

XVII CONGRESSO BRASILEIRO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

VII FENÁGUA – Feira Nacional de Água
XVIII Encontro Nacional de Perfuradores de Poços
23 a 26 de outubro de 2012 – Bonito-Ms

Controle Adaptativo do Erro Numérico das Estimativas de Contaminantes em Aquíferos

João Paulo M. dos Santos¹; Alessandro Firmiano²; Edson Wendland³

Resumo: Vários modelos computacionais que implementam o transporte de soluto em meio poroso saturado surgem constantemente em publicações científicas devido à importância na compreensão e previsão do transporte de constituintes dissolvidos em água subterrânea. As soluções numéricas obtidas por esquemas computacionais não estão imunes aos erros de discretização. No entanto, a confiabilidade nos resultados obtidos das complexas operações provenientes da dinâmica de fluidos computacional pode ser aumentada através de estimadores de erro *a posteriori* que indicam a precisão da solução numérica de um modelo matemático para simular o fenômeno físico de interesse. Neste trabalho é avaliado um estimador residual para a equação parabólica que descreve os fenômenos de advecção-dispersão-reação (ADR) em meio poroso saturado, considerando o transporte em regime de pequena advecção. Para a solução numérica da equação ADR é implementada um código computacional, em linguagem PYTHON, utilizando a discretização espaço-temporal que emprega o esquema θA -estável. Em situações de aquíferos isotrópicos e homogêneos, a boa concordância entre a solução numérica e a solução analítica disponível na literatura, é identificada também pelo estimador de erro residual.

Abstract: Several computer models that implement the solute transport in saturated porous media are constantly emerging in the scientific literature because of the importance in understanding and predicting the transport of dissolved constituents in groundwater. The numerical solutions obtained by computational schemes are not immune to errors of discretization. However, the reliability of the results of complex operations from computational fluid dynamics can be increased through *a posteriori* error estimators indicate that the accuracy of the numerical solution of a mathematical model to simulate the physical phenomenon of interest. This work evaluated a residual estimator for the parabolic equation that describes the phenomena of advection-dispersion-reaction (ADR) in saturated porous media, considering the transport of small advection scheme. For the numerical solution of the equation ADR is implemented a computer code in PYTHON language, using the space-time discretization that employs θA -stable scheme. In case of homogeneous and isotropic aquifers, the agreement between the numerical solution and analytical solution available in the literature is identified also by the residual error estimator.

Palavras chave: Erro Residual, Equação de Advecção-Dispersão-Reação, Projeto Fenics.

1. Introdução

Embora ocorram com frequência, os erros de aproximação são difíceis de identificar e de avaliar com medidas intuitivas ou heurísticas. (Ewing, 1992) Neste trabalho é avaliado o desempenho do estimador de erro residual para a equação do transporte de contaminantes (1), que descreve os fenômenos de advecção-dispersão-reação (ADR) em meio poroso saturado,

¹²³ Depto de Hidráulica e Saneamento, SHS/EESC/USP
13560-970, São Carlos, SP. Caixa Postal 359, (16) 3373-9541
E-mail: jp3@usp.br, ew@sc.usp.br, lezandro@sc.usp.br

considerando o regime de pequena advecção, conforme descrito em (Verfürth, 2008). O modelo matemático que descreve o transporte de contaminantes em água subterrânea é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t C - \text{div}(\mathbf{D}\nabla C) + \mathbf{v} \cdot \nabla C + \lambda C = f & \text{em } \Omega \times (0, T] \\ C = C_D & \text{sobre } \Gamma_D \times (0, T] \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}\nabla C = g & \text{sobre } \Gamma_N \times (0, T] \\ C = C_0 & \text{em } \Omega \end{array} \right. \quad (1)$$

sendo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ o domínio poligonal limitado e com fronteira Lipschitz Γ consistindo de duas partes disjuntas, Γ_D a fronteira de Dirichlet e Γ_N a fronteira de Neumann, tais que $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Omega$. O tempo final T é arbitrário, no entanto, precisa ser especificado. A matriz de dispersão \mathbf{D} é continuamente diferenciável e simétrica, uniformemente definida positiva e uniformemente isotrópica. E ainda, o campo de velocidades \mathbf{v} é continuamente diferenciável e o termo de reação λ é uma função escalar contínua e não-negativa (Bear, 2007).

2. O Estimador de Erro Residual

Em situações em que na equação (1) o termo advectivo é dominante sobre o termo dispersivo, o método residual apresenta-se como a técnica apropriada para obter estimativas *a posteriori* do erro da solução numérica da equação de transporte de contaminantes (Firmiano, 2010). Nesse método residual, o estimador de erro para a equação parabólica (1) em regime de pequena advecção é dado por:

$$\eta_I = \left\{ \|C_0 - \pi_0 C_0\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{n=1}^{N_t} \tau_n \left[(\eta_{T_n}^n)^2 + (\eta_t^n)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

sendo $\eta_{T_n}^n = \left\{ \sum_{K \in \tilde{T}_n} \alpha_K^2 \|R_K\|_{L^2(K)}^2 + \sum_{E \in \tilde{\mathcal{E}}_n} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \alpha_E \|R_E\|_{L^2(E)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$ o estimador residual espacial com

contribuições R_K dos elementos da malha do domínio e dos seus respectivos resíduos laterais R_E e

$\eta_t^n = \|C_{T_n}^n - C_{T_{n-1}}^{n-1}\| = \left\{ \varepsilon \|\nabla(C_{T_n}^n - C_{T_{n-1}}^{n-1})\|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta \|C_{T_n}^n - C_{T_{n-1}}^{n-1}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$ a contribuição temporal

para o estimador global (2) (Verfürth, 2008). Os índices sobrescritos nas equações acima se referem ao n -ésimo passo de tempo da discretização temporal e os subscritos referem-se à n -ésima triangulação da malha computacional.

3. Resultados e Discussão

Nesta seção é apresentada uma solução numérica da equação (1) sobre uma malha inicial de elementos finitos triangulares e funções de aproximação de 2ª ordem. As entradas do modelo computacional, implementado em linguagem PYTHON (Fenics Manual, 2011), consideram os parâmetros físicos de um aquífero situado em *Long Island-NY*, cujos valores numéricos e hipóteses

sobre a região de estudo estão disponíveis em Wexler (1992). O esquema de discretização espaço-temporal da equação (1) no código computacional é o θA -estável (Cartensen e Verfürth, 1999).

A figura 1 apresenta os valores das concentrações normalizadas obtidas para um tempo final de simulação $t_{final} = 1000$ dias divididos em 100 passos de tempo.

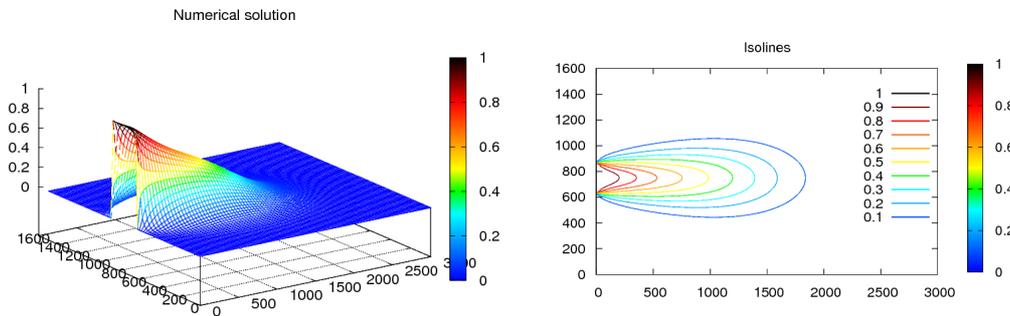


Figura 1. Concentrações de contaminantes em aquífero obtidas pelo código computacional

Para a avaliação do erro residual total sobre a malha e a correspondente evolução no tempo, o código também disponibiliza a solução analítica da equação (1). A figura 2 ilustra a boa concordância entre as duas soluções na direção de $y = 250$ e de $y = 750$.

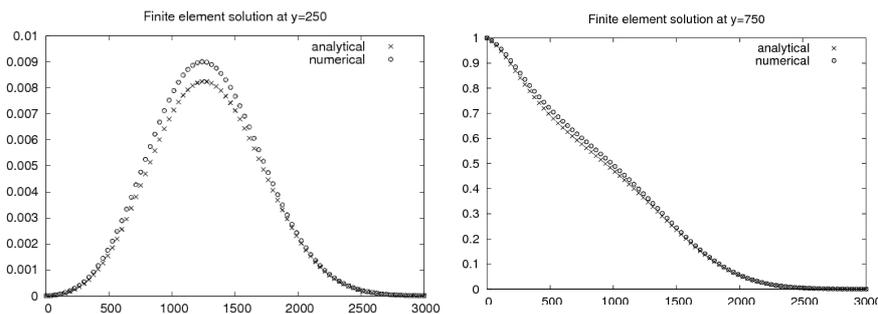


Figura 2. Concordância entre as soluções analítica e numérica da equação do transporte de contaminantes

No entanto, verifica-se que o erro real é mais acentuado na região central do domínio, local em que os nós da malha estão mais próximos da frente de contaminação inicial e constante.

A figura 3 mostra o mapa de erros em todo domínio computacional e as correspondentes curvas de nível.

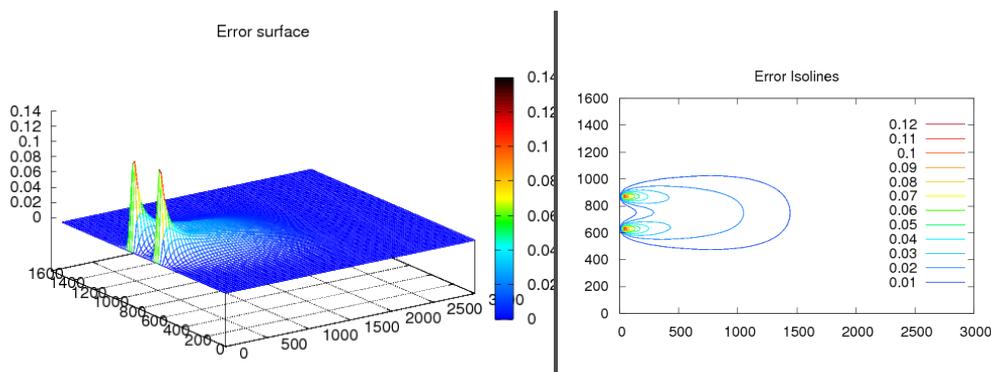


Figura 3. Mapa de erros estimados da solução da equação do transporte de contaminantes

Verifica-se que o valor máximo do erro espacial surge nas extremidades da fonte de contaminação devido a transição abrupta da condição inicial para a condição de fronteira, evidenciando a forte influência do gradiente de concentração na qualidade da solução numérica. Em uma análise qualitativa do estimador residual, é adotado o campo de velocidades que caracteriza o regime de pequena advecção, ou seja, $v = 0,5 \frac{m}{d}$ em uma malha que possui n elementos triangulares para cada direção cartesiana. O tempo final da simulação é $t_{final} = 500 d$ e considera $\Delta t = 1,0 d$. A figura 4a apresenta a evolução do erro residual para $n = 20; 40; 80$ e 120 . A figura 4b ilustra a razão $r = \frac{R_E}{R_K}$ entre as contribuições dos erros de salto e dos respectivos erros interiores dos elementos para os mesmos valores de n .

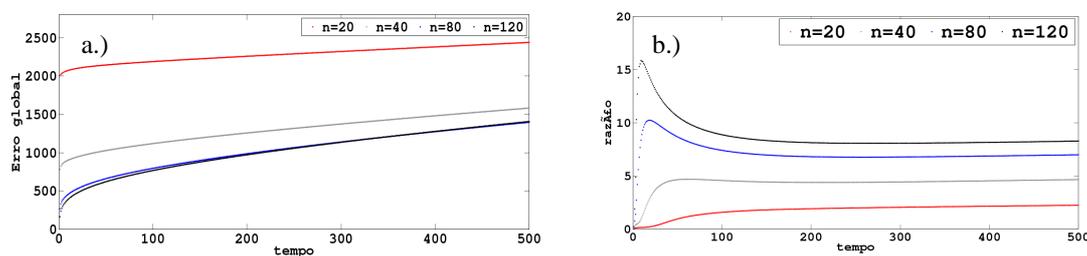


Figura 4 – a.) Evolução do erro global

b.) Evolução da razão entre erro interior e erro de salto

Verifica-se uma importante redução do erro global para os valores crescente de n e uma dominância comportada do erro de salto para o erro interior nas equações do transporte (1).

4. Conclusão

É avaliado um estimador de erro *a posteriori* para a equação de transporte de contaminantes em aquíferos com características residuais. O mapa de erro determinado pelo estimador apresenta a região de maior influência do gradiente de concentração. Em regime de pequena advecção o erro global estimado diminui e a razão r apresenta uma dominância comportada do erro de salto.

5. Referências Bibliográficas

- BEAR, J., 2007. *Hydraulics of Groundwater*, Dover Publications, 592 p.
- CARTESEN, C., Verfürth, R., 1999. Edge residuals dominate a posterior error estimates for low order finite element methods, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v 36, n 5, p 1571-1587.
- EWING, R.E., 1992. A posterior error estimator. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v 82, p 59-72.
- FENICS MANUAL, 2011. Fenics Project. <http://fenicsproject.org/documentation/>
- FIRMIANO, A., 2010. “Um Estimador de Erro *a posteriori* para a Equação do Transporte de Contaminantes em Regime de Pequena Advecção”, 150 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.
- KUNERT, G., Verfürth, R., 2000. Edge residuals dominate a posterior error estimates for linear FEM on anisotropic triangular and tetrahedral meshes, *Numer. Math.* 86, n 2, p 283-303
- VERFÜRTH, R., 2008. “Adaptive Finite Element Methods Lecture Notes Winter Term 2007/08” Fakultät für Mathematik, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland.
- WEXLER, E.J., 1992. “Applications of Hydraulics Analytical Solutions for One-, Two- and Three-Dimensional solute Transport in Groundwater Systems with Uniform Flow” – Chapter B7 Techniques of Water-Resources Investigations of the USGS. Denver USA, 1992.