

**EFAD: UM CÓDIGO NUMÉRICO PARA RESOLVER PROBLEMAS DE  
TIPO ADVECCÃO-DIFUSÃO PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS**

**Jorge H. Silvestrini**

**Edith B. Camaño Schettini**

Alunos do Curso de Pós-Graduação em  
Engenharia de Recursos Hídricos  
Instituto de Pesquisas Hidráulicas  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

**Nara M. Luzzi Rosau**

Professora, Instituto de Pesquisas Hidráulicas  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Porto Alegre - Brasil

**RESUMO**

Apresenta-se aqui um código numérico para resolver problemas governados por um tipo de equação diferencial de 2ª ordem, bi-dimensional, transiente, ligada aos casos de fluxo em meio poroso, transporte de uma determinada propriedade e escoamento irrotacional, através do método dos elementos finitos. As matrizes dos elementos foram calculadas a partir do método dos resíduos ponderados com o critério de Galerkin. O código permite trabalhar com elementos triangulares e retangulares lineares. Uma análise de erros e convergência para os dois tipos de equações mais usadas é efetuada a partir de dois problemas com solução analítica conhecida. Um destes problemas refere-se a difusão pura e o outro ao transporte uni-dimensional transiente de uma propriedade. Duas aplicações do código são apresentadas.

**ABSTRACT**

A computer program is presented for solving two-dimensional transient problems governed by a second order differential equation. The problem deals with groundwater flow, irrotational flow and transport of any substance, using the Finite Element Method. The element matrices are calculated using the Galerkin Weighted Residual Method. The program can deal with triangular convergence is performed using two problems with given analytical solutions, the first one refers to pure diffusion and the second to the one-dimensional transport of a given substance. Two applications of the program are presented.

## INTRODUÇÃO

Uma importante parte dos problemas que o engenheiro enfrenta hoje em dia podem ser analisados a partir da modelação matemática. Boa parte destes problemas, principalmente os ligados à hidromecânica, podem ser descritos por uma equação diferencial de segunda ordem, do tipo de advecção-difusão bi-dimensional, transiente, ou uma simplificação desta. Como exemplo podem-se citar o fluxo em meios porosos saturado e não-saturado, o transporte de massa ou calor num meio contínuo e o escoamento irrotacional.

Com o objetivo de atingir estes tipos de problemas foi desenvolvido um código numérico que utiliza como ferramenta o método dos elementos finitos. A escolha deste método baseia-se principalmente, no fato de ser muito versátil na incorporação de condições de contorno, na possibilidade de se realizar uma boa discretização do domínio, na relativa facilidade que apresenta sua ampliação para casos tri-dimensionais e, por último, sua simplicidade para compor programas gerais como o do tipo apresentado.

O desenvolvimento de códigos numéricos tem sido uma tarefa contínua, principalmente na área de análise de Estruturas e Mecânica dos Fluidos, aportando soluções a uma grande quantidade de problemas de engenharia. Estes códigos, porém, necessitam de um suporte computacional que não é sempre disponível. Com o objetivo de atingir uma faixa de usuários com disponibilidade de computadores tipo PC ou semelhante, é que foi desenvolvido o código EFAD.

## EQUACIONAMENTO DO PROBLEMA

O problema geral transiente, num domínio bi-dimensional  $\Omega$ , limitado pela fronteira  $\Gamma$ , é regido por:

$$\alpha \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial \phi}{\partial x} - u\phi \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial \phi}{\partial y} - v\phi \right) + S + Q_1(x_i) \cdot \delta(x_i) \quad (1)$$

onde  $\phi$  é a variável incógnita e  $\alpha$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $D_x$ ,  $D_y$ ,  $Q_1(x_i)$  e  $S$  são funções dadas e  $\delta(x_i)$  é o delta de Kronecker.

A solução de (1) estará sujeita às condições de contorno |1|:

$$\text{- tipo Dirichlet: } \phi = \bar{\phi}(x, y, t) \text{ em } \Gamma_1 \quad (2.a)$$

$$\text{- tipo Neumann: } D_x \frac{\partial \phi}{\partial x} n_x + D_y \frac{\partial \phi}{\partial y} n_y + q = 0 \text{ em } \Gamma_2 \quad (2.b)$$

$$\text{- tipo Cauchy: } D_x \frac{\partial \phi}{\partial x} n_x + D_y \frac{\partial \phi}{\partial y} n_y + h(\phi - \phi_m) = 0 \text{ em } \Gamma_3 \quad (2.c)$$

e a condição inicial:

$$\phi(x, y, 0) = \phi_0(x, y) \text{ em } \Omega \quad (3)$$

onde  $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 = \Gamma$ ,  $\bar{\phi}(x, y, t)$  é a condição prescrita na fronteira  $\Gamma_1$ ,  $n_x$  e  $n_y$  são as componentes do vetor normal à curva  $\Gamma_2$ ,  $q$  e  $h$  são funções conhecidas que atuam em  $\Gamma_2$  e  $\Gamma_3$  respectivamente,  $\phi_m$  é uma função conhecida que atua fora do domínio  $\Gamma$  e  $\phi_0(x, y)$  é o valor conhecido de  $\phi$  para  $t=0$ .

Deve-se salientar que determinados problemas como o de fluxo, em meio poroso não-saturado, ou o caso de aquífero livre, são não-lineares. Portanto, será de interesse que os parâmetros  $u$ ,  $v$ ,  $D_x$ ,  $D_y$  e  $\alpha$  admitam ser função de  $\phi$ ,  $x$ ,  $y$  e  $t$ .

Esta primeira apresentação do código numérico será destinado a problemas lineares. Deixa-se, portanto, para uma futura apresentação os casos não-lineares.

Como foi dito anteriormente a meta da utilização do código foi fixada para determinados tipos de problemas. Estes problemas são listados na Tabela 1 com o correspondente significado físico da variável dependente, os parâmetros e as condições de contorno envolvidas.

Vários destes parâmetros dependem da propriedade que se está transportando. Por exemplo: no caso de transporte de massa, o termo de perda ou ganho  $S$ , depende do tipo da substância representada por  $\phi$ . Assim, se  $\phi$  é:

- Substância conservativa:  $S = 0$  (4.a)

- DBO (Demanda Bioquímica de Oxigênio)

$$S = - (k_1 + k_3) \phi + L_a \quad (4.b)$$

- OD (Oxigênio Dissolvido)

$$S = - k_1 \phi_{DBO} + k_2 (C_s - \phi) - D_b \quad (4.c)$$

onde  $k_1$ : proporção de reação carbonácea de DBO,  $k$ : coeficiente de reateração,  $k_3$ : coeficiente de remoção de DBO por sedimentação e adsorção,  $L_a$ : proporção de adição de DBO no trecho,  $C_s$ : coeficiente de saturação de OD e  $D_b$ : a remoção de oxigênio devido a depósitos bentônicos, respiração de plantas ou aumento de oxigênio através de fotossíntese [ 2 ] .

No caso de aquífero semiconfinado, o termo  $S$  representa uma recarga ou descarga da camada semiconfinante sobre o aquífero, e é avaliado como:

$$S = (\phi' - \phi) k' / d' \quad (4.d)$$

onde  $k'$  é a permeabilidade do aquífero,  $d'$  sua espessura,  $\phi'$  é seu nível piezométrico e  $\phi$  o nível piezométrico do aquífero.

#### METODOLOGIA DE CÁLCULO

O código numérico desenvolvido usa o método dos resíduos ponderados com o critério de Galerkin para avaliar as matrizes de rigidez do elemento e os vetores carga. Desta forma a abordagem tradicional [ 1, 3 ] requer que:

$$\int_{\Omega} (e) [ L(\phi^{(e)}) - f^{(e)} ] W_i^{(e)} d\Omega = 0 \quad (5)$$

com  $\phi^{(e)} = [ N^{(e)} ] \{ \phi^{(e)} \}$  (6)

onde o índice (e) indica elemento,  $N^{(e)}$  são as funções forma,  $f^{(e)}$  é o vetor carga e  $\phi^{(e)}$  o vetor de valores nodais para um elemento genérico.

Substituindo (1) em (5) obtém-se a expressão geral do resíduo

$$\{R^{(e)}\} = \int_{\Omega^{(e)}} \{N^{(e)}\}^T \left[ D \nabla^2 \phi - \text{div} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \text{div} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial \phi}{\partial t} + QI + S \right] d\Omega^{(e)} \quad (7)$$

e uma matriz inter-elemento da forma:

$$\{I^{(e)}\} = \int_{\Gamma_1} \{N^{(e)}\}^T h \phi d\Gamma - \int_{\Gamma_1} \{N^{(e)}\}^T h \phi_n d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \{N^{(e)}\}^T q d\Gamma \quad (8)$$

As funções forma escolhidas foram as lineares do elemento triangular e retangular [4]. Portanto substituindo essas funções formas na expressão (7) e (8), e usando a formulação consistente para o termo transiente, obtemos:

$$\{R\} = [C] \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\} + [K] \{\phi\} - \{F\} \quad (9)$$

onde  $[C]$  é a matriz de capacitância,  $[K]$  a matriz de rigidez, na qual foram colocados os termos de difusão, advecção e decaimento, e  $\{F\}$  o vetor carga, responsável pela excitação do domínio.

Considerando agora uma discretização em diferenças finitas de tipo regressivo para a derivada temporal e operando, a equação (9) fica:

$$\begin{aligned} \{[C] + \theta \Delta t [K]\} \{\phi\}_{t+\Delta t} &= \{[C] - (1-\theta) \Delta t [K]\} \{\phi\}_t + \\ &+ \Delta t \{(1-\theta) \{F\}_t + \theta \{F\}_{t+\Delta t}\} \end{aligned} \quad (10)$$

A escolha do  $\theta$  nos dará os quatro esquemas mais populares:

- $\theta = 0$  Explícito (Condicionalmente estável)
- $\theta = 1/2$  Crank Nicholson (Incondicionalmente estável)
- $\theta = 2/3$  Galerkin (Incondicionalmente estável)
- $\theta = 1$  'Full Implicit' (Incondicionalmente estável)

A equação final a resolver será do tipo:

$$[A] \{\phi\}_{t+\Delta t} = [F] \{\phi\}_t + \{F'\}$$

ou

$$[A] \{\phi\}_{t+\Delta t} = \{F''\} \quad (11)$$

A matriz  $[A]$  é uma matriz banda e simétrica se os termos advectivos não são incorporados (caso de fluxo em meio poroso). A resolução de (11) é feita através da eliminação de Gauss.

### ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA

Estas análises foram feitas para dois tipos de equações. A primeira referente ao problema de difusão pura ligado aos casos de fluxo em meio poroso e a outra ao problema de advecção-difusão uni-dimensional ligada aos casos de transporte de uma determinada propriedade.

Caso 1: O problema a resolver é

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{\pi^2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad \text{em } \Omega \quad (12)$$

Condição de contorno:  $\phi(t) = 0$  em  $\Gamma$

Condição inicial :  $\phi(x, y, 0) = \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y/2)$

Solução analítica :  $\phi(x, y, t) = \exp(-5t/4) \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y/2)$

$0 < x < 1$  e  $0 < y < 2$

A medida do erro foi avaliada a partir do erro quadrático médio (EQM) referido ao valor médio da solução analítica. O problema foi resolvido para três diferentes malhas, mantendo o parâmetro  $2 \Delta x \Delta t / (\Delta x)^2 = 1$ . Este parâmetro permite a determinação do  $\Delta t$  nestes tipos de problemas e assegura a estabilidade incondicional do mesmo [5]. Os erros calculados para cada discretização e para  $\theta = 1/2, 2/3$  e  $1$  são apresentados na Tabela (2.a).

A experimentação numérica demonstrou que, para o tipo de equação tratada (difusão pura, sem termo de fonte ou sumidouro) a melhor discretização temporal é dada pelo método de Galerkin, ou seja,  $\theta = 2/3$ , independentemente da discretização escolhida.

Caso 2: O problema a resolver é

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - u \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad x > 0 \quad 0 < t < T \quad (13)$$

Condição de contorno:  $\phi(0, t) = 1$   $t > 0$   
 $\phi(L, t) = 0$

Condição inicial :  $\phi(x, 0) = 0$   $x > 0$

Solução analítica :  $\phi(x, t) = 1/2 \{ \text{erfc} [(x-ut)/2 \sqrt{Dt}] + \exp(ux/D) \cdot \text{erfc} [(x+ut)/2 \sqrt{Dt}] \}$

onde  $\text{erfc}(x)$  é a função erro complementar [6].

Como é amplamente abordado pela literatura especializada a resolução do problema (13) é dependente da relação existente entre os processos de advecção e difusão [7, 8]. Esta relação está dada pelo número de Peclet ( $Pe = u \Delta x / D$ ). Assim, para  $Pe$  baixo ( $< 2$ ) a difusão predomina, a equação é quasi parabólica e sua solução numérica não apresenta problemas significativos. No caso contrário, ou seja,  $Pe > 2$ , a convecção domina, o problema é mais hiperbólico que parabólico e a

solução apresenta oscilações. Uma das técnicas usadas para evitar essas oscilações é acrescentar ao problema original uma difusão artificial [7]. Esta técnica assegura a estabilidade mas prejudica a precisão dos resultados.

Com o objetivo de analisar um pouco melhor estas duas situações, foram organizados três testes de convergência. O primeiro é para um problema predominantemente difusivo, o segundo para um problema predominantemente convectivo sem difusão artificial e o terceiro convectivo com difusão artificial. O cálculo do erro foi o mesmo do caso anterior.

O critério de escolha do passo do tempo é definido por:

$$\Delta t < = \Delta x / u \quad (14.a)$$

$$\Delta t < = 0,5 (\Delta x)^2 / D \quad (14.b)$$

tomando o mais restritivo dos dois [5]. Para os três casos mencionados o L foi tomado igual a 8, T = 10 e escolheu-se  $\Delta x = 0,5, 0,25$  e 0,125. Os resultados obtidos para cada sub-caso são:

- $Pe < 2$ . Como este caso é predominantemente difusivo a determinação do  $\Delta t$  foi através da (14.b) tomando  $\Delta t = 0,5(\Delta x)^2/D$ . A tabela 2.b apresenta os resultados em função do NCM, reafirmando os obtidos para o Caso 1, com  $\theta = 2/3$ .
- $Pe > 2$ , sem difusão artificial. Neste caso o parâmetro de controle foi o número de Courant tomado igual a 1. Na tabela 2.c podem se observar os resultados, nos quais os erros são devido as oscilações geradas pelo modelo (Figura 1).
- $Pe > 2$ , com difusão artificial. Neste caso o número de Courant também foi mantido igual a 1. A difusão artificial é calculada por [7]:

$$D' = \alpha' \Delta x |u| / 2 \quad \text{com } \alpha' = \coth(Pe/2) - (2/Pe)$$

Os resultados apresentados na tabela 2.d e na figura 1 mostram a diminuição de precisão com respeito ao caso anterior.

Basicamente o benefício de obter uma situação estável não oscilante, é compensado com um "custo" na precisão. Isto é devido a que a introdução da difusão artificial na equação (13) elimina a difusão numérica ( $\partial^2 \phi / \partial x^2$ ) mas acrescenta erros de dispersão de tipo  $\partial^2 \phi / \partial t^2$  e  $\partial^3 \phi / \partial x^2 \partial t$  [7]. Uma forma de eliminar estes erros foi apresentada por Heinrich e Yu, [8], através do uso de funções testes especiais (método de Petrov-Galerkin em espaço e tempo).

Como em nosso caso o erro obtido cai dentro dos erros de medição normais, se considera que uma solução com difusão artificial eliminaria o problema na primeira instância. Se não for assim, deverá se recorrer a formular o problema da maneira apresentada em [8].

#### APLICAÇÕES

São apresentadas duas aplicações do código EFAD. A primeira está

relacionada ao cálculo de níveis piezométricos num campo de bombeamento e a segunda ao transporte de massa num domínio bi-dimensional.

Para o primeiro caso simulou-se a variação de níveis piezométricos do aquífero livre apresentado por Boonstra e De Ridder [9,10]. O aquífero é excitado pela presença de 5 bombas que extraem a água no período de seca e por uma recarga no período restante devido a percolação profunda. Na Figura 2 apresenta-se um croquis do aquífero. O domínio foi discretizado em 147 triângulos que compõem 89 nós. As condições de contorno são as seguintes:

- De A a B temos um rio que atua como condição de contorno de nível prescrito.
- De B a C temos uma falha impermeável a qual é considerada como condição de contorno de fluxo zero.
- De C a A temos uma condição de contorno de fluxo prescrito.

As características hidráulicas do aquífero e a condição inicial de nível piezométrico são conhecidas, e se dispõe dos níveis observados nos poços para o período de um ano (dados mensais).

Os resultados da simulação são apresentados na Figura 3 para os poços 2 e 5. Deve-se salientar que como o aquífero é livre, as características hidráulicas não-lineares do mesmo foram linearizadas tomando em todos os casos uma situação média entre a condição inicial e os resultados finais.

No segundo caso foi simulado o exemplo de transporte de massa apresentado por Smith et al [11]. Neste caso os parâmetros envolvidos foram:

$$u = 0,25 \text{ m/s} \quad v = 0$$

$$D_x = D_y = 2 \text{ m}^2/\text{seg}$$

As condições de contorno foram definidas como:

$$\phi = 0 \quad \text{em} \quad x = 0$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \text{em} \quad y = 0 \quad \text{e} \quad y = L$$

onde L é a largura do domínio.

A excitação do domínio é feita através de condição inicial, definida como:

				0					
				0	250	0			
				0	250	500	250	0	
			0	250	500	750	500	250	0
		0	250	500	750	1000	750	500	250
		0	250	500	750	500	250	0	
			0	250	500	250	0		
				0	250	0			

O domínio foi discretizado em 400 elementos triangulares e 231 nós. Como nosso objetivo foi a reprodução dos resultados obtidos por Smith et Allii, tomou-se os mesmos critérios de discretização temporal e espacial. Os resultados apresentados na Figura 4 para  $t=2500$  seg e para a linha central ( $y=L/2$ ), coincidem com os obtidos pelos autores.

As oscilações que aparecem na figura poderiam ser eliminadas através da determinação de um adequado  $\alpha$  e  $D$  como foi visto anteriormente.

### CONCLUSÕES

Apresentou-se um código numérico, denominado EFAD, que lida com problemas que podem ser representados matematicamente por uma equação do tipo de advecção difusão. A confiabilidade do código foi testada a partir de dois casos com solução analítica conhecida. Para o caso de difusão pura foram obtidos resultados de alta precisão. Para o caso de advecção-difusão unidimensional os resultados podem ser considerados razoáveis dentro dos níveis de precisão desejáveis na hidrologia e hidráulica.

Dois simulações a casos de interesse prático, referidas da bibliografia, indicam um ajuste razoável.

Como foi dito anteriormente pretende-se que o código EFAD resolva também os problemas não-lineares comuns para esse tipo de equação. Esta tarefa, em andamento, permitirá ampliar sua aplicação para o caso de fluxo em meio poroso não-saturado, tema este de grande interesse para a área de irrigação e drenagem.

### AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Nelson Luna Caicedo pelas múltiplas sugestões dadas durante a realização do trabalho.

### REFERÊNCIAS

1. Neuhner, K.H., "The FEM for Engineers". John Wiley & Sons, 1975.
2. Tucci, C.E.M., "Modelos Matemáticos em Hidrologia e Hidráulica", Revista Brasileira de Engenharia, 1986.
3. Rao, S.S., "The FEM in Engineering", Pergamon Press, 1982.
4. Segerlind, L.J., "Applied Finite Element Analysis", 2ª ed, John Wiley and Sons, 1984.
5. Bear, J., Verruljt, A., "Modeling Groundwater Flow and Pollution", D.Reidel Publishing Company, 1987.
6. Abramovits, M. and Stegun, I.A., "Handbook of Mathematical Functions", Dover, New York, 1965.
7. Heinrich, J.C., Envia, E., "Finite Element Techniques in Transport Phenomena", Proc. 4th Int. Conf. on Finite Elements in Water Resources, Springer-Verlag, 1982. pp.14-27, 14-40.
8. Heinrich, J.C., Yu Chung-Chy, "On the Solution of the time-dependent Convection-Diffusion Equation by the FEM", na Mecânica Computacional, Volumen 3, 1983, pp. 23-32.



9. Boonstra, J., de Rider, W.A., "Numerical Modelling of Groundwater basins", ILRI Publication 29, 1981.
10. Roman, L.M., "Calibragem de Aquíferos Regionais Usando Funções de Influência", Dissertação de Mestrado, Instituto de Pesquisas Hidráulicas, UFRGS, 1987.
11. Smith, I.M., Farraday, R.V. and O'Connor, B.A., "Rayleigh-Ritz and Galerkin Finite Elements for Diffusion-Convection Problems", Water Resources Research, Vol.9, nº 3, 1973, pp.593-606.

Problema	$\phi$	$D_x, D_y$	$u, v$	$Q$	$\alpha$	$S$	$q$	$n$
Transporte de massa num meio contínuo	Concentração	Coefficientes de dispersão longitudinal e transversal	Velocidades advectivas	-	1	Decaimento ou acréscimo de massa	Fluxo de massa no contorno	-
Transporte de calor num meio contínuo	Temperatura	Coefficientes de transferência de calor	Velocidades advectivas	Fonte de calor interna	1	-	Fluxo de calor no contorno	Coefficientes de transferência de calor p/convecção
Fluxo em meio poroso saturado	Nível piezométrico	Transmissividade	-	Recarga ou descarga	Coefficiente de armazenamento	Recarga do aquífero semiconfinado	Fluxo no contorno	-
Fluxo em meio poroso não-saturado	Conteúdo de umidade ou tensão de sucção	Coefficientes de difusão	Termo gravitatório	-	1 ou capacidade específica de água	-	Taxa de recarga	-
Fluxo Irrotacional	Potencial de velocidade ou função corrente	1	-	-	-	-	Velocidade no contorno	-

Tabela 1. Identificação do problema e parâmetros envolvidos.

a)	$\theta$	0,5	0,67	1
	NE			
	50	7.64	2.25	10.39
	100	4.28	1.74	5.39
	200	1.98	0,29	3.49
b)	$\theta$	0,5	0,67	1
	$\Delta x$			
	0,5	8.30	7.66	9.10
	0,25	2.08	2.06	2.88
	0,125	0.56	0.56	0.86
c)	0,5	16.42	16.60	25.48
	0,25	6.03	8.84	16.82
	0,125	1.68	4.62	10.66
d)	0,5	21.76	23.50	33.04
	0,25	12.64	16.64	22.40
	0,125	5.48	8.78	13.60

**Tabela 2:** Erro Quadrático médio para os casos 1 e 2 da análise de convergência.

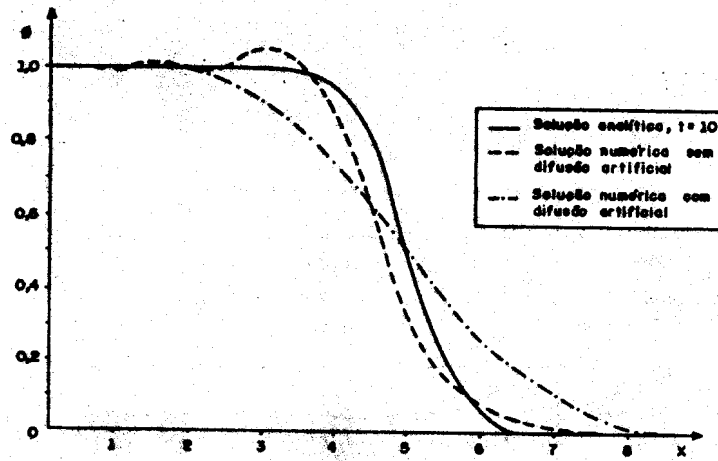


Figura 1. Comparação entre a solução analítica e numérica para o Caso 2 (com  $Pe = 2$ ).

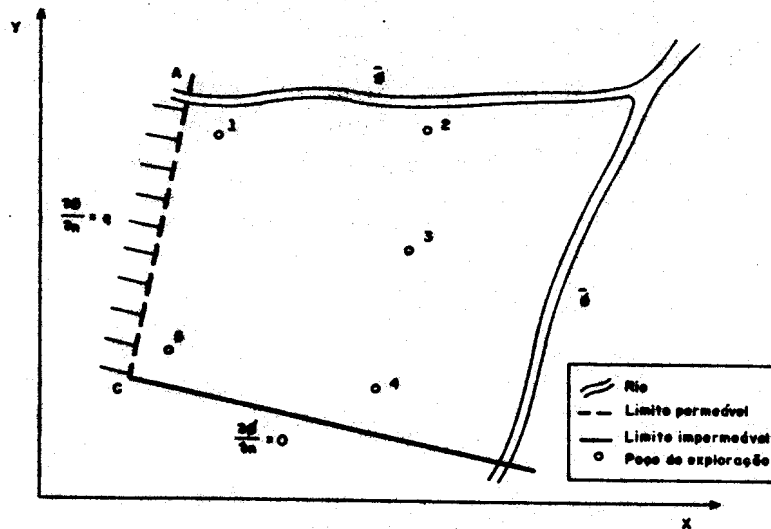


Figura 2. Esquema do aquífero.

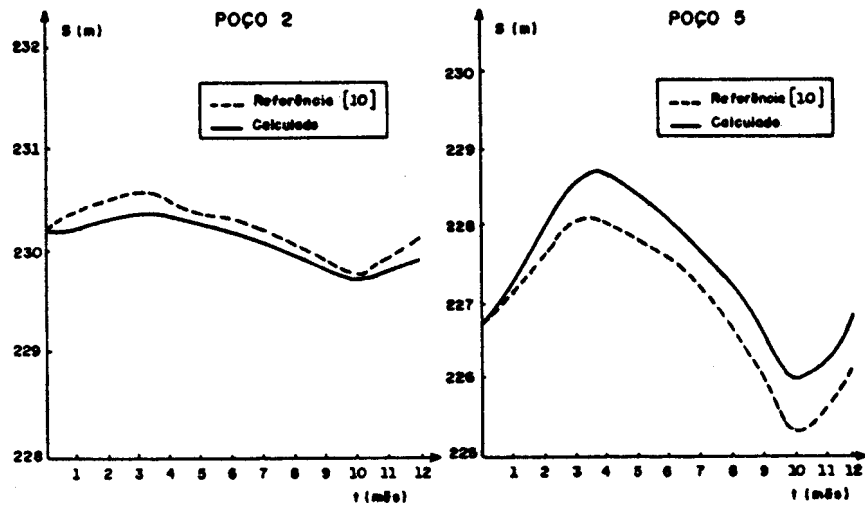


Figura 3. Comparação de níveis de rebaixamento.

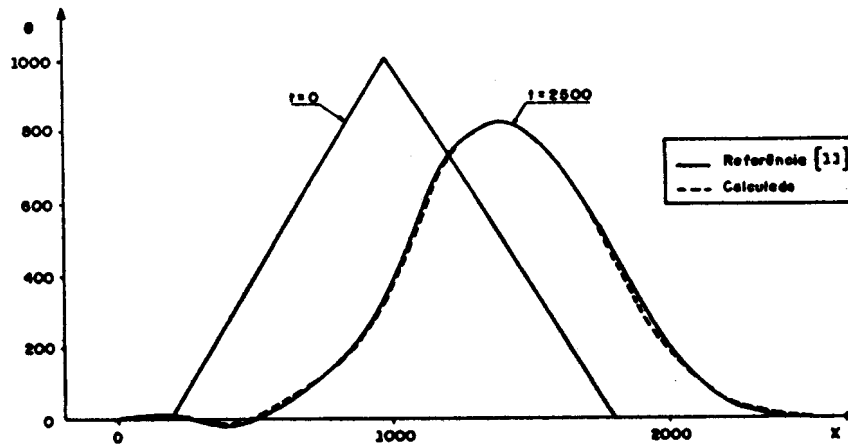


Figura 4. Comparação de resultados com a solução de Smith et al [11], ao longo do eixo  $x$  ( $y=L/2$ ).

