguem apresentar melhores resultados em regiões onde ocorrem gradientes de concentração muito severos.

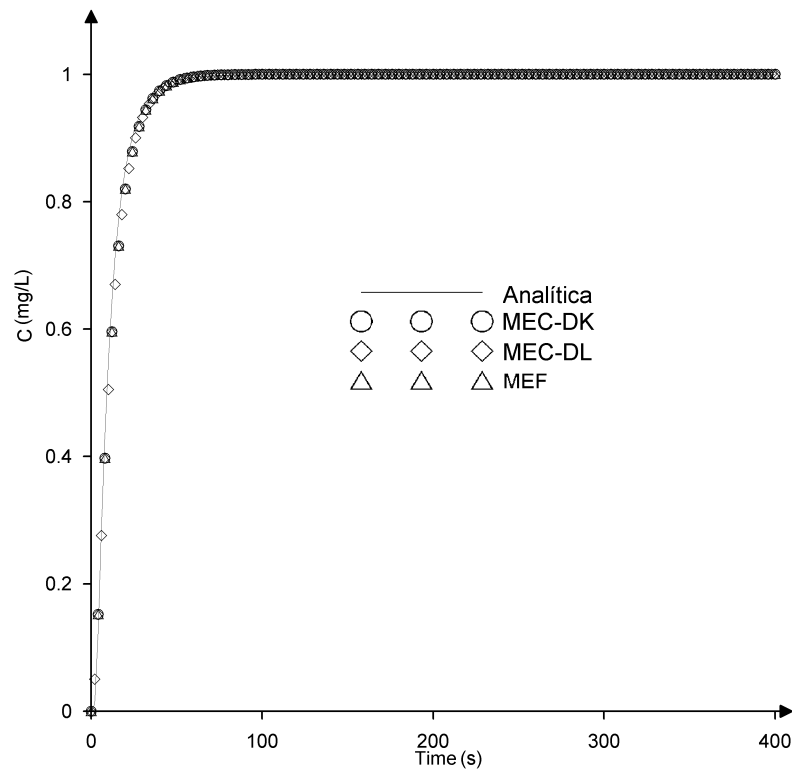


Figura 12: Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1c.

As figuras 15 a 18 mostram os resultados espaciais do canal para o caso 1a. Na figura 15 pode-se perceber que, dois segundos após o lançamento, a formação da pluma do contaminante já pode ser observada. Na figura 16, no instante 28 segundos, a pluma de contaminante já está a frente do centro do canal, no instante 56 segundos, que é mostrado na figura 17, o contaminante ainda é transportado sobre o domínio, e após 112 segundos, como é possível observar nas figuras 18 e 19, o problema atinge o regime permanente.

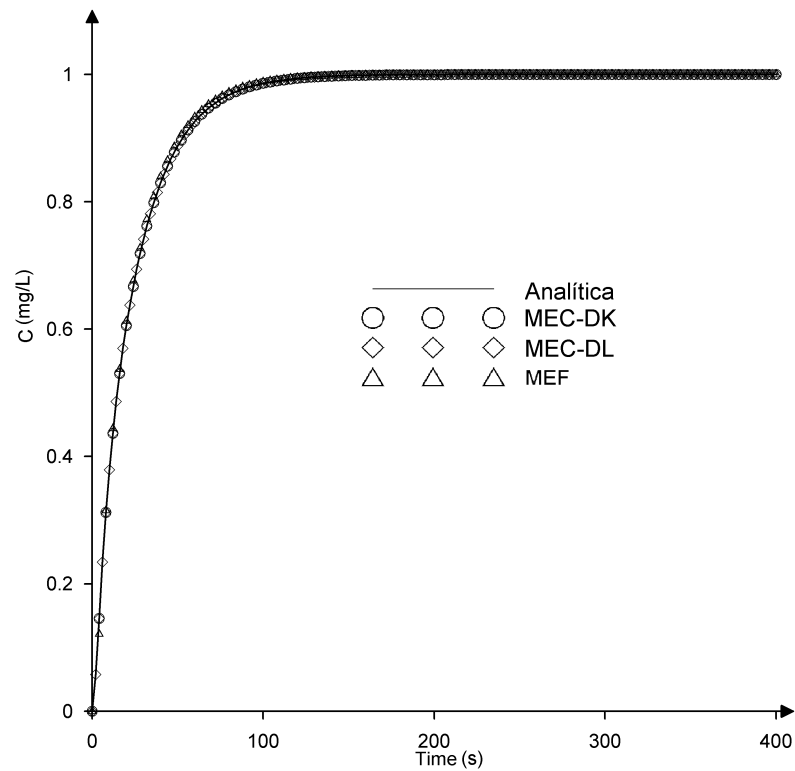


Figura 13: Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1d.

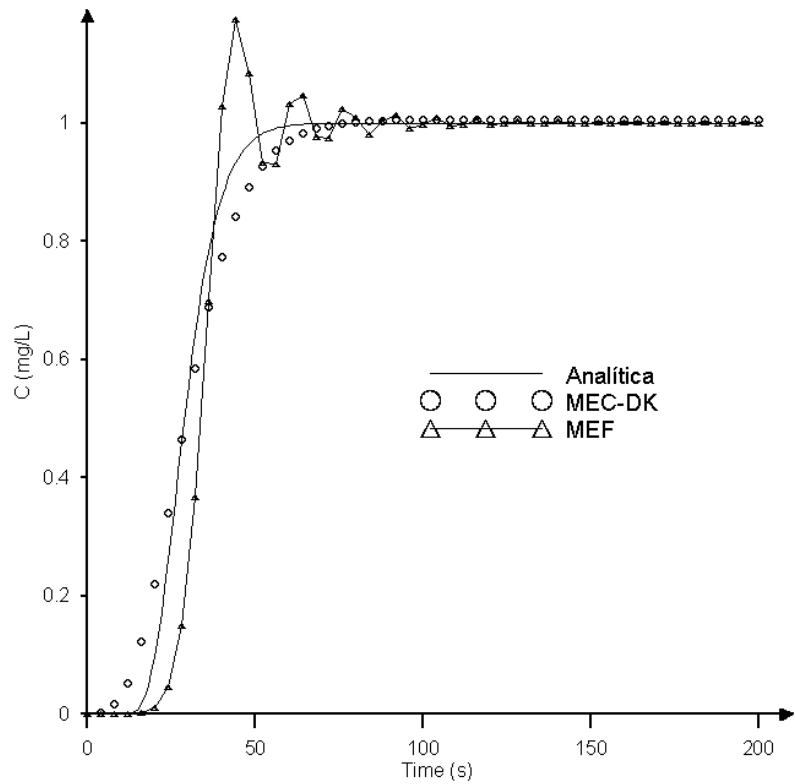


Figura 14: Canal unidimensional com carga contínua. Resultados correspondentes aos pontos no centro do canal: Caso 1d com $\Delta t = 4$ s.



Figura 15: Concentração, em mg/L no instante $t=2s$ para o caso 1a

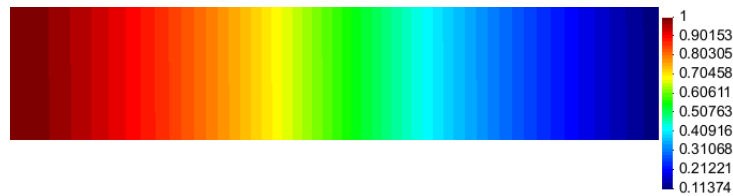


Figura 16: Concentração, em mg/L no instante $t=28s$ para o caso 1a



Figura 17: Concentração, em mg/L no instante $t=56s$ para o caso 1a



Figura 18: Concentração, em mg/L no instante $t=112s$ para o caso 1a



Figura 19: Concentração, em mg/L no instante $t=120s$ para o caso 1a

4.2 Simulação 2

O problema consiste no lançamento de uma fonte permanente, uniformemente distribuída na seção transversal de um canal alinhado com o eixo x e com comprimento igual a 12m e largura igual a 2 m. A água escoa no canal com velocidades $v_x = 0.1$ m/s e $v_y = 0.01$ m/s. Apesar do escoamento ser em um canal alinhado com o eixo x , a presença das componentes de velocidades nas duas direções faz com que o problema seja um problema bi-dimensional. As condições de contorno do problema são: $C(x = 0, y, t) = 1$ mg/L e fluxo normal nulo ao longo das paredes laterais. Dois testes foram desenvolvidos para dois valores de D : o coeficiente de dispersão utilizado no primeiro teste foi $D = 2$ m²/s, gerando números de Péclet: $P_x = 0.0375$ e $P_y = 0.00375$; no segundo teste foi utilizado $D = 0.5$ m²/s gerando números de Péclet: $P_x = 0.15$ e $P_y = 0.015$. As condições iniciais correspondem a: $C(x, y, t = 0) = 0, 0$ para os dois testes. Para o MEC foi utilizado $\Delta t = 1$ s e para o MEF $\Delta t = 0.2$ s. As figuras 21 e 23 apresentam resultados para evolução temporal nos pontos $A(3; 1)$, $B(6; 1)$ e $C(9; 1)$. Novamente pode-se verificar boa concordância entre os resultados numéricos e pouca oscilação numérica dos resultados tanto do MEC quanto do MEF. Esse problema não possui solução analítica conhecida pelo autor.

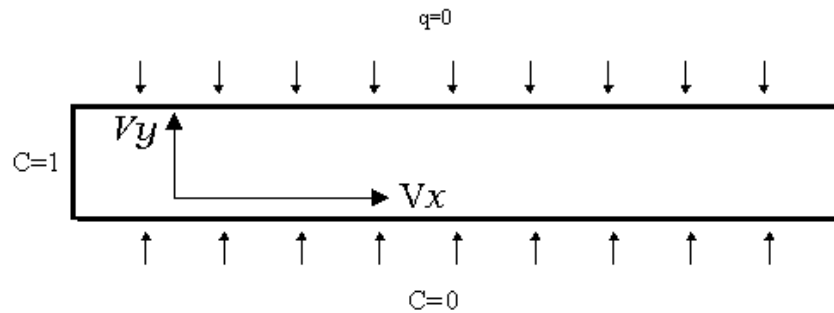


Figura 20: Geometria e condições de contorno para o experimento 2

Pode-se observar que o esquema numérico usado pelos modelos (MEF, MEC-DK e MEC-DL) não produzem oscilações numéricas. Verifica-se também que os resultados numéricos apresentam uma boa concordância entre si, considerando todos os casos, no que se refere à fase e à amplitude. As figuras 24 a 27 apresentam a distribuição espacial dos resultados para a concentração do contaminante nos instantes de tempo $t = 2s$, $t = 10s$, $t = 50s$ e $t = 80s$, respectivamente. As figuras 21 e 23 mostram os resultados para três pontos distintos ao longo do canal, com diferentes valores de D . É possível observar que os resultados numéricos, tanto das formulações do MEC quanto do MEF, apresentam boa concordância.

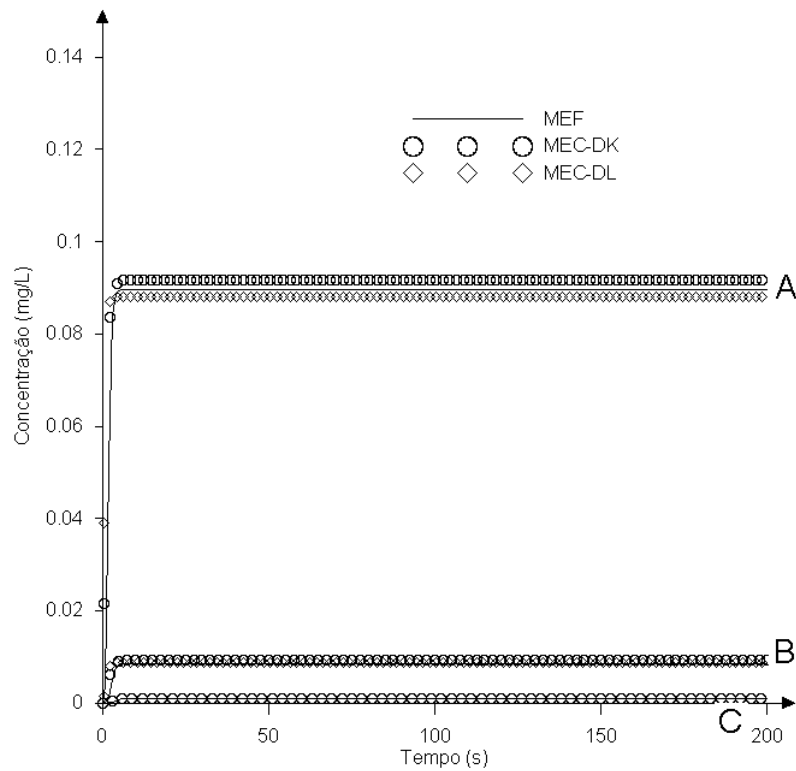


Figura 21: Valores de concentração no canal, considerando: $D = 2m^2/s$, $v_x = 0.1m/s$, $v_y = 0.01m/s$, nos pontos A(3; 1), B(6; 1) e C(9; 1)

A figura 22 mostra a diferença entre as soluções obtidas com as duas formulações do MEC e o MEF. É possível observar que as diferenças para esse problema também são mais acentuadas nas regiões onde os gradientes de concentração são mais severos. É importante ressaltar que as diferenças apresentadas estão na mesma ordem de grandeza dos erros em relação à solução analítica do experimento 1, indicando estabilidade e convergência para as soluções do MEC.

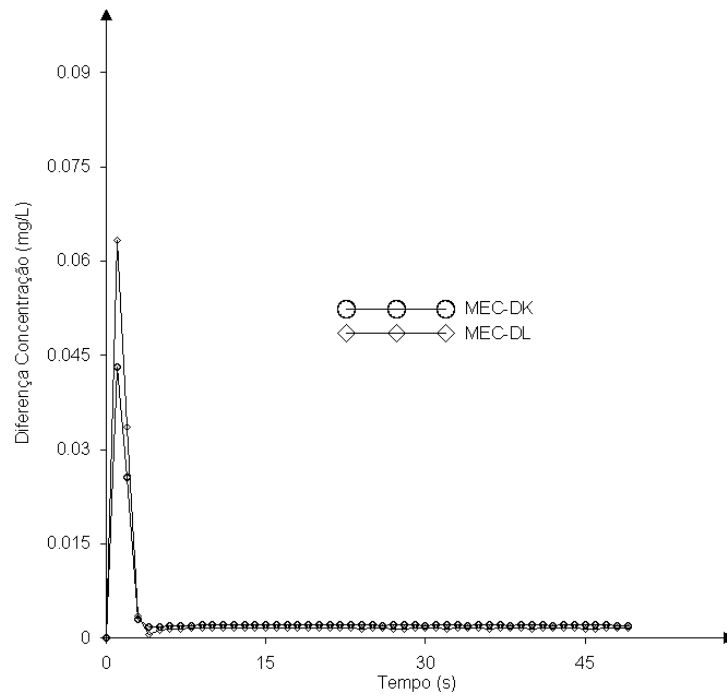


Figura 22: Diferença entre resultados do MEC e MEF para o problema representado na figura 21 para o ponto A

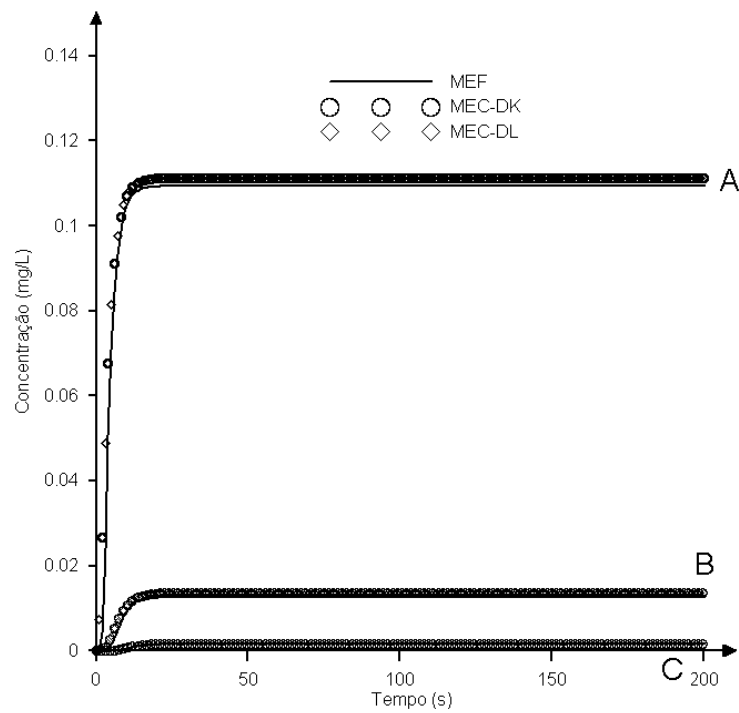


Figura 23: Valores de concentração no canal, considerando: $D = 0.05m^2/s$, $v_x = 0.1m/s$, $v_y = 0.01m/s$ nos pontos A(3; 1), B(6; 1) e C(9; 1)

A figura 24 mostra a distribuição do contaminante no canal dois segundos após o início do lançamento, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$. É possível observar que, como a velocidade v_y é diferente de zero, existe um pequeno transporte advectivo na direção y . Na figura 25, após 10 segundos do início do lançamento, ocorre um espalhamento do contaminante nas direções x e y , atingindo o regime permanente após 50 segundos, como é possível ser observado nas figuras 26 e 27. Note-se que, em todas as instâncias, o modelo preservou as condições de contorno impostas, no contorno $y = 0$ a concentração é nula, representando a entrada de água limpa.



Figura 24: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=2 \text{ s}$, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$



Figura 25: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=10 \text{ s}$, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$



Figura 26: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=50 \text{ s}$, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$



Figura 27: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=80 \text{ s}$, utilizando $D=2 \text{ m}^2/s$

4.3 Simulação 3

Esse experimento consiste em um canal de comprimento $L = 12$ m e largura igual a $B = 2$ m, com um lançamento de uma carga pontual constante no ponto $A(1.5; 0)$, conforme ilustra a figura 28. Esse problema simula uma situação de lançamento de esgoto em rios ou emissários em baías; esse tipo de problema tem grande importância para avaliar lançamento de efluentes em corpos d'água.

Foram analisados dois pontos a jusante do lançamento, o ponto $B(3; 1)$ e $C(9; 1)$. Para a análise do MEC foi utilizado $\Delta t = 1.5$ s e para o MEF foi utilizado $\Delta t = 0.5$ s. Para esse problema os seguintes valores foram utilizados: coeficiente de dispersão $D = 0.5$ m^2/s e velocidades $v_x = 0.2$ m/s e $v_y = 0$ m/s , gerando número de Péclet $P_x = 0.3$.

É possível observar na figura 29 que os resultados obtidos com as duas formulações do MEC estão em boa concordância entre si e também com os resultados obtidos com o MEF. Verifica-se também que não houve qualquer tipo de instabilidade dos resultados numéricos obtidos. Isso reforça a conclusão de que o MEC é capaz de resolver diversos tipos de problemas com vários tipos de condições de contorno, relacionados ao transporte de poluentes. Contudo, novamente é possível observar que nas regiões onde os gradientes de concentração são mais elevados houve uma pequena diferença entre o MEC e o MEF, sendo possível observar um amortecimento dos resultados obtidos pelo MEF.

As figuras 30 a 33 apresentam a distribuição espacial dos resultados obtidos com o MEC-DK para alguns instantes de tempo. É possível perceber que o MEC descreve muito bem o transporte da substância em todo o domínio do problema. É possível observar também que, devido à entrada de água limpa onde a concentração é nula, existe a diluição do contaminante com a água, e que o MEC conseguiu representar bem o transporte, a mistura e a diluição que ocorre durante o transporte da substância. A partir do instante 112 s, o sistema atinge o regime permanente.

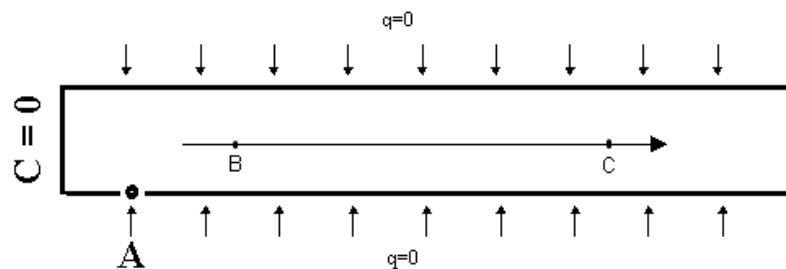


Figura 28: Geometria e condições de contorno para o experimento 3

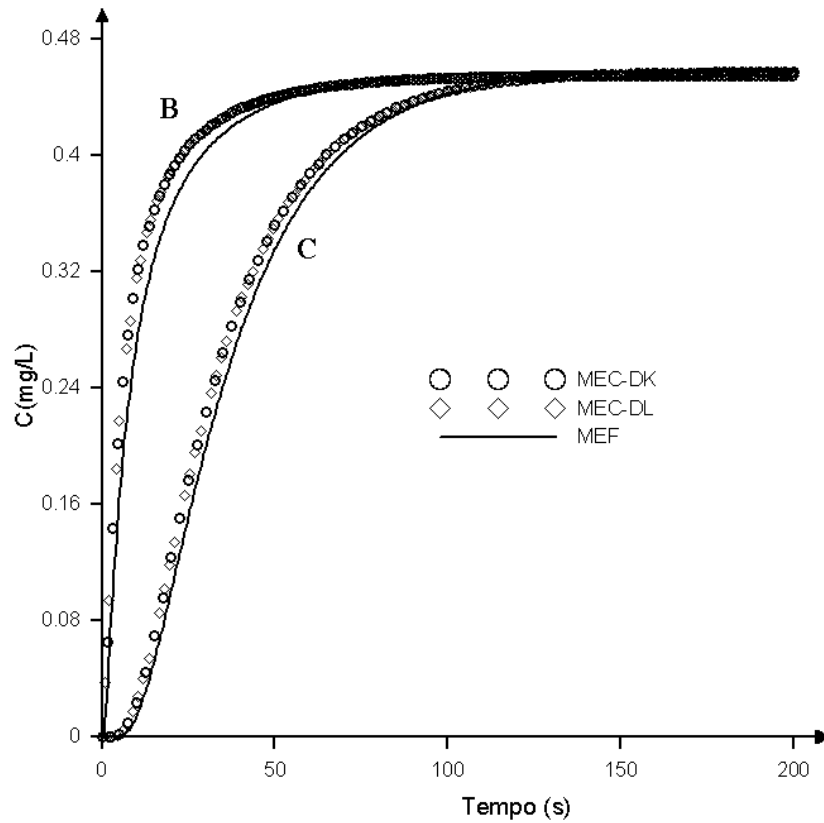


Figura 29: Canal com carga contínua lançada lateralmente: evolução temporal da concentração nos pontos B e C.

Na figura 30, que apresenta a distribuição de concentração dois segundos após o início do lançamento do contaminante, é possível perceber que o processo de transporte difusivo gera o espalhamento em torno do ponto de lançamento formando a pluma de contaminante. Na figura 31 é possível perceber que, após 28 segundos, a pluma de contaminante está se espalhando sobre todo o domínio, e após 100 segundos o contaminante apresenta uma concentração permanente sobre o domínio, conforme é possível observar nas figuras 32 e 33. É importante notar que na extremidade, $x = 0$, ocorre entrada de água limpa.



Figura 30: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=2s$

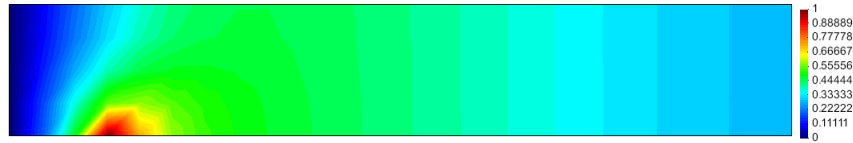


Figura 31: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=28s$

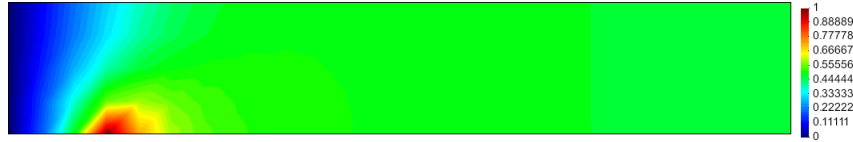


Figura 32: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=100s$



Figura 33: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=112s$

4.4 Simulação 4

Este problema consiste em um domínio quadrado, com lado igual a 10 m, no qual ocorre o lançamento de efluente, no instante inicial da análise, em uma região quadrada central com lado igual a 1 m, ver figura 34. A água escoa com velocidade $v_x = 0.1$ m/s e $v_y = 0.1$ m/s constantes e o coeficiente de dispersão é $D = 1 \text{ m}^2/s$, gerando números de Péclet $P_{ex} = P_{ey} = 0.05$, o que caracteriza um transporte bi-dimensional. Para esse problema a solução analítica não é conhecida pelo autor. As condições de contorno do problema são: $C(x = 0, y, t) = 0$ mg/L, $C(x, y = 0, t) = 0$ mg/L e fluxo normal nulo ao longo dos contornos $x = L$ e $y = L$. As condições iniciais correspondem a: $C(x = 5, y = 5, t = 0) = 1$ mg/L e é distribuída linearmente para os nós que estão localizados nos vértices do quadrado central da figura 34. Foram analisados dois pontos, um ponto antes do ponto de lançamento e outro à frente, os pontos A(2.5, 2.5) e B(7.5, 7.5) respectivamente.

Para esse experimento, a malha usada pelo MEF (figura 35), é formada por 400 elementos e 1681 nós, igualmente espaçados com $\Delta x = \Delta y = 0.25$ m. A malha usada no MEC (figura 36), para as duas formulações, é formada por 800 células e 445 nós, com $\Delta x = \Delta y = 0.5$ m, ver figura 36. Na análise do MEC, foi adotado $\Delta t = 1s$ e, na do MEF, $\Delta t = 0.2s$.

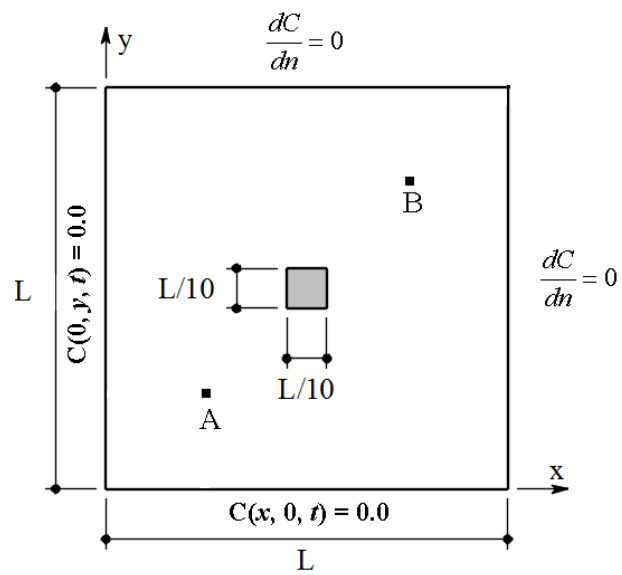


Figura 34: Domínio quadrado: geometria, condições de contorno e posição do subdomínio com condição inicial não nula

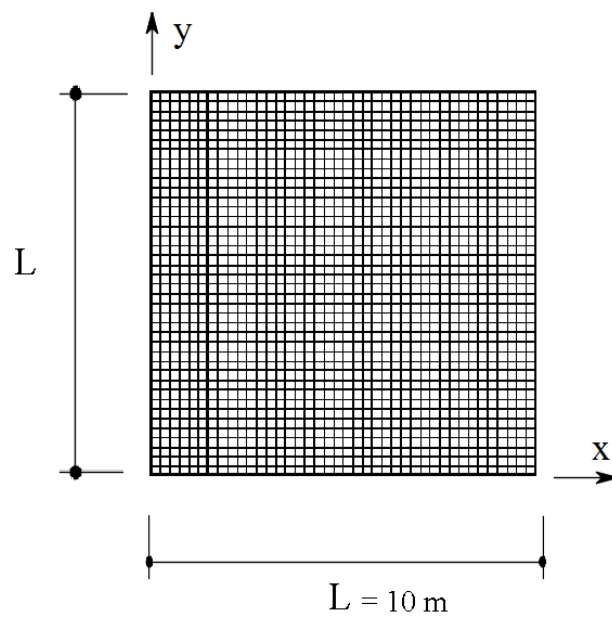


Figura 35: Malha utilizada no MEF

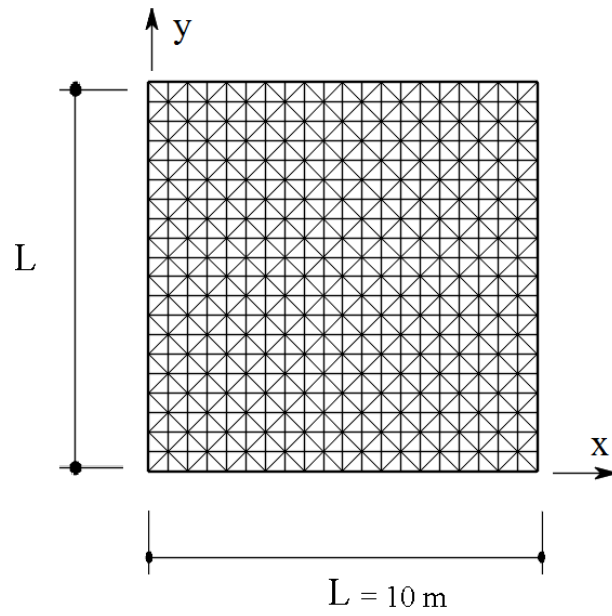


Figura 36: Malha utilizada no MEC

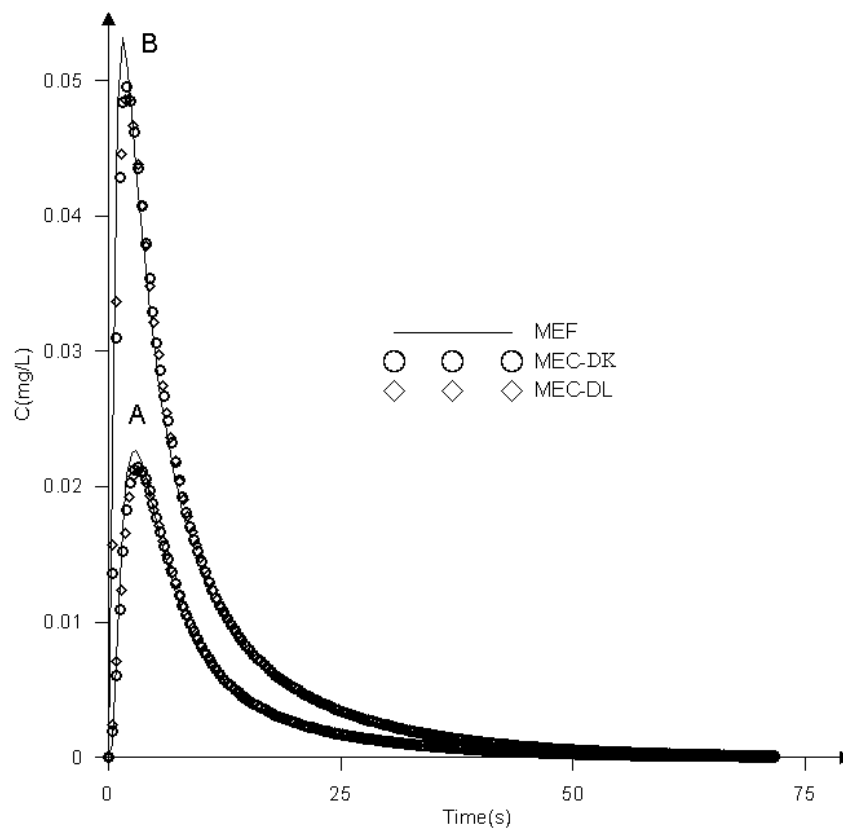


Figura 37: Domínio quadrado: evolução temporal da concentração do contaminante nos pontos A e B.

Como é possível observar na figura 37, principalmente nas regiões de máxima concentração, houve uma diferença entre os resultados obtidos para as formulações do MEC e do MEF. Para testar a acurácia das formulações utilizadas (tanto do MEC quanto do MEF), uma malha mais refinada foi utilizada no MEF, com $\Delta x = \Delta y = 0.1$ m, ou seja, com 10.000 elementos e 10.201 nós. A malha utilizada no MEC foi mantida.

É possível observar na figura 38 que os resultados obtidos com o MEF estão mais próximos dos resultados já obtidos com o MEC, principalmente nas regiões de máxima concentração.

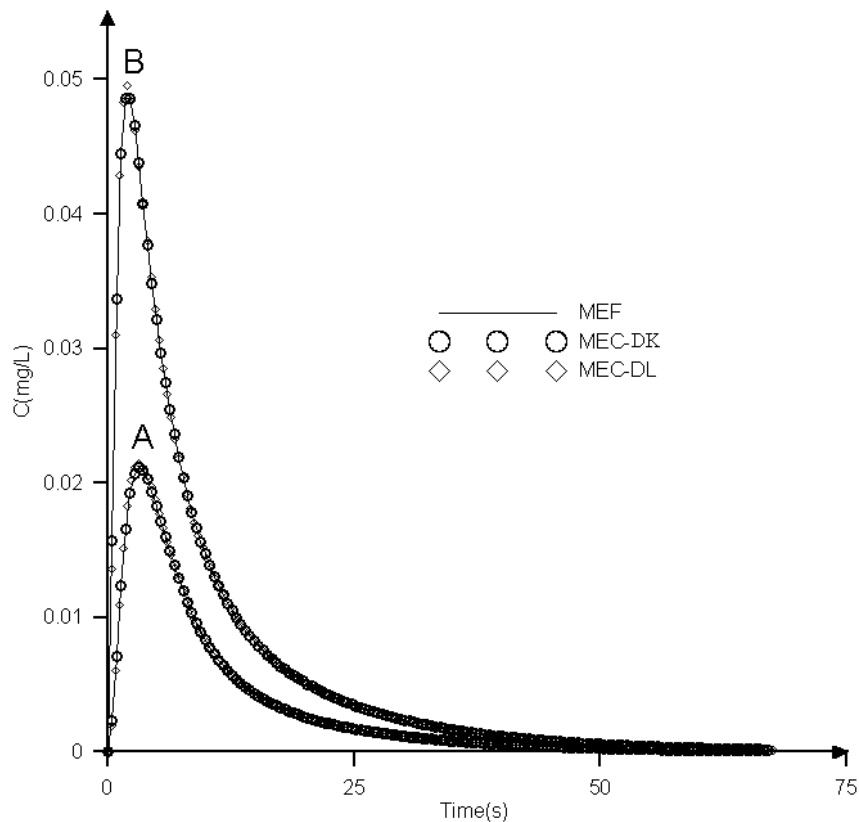


Figura 38: Domínio quadrado: evolução temporal da concentração do contaminante nos pontos A e B com a malha mais refinada.

A figura 39 mostra o espalhamento do contaminante no ponto de lançamento. É possível observar que a solução obtida com o MEC-DK apresentou uma queda de forma suave, não indicando qualquer instabilidade, já os resultados do MEF apresentaram oscilações na região de maior gradiente de concentração.

As figuras 40 a 45 apresentam a distribuição espacial do contaminante em alguns instantes de tempo. É possível observar que, como as componentes de velocidades são iguais ($v_x = v_y$), o contaminante sofre um espalhamento simétrico na direção da resultante das velocidades.

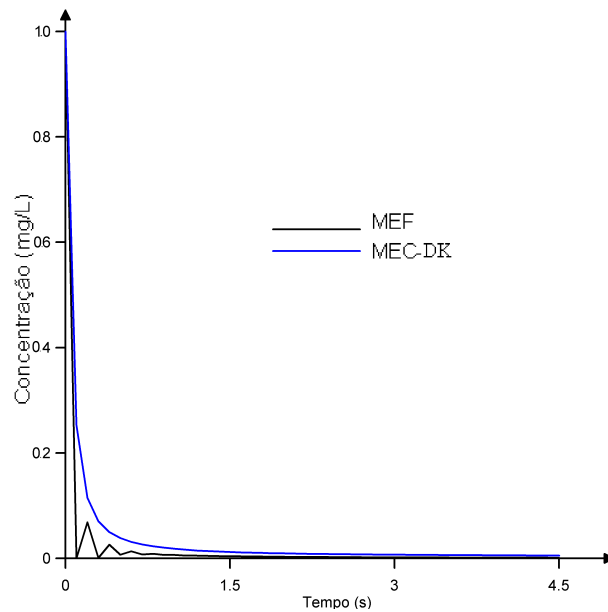


Figura 39: Espalhamento do contaminante no ponto de lançamento: Comparação entre MEC e MEF no nó $x = 5\text{m}$ e $y = 5\text{m}$

A figura 40 mostra a condição inicial aplicada ao problema; após 2 segundos do lançamento é possível perceber (figura 41), que o contaminante começa a espalhar, com pequeno deslocamento advectivo do centro de massa. Após 10 segundos (figura 42), o transporte advectivo do centro de massa é mais perceptível, levando a pluma de contaminante na direção do escoamento. Nas figuras 43 e 44 pode-se perceber que a pluma de contaminante é transportada de maneira simétrica, considerando que as velocidades nas direções x e y são iguais. E após o 100 segundos (figura 45) o centro de massa do contaminante está saindo do domínio, mantendo-se a direção do transporte advectivo.

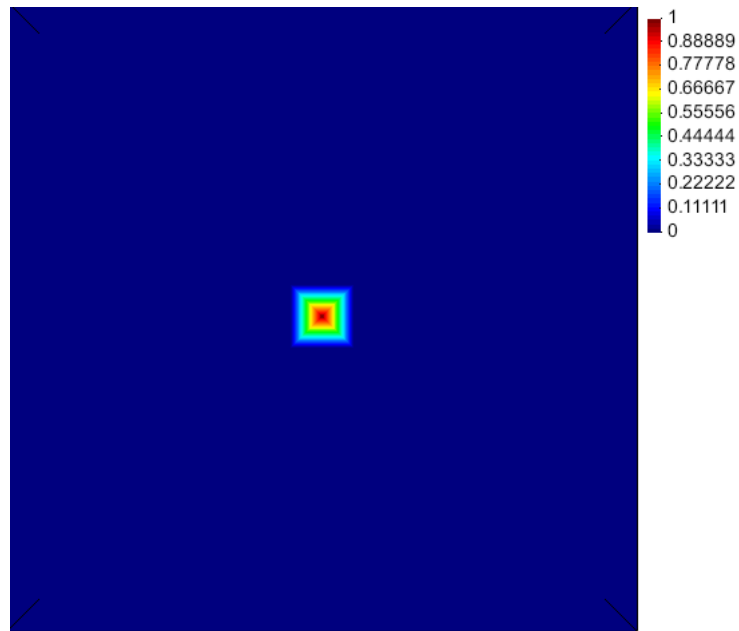


Figura 40: Concentração, em mg/L, no instante $t=0s$

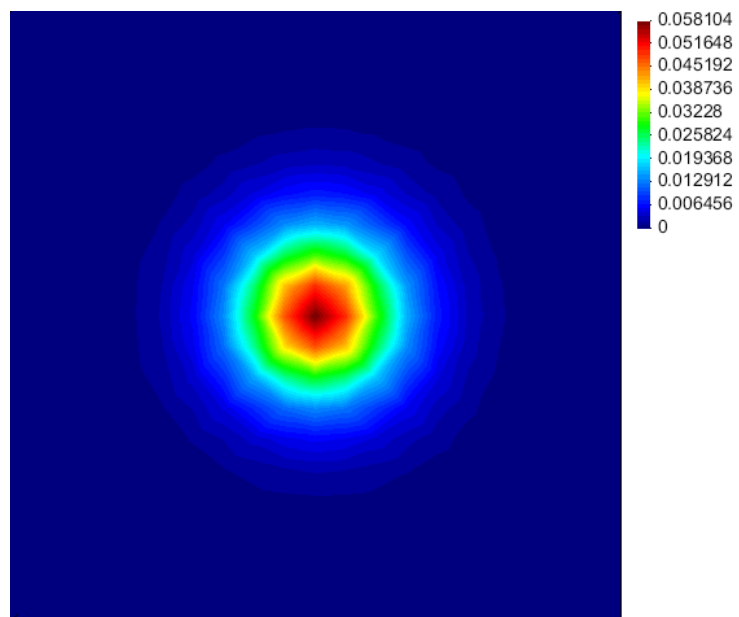


Figura 41: Concentração, em mg/L, no instante $t=2s$

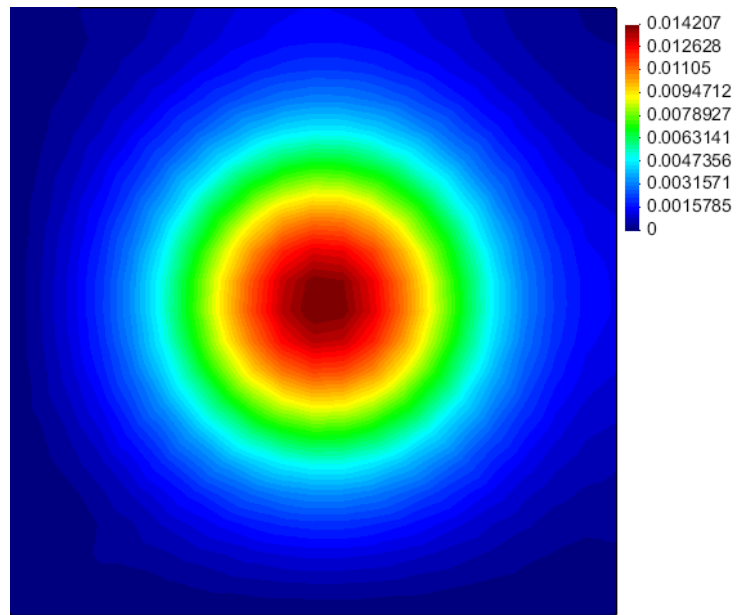


Figura 42: Concentração, em mg/L, no instante $t=10s$

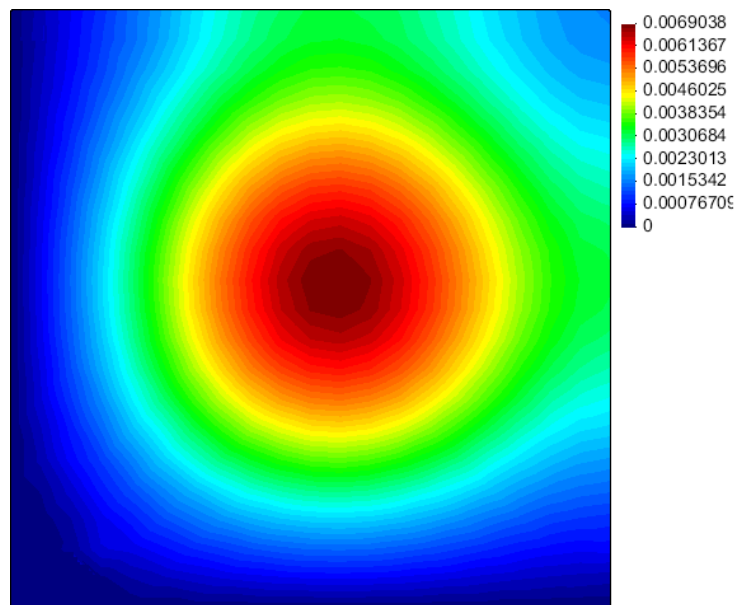


Figura 43: Concentração, em mg/L, no instante $t=20s$

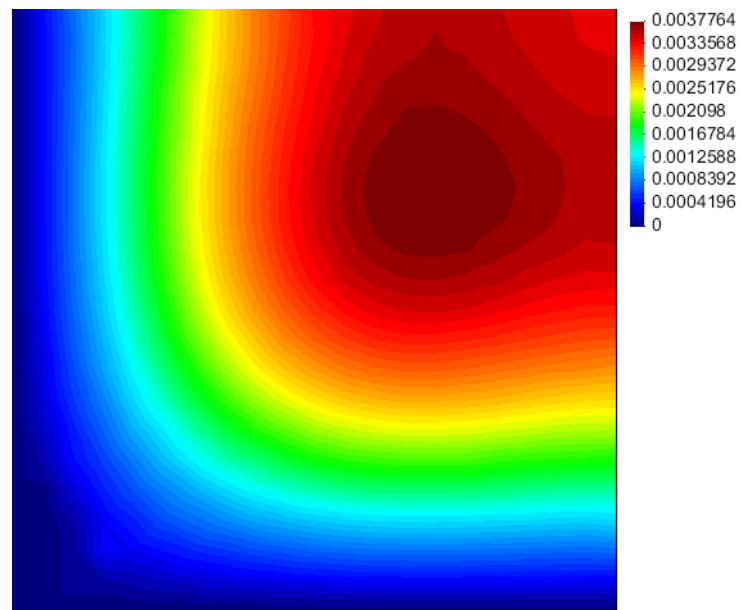


Figura 44: Concentração, em mg/L, no instante $t=40s$

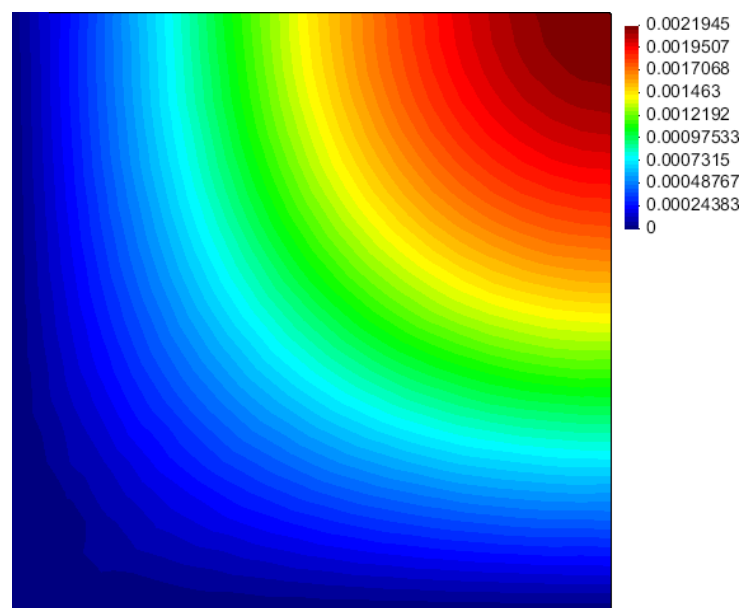


Figura 45: Concentração, em mg/L, no instante $t=100s$

4.5 Simulação 5

Esse experimento foi desenvolvido somente com a formulação MEC-DL, e será aplicado o perfil de velocidades variável parabólico, conforme descrito pela equação 3.82. As malhas utilizadas no MEC e no MEF são as mesmas descritas no experimento 1. O problema consiste no lançamento de uma fonte permanente uniformemente distribuída na seção transversal do canal, no ponto $x = 0$. A água escoa no canal com velocidade $v_y = 0$, a velocidade máxima no centro do canal é $v_x = 0.1 \text{ m/s}$ e o coeficiente de dispersão $D = 2 \text{ m}^2/\text{s}$. Apesar do escoamento ser em um canal alinhado com o eixo x , a presença do perfil de velocidade variável, gerando advecção na direção x , e dispersão nas direções x e y , fazem com que o problema seja um problema bi-dimensional. As condições de contorno do problema são: $C(x = 0, y, t) = 1 \text{ mg/L}$ e fluxo normal nulo ao longo dos contornos laterais. As condições iniciais correspondem a: $C(x, y, t = 0) = 0$. Para o MEC foi utilizado $\Delta t = 1 \text{ s}$ e para o MEF $\Delta t = 0.5 \text{ s}$. Esse problema também não possui solução analítica conhecida pelo autor.

A figura 46 apresenta os resultados da concentração ao longo do tempo nos pontos $A(3; 1)$ e $B(6; 1)$. Novamente pode-se verificar boa concordância entre os resultados numéricos e a boa estabilidade dos resultados tanto do MEC quanto do MEF, mas nesse experimento é possível perceber que houve um certo abatimento na solução do MEC, comparativamente à solução do MEF. Isso aconteceu nas regiões em que os gradientes de concentração são mais severos. A formulação proposta para o MEC no presente trabalho foi capaz de descrever muito bem o comportamento do contaminante, não produzindo oscilações e nem perturbações, como é possível observar na figura 46.

As figuras 47 a 51 apresentam a distribuição espacial dos resultados obtidos com o MEC-DL para alguns instantes de tempo. Novamente é possível perceber que o MEC descreve muito bem o transporte da substância em todo o domínio do problema. A pluma de contaminante é transportada sobre toda extensão do canal, permanecendo com o perfil parabólico, indicando um maior transporte advectivo ao longo do eixo central do canal. Deve-se notar que, 2 segundos após o lançamento do contaminante, o modelo consegue reproduzir o transporte advectivo variável, formando uma pluma de contaminante no formato parabólico, conforme ilustra a figura 47. O transporte advectivo na forma parabólica, ao longo da seção transversal, impõe a pluma de contaminante uma forma semelhante, conforme pode ser observado nas figuras 48 e 49, e alcança o regime permanente no instante de tempo 50 segundos, como é possível verificar nas figuras 49 e 50.

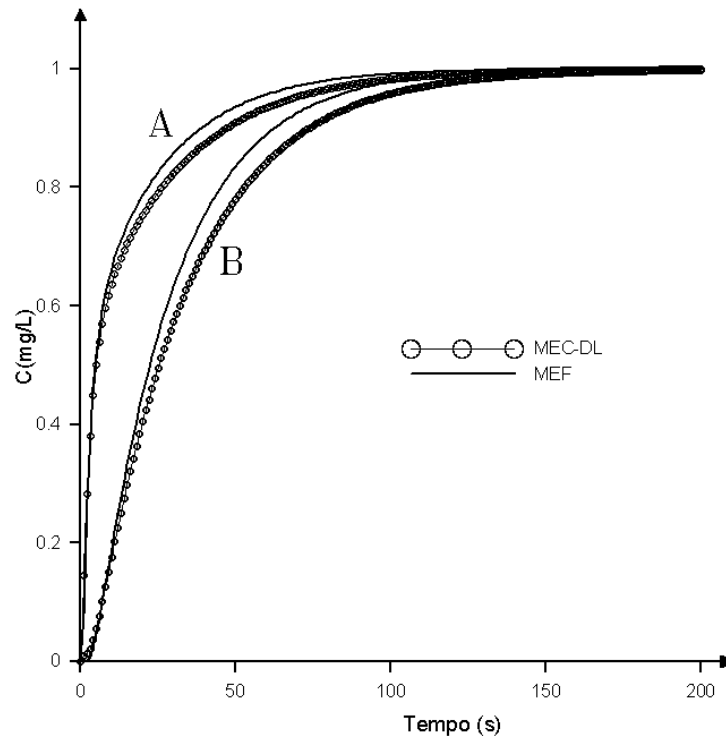


Figura 46: Perfil de velocidades parabólico: evolução temporal da concentração do contaminante nos pontos A e B.

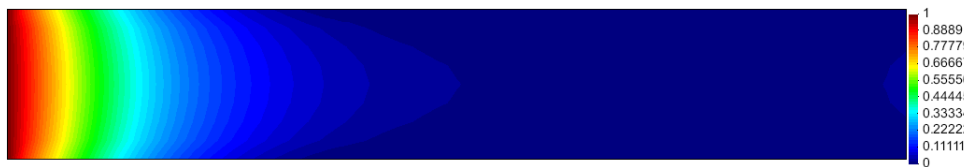


Figura 47: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=2s$

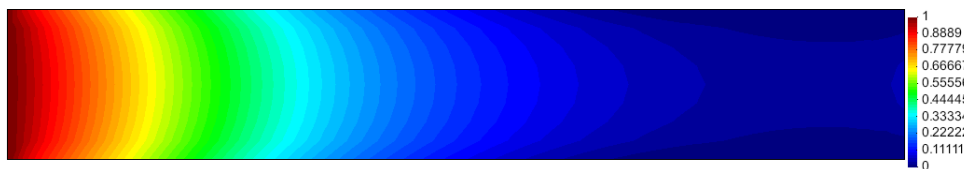


Figura 48: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=10s$

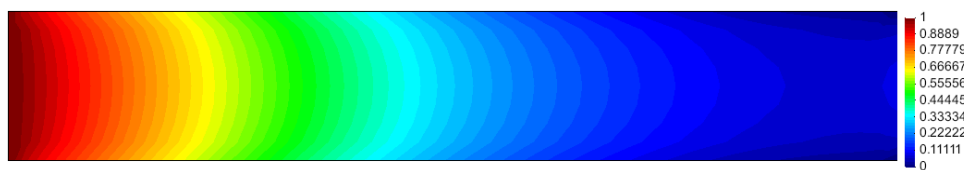


Figura 49: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=20s$

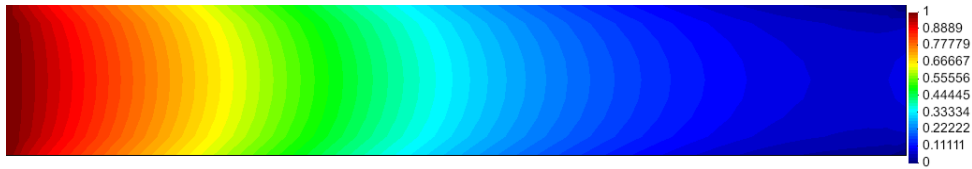


Figura 50: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=50s$

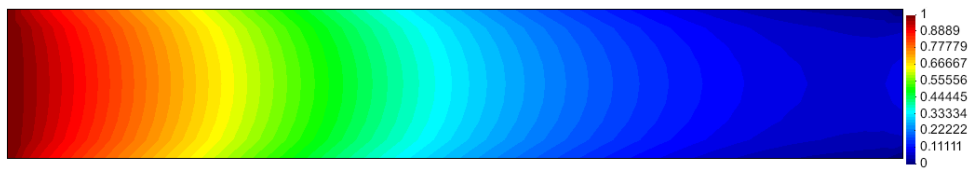


Figura 51: Concentração do contaminante, em mg/L, no instante de tempo $t=55s$

5 CONCLUSÕES

O presente estudo apresentou duas formulações do Método dos Elementos de Contorno para solução da equação da difusão-advecção bi-dimensional. A presença de uma integral de domínio na equação governante do MEC torna necessária a discretização do domínio do problema. O trabalho escrito por Romero e Benitez (2008) apresenta uma alternativa para essa integral.

A validação das formulações, usando a solução analítica apresentada no experimento 1, mostrou que o MEC é uma boa ferramenta para análise de problemas de transporte difusivo e advectivo de substâncias. Nos demais experimentos apresentados, os resultados numéricos das duas formulações do MEC foram comparados com as soluções obtidas a partir do modelo SisBAHIA[®], desenvolvido utilizando o Método dos Elementos Finitos. A comparação dos resultados entre os dois métodos foi extremamente satisfatórias.

A viabilidade computacional, em relação ao tempo de processamento do MEC, é um tópico ainda a ser analisado, e comparado com o tempo computacional do MEF, isso levando em conta ainda a acurácia dos resultados. Mas como foi observado nos experimentos, o MEC é capaz de obter resultados satisfatórios com passos de tempo bem maiores que os do MEF e empregando uma malha menos refinada que a do MEF. Já é conhecido que esses fatores (passo de tempo e tamanho da malha) influenciam na performance computacional dos métodos numéricos. Sendo assim, o MEC apresenta indicações de que é viável do ponto de vista computacional. Nesse trabalho, em todos os exemplos apresentados, os tempos de processamento para as formulações desenvolvidas para o MEC e o MEF implementado no SisBAHIA[®] não apresentaram diferenças significativas.

A formulação MEC-DL é capaz de lidar com campos de velocidades variável, o que expande as possibilidades de aplicações práticas do MEC para problemas de transporte de poluentes. Essa formulação foi testada com um perfil de velocidades parabólico, mostrado no experimento 5, e os resultados obtidos foram extremamente satisfatórios.

Essa formulação pode, ainda, ser utilizada para outros tipos de campos de velocidades, pois a formulação é uma generalização para campos de velocidades variável no espaço. É importante observar que as componentes de velocidade devem ser calculadas e armazenadas para que esses valores possam ser lidos ao longo da simulação.

A partir dos resultados obtidos nesse trabalho é possível observar que o MEC tem potencial para aplicações em problemas complexos relacionados à análise de transporte de substâncias em fluídos. Mas ainda, estudos mais abrangentes são necessários para que os modelos desenvolvidos utilizando o MEC possam se aproximar dos problemas reais. Sugestões para futuras pesquisas, que venham enriquecer o MEC, são apresentadas a seguir:

i) Considerar o coeficiente D variável nas direções x e y , possibilitando uma análise ainda mais próxima da realidade; por exemplo, em escoamentos em dutos e canais o coeficiente D_x possui ordem de grandeza diferente de D_y , devido à característica do escoamento, que é predominante na direção x . A introdução de coeficientes D_x e D_y variáveis no espaço e tempo também é um tópico a ser pesquisado.

ii) A introdução dos termos de reações cinéticas, principalmente de OD e DBO, que são os parâmetros mais utilizados na análise de qualidade de água, é também um assunto que deve ser abordado futuramente, pois tem grande importância em aplicações práticas para o problema proposto.

iii) A utilização de solução fundamental dependente do tempo também é uma possibilidade de aplicação, pois dispensa a necessidade de discretização de todo o domínio, restringindo a discretização somente nas regiões com condições iniciais não nulas. A viabilidade computacional do MEC, utilizando uma solução fundamental dependente do tempo, também é um tópico que merece atenção pois, com essa abordagem, as matrizes que aparecem nas integrais devem ser calculadas a cada passo de tempo, requerendo um esforço computacional adicional quando comparado às formulações apresentadas aqui.

iv) Métodos analíticos ou semi analíticos para as integrais que surgem das formulações são bem vindos, pois erros de aproximações numéricas nas integrações podem ser evitados, e uma maior acurácia dos resultados e diminuição do tempo de processamento podem ser alcançados.

A validação das formulações do MEC foram bem sucedidas em comparação com a solução analítica, mas é recomendado que os resultados sejam validados com dados reais, extraídos de medições feitas em campo ou experimentos feitos em laboratório. Esse tipo

de validação, principalmente para problemas que não possuem solução analítica podem confirmar a validade do MEC para problemas de transporte de substâncias em fluidos.

Referências

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *HANDBOOK of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables*. New York, EUA: New York: Dover, 1972.
- ANTONOPOULOS, V. Z.; GIANNIOU, S. K. Simulation of water temperature and dissolved oxygen distribution in lake vegoritis, greece. *Ecological Modelling*, USA, v. 160, p. 39–53, 2003.
- BATHE, K. J. *Finite Element Procedures*. New Jersey, EUA: PRENTICE HALL, New Jersey, 1996.
- BEAM, R. M.; WARMING, R. F. An implicit factored scheme for the compressible navier-stokes equations. *AIAA Journal*, USA, v. 16, p. 393–402, 1978.
- BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. *Elementary differential equations and boundary value problems. 8th ed.* EUA: New York etc.: John Wiley & Sons, Inc. XVI, 654 p., 1986.
- BOZKAYA, N.; TEZER-SEZGIN, M. Time domain bem solution of convection diffusion type mhd equations. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, USA, v. 56, p. 1969–1991, 2007.
- BREBBIA, C. A.; DOMINGUEZ, J. *Boundary elements: an introductory course*. UK: Computacional Mechanics Publications and McGraw-Hill, Southhampton, 1989.
- CARRER, J. A. M. *Técnicas implícitas para análise elastoplástica estática e dinamica com o método dos elementos de contorno*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Rio de Janeiro, 1991.
- CUNHA, C.; FERREIRA, A.; ROSMAN, P. Contribuições para o desenvolvimento da capacidade de previsão de um modelo de qualidade de água. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, Rio de Janeiro, v. 11, p. 71–83, 2006.
- CUNHA, C.; MONTEIRO, T.; ROSMAN, P. Modelagem bidimensional de transporte de escalares não-conservativos em corpos d’água rasos. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 7, p. 120–129, 2002.
- CUNHA, C. et al. Hydrodynamics and water quality models applied to sepetiba bay. *Continental Shelf Research*, v. 26, p. 1940–1953, 2006.
- CUNHA, C. L. N.; ROSMAN, P. C.; FERREIRA, A. P. Hydrodynamics and water quality models applied to sepetiba bay. *Continental Shelf Research*, Seattle, USA, v. 26, p. 1940–1953, 2006.
- DHAWAN, S.; KAPOOR, S.; KUMAR, S. Numerical method for advection diffusion equation using fem and b-splines. *Journal of Computational Science*, v. 3, p. 429–437, 2012.

- FRAGOSO, C.; MARQUES, D.; FERREIRA, T. *Modelagem Ecológica em ecossistemas aquáticos*. São Paulo: Oficina de Textos, 2009.
- GREENBERG, M. D. *Advanced Engineering Mathematics*. 2. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1998.
- GRIGORIEV, M. M.; DARGUSH, G. F. Efficiency of boundary element methods for time-dependent convective heat diffusion at high pecelet numbers. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, v. 21, 2005.
- LEITHOLD, L. *O Cálculo com geometria analítica V. 1*. 3. ed. São Paulo: Harbra, 1990.
- LEITHOLD, L. *O Cálculo com geometria analítica V. 2*. 3. ed. São Paulo: Harbra, 1990.
- LI, B. Q.; EVANS, J. Boundary element solution of heat convection-diffusion problems. *Journal of Computational Physics*, v. 93, p. 255–272, 1991.
- LOWRY, T.; LI, S. G. A finite analytic method for solving the 2-d time-dependent advection-diffusion equation with time-invariant coefficients. *Advances in Water Resources*, v. 28, p. 117–133, 2005.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC -Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 1995.
- MANSUR, W. J. *A Time-Stepping technique to solve wave propagation problems using the Boundary Element Method*. Tese (Doutorado) — University of Southampton, Southampton, 1983.
- OCHIAI, Y.; SLADEK, V.; SLADEK, J. Transient heat conduction analysis by triple-reciprocity boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 30, p. 194–204, 2006.
- PETRES, R. *Formulação do método dos elementos de contorno para análise da difusão e geração de calor em meios contínuos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba, 2014.
- PORTO, L. L. R. et al. *Hidrologia Ambiental*. SP, Brasil: Editora da Universidade de São Paulo, 1991.
- PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing*. 3. ed. New York, USA: Cambridge University Press, 2007.
- PRIETO, F. U.; MUNOZ, J. J. B.; CORVINOS, L. G. Application of the generalized finite difference method to solve the advection-diffusion equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 235, p. 1849–1855, 2011.
- QIU, Z. H.; WROBEL, L.; POWER, H. Numerical solution of convection-diffusion problems at high pecelet number using boundary elements. *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, v. 41, p. 899–914, 1998.
- ROMERO, L.; BENITEZ, F. G. A boundary element numerical scheme for the two-dimensional convection-diffusion equation. *International Journal For Numerical Methods in Engineering*, v. 76, p. 2063–2090, 2008.

- ROSMAN, P. Referência técnica do sisbahia – sistema base de hidrodinâmica ambiental (in portuguese). *Programa COPPE: Engenharia Oceânica, Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica*, Rio de Janeiro, Brasil, v. 26, 2005. Disponível em: http://www.sisbahia.coppe.ufrj.br/SisBAHIA_RefTec_V90.pdf.
- SCHLICHTING, H. *Boundary Layer Theory*. 7. ed. New York: McGraw Hill Book Company, 1979.
- SOARES, D. Acoustic modelling by bem-fem coupling procedures taking into account explicit and implicit multi-domain decomposition techniques. *International Journal For Numerical Methods In Engineering*, v. 78, p. 1076–1096, 2009.
- SOLHEID, B.; GOBBI, M. F.; TORII, A. J. Calibration of analytical solutions to problems of pollutant dispersion in the surf zone. *Mecanica Computacional*, Buenos Aires, Argentina, XXIX, p. 3891–3907, 2010.
- SZABO, B.; BABUSKA, I. *Finite Element Analysis*. 1. ed. New York, USA: John Wiley and Sons, INC., 1991.
- TAGUTI, Y. *Método dos Elementos de Contorno na resolução do problema de segunda ordem em placas delgadas*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo - UNESP, Guaratinguetá, 2010.
- TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L. *A first course in turbulence*. 9. ed. São Paulo: Cambridge, Mass. The MIT Press, 1983.
- WROBEL, L. C. et al. *Métodos Numéricos em recursos hídricos*. 1. ed. Porto Alegre, BR: Associação Brasileira de Recursos Hídricos - ABRH, 1989.
- YADA, S. K.; KUMAR, A.; KUMAR, N. Horizontal solute transport from a pulse type source along temporally and spatially dependent flow: Analytical solution. *Journal of Hydrology*, USA, v. 412, p. 193–199, 2012.
- ZHAO, C.; XU, T.; VALLIAPPAN, S. Numerical modelling of mass transport problems in porous media: A review. *Computers and Structures*, v. 53, p. 849–860, 1994.
- ZOPPOU, C.; KNIGHT, J. H. Analytical solution of a spatially variable coefficient advection-diffusion equation in up to three dimensions. *Applied Mathematical Modelling*, USA, v. 23, p. 667–685, 1999.

6 Anexo A

O desenvolvimento da solução fundamental para equação da difusão-advecção bi-dimensional com coeficientes constantes é apresentado.

Seja a equação diferencial parcial dada por:

$$D\nabla^2 u^* + \vec{v} \cdot \nabla u^* - \frac{\partial u^*}{\partial t} = -\delta(\xi, X) \quad (6.1)$$

onde $\delta(\xi, X)$ representa a função delta de Dirac.

Sujeita a seguinte condição inicial:

$$u(X, t = 0) = 0 \quad (6.2)$$

Aplicando a transformada de Fourier (GREENBERG, 1998) em ambos os lados da equação 6.1, tem-se:

$$F_{xy} \{ D\nabla^2 u^* \} + F_{xy} \{ \vec{v} \cdot \nabla u^* \} - F_{xy} \left\{ \frac{\partial u^*}{\partial t} \right\} = \hat{\delta} \quad (6.3)$$

Onde F_{xy} é representada a transformada de Fourier em x e y , e $\hat{\delta}$ representa a transformada de Fourier da função δ .

Desenvolvendo o primeiro termo do lado direito da equação 6.3, resolvendo a transformada primeiramente em x tem-se:

$$F_x \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = (iw_x)^2 \hat{u} \quad (6.4)$$

$$F_x \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial^2 F_x(u)}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} \quad (6.5)$$

Assim tem-se:

$$F_x \{D\nabla^2 u^*\} = -w_x^2 \widehat{u} + \frac{\partial^2 \widehat{u}}{\partial y^2} \quad (6.6)$$

Aplicando a transformada em y e agrupando os termos tem-se:

$$F_{xy} \{D\nabla^2 u^*\} = -w_x^2 \widehat{\widehat{u}} - w_y^2 \widehat{\widehat{u}} \quad (6.7)$$

Agora aplicando a transformada no segundo termo da equação 6.3, tem-se:

$$F_{xy} \{\vec{v} \cdot \nabla u^*\} = iw_x v_x \widehat{u} + iw_y v_y \widehat{u} \quad (6.8)$$

Agrupando os termos e escrevendo na forma vetorial, a equação 6.3 transformada fica:

$$\frac{\partial \widehat{\widehat{u}}}{\partial t} - A \widehat{\widehat{u}} = \widehat{\delta} \quad (6.9)$$

onde $A = \|w\|^2 D + iw\vec{v}$

O que se tem em 6.9 é uma equação diferencial ordinária, que pode ser resolvida aplicando transformada de Laplace (GREENBERG, 1998). Aplicando a transformada de Laplace na equação 6.9.

$$s \widehat{\widehat{\widehat{u}}} - \widehat{\widehat{u}}(t=0) - A \widehat{\widehat{\widehat{u}}} = \widehat{\widehat{\delta}} \quad (6.10)$$

Como a condição inicial é nula, e agrupando os termos tem-se que:

$$\widehat{\widehat{\widehat{u}}} = \frac{\widehat{\widehat{\delta}}}{s - A} \quad (6.11)$$

Agora basta fazer a transformada inversa de 6.11 que fica:

$$\widehat{\widehat{u}} = \widehat{\delta} * L^{-1} \left\{ \frac{1}{s - A} \right\} \quad (6.12)$$

Onde L^{-1} é a transformada inversa de Laplace, e $*$ representa a operação de convolução da transformada inversa.

$$\widehat{u} = \widehat{\delta} * e^{-At} \quad (6.13)$$

Aplicando a transformada inversa de Fourier em x e após em y tem-se:

$$u = \frac{1}{4D\pi(t-\tau)} e^{\frac{-(x-\xi_x-v_x(t-\tau))^2-(y-\xi_y-v_y(t-\tau))^2}{4D\pi(t-\tau)}} \quad (6.14)$$

A equação 6.14 é a solução fundamental utilizada no MEC, mas essa solução é dependente do tempo, como nesse trabalho será utilizada uma solução fundamental do problema estático, a equação 6.14 será integrada em relação à τ .

$$u = \int_0^t \frac{1}{4D\pi(t-\tau)} e^{\frac{-(x-\xi_x-v_x(t-\tau))^2-(y-\xi_y-v_y(t-\tau))^2}{4D\pi(t-\tau)}} d\tau \quad (6.15)$$

Resolvendo a integral definida na equação 6.15 obtém-se a solução fundamental da estática para o MEC.

$$u^* = \frac{K_0(A.r)}{2D\pi} e^{\frac{-\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \quad (6.16)$$

Onde \vec{v} é o vetor velocidade, \vec{r} é o vetor que representa a distância entre o ponto fonte e o ponto campo, que é dado por:

$$r = \sqrt{(x - \xi_x)^2 + (y - \xi_y)^2} \quad (6.17)$$

e o termo A que aparece no argumento da função de Bessel é dado por:

$$A = \frac{|\vec{v}|}{2D} \quad (6.18)$$

$\backslash\text{símbolo}\{D\}$

$\backslash\text{símbolo}\{v_x\}$

$\backslash\text{símbolo}\{v_y\}$

$\backslash\text{símbolo}\{C\}$

$\backslash\text{símbolo}\{C^*\}$

$\backslash\text{símbolo}\{q\}$

$\backslash\text{símbolo}\{q^*\}$

$\backslash\text{símbolo}\{\dot{C}\}$

$\backslash\text{símbolo}\{K_0\}$

$\backslash\text{símbolo}\{K_1\}$

$\backslash\text{sigla}\{\text{ABNT}\} \{\text{Descrição}\}$