

MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS COM INTEGRAÇÃO REDUZIDA NA SIMULAÇÃO DA CONTAMINAÇÃO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Claudia M. Dias¹; Eduardo L. M. Garcia; Abimael F. D. Loula; Alvaro L. G. A. Coutinho²

RESUMO

A modelagem do transporte de um contaminante em um aquífero pelo método dos elementos finitos requer a solução de um sistema acoplado de equações diferenciais parciais para pressões, velocidades e concentração do soluto. De forma a reduzir os custos computacionais envolvidos, utiliza-se neste trabalho a uma técnica de integração reduzida para avaliar as matrizes de elemento. Mostra-se através de experimentos numéricos que aumenta-se a eficiência do código computacional sem comprometer a precisão dos resultados.

PALAVRAS-CHAVE

Elementos Finitos, Integração Reduzida, Águas Subterrâneas

1. INTRODUÇÃO

Águas subterrâneas são de imensa importância para o ser humano, uma vez que 97 % da água doce disponível na Terra encontra-se no subsolo. A partir dos anos 80, a ênfase nas pesquisas sobre águas subterrâneas nos países industrializados mudou de avaliação quantitativa para avaliação e controle da água [1]. Recentemente, o problema da contaminação das águas subterrâneas tem preocupado muitos pesquisadores [2]. As águas podem ser contaminadas por resíduos industriais perigosos, chorumes de depósitos de lixo urbano, derramamento de petróleo, uso de fertilizantes, pesticidas, herbicidas, e ainda, por resíduos radiativos. A movimentação de um contaminante em um aquífero depende das propriedades deste contaminante, da geologia do aquífero e da velocidade das águas. O processo de transporte de um contaminante pode ser basicamente descrito como sendo advectivo-difusivo-reativo [3]. Assim, os problemas de contaminação são complexos e requerem uma abordagem interdisciplinar. A modelagem computacional pode ser útil na análise do escoamento das águas, onde é possível realizar simulações de diferentes situações e assim estimar e prevenir seus efeitos. Muitos modelos foram desenvolvidos usando diferentes métodos numéricos como o método das características [4], método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos [5,6], entre outros. O modelo aqui adotado é o de escoamento de um contaminante miscível em um meio

1) Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC / MCT). Av. Getúlio Vargas, 333, Quitandinha, CEP 25651-070, Petrópolis, RJ, Brasil - e-mail: mazga,edg,aloc@lncc.br

2) Programa de Engenharia Civil - COPPE/ Universidade Federal do Rio de Janeiro. Caixa Postal 68506, CEP 21945-970, Rio de Janeiro, RJ, Brasil - e-mail: alvaro@coc.nfrj.br

poroso saturado, que requer a solução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais. A primeira é a equação da pressão, que associada à Lei de Darcy fornece a distribuição do fluxo no meio poroso considerado. A segunda é a equação de transporte, que descreve o processo de advecção-difusão-reação, e que nos fornece a distribuição da concentração do contaminante no decorrer do tempo. Na modelagem computacional pelo método dos elementos finitos utilizamos a formulação clássica de Galerkin para o cálculo do campo de pressões, e a formulação estabilizada SUPG [7] para a equação de transporte. O objetivo do presente trabalho é analisar o comportamento do elemento quadrilátero bilinear com integração reduzida [8, 9] tanto para a equação de pressões quanto para a equação de transporte. A utilização da integração reduzida visa diminuir o tempo necessário para a avaliação dos termos das matrizes de elemento e resíduos, responsável por grande parte do tempo de processamento, e desta forma tornar o código mais eficiente do ponto de vista computacional. A precisão dos resultados é assegurada pela utilização de uma estratégia de estabilização [9].

Sendo assim, a seção 2 do trabalho apresenta o modelo matemático para o escoamento incompressível de um contaminante miscível em um meio poroso saturado. A seção 3 apresenta os aspectos da integração reduzida e a estratégia de estabilização adotada. Já a seção 4, refere-se aos experimentos numéricos de validação da metodologia utilizada neste trabalho. Em seguida, na seção 5, são apresentadas as principais conclusões do trabalho.

2. ESCOAMENTO INCOMPRESSÍVEL DE UM CONTAMINANTE MISCÍVEL EM MEIO POROSO SATURADO

MODELO MATEMÁTICO

O modelo para a simulação de transporte de um soluto (componente químico dissolvido) ou contaminante, em um escoamento subterrâneo objetiva o cálculo das concentrações deste soluto no tempo. Basicamente, tal cálculo requer a solução numérica de duas equações matemáticas que descrevem o fluxo subterrâneo e o processo de transporte. Estas equações podem ser obtidas a partir do princípio fundamental da conservação de massa do fluido. O modelo matemático adotado será o que representa o escoamento incompressível miscível através de um meio poroso rígido saturado. O fluxo de um fluido incompressível em um aquífero confinado é dado pela equação da continuidade ou conservação de massa e pela Lei de Darcy,

$$-\operatorname{div} \mathbf{v} = q \quad \text{em } \Omega \quad (1)$$

$$\mathbf{v} = -\frac{K}{\varphi} \nabla p \quad \text{em } \Omega \quad (2)$$

Sujeitas à seguinte condição de contorno,

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \partial\Omega \quad (3)$$

onde, \mathbf{v} é o vetor velocidade de Darcy com componentes (u_x, u_y) , p é a pressão estática, K é a condutividade hidráulica do meio poroso, φ é a porosidade efetiva do meio poroso, q é o fluxo volumétrico, Ω representa o domínio espacial do problema, \mathbf{x} são as coordenadas cartesianas e \mathbf{n} é o vetor unitário normal à fronteira $\partial\Omega$.

O princípio da conservação de massa do fluido requer que a massa líquida (soluto) que entra e sai do aquífero, durante um dado intervalo de tempo, deve ser igual ao somatório das massas armazenadas neste reservatório, no mesmo intervalo de tempo. Esta relação é expressa matematicamente pela equação [10],

$$\varphi \frac{\partial c}{\partial t} + \varphi v_i \frac{1}{R_f} \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{1}{R_f} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varphi D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{1}{R_f} f (c^* - c) + \varphi \lambda c = 0 \quad i, j = 1, 2 \quad (4)$$

Sujeitas às seguintes condições de contorno e inicial:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{v}) \nabla c \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{em } \partial\Omega \\ c(\mathbf{x}, 0) &= c_0(\mathbf{x}) && \text{em } \Omega \end{aligned} \quad (5)$$

onde c é a concentração do soluto, c^* é o valor da concentração nos poços, f é o fluxo volumétrico nos poços/fontes, λ é a taxa de decaimento, $[0, T]$ é o intervalo de tempo de interesse, e R_f o fator de retardo. O tensor de dispersão-difusão \mathbf{D} é dado por,

$$\mathbf{D} = (D_m + \alpha_T \|\mathbf{v}\|) \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|} \quad (6)$$

Para \mathbf{I} o tensor unitário, α_L e α_T , dispersividades longitudinal e transversal, respectivamente, e D_m coeficiente de difusão isotrópico. Tais coeficientes são considerados constantes no tempo [11].

MODELO COMPUTACIONAL

- Discretização Espacial

Como na maioria dos casos práticos a solução analítica das equações governantes não pode ser obtida diretamente. Portanto, métodos numéricos são utilizados, como o método dos elementos finitos, onde as variáveis principais são substituídas por variáveis discretas de subíndice h , definidas nos nós de uma malha de elementos finitos.

Equação da Pressão

Considerando p_h a aproximação usual de elementos finitos para a pressão, a formulação clássica do método de Galerkin para a equação da pressão (1)(2) é [7],

$$\int_{\Omega} \left(\frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \cdot \nabla p_h \right) \cdot \nabla w_h \, d\Omega - \int_{\Omega} q w_h \, d\Omega = 0 \quad \forall w_h \in U_h \quad (7)$$

onde w_h é a função discreta de ponderação e U_h é o espaço de elementos finitos de polinômios de grau ≤ 2 . Introduzindo a aproximação p_h em (7), chega-se à seguinte formulação de elementos finitos,

$$p_i \int_{\Omega} \left(\frac{k_{ij}}{\varphi \mu} \cdot \nabla N_j \right) \cdot \nabla N_i \, d\Omega - \int_{\Omega} q N_i \, d\Omega = 0 \quad i, j = 1, \dots, 4 \quad (8)$$

onde \mathbf{N} são as funções de forma Lagrangeanas. Esta formulação pode ser escrita na forma matricial, $\mathbf{S} \mathbf{p} = \mathbf{q}$. Onde \mathbf{S} é a chamada matriz global, simétrica e positiva-definida, \mathbf{q} é o vetor de

termos independentes e \mathbf{p} é o vetor das pressões nodais incógnitas. A matriz \mathbf{S} e o vetor \mathbf{q} são obtidos a partir das contribuições dos elementos. Para o elemento quadrilátero bilinear, tem-se a seguinte matriz de elemento onde n_{el} é o número de elementos da malha,

$$\mathbf{S} = \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{S}^e \quad \text{onde} \quad \mathbf{S}_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \nabla N_i \frac{k_{ij}}{\phi \mu} \nabla N_j \, d\Omega \quad i, j = 1, \dots, 4 \quad (9)$$

Avaliação do Campo de Velocidades - Superconvergência

Quando a solução aproximada de um problema não é interpolatória, existem situações onde uma precisão excepcional, assim como taxas de convergência de ordem superior à estimativa teórica, ocorrem em certos pontos. Este fenômeno é conhecido como superconvergência [12]. Mackinnon e Carey [13] apresentaram uma análise em séries de Taylor, onde é estabelecida a localização geométrica dos pontos de superconvergência para os gradientes. Para o elemento quadrilátero bilinear, o centróide do elemento é o lugar onde as derivadas em x e em y têm precisão de segunda ordem. Isso ocorrerá sempre que o elemento não seja irregular ou distorcido. Assim, o campo de velocidades, dado pela Lei de Darcy (1), é avaliado no centróide do elemento, onde a precisão do gradiente é assegurada pela superconvergência. Logo, temos,

$$\mathbf{v}^e = - \frac{k}{\phi \mu} \nabla N_{IR} \mathbf{p}^e \quad (10)$$

onde o vetor velocidade média de percolação é assim avaliado no centróide do elemento a partir do campo de pressões obtido com a utilização da integração reduzida na solução da equação (1), e N_{IR} são as funções de forma avaliadas no centróide do elemento. É importante notar que quando se trata de malhas distorcidas, a convergência de ordem superior não pode ser garantida no centróide do elemento. Pode-se nestes casos utilizar, por exemplo, uma técnica de pós-processamento para garantir taxas de convergência superiores [14].

Equação de Transporte

Como o problema frequentemente apresenta um caráter predominantemente advectivo, o método de Galerkin pode levar a oscilações. Por este motivo, utiliza-se a formulação SUPG, que utiliza funções peso descontínuas onde às funções peso de Galerkin são somadas perturbações que atuam na direção das linhas de corrente. Utilizou-se também um operador de captura de choques [15], levando a resultados melhores (com menos oscilações). Para a equação de transporte (4) tem-se a seguinte formulação aproximada,

$$B(w_h, c_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tau \mathbf{v}_h \nabla w_h (L(c_h) - \frac{1}{R_f} c_h^* f) \, d\Omega + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tau_c \nabla w_h \cdot \mathbf{v}_h \cdot \nabla c_h \, d\Omega = L(w_h) \quad (11)$$

onde,

$$B(w_h, c_h) = \int_{\Omega} w_h L(c_h) \, d\Omega$$

$$L(w_h) = \int_{\Omega} \frac{1}{R_f} w_h c_h^* f \, d\Omega \quad (12)$$

$$L(c_h) = \phi \frac{\partial c_h}{\partial t} - \frac{1}{R_f} \text{div}(\phi \mathbf{D} \nabla c_h) + \frac{1}{R_f} \text{div}(\phi \mathbf{v}_h c_h) + \frac{1}{R_f} \phi \lambda c_h$$

são os termos de Galerkin. O termo envolvendo o somatório representa a parcela de estabilização do método SUPG, sendo $L(c_h)$ é o resíduo da equação (4) calculado no interior dos elementos. Os parâmetros τ e τ_c são calculados de acordo com [7] e [15]. Em forma matricial temos,

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{c}} + \mathbf{K}\mathbf{c} = \mathbf{f} \quad (13)$$

Onde,

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_a + \mathbf{K}_d + \mathbf{K}_{pg} + \mathbf{K}_{cd} + \mathbf{K}_{dr} + \mathbf{K}_{drpg} \quad (14)$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_c + \mathbf{M}_{pg} \quad (15)$$

onde os subíndices d, a, pg, cd, dr e drpg indicam difusão, advecção, a parcela de Petrov-Galerkin, a parcela de captura de discontinuidades, o termo com decaimento radioativo e sua parcela de Petrov-Galerkin, respectivamente.

Como no caso da equação da pressão, tais matrizes podem ser obtidas a partir da contribuição dos elementos, de forma que para o e -ésimo elemento temos as seguintes componentes,

$$M_{c_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \varphi N_i \cdot N_j \, d\Omega \quad (16)$$

$$M_{pg_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \tau \varphi \nabla N_i \cdot \mathbf{v} N_j \, d\Omega \quad (17)$$

$$K_{d_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \varphi \nabla N_i D_{ij} \nabla N_j \, d\Omega \quad (18)$$

$$K_{a_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \varphi N_i \mathbf{v} \cdot \nabla N_j \, d\Omega \quad (19)$$

$$K_{pg_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \tau \varphi \nabla N_i \cdot \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \cdot \nabla N_j \, d\Omega \quad (20)$$

$$K_{cd_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \tau_c \nabla N_i \cdot \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla N_j \, d\Omega \quad (21)$$

$$K_{dr_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \lambda \varphi N_i \cdot N_j \, d\Omega \quad (22)$$

$$K_{drpg_{ij}}^e = \int_{\Omega^e} \lambda \tau \varphi \nabla N_i \cdot \mathbf{v} N_j \, d\Omega \quad (23)$$

Onde $i, j=1, \dots, 4$ e $\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{I} - \frac{1}{\|\mathbf{v}\|^2} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$, segundo [15].

É usual a utilização da quadratura numérica para avaliação das integrais presentes nestas equações. A integração numérica de Gauss para o elemento bilinear necessita de 4 pontos de quadratura. A utilização da integração reduzida vem reduzir os custos destas avaliações, uma vez que utiliza somente 1 (um) ponto de quadratura como será visto mais adiante.

- Discretização Temporal

A discretização no tempo pode ser feita pelo método implícito-sequencial [11] (incondicionalmente estável), onde as aproximações da pressão e da velocidade são tratadas de forma desacoplada da equação de transporte. Assim, resolve-se a equação da pressão, em seguida avalia-se as velocidades no

centróide do elemento através da aplicação da Lei de Darcy, e então é resolvida a equação de transporte em cada passo de tempo. A diferenciação no tempo será aproximada pela regra trapezoidal generalizada, utilizando-se um algoritmo preditor-multicorretor para o avanço no tempo do passo n a n+1.

3. INTEGRAÇÃO REDUZIDA

As implementações do método dos elementos finitos utilizam com freqüência a quadratura de Gauss na avaliação das integrais oriundas da formulação do problema. A chamada integração reduzida, ou seja, a utilização de um único ponto de integração na avaliação das integrais, é aqui utilizada com a finalidade de reduzir o custo computacional da avaliação destas integrais. Por outro lado, a utilização da integração reduzida pode provocar o surgimento de oscilações espúrias. Este fenômeno se deve à deficiência de posto das matrizes, e pode comprometer a qualidade das soluções [16]. Desta forma, é necessário controlar estas instabilidades, afim de se obter soluções precisas. Existem diversos métodos de estabilização para problemas difusivos [9, 17], e para problemas advectivos [18,20]. Neste trabalho, utiliza-se o método proposto por Belytschko e co-autores [9] para avaliação das integrais. Este método consiste basicamente na modificação do gradiente discreto a fim de recuperar o posto correto das matrizes de elemento [8]. Em outras palavras, a idéia principal do método é adicionar à matriz de elemento avaliada com um único ponto de quadratura de Gauss, termos de estabilização construídos à partir da formulação variacional de Hu-Washizu. Estes termos corrigem a deficiência de posto das matrizes, evitando o surgimento dos modos espúrios, e garantindo a precisão dos resultados. Considerando-se a matriz de elemento \mathbf{K}^e advectiva-difusiva-reativa (14), oriunda da equação de transporte, os resultados a seguir também se aplicam à equação da pressão (difusiva), onde $\mathbf{S}^e = \mathbf{K}_d$. Cada um destes termos pode ser calculado como a soma da parcela devida a integração reduzida (IR) e da parcela de estabilização (ESTAB),

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_{(IR)} + \mathbf{K}_{(ESTAB)} \quad (24)$$

Assim,

$$\mathbf{K}_{d(IR)}^e = \varphi \mathbf{A} \mathbf{b}_i \mathbf{D} \mathbf{b}_j^T \quad (25)$$

$$\mathbf{K}_{a(IR)}^e = \varphi \frac{A}{4} \mathbf{t} (\mathbf{v}_i \mathbf{b}_j^T) \quad (26)$$

$$\mathbf{K}_{pg(IR)}^e = \tau \varphi \mathbf{A} (\mathbf{b}_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j \mathbf{b}_j^T) \quad (27)$$

$$\mathbf{K}_{cd(IR)}^e = \tau_c \mathbf{A} (\mathbf{b}_i \bar{\mathbf{v}} \mathbf{b}_j^T) \quad (28)$$

$$\mathbf{K}_{drpg(IR)}^e = \lambda \mathbf{K}_{pg(IR)}^e \quad (29)$$

Com $i,j=1,2$. Nas equações acima,

$$\mathbf{t}^T = \{1 \quad 1 \quad 1 \quad 1\}$$

$$\mathbf{b}_1^T = \frac{1}{2A} \{y_{24} \quad y_{31} \quad y_{42} \quad y_{13}\} \quad (30)$$

$$\mathbf{b}_2^T = \frac{1}{2A} \{x_{42} \quad x_{13} \quad x_{24} \quad x_{31}\}$$

Nestas equações, A é a área do elemento, e $x_{ij} = x_i - x_j$; $y_{ij} = y_i - y_j$. As matrizes (25) a (29) são deficientes de posto. Para anular os efeitos indesejáveis que podem ocorrer com o uso da integração reduzida, adiciona-se os termos de correção obtidos modificando-se o gradiente discreto ∇N ,

$$\nabla \bar{N} = \begin{Bmatrix} \mathbf{b}_1^T \\ \mathbf{b}_2^T \\ \gamma^T \end{Bmatrix} \quad (31)$$

onde,

$$\gamma = \frac{1}{A} [\mathbf{h} - (\mathbf{h}^T \mathbf{x})\mathbf{b}_1 - (\mathbf{h}^T \mathbf{y})\mathbf{b}_2] \quad (32)$$

Para $\mathbf{h}^T = \{1 \quad -1 \quad 1 \quad -1\}$. Desta forma chega-se às seguintes parcelas de estabilização,

$$\mathbf{K}_{d(\text{ESTAB})}^e = \varphi \gamma \mathbf{D} \gamma^T \int_{\Omega^e} \zeta_i \zeta_i d\Omega \quad (33)$$

$$\mathbf{K}_{a(\text{ESTAB})}^e = \varphi \mathbf{b}_j v_i \gamma^T \int_{\Omega^e} x_{j,i} \zeta_i d\Omega \quad (34)$$

$$\mathbf{K}_{pg(\text{ESTAB})}^e = \tau \varphi \lambda \gamma \mathbf{v} \times \mathbf{v} \gamma^T \int_{\Omega^e} \zeta_i \zeta_i d\Omega \quad (35)$$

$$\mathbf{K}_{cd(\text{ESTAB})}^e = \tau_c \gamma \bar{\mathbf{v}} \gamma^T \int_{\Omega^e} \zeta_i \zeta_i d\Omega \quad (36)$$

$$\mathbf{K}_{drpg(\text{ESTAB})}^e = \lambda \cdot \mathbf{K}_{pg(\text{ESTAB})}^e \quad (37)$$

onde $\zeta = 1/4 (A \xi \eta)$ e ξ, η são as coordenadas naturais. Detalhes sobre o cálculo de γ na equação (32) e sobre a obtenção das equações (33) a (37) podem ser encontradas em Liu e Belytschko [8], Jacquote e Oden [19], Dias e Coutinho [20,21,22,23]. Verifica-se que \mathbf{K} será exata em malhas regulares (retângulos e paralelogramos) [20]. A convergência do método foi comprovada em trabalhos anteriores, onde se mostrou que o campo de pressões e de concentrações obtidos desta forma, tem a mesma ordem de convergência obtida com a utilização da quadratura completa de Gauss [8, 9, 20, 21]. A superconvergência do campo de velocidades também foi atestada em malhas regulares.

Observações:

1. Na quadratura de Gauss seriam necessárias 20 avaliações de matrizes para a obtenção de \mathbf{K}^e (ou seja, $\mathbf{K}_d, \mathbf{K}_a, \mathbf{K}_{pg}, \mathbf{K}_{cd}, \mathbf{K}_{drpg}$ avaliadas em cada um dos 4 pontos de integração), com a metodologia utilizada este número cai a metade. Além disso, como todos os termos das matrizes são conhecidos explicitamente, o ganho computacional pode ser ainda maior, e o código é ideal para a utilização em máquinas vetoriais. Testes de desempenho foram realizados em computadores e supercomputadores comprovando a eficiência computacional do método [20, 21]. Estes testes demonstram que a economia de tempo pode chegar a cerca de 60 %. Também é importante notar que os termos dependentes do tempo na equação (3) não são calculados de forma usual.

2. A chamada matriz de massa consistente é calculada exatamente e seu calculo é implementado explicitamente [22,23]. O mesmo ocorre com a matriz $\mathbf{K}_{dr} = \lambda \mathbf{M}_c$.

4. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

ESCOAMENTO UNIDIMENSIONAL

Este exemplo [3] trata do transporte unidimensional de um soluto em um sistema aquífero de comprimento $L=12$ cm, sujeito às condições de contorno e inicial,

$$\begin{aligned}
 v c^* &= v c - D \frac{\partial c}{\partial x} && \text{em } x = 0 \\
 \frac{\partial c}{\partial x} &= 0 && \text{em } x = l \\
 c(x, 0) &= 0
 \end{aligned} \tag{38}$$

onde $v_x = 0.10$ cm/s, $\alpha_r = 0.1$, $\alpha_L = 0.1$ cm, $\phi = 0.1$ e os elementos tem lados $\Delta x = 0.1$ cm.

Para ilustrar a precisão da implementação aqui utilizada simula-se o efeito da incorporação do fator de retardo representando um processo de sorção linear irreversível, o exemplo é avaliado em $t = 240$ s, onde três diferentes curvas são plotadas na Figura 1, correspondentes a três valores para o fator de retardo ($R_f = 2$, $R_f = 4$ e $R_f = 40$). Estes resultados estão em concordância com os apresentados na referência [3] para o programa MOC3D e a solução analítica.

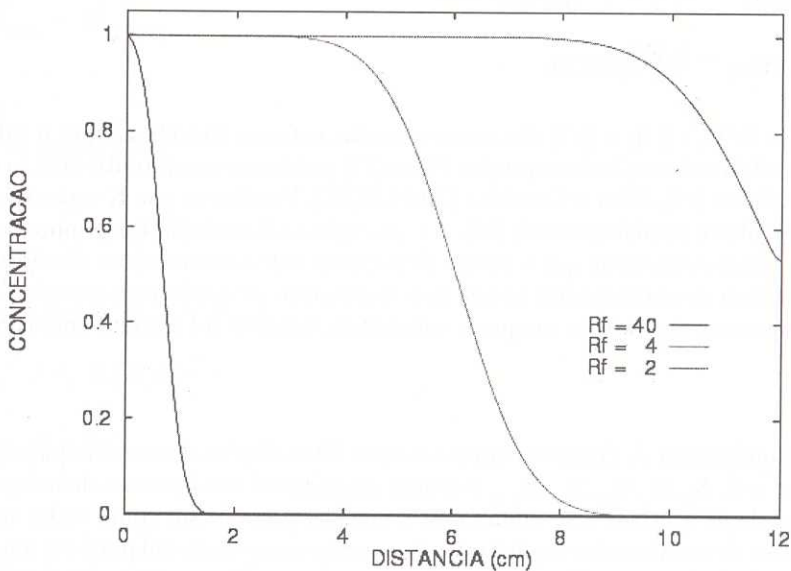


Figura 1 - Transporte com Diferentes Valores de Fator de Retardo para o Problema de Escoamento Unidimensional com Substância Reativa.

O efeito do decaimento pode ser verificado, quando para o mesmo exemplo toma-se a taxa de decaimento $\lambda = 0.01$ s⁻¹. A Figura 2 mostra os resultados obtidos pelo método dos elementos finitos com integração reduzida estabilizada, em 4 diferentes instantes da análise ($t = 30$ s, $t = 60$ s, $t = 90$ s e $t = 120$ s). Verifica-se novamente a concordância entre os mesmos.

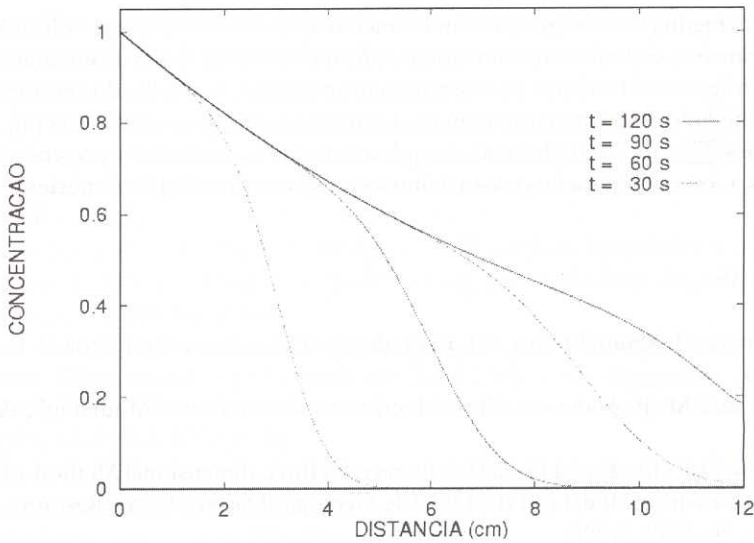


Figura 2 - Transporte com Decaimento Radioativo para o Problema de Escoamento Unidimensional com Substância Reativa

Vale acrescentar que uma descrição realística do transporte com várias reações químicas requer a consideração de componentes múltiplas no sistema. Surgem então equações diferenciais adicionais oriundas das relações de equilíbrio, formando um conjunto acoplado de equações governantes para o transporte advectivo-difusivo-reativo. A modelagem deste problema é complexa e será tema de estudo futuro.

A Tabela 1 mostra a relação entre os tempos de processamento gastos na montagem das matrizes de elemento. Esta relação foi observada em todos os exemplos, onde nota-se a grande economia na utilização da integração reduzida estabilizada em relação a quadratura de Gauss. Economia esta que pode chegar a 0.25 % do tempo gasto pela integração tradicional. Em particular para o exemplo acima, o tempo total de processamento para a análise foi de 17.28 s para a quadratura de Gauss, enquanto para a integração reduzida estabilizada foi de 11.28 s. Estes resultados foram obtidos no IBM 590 do LNCC.

Tabela 1 - Relação entre Tempos de Processamento para as Rotinas de Montagem das Matrizes de Elemento

Matrizes	Tempo de CPU	
	IR Estabilizada	Gauss 2 x 2
Pressão	1	0.25
Transporte	1	0.50

5. CONCLUSÕES

Este trabalho mostrou a utilização do elemento Lagrangeano bilinear associado a integração reduzida, de forma segura e precisa, na simulação de processos de contaminação de aquíferos. A principal vantagem desta metodologia é a avaliação das matrizes de elemento com boa precisão e economia de no mínimo 50 % do tempo de processamento. Além disso, o ganho computacional pode ser ainda maior já que com a integração reduzida é possível conhecer todos os termos das

matrizes explicitamente, e o código apresenta características favoráveis a sua utilização em máquinas vetoriais. Os primeiros experimentos numéricos aplicando a metodologia de integração reduzida para escoamentos em águas subterrâneas se mostraram promissores. A escolha dos exemplos de validação se deve a possibilidade de comparação com os resultados do programa MOC3D [3], muito utilizado para este tipo de aplicação. Exemplos mais complexos devem ser avaliados e pretende-se efetuar testes bidimensionais, a extensão para modelos tridimensionais e com múltiplas espécies.

REFERÊNCIAS

- [1] F. A. C. Feitosa e J. Manoel Filho, "Hidrogeologia - Conceitos e Aplicações", LABHID-UFPE, (1997).
- [2] H. F. Wang and M. P. Anderson, "Introduction to Groundwater Modeling", Academic Press, (1982).
- [3] L. F. Konikow, D. J. Goode and G. Z. Hornberger, "A three-dimensional Method-of-Characteristics Solute-Transport Model (MOC3D)", US. Geological Survey Water-Resources Investigations Report, 96-4269, (1996).
- [4] C. M. Palmer, "Principles os Contaminant Hydrogeology", 2nd Edition, CRC-Lewis Publishers, (1996).
- [5] A. F. D. Loula, E. L. M. Garcia and A. L. G. A. Coutinho, "Miscible Displacement Simulation by Finite Element Methods in Distributed Memory Machines", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 174, 339-354, (1999).
- [6] A. L. G. A. Coutinho e J. L. D. Alves, "Parallel Finite Element Simulation of Miscible Displacements in Porous Media", Society of Petroleum Engineers Journal, Vol. 1, N. 4, pp. 487-500, dezembro (1996).
- [7] A. N. Brooks, and T. J. R. Hughes, "Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulation for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equation", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 32, 199-259, (1982).
- [8] W. K. Liu, and T. Belytschko, "Efficient Linear and Nonlinear Heat Conduction with a Quadrilateral Element", Internatational Journal for Numerical Methods in Engineering, 20, 931-948, (1984).
- [9] T. Belytschko, J. S. J Ong, W. K. Liu and J. M. Kennedy, "Hourglass Control in Linear and Nonlinear Problems", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 43, 251-276, (1984).
- [10] J. Bear, "Hydraulics of groundwater", McGraw-Hill, (1979).
- [11] T. F. Russel, M. F. Wheeler and C. Chiang, "Large-scale Simulation of Miscible Displacement by Mixed and Characteristic Finite Element Methods", Anais do SIAM - Conference on Mathematical and Computational Methods in Seismic Exploration and Reservoir Modeling, 85-107, Houston-Texas, USA, (1985).
- [12] G. F. Carey, "Computational Grids. Generation, Adaptation and Solution Strategies", Taylor & Francis, pp. 161, (1997).
- [13] R. J. Mackinnon, and G. F. Carey, "Superconvergent Derivatives: A Taylor Series Analysis", International Journal for Numerical Methods in Engineering, 28, 489-509, (1989).
- [14] S. M. C. Malta, A. F. D. Loula, E. L. M. Garcia, "A Post-processing Technique to Approximate the Velocity Field in Miscible Displacement Simulations", Matemática Contemporânea, vol. 8, pp. 239-268, (1993).
- [15] R. Codina, "A Discontinuity-capturing Crosswind-dissipatio for the Finite Element Solution of the Convection-Diffusion Equation", Computer Methods in Applied Mechanics Engineering, v.94, pp. 239-262, (1992).
- [16] L. J. Hayes, "Practical Stability Test for Finite Elements with Reduced Integration", International Journal for Numerical Methods in Engineering, 17, 1689-1695, (1981).

- [17] P. Hansbo, "A New Approach to Quadrature for Finite Elements Incorporating Hourglass Control as a Special Case", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 158, N.º 3-4, 301-309, (1998).
- [18] M. Mallet, C. Poirier, and F. Shakib, "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: Development of an Hourglass Control Operator for Multidimensional Advective-diffusive Systems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94, 429-442, (1992).
- [19] O. P. Jacquotte, and J. T. Oden, "Analysis of Hourglass Instabilities and Control in Underintegrated Finite Element Methods", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 44, 339-363, (1984).
- [20] C. M. Dias, e A. L. G. A. Coutinho, "Integração Reduzida para Problemas Advectivos-difusivos Escalares Discretizados pela Formulação SUPG com Operador de Captura de Descontinuidades", *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 14, 2, 145-166, (1998).
- [21] C. M. Dias e A. L. G. A. Coutinho, "Estratégias de Integração Reduzida para Cálculo de Velocidades e Pressões em Meios Porosos", III SIMMEC, Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional, Ouro Preto/MG, Brasil, (1998).
- [22] C. M. Dias, "Técnicas de Integração Reduzida para a Simulação de Problemas Não-lineares de Transporte pelo Método dos Elementos Finitos". Tese D.Sc. COPPE/ UFRJ, (2001).
- [23] C. M. Dias, A. L. G. A. Coutinho, "Stabilized Finite Element Methods with Reduced Integration Techniques for Miscible Displacements in Porous Media", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, to appear, (2003).