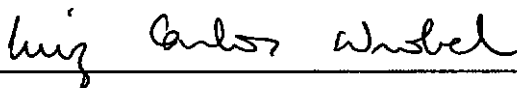


UMA FORMULAÇÃO DE PETROV-GALERKIN
PARA PROBLEMAS DE DISPERSÃO
PELO METODO DOS ELEMENTOS FINITOS

JULIÁN HERMÓGENES QUEZADA CELEDÓN

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE
PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA CIVIL DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO
DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO
DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.) EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:




PROF. LUIZ CARLOS WROBEL

(Presidente)


PROF. AUGUSTO CESAR NORONHA RODRIGUES GALEÃO


PROF. JONATAS COSTA MOREIRA


PROF. NELSON FRANCISCO FAVILLA EBECKEN

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

ABRIL DE 1988

QUEZADA CELEDÓN, JULIÁN HERMÓGENES

Uma formulação de Petrov-Galerkin para problemas de dispersão pelo método dos elementos finitos (Rio de Janeiro) 1988.

viii, 91 p, 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 1988).

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ.

I. Dispersão, 2. Elementos Finitos I. COPPE/UFRJ

II. Título (Série)

Aos meus pais

Bruna e Julio

MEUS SINCEROS AGRADECIMENTOS,

Ao Professor Luiz Carlos Wrobel, pelo incentivo e valiosa orientação.

Aos Professores do Programa de Engenharia Civil da COPPE, pelos ensinamentos, em especial a João Sergio Fajardo Roldão.

A Ana Maria Roux Martinez, pela sua amizade.

Aos colegas da COPPE, em especial a Miguel Angel Castro Cisternas, Teresa Cristina Rosso pela amizade e interesse demonstrado.

RESUMO DA TESE APRESENTADA À COPPE/UFRJ COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE
MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.)

UMA FORMULAÇÃO DE PETROV-GALERKIN
PARA PROBLEMAS DE DISPERSÃO
PELO METODO DOS ELEMENTOS FINITOS

JULIAN HERMOGENES QUEZADA CELEDON

ABRIL DE 1988

Orientador: LUIZ CARLOS WROBEL

Programa: Engenharia Civil

Esta tese consiste na discussão de uma formulação de elementos finitos para a equação de difusão-convecção, utilizando um esquema de Petrov-Galerkin com funções de ponderação descontínuas. O esquema, conhecido como SUPG, introduz o conceito de "upwind" de maneira consistente, e pode ser facilmente aplicado a problemas transientes e/ou multidimensionais. Apresentam-se testes numéricos, uni e bidimensionais, para ilustrar as principais características do método de correção. As respostas obtidas são comparadas com resultados de outras formulações. Pode-se concluir, a partir dos casos analisados, que a correção adotada apresenta vantagens que justificam sua utilização em estudos práticos de dispersão.

ABSTRACT OF THESIS PRESENTED TO COPPE/UFRJ AS PARTIAL
FULFILLMENT OF REQUIREMENTS FOR THE DEGREE
OF MASTER OF SCIENCE (M.Sc)

A PETROV-GALERKIN FORMULATION
FOR DISPERSION PROBLEMS
BY THE FINITE ELEMENT METHOD

JULIAN HERMOGENES QUEZADA CELEDON

APRIL, 1988

Charmain: LUIZ CARLOS WROBEL

Department: Civil Engineering

This thesis consists in the discussion of a finite element formulation for the diffusion-convection equation, using a Petrov-Galerkin scheme with discontinuous weighting functions. This scheme, known as SUPG, introduces the concept of a consistent upwind, that can be easily applied to transient and/or multidimensional problems. Numerical one and two-dimensional tests are presented to illustrate the main characteristics of the correction method. Results are compared to the solutions obtained by other formulations. It can be concluded, based in the test results, that the proposed correction possesses several advantages which justify its utilization in practical dispersion studies.

INDICE

I	INTRODUÇÃO.....	1
I.1	ASPECTOS GERAIS.....	1
I.2	OBJETIVO DO TRABALHO.....	5
I.3	APRESENTAÇÃO DO TRABALHO.....	6
II	O PROBLEMA DA DISPERSÃO.....	7
II.1	INTRODUÇÃO.....	7
II.2	DIFUSÃO MOLECULAR.....	8
II.3	DIFUSÃO DIFERENCIAL.....	8
II.4	DIFUSÃO TURBULENTA.....	9
II.5	EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO.....	10
II.6	APLICAÇÕES FLUVIAIS.....	13
II.7	EQUAÇÃO UNIDIMENSIONAL.....	16
II.8	SOLUÇÃO ANALITICA.....	17
II.9	SOLUÇÕES NUMERICAS.....	19
II.10	ERRO NA EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO PURA.....	20
II.11	ERRO NA EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO.....	23
II.12	ESQUEMAS CORRECTIVOS BASEADOS NO "UPWIND".....	27
II.12.1	METODO DE BALANCEAMENTO ANISOTROPICO.....	28
II.12.2	METODO DE INTEGRAÇÃO NUMERICA MODIFICADA....	30
III	METODO DE STREAMLINE UPWIND/PETROV-GALERKIN.....	33
III.1	DEFINIÇÕES BASICAS.....	33
III.2	FORMULAÇÃO DE PETROV-GALERKIN.....	35
III.3	IMPLEMENTAÇÃO DO METODO DE STREAMLINE UPWIND/PETROV-GALERKIN.....	36

III.4	CALCULO DA FUNÇÃO DE PONDERAÇÃO.....	40
III.5	PROBLEMA UNIDIMENSIONAL.....	42
III.6	PROBLEMA BIDIMENSIONAL.....	45
III.7	DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL.....	50
III.8	DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL.....	52
IV	TESTES NUMERICOS.....	54
IV.1	INTRODUÇÃO.....	54
IV.2	TESTES UNIDIMENSIONAIS.....	54
IV.3	TESTES BIDIMENSIONAIS.....	75
V	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	84
	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.....	86

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

I.1 ASPECTOS GERAIS

A administração dos recursos hídricos torna-se mais importante com o passar do tempo. Isto deve-se ao contínuo aumento da demanda, por um lado, e à deterioração das fontes de suprimento, por outro.

Um aspecto desta deterioração é caracterizado pela poluição das fontes de água doce. A poluição aparece como um fenômeno físico descrito, entre outras formas, pela dispersão de alguma substância que dificulta ou impossibilita o uso do recurso.

Neste contexto o problema aparece em várias áreas, dependendo do meio em que tal fenômeno aconteça. Ligadas ao problema de poluição da água podemos destacar a poluição fluvial, a lacustre e a marítima. Em outros meios podemos destacar a poluição atmosférica e a poluição do subsolo.

Como resultado desta tendência, vem ganhando atenção

crescente, nos centros de pesquisa, o estudo da dispersão. O fenômeno de dispersão de uma substância num meio líquido envolve problemas de difusão, convecção e reações químicas, que podem ser aproximados por um modelo matemático de qualidade de água.

O modelo usado para simular a dispersão, simples em princípio, utiliza equações que, em geral, só podem ser resolvidas através de métodos numéricos.

Os métodos numéricos mais usados neste campo são os de diferenças finitas, elementos finitos e, recentemente, elementos de contorno.

O programa de Engenharia Civil da COPPE/UFRJ vem desenvolvendo uma linha de pesquisas dentro desta área, podendo-se destacar os trabalhos de AUGUSTO [1], VENDRAME [2], ROLDAO [3], KUPPER [4], KUPPER E GUERRERO [5], MOREIRA e WROBEL [6], ROSSO [7].

As características hidrodinâmicas, de transporte e de misturamento, são de fundamental importância para a modelagem de um sistema que permita prever os níveis de contaminação que seriam alcançados a jusante de um determinado ponto de descarga poluente.

As características de transporte dependem de parâmetros hidráulicos e podem ser obtidos com relativa facilidade por métodos bem conhecidos, tais como molinetes, vertedouros, etc.

As características de misturamento são mais difíceis de serem obtidas pois, além de dependerem das características hidráulicas, dependem do conhecimento dos processos de difusão e dispersão, ambos de difícil avaliação.

A distribuição de uma massa de material poluente, movimentando-se por difusão e convecção, é descrita por uma equação baseada na lei de conservação da massa, que para o caso tridimensional, pode ser escrita em notação indicial como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = k_i \frac{\partial^2 c}{\partial x_i^2} \quad i = 1, 2, 3$$

- onde: c concentração do material
x_i posição ou direção
t tempo após a injeção
k_i coeficiente de difusão.

cuja solução permite obter valores de concentração, c.

Para obter soluções desta equação, em casos de interesse prático, empregam-se métodos numéricos discretos.

A solução da equação de difusão-convecção através de métodos numéricos geralmente apresenta problemas de oscilações numéricas e amortecimento quando o termo convectivo é preponderante, a nível de elemento.

No contexto do método dos elementos finitos, a razão principal destes problemas é que a matriz associada ao termo convectivo é não-simétrica, gerando sistemas de equações mal condicionados. Uma maneira de eliminá-los é usar malhas de elementos finitos bastante refinadas, de forma que a convecção não seja mais dominante a nível de elemento. Este processo, entretanto, pode conduzir a soluções desnecessariamente caras.

Uma forma mais eficiente de se eliminar oscilações e amortecimento é através do processo de "upwind" [8].

Reconhece-se que o método dos elementos finitos formulado via Bubnov-Galerkin, isto é, com funções teste iguais às funções base, fornece aproximações dos operadores diferenciais que são equivalentes a diferenças centrais. A idéia do upwind é aproximar as derivadas convectivas com um esquema que envolve uma combinação entre diferenças centrais e diferenças regressivas.

Demonstra-se que, em termos de diferenças finitas, isto equivale a se somar ao coeficiente de difusão real uma difusividade artificial [9]. O uso deste esquema é justificado pelo fato da difusão ser relativa à aproximação de diferenças centrais (ou de Bubnov-Galerkin) para o termo convectivo, e não à física do problema. A aproximação de diferenças centrais introduz uma difusão artificial negativa que é corrigida através do upwind.

Um esquema de upwind equivalente, do ponto de vista

matemático, foi desenvolvido para o método dos elementos finitos através de uma formulação de Petrov-Galerkin, onde as funções teste são construídas adicionando-se uma perturbação (equivalente a uma difusividade artificial) às funções clássicas do método de Bubnov-Galerkin [10]. A perturbação é calculada de forma a se obterem valores nodalmente exatos para problemas unidimensionais simples.

Generalizações do esquema upwind para casos multi-dimensionais [11], [12], apresentam, entretanto, problemas de uma sobredifusão no sentido ortogonal às linhas de corrente. Isto contraria a física do problema, já que o transporte convectivo segue as linhas de corrente do escoamento.

BROOKS e HUGHES [13], [14] corrigiram este problema com um esquema denominado SUPG ("Streamline Upwind Petrov-Galerkin") no qual a perturbação adicionada às funções base é descontínua entre elementos. O esquema proposto conduz a uma formulação consistente de resíduos ponderados [14] na qual a correção de upwind incide sobre todos os termos da equação, sendo igualmente válida para problemas transientes e/ou envolvendo fontes.

1.2 OBJETIVO DO TRABALHO

O presente trabalho discute o esquema SUPG aplicado a problemas estacionários e transientes, uni e bidimensionais. São utilizados elementos finitos isoparamétricos lineares e

bilineares na discretização espacial e diferenças finitas na discretização temporal. Resultados de testes numéricos são apresentados em detalhe.

I.3 APRESENTAÇÃO DO TRABALHO

No capítulo II mostra-se uma visão geral do problema e uma discussão dos métodos de diferenças finitas e elementos finitos, em sua implementação clássica, além das principais linhas de trabalho usadas para resolver os problemas numéricos da abordagem clássica.

No capítulo III apresenta-se a implementação numérica, utilizando o método dos elementos finitos, do esquema corretivo adotado. No capítulo IV mostram-se testes numéricos para problemas uni e bidimensionais. No capítulo V apontam-se as principais conclusões com base nos resultados dos testes numéricos.

CAPITULO II

O PROBLEMA DA DISPERSÃO

II.1 INTRODUÇÃO

A dispersão é um processo físico de mistura mecânica, causado pela superposição de vários fenômenos de natureza diferente: convecção, difusão, adsorção, reações químicas e fenômenos de decaimento radiativo. Estes três últimos mecanismos podem ser associados, normalmente, a fontes ou sorvedouros.

A convecção é caracterizada pela translação espacial de uma substância dentro de um meio deformável em movimento, enquanto que a difusão é caracterizada pelo movimento das partículas da substância no meio. O movimento das partículas no meio pode ser originado por duas causas: a) suas próprias características cinéticas e de concentração; b) as condições hidrodinâmicas do meio. O primeiro caso estuda-se como difusão molecular. No segundo caso, quando predominam as condições do meio, distinguem-se dois fenômenos: a dispersão como produto da diferença de velocidades entre filetes vizinhos paralelos, chamada difusão diferencial, e a dispersão como produto da turbulência, chamada difusão turbulenta.

II.2 DIFUSÃO MOLECULAR

A difusão molecular caracteriza-se como um fenômeno em nível microscópico em que uma partícula tende a equilibrar-se com o meio por sua própria energia cinética. Como resultado, o fluido ficará mais homogêneo. A forma na qual o equilíbrio é atingido pode ser proporcional ao gradiente de concentração ou não. A hipótese de proporcionalidade recebe o nome de Lei de Fick e é aceitável, em princípio, para a água. A Lei de Fick, para um fluido em repouso, unidimensional (1-D), pode ser formulada matematicamente como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (km \frac{\partial c}{\partial x}) \quad (II.1)$$

onde c	Concentração a ser difundida	[mg/l]
t	Tempo	[s]
x	Distância da injeção	[m]
km	Coefficiente de difusão molecular	[m ² /s ⁻¹]

Esta difusão molecular é bastante pequena em valor absoluto. A ordem do coeficiente de difusão molecular é próxima ao coeficiente de viscosidade cinemática: 10^{-6} [m²s⁻¹]. Um ponto de tinta na água imóvel levaria 24 horas para alcançar um diâmetro de 1 metro.

II.3 DIFUSÃO DIFERENCIAL

A difusão diferencial aparece como produto do

escoamento do fluido e caracteriza-se por um movimento de partículas entre linhas de fluxo paralelas, com velocidades diferentes. Este movimento de partículas, para equilibrar as concentrações, cresce com o gradiente de velocidades e apresenta-se junto à difusão turbulenta.

II.4 DIFUSÃO TURBULENTA

A difusão turbulenta aparece quando o movimento do fluido alcança a condição de turbulência, isto é, um número de Reynolds superior a 2000. Neste caso, o movimento das próprias linhas de corrente é o responsável pela homogeneização do fluido e representa o fenômeno mais importante nos casos de interesse prático.

Considere-se uma partícula P (figura 2.1) dentro de um fluido com fluxo turbulento e permanente. Assume-se que a velocidade média e a direção da corrente são constantes em nível da seção transversal. Localmente, no ponto P, a velocidade varia de maneira aleatória em módulo e sentido. Se fossem soltas várias pequenas partículas de qualquer substância que flutue indiferente no seio do fluido, estas separar-se-iam rapidamente umas abaixo. Este processo de difusão turbulenta, onde partículas individuais percorrem caminhos aleatórios diferentes dentro do fluxo, é mostrado na figura 2.1.

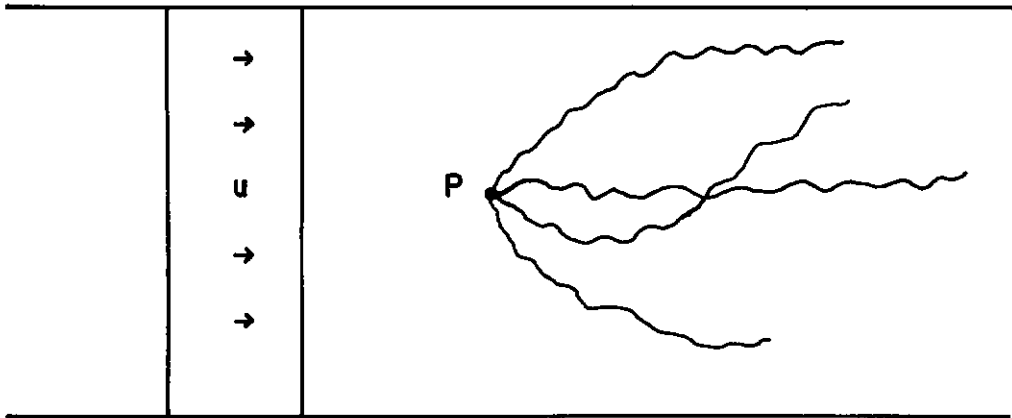


Figura 2.1 Difusão turbulenta em um fluxo permanente, com uma distribuição de velocidade u uniforme.

II.5 EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO

Se soltássemos, no fluido, uma pequena quantidade de partículas, poderíamos observar que a nuvem formada por elas cresce continuamente enquanto se movimenta águas abaixo. Este é o reflexo macroscópico do comportamento individual de um número grande de partículas. A descrição matemática desta difusão turbulenta pode ser feita por um modelo semi-empírico, que se expressa com uma equação diferencial, baseada na continuidade:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (uc)}{\partial x} = \frac{\partial (km \frac{\partial c}{\partial x})}{\partial x} \quad (II.2)$$

onde u Velocidade
km Coeficiente de difusão molecular.

É possível considerar um fluxo turbulento permanente como resultado da superposição de variações turbulentas mais um fluxo médio constante. Assim teremos uma velocidade média

constante \bar{u} e uma velocidade instantânea variável u' :

$$u = \bar{u} + u' \quad (11.3)$$

Podemos identificar o movimento de uma nuvem de partículas marcadas com alguma característica e flutuando em equilíbrio indiferente dentro de um fluido, basicamente, com quatro influências hidrodinâmicas:

- difusão molecular;
- difusão diferencial;
- difusão turbulenta;
- velocidade média do fluxo.

As três primeiras formam o transporte difusivo e a última, o transporte convectivo. A difusão molecular e a difusão diferencial, contudo, são pequenas se comparadas com a magnitude da difusão turbulenta.

A velocidade média é facilmente avaliada. A principal dificuldade é relacionar a difusão turbulenta, ligada à velocidade instantânea, com alguma propriedade média do fluxo.

Para correlacionar a difusão turbulenta a alguma propriedade média do fluxo, pode-se decompor a concentração como a soma de um valor médio \bar{c} e um valor variável c' :

$$c = \bar{c} + c' \quad (11.4)$$

Substituindo esta expressão e (II.3) na equação (II.2) e avaliando a concentração em um intervalo de tempo maior que o das flutuações das velocidades, porém curto, comparado com a escala de tempo da dispersão, obtemos:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}\bar{c})}{\partial x} = \frac{\partial (k\bar{m} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x})}{\partial x} - \bar{u}'\bar{c}' \quad (II.5)$$

onde $\bar{u}'\bar{c}'$ Transporte turbulento devido às flutuações da velocidade local.

A aproximação semi-empírica consiste em supor que a difusão turbulenta pode ser expressa de maneira análoga à difusão molecular:

$$\bar{u}'\bar{c}' = - k\bar{t} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (II.6)$$

onde $k\bar{t}$ Coeficiente de difusão turbulento

A difusão molecular, em fluxos turbulentos, é muito menor que a difusão turbulenta e, portanto, pode ser ignorada. Os menores valores práticos do coeficiente de difusão turbulenta são da ordem de $10^{-4} [m^2 s^{-1}]$; por outro lado, os coeficientes de difusão molecular são da ordem de $10^{-6} [m^2 s^{-1}]$.

A distribuição da difusão turbulenta no fluxo é variável no espaço, dependendo da orientação e da distância em relação as paredes. O fluxo turbulento terá, portanto, em geral condições difusivas anisotrópicas.

Reescrevendo a concentração média simplesmente como c e generalizando para o caso tridimensional (3-D), podemos

expressar a equação de convecção-difusão para uma substância conservativa que segue a Lei de Fick e que flutua indiferente no seio de um fluido, com um campo de velocidades constante como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(k_{xt}\frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(k_{yt}\frac{\partial c}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(k_{zt}\frac{\partial c}{\partial z}) \quad (II.7)$$

onde u,v,w Componentes do campo de velocidade
k_{xt},k_{yt},k_{zt} Coeficientes de difusão turbulenta

II.6 APLICAÇÕES FLUVIAIS

Em rios, a profundidade é usualmente pequena, se comparada com a largura e, portanto, a distribuição da concentração chega a ser uniforme verticalmente muito antes que na direção horizontal. Sendo assim, a equação diferencial tridimensional pode ser reduzida a duas dimensões (2-D). Esta equação pode ser considerada como representante de um valor médio da seção transversal ao longo do eixo vertical.

Precisa-se salientar que a mistura, em um rio, especialmente a transversal, é influenciada por correntes helicoidais que não podem ser representadas sem levar em conta a componente vertical da velocidade.

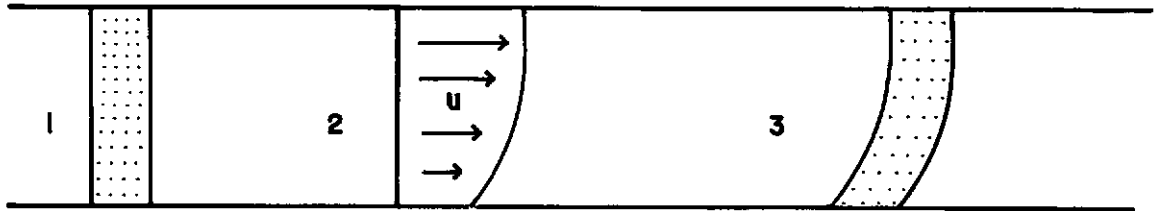
A equação de convecção-difusão, bidimensional (2-D), é obtida integrando a equação geral sobre a profundidade, usando a hipótese de que o transporte devido ao gradiente de velocidades e à difusão turbulenta podem ser englobados em um processo único. A equação é:

$$h \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (h u c)}{\partial x} + \frac{\partial (h w c)}{\partial z} = \frac{\partial (h k_x \frac{\partial c}{\partial x})}{\partial x} + \frac{\partial (h k_z \frac{\partial c}{\partial z})}{\partial z} \quad (11.8)$$

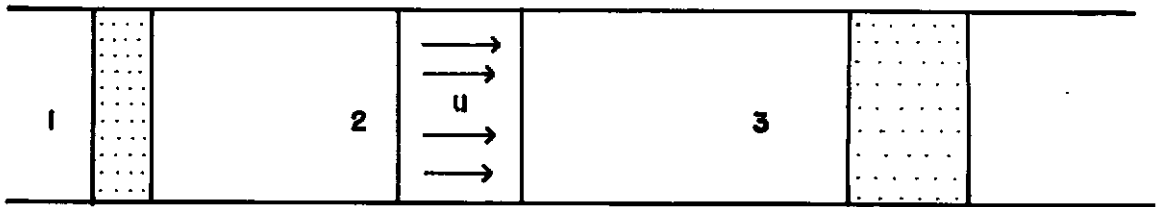
onde h Profundidade do rio
k_x, k_z Coeficientes de difusão

Os novos coeficientes de difusão englobam a difusão turbulenta e a difusão diferencial devida ao gradiente de velocidades.

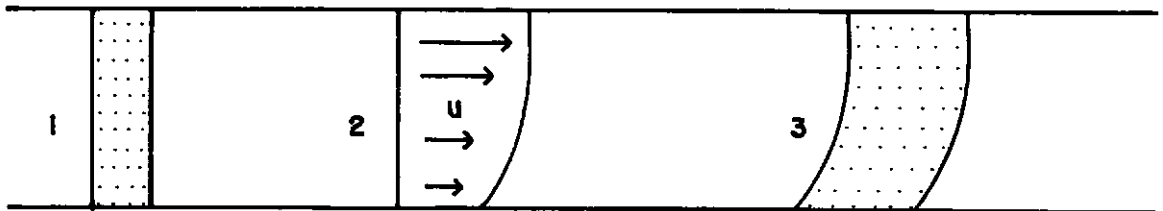
Se consideramos um canal reto, com uma pequena nuvem de um traçador contida entre dois planos normais ao eixo do canal e com uma velocidade apenas função da profundidade, veremos que a nuvem acompanhará o perfil de velocidade e simultaneamente terá difusão turbulenta. Esta difusão resulta muito maior que a difusão turbulenta pura. A figura 2.2 ilustra a superposição dos efeitos do gradiente de velocidades e da difusão turbulenta.



(a)



(b)



(c)

Figura 2.2 Convecção-difusão:

1. Distribuição inicial do traçador
2. Perfil de velocidade
3. Distribuição do traçador depois de um tempo.

- (a) Convecção pura.
- (b) Difusão turbulenta pura
- (c) Superposição da convecção e da difusão turbulenta.

Em geral k_x e k_z são muito maiores que os respectivos coeficientes de difusão turbulenta k_{xt} e k_{zt} . ELDER [15] realizou numerosas medições, chegando a estabelecer expressões empíricas para os valores de k_x e k_z , em um rio largo e com

fluxo permanente:

$$k_x = 5.93 u_* h \quad (II.9)$$

$$k_z = 0.23 u_* h \quad (II.10)$$

onde h Profundidade média

u_* Velocidade de atrito

$$u_* = (\tau_o / \rho_o)^{1/2}$$

τ_o Tensão de cisalhamento na parede

ρ_o Massa específica do fluido

Existe, na atualidade, um grande número de expressões deste tipo, deduzidas para diferentes condições. ROSSO [7] apresenta um excelente resumo.

O coeficiente k_x , de difusão longitudinal, é muito maior, porque leva em consideração a difusão devida ao gradiente de velocidades. Esta diferença permite uma nova simplificação: o modelo unidimensional (1-D).

II.7 EQUAÇÃO UNIDIMENSIONAL

TAYLOR [16], [17], [18] foi quem primeiro modelou o caso unidimensional, aplicado a tubos com fluxo a seção plena. A dispersão de um traçador injetado uniformemente em toda uma seção transversal tem um comportamento similar ao processo de difusão de um líquido que segue a Lei de Fick. A equação da convecção-difusão toma a forma:

$$\frac{\partial(A c)}{\partial t} + \frac{\partial(A u c)}{\partial x} = \frac{\partial(A k \frac{\partial c}{\partial x})}{\partial x} \quad (\text{II.11})$$

onde c Concentração média na seção transversal
A Área da seção transversal
u Velocidade média na seção transversal
k Coeficiente de dispersão longitudinal

FISCHER [19] deduziu uma expressão empírica para o valor do coeficiente de dispersão longitudinal, baseado em numerosas observações:

$$k = 250 u_* h \quad (\text{II.12})$$

II.8 SOLUÇÃO ANALÍTICA

Conhecidos A, u, e k, supostos constantes, a equação (II.11) tem solução analítica dada por:

$$c(x,t) = \frac{C_o V_o \exp[-(x - u t)^2 / (4 k t)]}{2 A (\pi k t)^{1/2}} \quad (\text{II.13})$$

onde C_o Concentração do traçador injetado
 V_o Volume do traçador injetado

Esta solução, entretanto, é de pouco valor prático para aplicações na engenharia, devido a três razões:

1. u, k e A não são constantes sobre trechos extensos.
2. O modelo unidimensional (1-D) só pode ser usado depois que a mistura alcance sua completa homogeneidade

transversal. Esta distância mínima da fonte de injeção, chamada de Distância de Boa Mistura, foi estudada por FISCHER [20], que introduziu a seguinte expressão analítica:

$$L = 1.8 h^2 u / (R_0 u_*) \quad (II.14)$$

onde L Distância de Boa Mistura

h Profundidade média

u Velocidade média

R₀ Raio Hidráulico

u_{*} Velocidade de Atrito

3. Dados experimentais tomados em rios naturais, apresentados por NORDIN e SABOL [21], mostram que a dispersão unidimensional não suporta bem a hipótese da Lei de Fick, e a solução analítica representa o fenômeno de forma inexata.

Para evitar o primeiro problema, podem ser usados métodos numéricos que, sendo unidimensionais, podem dividir o rio em partes, por trechos homogêneos mas com diferentes características hidrodinâmicas.

Para evitar o segundo problema, estudar regiões mais próximas à injeção que às da Distância de Boa Mistura, é possível usar modelos bidimensionais.

Por último, os métodos numéricos não podem contornar o problema da hipótese da Lei de Fick, porém mostram-se bastante pouco sensíveis ao valor exato do coeficiente de difusão longitudinal.

II.9 SOLUÇÕES NUMERICAS

Quando o transporte difusivo é dominante, a formulação das diferenças finitas e a dos elementos finitos convencionais (Bubnov-Galerkin), conduzem a bons resultados. Entretanto quando o termo convectivo prepondera no processo de dispersão, aparecem problemas numéricos de oscilação nó a nó e sobre-amortecimento. Estes problemas são comuns em outras equações de transporte envolvendo termos convectivos como, por exemplo, as equações de Navier-Stokes.

A razão principal destes problemas está no fato de que ao passar de uma equação predominantemente difusiva a uma onde predomina a convecção, mudam as características matemáticas da equação diferencial parcial que descreve o fenômeno.

Os operadores de difusão são simétricos e auto-adjuntos. A equação diferencial que governa o transporte difusivo puro é parabólica, no tempo. Sabe-se que os métodos de diferenças finitas e de elementos finitos, usando funções de interpolação de Bubnov-Galerkin, possuem propriedades de aproximação ótima quando são aplicados a operadores espacialmente simétricos.

A situação é diferente para o transporte convectivo puro. Os operadores são não-simétricos e não auto-adjuntos, base do sucesso no caso difusivo. Aqui, a equação diferencial parcial é hiperbólica.

Em princípio, é fácil formular uma solução numérica para a equação de convecção unidimensional pura. Porém os métodos de diferenças finitas e elementos finitos, com funções de interpolação simétricas, produzem soluções perturbadas por uma difusão artificial ou numérica, tornando-as, por vezes, inúteis.

II.10 ERRO NA EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO PURA

Para avaliar a magnitude do erro introduzido pelos métodos numéricos e que aparece como difusão artificial, pode-se usar o método das diferenças finitas.

Na convecção pura, em um rio com seção e velocidade constantes, a equação diferencial (II.11) simplifica-se, ficando:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (II.15)$$

A figura 2.3 representa a malha espaço-temporal, na qual o esquema de diferenças finitas é aplicado, para resolver a equação anterior :

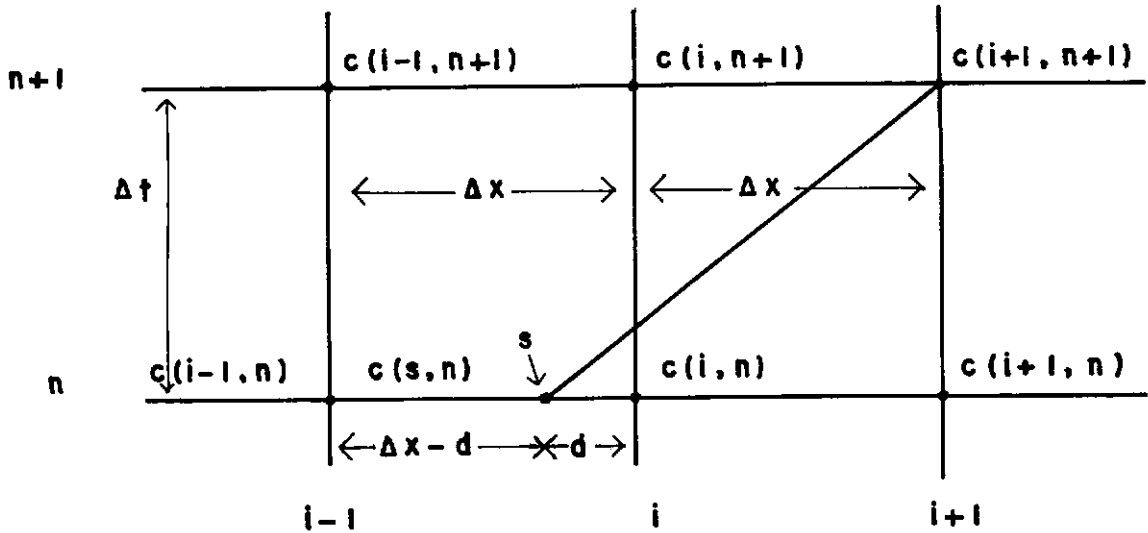


Figura 2.3 Esquema de diferenças finitas, para a equação de convecção.

Como na convecção pura conserva-se a concentração de cada partícula, a concentração no ponto $(i+1, n+1)$ será a mesma de um ponto (s, n) . Se a expressarmos através de uma interpolação linear da concentração dos pontos vizinhos $(i-1, n)$ e (i, n) , teremos:

$$c(i+1, n+1) = \frac{(\Delta x - d) c(i, n) + d c(i-1, n)}{\Delta x} \quad (11.16)$$

- onde Δx Espaçamento
 Δt Intervalo de tempo
 d Distância ao nó (i, n)

Expandindo cada termo da concentração em série de Taylor em torno do ponto $(i+1, n)$, e mantendo até os termos de segunda ordem, obtém-se:

$$c(i+1,n+1) = c(i+1,n) + \frac{\partial c}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2} \quad (II.17)$$

$$c(i,n) = c(i+1,n) - \frac{\partial c}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \frac{\Delta x^2}{2} \quad (II.18)$$

$$c(i-1,n) = c(i+1,n) - \frac{\partial c}{\partial x} 2 \Delta x + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} 2 \Delta x^2 \quad (II.19)$$

Para eliminar a segunda derivada parcial com respeito ao tempo da equação (II.17), pode-se derivar (II.15), com respeito ao tempo, e obter:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (II.20)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(-u \frac{\partial c}{\partial t} \right) \quad (II.21)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (II.22)$$

Substituindo (II.17) a (II.19) em (II.16) temos:

$$\begin{aligned} & c(i+1,n) + \frac{\partial c}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2} = \\ & (\Delta x-d) [c(i+1,n) - \frac{\partial c}{\partial x} \Delta x + (\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}) \frac{\Delta x^2}{2}] / \Delta x \\ & + d [c(i+1,n) - \frac{\partial c}{\partial x} 2 \Delta x + (\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}) 2 \Delta x^2] / \Delta x \quad (II.23) \end{aligned}$$

Utilizando (II.22) e somando termos, temos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \Delta t + u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \frac{\Delta t^2}{2} = - [d + \Delta x] \frac{\partial c}{\partial x} + [(\Delta x - d) \Delta x / 2 + 2 d \Delta x] \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (II.24)$$

e usando a identidade $\Delta x + d = u \Delta t$, chegamos a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{d (\Delta x - d)}{2 \Delta t} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (II.25)$$

Observa-se que aparece uma difusão artificial ou numérica de ordem igual a:

$$K_a = d (\Delta x - d) / (2 \Delta t) \quad (II.26)$$

onde K_a Coeficiente de difusão artificial ou numérico

Seguindo a CUNGE [22], pode-se expressar em termos do número de Courant:

$$K_a = \Delta x^2 (1 - Cr) (Cr - 2) / (2 \Delta t) \quad (II.27)$$

onde Cr Número de Courant

$$Cr = u \Delta t / \Delta x$$

II.11 ERRO NA EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO

Para introduzir-se a idéia de "upwind", considera-se a equação de convecção-difusão unidimensional (II.11), em regime

permanente e com seção constante:

$$u \frac{dc}{dx} = k \frac{d^2c}{dx^2} \quad 0 < x < L \quad (II.28)$$

onde L Comprimento do trecho

sujeita às condições de contorno:

$$c(0) = 0 \quad (II.29)$$

$$c(L) = 1 \quad (II.30)$$

cuja solução exata é dada por

$$c(x) = \frac{1 - \exp[-Pe \ x/L]}{1 - \exp[-Pe]} \quad (II.31)$$

onde Pe Número de Peclet global

$$Pe = u L / k$$

Dividindo-se a região em elementos finitos lineares iguais de comprimento h e aplicando-se o método de Bubnov-Galerkin, obtém-se uma solução aproximada equivalente à obtida com diferenças finitas usando diferenças centrais. Chamando-se de x_i um ponto qualquer no interior da região, isto corresponde a dizer que os operadores diferenciais da equação (II.28) são aproximados da seguinte forma:

$$\left. \frac{dc}{dx} \right|_{x_i} = (c_{i+1} - c_{i-1}) / (2h) \quad (11.32)$$

$$\left. \frac{d^2c}{dx^2} \right|_{x_i} = (c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}) / h^2 \quad (11.33)$$

onde c_i Valor da função $c(x_i)$

Soluções obtidas desta maneira apresentam oscilações para valores maiores que 2 do número de Peclet local, como mostrado na figura 2.4, extraída de BROOKS e HUGHES [13]; as soluções foram obtidas com o uso de 10 elementos finitos lineares.

A idéia básica do "upwind" é aproximar as derivadas convectivas usando-se um esquema de diferenças regressivas, ou seja:

$$\frac{dc}{dx} = (c_i - c_{i-1}) / h \quad (11.34)$$

admitindo-se que o escoamento seja na direção positiva do eixo x . O uso deste esquema de "upwind" total evita as oscilações numéricas, porém torna a solução sobre-difusiva, como pode ser visto na figura 2.5, obtida por BROOKS e HUGHES [13] com a mesma discretização.

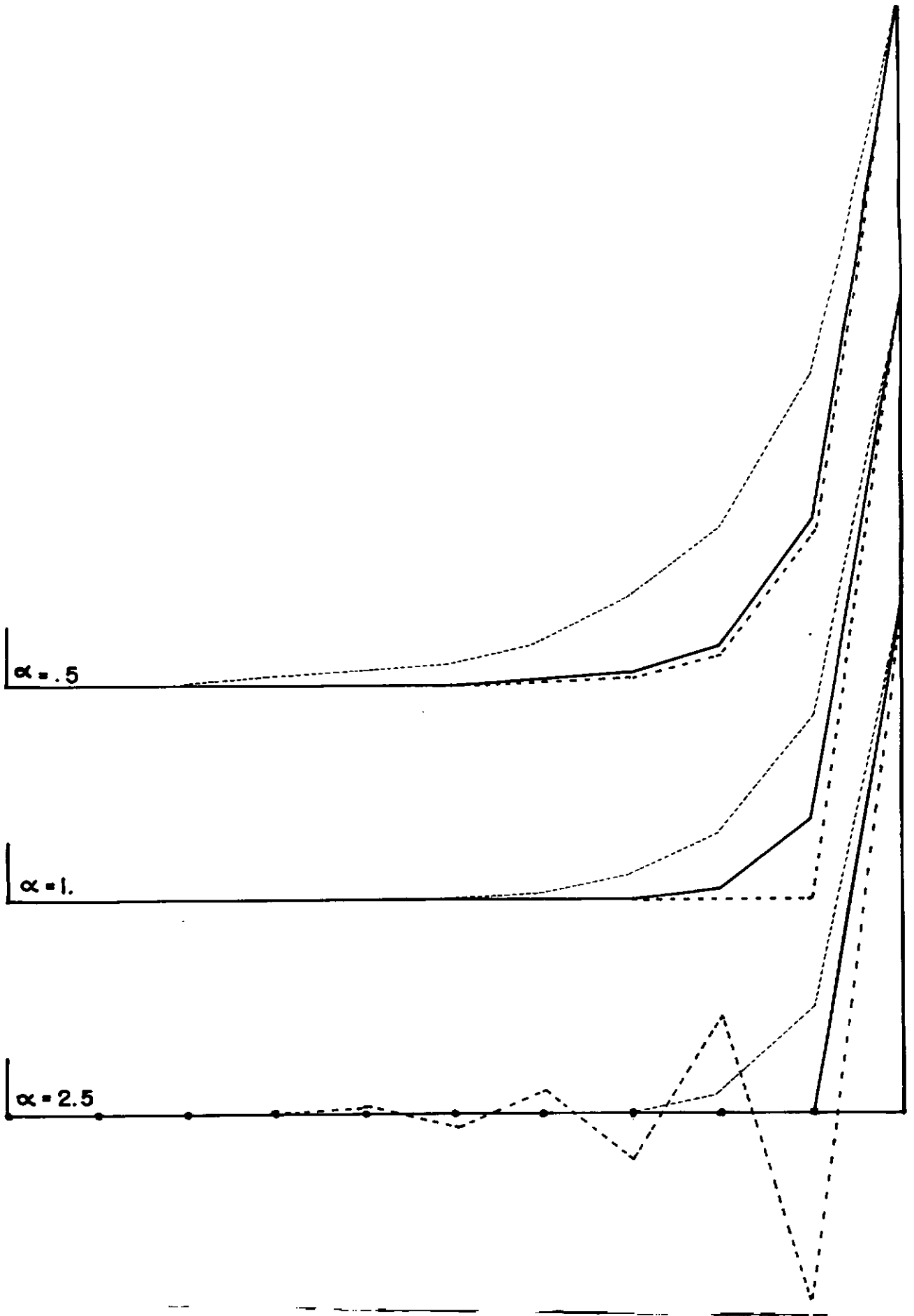


Figura 2.4 Soluções usando diferencias finitas.

- _____ interpolação linear da solução exata
- - - - - diferencas centrais
- diferencas regressivas

II.12 ESQUEMAS CORRETIVOS BASEADOS NO "UPWIND"

Existem, basicamente, três maneiras distintas de se introduzir o "upwind" no contexto de elementos finitos:

- i) através da adição de uma difusão artificial, o chamado método de dissipação de balanceamento anisotrópico. Consiste em adicionar, ao coeficiente de difusão, um outro de difusão artificial, que venha a compensar o efeito numérico introduzido pela diferença central. Existem vários trabalhos nesta linha: KELLY et al. [8], MOREIRA e WROBEL [6], com resultados bons. Como a modificação é feita apenas sobre o termo difusivo da equação diferencial, permanece algum efeito sobredifusivo quando o problema é transiente e/ou apresenta fontes.

- ii) através de integração numérica modificada para o termo convectivo. Existem trabalhos nesta linha, entre os que destacam-se: HUGHES [31], PAYRE et al. [23]. Consiste em modificar a integração numérica, deslocando os pontos de integração no sentido contrario ao do fluxo.

- iii) através de funções de ponderação assimétricas, o chamado método de Petrov-Galerkin, CHRISTIE et al. [10], HEINRICH et al. [11] e [12], BROOKS e HUGHES [13] e [14], ATKINSON e HUGHES [24], MORTON e BARRET [25]. Consiste em utilizar funções de ponderação que dêem mais peso ao elemento a

montante de cada nó.

Estes três métodos são equivalentes no caso unidimensional permanente; para problemas multidimensionais ou transientes, entretanto, conduzem a resultados diferentes.

O presente trabalho estuda o último dos esquemas acima apresentados, acrescentando uma correção no termo temporal para corrigir uma sobredifusão, remanescente, em casos fortemente convectivos.

A seguir descrevem-se brevemente os primeiros dois métodos, para tratar o terceiro, em detalhe, no capítulo seguinte.

II.12.1 METODO DE BALANCEAMENTO ANISOTROPICO

Quando se usam diferenças finitas, para resolver equações diferenciais de segunda ordem com primeira derivada significativa, por vezes resulta vantajoso aproximar a derivada de primeira ordem por uma diferença não centrada, logo não simétrica. Um exemplo típico de diferença não centrada é a diferença regressiva. Este procedimento tem a desvantagem de perder precisão, já que diferenças do tipo regressivo possuem precisão de primeiro ordem, enquanto que as diferenças centrais tem precisão de segunda ordem.

KELLY et al. [8] mostraram que uma combinação de

diferença central e diferença regressiva pode ser obtida em elementos finitos, somando uma difusão artificial ao coeficiente de difusão da equação (II.28)

$$(k + k') \frac{d^2c}{dx^2} - u \frac{dc}{dx} = 0 \quad (II.35)$$

onde k' Coeficiente de Difusão Artificial

KELLY et al. [8] mostram que a aplicação do método de Bubnov-Galerkin à equação (II.35), com elementos lineares de comprimento h , fornece a solução exata da equação diferencial nos pontos nodais tomando para o coeficiente de difusão artificial k' o valor:

$$k' = \alpha u h / 2 \quad (II.36)$$

$$\alpha = \coth(\gamma / 2) - 2 / \gamma \quad (II.37)$$

onde α Parâmetro de "upwind"

γ Número de Peclet local

$$\gamma = u h / k$$

h Espaçamento da malha

O coeficiente de difusão artificial é interpretado como um fator que, somado à aproximação de diferença central do termo convectivo, fornece como resultado a aproximação de "upwind".

Tomando-se $\alpha = 1$ na equação (II.36) que define k' , equivalente ao "upwind" total, pode-se escrever, para o termo convectivo:

$$\frac{-u}{2h} (c_{i+1} - c_{i-1}) + \frac{uh}{2} \frac{1}{h^2} (c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}) = \frac{u}{h} (c_i - c_{i-1}) \quad (\text{II.38})$$

que é igual à expressão obtida na equação (II.34).

Nota-se, assim, que a difusão artificial é relativa à aproximação de diferenças centrais do método de Bubnov-Galerkin, e não à física do problema. O esquema de Bubnov-Galerkin introduz uma difusão artificial negativa, como pode ver-se também na equação (II.27), que se pode corrigir através do "upwind", sendo que o parâmetro " α " controla a quantidade de correção. O valor ótimo de " α " é dado pela equação (II.37).

II.12.2 MÉTODO DE INTEGRAÇÃO NUMÉRICA MODIFICADA

O método de integração modificada resulta de uma extensão direta das discretizações não simétricas usadas em diferenças finitas. Em elementos finitos, a discretização não simétrica traduz-se em tomar pontos de integração numérica não simétricos. Assim, os pontos de integração deslocam-se em sentido contrário ao do fluxo, imitando um esquema de diferença regressiva.

Esta abordagem é usada em problemas nos quais o efeito sobredifusivo não seja crítico, como por exemplo, alguns problemas de fluxos com componentes múltiplos. Por outro lado, para estudar o efeito de propagação de poluição, a sobredifusão é indesejável.

CAPITULO III

METODO DE STREAMLINE UPWIND PETROV-GALERKIN

III.1 DEFINIÇÕES BASICAS

Toma-se como domínio uma região limitada Ω em R^{nd} , onde nd é a dimensão do espaço. Supõe-se, também, que Ω é limitada por um contorno suave por trechos. Chamaremos um ponto do domínio Ω , ou seu contorno Γ , por $x = \{ x_i \}, i = 1, 2, \dots, nd$ e $n = \{ n_i \}$ ao vetor normal externo a Γ . Particionaremos o contorno Γ em dois subconjuntos Γ_g e Γ_h tal que:

$$\Gamma_g \cup \Gamma_h = \Gamma \quad (III.1)$$

$$\Gamma_g \cap \Gamma_h = \phi \quad (III.2)$$

onde ϕ é o conjunto vazio.

A equação de convecção-difusão, para fluidos incompressíveis em condições não-permanentes, pode ser representada na forma:

$$c_{,t} + \sigma_{i,i} = f \quad (III.3)$$

onde:

c Concentração

σ_i Componente do fluxo paralela ao eixo i

$$\sigma_i = \sigma_i^a + \sigma_i^d$$

σ_i^a Componente do fluxo convectivo

$$\sigma_i^a = u_i c$$

u_i Componente da velocidade

σ_i^d Componente do fluxo difusivo

$$\sigma_i^d = -k_{ij} \partial c / \partial x_j$$

k_{ij} Tensor de difusividade

f Termo que representa uma fonte

É adotada a convenção de soma para índices repetidos e vírgula, para derivação parcial.

O problema consiste em achar a função $c(x,t)$ que satisfaça a equação diferencial parcial em Ω e as condições de contorno:

$$c(x,t) = g(x,t) \quad \text{em } \Gamma_g \quad (\text{III.4})$$

$$-\sigma_i^d n_i = h(x,t) \quad \text{em } \Gamma_h \quad (\text{III.5})$$

assim como a condição inicial:

$$c(x,0) = c_0(x) \quad (\text{III.6})$$

III.2 FORMULAÇÃO DE PETROV-GALERKIN

A formulação em elementos finitos de Bubnov-Galerkin considera como funções de peso nos elementos as próprias funções de interpolação simétricas. Na formulação de Petrov-Galerkin, as funções de peso são não-simétricas e, por isto, diferentes das funções de interpolação. Um exemplo de funções de Bubnov-Galerkin e Petrov-Galerkin é mostrado na figura 3.1.

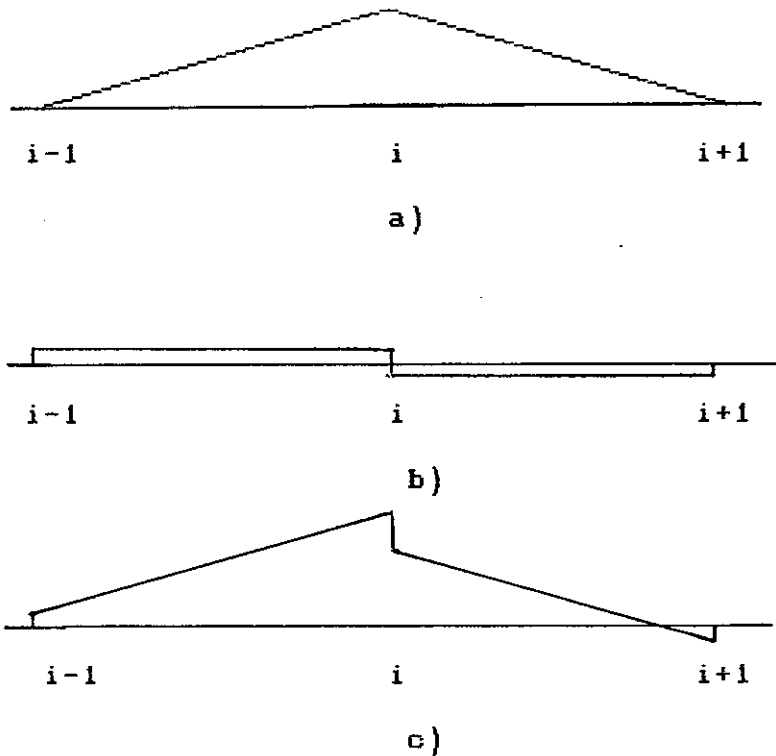


Figura 3.1 a) Função de Bubnov-Galerkin, simétrica.
b) Função de peso assimétrica
c) Função de Petrov-Galerkin

A idéia, ao aplicar funções não simétricas como funções de peso, é aproveitar a informação a montante do fluxo, da forma usada nas diferenças regressivas no método das

diferenças finitas.

III.3 IMPLEMENTAÇÃO DO METODO DE STREAMLINE UPWIND/PETROV-GALERKIN

A idéia básica do método Streamline Upwind Petrov-Galerkin, SUPG, consiste em dar mais peso a função ao começo das linhas de corrente, dentro de cada elemento. Isto é feito a partir do uso de funções de ponderação diferentes das funções de interpolação. No caso de funções de ponderação lineares, estas serão descontinuas entre os elementos, na forma:

$$\tilde{w} = w + p \quad (\text{III.7})$$

onde \tilde{w} Função de ponderação, não-simétrica

w Parte simétrica da função de ponderação, continua entre elementos

p Parte não-simétrica da função de ponderação, descontinua entre elementos

Escolhem-se funções w e p suaves no interior do elemento.

Supõem-se que as funções de interpolação satisfazem as condições de contorno essenciais dadas na equação (III.4).

O esquema de ponderação de Bubnov-Galerkin, aplicado as equações definidas por (III.3) a (III.5), é:

$$\int_{\Omega} w (c_{,t} + \sigma_{i,i} - f) d\Omega + \int_{\Gamma_h} w (\sigma_i^d n_i + h) d\Gamma = 0 \quad (III.8)$$

BROOKS e HUGHES [13] mostraram que, se as funções de ponderação são de ordem C^0 , a equação (III.8) pode ser discretizada a nível do elemento da forma:

$$\begin{aligned} \sum_e^{Ne} \int_{\Omega_e} w (c_{,t} + \sigma_{i,i} - f) d\Omega = & - \int_{\Gamma_h} w (\sigma_i^d n_i + h) d\Gamma \\ & - \int_{\Gamma_{int}} w (\sigma_i^d n_i) d\Gamma \end{aligned} \quad (III.9)$$

onde \sum_e Somatório sobre os elementos

Ω_e Domínio dos elementos

Ne Número de elementos

Γ_{int} União dos contornos dos elementos sem incluir o contorno físico

$\Gamma_{int} = \cup^e \Gamma_e - \Gamma$

Γ_e Contorno dos elementos

Aplicando-se a função de ponderação (III.7) do método de Petrov-Galerkin, e tendo-se em conta que a função p é descontínua entre elementos, a equação de resíduos ponderados a ser usada tem a forma:

$$\begin{aligned} \frac{Ne}{\Sigma_e} \int_{\Omega_e} w (c_{,t} + \sigma_{i,i} - f) d\Omega + \frac{Ne}{\Sigma_e} \int_{\Omega_e} p (c_{,t} + \sigma_{i,i} - f) d\Omega = \\ - \int_{\Gamma_h} w (\sigma_i^d n_i + h) d\Gamma - \int_{\Gamma_{int}} w (\sigma_i^d n_i) d\Gamma \quad (III.10) \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{Ne}{\Sigma_e} \int_{\Omega_e} \tilde{w} (c_{,t} + \sigma_{i,i} - f) d\Omega = \\ - \int_{\Gamma_h} w (\sigma_i^d n_i + h) d\Gamma - \frac{Ne}{\Sigma_e} \int_{\Gamma_{int}} w (\sigma_i^d n_i) d\Gamma \quad (III.11) \end{aligned}$$

Cada lado do contorno interno, por ser comum a dois elementos, será integrado duas vezes. Escolhendo para cada segmento, comum a dois elementos, uma orientação arbitrária da normal, podemos somar as contribuições ao longo desse contorno comum:

$$\sigma_i^+ n_i^+ + \sigma_i^- n_i^- = (\sigma_i^+ - \sigma_i^-) n_i^+ \quad (III.12)$$

$$\text{onde } \sigma_i^+ = \lim_{x \rightarrow x_i^+} \sigma_i$$

$$\sigma_i^- = \lim_{x \rightarrow x_i^-} \sigma_i$$

Definindo a diferença como:

$$[\sigma_n] = (\sigma_i^+ - \sigma_i^-) n_i^+ \quad (III.13)$$

pode-se expressar a integral sobre o contorno interior de (III.11) como:

$$\sum_e^{Ne} \int_{\Gamma_{int}} w \sigma_i^d n_i d\Gamma = \int_{\Gamma_{int}} w [\sigma_n^d] d\Gamma \quad (III.14)$$

Reordenando a equação (III.11) e usando (III.14), pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \sum_e^{Ne} \int_{\Omega_e} \tilde{w} (c_{,t} + \sigma_{i,i} - f) d\Omega + \int_{\Gamma_h} w (\sigma_i^d n_i + h) d\Gamma \\ + \int_{\Gamma_{int}} w [\sigma_n^d] d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (III.15)$$

Como o fluxo difusivo é contínuo entre os elementos, temos que no contorno interno a diferença se anula:

$$[\sigma_n^d] = 0 \quad (III.16)$$

Na equação (III.10), pode-se observar que a parte descontínua da função de ponderação "p" aparece somente no interior dos elementos e não afeta a condição de compatibilidade entre elementos.

Suponha-se que se mantenham as seguintes condições:

- i) o fluxo é isotrópico;
- ii) as funções de interpolação são isoparamétricas e

bilineares;

iii) os elementos são retangulares.

Estas condições implicam que, no interior de cada elemento, a variação do fluxo difusivo será nula:

$$[\sigma_n^d] = 0 \quad \implies \quad \sigma_{i,i}^a = \sigma_{i,i} \quad (\text{III.17})$$

Assim, a parte descontínua da função de ponderação não afeta ao termo difusivo.

Por outro lado, se os elementos não forem retangulares $\sigma_{i,i}^d$ poderá ser diferente de zero. No entanto, para simplificar a análise pode-se admitir, como boa aproximação, que para casos práticos e formas razoavelmente regulares, a contribuição de $p \sigma_{i,i}^d$ pode ser desprezada.

III.4 CALCULO DA FUNÇÃO DE PONDERAÇÃO

Nesta seção avalia-se a função de ponderação do método de Streamline Upwind/Petrov-Galerkin, SUPG. A seguir, compara-se com a correção do balanceamento anisotrópico começando pelo caso unidimensional e, posteriormente, estendendo-se para o caso bidimensional. Não será considerado na implementação o termo de fonte f na equação (III.3) por simplicidade, uma vez que ele não aparece nos problemas considerados.

O objetivo básico é achar uma expressão para a função de ponderação assimétrica: p . A abordagem usada consiste em se usar uma função linear do tipo ímpar, que se oriente conforme o sentido do fluxo. Uma função com estas características é mostrada na figura 3.2.

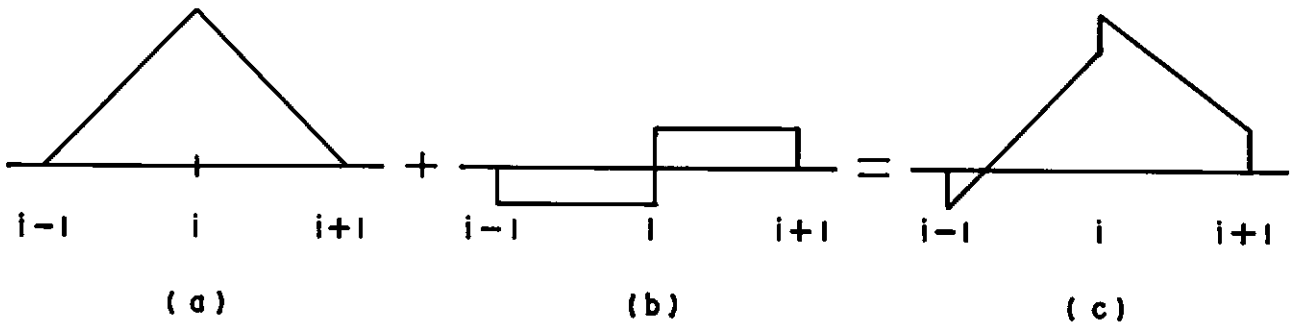
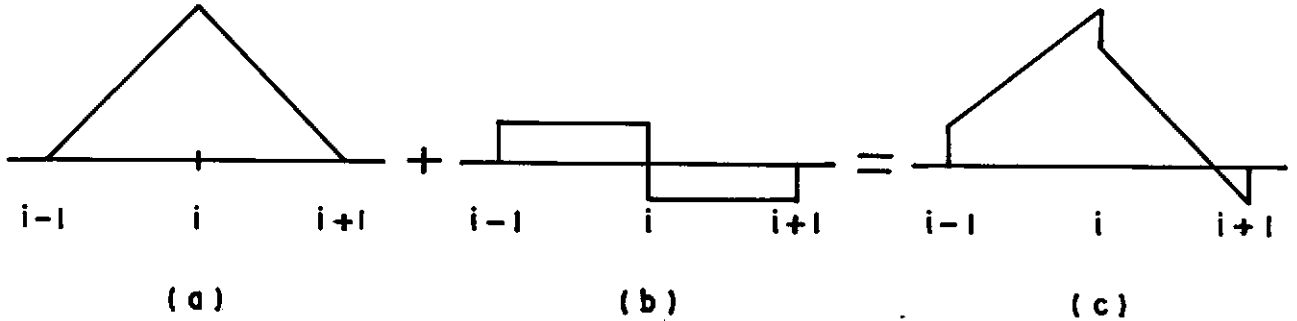


Figura 3.2 a) Função de interpolação

b) Função de ponderação parte ímpar

c) Função de ponderação

A derivada da função de interpolação multiplicada pelo sinal da velocidade do fluxo adapta-se perfeitamente às condições requeridas para a parte anti-simétrica da função de ponderação. Para controlar o peso relativo desta parte anti-simétrica da função de ponderação BROOKS e HUGHES [13] sugeriram que se tome como fator o próprio coeficiente de

difusividade artificial, já conhecido dos esquemas de balanceamento anisotrópico: equação (II.36). Sendo assim, pode-se definir p como:

$$p = \bar{k} u_i w_{,i} / \|u\|^2 \quad (\text{III.18})$$

onde: $\bar{k} = \alpha u h / b$

$b = 2$ caso estacionario

$b = \sqrt{15}$ caso transiente

$\alpha = \coth(v / 2) - 2 / v$

$v = u h / k$

h Espaçamento entre nós

Para a discretização espacial, com o método dos elementos finitos, usa-se a função de ponderação assimétrica assim proposta. Para a discretização temporal, no caso transiente, utiliza-se um esquema passo-a-passo com aproximação de diferenças finitas.

III.5 PROBLEMA UNIDIMENSIONAL (1-D)

A equação unidimensional (II.11), apresentada no capítulo anterior, considerando-se que não existem fontes na região de interesse a ser resolvida, é:

$$c_{,t} + u c_{,x} = k c_{,xx} \quad 0 < x < 1 \quad (\text{III.19})$$

sujeita às condições de contorno e iniciais:

$$c(0,t) = g \quad (III.20)$$

$$-k c_{,x}(1,t) = h \quad (III.21)$$

$$c(x,0) = c_0 \quad (III.22)$$

Aplicando a função de ponderação assimétrica ao domínio da equação diferencial, e a parte simétrica da mesma ao contorno, tem-se:

$$\int_0^1 (c_{,t} + u c_{,x} - k c_{,xx}) (w + p) dx + [(k c_{,x} + h) w]_0^1 = 0 \quad (III.23)$$

Integrando por partes o termo difusivo, continuo, da primeira integral de (III.23)

$$\int_0^1 k c_{,xx} w dx = [k c_{,x} w]_0^1 - \int_0^1 k c_{,x} w_{,x} dx \quad (III.24)$$

Substituindo na equação (III.23) tem-se:

$$\int_0^1 (c_{,t} + u c_{,x}) w dx + \int_0^1 k c_{,x} w_{,x} dx + \sum_e^{N_e} \int_{l_{i-1}}^{l_i} (c_{,t} + u c_{,x} - k c_{,xx}) p dx = [-h w]_0^1 \quad (III.25)$$

Compare-se esta expressão com a expressão equivalente resultante da aplicação da soma de uma difusão artificial ao coeficiente respectivo.

Aplicando a idéia da difusão artificial novamente na equação (III.19) e suas condições de contorno tem-se:

$$\int_0^1 (c_{,t} + u c_{,x} - (k+\bar{k}) c_{,xx}) w dx + [(k+\bar{k}) c_{,x} + h] w \Big|_0^1 = 0 \quad (III.26)$$

Integrando por partes o termo difusivo, obtém-se:

$$\int_0^1 (k+\bar{k}) c_{,xx} w dx = [(k+\bar{k}) c_{,x} w] \Big|_0^1 - \int_0^1 (k+\bar{k}) c_{,x} w_{,x} dx \quad (III.27)$$

Substituindo na equação (III.26) tem-se:

$$\int_0^1 (c_{,t} + u c_{,x}) w dx + \int_0^1 (k+\bar{k}) c_{,x} w_{,x} dx = [-h w] \Big|_0^1 \quad (III.28)$$

Comparando a equação (III.28) com (III.25), pode-se observar:

1) do termo convectivo se tem:

$$\int \bar{k} c_{,x} w_{,x} dx = \int u c_{,x} p dx \quad (III.29)$$

de onde se pode observar que p coincide com a correção do balanceamento anisotrópico que, para o caso unidimensional, adota a forma:

$$p = \bar{k} w_{,x} / u \quad (\text{III.30})$$

2) tomando funções de interpolação lineares, não é necessária a correção do termo difusivo, já que: $p c_{,xx} = 0$

3) na equação obtida com o método Streamline Upwind Petrov-Galerkin aparece uma correção no termo temporal, ausente na equação obtida via soma de uma difusão artificial, o que representa uma melhora para problemas transientes. A correção do método Streamline Upwind Petrov-Galerkin é consistente, modificando todos os termos da equação.

III.6 PROBLEMA BIDIMENSIONAL

Estendendo a equação unidimensional (II.11) para o caso bidimensional e usando índices repetidos para indicar soma, podemos escrever a equação bidimensional como:

$$c_{,t} + u_i c_{,i} = k_i c_{,ii} \quad \text{em } \Omega \quad (\text{III.31})$$

sujeita às condições de contorno

$$c(x,t) = g \quad \text{em } \Gamma_g \quad (\text{III.32})$$

$$- k_i c_{,i} n_i = h \text{ em } \Gamma_h \quad (\text{III.33})$$

e à condição inicial:

$$c(x,t) = c_0 \quad (\text{III.34})$$

Aplicando a função de ponderação assimétrica ao domínio da equação diferencial e a parte simétrica da mesma ao contorno, tem-se a equação de resíduos ponderados:

$$\begin{aligned} \sum_e^{Ne} \int_{\Omega_e} (c_{,t} + u_i c_{,i} - k_i c_{,ii}) (w + p) d\Omega \\ + \int_{\Gamma_h} (k_i c_{,i} n_i + h) w d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.35})$$

Integrando por partes o termo difusivo, contínuo, na primeira integral de (III.35) tem-se:

$$\int_{\Omega} k_i c_{,ii} w d\Omega = \int_{\Gamma} k_i c_{,i} n_i w d\Gamma - \int_{\Omega} k_i c_{,i} w_{,i} d\Omega \quad (\text{III.36})$$

Reaplicando-se na equação (III.35) obtém-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (c_{,t} + u_i c_{,i}) w d\Omega + \int_{\Omega} k_i c_{,i} w_{,i} d\Omega \\ + \sum_e^{Ne} \int_{\Omega_e} (c_{,t} + u_i c_{,i} - k_i c_{,ii}) p d\Omega = \int_{\Gamma_h} -h w d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{III.37})$$

Compara-se esta expressão com a expressão equivalente resultante da aplicação da soma de uma difusão artificial ao coeficiente respectivo.

Aplicando a idéia da difusão artificial novamente na equação (III.31) e suas condições de contorno, e integrando-a por partes, obtém-se:

$$\int_{\Omega} (c_{,t} + u_i c_{,i}) w \, d\Omega + \int_{\Omega} (k_i + \bar{k}) c_{,i} w_{,i} \, d\Omega + \int_{\Gamma_h} h w \, d\Gamma = 0. \quad (III.38)$$

Comparando a equação (III.38) com (III.37), pode-se observar:

1) o termo convectivo é o mesmo, visto que:

$$\bar{k} c_{,i} w_{,i} = u_i c_{,i} p \quad (III.39)$$

Pode-se desenvolver esta expressão como :

$$\bar{k} [c_{,1} w_{,1} + c_{,2} w_{,2}] = (u_1 c_{,1} + u_2 c_{,2}) p \quad (III.40)$$

Reescrevendo (III.40) como produto interno temos:

$$\bar{k} (w_{,1} \quad w_{,2}) (c_{,1} \quad c_{,2})^t = (u_1 \quad u_2) (c_{,1} \quad c_{,2})^t p \quad (III.41)$$

Isto conduz a:

$$\bar{k} (w_{,1} \quad w_{,2}) = (u_1 \quad u_2) p \quad (\text{III.42})$$

Fazendo um produto interno com o vetor de velocidade e colocando em evidência p, tem-se:

$$p = \bar{k} (w_{,1} \quad w_{,2}) (u_1 \quad u_2)^t / \| u \|^2 \quad (\text{III.43})$$

onde $\| u \|^2$ Norma do vetor de velocidade

Para o presente caso, empregando elementos isoparametricos bilineares, o parâmetro k toma a forma:

$$\bar{k} = (\alpha_r u_r h_r + \alpha_s u_s h_s) / b$$

$$\text{onde } \alpha_r = \coth(v_r / 2) - 2 / v_r$$

$$\alpha_s = \coth(v_s / 2) - 2 / v_s$$

$$v_r = u_r h_r / k$$

$$v_s = u_s h_s / k$$

$$u_r = e_{r\sim} u_{\sim}$$

$$u_s = e_{s\sim} u_{\sim}$$

$$b = 2 \quad \text{caso estacionario}$$

$$b = \sqrt{15} \quad \text{caso transiente}$$

sendo u_{\sim} vetor de velocidade

$e_{r\sim}$ e $e_{s\sim}$, os vetores unitarios

h_r e h_s os comprimentos caracteristicos dos elementos

definidos na figura 3.3

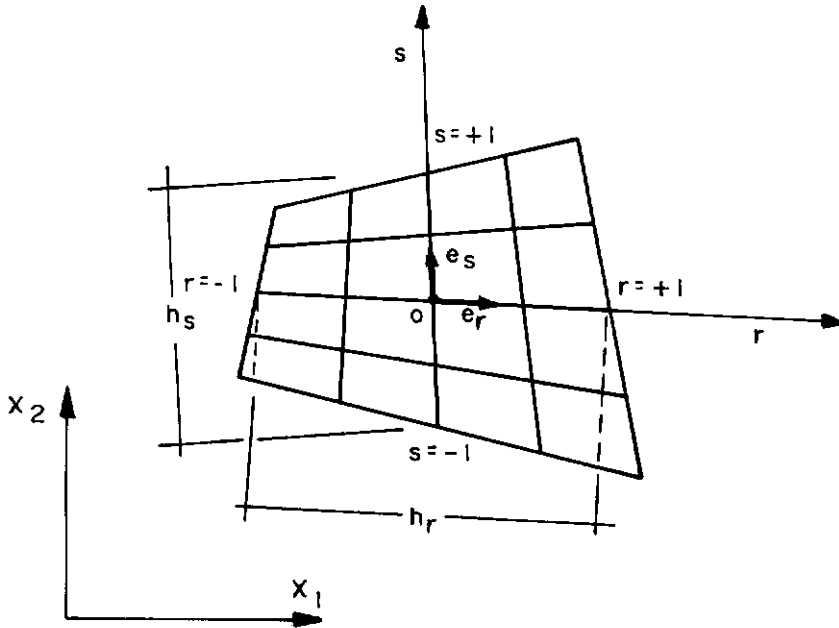


Figura 3.3 Definições geométricas do elemento isoparamétrico bi-linear

2) tomando funções de interpolação bilineares, não é necessária a correção do termo difusivo, já que: $p c_{,ii} = 0$

3) no método de Streamline Upwind Petrov-Galerkin, aparece uma correção no termo temporal, como no caso unidimensional, que torna a formulação consistente e melhora a resposta nos problemas transientes.

A equação a ser discretizada torna-se:

$$\int_{\Omega} (c_{,t} + u_i c_{,i}) w \, d\Omega + \int_{\Omega} k_i c_{,i} w_{,i} \, d\Omega + \int_{\Omega} (c_{,t} + u_i c_{,i}) p \, d\Omega = \int_{\Gamma} h w \, d\Gamma \quad (\text{III.44})$$

A parte convectiva a corrigir será:

$$\int_{\Omega} u_i c_{,i} p \, d\Omega = \int_{\Omega} (u_i c_{,i}) ((\bar{k}/\|u\|^2) w_{,j} u_j) \, d\Omega \quad (\text{III.45})$$

Expressando esta integral por extenso:

$$\int_{\Omega} (\bar{k}/\|u\|^2) (u_1^2 c_{,1} w_{,1} + u_1 u_2 c_{,1} w_{,2} + u_1 u_2 c_{,2} w_{,1} + u_2^2 c_{,2} w_{,2}) \, d\Omega \quad (\text{III.46})$$

III.7 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

Para a aproximação, usa-se a convenção usual em elementos finitos:

$$c(x,t) \cong N(x) C^e \quad (\text{III.47})$$

$$w = W^t N^t \quad (\text{III.48})$$

onde $W = (w_1 \ w_2 \ w_3 \ w_4)$

$$p = (k/\|u\|^2) w_{,i} u_i \quad (III.49)$$

onde p Função de peso assimétrica

Escrevendo a equação (III.44) em forma discreta, e considerando a arbitrariedade dos parâmetros nodais w, chega-se a:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (N^t N C_{,t}^e + (u_i N^t N_i) C^e) d\Omega + \int_{\Omega} k_i N_i^t N_i C^e d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \bar{k} u_i N_i^t N C_{,t}^e d\Omega / \|u\|^2 \\ & + \int_{\Omega} (k_{11} N_1^t N_1 + k_{12} N_2^t N_1 + k_{21} N_1^t N_2 + k_{22} N_2^t N_2) C^e d\Omega \\ & = \int_{\Gamma_h} N^t h d\Gamma \quad (III.50) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{onde } k_{ij} &= (\bar{k}/\|u\|^2) u_i u_j \\ N_i &= \partial N / \partial x_i \end{aligned}$$

Para completar a definição do problema, resta definir as matrizes elementares:

$$M^e = \int_{\Omega} N^t N d\Omega \quad (III.51)$$

$$K^e = \int_{\Omega} (k_i \delta_{ij} + k_{ij}) N_i^t N_j d\Omega \quad (III.52)$$

$$D^e = \int_{\Omega} u_i N^t N_i d\Omega \quad (III.53)$$

$$P^e = \int_{r_h} N^t h dF \quad (\text{III.54})$$

onde δ_{ij} Delta de Kronecker

Finalmente, montando o sistema global de equações, obtém-se:

$$(M + (\bar{k}/\|u\|^2) D^t) C_{,t} + (K + D) C = P \quad (\text{III.55})$$

III.8 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

Para obter uma expressão para a discretização temporal, pode-se partir da equação (III.55), reescrevendo-a como:

$$\bar{M} C_{,t} + \bar{K} C = P \quad (\text{III.56})$$

onde $\bar{M} = M + \bar{k}/\|u\|^2 D^t$

$$\bar{K} = K + D$$

Discretizando $C_{,t}$ com relação ao tempo como:

$$C_{,t}(\bar{t}) = (C(t + \Delta t) - C(t))/\Delta t \quad (\text{III.57})$$

onde $\bar{t} = t + \theta \Delta t$

θ Parâmetro que posiciona \bar{t} entre os tempos t e $t + \Delta t$

$$0 < \theta < 1$$

Usando a discretização anterior na equação (III.56) para um tempo \bar{t} , temos:

$$\begin{aligned} \bar{K} [(1-\theta) C(t) + \theta C(t+\Delta t)] + \bar{M} [(C(t+\Delta t) - C(t))/\Delta t] = \\ (1-\theta) P(t) + \theta P(t+\Delta t) \end{aligned} \quad (III.58)$$

Finalmente, agrupando termos no tempo t e $t+\Delta t$, chegamos a:

$$\begin{aligned} [(1-\theta) \bar{K} - (1/\Delta t) \bar{M}] C(t) + [\theta \bar{K} + (1/\Delta t) \bar{M}] C(t+\Delta t) = \\ (1-\theta) P(t) + \theta P(t+\Delta t) \end{aligned} \quad (III.59)$$

Esta última equação algébrica pode ser resolvida, para cada intervalo de tempo, de forma recursiva. Conhecido o vetor de concentrações no instante t , condições iniciais, se pode calculá-lo no instante $t + \Delta t$ resolvendo (III.59), até atingir o instante desejado.

CAPITULO IV

TESTES NUMERICOS

IV.1 INTRODUÇÃO

Apresentam-se, neste capítulo, testes de desempenho do método de correção utilizado. Basicamente, comparam-se as soluções obtidas com resultados apresentados por trabalhos anteriores, que usam esquemas corretivos diferentes, resultados obtidos sem usar esquema corretivo nenhum, e soluções analíticas.

Os procedimentos desenvolvidos foram implementados num microcomputador Nexus-1600, de 16 bits, com 704 Kbytes de memória RAM, compatível com o IBM/PC. Usaram-se elementos lineares nos problemas unidimensionais (1D), e bilineares, isoparamétricos, nos problemas bidimensionais (2D).

IV.2 TESTES UNIDIMENSIONAIS (1D)

Analisou-se o problema unidimensional em duas situações, transientes, de importância prática: com injeção

continua e com injeção instantânea.

IV.2.1 INJEÇÃO CONTINUA

Nos primeiros testes discretizou-se uma região de 10 [m], com 20 elementos. A velocidade do fluxo foi considerada constante, igual a 0.5 [m/s], no sentido do eixo X.

A condição inicial e as condições de contorno para o problema unidimensional, com injeção continua, são as seguintes:

$$c(x_j, 0) = 0 \quad j = 0, \dots, N \quad (\text{IV.1})$$

$$c(x_0, t) = 1 \quad \forall t > 0 \quad (\text{IV.2})$$

$$c(x_N, t) = 0 \quad \forall t \quad (\text{IV.3})$$

onde N é o número de nós.

Por serem lineares as funções de interpolação, a condição de contorno no primeiro elemento pode ser vista como uma variação linear entre os dois primeiros nós. A solução teórica apresentada, nas figuras 4.1 a 4.5, 4.7 e 4.9, representa uma interpolação linear entre valores nodais exatos.

Comparam-se os resultados para varios instantes de tempo depois da injeção inicial, e para situações com diferentes números de Peclet. O incremento no tempo é tomado sempre igual a 0.4 [seg]. O número de Courant ($u \Delta t / \Delta x$) fica, assim, constante em 0.4.

Nos testes 1 a 5 comparam-se as soluções de Bubnov-Galerkin e Streamline Upwind Petrov-Galerkin com a solução teórica para um número de Peclet igual a 10, para diferentes tempos. Na figura 4.1 mostra-se a resposta para 6.4 [seg] depois de começada a injeção contínua, ou seja, depois de 16 intervalos de tempo. Mostra-se também a solução de HUYAKORN et al. [26], que utiliza a técnica de elementos finitos com funções de ponderação assimétricas. Na figura 4.2, mostra-se a resposta do teste N 2 onde o tempo vale 9.6 [seg]. Na figura 4.3 mostra-se a resposta do teste N 3, a 12.8 [seg] depois da injeção. Na figura 4.4, mostra-se a resposta do teste N 4, onde o tempo é 16 [seg] e no teste N 5 estuda-se a frente do perfil das concentrações atingindo o contorno, no instante 19.2 [seg], depois de 48 intervalos de tempo.

Enquanto a frente do perfil de concentrações permanece afastada do contorno a jusante, pode-se observar pouca diferença entre as soluções dos métodos numéricos entre si e uma pequena sobredifusão com respeito à solução teórica.

Uma vez que a frente do perfil de concentrações atinge o contorno a jusante o erro do método de Streamline Upwind Petrov-Galerkin mostra-se relativamente menor, com relação ao erro do método de Bubnov-Galerkin, como mostra a figura 4.5.

Na figura 4.6 mostra-se o erro global, na medida que se vai avançando no tempo, para cada iteração.

Para avaliar o erro usou-se , como norma, o valor absoluto da área entre as soluções numérica e teórica, ao longo de todo o domínio. Mostra-se o erro global para cada passo de tempo.

No teste 6 comparam-se as soluções de Bubnov-Galerkin e Streamline Upwind/Petrov-Galerkin com a solução teórica para um número de Peclet igual a 100, caracterizando um escoamento predominantemente convectivo. O tempo é 6.4 [seg]. Pode-se observar como, na solução numérica, usando simplesmente Bubnov-Galerkin, aparecem oscilações numéricas que chegam a ser importantes. Pode-se observar, também, que a correção diminui consideravelmente as oscilações.

Na figura 4.9 mostra o teste 7 em que comparam-se resultados, no mesmo instante t igual a 6.4 [seg], para condição de convecção pura, Peclet infinito. Pode-se observar que a solução de Bubnov-Galerkin se deteriora, conservando a característica do erro crescer quando o perfil da frente de onda atinge o contorno a jusante. A solução Streamline Upwind/Petrov-Galerkin, apresenta uma resposta mais próxima à resposta exata, conservando um grau de sobredifusidade ainda que o erro global decresça.

Na figura 4.10 mostram-se os erros globais, no caso de convecção pura, na medida que se vai avançando no tempo, para cada iteração. Pode-se observar que o erro da solução SUPG é inferior à da solução de Bubnov-Galerkin.

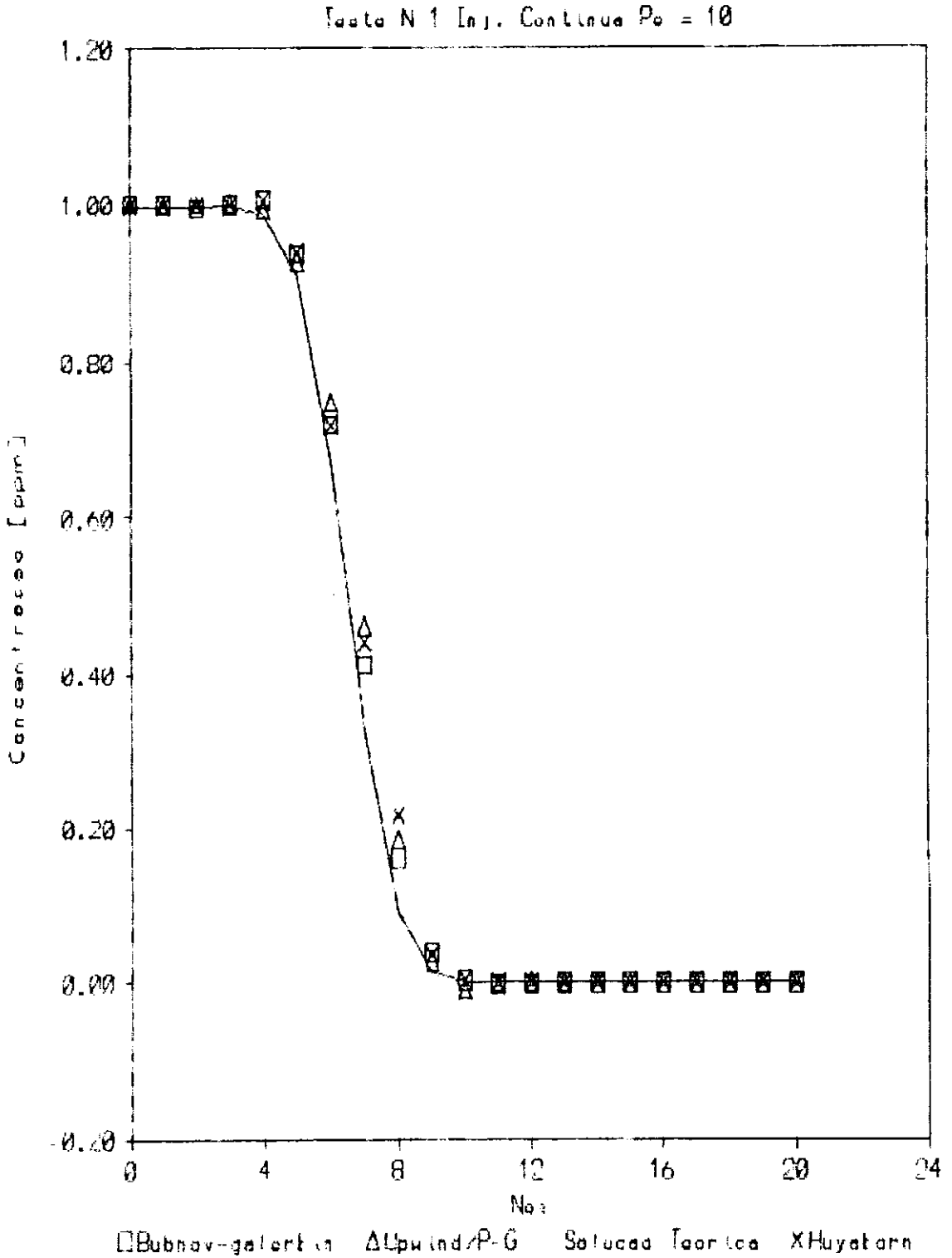


Figura 4.1

Teste N 2 Inj. Continua $P_0 = 10$

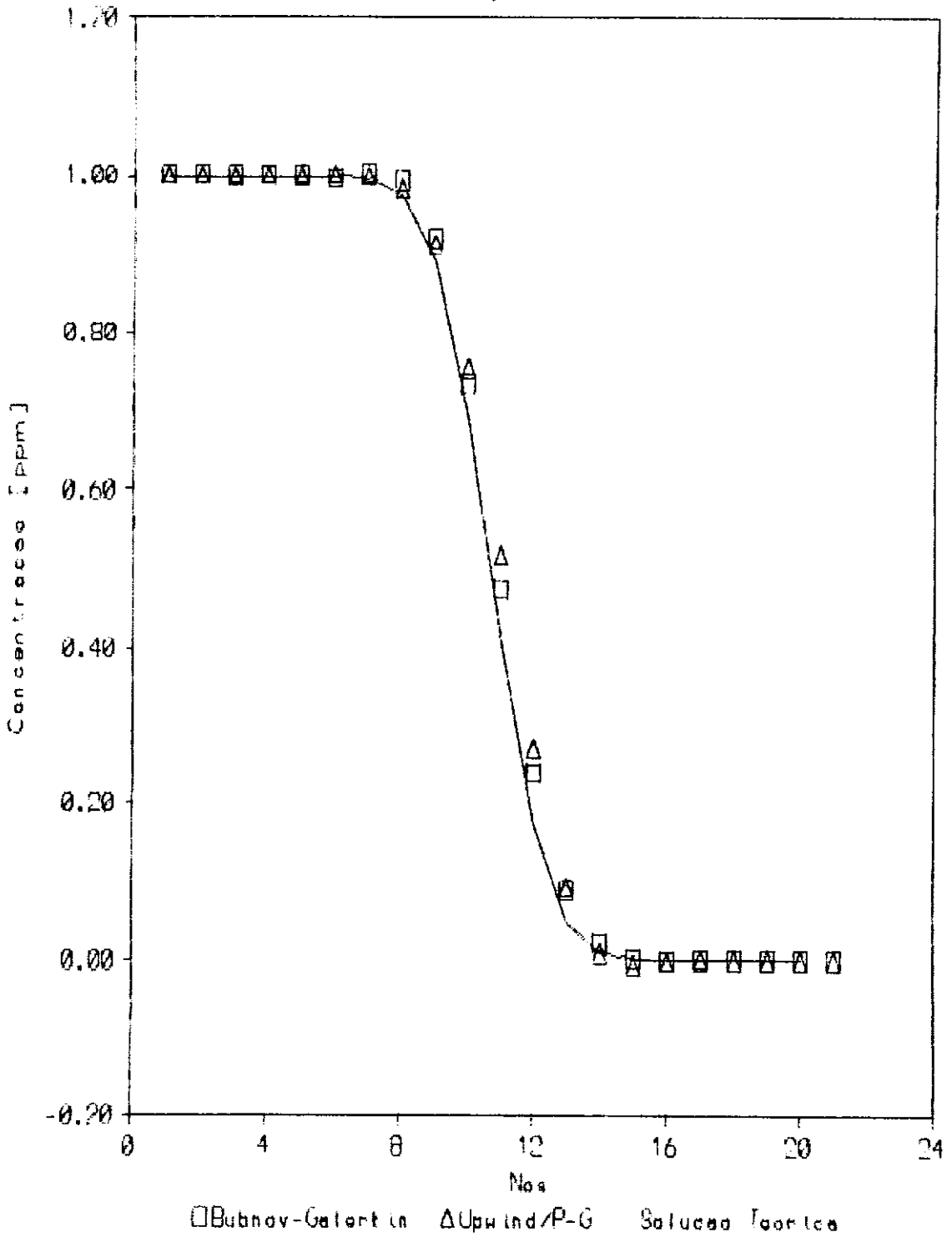


Figura 4.2

Teste N 3 Inj. Contine Po = 10

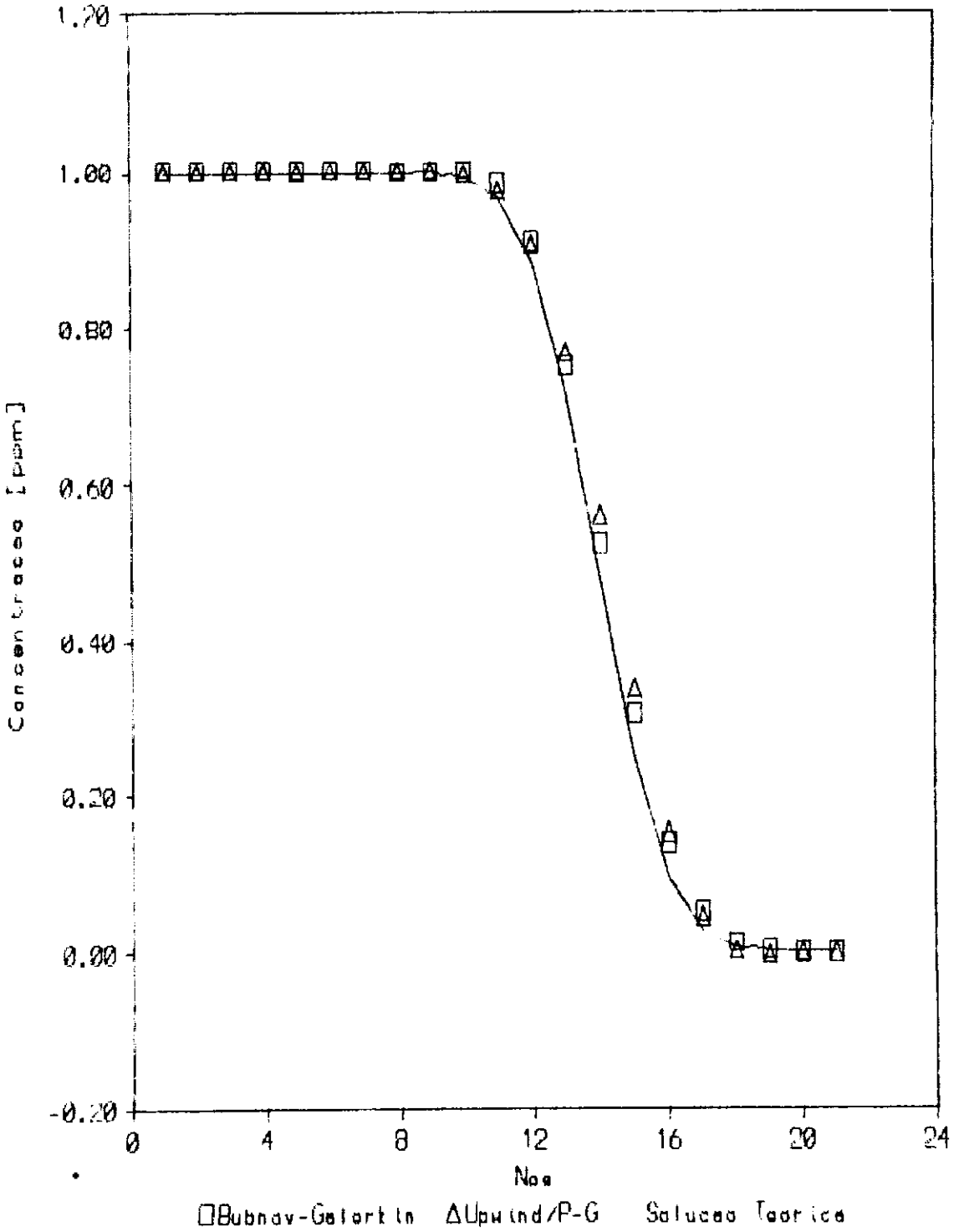


Figura 4.3

Teste N 4 Inj. Continua $Pe = 10$

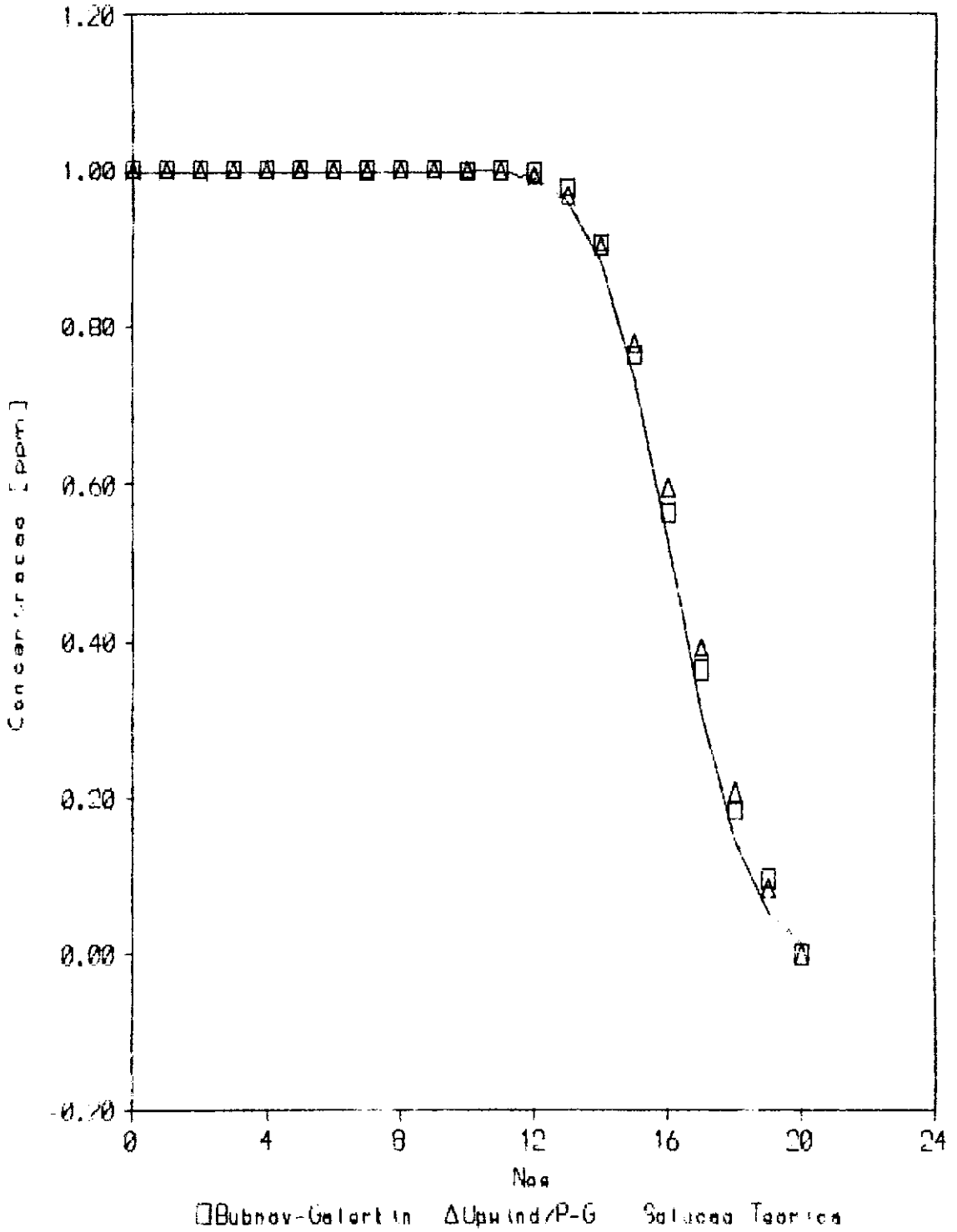


Figura 4.4

Teste N 5 Inj. Continua Po - 10

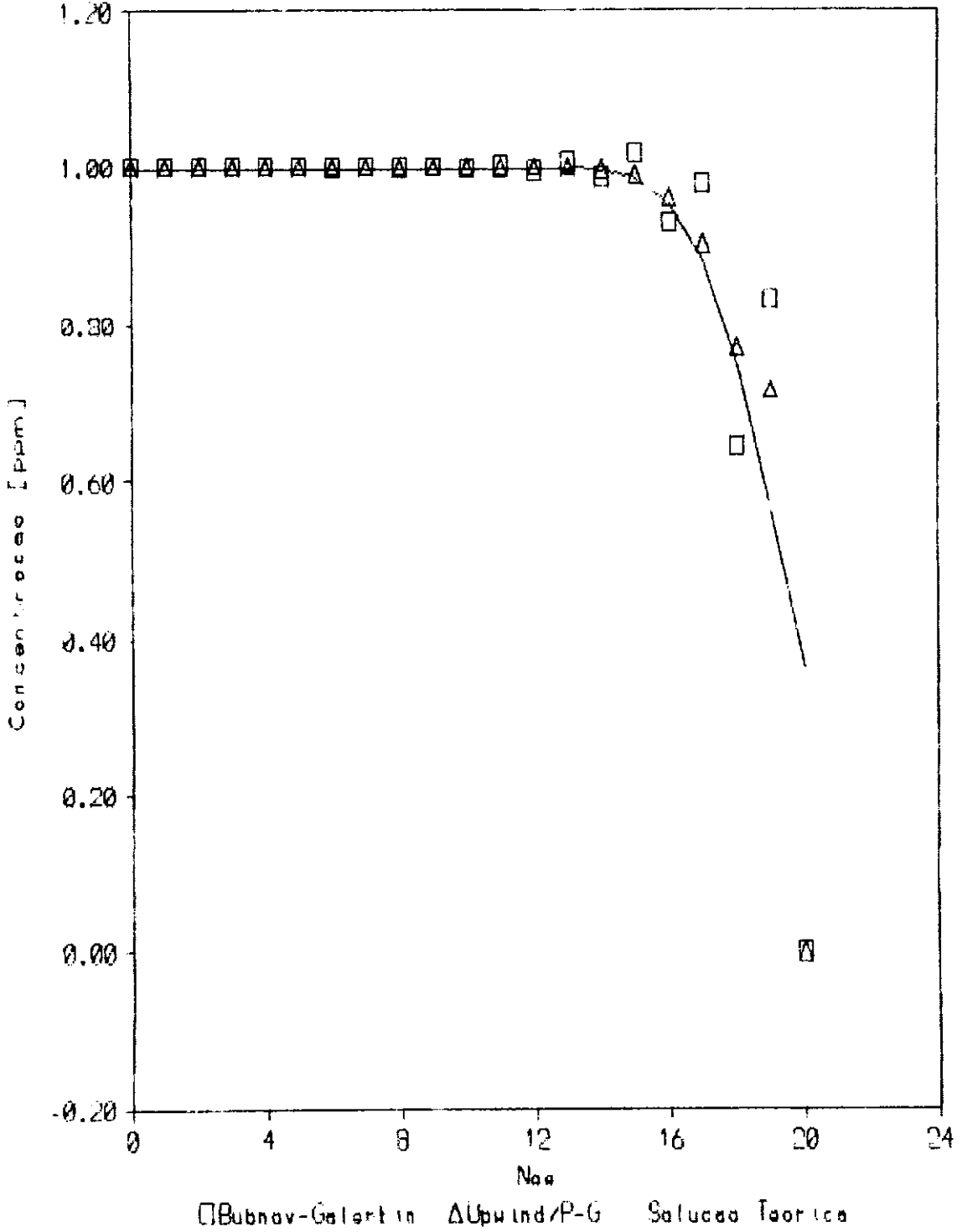


Figura 4.5

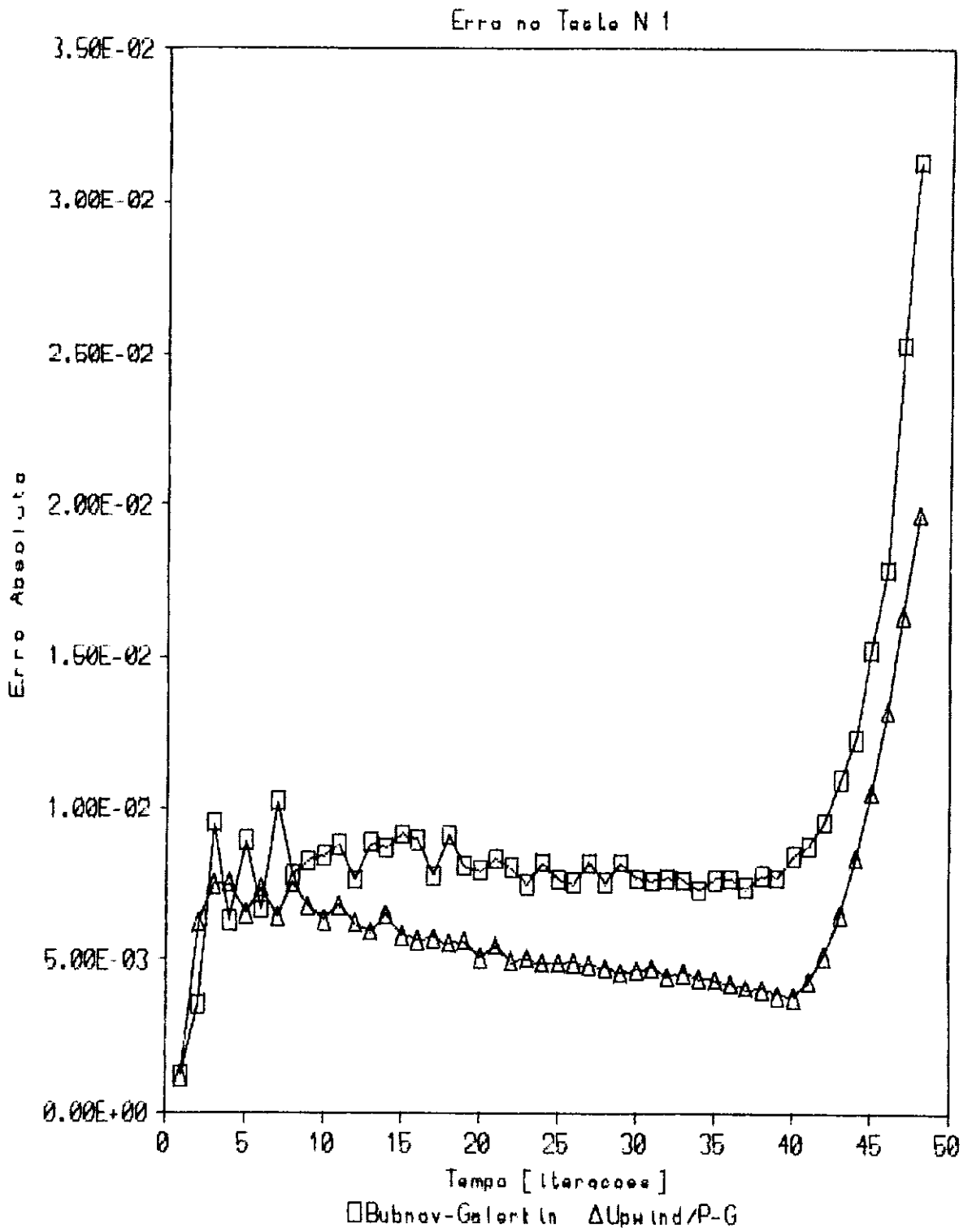


Figura 4.6

Teste N 6 Inj. Continua Po = 100

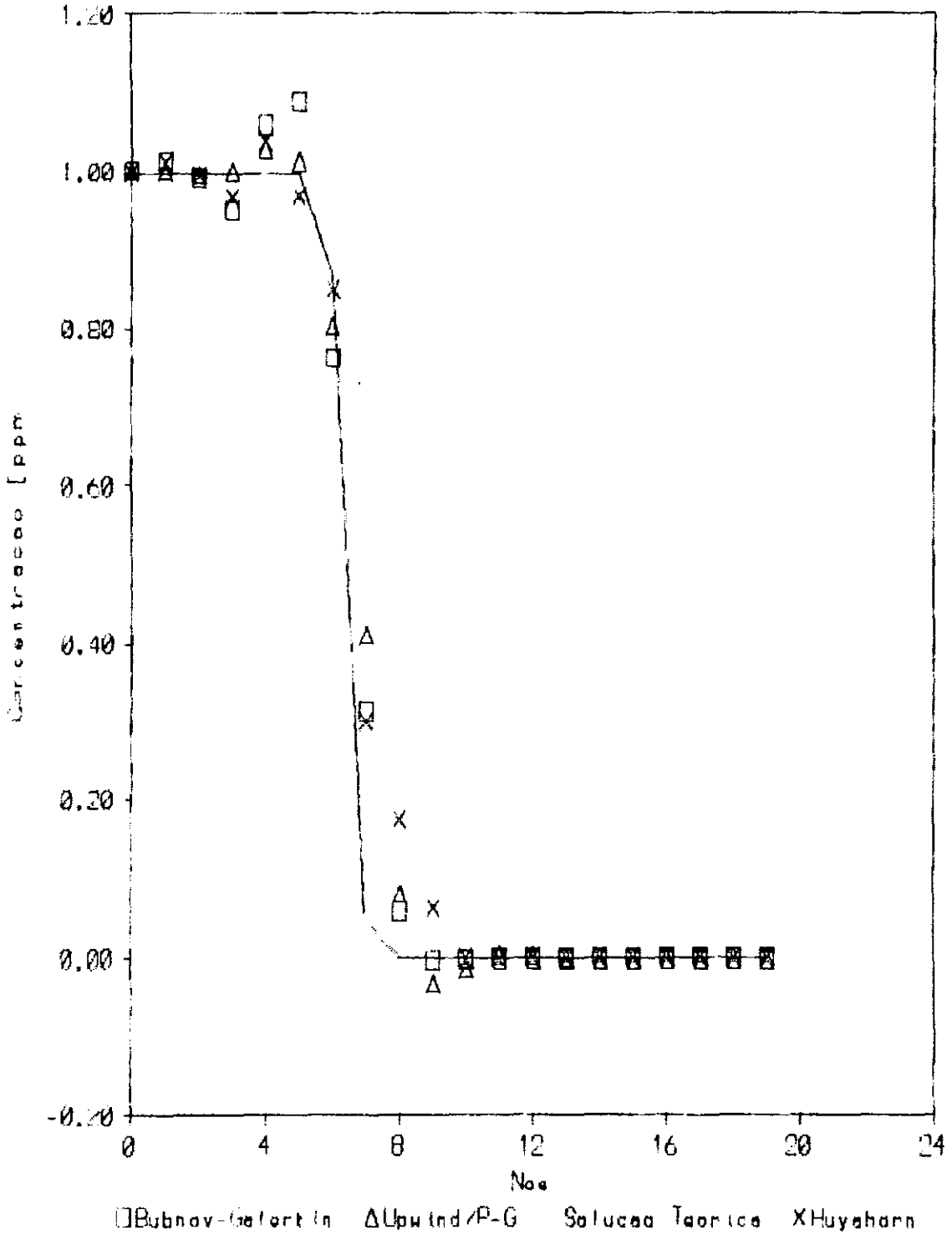


Figura 4.7

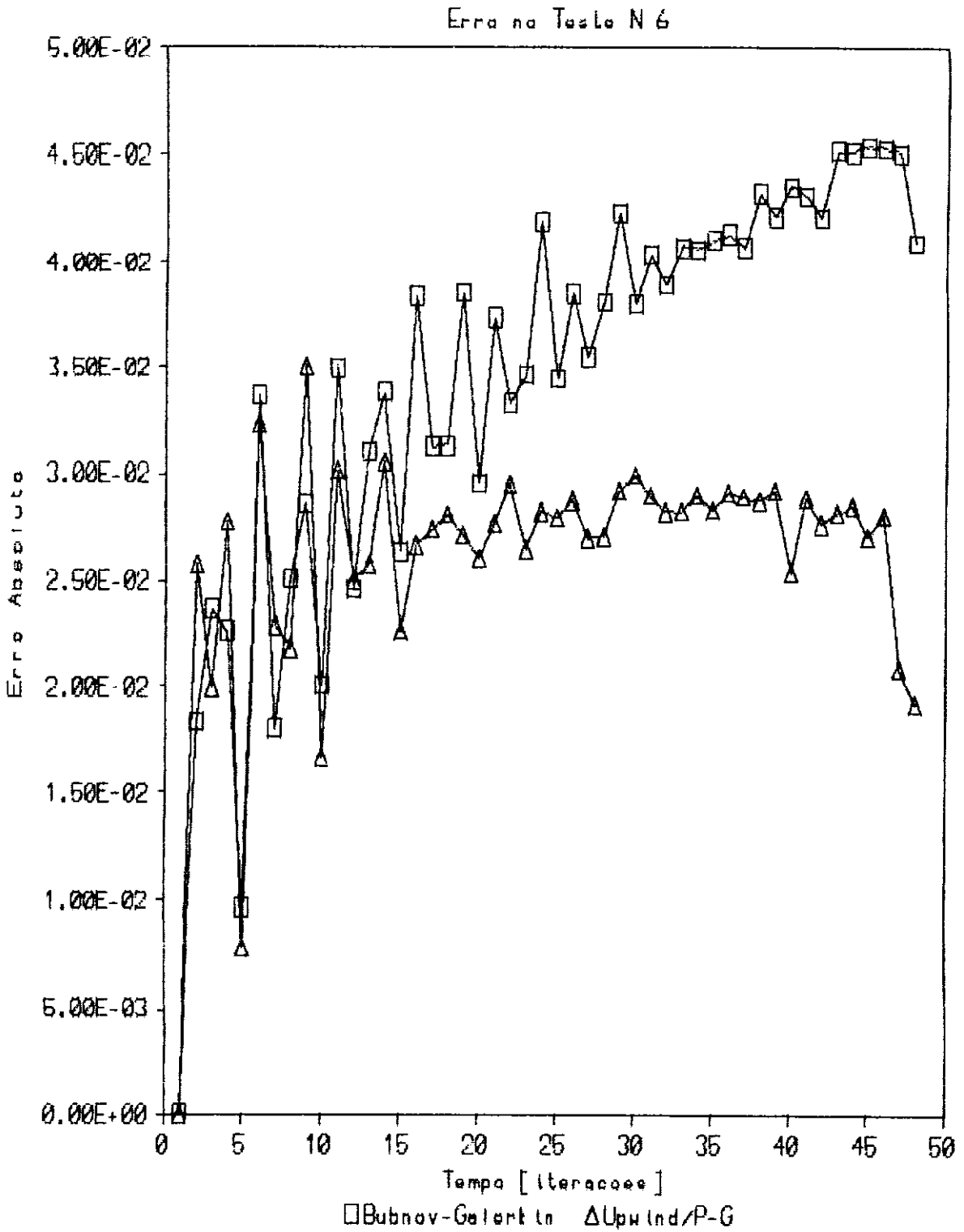


Figura 4.8

Teste N 7 Conveccao Pure

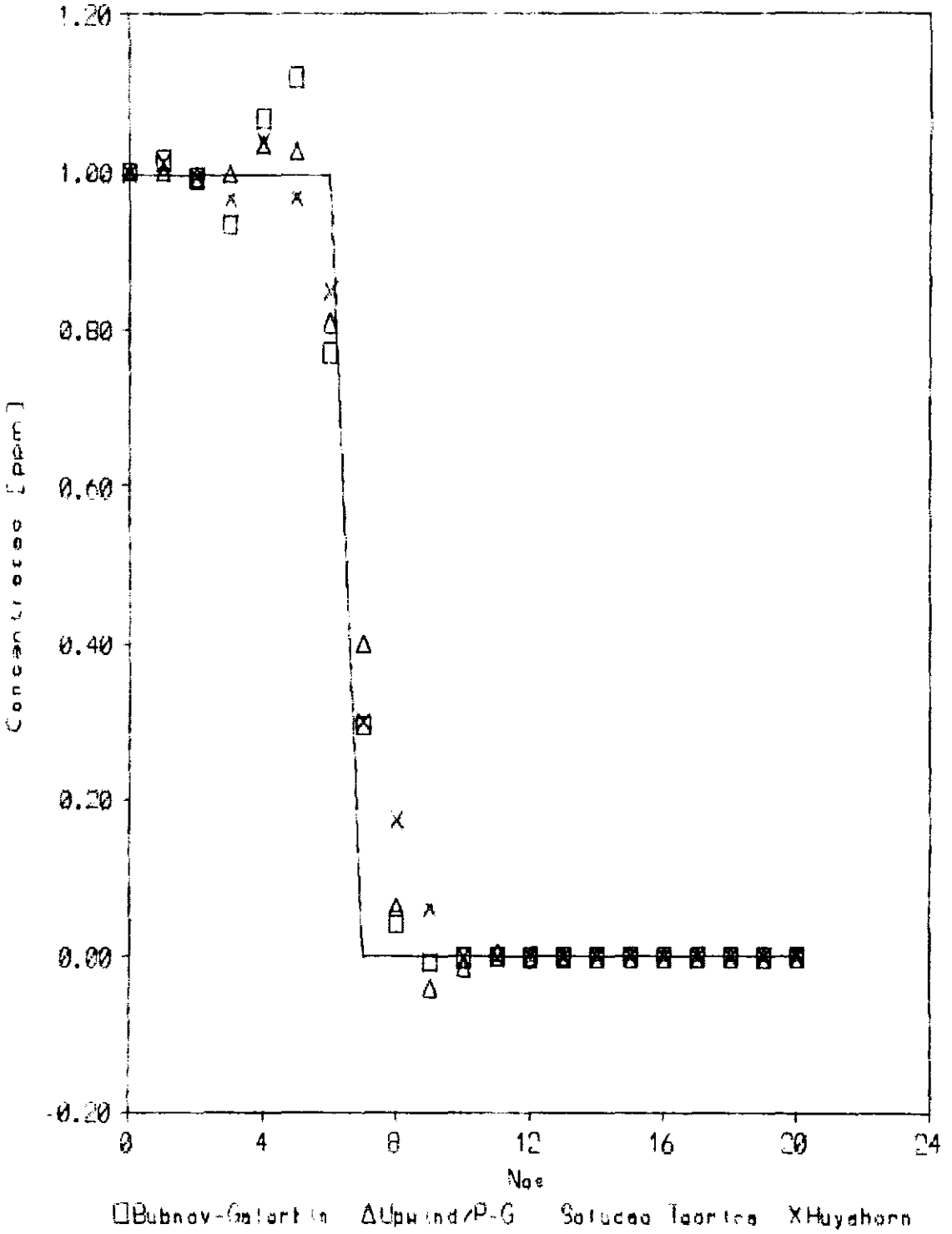


Figura 4.9

Erro no Teste N 7

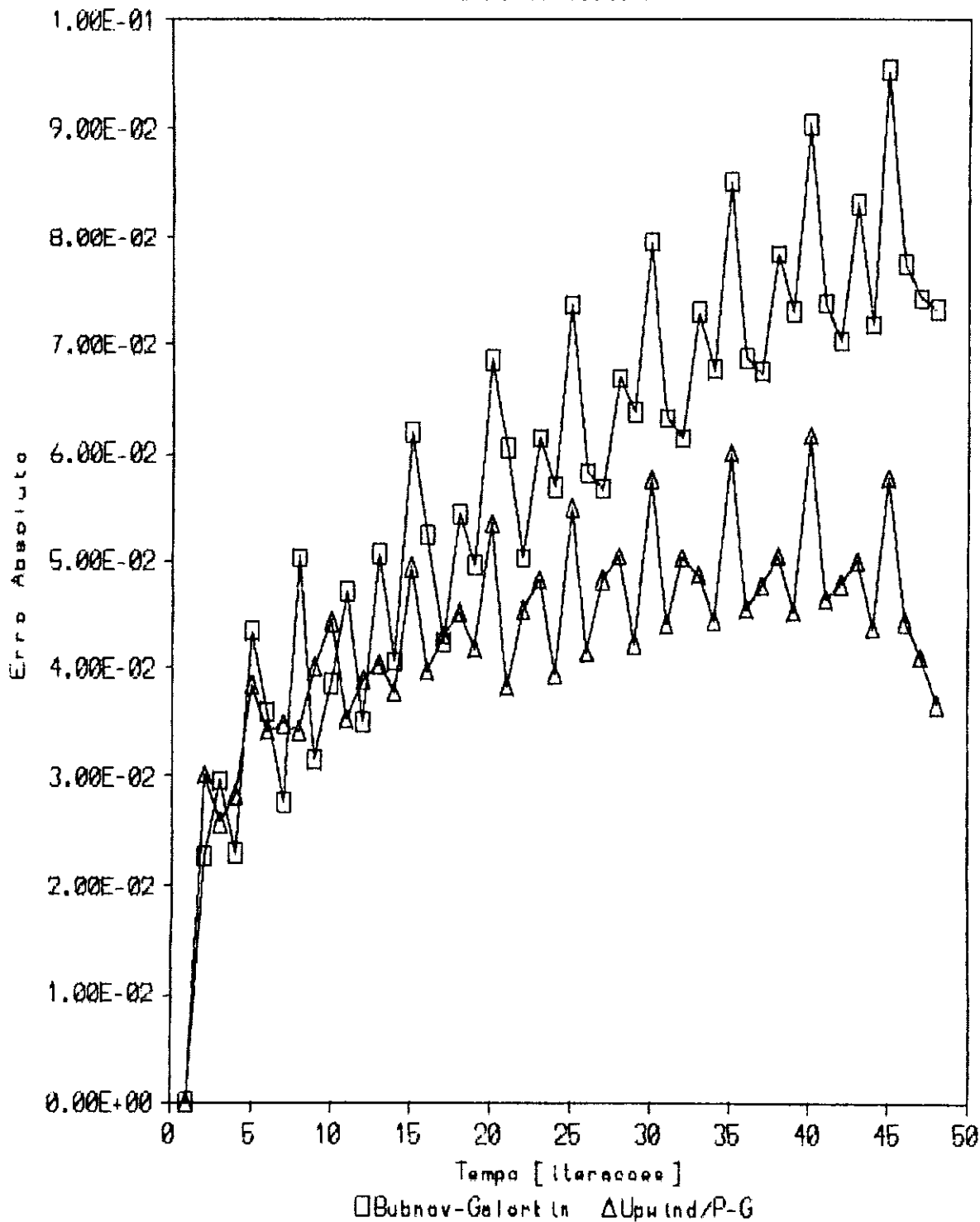


Figura 4.10

IV.2.2 INJEÇÃO DESCONTINUA

Simulou-se um processo de injeção descontínua dando um perfil de concentrações descontínuo, como condição inicial. O comprimento foi tomado igual a 20.0 [m]. Usou-se uma discretização de 40 elementos.

A condição inicial e as condições de contorno para o problema unidimensional, com injeção descontínua, são as seguintes:

$$c(x_i, 0) = 0 \quad i = 0, 1, 2, \dots, 10 \quad (\text{IV.4})$$

$$c(x_j, 0) = 1 \quad j = 11, 12, 13, 14, 15 \quad (\text{IV.5})$$

$$c(x_k, 0) = 0 \quad k = 16, 17, \dots, 40 \quad (\text{IV.6})$$

$$c(x_0, t) = 0 \quad \forall t \quad (\text{IV.7})$$

$$c(x_{40}, t) = 0 \quad \forall t \quad (\text{IV.9})$$

A velocidade do fluxo é constante, igual a 0.5 [m/s], no sentido do eixo X.

Para estudar o efeito da convectividade, se modelaram tres casos, com diferente número de Peclet, conservando iguais as características restantes.

Na figura 4.11 mostra-se a resposta do teste N 8 para Peclet igual a 10. Na figura 4.12 mostra-se a resposta do teste N 9 para Peclet igual a 100 e, nas figuras 4.13 e 4.14, mostra-se as respostas para os testes 10 e 11 no caso de convecção pura, para 2 e 10 [seg], respectivamente. Mostra-se

tambem, na figura 4.15, o erro global para cada passo de tempo.

Pode-se observar que a solução de Bubnov-Galerkin apresenta oscilações que tendem a aumentar com o número de Peclet e com a passagem da nuvem de poluentes. a solução com o esquema Upwind/Petrov Galerkin minimiza as oscilações, principalmente a montante da nuvem. É importante, tambem, ressaltar que os erros numéricos na crista de onda, embora ainda não ultrapassem 10% no esquema de SUPG, podendo alcançar até 25% no esquema de Bubnov-Galerkin.

Teste N 8 Inj. Descontinua Pe = 10

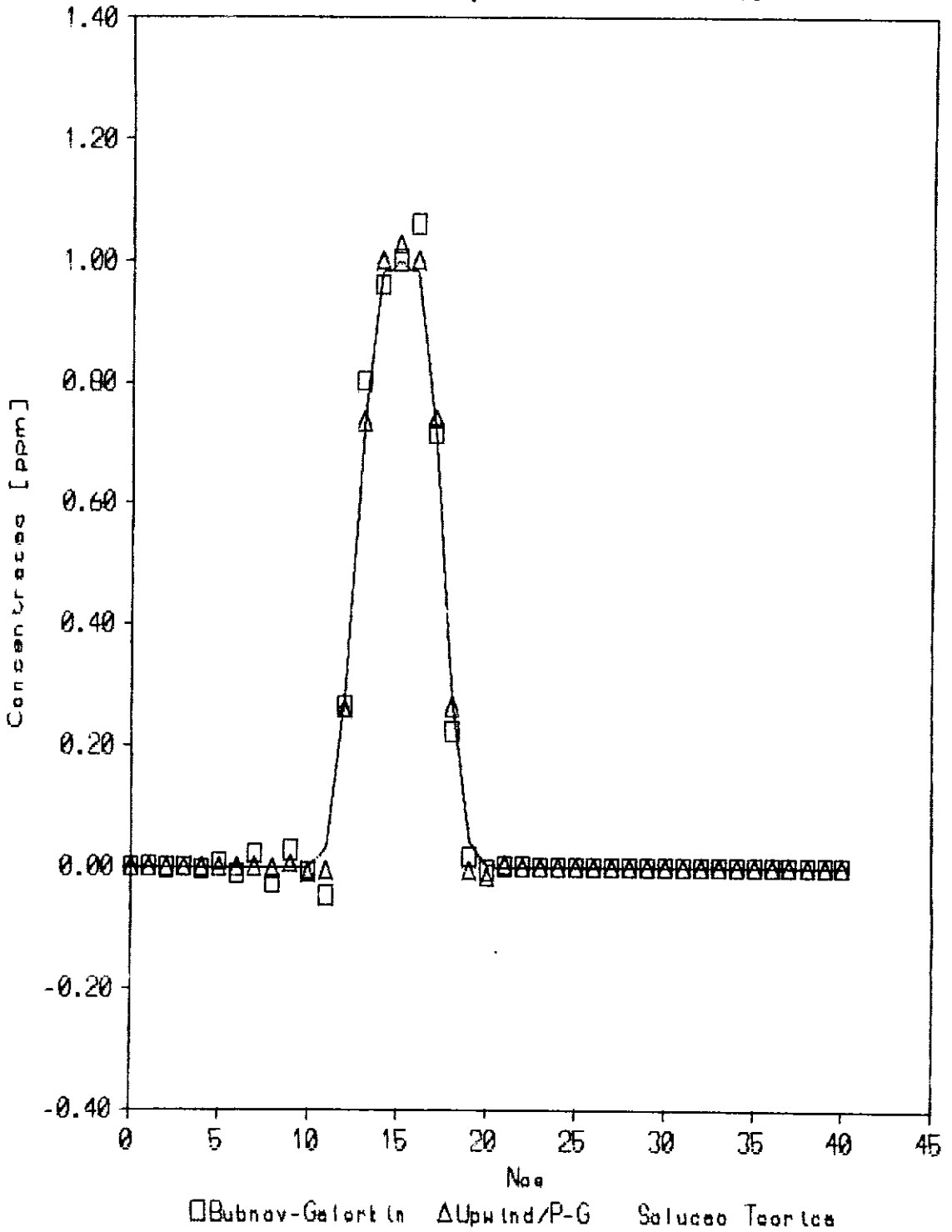


Figura 4.11

Teste N 9 Inj. Descontinua $Pe=100$

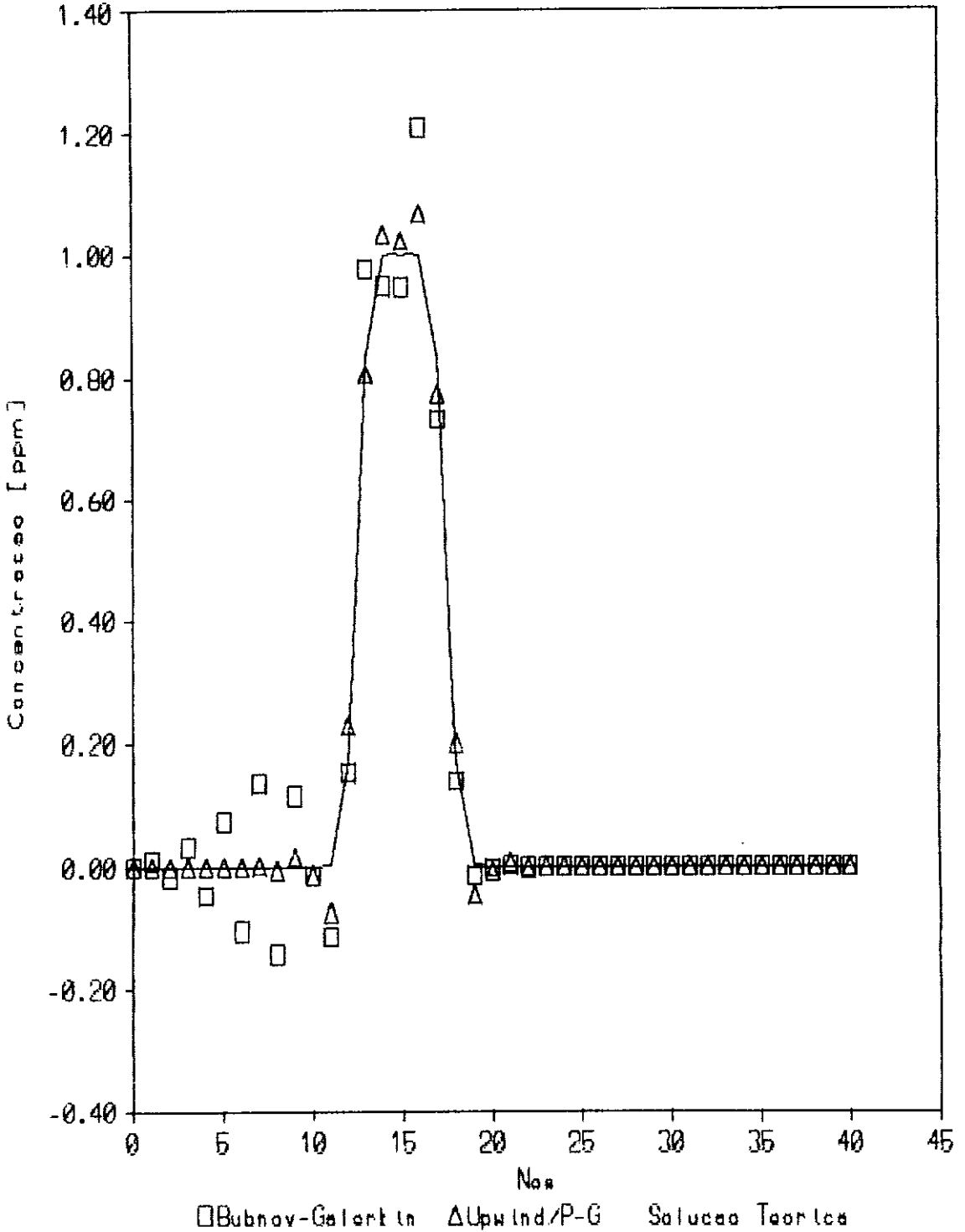


Figura 4.12

Teste N 10 Inj. Dos. Convencido Pura

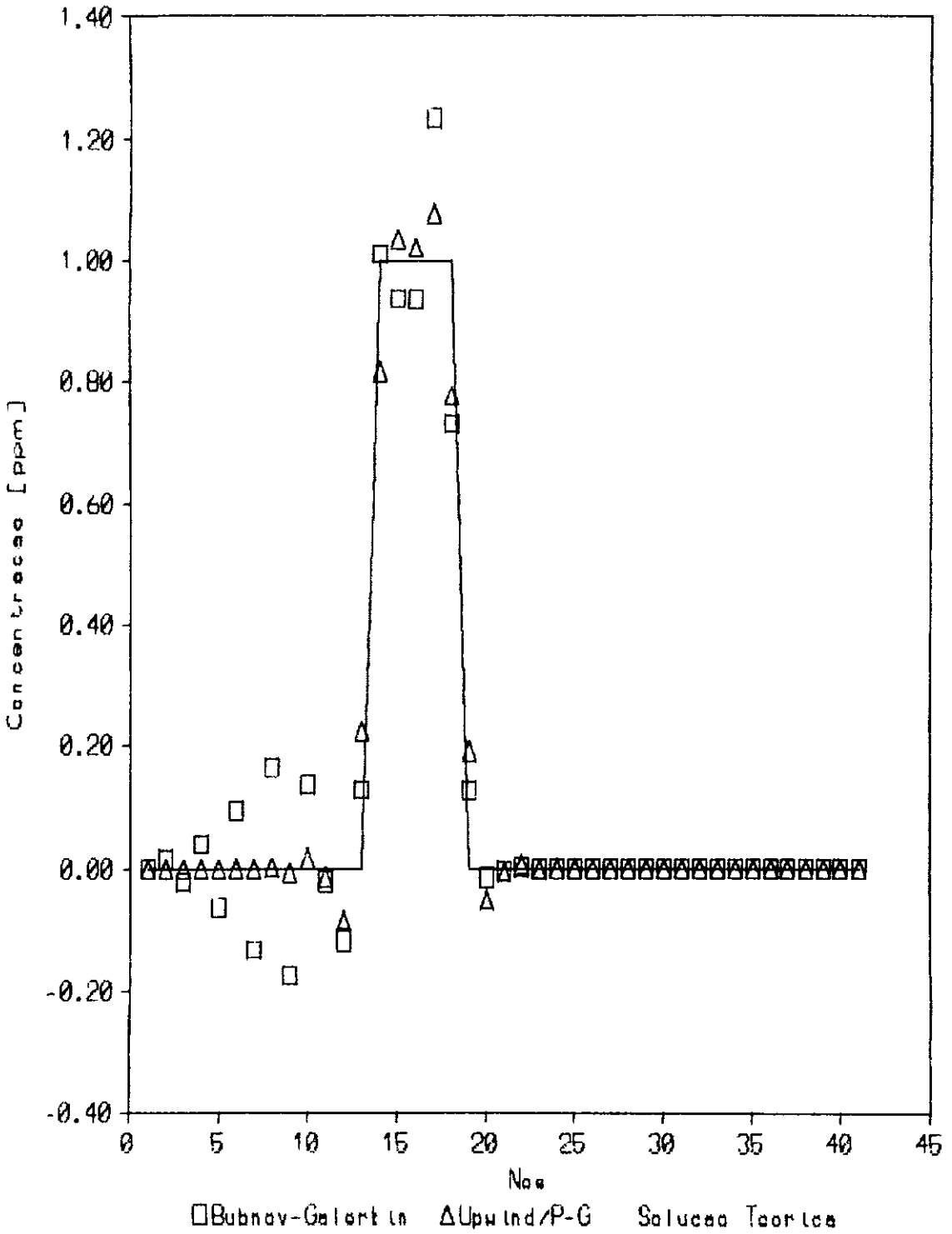


Figura 4.13

Teste N 11 Inj. Des. Convecção Pura

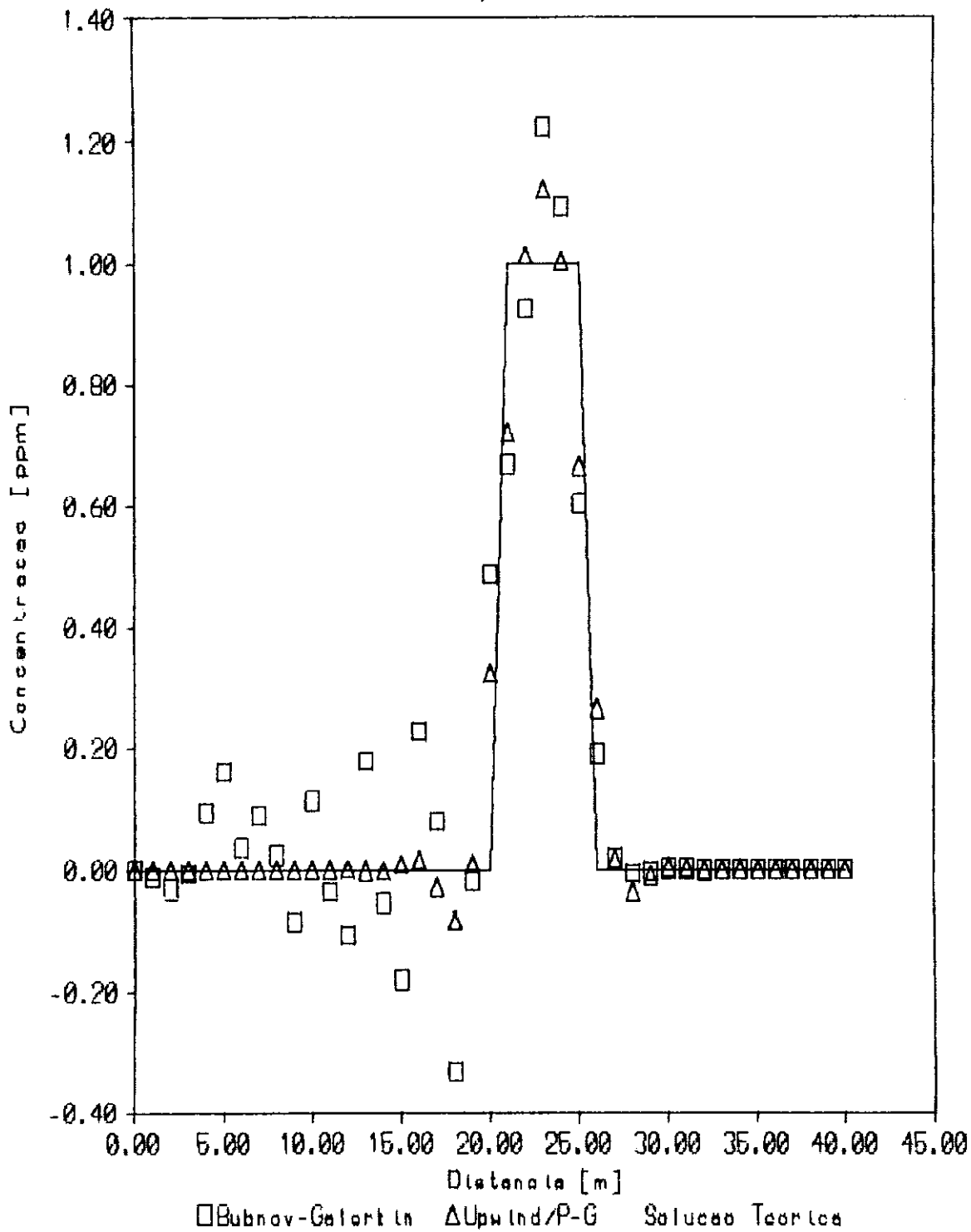


Figura 4.14

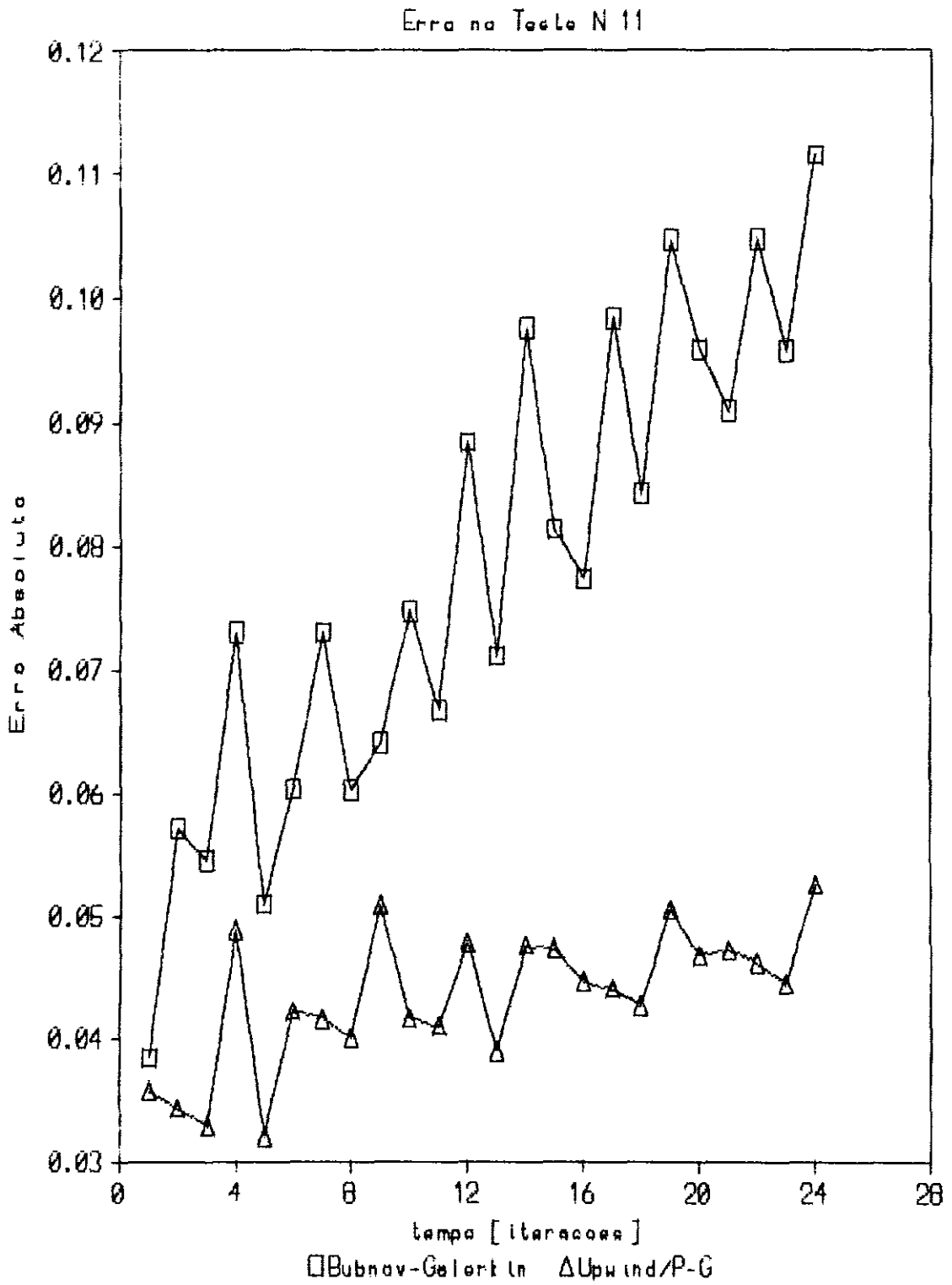


Figura 4.15

IV.3 TESTES BIDIMENSIONAIS

Foram analisados problemas bidimensionais em condições estacionárias e transientes.

Primeiramente testou-se uma situação , transiente, praticamente unidimensional. Em um domínio quadrado $\Omega =]0,1[\times]0,1[$ discretizou-se uma malha de 12×12 elementos, iguais, impondo condições diferentes a montante e a jusante. Os contornos paralelos ao fluxo foram modelados como impermeáveis.

Os valores adotados para os parâmetros foram, respectivamente, Peclet igual a 100, e Courant igual a 0.432.

As condições de contorno deste teste são:

$$c(0, y, t) = 1 \quad \forall t \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (4.10)$$

$$c(1, y, t) = 0 \quad \forall t \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (4.11)$$

$$c_{,y}(x, 0, t) = 0 \quad \forall t \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.12)$$

$$c_{,y}(x, 1, t) = 0 \quad \forall t \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.13)$$

$$u = 1.2 \quad v = 0 \quad (4.14)$$

$$k = 0.001 \quad (4.15)$$

$$\Delta t = 0.03 \quad (4.16)$$

Como condição inicial tomou-se a concentração inicial igual a zero.

Nas figuras 4.16 e 4.17 mostram-se os resultados, depois de 30 passos de tempo, quando a frente do perfil de

concentrações já atingiu o extremo da região analisada. As fortes oscilações, para valores grandes do gradiente de concentrações, típicas do método de Bubnov-Galerkin, são suavizadas pela correção SUPG.

É necessário salientar que as condições de contorno impostas não são usuais do ponto de vista prático, servindo apenas como teste numérico para demonstrar a força do esquema corretivo de SUPG, frente ao mau condicionamento das condições de contorno.

O segundo teste bidimensional estudou uma situação transiente envolvendo condições de fluxo predominantemente convectivo. Em um domínio quadrado $\Omega = [0,1[\times]0,1[$ discretizado com uma malha de 12x12 elementos iguais, foram impostas as seguintes condições de contorno:

$$c(0, y, t) = -0.5 \quad \forall t \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (4.17)$$

$$c(1, y, t) = 0.5 \quad \forall t \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (4.18)$$

$$c_{,y}(x, 0, t) = 0 \quad \forall t \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.19)$$

$$c_{,y}(x, 1, t) = 0 \quad \forall t \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.20)$$

$$u = (3y - 1) \quad v = 0 \quad (4.21)$$

$$k = 0.01 \quad (4.22)$$

$$\Delta t = 0.08 \quad (4.23)$$

Como condição inicial tomou-se a concentração igual a zero.

Este teste já foi estudado por DONEA et al. [27], para

comparar vários esquemas corretivos. Os resultados, mostrados nas figuras 4.18 e 4.19, com a correção SUPG são melhores que os resultados obtidos no referido trabalho. Pode-se observar que os resultados obtidos com a correção SUPG não apresentam as oscilações observadas com a abordagem clássica de Bubnov-Galerkin.

O último teste estuda uma situação envolvendo condições de fluxo muito próximas da convecção pura, em regime permanente. Em um domínio quadrado $\Omega =]0,1[\times]0,1[$ discretizado com uma malha de 10×10 elementos iguais, especificaram-se as seguintes condições de contorno:

$$c(0,y) = 1 \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (4.24)$$

$$c(x,0) = 1 \quad 0 \leq x \leq 1/3 \quad (4.25)$$

$$c(x,0) = 0 \quad 1/3 < x \leq 1 \quad (4.26)$$

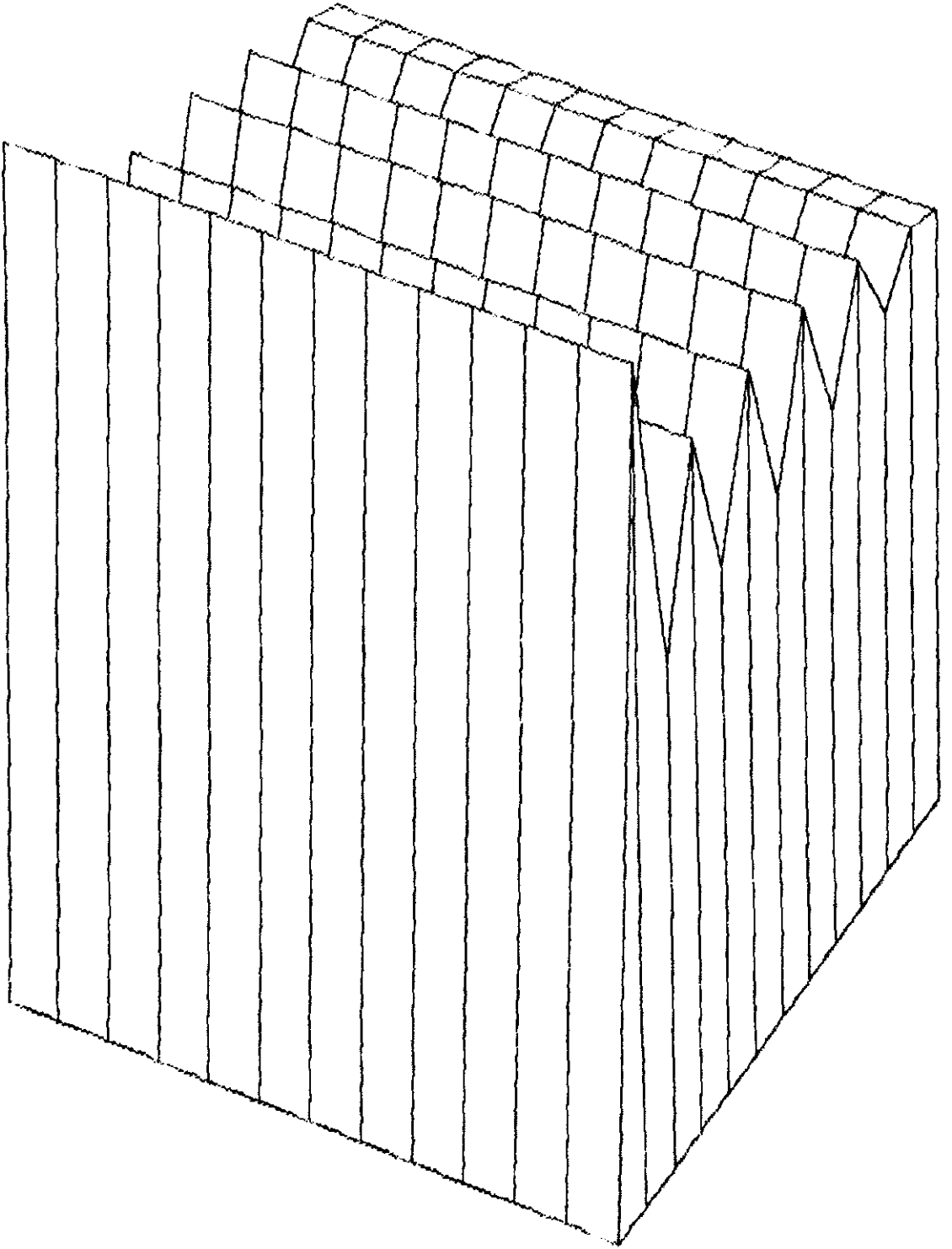
$$c_{,y}(x,0) = 0 \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (4.27)$$

$$c_{,x}(1,y) = 0 \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (4.28)$$

$$u = 1/\sqrt{2} \quad v = 1/\sqrt{2} \quad (4.29)$$

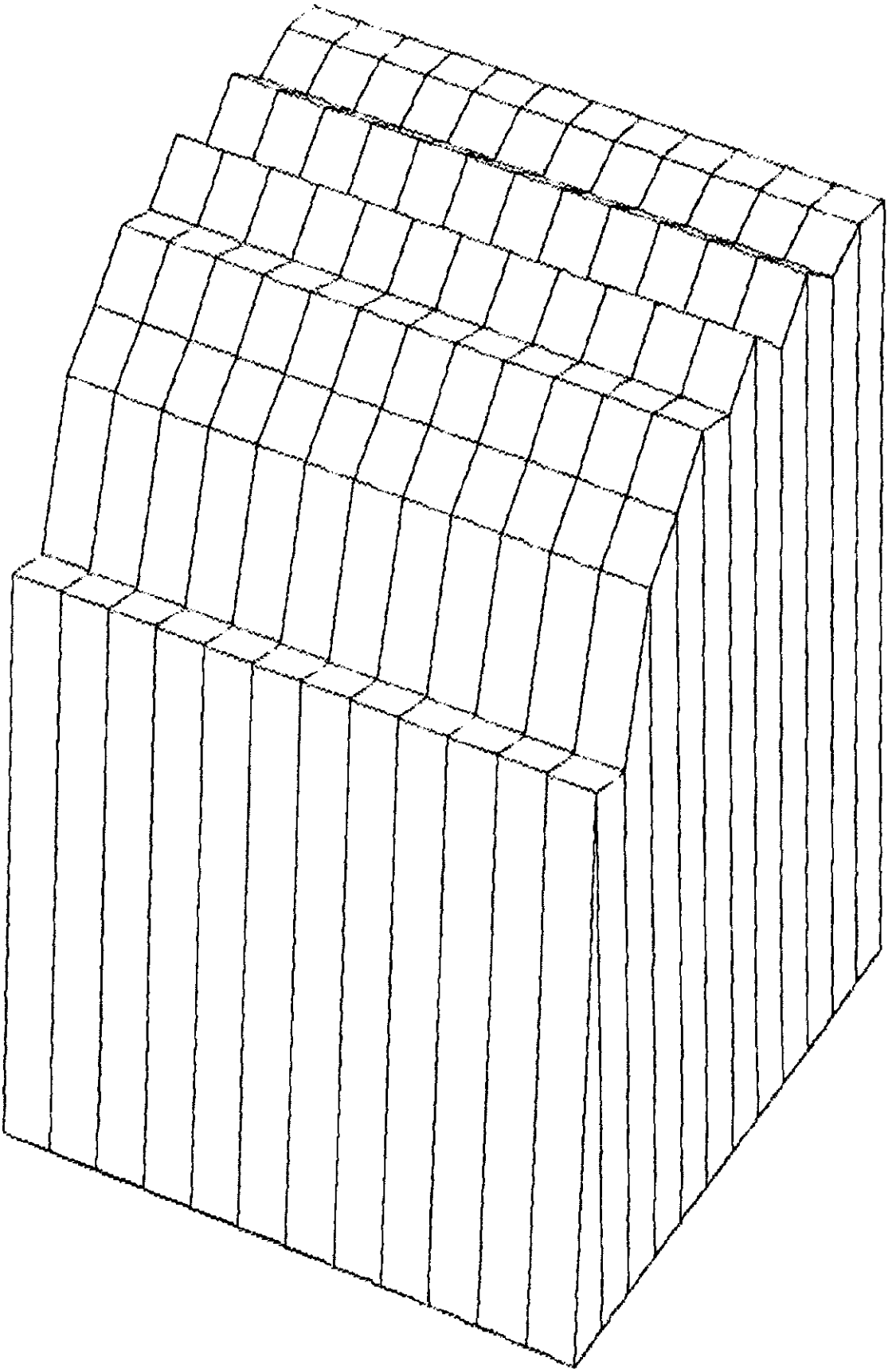
$$k = 10^{-6} \quad (4.30)$$

Este teste foi utilizado por BROOKS e HUGHES [13], e mostra a melhora do esquema correctivo SUPG frente a outros métodos. Nas figuras 4.20 e 4.21 mostram-se os resultados, podendo-se comprovar o efeito da correção que elimina as oscilações, sem introduzir sobredifusão transversal ao fluxo, como apresentada por outros esquemas corretivos. O erro mostra-se sensível à direção da velocidade, aumentando quando o ângulo desta é diferente de 45 graus.



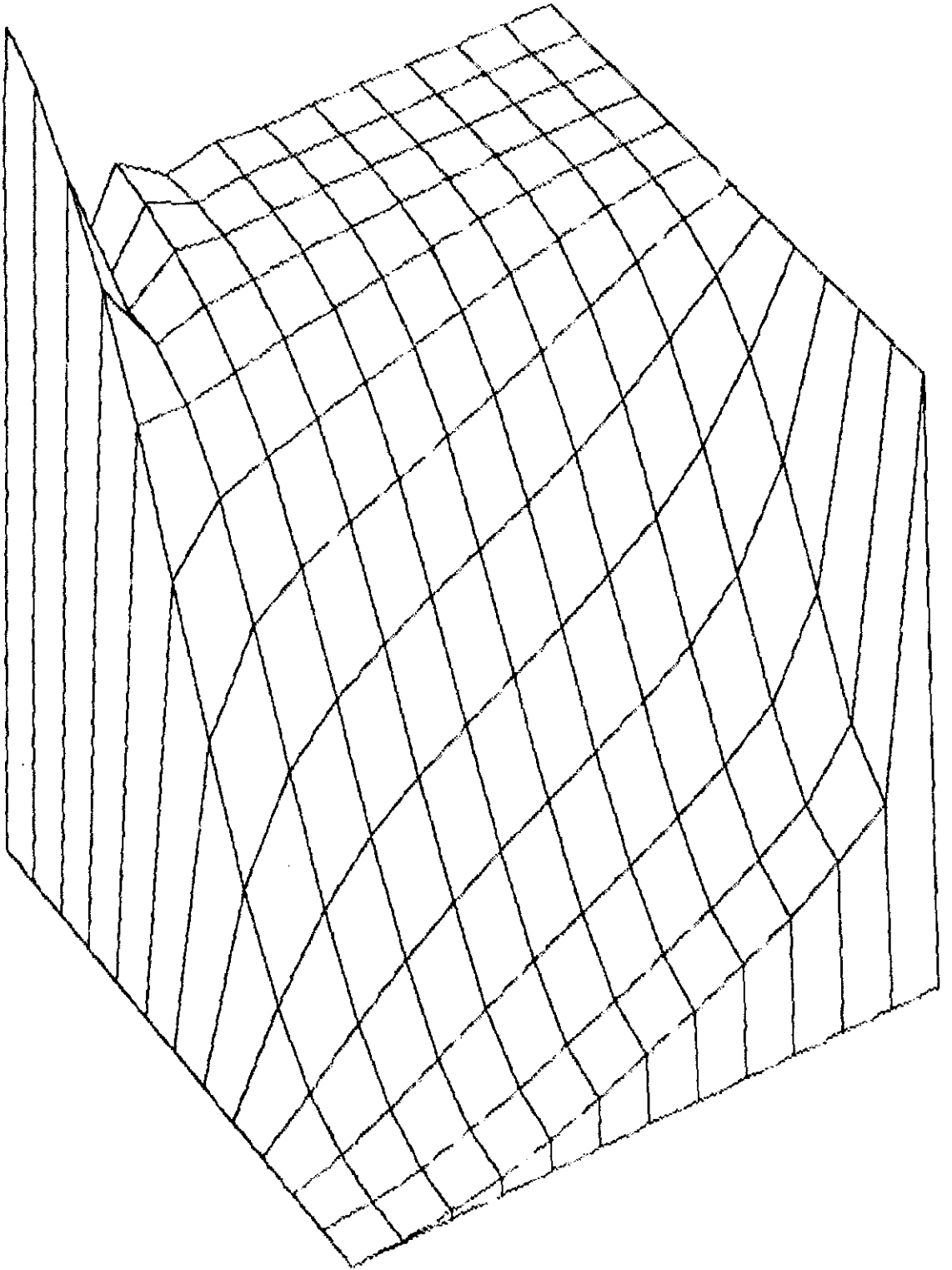
Teste N 13 Sol. Trans. B-G

Figura 4.16



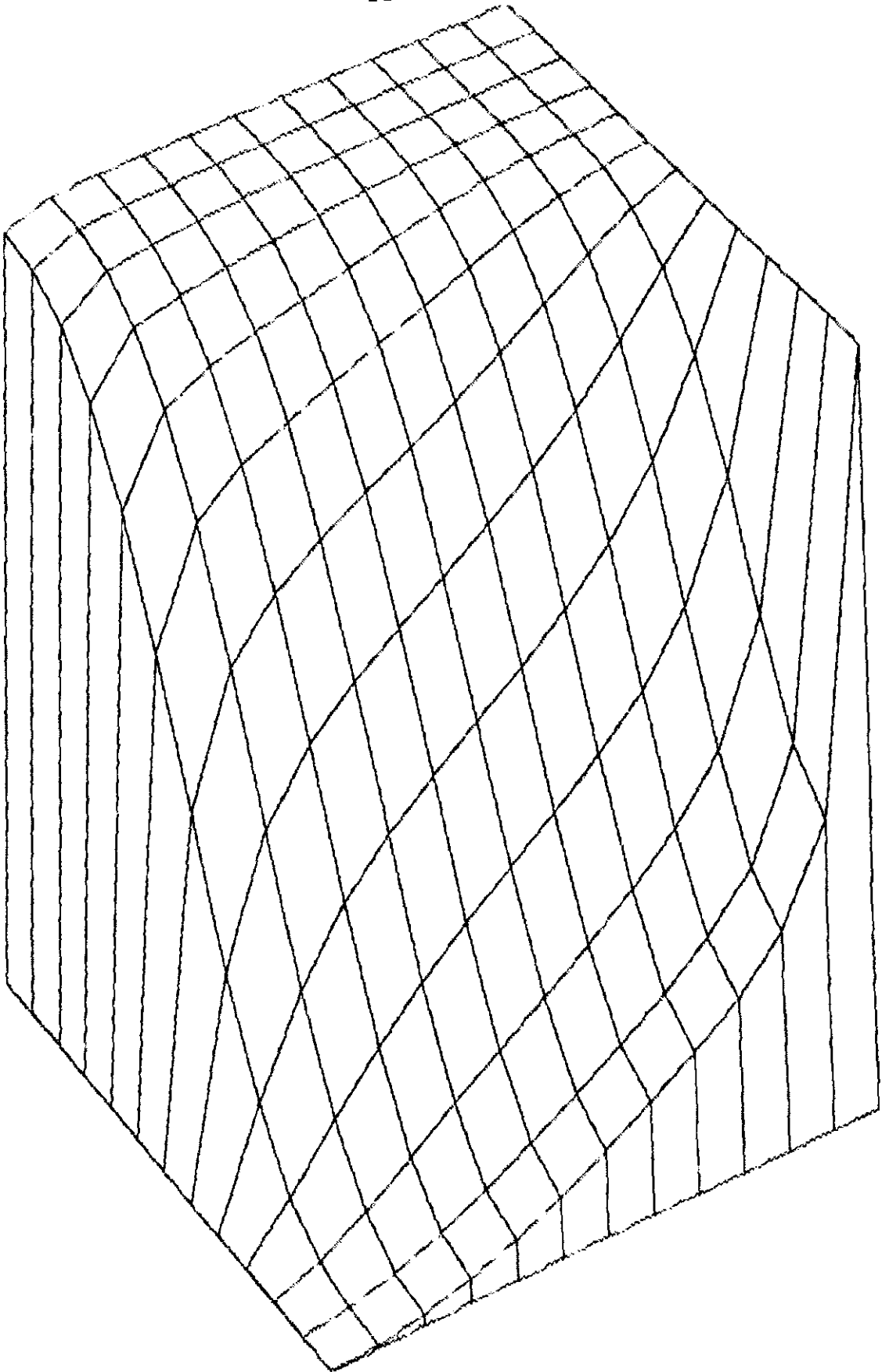
Teete N 13 Sol, Trans. P-G

Figura 4.17

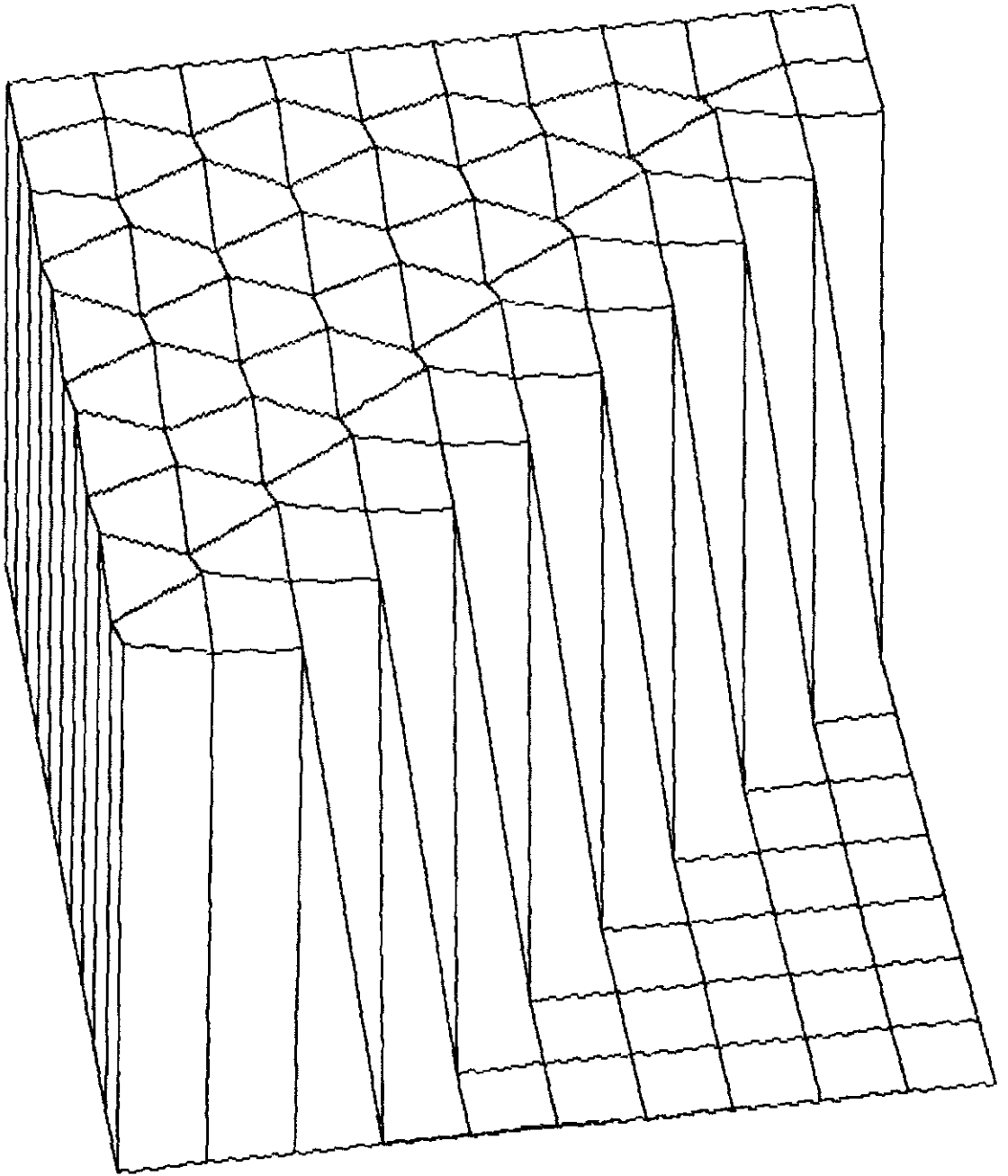


Teste N 14 Solucao B-G

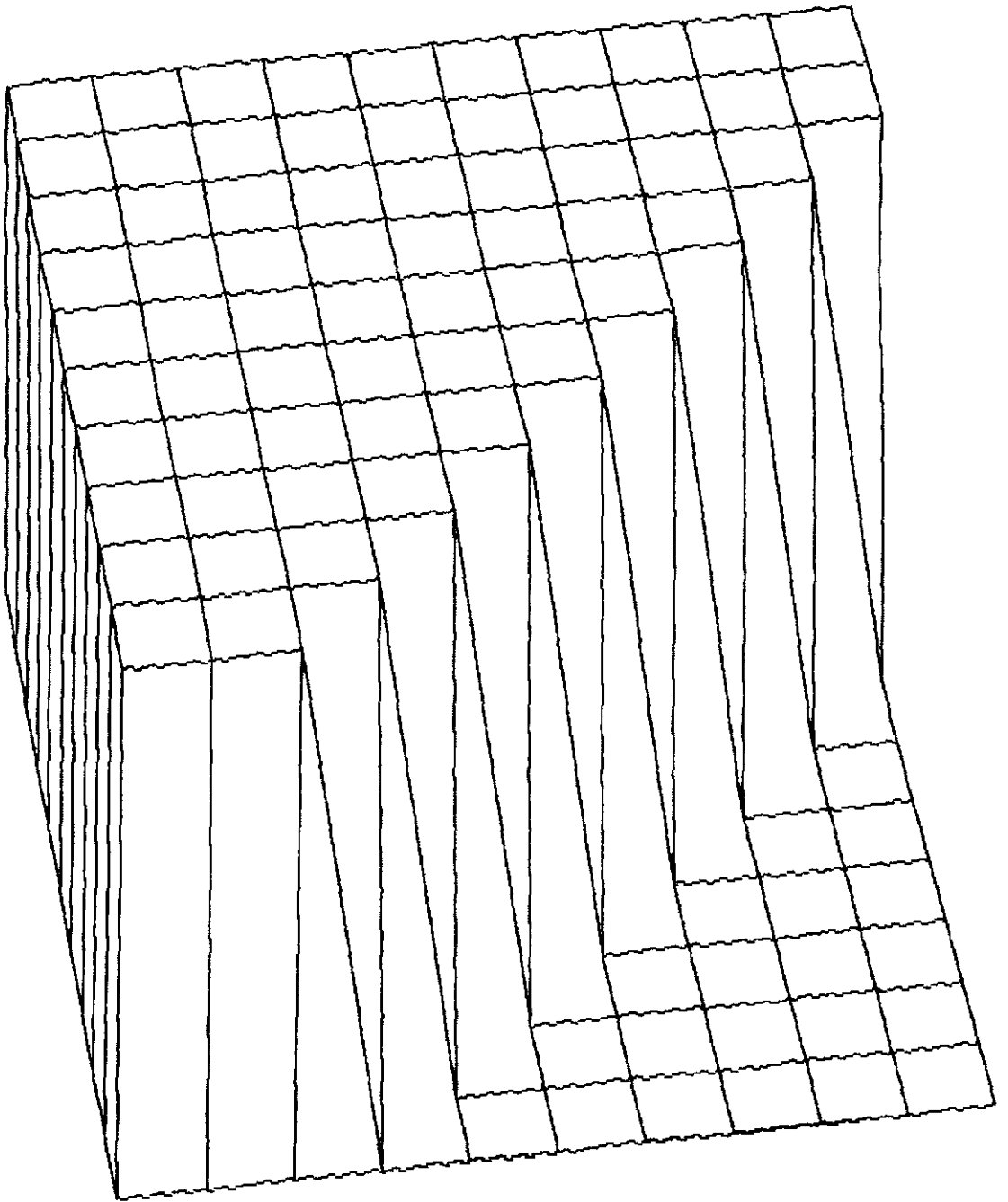
Figura 4.18



Teste N 14 Solucao P-G
Figura 4.19



Teste N 12 B-G



Teste N 12 P-G

Figura 4.21

CAPITULO V

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O esquema Streamline Upwind Petrov-Galerkin, SUPG, para problemas de difusão-convecção com o método dos elementos finitos minimiza os problemas numéricos de oscilação e amortecimento presentes na formulação tradicional de Bubnov-Galerkin, e que continuavam presente em formulações nas quais a correção de upwind não era introduzida de maneira consistente. O esquema também é válido para outras equações de transporte onde aparecem termos convectivos. Uma extensão natural é a aplicação do método a equações não lineares, como as de Navier-Stokes e Burger, [13], [14], [27].

Problemas transientes com valores muito elevados do número de Peclet, correspondendo a transporte quase que puramente convectivo, ainda fornecem soluções com razoáveis oscilações. O presente trabalho foi desenvolvido visando, principalmente, o estudo do transporte e diluição de poluentes em rios. O número de Peclet local, em casos de interes prático, dificilmente ultrapassa valores nafaixa de 80. Portanto pode-se concluir que o esquema SUPG é plenamente satisfatório para estudos de poluição em rios.

Modificações do esquema SUPG para transporte quase

puramente convectivo foram apresentadas recentemente na literatura [28], [29], [30] e [32]. O esquema correctivo SUPG acrescenta, nas funções de ponderação, um termo orientado no sentido convectivo. As modificações propostas nestes trabalhos acrescentam um segundo termo na direcção do gradiente da propria solução.

Em um trabalho recente [32] mostra-se a abordagem do caso de convecção e difusão de uma substancia que apresenta decaimento. Esta característica é de importancia no estudo da poluição já que, na prática, frequentemente o elemento a ser dispersado não é conservativo.

Uma sugestão para continuação da presente pesquisa é o estudo de uma extensão do método para casos ortotrópicos já que, quando pretende-se analisar a dispersão em uma região próxima ao lançamento, isto é dentro da distancia de boa mistura, é necessaria a aplicação de modelos bidimensionais. A dispersão longitudinal processa-se de maneira bastante distinta da transversal, requerendo modelos ortotrópicos. O esquema SUPG não pode, então, ser aplicado da maneira descrita neste trabalho, precisando modificações provavelmente na determinação do coeficiente \bar{k} de difusão artificial.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] AUGUSTO, M. C., "Determinação da Vazão em Condutos Abertos e Forçados", Tese Mestrado, COPPE - UFRJ, (1976).
- [2] VENDRAME, I. F., "Determinação Experimental do Coeficiente de Reaeração, em Rios e Canais Abertos, com Emprego de Traçadores", Tese de Mestrado, COPPE - UFRJ, (1982).
- [3] ROLDÃO, J. S. F., "Uso de Traçadores Fluorescentes Associados a Estudos em Fundações e Maciços de Terra de Barragens: Uma Nova Visão", XVI Seminario Nacional de Grandes Barragens, Belo Horizonte, (1985).
- [4] KUPPER, J. A. "Poluição de Águas Subterrâneas : Seleção de um Modelo Matemático de Dispersão Bidimensional", Tese de Mestrado, COPPE-UFRJ (1982).
- [5] KUPPER, J. A. e GUERRERO, P. "Desenvolvimento de um Modelo de Dispersão de Contaminantes em Aquíferos. Relatório N 1: Comparação de Soluções Numéricas para o Caso Unidimensional", Relatório Interno, COPPE-UFRJ (1982).
- [6] MOREIRA, J. e WROBEL, L. C., "Um Modelo de Elementos Finitos para Análise de Dispersão", Simpósio Luso-Brasileiro sobre Simulação e Modelação em Hidráulica e Recursos Hídricos, Revista Brasileira de

Engenharia, pp 189 - 203, (1983).

- [7] ROSSO, T. C. de A., "Determinação do Coeficiente de Dispersão, através de Traçadores Radioativos e Fluorescentes", Tese de Mestrado, COPPE - UFRJ, (1986).
- [8] KELLY, D. W., NAKAZAWA, S., ZIENKIEWICZ, O. C. e HEINRICH, J. C., "A Note on Upwind and Anisotropic Balancing Dissipation in Finite Element Approximations to Convective Diffusion Problems", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 15, pp 1705 - 1711, (1980).
- [9] SPALDING, D. B. "A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 4, pp 551 - 559 (1972).
- [10] CHRISTIE, I., GRIFFITHS, D. F., MITCHELL, A. R. e ZIENKIEWICZ, O.C., "Finite Element Method for Second Order Differential Equation with Significant First Derivatives", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 10, pp 1389 - 1396, (1976).
- [11] HEINRICH, J. C., HUYAKORN, P. S., ZIENKIEWICZ, O. C. e MITCHELL, A. R., "An Upwind Finite Element Scheme for

Two-dimensional Convective Transport Equation", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 11, pp 134 - 143, (1977).

[12] HEINRICH, J. C. e ZIENKIEWICZ, O. C. "Quadratic Finite Element Schemes for Two-Dimensional Convective Transport Problems", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 11, pp 1831 - 1844 (1977).

[13] BROOKS, A. N., e HUGHES, T. J. R., "Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulation for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 32, pp 199 - 259, (1982).

[14] HUGHES, T. J. R. e BROOKS, A. N., "A Theoretical Framework for Petrov-Galerkin Methods with Discontinuous Weighting Functions: Application to the Streamline Upwind Procedure", Finite Elements in Fluids, Vol. 4, pp 46 - 65, WILEY (1982).

[15] ELDER, J. W., "The Dispersion of Marked Fluid in Turbulent Shear Flow", Journal of the Fluid Mechanics, Vol. 5, pp 544 - 560, (1959).

[16] TAYLOR, G. I., "Diffusion by Continuous Movement", Proc. London Math. Soc., Serie A, Vol. 20, pp 196 - 211,

(1921).

- [17] TAYLOR, G. I., "Dispersion of Soluble Matter in Solvent Flowing Slowly Through a Tube". Proc. London Math. Soc., Serie A, Vol. 219, pp 186 - 203, (1953).
- [18] TAYLOR, G. I., "The Dispersion of Matter in Turbulent Flow through a Pipe". Proc. London Math. Soc., Serie A, Vol. 223, pp 446 - 468, (1954)
- [19] FISCHER, H. B., "The Mechanics of Dispersion in Natural Stream" Proc. ASCE, Journal Hydraulics Division, Vol. 93 pp 187 - 216, (1967).
- [20] FISCHER, H. B., "Dispersion Predictions in Natural Stream", Proc. ASCE, Journal Sanit. Eng. Div, Vol. 94, pp 927 - 944, (1968).
- [21] NORDIN, C. F. e SABOL, G. V., "Empirical Data on Longitudinal Dispersion in River", U. S. Geological Survey Water Resource Investigation, pp 20-24, (1974).
- [22] CUNGE, J. A., HOLLY, F. M. e VERWEY, A., "Practical Aspects of Computational River Hydraulics". Pitman Advanced Publishing Program, (1981).
- [23] PAYRE, G., DE BROISSA, M. e BAZINET, J., "An Upwind Finite Element Method via Numerical Integration", International Journal for Numerical Methods in

Engineering, Vol. 18, pp 381 - 396, (1982).

- [24] ATKINSON, J. D., e HUGHES, T. J. R., "Upwind Finite Element Schemes for Convective-Difusive Equations", Charles Kolling Laboratory Tech. note C-2, The University of Sydney, Sydney, Australia, (1977).
- [25] MORTON, K. W. e BARRET, J. W., "Optimal Finite Element Methods for Difusion-Convection Problems", Boundary and Interior Layers: Computational and Asymptotic Methods, pp 134- 148, Boole, Dublin, (1980).
- [26] HUYAKORN, P. S. e NILKHA, K., "Solution of Transient Transport Equation Using an Upstream Finite Element Scheme", Applied Mathematical Modelling, Vol. 3, pp 7 - 17, (1979).
- [27] DONEA, J., GIULIANI, S., LAVAL, H. e QUARTAPELLE, L. "Time-accurate Solution of Advection-Diffusion Problems by Finite Elements" Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 45, pp 123 - 145, (1982)
- [28] MIZUKAMI, A. e HUGHES, T. J. "A Petrov-Galerkin Finite Element Method for Convection-Dominated Flows: An Accurate Upwind Technique for Satisfying the Maximum Principle" Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 50, pp 181 - 193, (1985).

- [29] HUGHES, T. J., MALLET, M. e MIZUKAMI, A. "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: II. Beyond SUPG" Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 54, pp 341 - 355, (1986)
- [30] CARMO, E. G. e GALEÃO, A. C. "Uma Formulação Consistente do Método de Elementos Finitos para Resolução de Problemas de Transporte Difusivo-Convectivo" Revista Brasileira de Ciências Mecânicas, Vol. VIII, pp 309-340, (1986).
- [31] HUGHES, T. J. R., "A Simple Scheme for Developing Upwind Finite Elements", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 12, pp 1359 - 1365, (1978).
- [32] TEZDUYAR, T. E. e PARK, Y. J., "Discontinuity-Capturing Finite Element Formulations for Nonlinear Convection-Diffusion-Reaction Equations", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 59, pp 307 - 325, (1986).