

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

VIVIANNE LUIZA COSTA

UMA FORMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE
CONTORNO NO DOMÍNIO DO TEMPO PARA O PROBLEMA DA
DIFUSÃO-ADVECÇÃO BIDIMENSIONAL

CURITIBA

2016

VIVIANNE LUIZA COSTA

UMA FORMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE
CONTORNO NO DOMÍNIO DO TEMPO PARA O PROBLEMA DA
DIFUSÃO-ADVECÇÃO BIDIMENSIONAL

Tese de doutorado apresentada como requisito parcial
à obtenção do grau de Doutora em Ciências pelo
Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos
em Engenharia, Área de Concentração em Mecânica
Computacional, Setor de Tecnologia da Universidade
Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. José Antonio Marques Carrer
Coorientador: Prof. Ph.D. Guilherme Bontorin Alves

CURITIBA

2016

*Dedico esta tese de doutorado à minha mãe Regina,
ao meu pai Jamil e ao meu irmão Junior, com muito carinho.*

Agradecimentos

À Deus, pelo conhecimento e sabedoria que me concedeu para chegar até aqui.

Ao meu querido Guilherme, pelo incentivo e coragem que me deu para estudar Física aqui na UFPR, pelos trabalhos em parceria na UFRGS, de extrema importância para minha carreira profissional, pela ajuda com as figuras e com o texto dessa tese de doutorado, mas principalmente, por todo o cuidado e amor que tem tido por mim.

Aos meus pais, Regina e Jamil, pelo amor, pelo cuidado, pelo incentivo e por toda ajuda financeira nos estudos.

À minha querida tia Rose, pelo apoio que sempre me deu, pela ajuda nos momentos mais difíceis e, principalmente, pelo seu carinho incondicional.

À minha amiga Zulmeia, pelos seus conselhos e suas experiências de vida, mas principalmente, por saber que sempre posso contar com ela.

Ao meu orientador, Prof. Carrer, pela confiança, pela paciência, pela parceria no desenvolvimento desse trabalho, mas principalmente, por repassar seus conhecimentos sempre com humildade e muito bom humor.

Aos professores, membros da banca examinadora, que gentilmente aceitaram o meu convite para fazer parte dela, em especial ao Prof. Mansur, pela disposição em vir para Curitiba e pelos ensinamentos transferidos, sempre com muito carisma.

Ao colega do PPGMNE, Raphael Scuciato, pela ajuda nas disciplinas do curso e com os demais trabalhos relacionados.

Ao secretário do PPGMNE, Jair dos Anjos, que esteve sempre pronto a ajudar nos serviços burocráticos, com muita presteza, simpatia e dedicação.

À CAPES, pelo apoio financeiro de extrema importância para a realização dessa obra.

“Tenho a impressão de ter sido uma criança brincando à beira-mar, divertindo-me em descobrir uma pedrinha mais lisa ou uma concha mais bonita que as outras, enquanto o imenso oceano da verdade continua misterioso diante de meus olhos.” (Isaac Newton)

Resumo

O fenômeno da dispersão de poluentes ao longo de rios, estuários e reservas subterrâneas é um problema de interesse social, econômico e ambiental de extrema importância. Este é um exemplo de problema transiente que pode ser modelado pela equação da difusão-advecção bidimensional. Neste trabalho, foi desenvolvida uma formulação para tal classe de equações utilizando o Método dos Elementos de Contorno no Domínio do Tempo, denotado por MEC-DT. As formulações MEC-DT empregam soluções fundamentais dependentes do tempo. Além de reduzir a dimensão do domínio do problema, como todas as formulações do Método de Elementos de Contorno (MEC), a formulação MEC-DT tem a vantagem de facilitar a discretização. Por exemplo, em problemas onde a condição inicial é homogênea, apenas o contorno necessita ser discretizado. Na presença de condição inicial não homogênea, o método requer a discretização somente da parte do domínio referente à ocorrência da condição inicial. Os resultados da formulação MEC-DT foram validados em exemplos com condições iniciais e de contorno apropriadas. Quando comparados com as respectivas soluções analíticas ou com outra solução do MEC, o MEC-DT apresenta bastante acurácia. Especificamente, a formulação MEC-DT é a única formulação do MEC capaz de simular um caso em que a condição inicial é representada por um Delta de Dirac.

Palavras-chave: Método dos Elementos de Contorno no Domínio do Tempo (MEC-DT). Equação da Difusão-Advecção. Dispersão de Poluentes.

Abstract

The dispersion of pollutant on rivers, estuaries or groundwater is an extremely important problem concerning social, economic and environment aspects of everyday life. It is an example of transient problem that can be modeled by the two-dimensional diffusion-advection equation. This work presents a formulation for such a class of equations using Time-Domain Boundary Element Method (TD-BEM). These formulations use time-dependent fundamental solutions. Moreover than reducing the dimension of the domain, as all other Boundary Element Methods (BEM) does, the application of TD-BEM facilitates discretization. For example, only the boundaries need to be discretized on problems with a homogeneous initial condition. On the presence of a non-homogeneous initial condition, the domain discretization is carried out only on the region with initial condition. The TD-BEM is tested on examples with appropriated initial and boundary conditions. TD-BEM solutions proved to be accurate when compared to the respective analytic solution or with other BEM solution. Moreover, the TD-BEM is the only BEM formulation that can simulate a case with a Delta-Dirac as initial condition.

Keywords: Time-Domain Boundary Element Method (TD-BEM). Diffusion-Advection Equation. Pollutant Dispersion.

Lista de ilustrações

FIGURA 1 – Rio Tietê em Pirapora do Bom Jesus/SP.	16
FIGURA 2 – Discretização em elementos de contorno (caso bidimensional).	18
FIGURA 3 – Fluxo total na direção x em um elemento diferencial de volume.	25
FIGURA 4 – Domínio Ω e contorno Γ de um problema genérico.	33
FIGURA 5 – Ângulo interno α	38
FIGURA 6 – Exemplo 1 - Discretização do contorno.	41
FIGURA 7 – Exemplo 1 - Resultados para P_1, P_2, P_3 e P_4	41
FIGURA 8 – Exemplo 1 - Resultados para $Pe = 10$	42
FIGURA 9 – Exemplo 1 - Resultados para $Pe = 20$	43
FIGURA 10 – Exemplo 1 - Resultados para $Pe = 40$	43
FIGURA 11 – Exemplo 1 - Norma L_2	44
FIGURA 12 – Exemplo 2 - Teste 1.	46
FIGURA 13 – Exemplo 2 - Teste 2.	46
FIGURA 14 – Exemplo 2 - Teste 3.	47
FIGURA 15 – Exemplo 2 - Teste 4.	47
FIGURA 16 – Exemplo 2 - C em $t = 5$ s.	48
FIGURA 17 – Exemplo 2 - C em $t = 10$ s.	49
FIGURA 18 – Exemplo 2 - C em $t = 20$ s.	49
FIGURA 19 – Exemplo 2 - C em $t = 40$ s.	50
FIGURA 20 – Exemplo 2 - C em $t = 60$ s.	50
FIGURA 21 – Exemplo 2 - C em $t = 180$ s.	51
FIGURA 22 – Exemplo 3 - Descrição do problema.	51
FIGURA 23 – Exemplo 3 - Discretização do contorno.	52
FIGURA 24 – Exemplo 3 - Resultados para P_1 e P_2	53
FIGURA 25 – Exemplo 3 - C em $t = 2$ s.	53
FIGURA 26 – Exemplo 3 - C em $t = 3$ s.	54
FIGURA 27 – Exemplo 3 - C em $t = 5$ s.	54
FIGURA 28 – Exemplo 3 - C em $t = 7$ s.	55
FIGURA 29 – Exemplo 3 - C em $t = 10$ s.	55
FIGURA 30 – Exemplo 3 - C em $t = 20$ s.	56
FIGURA 31 – Exemplo 3 - C em $t = 40$ s.	56
FIGURA 32 – Exemplo 3 - C em $t = 60$ s.	57
FIGURA 33 – Exemplo 4 - Discretização do contorno	58
FIGURA 34 – Exemplo 4 - Resultados para P_1, P_2 e P_3	59
FIGURA 35 – Exemplo 4 - C em $t = 5$ s.	60
FIGURA 36 – Exemplo 4 - C em $t = 10$ s.	60

FIGURA 37 – Exemplo 4 - C em $t = 15$ s.	61
FIGURA 38 – Exemplo 4 - C em $t = 20$ s.	61
FIGURA 39 – Exemplo 4 - C em $t = 40$ s.	62
FIGURA 40 – Exemplo 4 - C em $t = 60$ s.	62
FIGURA 41 – Exemplo 5 - Resultados para P_1 e P_2	64
FIGURA 42 – Exemplo 5 - C em $t = 2$ s.	65
FIGURA 43 – Exemplo 5 - C em $t = 3$ s.	65
FIGURA 44 – Exemplo 5 - C em $t = 5$ s.	66
FIGURA 45 – Exemplo 5 - C em $t = 7$ s.	66
FIGURA 46 – Exemplo 5 - C em $t = 10$ s.	67
FIGURA 47 – Exemplo 5 - C em $t = 20$ s.	67
FIGURA 48 – Exemplo 5 - C em $t = 40$ s.	68
FIGURA 49 – Exemplo 5 - C em $t = 60$ s.	68
FIGURA 50 – Malha MEC-D do Exemplo 2.	81
FIGURA 51 – Malha MEC-D do Exemplo 3.	82

Lista de tabelas

TABELA 1 – Exemplo 2 - Testes.	45
TABELA 2 – Comparação dos métodos.	70

Lista de abreviaturas e siglas

MEC:	Método dos Elementos de Contorno
MDF:	Método das Diferenças Finitas
MEF:	Método dos Elementos Finitos
MVF:	Método dos Volumes Finitos
MEC-D:	Método dos Elementos de Contorno no Domínio
MEC-DR:	Método dos Elementos de Contorno com Dupla Reciprocidade
MEC-DT:	Método dos Elementos de Contorno no Domínio do Tempo

Lista de símbolos

C :	Concentração de poluentes
t :	Variável tempo
X :	Ponto campo: vetor de coordenadas (x, y)
D :	Coefficiente de difusão
U :	Velocidade de advecção na direção x
V :	Velocidade de advecção na direção y
K :	Termo de decaimento
Pe :	Número de Péclet
Ω :	Domínio do problema
Γ :	Contorno do problema
n :	Vetor normal ao contorno
n_x :	Derivada normal em relação a x
n_y :	Derivada normal em relação a y
Q :	Derivada de C em relação a n
\hat{C} :	Condição de contorno prescrita em Γ_C
\hat{Q} :	Condição de contorno prescrita em Γ_Q
C_0 :	Concentração de poluentes em $t = 0$
$\delta(X - \xi)$:	Delta de Dirac
ξ :	Ponto fonte
r :	Distância entre o ponto campo e o ponto fonte
C^* :	Solução fundamental dependente do tempo
Q^* :	Derivada em relação a n da solução fundamental dependente do tempo
C_0^* :	Solução fundamental dependente do tempo em $\tau = 0$
τ :	Tempo anterior a t

Δt :	Intervalo de tempo
Δl :	Dimensão do maior elemento na discretização
L :	Comprimento do domínio do exemplo abordado
$\mathbf{H}, \mathbf{G}, \mathbf{F}$:	Matrizes do sistema de equações da formulação MEC-DT.
$\mathbf{S}, \mathbf{N}, \mathbf{B}, \mathbf{M}$:	Matrizes do sistema de equações da formulação MEC-D.
\mathbf{I} :	Matriz identidade

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Definição do Problema	15
1.2	O Método dos Elementos de Contorno	17
1.3	Principais Aplicações do MEC	19
1.4	Objetivos do Trabalho	22
1.5	Organização do Trabalho	22
2	EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO	24
2.1	A Dedução da Equação da Difusão-Advecção	24
2.2	O Fluido Incompressível	27
2.3	O Número de Péclet	28
2.4	As Condições Iniciais e de Contorno	29
2.5	Soluções Analíticas Unidimensionais	30
2.5.1	Regime Estacionário	30
2.5.2	Difusão Pura	31
2.5.3	Difusão-Advecção	31
2.5.4	Difusão-Decaimento	31
3	FORMULAÇÃO MEC-DT	32
3.1	O MEC Aplicado à Equação da Difusão-Advecção	33
3.2	A Solução Fundamental Dependente do Tempo	36
3.3	Formação do Sistema de Equações	38
3.4	Intervalo de Tempo Crítico	39
4	ANÁLISE NUMÉRICA	40
4.1	Exemplo 1: Fluxo Unidimensional em um Domínio Semi-Infinito	40
4.2	Exemplo 2: Fluxo Bidimensional em um Domínio Retangular	45
4.3	Exemplo 3: Carga Instantânea Central em um Domínio Quadrado	51
4.4	Exemplo 4: Fonte Contínua em um Domínio Quadrado	57
4.5	Exemplo 5: Carga Pontual Concentrada	63
5	CONCLUSÃO	69
5.1	Trabalhos Futuros	70
	Referências	71

APÊNDICES	77
APÊNDICE A FORMULAÇÃO MEC-D	78
A.1 Malha MEC-D	81

1 INTRODUÇÃO

Os fenômenos da natureza são regidos por leis fundamentais da física, as quais, quando aplicadas a meios contínuos, são descritas por equações diferenciais, que dependendo do fenômeno em questão podem assumir inúmeras formas. Devido à complexidade das equações diferenciais, da geometria do meio contínuo e das suas condições iniciais e de contorno, geralmente não são encontradas soluções exatas para o problema.

Com o avanço da tecnologia, em especial dos computadores, a solução de equações diferenciais por meio de métodos numéricos tem sido intensamente aplicada, principalmente pela agilidade no processamento dos resultados. Nestes métodos numéricos, o domínio contínuo é substituído por um domínio discretizado e assim as coordenadas espaciais e temporais são substituídas por pontos através de técnicas matemáticas, as quais são características inerentes de cada método.

1.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Rios, estuários e reservas subterrâneas sempre foram alvos de lançamentos de resíduos produzidos pela atividade humana, seja por fontes domésticas, seja por efluentes industriais ou agrícolas. Ao longo dos anos, o aumento descontrolado da produção industrial, acompanhado pelo crescimento desenfreado da população urbana, conduziu a graves problemas de poluição da água em muitos rios, transformando alguns deles em esgotos a céu aberto. No entanto, em muitos países, onde foram instituídas rigorosas leis de proteção da qualidade da água, entre os anos de 1960 e 1980, esta situação foi atenuada. Apesar disso, as condições indesejáveis de qualidade da água podem persistir, sendo necessárias ainda muitas melhorias (CZERNUSZENKO; ROWINSKI, 2005).

A Figura 1 é uma fotografia, registrada em maio de 2015, do rio Tietê em Pirapora do Bom Jesus, cidade turística do interior do estado de São Paulo. A concentração de poluentes nas águas do rio produziu uma espuma branca, que levada pelo vento, atingiu casas, manchando roupas, paredes e a pintura de veículos. Além disso, o mau cheiro, provocado por uma espécie de gás liberado pela espuma, incomodou muito os moradores e afugentou os turistas. Isso é o resultado dos constantes depósitos de lixo e de esgoto lançados em um trecho do rio que, chegando próximo às comportas da barragem da Usina Hidrelétrica de Pirapora, formaram espumas pela movimentação das águas (OTEMPO, 2015).

Sabe-se que a má qualidade da água é o resultado de diversos processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem devido às múltiplas descargas de dejetos em determinadas

partes do rio. Uma boa compreensão e descrição desses processos, geralmente vinculados a modelos matemáticos, é necessária para que autoridades responsáveis possam desenvolver soluções apropriadas e estratégias de controle que atendam às leis de proteção da qualidade da água. Por exemplo, no caso de recursos hídricos, é imprescindível monitorar os sistemas para entender como atuam os agentes que provocam a degradação deste sistema e, com isso, desenvolver uma melhor gestão para minimizar os impactos causados (CUNHA et al., 2006). O lançamento de dejetos em recursos hídricos deve ser controlado, pois a concentração de substâncias prejudiciais à saúde deve ser inferior ao limite estabelecido pelos órgãos ambientais para que este recurso possa ser utilizado (OLIVEIRA, 2015).



FIGURA 1 – Rio Tietê em Pirapora do Bom Jesus/SP.

Os modelos matemáticos que descrevem a dispersão da poluição em rios, estuários e reservas subterrâneas geralmente são formados por uma ou mais equações diferenciais que descrevem a evolução no espaço-tempo de processos físicos, químicos e biológicos do sistema analisado. A Equação da Difusão-Advecção é um modelo matemático que simula o transporte de substâncias em meios líquidos. Trata-se de uma equação parabólica em derivadas parciais, que descreve o fenômeno físico onde partículas são transferidas dentro de um sistema devido a dois processos: a difusão e a advecção (ou convecção), tendo como base as leis da conservação da massa e da quantidade de movimento.

Obter soluções exatas (ou analíticas) para a Equação da Difusão-Advecção, em geral, é complicado devido ao grande número de parâmetros presentes na equação e

das condições de contorno do caso analisado. Além disso, quando encontradas, estas soluções analíticas possuem a desvantagem de serem aplicáveis apenas em problemas cuja geometria e condições de contorno são simples (MALISKA, 1995). Assim, por se tratar de um importante problema ambiental, a busca por soluções numéricas que resolvam este problema tem sido bastante estimulada nos últimos anos.

As primeiras formulações numéricas desenvolvidas para equacionar e solucionar este tipo de problema foram obtidas através do Método das Diferenças Finitas (MDF) (ATAIE-ASHTIANI; HOSSEINI, 2005; PRIETO; MUNOZ; CORVINOS, 2011). Posteriormente, o Método dos Volumes Finitos (MVF) surgiu como uma poderosa ferramenta (MALISKA, 1995). A partir de 1970 o Método dos Elementos Finitos (MEF) passou a ser utilizado na maioria das formulações, pela sua capacidade de trabalhar com malhas em domínios com geometrias complexas (DHAWAN; KAPOOR; KUMAR, 2012).

Um método que tem chamado a atenção de muitos pesquisadores ao longo dos últimos anos, principalmente pela sua eficácia e acurácia nos resultados, é o Método dos Elementos de Contorno (MEC) (BREBBIA, 1978; BREBBIA; TELLES; WROBEL, 1984). O MEC é empregado na solução de diversos problemas complexos de engenharia, pois trata-se de uma técnica numérica que consiste em transformar a equação diferencial que descreve o problema analisado em uma equação integral de contorno, resultando na redução da dimensão do problema.

1.2 O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

Nos últimos anos, o MEC emergiu como uma ferramenta poderosa para solucionar problemas complexos de engenharia. Trata-se de um método numérico que transforma a equação de domínio do problema em uma integral que relaciona valores do contorno. Em seguida, a integral de contorno é resolvida numericamente a partir da discretização do contorno em segmentos (para o caso bidimensional) chamados de elementos de contorno que são conectados por pontos ou nós, como na Figura 2.

Condições de contorno são impostas em cada elemento e funções de interpolação são utilizadas para aproximar os valores das variáveis no contorno. Uma vez que as integrais em cada elemento são resolvidas, obtém-se um sistema de equações algébricas, cuja solução fornece os valores das incógnitas no contorno. As incógnitas no domínio (ou nos pontos internos) são obtidas após o cálculo dos valores no contorno, pela aplicação direta da expressão geral da formulação do MEC (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 1984).

A principal vantagem em trabalhar com o MEC é que ele não requer a discretização do domínio em problemas homogêneos, conseqüentemente, a dimensão do problema é reduzida. Assim, em problemas bidimensionais, apenas o contorno unidimensional do

domínio necessita ser discretizado, enquanto que em problemas tridimensionais, apenas a superfície bidimensional do contorno é discretizada (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1989).

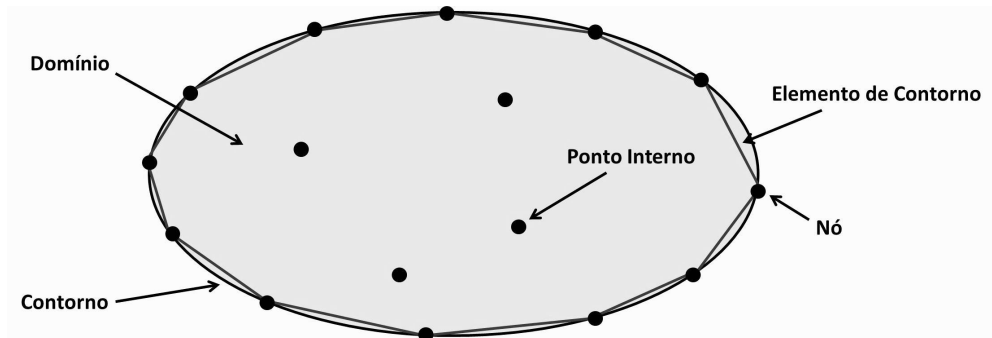


FIGURA 2 – Discretização em elementos de contorno (caso bidimensional).

Comparado a outros métodos como, por exemplo, o MDF ou o MEF, isso resulta em uma redução do esforço de modelagem computacional e em um sistema menor de equações algébricas. Outra vantagem em relação ao MDF e ao MEF é que, para determinadas classes de problemas, onde o domínio é infinito ou semi-infinito, a acurácia nos resultados é maior (ALIABADI, 2002).

Inúmeras são as técnicas matemáticas utilizadas a fim de transformar a equação diferencial em uma integral de contorno, porém, nos últimos anos, a formulação do MEC tem sido desenvolvida a partir de uma sentença do Método dos Resíduos Ponderados (ZIENKIEWICZ; MORGAN, 1983). Neste método a solução da equação é aproximada por expressões em séries de funções conhecidas, com coeficientes α_n a determinar, as chamadas funções de forma ϕ_n , tal como:

$$\tilde{u} = \sum_n \alpha_n \phi_n, \quad (1)$$

onde \tilde{u} é uma solução aproximada. A substituição de \tilde{u} no problema original resulta em uma função erro ou função resíduo R . Com o intuito de anular a média ponderada do resíduo no domínio Ω do problema, faz-se:

$$\int_{\Omega} w_n R d\Omega = 0, \quad (2)$$

onde w_n são as funções de ponderação, cuja escolha resulta em diferentes métodos numéricos (FINLAYSON, 1972). Uma das grandes vantagens deste método e, por conseguinte, a razão de sua grande aceitação, vem do fato de que para obtenção da formulação numérica, pode-se deduzi-la diretamente a partir da equação que define o fenômeno físico em estudo.

No caso do MEC, a função de ponderação é substituída pela Solução Fundamental do operador diferencial do problema analisado (BREBBIA, 1978). Isto é, se a equação diferencial é dada por:

$$\mathcal{L}f(X) = g(X), \quad (3)$$

onde $f(X)$ e $g(X)$ são funções definidas em todo o domínio do problema, \mathcal{L} é um operador diferencial e X um ponto qualquer do domínio, a solução pode ser calculada por meio de uma Função de Green $G(X, \xi)$, que é solução da equação:

$$\mathcal{L}G(X, \xi) = \delta(X - \xi). \quad (4)$$

A Função de Green $G(X, \xi)$ representa o efeito em um ponto campo X de uma fonte que age em um ponto escolhido ξ , tais fontes são representadas pelo delta de Dirac: $\delta(X - \xi)$.

Na ausência de condições de contorno, $G(X, \xi)$ é chamada de Solução Fundamental (OLIVEIRA, 2015). Sendo assim, cada problema possui uma solução fundamental correspondente (POLYANIN, 2002).

Entre os desafios encontrados para se implementar as formulações do MEC, merece ser destacada a resolução de integrais singulares ou impróprias, provenientes da solução fundamental utilizada. A busca de soluções fundamentais para problemas complexos de engenharia também é um desafio do MEC.

1.3 PRINCIPAIS APLICAÇÕES DO MEC

Estudos recentes mostram o MEC como uma ferramenta eficaz na resolução de problemas complexos de física e de engenharia. São inúmeras as áreas de abrangência, entre elas podem ser citadas: dinâmica de estruturas (BESKOS, 2003), dinâmica dos fluidos e acústica (WROBEL, 2002), elastodinâmica (SOARES-JR; MANSUR, 2004), etc.

As formulações do MEC para problemas dinâmicos que envolvem integrais de domínio podem ser classificadas em: (i) MEC-D (com D significando domínio), (ii) MEC-DR (com DR significando dupla reciprocidade) e (iii) MEC-DT (com DT significando domínio do tempo).

As formulações MEC-D e MEC-DR têm uma origem comum: ambas empregam a solução fundamental correspondente ao problema estacionário. Se a integral de domínio é

mantida na equação integral, surge então a formulação MEC-D. Mas, se a transformação da integral de domínio em integrais de contorno é feita por meio de funções de interpolação específicas, é gerada a formulação MEC-DR. Tanto na formulação MEC-D quanto na formulação MEC-DR, geralmente o integrando é constituído pela solução fundamental multiplicada pela derivada primeira em relação ao tempo da variável do problema. Além disso, ambas as formulações requerem a discretização de todo o domínio do problema. Nestas formulações, a escolha de um regime de marcha no tempo também se torna necessária (CARRER; CUNHA; COSTA, 2015).

Inúmeras são as aplicações que utilizam a formulação MEC-D. Entre elas estão: análises elastoplásticas (HATZIGEORGIOU; BESKOS, 2002), análises elastodinâmicas (CARRER; MANSUR, 2004) e problemas de difusão de calor (VANZUIT, 2007; CARRER et al., 2012; PETTRES, 2014). Para o problema difusivo-advectivo, em Ikeuchi e Onishi (1983) são encontradas duas formulações MEC-D. A primeira, denominada pelos autores de Direta, utiliza a solução fundamental do operador difusivo-advectivo. A segunda, chamada de Iterativa, adota a solução fundamental de Laplace. Já em Pettres (2014) adotou-se a solução fundamental para o operador adjunto Laplaciano e diferentes valores para a velocidade advectiva foram testados em um caso de escoamento laminar. Em Oliveira (2015) encontra-se a formulação MEC-D para o caso bidimensional da Equação da Difusão-Advecção, a qual utiliza uma solução fundamental que corresponde ao regime estacionário. A solução fundamental é uma função de Bessel modificada de segundo tipo e de ordem zero. Neste mesmo trabalho também é sugerida uma formulação onde o campo de velocidades advectivas é variável no espaço.

As formulações MEC-DR também compreendem diversos casos, vide Partridge, Brebbia e Wrobel (1992). Além das análises elastoplásticas (KONTONI; BESKOS, 1993), elastodinâmicas (AGNANTIARIS; POLYZOS; BESKOS, 1996), dinâmica de estruturas (AGNANTIARIS; POLYZOS; BESKOS, 1998) e de difusão do calor (OCHIAI, 2001; TANAKA; KUROKAWA; MATSUMOTO, 2008; GUO et al., 2013), na literatura são encontrados alguns trabalhos difusivo-advectivos. Em Singh e Tanaka (2003), por exemplo, as chamadas Funções de Base Radial foram adotadas como funções de interpolação.

Em relação ao processo de marcha no tempo, é importante observar que o Método de Houbolt (HOUBOLT, 1950) tem sido empregado com sucesso nas formulações MEC-D e MEC-DR, principalmente em problemas de propagação de onda, nos quais o integrando das integrais de domínio contém uma derivada de ordem dois em relação ao tempo da variável de interesse. O Método de Houbolt é obtido a partir dos polinômios cúbicos de Lagrange e de suas derivadas em relação ao tempo, que fornecem as aproximações para as derivadas de ordem um e de ordem dois.

Entre muitos processos de marcha no tempo apresentados pelo MEF, o Método de Newmark também é bem empregado no MEC (NEWMARK, 1959). Quando comparado

ao método de Houbolt, o Método de Newmark produz um melhor controle da estabilidade das integrais do MEC, de acordo com os parâmetros presentes no desenvolvimento do método (COOK; MALKUS; PLESHA, 1989; BATHE, 1996).

As formulações MEC-DT empregam soluções fundamentais dependentes do tempo. Consequentemente, a solução de problemas com a condição inicial homogênea requer apenas a discretização no contorno, enquanto que a presença de condição inicial não homogênea requer a discretização, realizada com o emprego de células, somente da parte do domínio onde ela ocorre.

Uma das primeiras formulações completas do MEC-DT surgiu em 1983, resultado do desenvolvimento da formulação do MEC para o problema de propagação de ondas bidimensionais. Nesta formulação, aproveitando as propriedades da Solução Fundamental Dependente do Tempo da Equação da Onda, o autor empregou a propriedade da translação temporal para efetuar a integração no tempo e ainda mostrou que a adoção de passos de tempo pequenos poderia causar instabilidade, enquanto que passos de tempo muito grandes poderiam introduzir erros pela violação da condição de causalidade (MANSUR, 1983).

A formulação MEC-DT, do ponto de vista matemático, é muito elegante e eficaz, uma vez que produz resultados bastante precisos. A única crítica à formulação MEC-DT é o seu alto custo computacional, decorrente de duas fontes: (i) do cálculo das integrais de convolução no tempo; e (ii) da formação de novas matrizes a cada passo de tempo. Estas integrais e matrizes aparecem na formulação devido à solução fundamental empregada. No entanto, sempre é possível truncar o processo de convolução no tempo, fazendo com que o custo computacional seja aceitável. Entre os trabalhos baseados no truncamento da integral, podem ser citados: Demirel e Wang (1987), Mansur e Silva (1992), Carrer e Mansur (2006).

Além dos problemas dinâmicos de propagação de ondas (MANSUR; BREBBIA, 1982; DOMINGUEZ, 1994; CARRER; MANSUR, 1996; CARRER; MANSUR, 2002; RODRIGUES, 2012; CARRER; COSTA, 2014), as formulações MEC-DT aparecem na análise de problemas difusivos (WROBEL, 1981; YOUNG et al., 2004; AZIS; CLEMENTS, 2008; ABREU, 2013), e alguns problemas de difusão-advectação. Por exemplo, em Brebbia e Skerget (1984), além dos autores utilizarem a solução fundamental do estado estacionário, eles também utilizaram uma Solução Fundamental Dependente do Tempo.

Outros trabalhos interessantes, ainda no âmbito de problemas difusivo-advectivos, são encontrados na literatura. Por exemplo, em Taigbenu e Liggett (1986) é apresentado uma formulação de integral de contorno baseada na segunda identidade de Green. Neste trabalho, exemplos clássicos unidimensionais e bidimensionais são testados. Já em Boztosun e Charafi (2002) é apresentado um método baseado em Funções de Base Radial, os resultados são comparados com o MEC-DR, o MDF e com a solução analítica.

Em Singh e Tanaka (2000), os autores adotaram uma formulação do MEC baseada na transformação exponencial variável para problemas de difusão-advecção estáveis, convertendo a Equação da Difusão-Advecção na equação de Helmholtz modificada. Já em Young, Wang e Eldho (2000) é apresentada uma combinação do MEC com o Método Euleriano-Lagrangeano.

1.4 OBJETIVOS DO TRABALHO

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma formulação computacional baseada no MEC para resolver a Equação da Difusão-Advecção Bidimensional. Para isso, será utilizado uma Solução Fundamental Dependente do Tempo, esta formulação é denominada de MEC-DT.

Exemplos clássicos de problemas bidimensionais transientes serão analisados com o objetivo de validar a formulação MEC-DT para a Equação da Difusão-Advecção. A fim de expandir o leque de aplicações, será analisado um problema específico, que somente a formulação MEC-DT é capaz de resolver, onde utiliza-se como condição inicial um delta de Dirac, representando uma carga pontual concentrada de poluentes.

Além da contribuição científica, a formulação MEC-DT apresentada neste trabalho poderá se apresentar como uma ferramenta eficaz para o desenvolvimento de soluções apropriadas e estratégias de monitoramento e controle que atendam às leis de proteção da qualidade das águas.

1.5 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O Capítulo 2 apresenta uma dedução detalhada da Equação da Difusão-Advecção a partir das leis da conservação da massa e da quantidade de movimento, mostrando as principais características desta equação e algumas soluções analíticas unidimensionais encontradas na literatura.

O Capítulo 3 apresenta o desenvolvimento da formulação MEC-DT aplicada à Equação da Difusão-Advecção bidimensional. Nesse capítulo é utilizada a Solução Fundamental Dependente do Tempo e a expressão geral do MEC-DT é obtida.

O Capítulo 4 mostra quatro exemplos de domínios distintos, onde são testadas diferentes condições iniciais e de contorno. Os resultados obtidos são comparados com as soluções analíticas correspondentes em cada caso e na ausência destas, com outra formulação do MEC já validada anteriormente, a formulação MEC-D. Verificada a potencialidade da formulação MEC-DT e a fim de ampliar a gama de aplicações, nesse capítulo ainda será analisado um quinto exemplo, onde uma carga pontual concentrada, representada por um delta de Dirac, é lançada no interior de um domínio quadrado.

No Capítulo 5 são feitas as considerações finais acerca da formulação MEC-DT e são sugeridos possíveis trabalhos futuros que contribuam ainda mais com a comunidade científica.

2 EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO

A dispersão de poluentes em um curso d'água passa por duas importantes fases no transporte de matéria: a primeira é a Advecção, que é o movimento das partículas devido ao fluxo do fluido, onde as partículas são carregadas pelo próprio movimento do escoamento; a segunda é a Difusão, que é o movimento de partículas devido à diferença do gradiente de concentração molecular. A combinação dessas duas fases é governada pela Equação da Difusão-Advecção (CHAPRA, 1997). As próximas seções tratam da dedução desta equação, suas principais características e as soluções analíticas encontradas na literatura.

2.1 A DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO

Em sistemas lineares, modelos matemáticos que descrevem fenômenos físicos podem empregar o Princípio da Superposição. Fisicamente, isto significa que, para um modelo que apresente vários processos, eles podem ser somados, pois as grandezas que os compõem são linearmente independentes, de forma que, um processo não interferirá no outro.

Na literatura são encontradas várias maneiras de se chegar à Equação da Difusão-Advecção; vide, por exemplo, Souza (2012), onde o autor apresenta um enfoque minuciosamente matemático. Aqui, além deste trabalho, será tomado como base o que foi apresentado em Socolofsky e Jirka (2002), cujo enfoque é um pouco mais simples.

Dado um elemento diferencial de volume, considere-se que existe um fluxo difusivo J_d ou, mais especificamente, que a substância migra de onde ela está mais concentrada para onde está menos concentrada. Dado um ponto qualquer neste elemento diferencial, em um instante Δt , o fluxo difusivo aponta para a região de decrescimento mais rápido de concentração C , a qual é oposta ao gradiente de C . Este princípio é conhecido como Lei de Fick e é dado por:

$$J_d = -D_X \frac{dC}{dX}, \quad (5)$$

onde $X = (x, y, z)$ é o vetor espacial e $D_X = (D_x, D_y, D_z)$ é o vetor coeficiente de difusão. Considerando também que existe um fluxo advectivo J_a , isto é, que há movimento da substância devido ao fluxo do fluido, ele é dado por:

$$J_a = \vec{u}C, \quad (6)$$

onde $\vec{u} = (U, V, W)$ é o vetor velocidade do fluxo. Se considerarmos apenas a direção x , o fluxo total será dado por:

$$J_x = UC - D_x \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (7)$$

A unidade de fluxo (J_d , J_a e J_x) aqui representada é $\left[\frac{g}{m^2s}\right]$ e de D_x é $\left[\frac{m^2}{s}\right]$, portanto, a unidade de C é $\left[\frac{g}{m^3}\right]$. O fluxo total na direção x é mostrado para um elemento diferencial de volume, como na Figura 3, onde o prefixo *in* se refere ao fluxo que entra e *out* ao fluxo que sai.

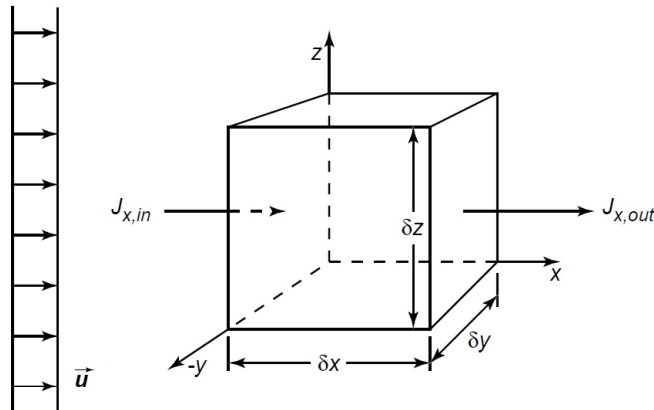


FIGURA 3 – Fluxo total na direção x em um elemento diferencial de volume.

Seguindo a notação de Fischer et al. (1979), a partir da Lei da Conservação da Massa, tem-se que:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out}, \quad (8)$$

onde \dot{m}_{in} é a taxa de massa que entra no elemento e \dot{m}_{out} é a taxa de massa que sai. Logo, para a direção x :

$$\delta \dot{m}|_x = \left(UC - D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta y \delta z - \left(UC - D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_2 \delta y \delta z. \quad (9)$$

Utilizando-se uma expansão linear em série de Taylor para combinar os termos de fluxo advectivo, tem-se:

$$UC|_1 - UC|_2 = UC|_1 - \left(UC|_1 + \frac{\partial(UC)}{\partial x} \Big|_1 \delta x \right) = -\frac{\partial(UC)}{\partial x} \delta x. \quad (10)$$

Utilizando uma expansão para o fluxo difusivo, obtém-se:

$$-D_x \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 + D_x \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_2 = -D_x \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 + \left[D_x \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta x \right] = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \delta x. \quad (11)$$

Então, para a direção x , tem-se:

$$\delta \dot{m}|_x = -\frac{\partial(UC)}{\partial x} \delta x \delta y \delta z + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \delta x \delta y \delta z. \quad (12)$$

As direções y e z são similares à direção x , com V e W sendo as outras componentes da velocidade do fluxo; logo, tem-se que:

$$\delta \dot{m}|_y = -\frac{\partial(VC)}{\partial y} \delta y \delta x \delta z + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \delta y \delta x \delta z, \quad (13)$$

$$\delta \dot{m}|_z = -\frac{\partial(WC)}{\partial z} \delta z \delta x \delta y + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \delta z \delta x \delta y. \quad (14)$$

Substituindo estes resultados em (8) e sabendo que $M = C \delta x \delta y \delta z$, obtém-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) = D \nabla^2 C, \quad (15)$$

ou, em notação de Einstein:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2}, \quad (16)$$

que é chamada de Equação da Difusão-Advecção. Esta equação supõe implicitamente que

$D = D_x = D_y = D_z$ é constante. Quando D é variável, o lado direito da equação (16) toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right). \quad (17)$$

Se a substância em questão sofre algum tipo de degradação, sabe-se da teoria das equações diferenciais, que seu decaimento, de primeira ordem, é modelado pela equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -KC, \quad (18)$$

onde $K > 0$ é chamado de termo de decaimento. Este tipo de fenômeno pode ser interpretado como um sumidouro e assim, pelo princípio da superposição, a equação (15) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) = D\nabla^2 C - KC. \quad (19)$$

que é conhecida como Equação da Difusão-Advecção Decaimento. Quando, além do decaimento, outras fontes são adicionadas, por exemplo, uma substância sendo despejada, a equação (19) toma a forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) - D\nabla^2 C + KC = F. \quad (20)$$

2.2 O FLUIDO INCOMPRESSÍVEL

Um fluido incompressível é aquele cuja densidade ρ_0 permanece constante com o tempo. Neste caso, a equação da conservação de massa se reduz à equação da continuidade, ver Batchelor (1967):

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (21)$$

Utilizando a equação (19) e expandido o termo advectivo $\nabla \cdot (\vec{u}C)$, tem-se:

$$\nabla \cdot (\vec{u}C) = (\nabla \cdot \vec{u})C + \vec{u} \cdot \nabla C. \quad (22)$$

Em virtude da equação da continuidade (21), a Equação da Difusão-Advecção (19), para um fluido incompressível, pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C = D\nabla^2 C - KC, \quad (23)$$

ou, em notação de Einstein:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} - KC. \quad (24)$$

A equação (23) tem o formato da Equação da Difusão-Advecção que será utilizada no desenvolvimento da formulação MEC-DT, assunto do próximo capítulo.

2.3 O NÚMERO DE PÉCLET

No estudo da Difusão-Advecção, o número de Péclet (PATANKAR, 1980) é um número adimensional relevante para caracterizar a natureza do transporte. Nomeado em honra ao físico francês Jean Claude Eugène Péclet, expressa a razão entre a taxa de advecção de uma quantidade física e a taxa de difusão desta mesma quantidade física. No caso de transporte de massa, considerando a direção de x , é dado como:

$$Pe = \frac{U\Delta x}{D}, \quad (25)$$

onde Δx é uma distância de referência, por exemplo, a distância entre dois pontos consecutivos do domínio do problema. Para as direções y e z , considerando que $D = D_x = D_y = D_z$, o número de Péclet é dado, respectivamente, por:

$$Pe = \frac{V\Delta y}{D} \quad \text{e} \quad Pe = \frac{W\Delta z}{D}. \quad (26)$$

No contexto de dispersão de massa na dinâmica de fluidos, o número de Péclet é equivalente ao produto do número de Reynolds (STOKES, 1851; REYNOLDS, 1883) e

do número de Schmidt (INCROPERA; DEWITT, 1990). Em engenharia, esta relação é muito utilizada, pois caracteriza a dominância do fenômeno no transporte, isto é: para $Pe < 1$, a difusão é dominante; para $Pe > 1$, a advecção é dominante; e para $Pe = 1$, a difusão e advecção são igualmente influentes, não sendo observada dominância (QIU; WROBEL; POWER, 1998).

2.4 AS CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

Em problemas Difusivos-Advectivos dois tipos de contornos devem ser considerados: os contornos fechados e os contornos abertos.

Geralmente, os contornos fechados representam as margens do corpo d'água analisado e possibilitam pontos de entrada ou de saída de fluxo como, por exemplo, em rios ou lagos, podem ser definidos como:

$$U_n C - D \frac{\partial C}{\partial n} = J_n, \quad (27)$$

onde o sub-índice n indica a direção normal, J_n é o fluxo normal prescrito e U_n é a componente normal da velocidade.

Os contornos abertos representam os limites do domínio na água, tais como entradas em baías, estuários ou reservatórios. Nestes contornos, os fluxos difusivos são desprezados; então:

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = 0. \quad (28)$$

De maneira geral, as condições de contorno podem indicar que na fronteira do problema a concentração é mantida a um valor constante. Isto pode ocorrer, por exemplo, via injeção de uma vazão massiva de poluentes ou via um fluxo de calor constante.

Por sua vez, a condição inicial indica a concentração de poluentes no domínio no instante em que o processo se inicia, isto é, em $t = 0$, ela é dada por:

$$C(X, t) = C_0(X) \quad \text{em } t = 0. \quad (29)$$

2.5 SOLUÇÕES ANALÍTICAS UNIDIMENSIONAIS

Existem alguns casos particulares da Equação da Difusão-Advecção, quando o domínio é semi-infinito e o fluxo é puramente unidimensional (DIAS, 2003). Isso acontece quando as componentes (y, z) da velocidade de advecção são nulas. Neste caso a Equação (23) toma a seguinte forma:

$$\frac{dC}{dt} + U \frac{dC}{dx} = D \frac{d^2C}{dx^2} - KC. \quad (30)$$

As condições iniciais e de contorno podem ser dadas por:

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= 0, \quad x \geq 0, \\ C(0, t) &= C_0, \quad t \geq 0, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} C(x, t) &= 0, \quad t \geq 0. \end{aligned} \quad (31)$$

Casos particulares de interesse na engenharia, que apresentam estas mesmas condições iniciais e de contorno, serão tratados a seguir.

Uma observação importante é que as soluções analíticas da equação (30) envolvem a função erro e a função erro complementar definidas, respectivamente, por Jeffrey (1995):

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi \quad \text{e} \quad \operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x). \quad (32)$$

2.5.1 Regime Estacionário

O regime estacionário de (30) é obtido quando $\frac{dC}{dt} = 0$. Fazendo também $K = 0$, a equação (30) se reduz a uma equação diferencial linear de segunda ordem e homogênea, cuja solução analítica, é dada por:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{1 - \exp\left(-\frac{U}{D}L\right)} + \frac{C_0}{1 - \exp\left(\frac{U}{D}L\right)} \exp\left(\frac{U}{D}x\right), \quad (33)$$

onde a condição de contorno $\lim_{x \rightarrow \infty} C(x, t) = 0$ é satisfeita em $x = L$.

2.5.2 Difusão Pura

Este é um problema transiente, isto é, $\frac{dC}{dt} \neq 0$, normalmente descrito em diversos livros-texto de matemática aplicada: ver Fischer et al. (1979), Butkov (1988), Dettman (1988). Neste caso $U = K = 0$ em (30). A solução analítica é dada por:

$$C(x, t) = C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right). \quad (34)$$

2.5.3 Difusão-Advecção

Neste caso, $K = 0$ em (30). A solução analítica para este problema é dada por Ogata e Banks (1961), Taigbenu e Liggett (1986), Wang et al. (2012), Romero e Benitez (2008):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \exp \left(\frac{U}{D} x \right) \right]. \quad (35)$$

2.5.4 Difusão-Decaimento

Neste caso, $U = 0$ em (30), e a solução analítica é dada por Jeffrey (1995):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left(\frac{-x + 2\sqrt{KDt}}{2\sqrt{Dt}} \right) \exp \left(-\sqrt{\frac{K}{D}} x \right) \right\} + \frac{C_0}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x + 2\sqrt{KDt}}{2\sqrt{Dt}} \right) \exp \left(\sqrt{\frac{K}{D}} x \right) \right]. \quad (36)$$

As soluções analíticas apresentadas acima são puramente unidimensionais e obedecem às condições dadas por (31). Para os casos em que as dimensões são maiores que um, ou as condições são diferentes das apresentadas em (31), em geral as soluções analíticas são difíceis de serem obtidas; portanto, faz-se necessário o uso de métodos numéricos.

No próximo capítulo é apresentado o desenvolvimento da formulação MEC-DT aplicada ao problema difusivo-advectivo para o caso bidimensional, onde será utilizado uma Solução Fundamental Dependente do Tempo.

3 FORMULAÇÃO MEC-DT

Sabe-se que Equação da Difusão-Advecção é uma equação parabólica em derivadas parciais. Em sua forma mais simples, onde não há fontes poluidoras ou sumidouros, a equação é dada por (23), mas pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C - \vec{u} \cdot \nabla C - KC, \quad (37)$$

onde, como já mencionado anteriormente, C representa a concentração de substâncias (poluentes), t é o tempo, D o coeficiente de difusão, \vec{u} representa o vetor velocidade de advecção e K é o termo de decaimento. Além disso, sabe-se que os dois primeiros termos do lado direito da equação correspondem, respectivamente, à difusão e à advecção.

Reescrevendo a equação (37) para o caso bidimensional, em um domínio Ω limitado por Γ , tem-se que:

$$\frac{\partial C(X, t)}{\partial t} = D\nabla^2 C(X, t) - U \frac{\partial C(X, t)}{\partial x} - V \frac{\partial C(X, t)}{\partial y} - KC(X, t), \quad (38)$$

onde X é o vetor de coordenadas (x, y) . É importante observar que se $U = V = K = 0$, a expressão (38) se reduz à Equação do Calor bidimensional (WROBEL, 1981).

Sabe-se também que a solução de qualquer equação diferencial dependente do tempo requer a especificação das condições iniciais do processo físico e das condições de contorno do sistema. A condição inicial para o transporte de poluentes é dada por:

$$C(X, t) = C_0(X) \quad \text{em } t = 0, \quad (39)$$

onde C_0 é a concentração inicial do poluente. As condições de contorno, por sua vez, são dadas por:

$$C(X, t) = \hat{C}(X, t) \quad \text{em } \Gamma_C \quad (40)$$

e:

$$Q(X, t) = \frac{dC(X, t)}{dn} = \hat{Q}(X, t) \quad \text{em } \Gamma_Q, \quad (41)$$

onde $\Gamma = \Gamma_C \cup \Gamma_Q$ e n é a direção normal ao contorno. De forma esquemática, para um problema genérico, vide Figura 4.

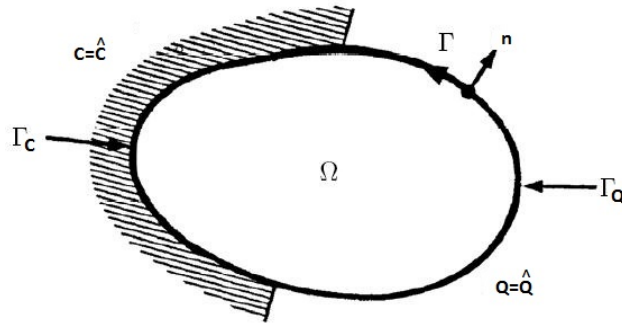


FIGURA 4 – Domínio Ω e contorno Γ de um problema genérico.

A equação (40) é chamada de condição de contorno Essencial ou de Dirichlet, enquanto que a equação (41) é chamada de condição de contorno Natural ou de Neumann (BRAGA, 2005).

3.1 O MEC APLICADO À EQUAÇÃO DA DIFUSÃO-ADVECÇÃO

Como mencionado anteriormente, a principal característica do MEC é transformar a equação diferencial que descreve o problema analisado em uma integral de contorno. Para isso, considera-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = a \nabla^2 w + b_1 \frac{\partial w}{\partial x} + b_2 \frac{\partial w}{\partial y} + sw. \quad (42)$$

Aplicando nessa equação uma transformação exponencial, que pode ser encontrada em (POLYANIN, 2002), tal como:

$$w = \exp \left[-\frac{b_1}{2a}x - \frac{b_2}{2a}y + \left(s - \frac{b_1^2 + b_2^2}{4a} \right) t \right] u, \quad (43)$$

a equação (42) se reduz à:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \nabla^2 u. \quad (44)$$

Aplicando-se em (44) uma sentença do Método de Resíduos Ponderados dependente do tempo, tal como:

$$\int_{\Omega} \int_{\tau} R u^* d\tau d\Omega = \int_{\Gamma_u} \int_{\tau} w_u R_u d\tau d\Gamma + \int_{\Gamma_p} \int_{\tau} w_p R_p d\tau d\Gamma, \quad (45)$$

onde R , R_u e R_p são os resíduos em Ω , Γ_u e Γ_p , respectivamente, u^* é uma função de ponderação conhecida, e w_u e w_p são as funções de ponderação em Γ_u e Γ_p , respectivamente. A equação se transforma em:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \int_{\tau} \left(a \nabla^2 \tilde{u} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \right) u^* d\tau d\Omega = \\ \int_{\Gamma_u} \int_{\tau} w_u (\tilde{u} - \hat{u}) d\tau d\Gamma + \int_{\Gamma_p} \int_{\tau} w_p (\tilde{p} - \hat{p}) d\tau d\Gamma, \end{aligned} \quad (46)$$

onde os resíduos neste caso são:

$$\begin{aligned} R &= a \nabla^2 \tilde{u} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \neq 0, \\ R_u &= \tilde{u} - \hat{u} \neq 0, \\ R_p &= \tilde{p} - \hat{p} \neq 0. \end{aligned} \quad (47)$$

Na equação (46) \tilde{u} é uma solução aproximada, enquanto que \hat{u} e \hat{p} referem-se às condições de contorno de Dirichlet e de Neumann, respectivamente.

Para simplificar a notação, de agora em diante u passa a representar a solução aproximada. Integrando por partes o lado esquerdo da igualdade em (46), obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \int_{\tau} \left(a \nabla^2 u^* + \frac{\partial u^*}{\partial t} \right) u d\tau d\Omega + a \int_{\Gamma} \int_{\tau} p u^* d\tau d\Gamma - a \int_{\Gamma} \int_{\tau} u p^* d\tau d\Gamma = \\ \int_{\Gamma_u} \int_{\tau} w_u (\tilde{u} - \hat{u}) d\tau d\Gamma + \int_{\Gamma_p} \int_{\tau} w_p (\tilde{p} - \hat{p}) d\tau d\Gamma, \end{aligned} \quad (48)$$

onde

$$p = \frac{du}{dn} \quad \text{e} \quad p^* = \frac{du^*}{dn}. \quad (49)$$

No MEC, as funções de ponderação w_u e w_p são escolhidas de forma a simplificar o problema. Assim, adota-se:

$$w_u = -ap^* \quad \text{e} \quad w_p = au^*. \quad (50)$$

Substituindo em (48) e combinando as integrais, obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \int_{\tau} \left(a \nabla^2 u^* + \frac{\partial u^*}{\partial t} \right) u d\tau d\Omega &= -a \int_{\Gamma} \int_{\tau} p u^* d\tau d\Gamma + \\ a \int_{\Gamma} \int_{\tau} u p^* d\tau d\Gamma &- \int_{\Omega} u(X, 0) u_0^* d\Omega, \end{aligned} \quad (51)$$

que é a equação integral de contorno de (44), onde $u_0^* = u^*(\xi, 0, X, t)$. Agora, reescrevendo a Equação da Difusão-Advecção (38) como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C - U \frac{\partial C}{\partial x} - V \frac{\partial C}{\partial y} - KC, \quad (52)$$

onde $C = C(X, t)$, de modo a simplificar a notação. Comparando com (42), os termos equivalentes são: $w = C$, $a = D$, $b_1 = -U$, $b_2 = -V$ e $s = -K$. Então, fazendo uma transformação exponencial semelhante a (43), isto é:

$$C = \exp \left[\frac{U}{2D} x + \frac{V}{2D} y - \left(K + \frac{U^2 + V^2}{4D} \right) t \right] u, \quad (53)$$

tem-se que:

$$u = \exp \left[-\frac{U}{2D} x - \frac{V}{2D} y + \left(K + \frac{U^2 + V^2}{4D} \right) t \right] C \quad (54)$$

e:

$$p = \left[-\left(\frac{U n_x + V n_y}{2D} \right) C + Q \right] \exp \left[-\frac{U}{2D} x - \frac{V}{2D} y + \left(K + \frac{U^2 + V^2}{4D} \right) t \right], \quad (55)$$

onde

$$n_x = \frac{dn}{dx}, \quad n_y = \frac{dn}{dy} \quad \text{e} \quad Q = \frac{dC}{dn}. \quad (56)$$

Logo, substituindo as equações (54) e (55) na equação (51), bem como os termos equivalentes, obtém-se:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \int_{\tau} \left(D \nabla^2 C^* + U \frac{\partial C^*}{\partial x} + V \frac{\partial C^*}{\partial y} - K C^* + \frac{\partial C^*}{\partial t} \right) C d\tau d\Omega = \\ & D \int_{\Gamma} \int_{\tau} \left(\frac{U n_x + V n_y}{2D} C^* + Q^* \right) C d\tau d\Gamma - D \int_{\Gamma} \int_{\tau} Q C^* d\tau d\Gamma - \\ & \int_{\Omega} C(X, 0) C_0^* d\Omega, \end{aligned} \quad (57)$$

onde $C_0^* = C^*(\xi, 0, X, t)$.

3.2 A SOLUÇÃO FUNDAMENTAL DEPENDENTE DO TEMPO

Em relação ao termo entre parênteses na integral à esquerda em (57), a função de ponderação C^* deve ser, tal que:

$$D \nabla^2 C^* + U \frac{\partial C^*}{\partial x} + V \frac{\partial C^*}{\partial y} - K C^* + \frac{\partial C^*}{\partial t} = -\delta(X - \xi) \delta(t - \tau), \quad (58)$$

isto é, $C^* = C^*(\xi, \tau, X, t)$ é a Solução Fundamental Dependente do Tempo do problema, ver Li e Evans (1991), interpretada como sendo o efeito no ponto campo X no tempo t de um impulso no ponto fonte ξ no tempo τ . Esta solução é dada por:

$$C^* = \frac{1}{4\pi D(t - \tau)} \exp \left[-\frac{r^2}{4D(t - \tau)} - h \right], \quad (59)$$

onde $r = |X - \xi|$ e:

$$h = \frac{U}{2D}(x - \xi_x) + \frac{V}{2D}(y - \xi_y) + \left(K + \frac{U^2 + V^2}{4D} \right) (t - \tau). \quad (60)$$

É interessante observar que se $U = V = K = 0$, a expressão (59) se reduz à Solução Fundamental Dependente do Tempo da Equação do Calor. Esta solução, quando t

tende a infinito, comporta-se como sendo a Solução Fundamental em Regime Estacionário, isto é, a Solução Fundamental da Equação de Laplace, ver Wrobel (1981). No caso da Solução Fundamental Dependente do Tempo da Equação da Difusão-Advecção (59), o mesmo comportamento é esperado, isto é, quando t tende a infinito, espera-se obter (a demonstração não é apresentada neste trabalho) a Solução Fundamental em Regime Estacionário da Equação da Difusão-Advecção, que é dada por:

$$C^* = \frac{1}{2\pi} K_0, \quad (61)$$

onde K_0 é a função de Bessel modificada de segundo tipo e ordem zero, apresentada por Oliveira (2015).

Agora, derivando (59) em relação a n , no ponto campo X , obtém-se:

$$Q^* = \frac{r}{8\pi D^2(t-\tau)^2} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t-\tau)} - h\right] \frac{dr}{dn(X)}, \quad (62)$$

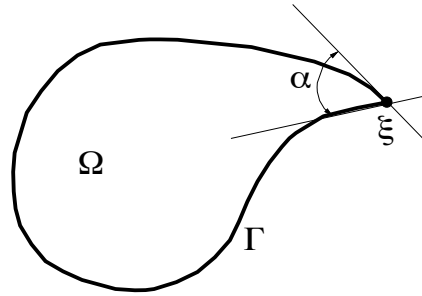
Substituindo a equação (58) na equação (57) e aplicando as propriedades do delta de Dirac (BRAGA, 2005) na integral resultante, obtém-se:

$$\begin{aligned} f(\xi)C(\xi, \tau) = & D \int_{\Gamma} \int_{\tau} Q C^* d\tau d\Gamma - \\ & D \int_{\Gamma} \int_{\tau} \left(\frac{U n_x + V n_y}{2D} C^* + Q^* \right) C d\tau d\Gamma + \int_{\Omega} C(X, 0) C_0^* d\Omega, \end{aligned} \quad (63)$$

que é a expressão geral da formulação MEC-DT para a Equação da Difusão-Advecção (52). O coeficiente $f(\xi)$ é definido como:

$$f(\xi) = \frac{\alpha}{2\pi}, \quad (64)$$

onde o ângulo α é definido na Figura 5. Para pontos internos ao domínio Ω , $f(\xi) = 1$ e para pontos externos ao domínio Ω , $f(\xi) = 0$.

FIGURA 5 – Ângulo interno α .

3.3 FORMAÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES

Para a solução numérica da equação (63), adota-se que C e Q são constantes em cada intervalo de tempo Δt , nos quais o tempo total de análise foi dividido. Em seguida, as integrais no tempo são calculadas numericamente, por meio da técnica de Quadratura Gaussiana (CUNHA et al., 2016).

O contorno é discretizado com elementos lineares, nos quais se adota uma variação linear tanto para C quanto para Q . As integrais de contorno também são calculadas numericamente. A discretização do domínio, quando necessária, emprega células triangulares lineares. Para maiores detalhes concernentes à integração no contorno e no domínio, o assunto é discutido detalhadamente em Mansur (1983).

A aplicação da versão discretizada da equação integral de contorno (63) para todos os nós do contorno gera o seguinte sistema de equações algébricas:

$$\mathbf{H}^{nn}\mathbf{C}^n = \mathbf{G}^{nn}\mathbf{Q}^n + \sum_{m=0}^{n-1} (\mathbf{G}^{nm}\mathbf{Q}^m - \mathbf{H}^{nm}\mathbf{C}^n) + \mathbf{F}^n\mathbf{C}_0, \quad (65)$$

onde, as matrizes \mathbf{H} , \mathbf{G} e \mathbf{F} são dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{C} + D \int_{\Gamma} \int_{\tau} \left(\frac{Un_x + Vn_y}{2D} C^* + Q^* \right) C d\tau d\Gamma, \\ \mathbf{G} &= D \int_{\Gamma} \int_{\tau} Q C^* d\tau d\Gamma, \\ \mathbf{F} &= \int_{\Omega} C(X, t) C_0^* d\Omega. \end{aligned} \quad (66)$$

Em (65), o índice n está associado ao tempo $t_n = n\Delta t$, $n \geq 1$, e o índice m , ao tempo t_m anterior a t_n .

3.4 INTERVALO DE TEMPO CRÍTICO

Uma fórmula para determinar o valor crítico do intervalo de tempo, Δt , foi sugerida por Onishi e Kuroki (1980) e encontrada em Wrobel (1981), é dada por:

$$\Delta t_{crit} \leq \frac{\Delta l^2}{2D}, \quad (67)$$

onde Δl é a dimensão do maior elemento de contorno empregado na discretização.

A expressão (67), em matemática estatística, explora a similaridade entre a solução fundamental para a Equação da Difusão e a função densidade de probabilidade de uma distribuição normal bivariada.

Apresentada a formulação MEC-DT, exemplos clássicos serão analisados para validá-la. Assunto do próximo capítulo.

4 ANÁLISE NUMÉRICA

Com a finalidade de validar os resultados obtidos quanto à acurácia da formulação MEC-DT, cinco exemplos clássicos serão abordados neste capítulo. Os resultados do MEC serão comparados com as soluções analíticas correspondentes em cada exemplo abordado. Porém, na ausência de soluções analíticas, as soluções do MEC serão comparadas com os resultados de outra formulação do MEC, já validada anteriormente, neste caso, a formulação MEC-D (PETTRES, 2014; OLIVEIRA, 2015). Para maiores detalhes do desenvolvimento da formulação MEC-D para o problema difusivo-advectivo discutido neste trabalho, ver o Apêndice A.

4.1 EXEMPLO 1: FLUXO UNIDIMENSIONAL EM UM DOMÍNIO SEMI-INFINITO

Este exemplo consiste no lançamento de uma fonte permanente, uniformemente distribuída na seção transversal de um domínio semi-infinito, alinhado com o eixo x e sem decaimento, isto é, $K = 0$. A água escoa no canal com velocidade U constante e com $V = 0$, caracterizando um escoamento unidimensional. As condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(x,0) &= 0 \quad \text{para } x > 0, \\ C(0,t) &= C_0 \quad \text{para } t \geq 0, \\ C(\infty,t) &= 0 \quad \text{para } t \geq 0, \end{aligned} \tag{68}$$

onde $C_0 = 10 \text{ g/m}^3$. A solução analítica para este problema, como vista no Capítulo 2, é:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \exp \left(\frac{U}{D} x \right) \right]. \tag{69}$$

A análise numérica foi feita em um domínio retangular finito de comprimento $L = 12 \text{ m}$ e altura $H = 6 \text{ m}$, tal que: $0 \leq x \leq L$ e $0 \leq y \leq H$. Foi adotado $U = 0,05 \text{ m/s}$. O contorno foi dividido em 48 elementos, como mostrado na Figura 6.



FIGURA 6 – Exemplo 1 - Discretização do contorno.

Levando-se em conta que nas análises numéricas foi empregado um canal extenso de comprimento finito, durante o tempo selecionado, a condição de contorno $C(\infty, t) = 0$ é satisfeita em $x = L$.

A primeira análise refere-se ao caso onde a concentração C é dada em função do tempo t . Foi adotado $D = 0,375 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\Delta t = 1 \text{ s}$. O tempo final de análise se dá em $t = 360 \text{ s}$, para os pontos $P_1 = (3;3)$, $P_2 = (6;3)$, $P_3 = (9;3)$ e $P_4 = (12;3)$, como apresentada na Figura 7. Pode-se observar bastante acurácia nos resultados da formulação MEC-DT quando comparados à solução analítica.

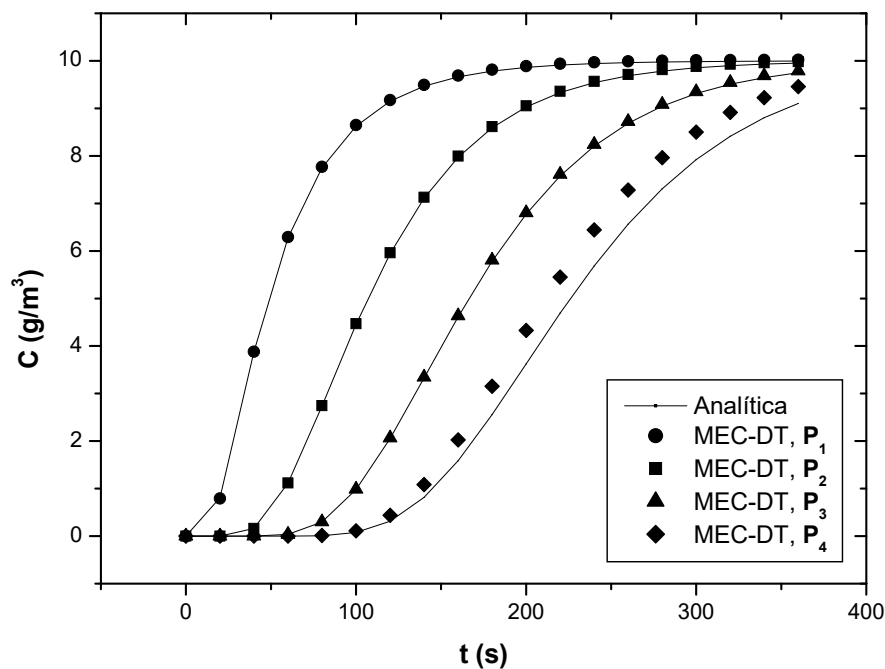


FIGURA 7 – Exemplo 1 - Resultados para P_1 , P_2 , P_3 e P_4 .

Uma observação relativa à escolha do intervalo de tempo, Δt , torna-se necessária neste ponto da discussão. O intervalo de tempo desempenha um papel importante na

solução numérica de problemas transientes e a utilização de valores pequenos de Δt não é necessariamente seguida de soluções numéricas mais precisas em formulações MEC-DT, como bem relata Mansur (1983). Empiricamente, observou-se que o valor $\Delta t = 1 \text{ s}$ apresenta resultados adequados.

Para avaliar ainda mais o potencial da formulação MEC-DT, três números de Péclet, relacionados apenas ao caso onde a advecção é dominante, foram testados. Ao adotar $D = 0,00375 \text{ m}^2/\text{s}$, tem-se $Pe = 10$. Os outros valores testados para o coeficiente de difusão são: $D = 0,001875 \text{ m}^2/\text{s}$ e $0,0009375 \text{ m}^2/\text{s}$, correspondendo, respectivamente, a $Pe = 20$ e 40 , utilizando $\Delta x = 0,75 \text{ m}$. Os resultados referentes à concentração ao longo do eixo x , para $t = 60 \text{ s}$, 90 s , 120 s e 150 s , estão representados nas Figuras 8 a 10, correspondendo, respectivamente, a $Pe = 10$, 20 e 40 .

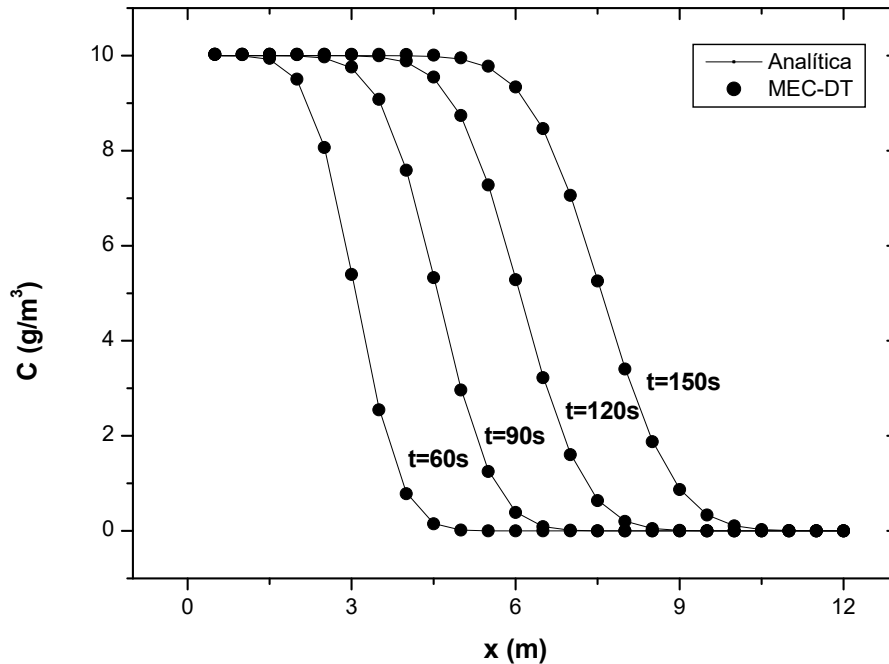


FIGURA 8 – Exemplo 1 - Resultados para $Pe = 10$.

No que diz respeito aos resultados mostrados nas Figuras 8 a 10, pode-se observar que a formulação MEC-DT não apresenta resultados com comportamento oscilatório, como observado na formulação MEC-D, apresentada por Taigbenu e Liggett (1986). Mas, infelizmente, nota-se que à medida que Pe cresce, os resultados numéricos perdem a acurácia.

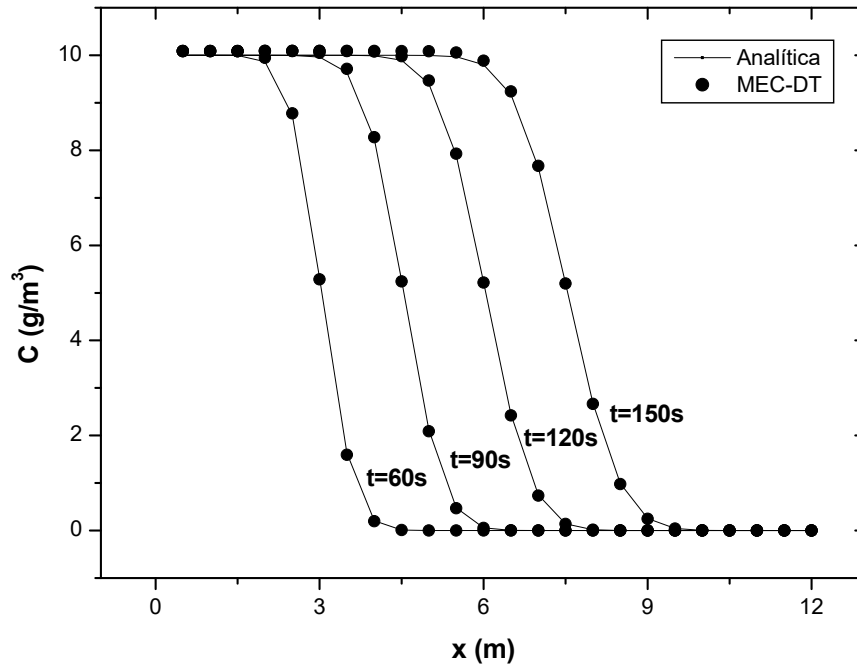


FIGURA 9 – Exemplo 1 - Resultados para $Pe = 20$.

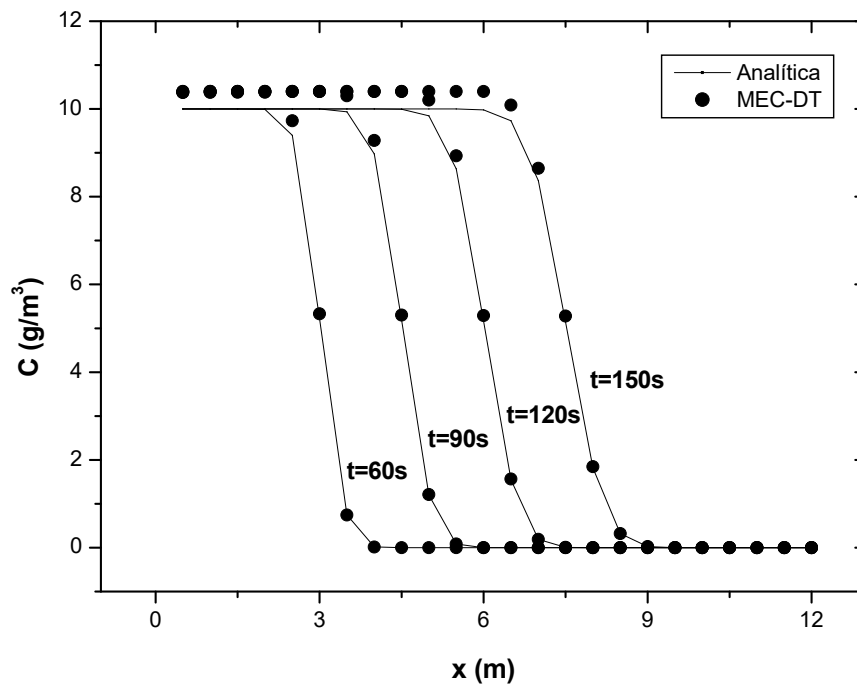


FIGURA 10 – Exemplo 1 - Resultados para $Pe = 40$.

Vale salientar que quando se utiliza um Pe muito grande, por exemplo, igual a 80, a solução analítica não pode ser calculada computacionalmente nos pontos acima de $x = 6 m$. Isso se deve ao fato de que na expressão da solução analítica, ver (69), há uma função exponencial, que quando tende ao infinito, ultrapassa o número de bits permitido por um computador padrão de 32 ou 64 bits, tal erro é conhecido como *overflow*. Isso não ocorre na solução da formulação MEC-DT.

A norma L_2 , utilizada em análises numéricas para determinar o erro obtido em formulações numéricas, é definida como:

$$L_2 = \left[\frac{\sum_{m=1}^N (C_{i,analítica} - C_{i,numérica})^2}{\sum_{m=1}^N C_{i,analítica}^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (70)$$

onde $C_{i,analítica}$ é a solução analítica, $C_{i,numérica}$ é a solução numérica e N é o número total de pontos utilizados na análise.

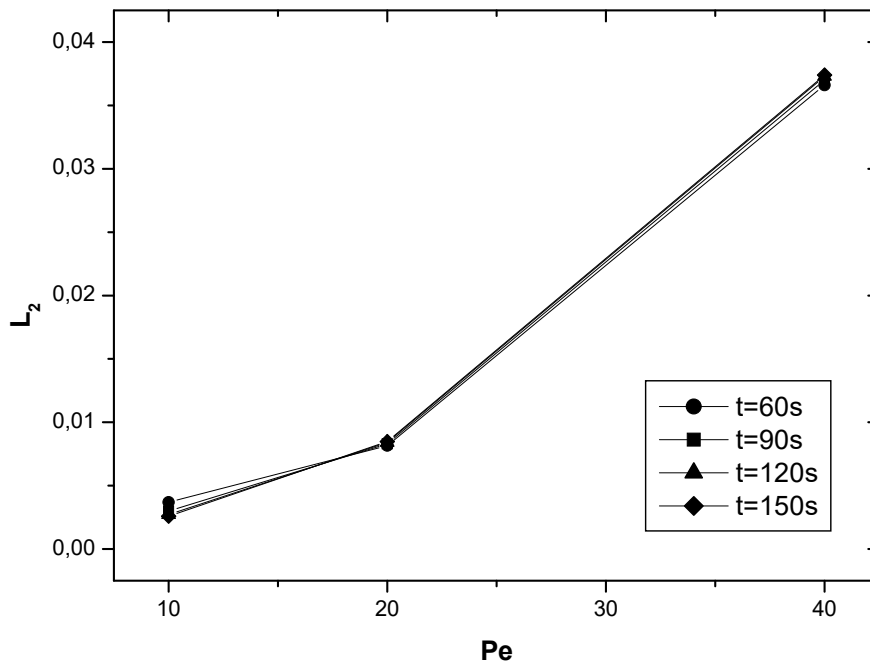


FIGURA 11 – Exemplo 1 - Norma L_2 .

Os resultados resumidos na Figura 11, apontam que foram alcançados baixos valores para L_2 e que quanto menor for Pe , menor será o erro obtido pela formulação. Isso significa que os resultados do MEC-DT são bastantes satisfatórios.

4.2 EXEMPLO 2: FLUXO BIDIMENSIONAL EM UM DOMÍNIO RETANGULAR

Este exemplo trata de 4 testes e avalia o comportamento da solução MEC-DT, dependendo do grau de complexidade da Equação da Difusão-Advecção, considerando a variação dos seguintes parâmetros: velocidades de advecção U e V em x e y , respectivamente, e termo de decaimento K . As condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(x,y,0) &= 0 \quad \text{para } x,y > 0, \\ C(0,y,t) &= C_0 \quad \text{para } t \geq 0, \\ Q(L,y,t) &= 0 \quad \text{para } t \geq 0, \end{aligned} \tag{71}$$

onde $C_0 = 10 \text{ g/m}^3$.

O domínio do problema é retangular, o mesmo do exemplo anterior, vide Figura 6. Neste exemplo admite-se que $D = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\Delta t = 0,5 \text{ s}$. Os valores utilizados em cada teste para U , V e K são descritos na Tabela 1.

Teste	V (m/s)	U (m/s)	K (s ⁻¹)
1	0	0	0
2	0,2	0,2	0
3	0	0	0,02
4	0,2	0,2	0,02

TABELA 1 – Exemplo 2 - Testes.

Neste exemplo, como as soluções analíticas não foram encontradas na literatura, as soluções MEC-DT serão comparadas com os resultados da formulação MEC-D. Maiores detalhes desta formulação são descritos no Apêndice A.

O Teste 1 se refere ao problema da Difusão Pura Bidimensional. A Figura 12 mostra os resultados nos pontos: $P_1 = (3;3)$, $P_2 = (6;3)$, $P_3 = (9;3)$ e $P_4 = (12;3)$ para t variável. Já no Teste 2, a Figura 13 mostra, nos mesmos pontos que o teste anterior, as contribuições da Advecção. Observou-se, para ambos os testes, que as respostas fornecidas por ambas as formulações apresentam uma boa concordância.

Nos Testes 3 e 4, Figuras 14 e 15, respectivamente, são introduzidas as contribuições relacionadas ao termo de decaimento K . Nota-se que os resultados de ambos os testes são bastantes parecidos, embora no Teste 3 não exista a ocorrência da advecção. De maneira semelhante, observa-se que as respostas fornecidas por ambas as formulações são muito parecidas.

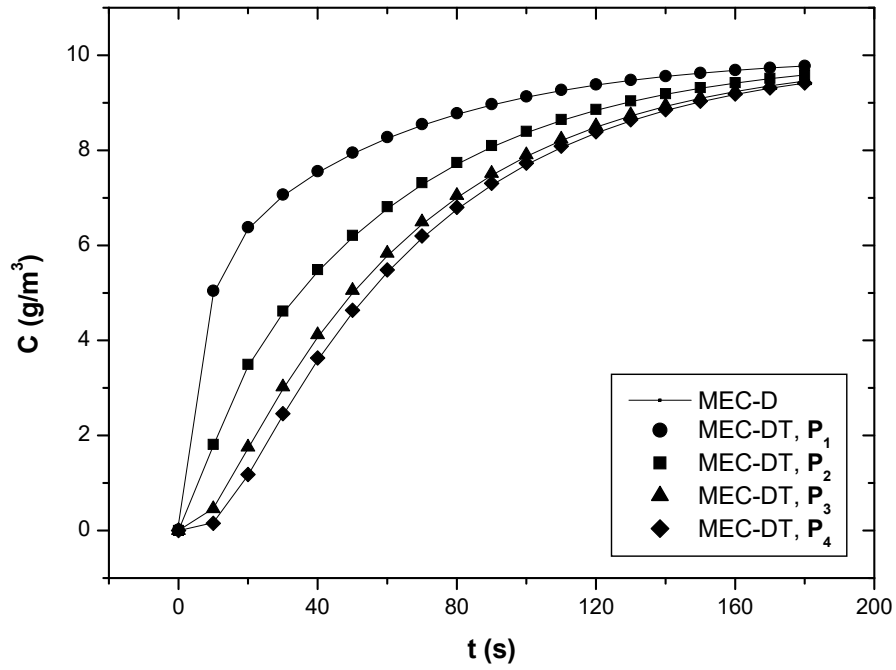


FIGURA 12 – Exemplo 2 - Teste 1.

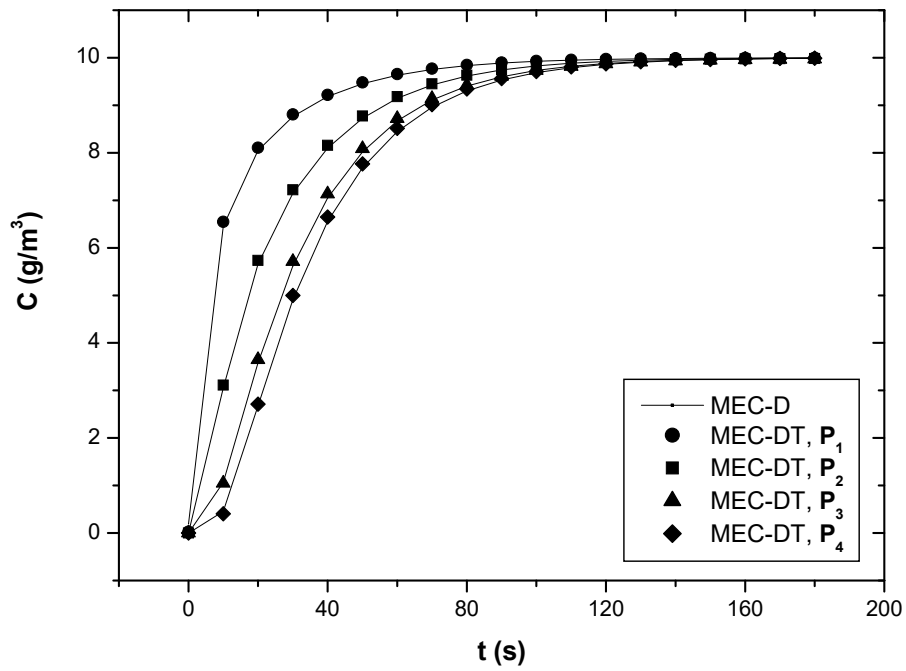


FIGURA 13 – Exemplo 2 - Teste 2.

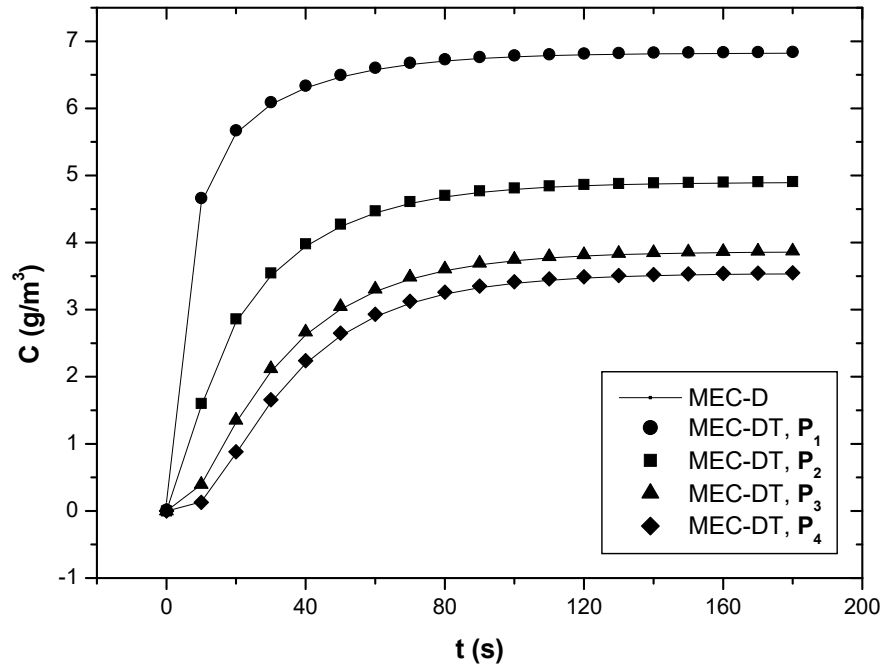


FIGURA 14 – Exemplo 2 - Teste 3.

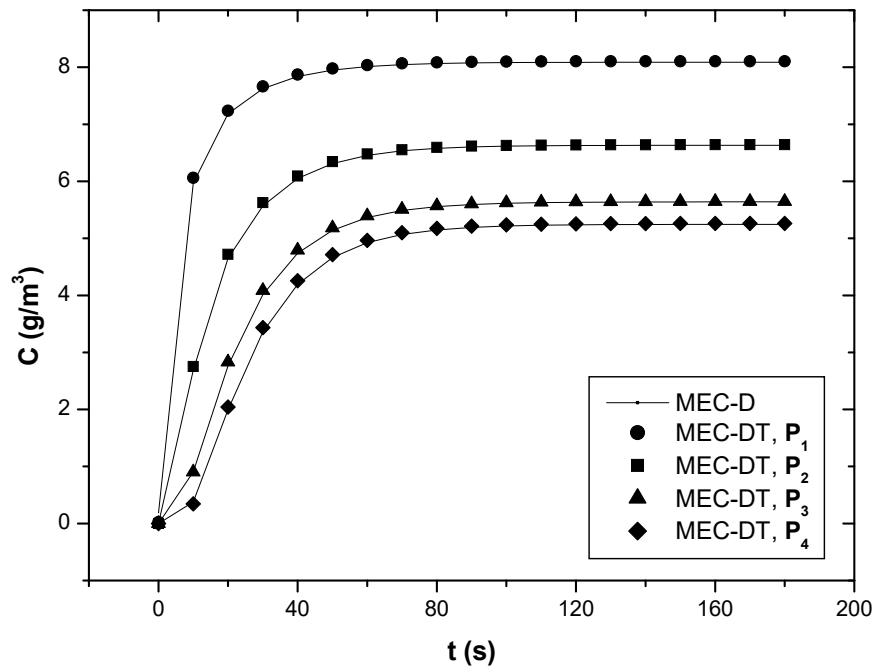


FIGURA 15 – Exemplo 2 - Teste 4.

Os testes foram realizados utilizando um processador Intel Pentium Dual-Core 2, 2,10 GHz, 2 GB de RAM e sistema operacional Windows 7 Ultimate - 64 bits. A programação foi feita em linguagem Fortran 95. Para as medidas de performance de tempo, foi utilizada a função interna do Fortran TIMEF. Observou-se que a execução do programa referente à formulação MEC-DT, quando comparada à da formulação MEC-D, é um pouco mais lenta (aproximadamente 1,5% para este exemplo). Isto se deve ao esforço computacional que a formulação MEC-DT exige, em função da solução fundamental empregada e, principalmente, devido à formação de novas matrizes a cada passo de tempo.

Outros testes foram realizados, alterando o valor de Δt , bem como os de U , V e K . Não houve alterações significativas nas soluções e, por serem análogas às que já foram apresentadas, não serão mostradas neste trabalho.

Tendo em vista os resultados obtidos, pode-se concluir que, embora tenha havido aumento gradativo na complexidade da equação, as soluções da formulação MEC-DT não apresentam quaisquer discrepâncias quando comparadas com as soluções MEC-D, o que colabora na validação da formulação desenvolvida aqui.

Com o intuito de compreender melhor o que acontece com a concentração de poluentes C no domínio do problema, os resultados obtidos na formulação MEC-DT são esboçados no plano xy para $t = 5$ s, 10 s, 20 s, 40 s, 60 s e 180 s, e mostrados nas Figuras 16 a 21.

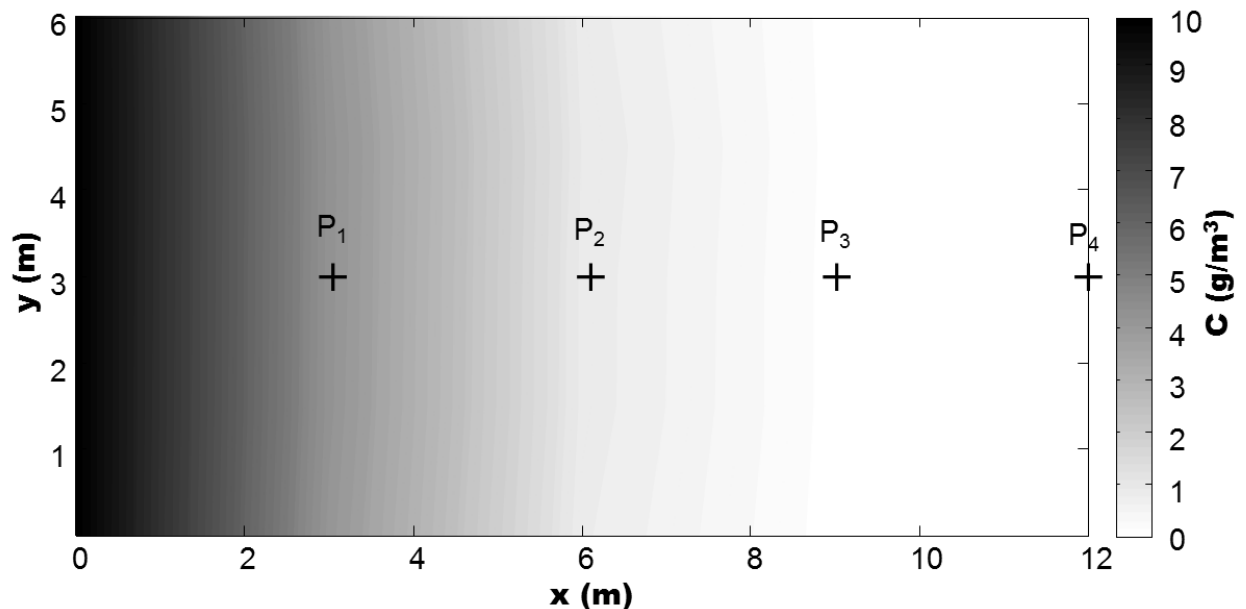
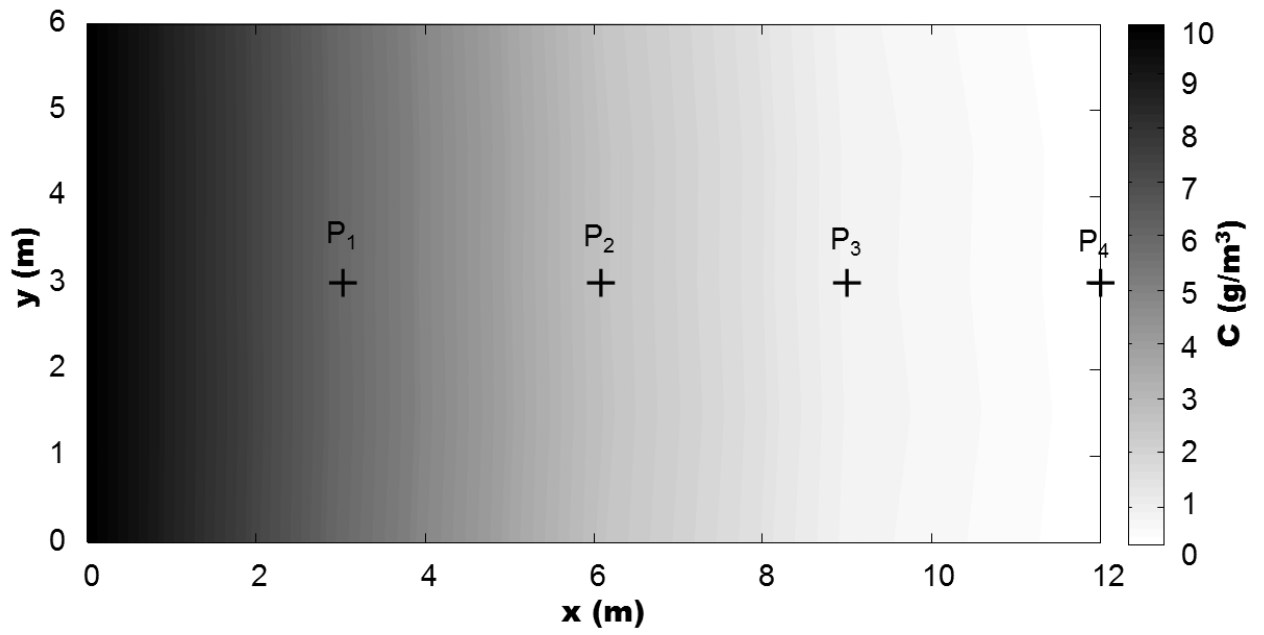
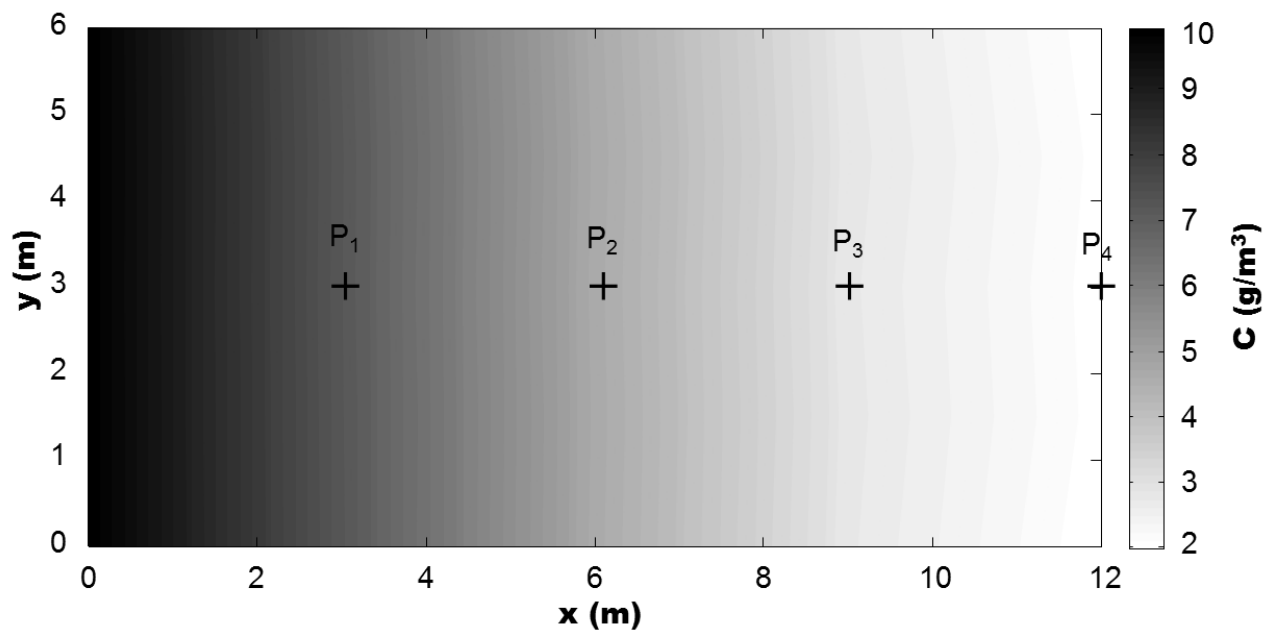
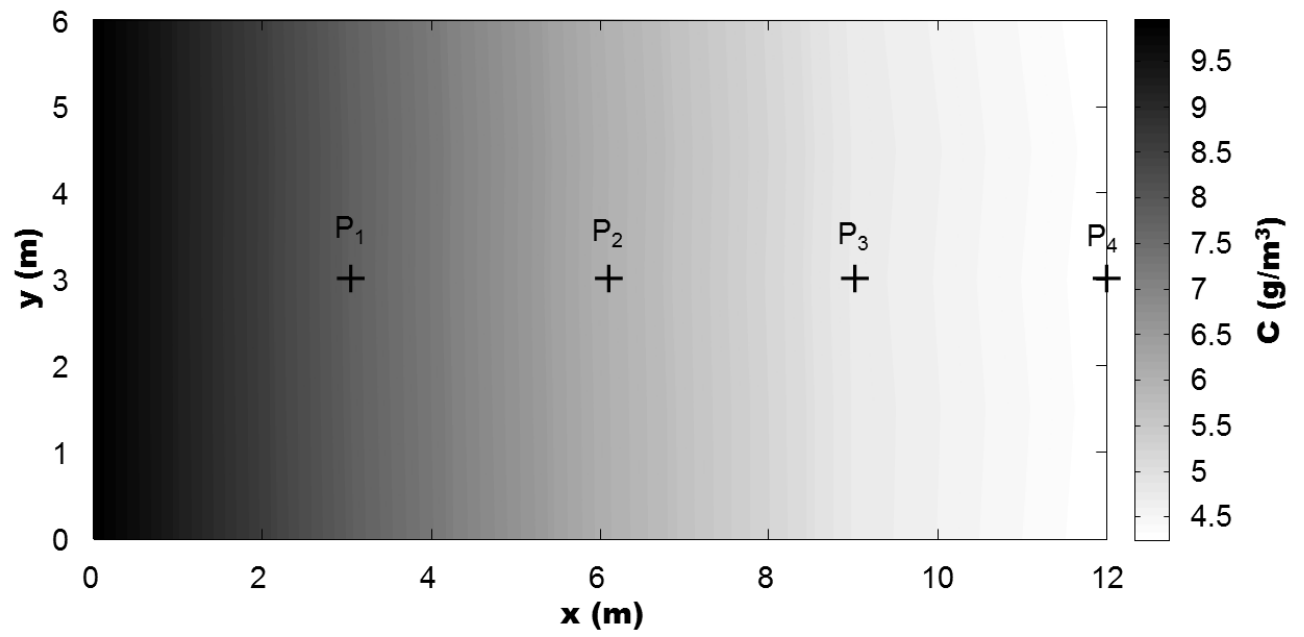
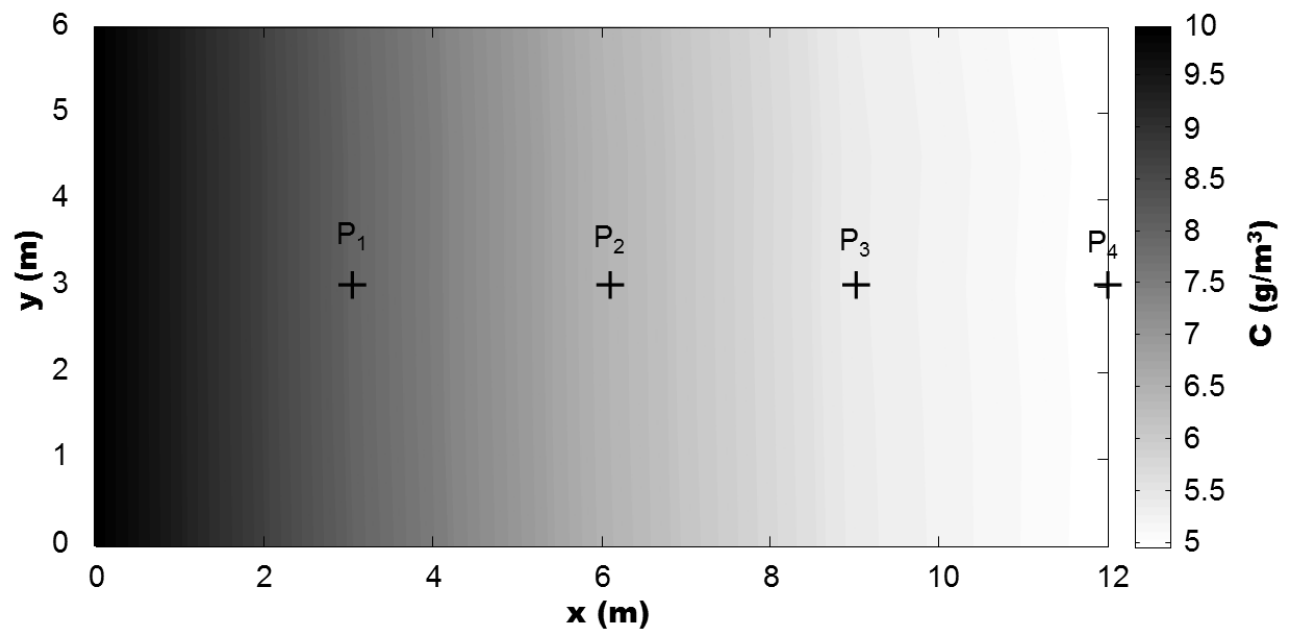


FIGURA 16 – Exemplo 2 - C em $t = 5$ s.

FIGURA 17 – Exemplo 2 - C em $t = 10$ s.FIGURA 18 – Exemplo 2 - C em $t = 20$ s.

FIGURA 19 – Exemplo 2 - C em $t = 40$ s.FIGURA 20 – Exemplo 2 - C em $t = 60$ s.

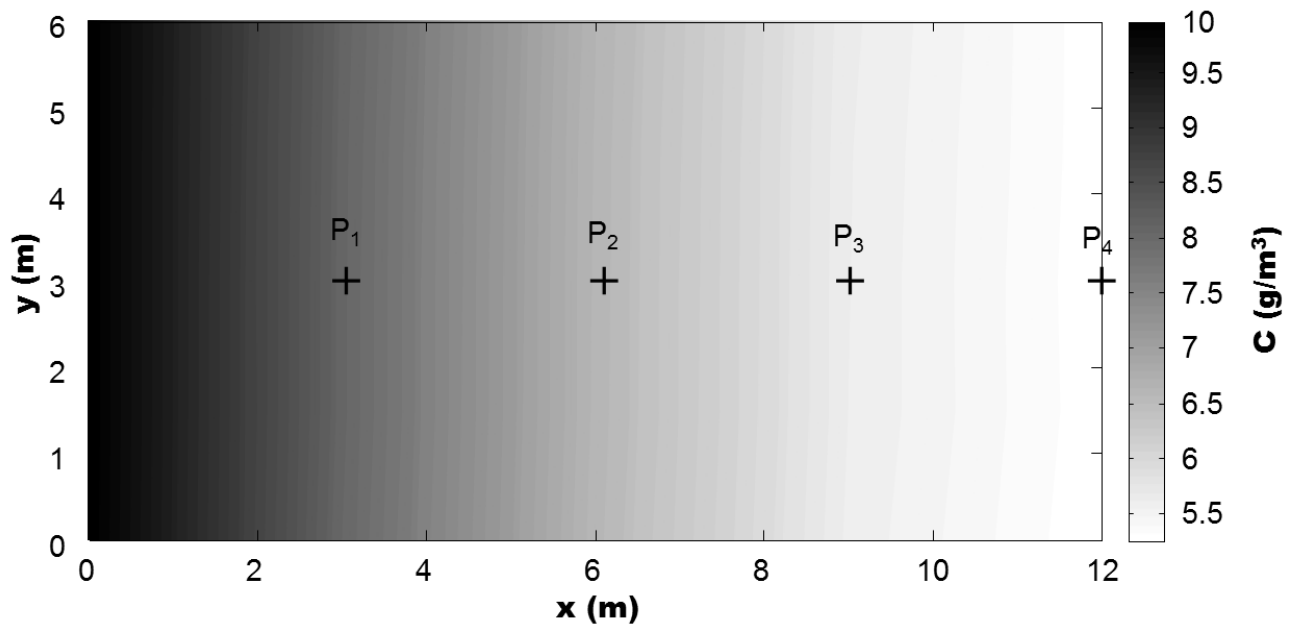


FIGURA 21 – Exemplo 2 - C em $t = 180$ s.

4.3 EXEMPLO 3: CARGA INSTANTÂNEA CENTRAL EM UM DOMÍNIO QUADRADO

O terceiro exemplo consiste no lançamento de contaminantes, no tempo inicial da análise, em um domínio quadrado com lado igual a $L = 10$ m. A região de lançamento corresponde a um pequeno quadrado, com lado $L/10$, no qual o contaminante, tratado como condição inicial, varia linearmente do centro até se anular na suas bordas, ver Figura 22.

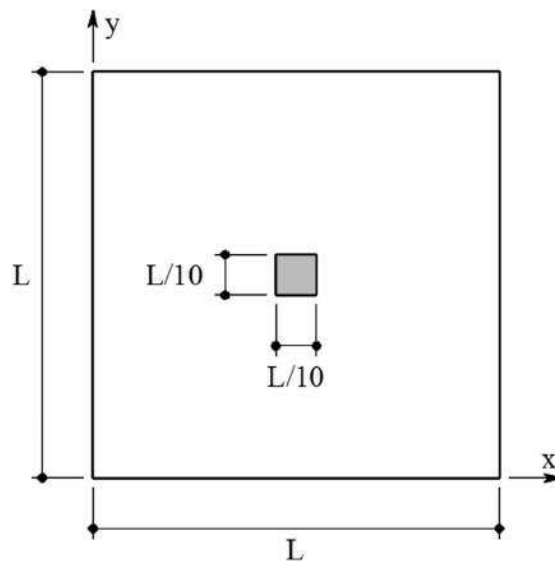


FIGURA 22 – Exemplo 3 - Descrição do problema.

As condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(x,y,0) &= C_0 \quad \text{para } x = y = 5, \\ Q(x,0,t) &= Q(0,y,t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0, \\ Q(x,L,t) &= Q(L,y,t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0, \end{aligned} \quad (72)$$

onde $C_0 = 10 \text{ g/m}^3$. Os outros parâmetros são: $V = U = 0,2 \text{ m/s}$, $K = 0,02 \text{ s}^{-1}$ e $D = 1 \text{ m}^2/\text{s}$. O intervalo de tempo utilizado foi de $\Delta t = 0,5 \text{ s}$.

O contorno foi dividido em 80 elementos. A discretização do domínio foi restrita apenas à região onde a condição inicial é diferente de zero, com o emprego de 4 células, onde $\Delta x = \Delta y = 0,5 \text{ m}$, como mostrado na Figura 23.

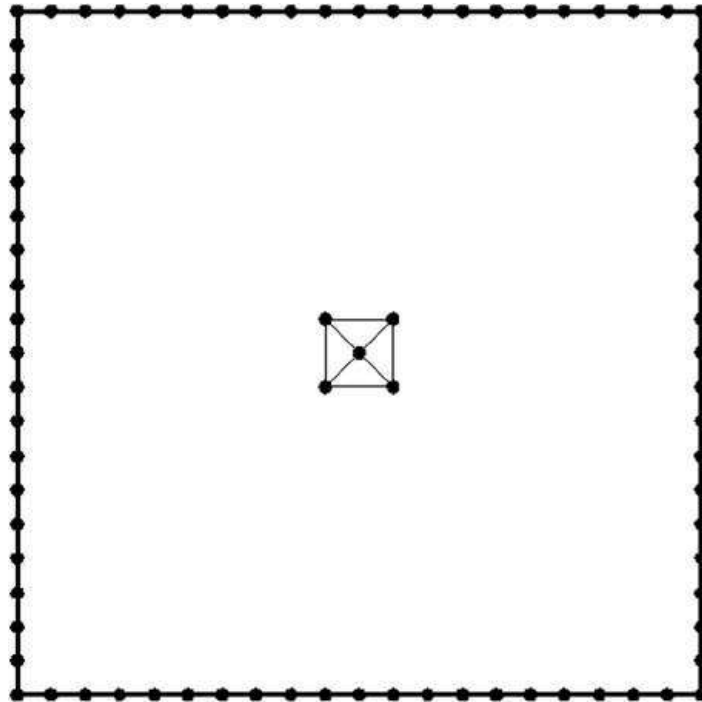
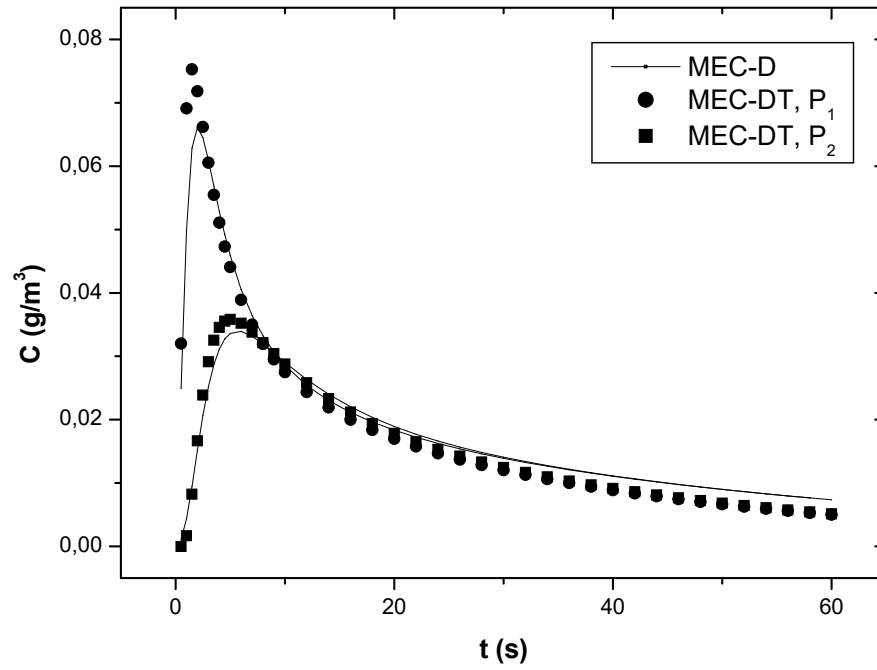
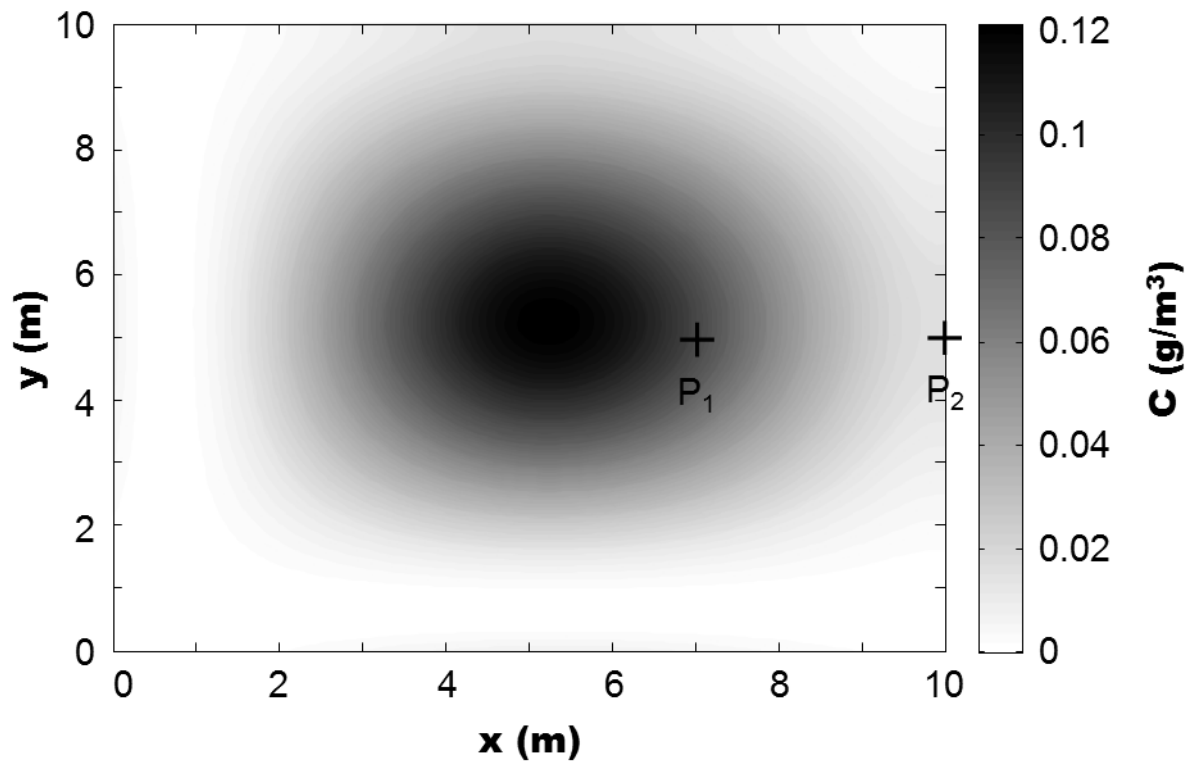
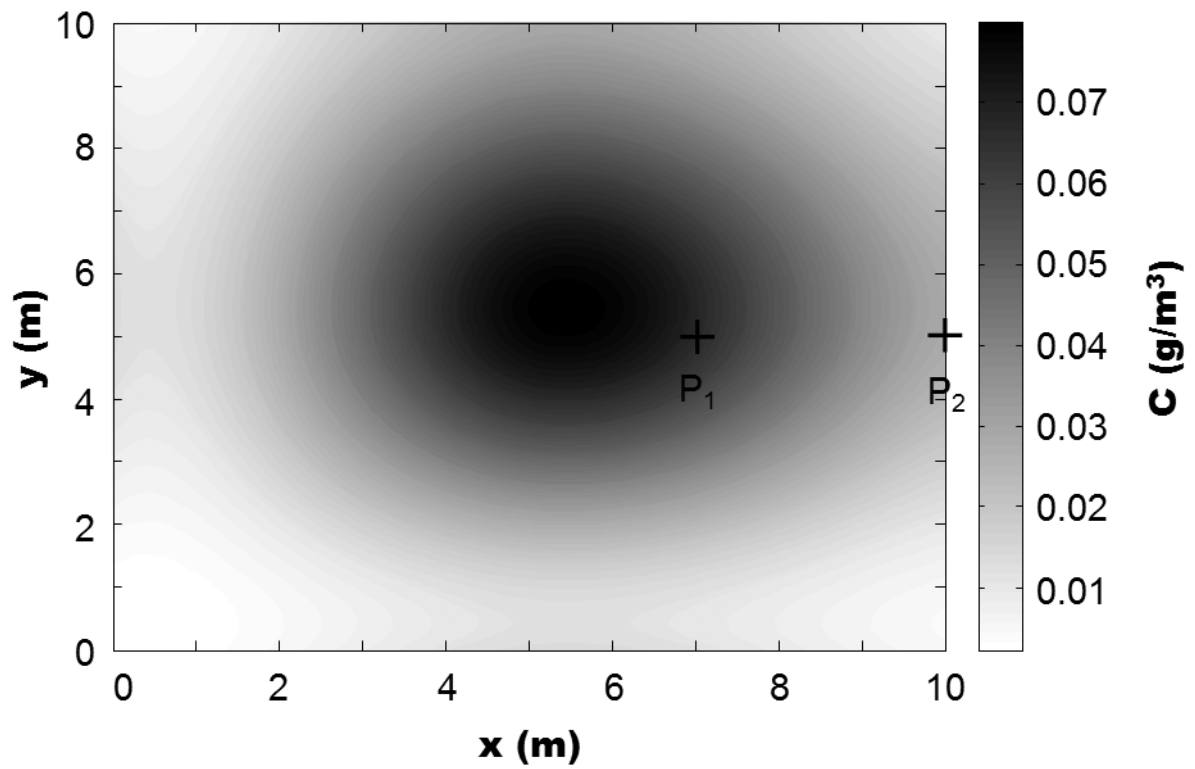
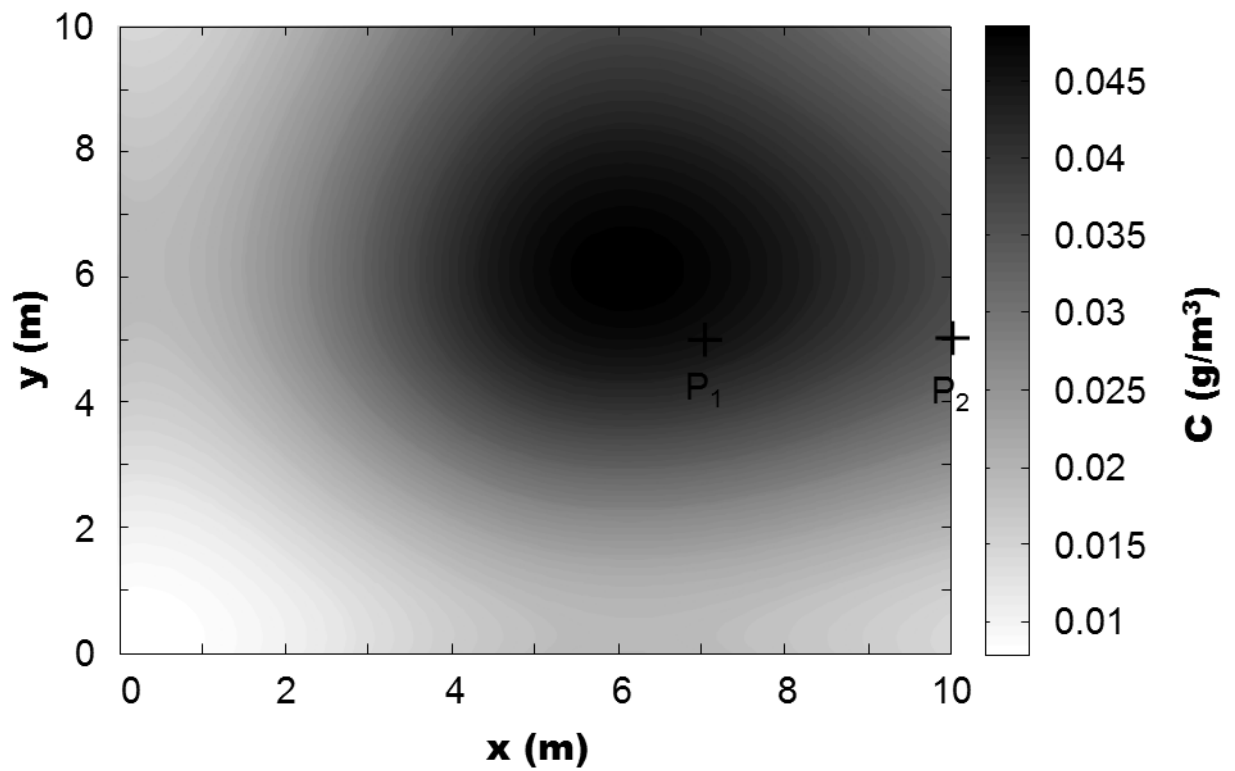


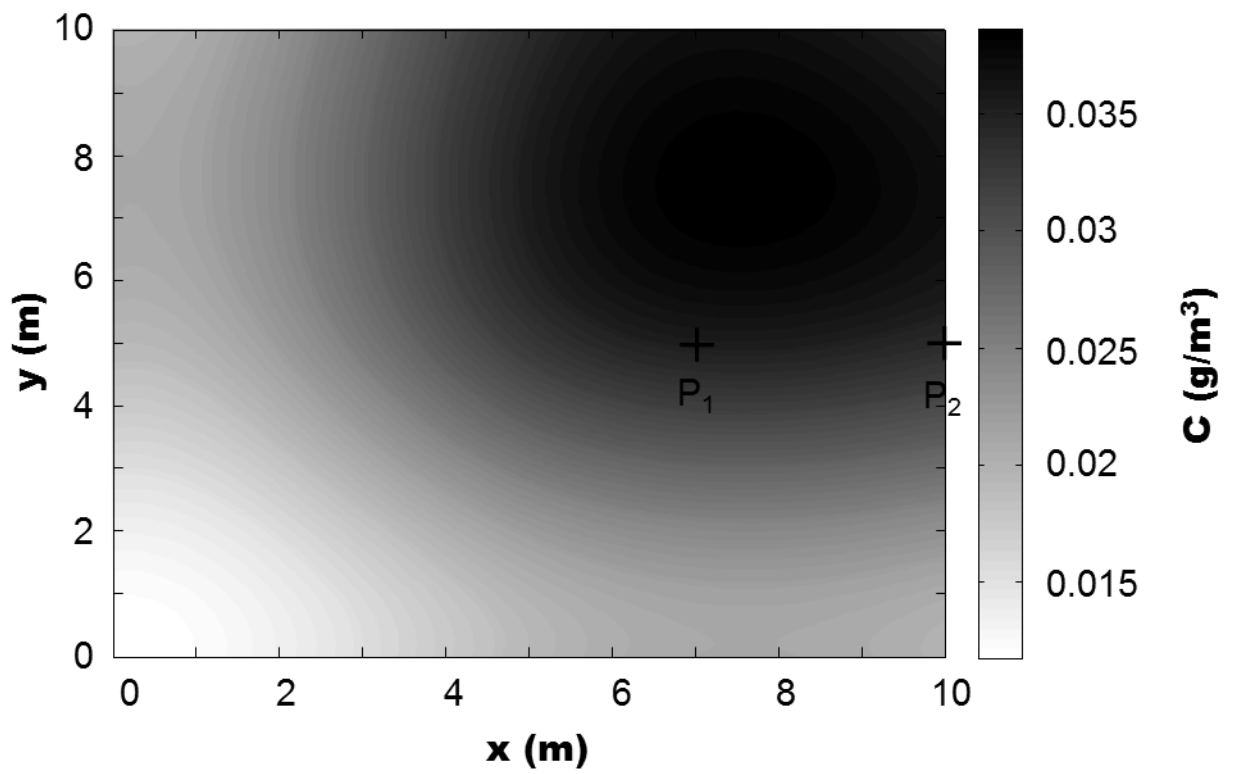
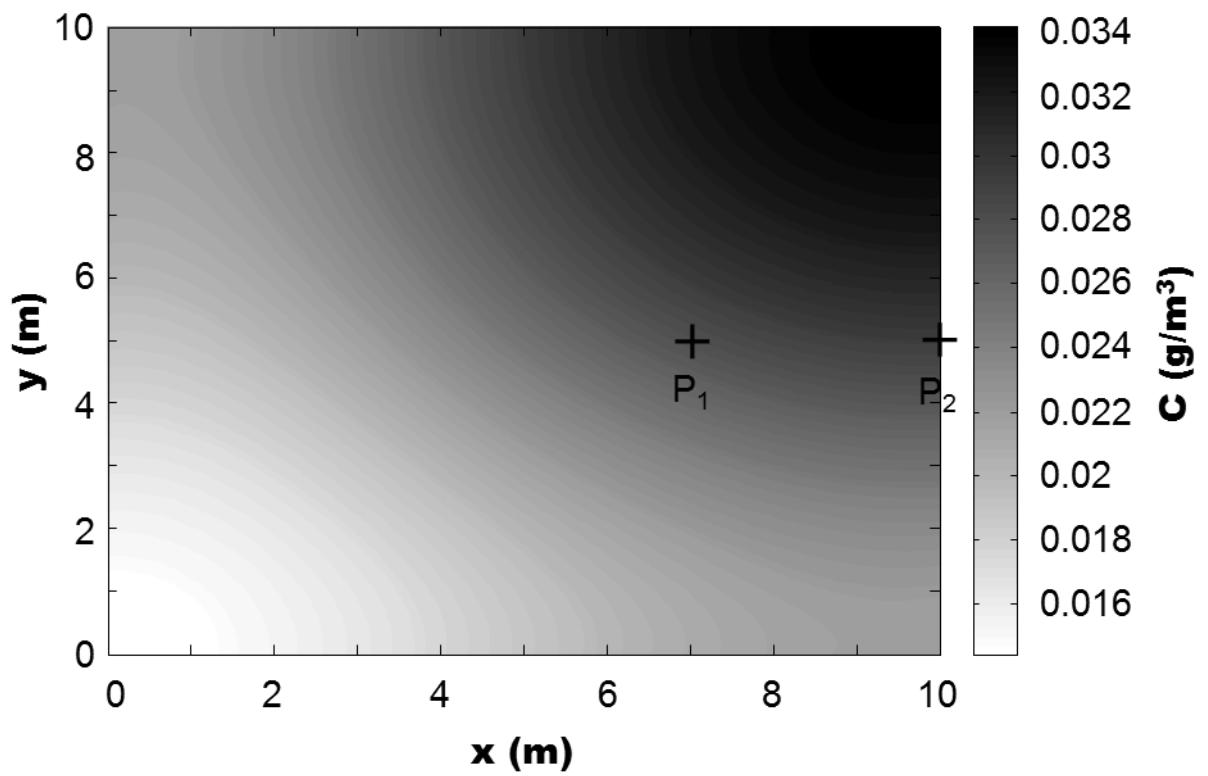
FIGURA 23 – Exemplo 3 - Discretização do contorno.

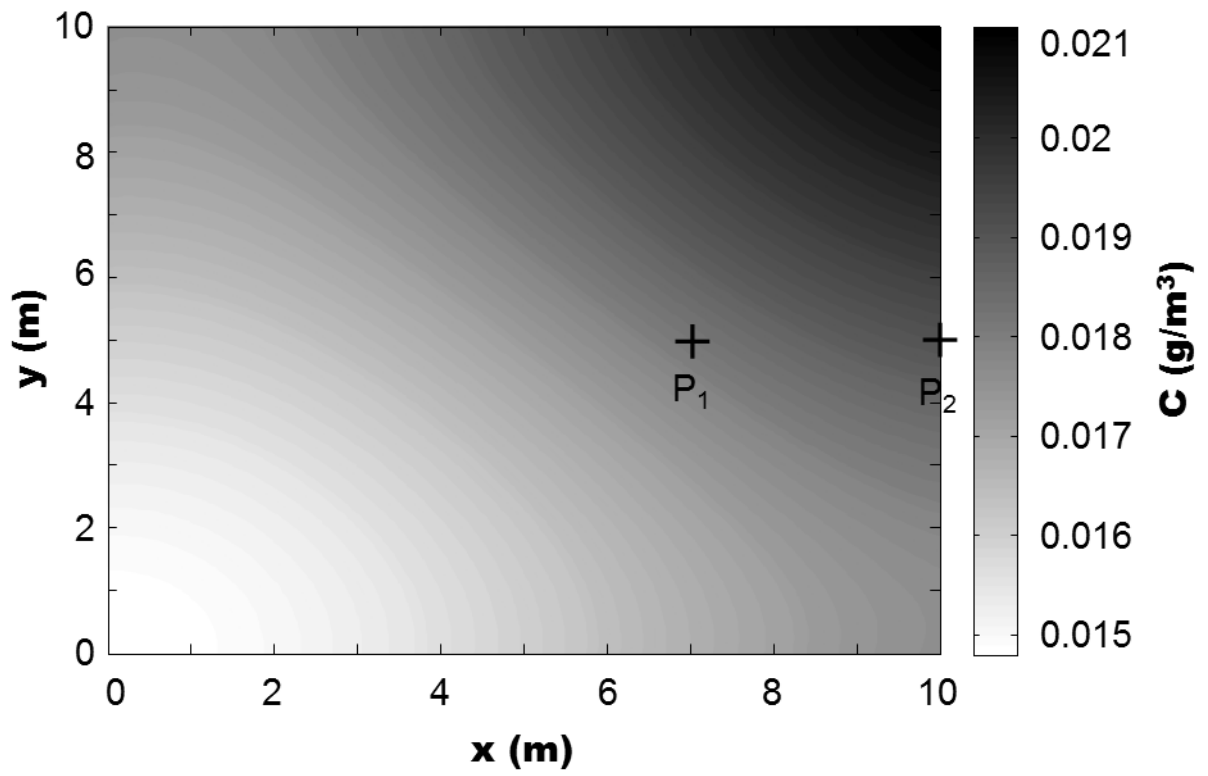
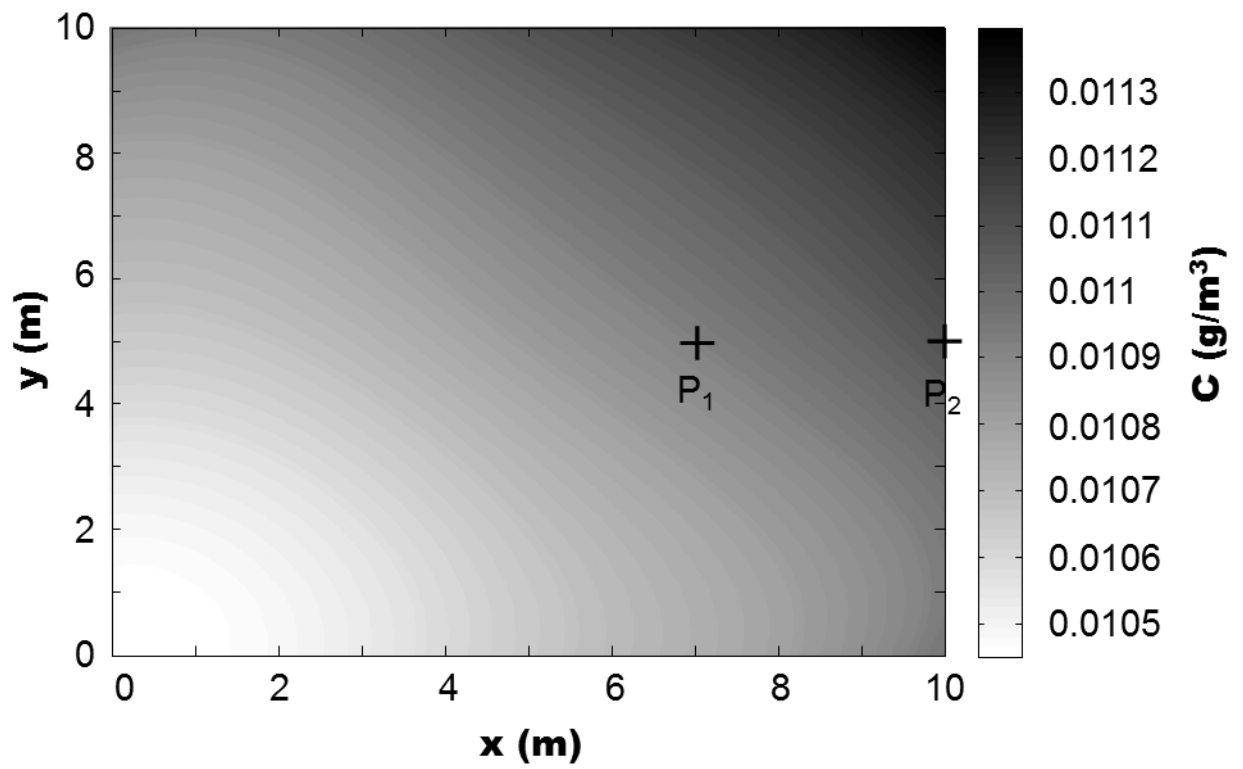
Neste exemplo as soluções MEC-DT também foram esboçadas com as soluções MEC-D (Apêndice A). Na Figura 24, nos pontos $P_1 = (7,5;5)$ e $P_2 = (10;5)$, são comparadas as respostas das formulações MEC-DT e MEC-D.

Os resultados obtidos na formulação MEC-DT, ao longo do domínio xy , nos instantes $t = 2 \text{ s}$, 3 s , 5 s , 7 s , 10 s , 20 s , 40 s e 60 s , são mostrados nas Figuras 25 a 32, as quais permitem acompanhar a dispersão de poluentes em função do tempo.

FIGURA 24 – Exemplo 3 - Resultados para P_1 e P_2 .FIGURA 25 – Exemplo 3 - C em $t = 2$ s.

FIGURA 26 – Exemplo 3 - C em $t = 3$ s.FIGURA 27 – Exemplo 3 - C em $t = 5$ s.

FIGURA 28 – Exemplo 3 - C em $t = 7$ s.FIGURA 29 – Exemplo 3 - C em $t = 10$ s.

FIGURA 30 – Exemplo 3 - C em $t = 20$ s.FIGURA 31 – Exemplo 3 - C em $t = 40$ s.

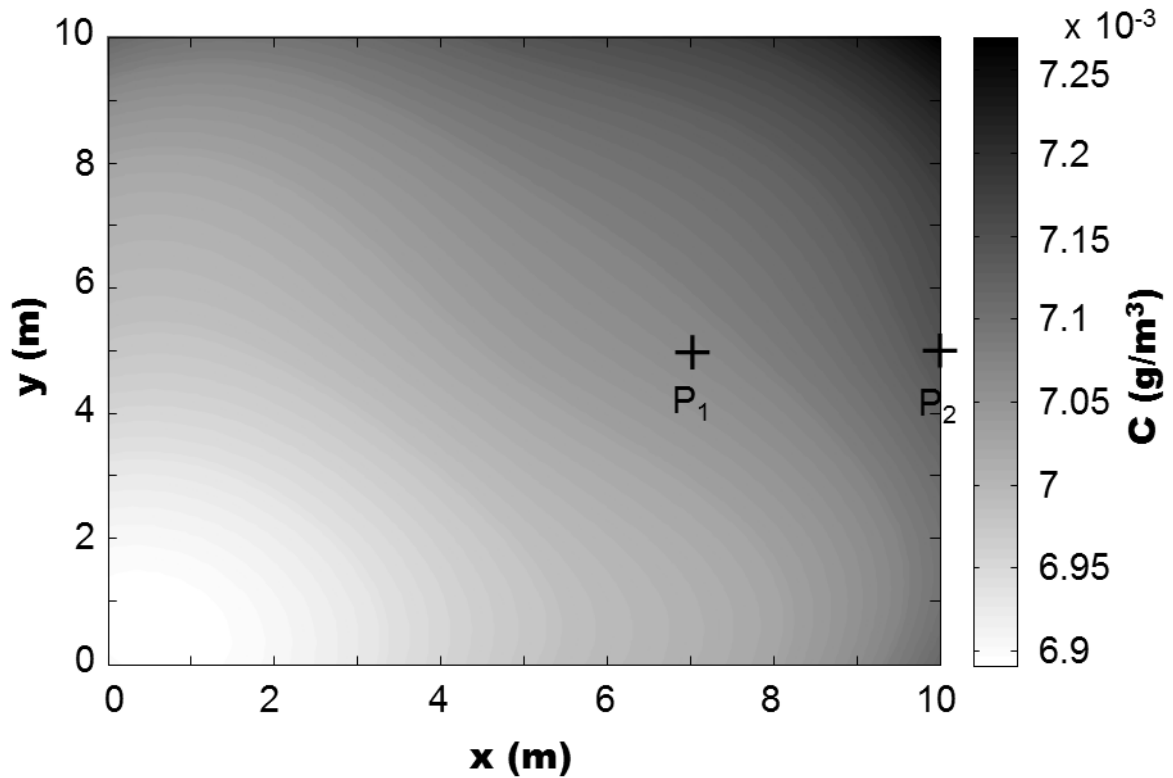


FIGURA 32 – Exemplo 3 - C em $t = 60$ s.

4.4 EXEMPLO 4: FONTE CONTÍNUA EM UM DOMÍNIO QUADRADO

O quarto exemplo compreende um domínio quadrangular de lado $L = 50$ m. As condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned}
 C(x,y,0) &= 0 \quad \text{para } x,y > 0, \\
 C(0,y,t) &= C_0 \quad \text{para } y_1 \leq y \leq y_2 \quad \text{e } t > 0, \\
 C(0,y,t) &= 0 \quad \text{para } y_1 \geq y \geq y_2 \quad \text{e } t > 0, \\
 Q(\infty,y,t) &= 0 \quad \text{para } t > 0, \\
 Q(x, \pm \infty,t) &= 0 \quad \text{para } t > 0,
 \end{aligned} \tag{73}$$

onde $C_0 = 10$ g/m³.

Pode-se interpretar as condições de contorno do problema como a influência de uma fonte contínua, sem qualquer outra contribuição do contorno. Por esta razão, apenas o lado do quadrado com a fonte merece uma discretização minuciosa, que empregou 50 elementos de contorno. Como nenhuma contribuição do contorno é esperada dos outros lados, eles foram discretizados com apenas 2 elementos de contorno cada, conforme Figura 33.

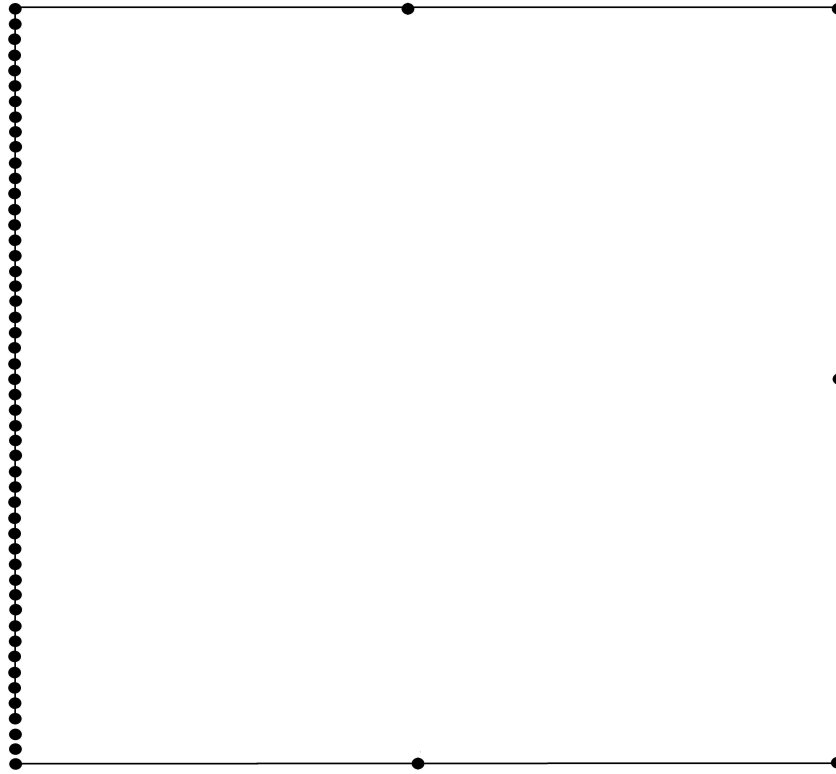


FIGURA 33 – Exemplo 4 - Discretização do contorno

A solução analítica deste problema está disponível na literatura (CLEARY; UNGS, 1978; CRAIG, 2004; WEXLER, 1992) e é escrita como:

$$C(x,y,t) = \frac{C_0 x}{4\sqrt{\pi D}} \exp\left(\frac{U}{D}x\right) \int_0^t f(\tau) d\tau, \quad (74)$$

onde:

$$f(\tau) = [\operatorname{erfc}(\arg_1) - \operatorname{erfc}(\arg_2)] \exp\left[-\left(\frac{U^2}{4D} + K\right)\tau + \frac{x^2}{4D\tau}\right] \tau^{-\frac{3}{2}}, \quad (75)$$

com:

$$\arg_1 = \frac{y_1 - y}{2\sqrt{D\tau}} + \frac{V}{2}\sqrt{\frac{\tau}{D}} \quad (76)$$

e:

$$\arg_2 = \frac{y_2 - y}{2\sqrt{D\tau}} + \frac{V}{2}\sqrt{\frac{\tau}{D}}. \quad (77)$$

A análise foi realizada considerando $U = 1 \text{ m/s}$, $V = 0,5 \text{ m/s}$ e $K = 0$. Os outros parâmetros são:

$$\begin{aligned} D &= 1 \text{ m}^2/\text{s}, \\ y_1 &= 24 \text{ m}, \\ y_2 &= 26 \text{ m}. \end{aligned} \quad (78)$$

O intervalo de tempo utilizado foi $\Delta t = 1 \text{ s}$. É importante mencionar que, devido à utilização de elementos de contorno lineares, a fonte não é restrita apenas ao intervalo $y_2 - y_1 = 2 \text{ m}$, que contém 4 elementos de contorno, mas varia linearmente de C_0 a zero nos elementos de contorno adjacentes. Isto significa que mais poluentes são lançados no domínio. Para evitar considerar esta contribuição extra, os resultados da formulação MEC-DT são multiplicados por um fator de escala igual a 0,66. Os resultados para os pontos $P_1 = (5;25)$, $P_2 = (8;25)$ e $P_3 = (15;25)$ estão representados na Figura 34, onde observa-se uma boa concordância entre a solução analítica e os resultados do MEC-DT.

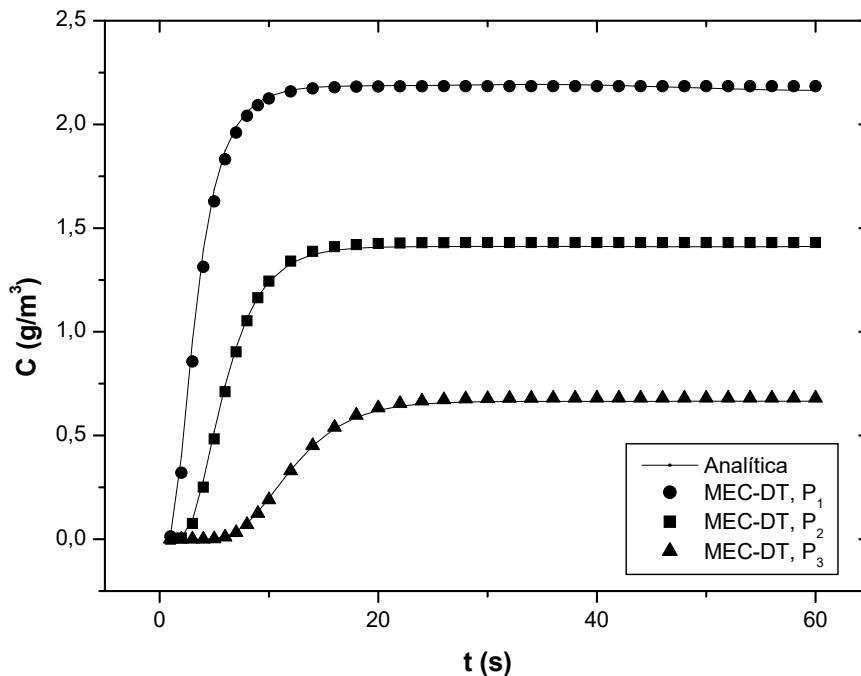
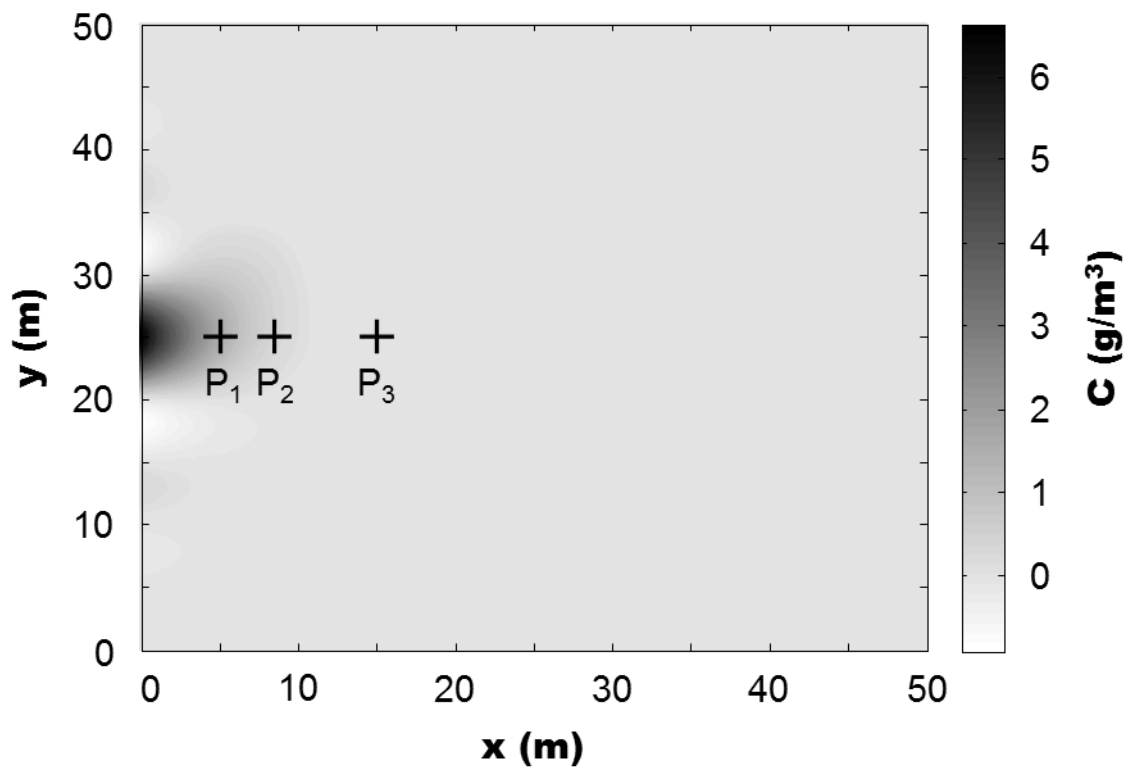
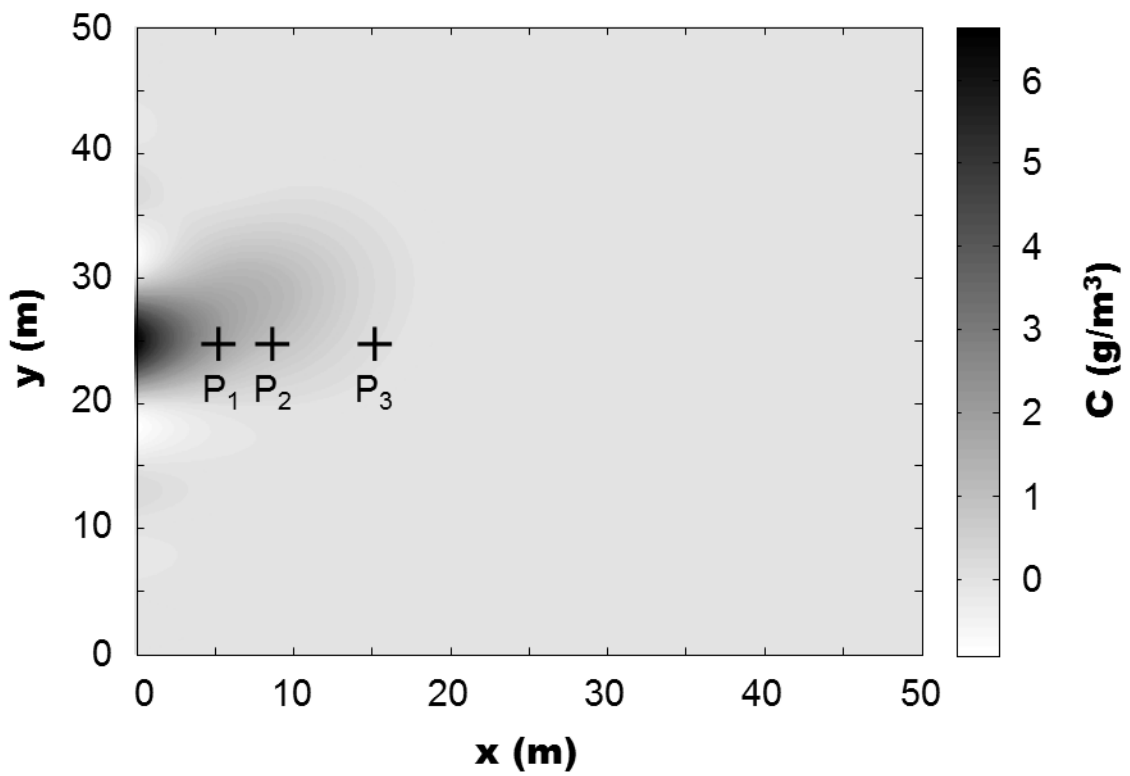
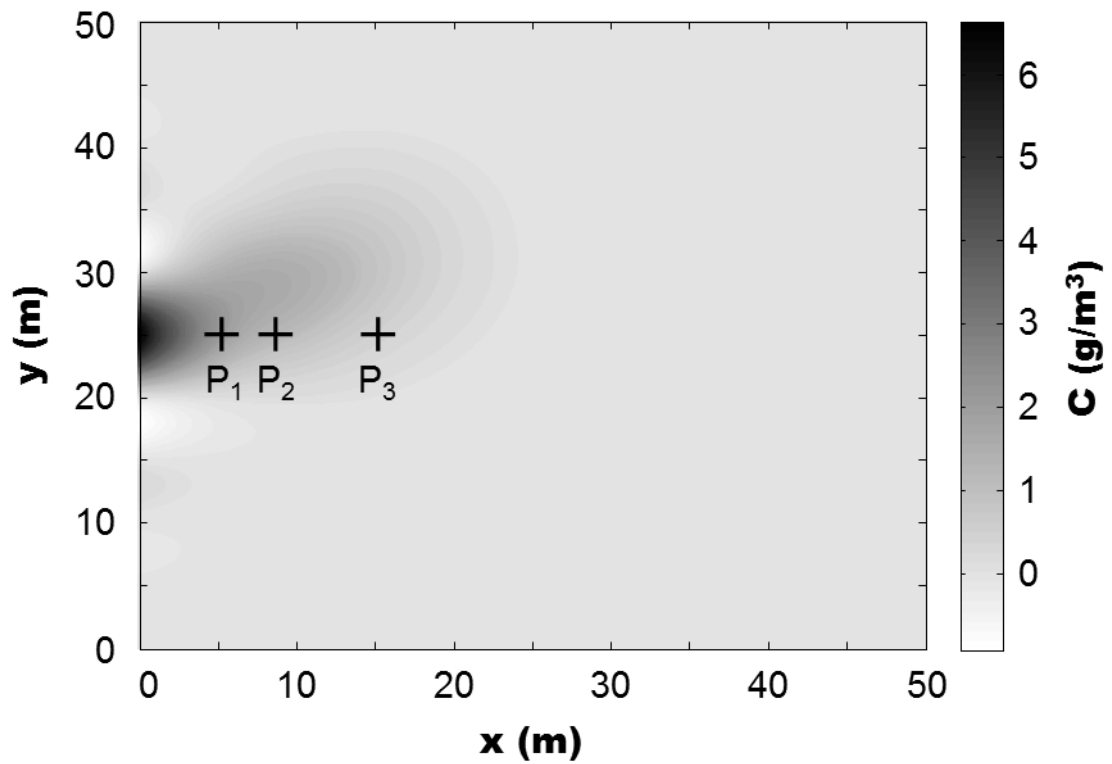
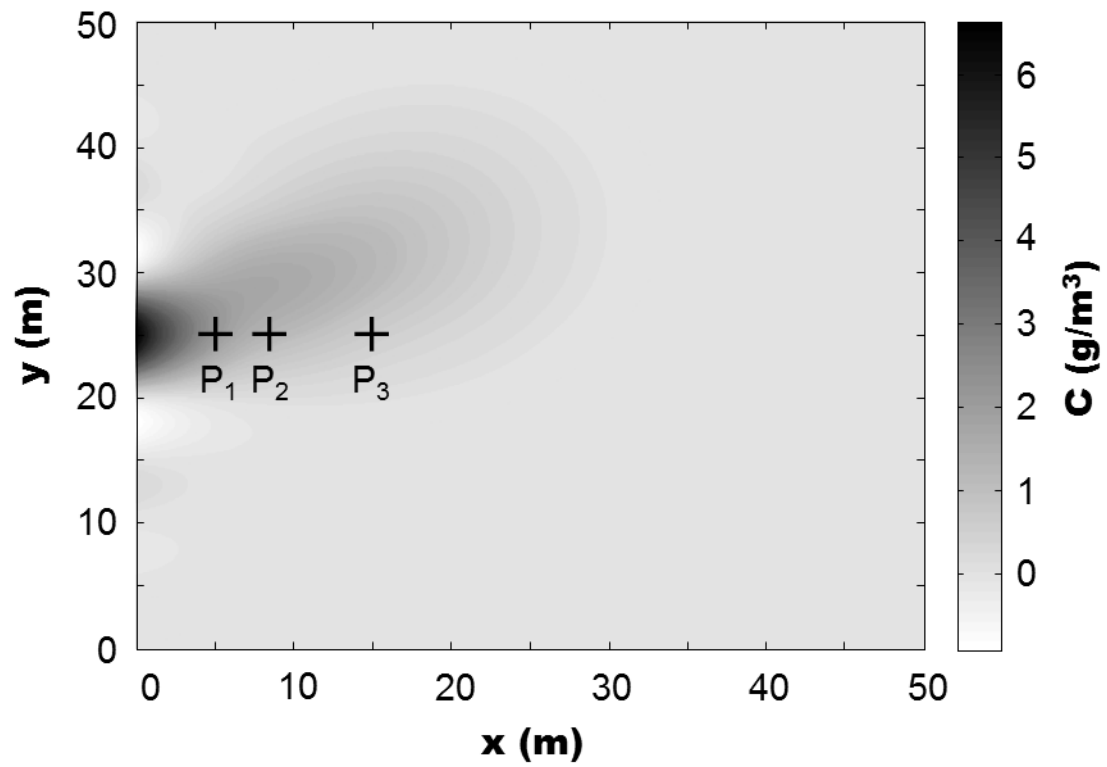
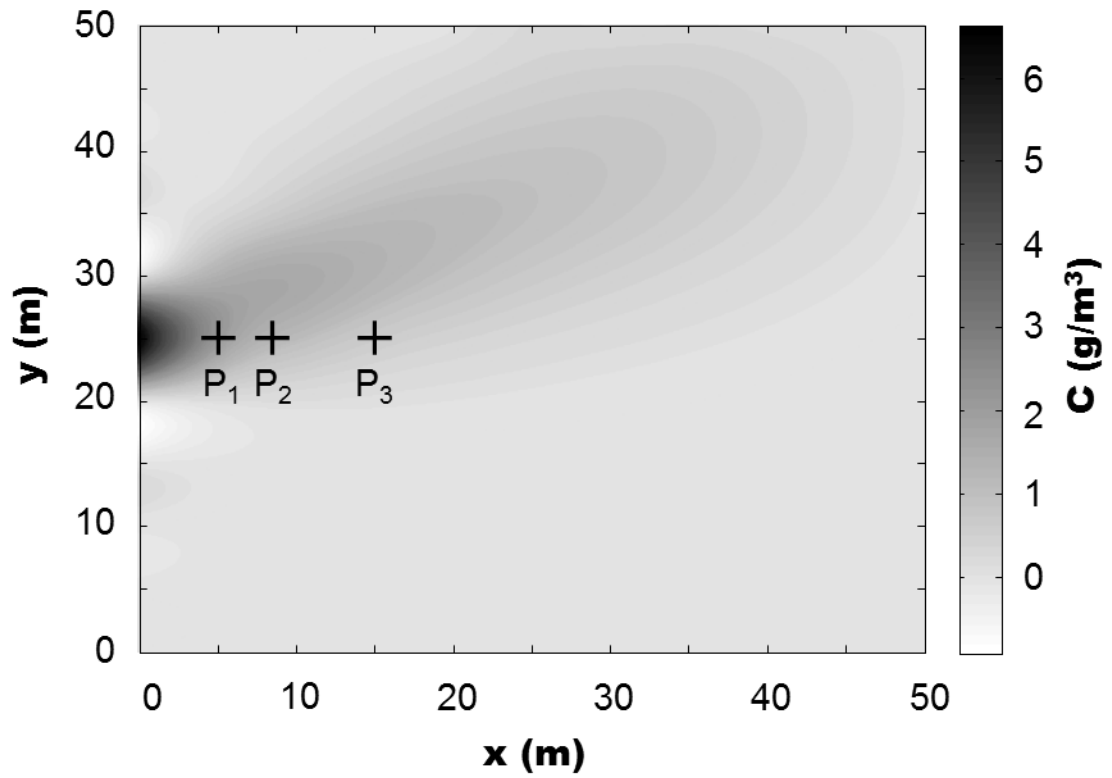
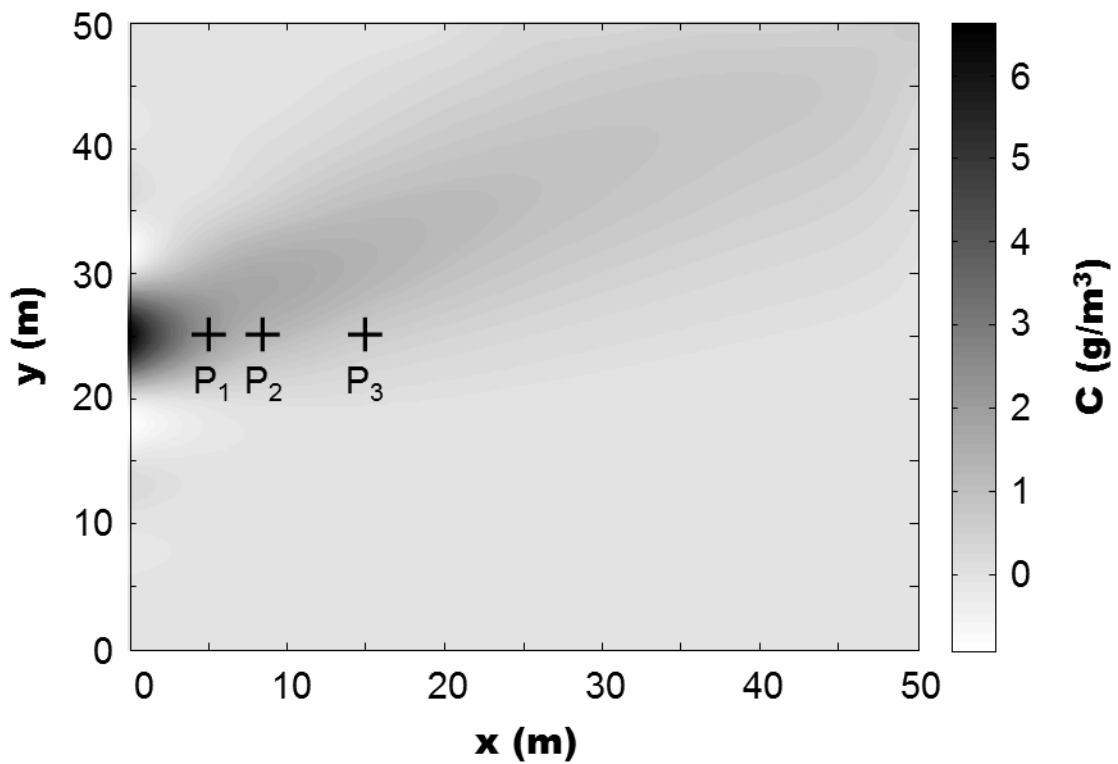


FIGURA 34 – Exemplo 4 - Resultados para P_1 , P_2 e P_3 .

Ao longo do domínio xy , os resultados em $t = 5 \text{ s}$, 10 s , 15 s , 20 s , 40 s e 60 s estão representados nas Figuras 35 a 40.

FIGURA 35 – Exemplo 4 - C em $t = 5$ s.FIGURA 36 – Exemplo 4 - C em $t = 10$ s.

FIGURA 37 – Exemplo 4 - C em $t = 15$ s.FIGURA 38 – Exemplo 4 - C em $t = 20$ s.

FIGURA 39 – Exemplo 4 - C em $t = 40$ s.FIGURA 40 – Exemplo 4 - C em $t = 60$ s.

4.5 EXEMPLO 5: CARGA PONTUAL CONCENTRADA

A fim de ampliar a gama de aplicações, um quinto exemplo é abordado, onde uma carga pontual concentrada é lançada no ponto central de um domínio quadrado, semelhante ao do Exemplo 3. O lançamento da carga ocorre no tempo inicial da análise. A condição inicial é representada por um delta de Dirac.

Inúmeras são as aplicações em engenharia que envolvem o delta de Dirac. Em dinâmica de estruturas, por exemplo, é utilizado para representar forças ou momentos pontuais aplicados em uma determinada estrutura. Já em eletromagnetismo, a fonte excitante de um circuito RLC (Resistor-Indutor-Capacitor) pode ser modelada por um delta de Dirac, gerando um impulso instantâneo, fazendo com que o circuito responda a esta excitação de uma forma muito peculiar.

Neste exemplo, o delta de Dirac será utilizado para representar uma grande quantidade de poluentes no ponto central do domínio. Desta forma, as condições iniciais e de contorno são dadas por:

$$\begin{aligned} C(X,0) &= C_0\delta(X - \xi) \quad \text{para } x = y = 5, \\ Q(x,0,t) &= Q(0,y,t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0, \\ Q(x,L,t) &= Q(L,y,t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0, \end{aligned} \tag{79}$$

onde $X = (x,y)$, $\xi = (\xi_x,\xi_y)$ e $C_0 = 10g/m^3$.

É interessante notar que da expressão geral da formulação MEC-DT (57), a integral de domínio, denotada neste momento por I_D , é definida como:

$$I_D = \int_{\Omega} C(X,0)C_0^*d\Omega. \tag{80}$$

Então, substituindo a condição inicial (79), obtém-se:

$$I_D = \int_{\Omega} C_0\delta(X - \xi)C_0^*d\Omega. \tag{81}$$

Logo, das propriedades do delta de Dirac, a integral de domínio se reduz à seguinte expressão:

$$I_D = C_0 C_0^*, \quad (82)$$

onde $C_0^* = C^*(\xi, 0, X_p, t)$ é a Solução Fundamental Dependente do Tempo em $\tau = 0$ e X_p é o ponto de aplicação da condição inicial.

Os outros parâmetros utilizados nesta simulação são: $U = V = 0,2 \text{ m/s}$, $K = 0,02 \text{ s}^{-1}$, $D = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\Delta t = 0,5 \text{ s}$.

Se a quantidade de contaminante lançada pontualmente for igual à quantidade total de poluentes do Exemplo 3, os efeitos em pontos distantes do lançamento devem ser parecidos para as duas análises, como esperado. Os resultados obtidos nos pontos $P_1 = (7,5;5)$ e $P_2 = (10;5)$ estão esboçados na Figura 41, os quais foram bastante satisfatórios.

Os resultados obtidos ao longo do domínio, nos instantes $t = 2 \text{ s}$, 5 s , 7 s , 10 s , 20 s , 40 s e 60 s , são mostrados nas Figuras 42 a 49.

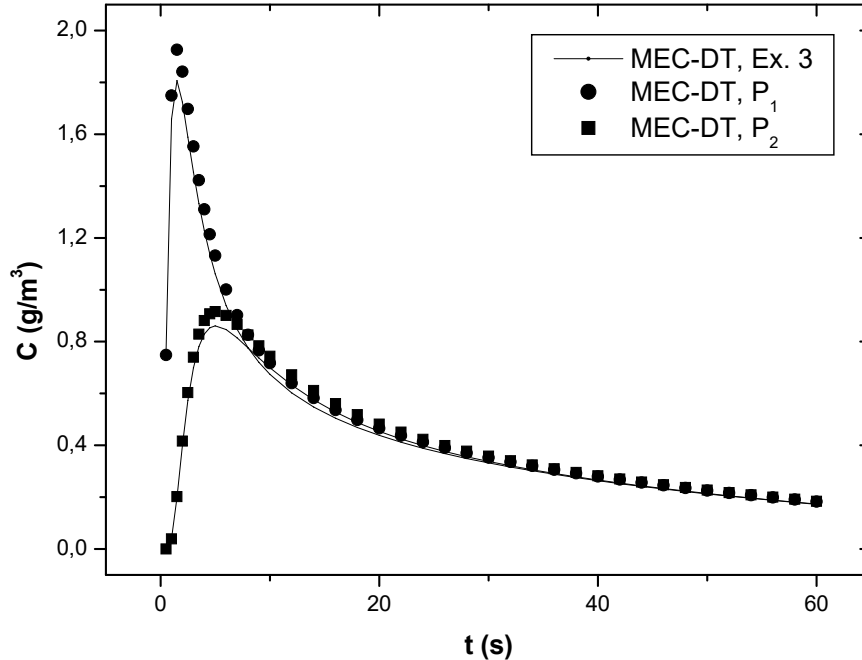
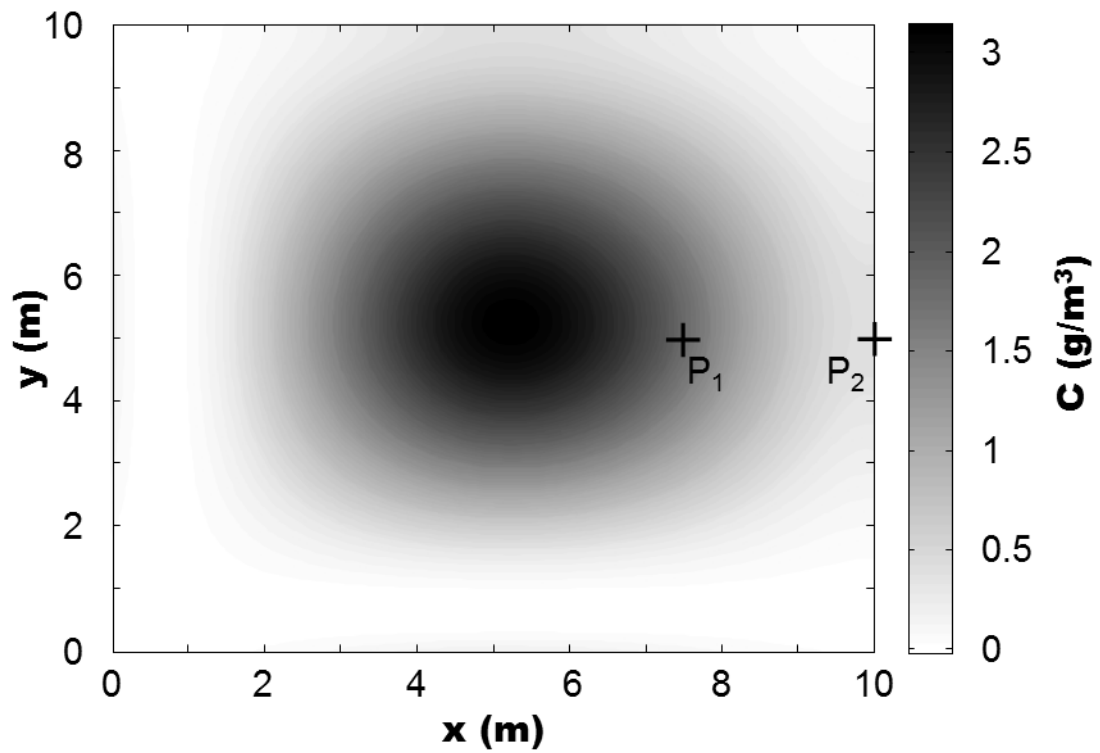
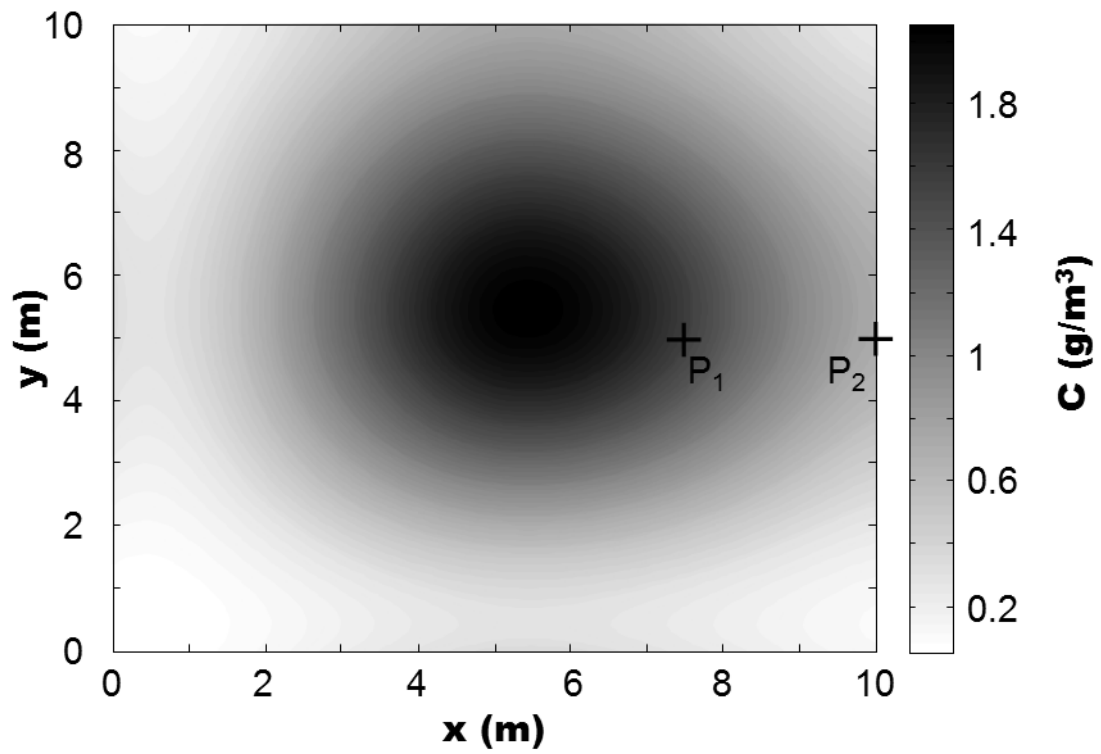
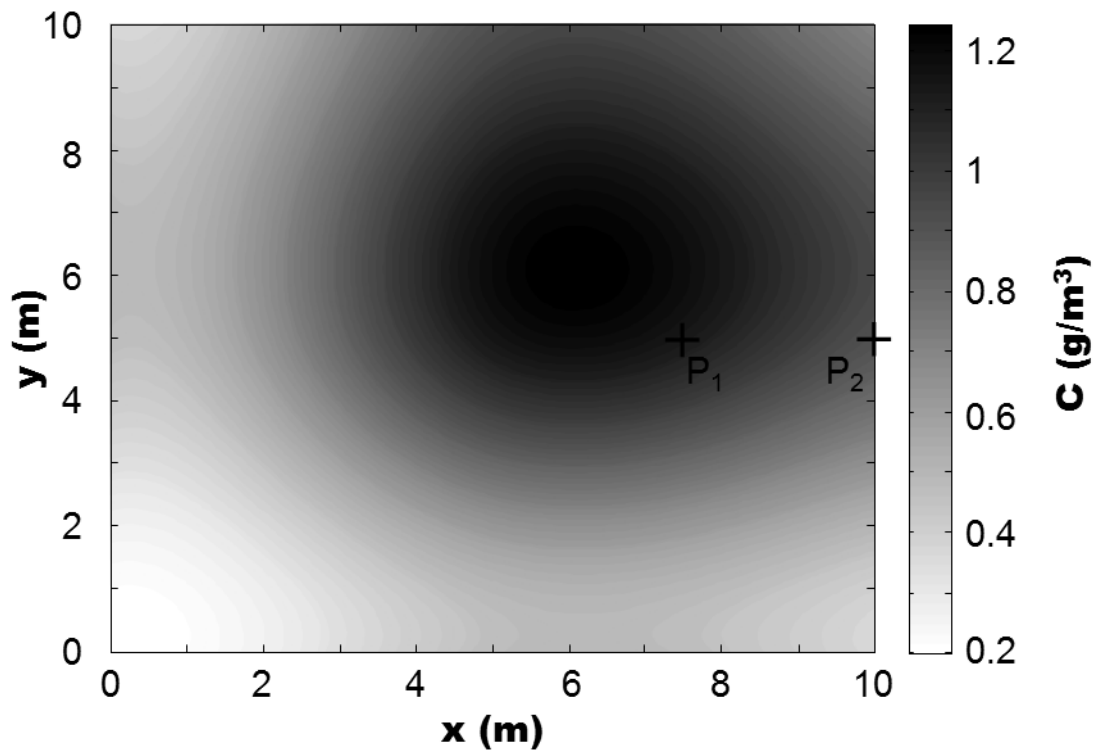
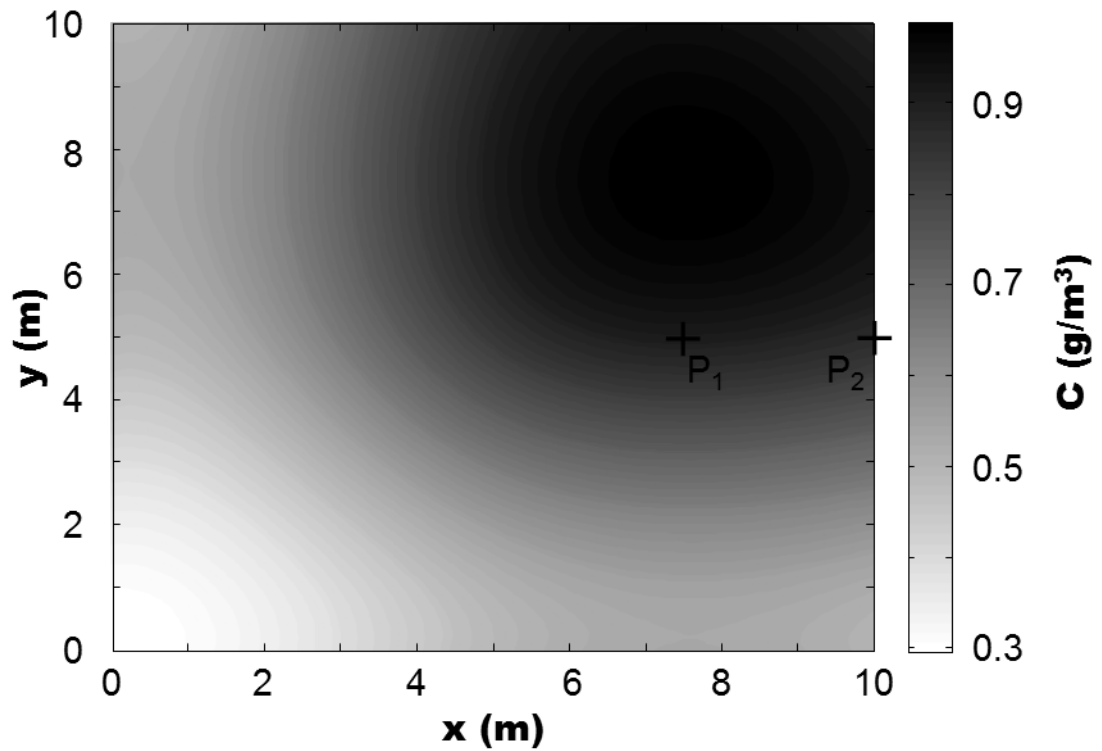
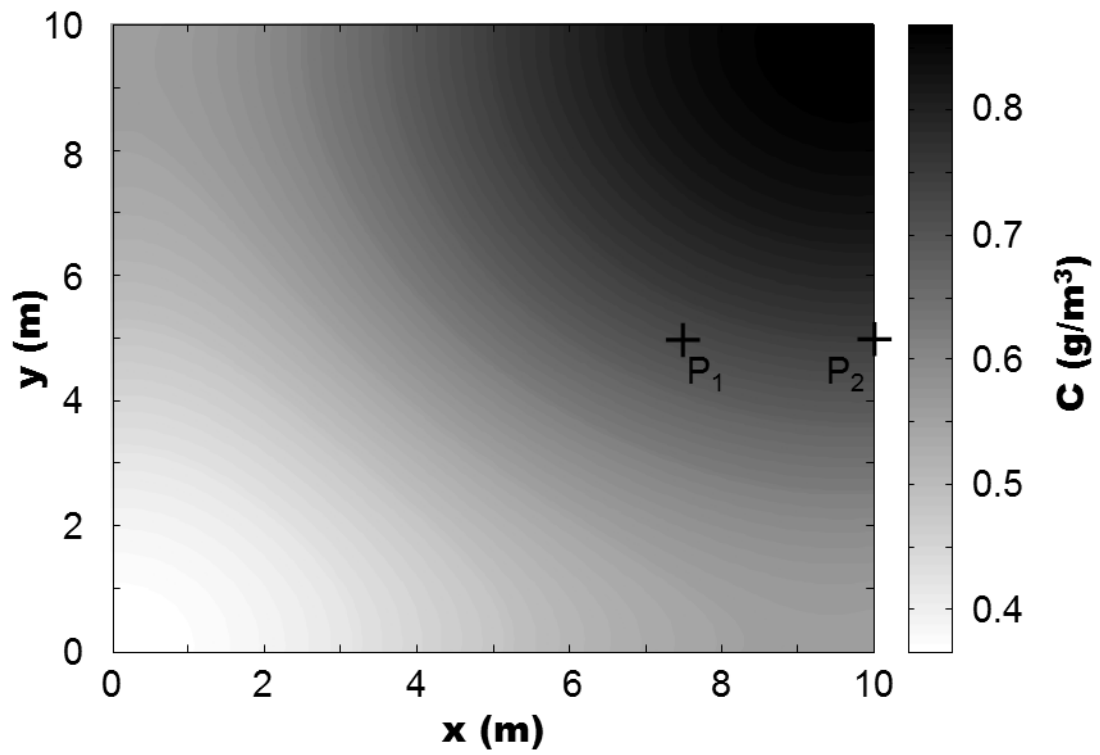
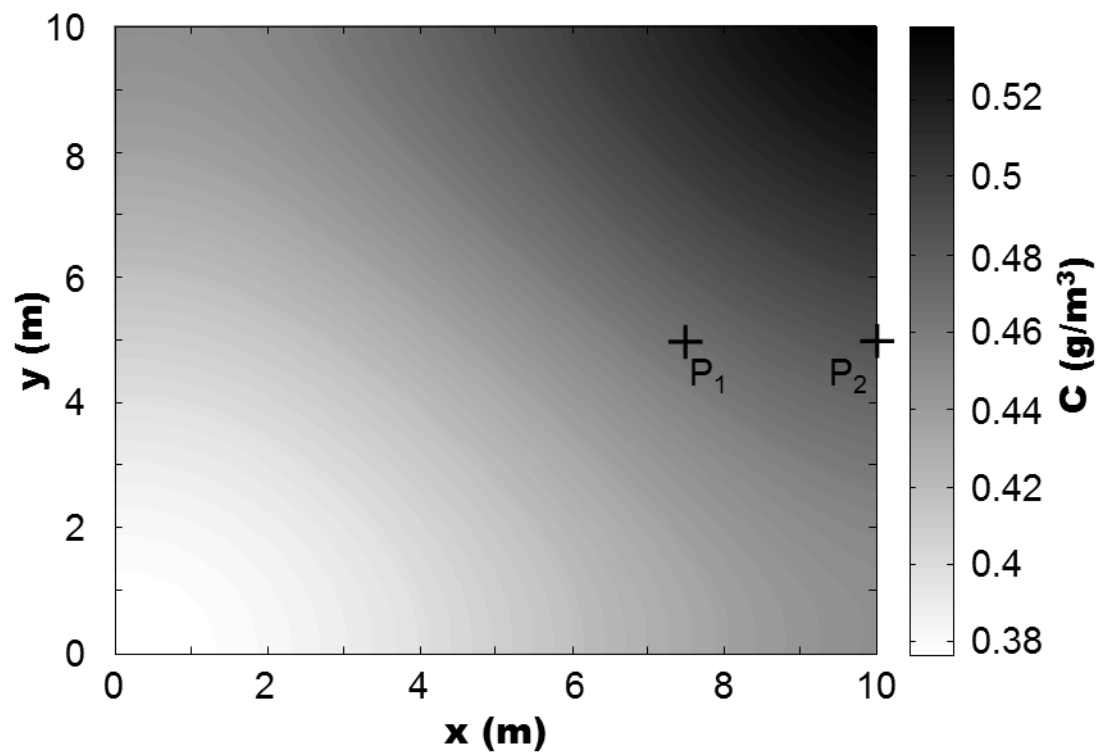
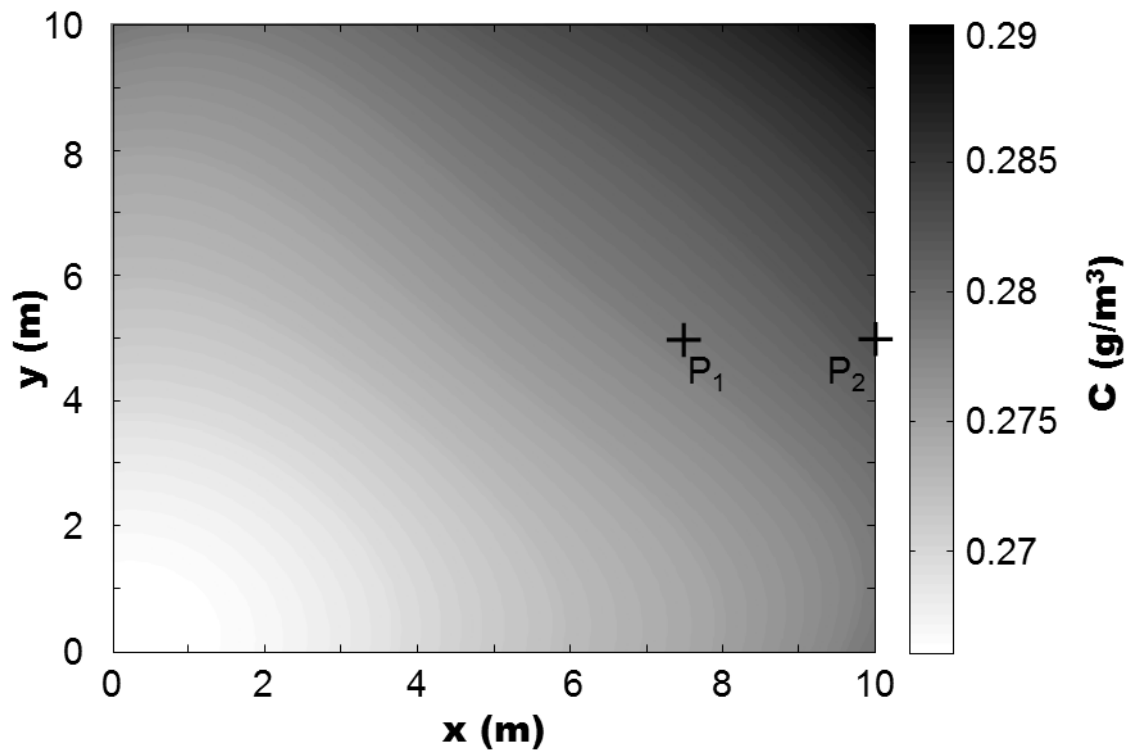
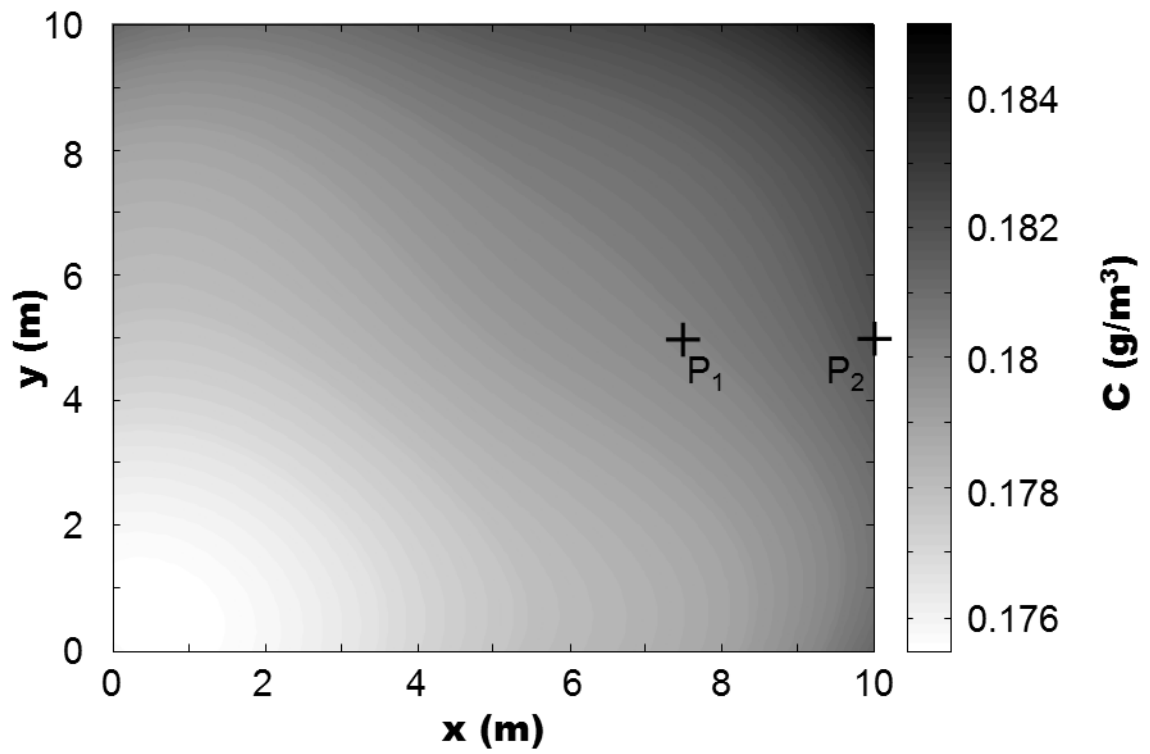


FIGURA 41 – Exemplo 5 - Resultados para P_1 e P_2 .

FIGURA 42 – Exemplo 5 - C em $t = 2$ s.FIGURA 43 – Exemplo 5 - C em $t = 3$ s.

FIGURA 44 – Exemplo 5 - C em $t = 5$ s.FIGURA 45 – Exemplo 5 - C em $t = 7$ s.

FIGURA 46 – Exemplo 5 - C em $t = 10$ s.FIGURA 47 – Exemplo 5 - C em $t = 20$ s.

FIGURA 48 – Exemplo 5 - C em $t = 40$ s.FIGURA 49 – Exemplo 5 - C em $t = 60$ s.

5 CONCLUSÃO

Os estudos baseados na Equação da Difusão-Advecção entram no quadro de problemas ambientais, notadamente no estudo da dispersão de poluentes. Como, em geral, para tais tipos de problemas não são encontradas soluções analíticas, a busca por soluções numéricas eficientes torna-se cada vez mais necessária. Este estudo aponta o MEC como uma ferramenta promissora para equacionar e solucionar problemas deste tipo. Trata-se de um método numérico que, ao longo dos anos, tem demonstrado ser eficaz e com boa qualidade de solução, quando comparado a outros métodos numéricos, como, por exemplo, o MDF ou o MEF. O MEC possui características próprias que o tornam muito apropriado em vários tipos de problemas, inclusive na solução de problemas com domínio infinito e semi-infinito.

A principal contribuição deste trabalho é o desenvolvimento da formulação MEC-DT para o caso bidimensional da Equação da Difusão-Advecção. Comparada a outros métodos e outras formulações do MEC, pode-se dizer que, do ponto de vista matemático, a formulação MEC-DT é muito sofisticada, mas é contrabalanceada por um alto esforço computacional. Entretanto, com o desenvolvimento de computadores e clusters cada vez mais potentes, esta lacuna fica cada vez mais fácil de ser preenchida.

Com a finalidade de validar a formulação desenvolvida, quatro exemplos clássicos foram analisados, onde as características da formulação MEC-DT foram evidenciadas pelo uso da Solução Fundamental Dependente do Tempo em problemas com o termo difusivo, com o termo advectivo, com o termo de decaimento e com a combinação destes três. Observou-se, em cada caso, que as curvas apresentadas possuem um alto nível de aproximação com as soluções analíticas e as soluções MEC-D, como mostrado nos Exemplos de 1 a 4.

Verificada a potencialidade da formulação MEC-DT e a fim de ampliar o leque de aplicações, um quinto exemplo foi abordado, onde uma carga pontual concentrada foi simulada com o emprego de um delta de Dirac. Os resultados deste exemplo não puderam ser comparados com nenhum outro resultado conhecido na literatura. Isso acontece porque somente a formulação MEC-DT é capaz de analisar um exemplo com este tipo de condição inicial e quando comparados à aproximação feita por meio do Exemplo 3, observou-se resultados bastante satisfatórios.

A Tabela 2 compara quais formulações são capazes de resolver os exemplos apresentados nesse trabalho. O símbolo \times significa que a formulação é capaz de resolver o exemplo.

Exemplo	Analítica	MEC-D	MEC-DT
1	×	×	×
2		×	×
3		×	×
4	×	×	×
5			×

TABELA 2 – Comparação dos métodos.

Em relação ao tempo de processamento computacional da formulação MEC-DT, comparado, por exemplo, ao tempo computacional exigido pela formulação MEC-D, esse é ainda um assunto a ser analisado. Porém, de acordo com os exemplos testados, o MEC-DT é capaz de obter bons resultados independentemente do tempo de análise, utilizando grandes intervalos de tempo e malhas de elementos ainda menores que as do MEC-D.

E, em se tratando de outros métodos numéricos, como, por exemplo, o MDF e o MEF, sabe-se que fatores como intervalo de tempo e malha de elementos influenciam significativamente na performance computacional dos métodos numéricos. Desta forma, conclui-se que o MEC-DT é uma ferramenta computacional válida na solução de problemas.

5.1 TRABALHOS FUTUROS

É importante ressaltar que estudos mais completos são necessários para que as formulações desenvolvidas possam se aproximar ainda mais de problemas reais. Sugestões de trabalhos futuros, de forma a confirmar a veracidade da formulação MEC-DT e expandir suas aplicações, contribuindo ainda mais com a comunidade acadêmica, são propostas a seguir:

- Considerar o coeficiente de difusão D variável, tanto na direção x , quanto na direção y . Neste trabalho foi considerado que $D = D_x = D_y$;
- Considerar as velocidades U e V dependentes do espaço e do tempo. Neste trabalho, considerou-se tais valores constantes para simplificar a formulação, porém, em condições reais, sabe-se que o campo de velocidade é afetado por vários fatores climáticos na região de análise;
- Realizar um estudo de caso real em um rio ou realizar um experimento prático em laboratório, considerando um domínio assimétrico, que não possua solução analítica, para confirmar a validade da formulação MEC-DT

Referências

- ABREU, A. I. A boundary integral formulation based on the convolution quadrature method for transient heat conduction in functionally graded materials. *Symposium of the International Association for Boundary Element - IABEM*, 2013. Citado na página 21.
- AGNANTIARIS, J. P.; POLYZOS, D.; BESKOS, D. E. Some studies on dual reciprocity BEM for elastodynamic analysis. *Computational Mechanics*, v. 17, n. 4, p. 270–277, 1996. Citado na página 20.
- AGNANTIARIS, J. P.; POLYZOS, D.; BESKOS, D. E. Three-dimensional structural vibration analysis by the dual reciprocity BEM. *Computational Mechanics*, v. 21, n. 4, p. 372–381, 1998. Citado na página 20.
- ALIABADI, M. H. *The Boundary Element Method*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2002. v. 2. Citado na página 18.
- ATAIE-ASHTIANI, B.; HOSSEINI, S. A. Error analysis of finite difference methods for two dimensional advection dispersion reaction equation. *Advances in Water Resources*, v. 28, n. 8, p. 793–806, 2005. Citado na página 17.
- AZIS, M. I.; CLEMENTS, D. L. Nonlinear transient heat conduction problems for a class of inhomogeneous anisotropic materials by BEM. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 32, n. 12, p. 1054–1060, 2008. Citado na página 21.
- BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1967. Citado na página 27.
- BATHE, K. J. *Finite Element Procedures*. New Jersey: Prentice Hall Inc., 1996. Citado na página 21.
- BESKOS, D. E. *Dynamic Analysis of Structures and Structural Systems*. Udine: CISM, 2003. Citado na página 19.
- BOZTOSUN, I.; CHARAFI, A. An analysis of the linear advection diffusion equation using mesh free and mesh dependent methods. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 26, n. 10, p. 889–895, 2002. Citado na página 21.
- BRAGA, C. L. R. *Notas de Física Matemática*. [S.l.]: Livraria da Física, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 33, 37 e 79.
- BREBBIA, C. A. *The Boundary Element Method for Engineers*. [S.l.]: Pentech Press, 1978. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 19.
- BREBBIA, C. A.; DOMINGUEZ, J. *Boundary Elements: An Introductory Course*. [S.l.]: Computational Mechanics Publications, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 80.
- BREBBIA, C. A.; SKERGET, P. Diffusion-advection problems using boundary elements. *International Conference on Finite Elements in Water Resources*, p. 747–768, 1984. Citado na página 21.

- BREBBIA, C. A.; TELLES, J. C. F.; WROBEL, L. C. *Boundary Element Techniques: Theory and Application in Engineering*. [S.l.]: Springer Verlag, 1984. Citado na página 17.
- BUTKOV, E. *Física Matemática*. [S.l.]: Guanabara Koogan, 1988. Citado na página 31.
- CARRER, J. A. M.; COSTA, V. L. Boundary element method formulations for the solution of the scalar wave equation in one-dimensional problems. *Journal of Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 37, n. 3, p. 959–971, 2014. Citado na página 21.
- CARRER, J. A. M.; CUNHA, C. L. N.; COSTA, V. L. A time-domain boundary element method formulation for advection-diffusion problems. XXXVI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Rio de Janeiro, 2015. Citado na página 20.
- CARRER, J. A. M.; MANSUR, W. J. Time-domain BEM analysis for the 2D scalar wave equation: Initial contributions to space and time derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 39, n. 13, p. 2169–2188, 1996. Citado na página 21.
- CARRER, J. A. M.; MANSUR, W. J. Time-dependent fundamental solution generated by a not impulsive source in the boundary element method analysis of the 2D scalar wave equation. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, v. 18, n. 4, p. 277–285, 2002. Citado na página 21.
- CARRER, J. A. M.; MANSUR, W. J. Alternative time-marching schemes for elastodynamic analysis with domain boundary element method formulation. *Computational Mechanics*, v. 34, n. 5, p. 387–399, 2004. Citado na página 20.
- CARRER, J. A. M.; MANSUR, W. J. Solution of the two-dimensional scalar wave equation by the time domain time-dependent boundary element method: Lagrange truncation strategy in time integration. *Struct. Eng. Math*, v. 23, n. 3, p. 263–278, 2006. Citado na página 21.
- CARRER, J. A. M. et al. Transient heat conduction by the boundary element method: D-BEM approaches. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 89, n. 7, p. 897–913, 2012. Citado na página 20.
- CHAPRA, S. C. *Surface-Water Quality Modelling*. [S.l.]: The McGraw Hill Companies, 1997. Citado na página 24.
- CLEARY, R. W.; UNGS, M. J. Groundwater pollution and hydrology. *Technical Report 78-WR-15*, 1978. Citado na página 58.
- COOK, R. D.; MALKUS, D. S.; PLESHA, M. E. *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*. New York: Wiley, 1989. Citado na página 21.
- CRAIG, J. R. *Reactive Contaminant Transport Modeling Using Analytic Element Flow Solutions*. Tese (Doutorado), University at Buffalo, 2004. Citado na página 58.
- CUNHA, C. L. N. et al. A study concerning the solution of advection–diffusion problems by the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 65, p. 79–84, 2016. Citado na página 38.

- CUNHA, C. L. N. et al. Hydrodynamics and water quality models applied to Sepetiba bay. *Continental Shelf Research*, v. 26, n. 16, p. 1940–1953, 2006. Citado na página 16.
- CZERNUSZENKO, W.; ROWINSKI, P. M. *Water Quality Hazards And Dispersion of Pollutants*. [S.l.]: Springer, 2005. Citado na página 15.
- DEMIREL, V.; WANG, S. Efficient boundary element method for two-dimensional transient wave propagation problems. *Appl. Math Model*, v. 11, n. 6, p. 411–416, 1987. Citado na página 21.
- DETTMAN, J. W. *Mathematical Methods in Physics and Engineering*. [S.l.]: Dover Publications, 1988. Citado na página 31.
- DHAWAN, S.; KAPOOR, S.; KUMAR, S. Numerical method for advection diffusion equation using FEM and B splines. *Journal of Computational Science*, v. 3, n. 5, p. 429–437, 2012. Citado na página 17.
- DIAS, N. L. Obtenção de uma solução analítica da equação de difusão-advecção com decaimento de 1ª ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. *RBRH—Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 8, n. 1, 2003. Citado na página 30.
- DOMINGUEZ, J. *Boundary Elements in Dynamics*. Southampton, England: Computational Mechanics Publications, 1994. Citado na página 21.
- FINLAYSON, B. A. *The Method of Weighted Residuals and Variation Principles*. [S.l.]: Academic Press, 1972. Citado na página 18.
- FISCHER, H. B. et al. *Mixing in Inland and Coastal Waters*. [S.l.]: Academic Press, 1979. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 31.
- GUO, S. et al. Three-dimensional transient heat conduction analysis by laplace transformation and multiple reciprocity boundary face method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 37, n. 1, p. 15–22, 2013. Citado na página 20.
- HATZIGEORGIOU, G. D.; BESKOS, D. E. Dynamic elastoplastic analysis of 3D structures by the domain/boundary element method formulation. *Compututational Structures*, v. 80, n. 3, p. 339–347, 2002. Citado na página 20.
- HOUBOLT, J. C. A recurrence matrix solution for the dynamic response of elastic aircraft. *Journal of the Aeronautical Sciences*, v. 17, n. 9, p. 540–550, 1950. Citado na página 20.
- IKEUCHI, M.; ONISHI, K. Boundary element solutions to steady convective diffusion equations. *Applied Mathematical Modelling*, v. 7, 1983. Citado na página 20.
- INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer 1*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1990. Citado na página 29.
- JEFFREY, A. *A Handbook of Mathematical Formulas and Integrals*. [S.l.]: Academic Press, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.
- KONTONI, D. P. N.; BESKOS, D. E. Transient dynamic elastoplastic analysis by the dual reciprocity. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 12, n. 1, p. 1–16, 1993. Citado na página 20.

- LI, B. Q.; EVANS, J. W. Boundary element solution of heat convection-diffusion problems. *Journal of Computational Physics*, v. 93, n. 2, p. 255–272, 1991. Citado na página 36.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. [S.l.]: LTC-Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 1995. Citado na página 17.
- MANSUR, W. J. *A Time-Stepping Technique to Solve Wave Propagation Problems Using the Boundary Element Method*. Tese (Doutorado), University of Southampton, 1983. Citado 3 vezes nas páginas 21, 38 e 42.
- MANSUR, W. J.; BREBBIA, C. A. Formulation of the boundary element method for transient problems governed by scalar wave equation. *Appl. Math. Modeling*, v. 6, n. 4, p. 307–311, 1982. Citado na página 21.
- MANSUR, W. J.; SILVA, W. L. Efficient time truncation in two-dimensional BEM analysis of transient wave propagation problems. *Earthquake Engineering & Structural Dynamics*, v. 21, n. 1, p. 51–63, 1992. Citado na página 21.
- NEWMARK, N. M. A method of computation for structural dynamics. *ASCE Journal of the Engineering Mechanics Division*, v. 85, p. 67–94, 1959. Citado na página 20.
- OCHIAI, Y. Two-dimensional unsteady heat conduction analysis with heat generation by triple-reciprocity BEM. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 5, n. 2, p. 143–157, 2001. Citado na página 20.
- OGATA, A.; BANKS, R. B. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. *Geological Survey Professional Paper*, v. 411, n. A, p. 1–7, 1961. Citado na página 31.
- OLIVEIRA, M. F. *Análise do Transporte de Contaminantes em Domínios Bidimensionais Utilizando o Método dos Elementos de Contorno*. Tese (Doutorado), Universidade Federal do Paraná, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 16, 19, 20, 37 e 40.
- ONISHI, K.; KUROKI, T. Boundary element method in transient heat transfer problems. *Civil Engineering and Applied Mathematics*, n. 3, 1980. Citado na página 39.
- OTEMPO. *Poluição Agravada pela Seca Faz Espuma do Tietê Invadir Casas*. 2015. Disponível em: <<http://www.otempo.com.br>>. Citado na página 15.
- PARTRIDGE, P. W.; BREBBIA, C. A.; WROBEL, L. W. *The Dual Reciprocity Boundary Element Method*. London: Computational Mechanics Publications, Southampton, 1992. Citado na página 20.
- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1980. Citado na página 28.
- PETTRES, R. *Formulação do Método dos Elementos de Contorno para Análise da Difusão e Geração do Calor em Meios Contínuos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 40.
- POLYANIN, A. D. *Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists*. [S.l.]: Chapman and Hall/CRC, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 33.

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, n. 7, p. 1849–1855, 2011. Citado na página 17.

QIU, Z. H.; WROBEL, L. C.; POWER, H. Numerical solution of convection diffusion problems at high Peclet number using boundary elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 41, n. 5, p. 899–914, 1998. Citado na página 29.

REYNOLDS, O. *An Experimental Investigation of the Circumstances which Determine Whether the Motion of Water Shall be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels*. [S.l.]: Philosophical Transactions of the Royal Society, 1883. Citado na página 28.

RODRIGUES, V. L. C. *Propagação de Ondas Unidimensionais por Meio da Formulação Dependente do Tempo do Método dos Elementos de Contorno*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná, 2012. Citado na página 21.

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. 13, n. 76, p. 2063–2090, 2008. Citado na página 31.

SINGH, K. M.; TANAKA, M. On exponential variable transformation based boundary element formulation for advection–diffusion problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 24, n. 3, p. 225–235, 2000. Citado na página 22.

SINGH, K. M.; TANAKA, M. Dual reciprocity boundary element analysis of transient advection diffusion. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, v. 13, n. 5, p. 633–646, 2003. Citado na página 20.

SOARES-JR, D.; MANSUR, W. J. Compression of time generated matrices in two-dimensional time domain elastodynamic BEM analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 61, n. 8, p. 1209–1218, 2004. Citado na página 19.

SOCOLOFSKY, S. A.; JIRKA, G. H. *Environmental Fluid Mechanics Part I: Mass Transfer and Diffusion*. [S.l.]: Institut fur Hydromechanik, 2002. Citado na página 24.

SOUZA, D. M. *Um Problema Inverso de Reconstrução de Fonte para a Equação da Difusão-Advecção*. Tese (Doutorado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012. Citado na página 24.

STOKES, G. G. *On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums*. [S.l.]: Transactions of the Cambridge Philosophical Society, 1851. Citado na página 28.

TAIGBENU, A.; LIGGETT, J. A. An integral solution for the diffusion-convection equation. *Water Resources Research*, v. 22, n. 8, p. 1237–1246, 1986. Citado 3 vezes nas páginas 21, 31 e 42.

TANAKA, M.; KUROKAWA, K.; MATSUMOTO, T. A time-stepping DR-BEM for transient heat conduction in anisotropic solids. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 32, n. 12, p. 1046–1053, 2008. Citado na página 20.

VANZUIT, J. R. *Análise do Fluxo Bidimensional de Calor pelo Método dos Elementos de Contorno com Soluções Fundamentais Independentes do Tempo*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná, 2007. Citado na página 20.

WANG, W. et al. A hybrid laplace transform finite analytic method for solving transport problems with large Peclet and Courant numbers. *Computers & Geosciences*, v. 49, p. 182–189, 2012. Citado na página 31.

WEXLER, E. J. Analytical solutions for one, two, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow. *Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey*, v. 8, n. 1, 1992. Citado na página 58.

WROBEL, L. *Potential and Viscous Flow Problems Using the Boundary Element Method*. Tese (Doutorado), University of Southampton, 1981. Citado 4 vezes nas páginas 21, 32, 37 e 39.

WROBEL, L. *The Boundary Element Method Volume 1 Applications in Thermo-Fluids and Acoustic*. [S.l.]: John Wiley and Sons LTD, 2002. Citado na página 19.

YOUNG, D. L. et al. Time dependent fundamental solutions for homogeneous diffusion problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 28, n. 12, p. 1463–1473, 2004. Citado na página 21.

YOUNG, D. L.; WANG, Y. F.; ELDHO, T. I. Solution of the advection diffusion equation using the eulerian lagrangian boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 24, n. 6, p. 449–457, 2000. Citado na página 22.

ZIENKIEWICZ, O. C.; MORGAN, K. *Finite Elements & Approximation*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 1983. Citado na página 18.

APÊNDICES

APÊNDICE A – FORMULAÇÃO MEC-D

Para o desenvolvimento da formulação MEC-D, a Equação da Difusão-Advecção é reescrita como:

$$\nabla^2 C - \frac{U}{D} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{V}{D} \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{K}{D} C = \frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (83)$$

onde $C = C(X, t)$. Aplicando em (83) uma sentença do Método de Resíduos Ponderados, tem-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\nabla^2 \tilde{C} - \frac{U}{D} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x} - \frac{V}{D} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial y} - \frac{K}{D} \tilde{C} - \frac{1}{D} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} \right) C^* d\Omega = \\ \int_{\Gamma_C} w_C (\tilde{C} - \hat{C}) d\Gamma + \int_{\Gamma_Q} w_Q (\tilde{Q} - \hat{Q}) d\Gamma. \end{aligned} \quad (84)$$

Fazendo $\tilde{C} = C$ apenas para simplificar a notação e separando as integrais, a equação (84) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla^2 C C^* d\Omega - \frac{U}{D} \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} C^* d\Omega - \frac{V}{D} \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial y} C^* d\Omega - \frac{K}{D} \int_{\Omega} C C^* d\Omega - \\ \frac{1}{D} \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} C^* d\Omega = \int_{\Gamma_C} w_C (C - \hat{C}) d\Gamma + \int_{\Gamma_Q} w_Q (Q - \hat{Q}) d\Gamma. \end{aligned} \quad (85)$$

Integrando por partes as três primeiras integrais do lado esquerdo da igualdade, isto é:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla^2 C C^* d\Omega &= \int_{\Gamma} Q C^* d\Gamma - \int_{\Gamma} C Q^* d\Gamma + \int_{\Omega} C \nabla^2 C^* d\Omega, \\ \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} C^* d\Omega &= \int_{\Gamma} C n_x C^* d\Gamma - \int_{\Omega} C \frac{\partial C^*}{\partial x} d\Omega, \\ \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial y} C^* d\Omega &= \int_{\Gamma} C n_y C^* d\Gamma - \int_{\Omega} C \frac{\partial C^*}{\partial y} d\Omega, \end{aligned} \quad (86)$$

onde $n_x = \frac{dn}{dx}$, $n_y = \frac{dn}{dy}$ e $Q^* = \frac{dC^*}{dn}$, e substituindo em (85), obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma} QC^* d\Gamma - \int_{\Gamma} CQ^* d\Gamma + \int_{\Omega} C\nabla^2 C^* d\Omega - \frac{U}{D} \int_{\Gamma} Cn_x C^* d\Gamma + \frac{U}{D} \int_{\Omega} C \frac{\partial C^*}{\partial x} d\Omega - \\
& \frac{V}{D} \int_{\Gamma} Cn_y C^* d\Gamma + \frac{V}{D} \int_{\Omega} C \frac{\partial C^*}{\partial y} d\Omega - \frac{K}{D} \int_{\Omega} CC^* d\Omega - \frac{1}{D} \int_{\Omega} \dot{C}C^* d\Omega = \quad (87) \\
& \int_{\Gamma_C} w_C(C - \hat{C})d\Gamma + \int_{\Gamma_Q} w_Q(Q - \hat{Q})d\Gamma,
\end{aligned}$$

onde $\dot{C} = \frac{\partial C}{\partial t}$. Agrupando as integrais semelhantes e combinando a equação resultante, (87) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} C\nabla^2 C^* d\Omega = \int_{\Gamma} C \left(\frac{Un_x + Vn_y}{D} C^* + Q^* \right) d\Gamma - \int_{\Gamma} QC^* d\Gamma - \\
& \frac{1}{D} \int_{\Omega} C \left(U \frac{\partial C^*}{\partial x} + V \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) d\Omega + \frac{K}{D} \int_{\Omega} CC^* d\Omega + \frac{1}{D} \int_{\Omega} \dot{C}C^* d\Omega + \quad (88) \\
& \int_{\Gamma_C} w_C C d\Gamma - \int_{\Gamma_C} w_C \hat{C} d\Gamma + \int_{\Gamma_Q} w_Q Q d\Gamma - \int_{\Gamma_Q} w_Q \hat{Q} d\Gamma.
\end{aligned}$$

Se a função de ponderação é tal que:

$$\nabla^2 C^*(X, \xi) = -\delta(X - \xi), \quad (89)$$

então $C^*(X, \xi)$ é a Solução Fundamental da Equação de Laplace, cuja expressão é dada por:

$$C^*(X, \xi) = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{1}{r} \right) \quad (90)$$

e a sua derivada em relação a normal é:

$$Q^*(X, \xi) = \frac{dC^*(X, \xi)}{dn} = \frac{1}{2\pi r} \frac{dr}{dn}, \quad (91)$$

onde $r = |X - \xi|$. Substituindo (89) em (88) e aplicando as propriedades do delta de Dirac (BRAGA, 2005), tem-se que:

$$\begin{aligned}
C(\xi, t) = & \int_{\Gamma} C \left(\frac{Un_x + Vn_y}{D} C^* + Q^* \right) d\Gamma - \int_{\Gamma} QC^* d\Gamma - \\
& \frac{1}{D} \int_{\Omega} C \left(U \frac{\partial C^*}{\partial x} + V \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) d\Omega + \frac{K}{D} \int_{\Omega} CC^* d\Omega + \frac{1}{D} \int_{\Omega} \dot{C}C^* d\Omega + \\
& \int_{\Gamma_C} w_C C d\Gamma - \int_{\Gamma_C} w_C \hat{C} d\Gamma + \int_{\Gamma_Q} w_Q Q d\Gamma - \int_{\Gamma_Q} w_Q \hat{Q} d\Gamma.
\end{aligned} \tag{92}$$

As funções de ponderação w_C e w_Q , são escolhidas como:

$$\begin{aligned}
w_C &= - \left(\frac{Un_x + Vn_y}{D} C^* + Q^* \right), \\
w_Q &= C^*.
\end{aligned} \tag{93}$$

Substituindo (94) em (93), e combinando as integrais, obtém-se:

$$\begin{aligned}
C(\xi, t) = & \int_{\Gamma} QC^* d\Gamma - \int_{\Gamma} C \left(\frac{Un_x + Vn_y}{D} C^* + Q^* \right) d\Gamma - \\
& \frac{1}{D} \int_{\Omega} C \left(U \frac{\partial C^*}{\partial x} + V \frac{\partial C^*}{\partial y} - KC^* \right) d\Omega - \frac{1}{D} \int_{\Omega} \dot{C}C^* d\Omega,
\end{aligned} \tag{94}$$

que é a expressão geral da formulação MEC-D para o caso bidimensional. Substituindo a solução fundamental C^* e a sua derivada normal Q^* na equação (94) e resolvendo as integrais numericamente, utilizando Quadratura Gaussiana (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1989), um sistema de equações algébricas é obtido:

$$\begin{aligned}
& \left[\begin{array}{cc} \mathbf{S}^{bb} + \mathbf{N}^{bb} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{bb} & \mathbf{N}^{bd} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{bd} \\ \mathbf{N}^{db} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{db} & \mathbf{I} + \mathbf{N}^{dd} + \frac{1}{D\Delta t} \mathbf{M}^{dd} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{C}_{n+1}^b \\ \mathbf{C}_{n+1}^d \end{array} \right\} = \\
& \left[\begin{array}{c} \mathbf{B}^{bb} \\ \mathbf{B}^{db} \end{array} \right] \left\{ \mathbf{Q}_{n+1}^b \right\} + \frac{1}{D\Delta t} \left[\begin{array}{cc} \mathbf{M}^{bb} & \mathbf{M}^{bd} \\ \mathbf{M}^{db} & \mathbf{M}^{dd} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{C}_n^b \\ \mathbf{C}_n^d \end{array} \right\},
\end{aligned} \tag{95}$$

onde o índice d se refere aos nós do domínio (pontos internos), b aos nós do contorno e n ao tempo. As matrizes \mathbf{S} e \mathbf{N} resultam de:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} &= C(\xi, t) + \int_{\Gamma} C \left(\frac{Un_x + Vn_y}{D} C^* + Q^* \right) d\Gamma, \\
\mathbf{N} &= -\frac{1}{D} \int_{\Omega} C \left(U \frac{\partial C^*}{\partial x} + V \frac{\partial C^*}{\partial y} - KC^* \right) d\Omega.
\end{aligned} \tag{96}$$

E as matrizes \mathbf{B} e \mathbf{M} resultam, respectivamente, de:

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \int_{\Gamma} Q C^* d\Gamma, \\ \mathbf{M} &= -\frac{1}{D} \int_{\Omega} C C^* d\Omega,\end{aligned}\tag{97}$$

onde \dot{C} foi aproximado por meio de Diferença Regressiva, isto é:

$$\dot{C} = \frac{dC}{dt} = \frac{C(t) - C(t - \Delta t)}{\Delta t}.\tag{98}$$

A.1 MALHA MEC-D

Na formulação MEC-D, o domínio do problema necessita ser discretizado. Para os Exemplos 1 e 2 foi utilizada a malha da Figura 50, onde o domínio foi dividido em 256 células triangulares lineares, resultando em 105 pontos internos e 48 elementos de contorno lineares.

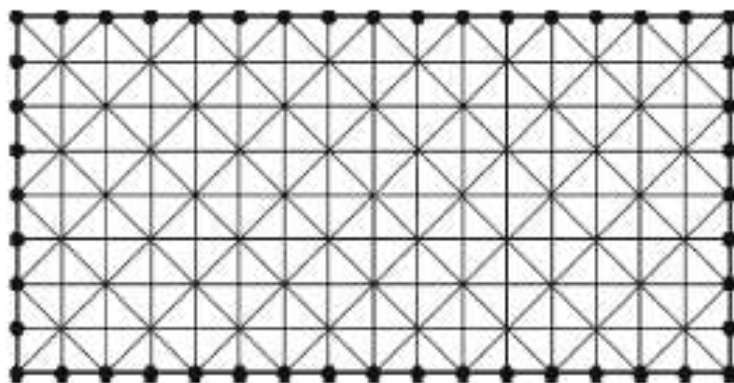


FIGURA 50 – Malha MEC-D do Exemplo 2.

Para o Exemplo 3 foi utilizada a malha da Figura 51, onde o domínio foi dividido em 800 células triangulares lineares, resultando em 361 pontos internos e 80 elementos de contorno lineares.

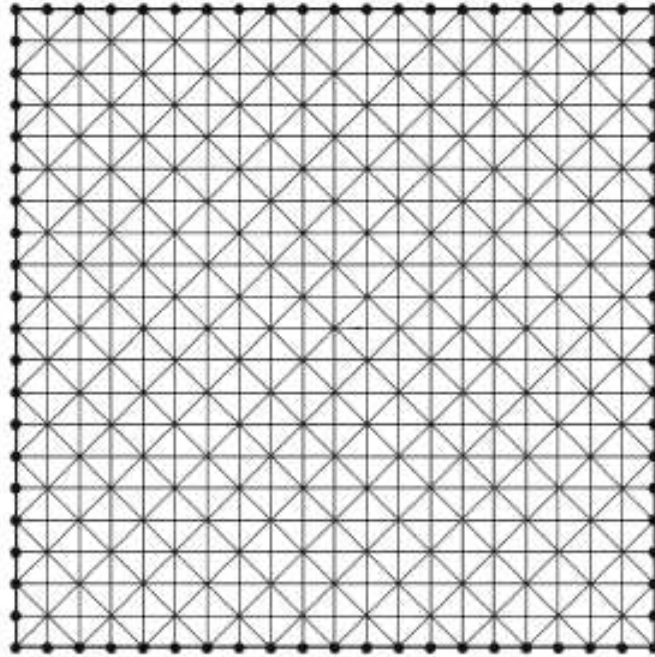


FIGURA 51 – Malha MEC-D do Exemplo 3.