

Editado por

Eliana X.L. de Andrade

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

Rubens Sampaio

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro -

Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Geraldo N. Silva

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.7)**, as figuras em eps e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página
<http://www.sbmac.org.br/notas.php>



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

2012

MODELOS MATEMÁTICOS E MÉTODOS NUMÉRICOS EM AGUAS SUBTERRÂNEAS

Edson Wendland
Laboratório de Hidráulica Computacional
Departamento de Hidráulica e Saneamento
Escola de Engenharia de São Carlos
Universidade de São Paulo
LHC - SHS - EESC - USP
ew@sc.usp.br

SÃO CARLOS - SP



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil
2012

Coordenação Editorial: Geraldo Nunes Silva

Coordenação Editorial da Série: Geraldo Nunes Silva

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2012 by Edson Wendlander. Direitos reservados, 2012 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP
Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner

Wendlander, Edson.

Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas - São Carlos, SP: SBMAC, 2012, 95 p., 20.5 cm - (Notas em Matemática Aplicada; v. 3)

e-ISBN 978-85-86883-72-9

1. Matemática Aplicada. 2. Águas Subterrâneas.
3. Métodos Numéricos. 4. Computação científica.
I. Wendlander, Edson. II. Título. III. Série.

CDD - 51

Esta é uma republicação em formato de e-book do livro original do mesmo título publicado em 2003 nesta mesma série pela SBMAC.

PREFÁCIO DA SÉRIE

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC, desde a realização do primeiro CNMAC - Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, publica monografias de cursos que são ministrados durante o Evento. A atual diretoria decidiu fazer a indexação bibliográfica dessas monografias através do ISBN para efeito de catalogação para preservação das mesmas para a memória dos CNMAC.

A coleção recebeu o título de “Notas em Matemática Aplicada” e consistirá das monografias dos cursos ministrados nos CNMAC. O livro correspondente a cada minicurso deve ser preparado em até 100 páginas para servir como texto introdutório, de modo que é aconselhável que contenha uma boa revisão bibliográfica e exercícios de verificação de aprendizagem. A clareza do texto é um dos fatores mais importantes.

A coleção incluirá, gradativamente, os textos dos Encontros Regionais de Matemática Aplicada e Computacional, os ERMAC e de outros eventos patrocinados pela SBMAC.

Além disso, é objetivo desta coleção publicar volumes com coletâneas de *pre-prints* de trabalhos apresentados em reuniões científicas patrocinadas pela SBMAC.

Esta primeira coleção, composta das monografias dos minicursos do XXVI CNMAC, foi especialmente preparada em comemoração aos 25 anos da SBMAC.

E. X. L. de Andrade
R Sampaio
G N Silva

Prefácio

Este livro foi preparado como material de apoio ao Minicurso “Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas”, apresentado pelo autor durante o XXVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) em São José do Rio Preto - SP em 2003.

O texto consiste de uma coletânea de Notas de Aula preparadas para acompanhamento das disciplinas “Hydrogeologie V - Numerische Methode in Grundwasser”, ministrada pelo autor na Ruhr-Universität Bochum, na Alemanha e “SHS-5896 Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas”, ministrada pelo autor no Programa de Pós-Graduação em Hidráulica e Saneamento (PPG-SHS) da Escola de Engenharia de São Carlos (EESC) da Universidade de São Paulo (USP).

Procurou-se desenvolver os capítulos de modo a contemplar os principais aspectos inerentes à aplicação de métodos numéricos a problemas de escoamento de água no subsolo (meio poroso). Nesse sentido, o primeiro capítulo aborda de forma abstrata as questões relativas ao tipo de modelos e ao processo de modelagem, desde a concepção do modelo físico até a análise de resultados. No segundo capítulo são apresentados alguns fundamentos básicos de Hidrogeologia, que permitirão a compreensão dos conceitos utilizados na elaboração do modelo matemático desenvolvido no terceiro capítulo. O quarto capítulo é reservado à introdução dos diferentes métodos numéricos passíveis de aplicação para a solução da equação diferencial parcial que descreve o fenômeno físico. A partir do capítulo cinco é desenvolvido detalhadamente o Método de Diferenças Finitas (FDM), como ferramenta aplicada ao escoamento de água subterrânea. No capítulo seis, são abordadas situações especiais de discretização e aproximação por diferenças finitas.

O livro não esgota o assunto e deve ser visto como uma introdução ao problema. Desde já pretende-se agradecer às críticas e sugestões, que venham a ser encaminhadas ao autor (ew@sc.usp.br), contribuindo para a melhoria da obra.

São Carlos, junho de 2003.

Edson Wendland

Agradecimentos

A produção deste texto foi possível graças ao trabalho prévio desenvolvido pelos alunos dos programas de pós-graduação do Departamento de Hidráulica e Saneamento (SHS) da Escola de Engenharia de São Carlos (EESC) da Universidade de São Paulo (USP). Nesse sentido, agradeço aos alunos das disciplinas SHS-5854 Hidráulica de Águas Subterrâneas e SHS-5896 Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas pelo auxílio na elaboração das Notas de Aula das referidas disciplinas. Em especial, agradeço aos alunos Alessandra Troleis da Cunha, Andréa Luiza da Silva, Johannes Gérson Janzen, Jorge Luiz Rabelo, José Anderson do Nascimento Batista, Kleber Teodoro Formiga, Peter Baptista Cheung, Stênio de Sousa Venânccio e William Giorgio Debastiani, cujos apontamentos de aula e revisão bibliográfica constituíram a base de desenvolvimento do texto final.

Agradecimento especial cabe ao aluno de Iniciação Científica Rogério M. B. Pasqual pelo trabalho de diagramação e formatação do texto em latex, de acordo com as normas dos organizadores.

Finalmente, gostaria de agradecer à Diretoria da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional (SBMAC) e à Comissão Organizadora do XXVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) pela oportunidade de apresentar em São José do Rio Preto - SP o Minicurso que deu origem a esta publicação.

O autor

Aos meus filhos
Laonny, Niklas e Mellyna
Dedico

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Importância das águas subterrâneas	1
1.2	Objetivos	3
1.3	Definições	3
1.4	Classificação de modelos ou sistemas	5
1.4.1	Conceitual e empírico	5
1.4.2	Estocástico e determinístico	5
1.5	Pontos de partida da modelação	6
1.6	Limitações de um modelo	7
1.7	Processos importantes na modelação	7
1.8	Dimensão espacial de modelos numéricos	10
2	Modelo conceitual de aquíferos	12
2.1	Fundamentos hidrogeológicos	12
2.2	Aquíferos	13
2.3	Lei de Darcy	16
2.4	Escala de trabalho	18
3	Modelos matemáticos de fluxo	19
3.1	Equação diferencial da continuidade	19
3.2	Analogias	25
3.3	Condições de contorno	25
4	Introdução aos métodos numéricos	29
4.1	Modelos Contínuos	30
4.2	Modelos Discretos	37
5	Método de Diferenças Finitas	44
5.1	Séries de Taylor	44
5.2	Estimativa de erros	49
5.3	Diferenças Finitas no caso uni-dimensional	51
5.4	Solução do sistema de equações	54
5.4.1	Métodos iterativos	54
5.4.2	Critérios de parada da iteração	60

5.4.3	Esquemas iterativos avançados	64
5.5	Método de Diferenças Finitas em duas dimensões	66
5.6	Inclusão da Condição de Neuman (2º Tipo)	68
5.7	Solução da equação de fluxo transiente	69
5.8	Convergência, Consistência e Estabilidade	73
6	Técnicas especiais de discretização em diferenças finitas	77
6.1	Derivadas mistas	77
6.2	Discretização em meios heterogêneos	78
6.3	Discretização variável	80
6.4	Geração de malhas	85

Capítulo 1

Introdução

1.1 Importância das águas subterrâneas

Devido às facilidades na observação das águas superficiais, é natural que haja um maior volume de estudos relacionados a esses mananciais. Da mesma forma, há uma tendência em se considerar esses mananciais como sendo a maior fonte para abastecimento de água. Todavia, de acordo com as mais recentes avaliações, dos 1360 quatrilhões de toneladas de água do planeta, apenas 0,8% corresponde à água doce. Dessa fração, 3% apresentam-se na forma de água superficial e 97% na forma de água subterrânea [3].

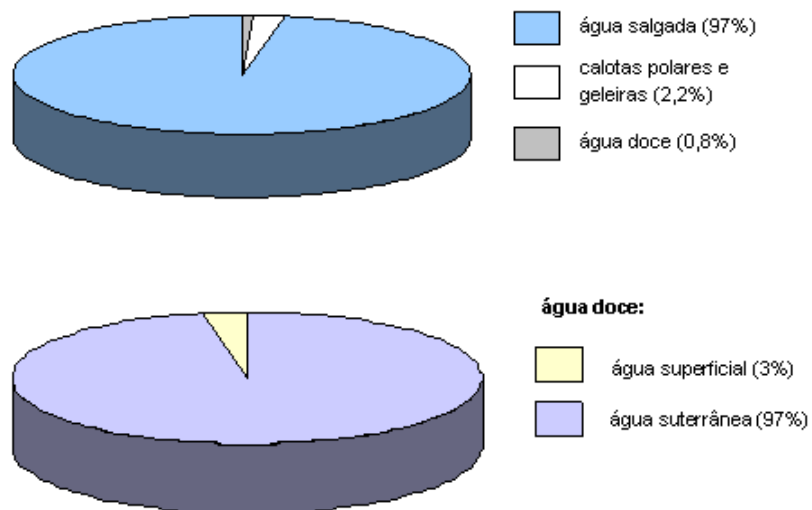


Figura 1.1: Distribuição da água no globo

Um dos equívocos mais freqüentes no entendimento dessa matéria costuma estar associado à expectativa de que as reservas subterrâneas podem ser exploradas como fontes alternativas, somente para completar disponibilidades superficiais escassas ou altamente comprometidas. A própria expressão “reservas hídricas subterrâneas”, largamente utilizada para designar este tipo de ocorrência, contém a idéia de uma quantidade adicional de água, reservada para livre utilização futura ou sempre que as demais formas de disponibilidades estiverem já comprometidas.

Ocorrendo em maiores quantidades, as águas subterrâneas têm grande potencial de exploração, destacando-se ainda vantagens evidentes como boa qualidade (em geral) para o consumo humano e possibilidade de localização de obras de captação nas proximidades das áreas de consumo. Em grande parte dos casos, especialmente em cidades pequenas e médias, o abastecimento pode ser atendido por poços, com prazos de execução mais curtos e menores custos. As águas subterrâneas podem oferecer uma alternativa qualitativamente mais adequada. Os mananciais subterrâneos são naturalmente melhor protegidos dos agentes poluidores em relação à poluição de rios e lagos, muito embora o lençol freático seja vulnerável à contaminação. Porém na despoluição desses mananciais ocorre exatamente o contrário.

Enquanto que os corpos d’água superficiais representam água em trânsito, as reservas subterrâneas representam água armazenada. As águas subterrâneas vêm se acumulando há muitos séculos. Durante um ano, em média, as águas dos cursos superficiais se renovam mais ou menos 31 vezes, enquanto que as águas subterrâneas possuem tempo de permanência variável de 2 semanas a 10000 anos, dependendo das condições do aquífero e da exploração. Nem toda água do subsolo pode ser retirada dos aquíferos. Algumas jazem em formações tão profundas que o custo de extração torna seu aproveitamento impraticável.

Ainda que os números comparativos das quantidades de água disponíveis nos mananciais superficiais e subterrâneos não possam ser usados como índices das reservas reais de água, eles revelam que a provisão disponível de água subterrânea é várias vezes maior que a das águas de superfície. Não obstante, o destaque dado às reservas hídricas subterrâneas não faz jus ao seu grande potencial para o abastecimento de água.

O desenvolvimento de modelos de simulação do movimento de águas subterrâneas tem sido justificado pelos vários objetivos associados ao planejamento do uso dessa fonte. A previsão dos efeitos causados pela concentração de poços e vazões bombeadas constitui-se numa das mais importantes aplicações desses modelos [14].

A seguir, serão descritos os modelos matemáticos para aquíferos livres confinados, não-confinados e semi-confinados, será feita também uma abordagem da elaboração das condições de contorno na construção de um modelo para um determinado aquífero, sendo analisadas em seguida a formulação de algumas generalizações.

1.2 Objetivos

Mostrar as possibilidades de aplicação de modelos com suas respectivas limitações.

- Explicar os conhecimentos físicos relevantes.
- Apresentar os fundamentos hidráulicos e matemáticos.
- Apresentar os métodos correntes.
- Escolha do método mais adequado ao problema em estudo.
- Análise de erros em modelagem.
- Capacitar a avaliação de modelos de terceiros.

1.3 Definições

Dooge [55] revisou os conceitos utilizados para definir um sistema, concluindo que:

“Sistema é qualquer estrutura, esquema ou procedimento, real ou abstrato, que num dado tempo de referência inter-relaciona-se com uma entrada, causa ou estímulo de energia ou informação, e uma saída, efeito ou resposta de energia ou informação”.

Sintetizando, sistema é qualquer engenho que responde, através de uma saída, a uma entrada. Cada sistema possui suas próprias características e pode, em função de cada caso, ser subdividido em subsistemas onde certas características são mais homogêneas. Exemplificando, uma bacia hidrográfica é um sistema, que acionado por uma entrada ou estímulo, transforma precipitação em vazão. A estrutura do sistema hidrológico depende das características tais como: solo, vegetação, topografia, etc.

O modelo é:

- Reprodução idealizada de algumas ou todas características físicas de um processo natural em escala adequada.
- Sistema que consegue reproduzir, pelo menos em parte, o comportamento de um processo natural [57].
- Representação de algum objeto ou sistema, numa linguagem ou forma de fácil acesso e uso, com o objetivo de entendê-lo e buscar respostas para diferentes estímulos [55].

O modelo por si só não é um objetivo, mas uma ferramenta para atingir um objetivo. Ele é utilizado para se antecipar aos eventos, representando: o impacto da urbanização de uma bacia antes que ele ocorra, para que medidas preventivas

possam ser tomadas; a previsão de uma enchente em tempo real; o impacto da alteração de um rio; a ocorrência de eventos extremos estatisticamente possíveis.

Portanto, o modelo é uma representação do comportamento do sistema. Os modelos usualmente são classificados em: físicos, analógicos e matemáticos.

Modelo físico:

O modelo físico representa o sistema por um protótipo em escala menor, na maior parte dos casos. Na Hidráulica, a teoria da semelhança é utilizada para o estabelecimento dos modelos reduzidos [55].

Modelo analógico:

O modelo analógico está baseado na analogia entre diferentes processos físicos. Vale-se da analogia das equações que regem diferentes fenômenos, para modelar no sistema mais conveniente, o processo desejado. A analogia entre as equações do escoamento hidráulico e de um circuito elétrico permite a representação do sistema hidráulico por um circuito elétrico, que tem um custo mais reduzido [55], [57].

Modelo matemático:

Os modelos matemáticos, também chamados de digitais, são os que representam a natureza do sistema, através de equações matemáticas. Estes modelos são mais versáteis, porque se pode facilmente modificar a sua lógica, obtendo-se resultados de diferentes situações de um mesmo sistema ou de diferentes sistemas, além da grande velocidade de resposta. A desvantagem desse tipo de modelo está na discretização de processos contínuos e na dificuldade na representação matemática de alguns processos físicos. Em determinadas áreas de estudo, ainda não existem funções matemáticas, que representem convincentemente certos fenômenos físicos [55].

Algumas definições são importantes para melhor compreensão do sistema e do modelo que o representa.

Fenômeno: É um processo físico, que produz alteração de estado no sistema. Por exemplo, precipitação, evaporação, infiltração e escoamento são fenômenos.

Variável: É um valor que descreve quantitativamente um fenômeno, variando no espaço e no tempo. Por exemplo, vazão é uma variável que descreve o estado do escoamento.

Parâmetro: É um valor que caracteriza o sistema, o parâmetro também pode variar com o espaço e o tempo. Exemplos de parâmetros são: rugosidade de uma seção de um rio, área de uma bacia hidrográfica e áreas impermeáveis de aquíferos.

Simulação: É o processo de utilização do modelo. Na simulação existem, em geral, três fases que são classificadas como estimativa ou ajuste, verificação e previsão. A estimativa dos parâmetros é a fase da simulação onde os parâmetros devem ser determinados. A verificação ou validação é a simulação do modelo com os parâmetros estimados, onde se verifica a confiabilidade do ajuste realizado. A previsão é a simulação do sistema pelo modelo com parâmetros ajustados para quantificação de suas respostas a diferentes entradas.

1.4 Classificação de modelos ou sistemas

Um sistema pode ser classificado segundo vários critérios encontrados na literatura. As classificações a seguir apresentadas mencionam indistintamente os termos sistema e modelo.

1.4.1 Conceitual e empírico

Um modelo é dito conceitual, quando as funções utilizadas na sua elaboração levam em consideração os processos físicos. Esta definição é estabelecida para diferenciar os modelos que consideram os processos físicos, dos modelos ditos “caixa-preta”. Os modelos do tipo “caixa-preta” ou empíricos são aqueles em que se ajustam os valores calculados aos dados observados, através de funções que não têm, necessariamente, nenhuma relação com os processos físicos envolvidos. A definição do modelo conceitual é artificial, já que funções empíricas são também usadas (equações de Darcy, Horton, etc), mas estão relacionadas com a física do problema.

1.4.2 Estocástico e determinístico

Esta é uma das principais classificações dentro da simulação hidrológica. Segundo Chow [55], se a chance de ocorrência das variáveis é levada em conta, e o conceito de probabilidade é introduzido na formulação do modelo, o processo e o modelo são ditos estocásticos. De outro lado, se a chance de ocorrência das variáveis envolvidas no processo é ignorada, e o modelo segue uma lei que não a lei das probabilidades, o modelo e os processos são ditos determinísticos. Os modelos determinísticos podem ser divididos em duas categorias de solução, analíticas e numéricas.

Soluções analíticas

Estas são obtidas em problemas de geometria simples, parâmetros homogêneos e relações lineares. São empregadas diferentes técnicas matemáticas:

- Separação de variáveis
- Função de Green
- Teoria da perturbação
- Transformada de Laplace e Fourier

Soluções numéricas

Podem ser obtidas para problemas gerais, independentemente da complexidade geométrica, dos parâmetros físicos e das relações constitutivas. São empregadas diferentes técnicas numéricas:

- Método diferenças finitas (FDM)
- Método elementos finitos (FEM)
- Método volumes finitos (FVM)
- Método elementos de contorno (BEM)

1.5 Pontos de partida da modelação

Durante o planejamento do modelo dever-se-ia primeiramente responder algumas questões relevantes:

1. Qual é o problema?
2. Qual é o objetivo? Quais respostas estou necessitando?
3. É necessário um modelo para se resolver o problema?
4. Quais são os dados disponíveis (conhecidos)?
5. Posso verificar através de medições os resultados do modelo? (Aferição)
6. Quais processos são considerados?
 - escoamento de fluido
 - Transporte de calor
 - Transporte de gás
 - escoamento multifásico (por exemplo: água e óleo)
 - Transporte de vários componentes com reações químicas (multicomponente)

1.6 Limitações de um modelo

Após a decisão sobre a utilização de um modelo, deve-se considerar que:

- Todos os modelos têm vantagens e desvantagens.
- Possíveis soluções de um modelo:
 - Solução errada para problema bem-posto (correto)
 - Solução correta para problema errado
- O modelo é somente uma ferramenta para apoiar decisões. Estas só podem ser tomadas, quando existe a familiaridade necessária com os conceitos, técnicas, empregos e limitações da modelação.

Deve-se, no entanto ter em mente que nenhum modelo é capaz de descrever exatamente os processos naturais por causa:

- da complexidade dos processos naturais;
- da falta de conhecimento dos parâmetros requeridos
- das simplificações e generalizações que são introduzidas

Portanto, a resposta do modelo é altamente dependente de acertadas simplificações e da exatidão dos parâmetros de entrada.

1.7 Processos importantes na modelação

Na modelação de um problema físico, diferentes etapas com as respectivas definições são importantes. A figura 1.2 apresenta esquematicamente as várias etapas a serem percorridas na elaboração de um modelo para investigação de um processo natural.

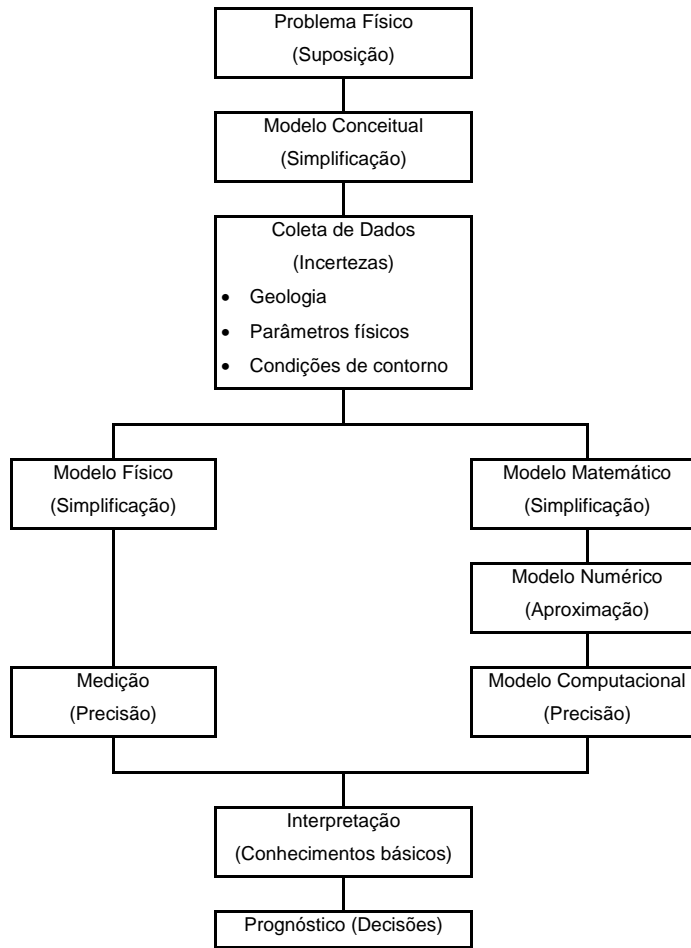


Figura 1.2: Etapas da modelação

Problema Físico \Rightarrow Suposições

- Definição de questões relevantes e suposição do processo natural estudado.

Modelo Conceitual \Rightarrow Simplificações

- Definição das principais relações causa-consequência.
- Descrição qualitativa do comportamento do sistema natural, através da qual podem ser feitas simplificações.

Modelo Matemático \implies Simplificações

- Descrição do processo físico através de relações matemáticas, tendo em vista a conservação de massa e energia. Assim são ignorados ou simplificados alguns fenômenos físicos.
- Definição das condições iniciais e de fronteira.
- Se possível (e se suficiente), pode-se resolver o problema analiticamente.

Modelo numérico \implies Aproximações

- Descrição aproximada da expressão matemática diferencial.
- A formulação diferencial é aproximada por uma formulação algébrica, determinando as variáveis (carga hidráulica, por exemplo) em pontos discretos do modelo.

Modelo computacional \implies Erros de arredondamento

- Tradução do modelo numérico em linguagem computacional.
- Resolução do sistema com diferentes técnicas matriciais \rightarrow Resultados.

Interpretação \implies Conhecimentos físicos

- As grandezas calculadas são interpretadas com base em conhecimentos físicos específicos.
- Comparação dos resultados numéricos com valores medidos (históricos).
- Calibração ou ajuste. Os valores de parâmetros físicos obtidos da literatura frequentemente não são números absolutos, mas indicados como intervalo de valores. A calibração com base em uma série de dados é requerida.
- Validação do modelo, preferencialmente frente uma série de medidas de um período em condições variadas.
- Solução não-desejável \rightarrow Retornar ao ponto 1 (problema físico).

Prognóstico \implies Decisões

- Adaptação do modelo a determinadas perguntas (por exemplo: que consequência terá a perfuração de um poço no lençol freático?).
- Decisões econômicas baseadas em cálculos.
- Análise sensitiva.

1.8 Dimensão espacial de modelos numéricos

São mostradas a seguir as possíveis dimensões de modelos.

0-dimensional :

Exemplo: Reações químicas ($NaCl \Rightarrow Na^+ + Cl^-$)

unidimensional :

Exemplo: Infiltração de precipitação em meio poroso.

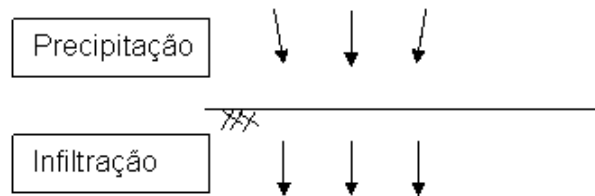


Figura 1.3: Infiltração em meio poroso

Exemplo: Propagação de calor em uma barra metálica.



Figura 1.4: Distribuição de temperatura em barra metálica devido a uma fonte de calor na extremidade da mesma

Bidimensional :

Exemplo: Em modelos de escoamento em que se despreza a componente vertical do escoamento, tem-se um modelo horizontal.



Figura 1.5: Modelo horizontal

Nos modelos em que se considera um corte vertical desprezando-se a componente de fluxo normal ao plano de escoamento, tem-se um modelo vertical.



Figura 1.6: Modelo vertical

Tridimensional :

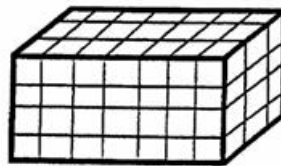


Figura 1.7: Modelo 3D

Modelo acoplado: Horizontal com região 3D :

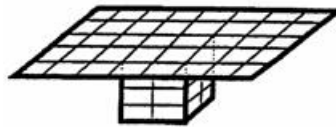


Figura 1.8: Modelo vertical

Capítulo 2

Modelo conceitual de aquíferos

Relatos de longa data exprimem a relevância histórica da utilização da água, contemplada em diversas obras literárias por diversos autores que descrevem a sua evolução. Apesar de obras hidráulicas datadas de séculos, seu estudo atingiu maior atenção, sobretudo do ponto de vista político, recentemente, com o crescimento acelerado da população associado ao crescimento econômico principalmente no setor terciário que, confrontando com o aspecto da disponibilidade da água, considerando sua localização geográfica e finalidades de uso, foi o ponto determinante para a ativação do crescente estudo em torno dos recursos hídricos e a geologia propriamente dita, em função da interatividade destes fatores no ambiente natural e da grande disponibilidade de água concentrada no subsolo. Para tanto, relacionar as características da água com os de natureza geológica, representa a essência crucial para sua utilização sobre vários aspectos da crescente demanda, disciplinando esta necessidade com a indispensável conservação dos recursos hídricos, do meio ambiente, garantindo desta forma a permanência incondicional de vida na Terra.

2.1 Fundamentos hidrogeológicos

O estudo do binômio água-solo é uma ciência dinâmica. É comparado a compostos químicos em equilíbrio e, quando o equilíbrio é perturbado, tenta ajustar-se, e tendo reabastecimento, o equilíbrio tende a reverter-se em “equação” original. De vez em quando um novo fator permanente é introduzido e, neste caso, o equilíbrio na terra muda para a nova forma. Neste contexto, uma água considerada adequada a determinado uso pode tornar-se inútil, sendo verdadeira a recíproca.

Somos desta forma chamados a compreender o sistema como um todo e, para tanto, precisamos de conceitos especiais e métodos para aplicá-los no campo. Não

basta saber isoladamente as características físicas e químicas da água, se uma rocha é saturada e tem permeabilidade alta; mas sim se, por exemplo, há infiltração e reabastecimento; se, faltando chuva numa determinada época, haverá muita armazenagem perto; se, bombeando muito, roubaremos o fluxo normal dos riachos vizinhos; se, irrigando o solo, teremos problemas de salinização, dentre outros.

O estudo da água subterrânea sendo uma ciência geológica, não permite adquirir uma compreensão adequada numa área (objeto de estudo), sem compreender primeiramente a geologia local. Para efetuar seu desenvolvimento próprio, a ciência precisa das habilidades dos matemáticos, engenheiros, físicos e químicos; mas é necessário lembrar sempre que a água ocorre nas rochas da terra. Desta forma, e como ponto de partida deste abrangente estudo, será traçado um panorama das relações água-aqüífero, culminando no estudo experimental que relaciona estas características pelo comportamento do fluido através dos interstícios do meio poroso, disseminadamente conhecido por lei de Darcy.

2.2 Aqüíferos

As formações geológicas que contêm e transmitem água subterrânea são chamadas de aqüíferos (fig.2.1). O volume de água subterrânea que se pode produzir em uma determinada região dependerá das características do aqüífero e da frequência de recarga.

Os aqüíferos, portanto, podem ser classificados de acordo com a pressão das águas nas suas superfícies limítrofes, podendo ser superior, chamada topo, e inferior, chamada base, e ainda em função da capacidade de transmitir água das respectivas camadas limítrofes, ou seja, do topo (camada drenante superior) e da base (camada confinante inferior).

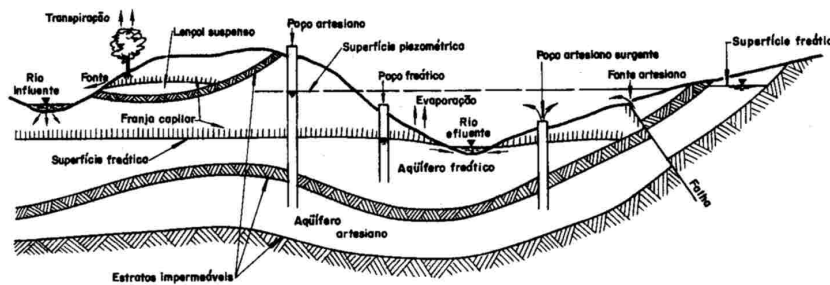


Figura 2.1: Tipos de aqüíferos [44]

Aqüífero é uma formação geológica, formada por rochas permeáveis seja pela

porosidade granular ou pela porosidade fissural, capaz de armazenar e transmitir quantidades significativas de água. O aquífero pode ser de variados tamanhos. Eles podem ter extensão de poucos km² a milhares de km², ou também, podem apresentar espessuras de poucos metros a centenas de metros.

Quando a unidade aquífera é formada por mais de uma formação geológica, com características hidrogeológicas semelhantes, podemos chamá-la de sistema aquífero.

A composição dos aquíferos pode ser bastante variada, mas de forma geral, podemos subdividi-lo em dois grupos principais. Nos aquíferos sedimentares, formados por sedimentos de granulação variada, a água circula através dos poros formados entre os grãos de areia, silte e argila. Os aquíferos cristalinos são formados por rochas duras e maciças, onde a circulação da água se faz nas fissuras e fraturas abertas devido ao movimento tectônico.

Portanto concluímos que são materiais ou rochas que armazenam água e permitem a sua circulação. De modo geral, os solos e sedimentos são assim classificados, compreendendo, ainda nesta categoria, as rochas sedimentares que apresentam porosidade granular (arenitos, alguns calcários detríticos); as rochas com porosidade cárstica (calcários, brechas calcárias) com porosidade devido a alteração, ou a efeitos tectônicos (cataclasitos, por exemplo); e, ainda, os maciços rochosos com grande número de descontinuidades, que apresentam porosidade de fraturas (rochas cristalinas em geral).

O nível d'água subterrânea pode estar submetido a pressões iguais ou superiores à atmosférica. No primeiro caso, os aquíferos são ditos freáticos ou livres e o correspondente nível d'água é denominado nível freático. No segundo caso, são chamados de confinados (ou artesianos) ou semiconfinados e o correspondente nível d'água é denominado nível piezométrico.

Um caso particular de aquífero freático é o dos denominados aquíferos ou lençóis suspensos, de distribuição espacial geralmente restrita e, comumente, com existência temporária. Ocorrem alçados em relação ao nível do lençol d'água local e se formam quando a água, que se infiltra no terreno (maciço natural, solo, aterro, etc.), encontra um obstáculo (superfícies impermeáveis, camada de argila, etc.) que dificulta sua passagem até o lençol freático.

Tipos de aquífero

Aquífero livre:

O aquífero livre (fig.2.2) é uma formação geológica permeável e parcialmente saturada de água. É limitado na base por uma camada impermeável. O nível da água no aquífero está à pressão atmosférica.

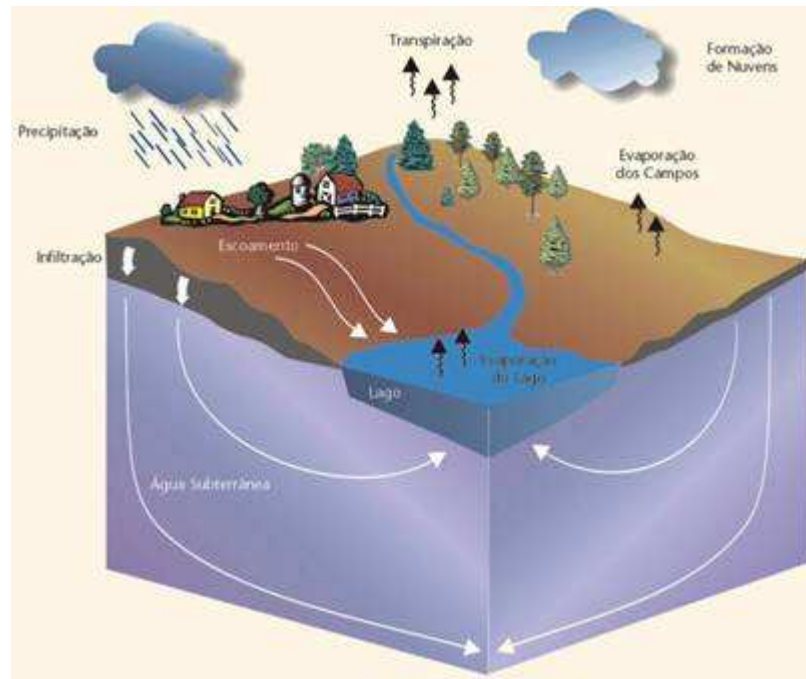


Figura 2.2: Exemplo de Aquífero Livre

Apresenta também a maior parte da superfície da água diretamente em contato com a pressão atmosférica. Sua superfície piezométrica é chamada de superfície freática ou ainda de lençol ou nível freático.

A pressão da água na superfície da zona saturada está em equilíbrio com a pressão atmosférica, com a qual se comunica livremente. São os aquíferos mais comuns e mais explorados pela população. São também os que apresentam maiores problemas de contaminação.

Aquífero confinado ou artesiano:

O aquífero confinado é limitado no topo e na base por camadas impermeáveis, apresenta a espessura da formação geológica totalmente saturada, com a água submetida a uma pressão superior à pressão atmosférica. Isso determina que o nível da água seja superior ao teto confinante. Assim nestes aquíferos a camada saturada está confinada entre duas camadas impermeáveis ou semipermeáveis, de forma que a pressão da água no topo da zona saturada é maior do que a pressão atmosférica naquele ponto, o que faz com que a água suba no poço para além da zona aquífera.

Se a pressão for suficientemente forte a água poderá jorrar espontaneamente pela boca do poço. Neste caso diz-se que temos um poço jorrante.

Há muitas possibilidades geológicas em que a situação de confinamento pode ocorrer. A figura 2.3 abaixo mostra o modelo do Aquífero Guarani.

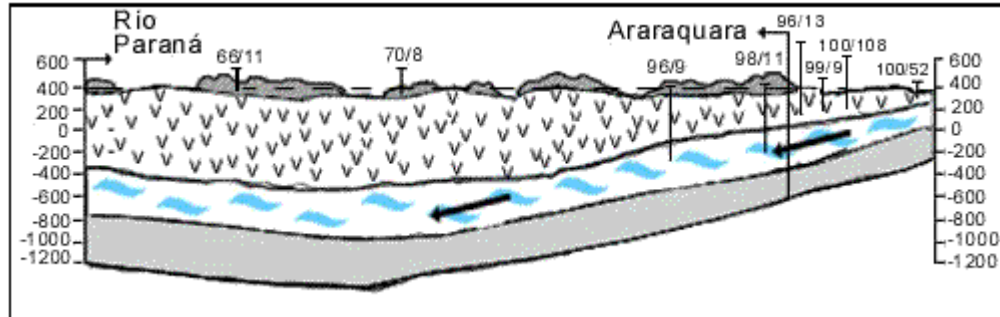


Figura 2.3: Perfil de aquífero confinado (Aquífero Guarani)

2.3 Lei de Darcy

Exceto em grandes cavernas e fendas, o escoamento subterrâneo é quase sempre laminar. Hagen e Poiseuille [5] demonstraram que a velocidade do escoamento em tubos capilares é proporcional à declividade da linha de energia. Henry Darcy [19], engenheiro hidráulico francês, confirmou experimentalmente (fig.5.4) a aplicabilidade desse princípio ao escoamento em areias de granulometria uniforme. Concluiu para tanto, que a vazão do escoamento (volume por unidade de tempo) através de uma coluna com material poroso era:

- proporcional à seção transversal (A) do filtro;
- proporcional à diferença de cargas hidráulicas (h_1 e h_2), entre os piezômetros;
- inversamente proporcional à distância entre os piezômetros (dl).

$Q = -K.A * \frac{(h_2-h_1)}{dl}$,é denominada Lei de Darcy, onde:

- $\frac{Q}{A} = q$ é denominada vazão específica ou velocidade aparente.
- K é o coeficiente de proporcionalidade, chamado de condutividade hidráulica, que leva em conta as características do meio, incluindo porosidade, tamanho e distribuição das partículas, forma e arranjo das partículas, bem como as características do fluido que está escoando (viscosidade e massa específica).
Depende ainda das características do meio poroso e das propriedades do fluido.

Desta forma, a condutividade hidráulica pode ser expressa em função dos parâmetros do meio e do fluido da seguinte forma:

$$K = \frac{k * \rho * g}{\eta} = \frac{k * g}{\nu}, \text{ onde:}$$

K = condutividade hidráulica (L/T);

k = permeabilidade intrínseca do meio poroso (L^2);

ν = viscosidade cinemática do fluido (L^2/T);

g = aceleração gravitacional (LT^2)

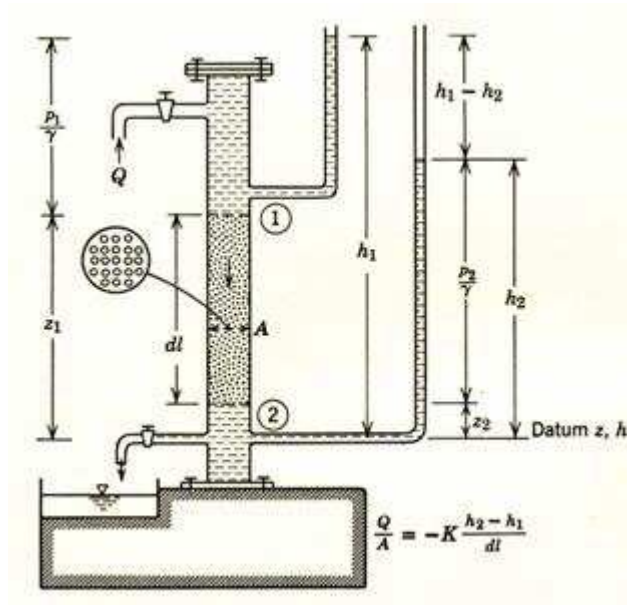


Figura 2.4: Experimento de Darcy

Definindo o gradiente hidráulico

$$\frac{\partial h}{\partial l} = \frac{(h_2 - h_1)}{dl},$$

a Lei de Darcy resulta em:

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial l} = -\frac{k * g}{\nu} \frac{\partial h}{\partial l}$$

É importante frisar, que a Lei de Darcy é válida apenas para escoamentos laminares. Neste tipo de escoamento as velocidades são relativamente pequenas e a água percorre lentamente pelos poros do aquífero. O escoamento é dominado pelas forças viscosas do líquido e a perda de carga varia linearmente com a velocidade.

Na tabela 2.5, são apresentadas faixas de valores de permeabilidade intrínseca e condutividade hidráulica para vários materiais não consolidados.

Figura 2.5: Valores de permeabilidade intrínseca e condutividade hidráulica para vários materiais não consolidados

Material	Permeabilidade Intrínseca (cm ²)	Condutividade Hidráulica (cm/s)
Argila	10 ⁻¹⁴ - 10 ⁻¹¹	10 ⁻⁹ - 10 ⁻⁶
Silte; Silte arenoso	10 ⁻¹¹ - 10 ⁻⁹	10 ⁻⁶ - 10 ⁻⁴
Areia argilosa	10 ⁻¹¹ - 10 ⁻⁹	10 ⁻⁶ - 10 ⁻⁴
Areia siltosa; Areia fina	10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻⁸	10 ⁻⁵ - 10 ⁻³
Areia bem distribuída	10 ⁻⁸ - 10 ⁻⁶	10 ⁻³ - 10 ⁻¹
Cascalho bem distribuído	10 ⁻⁷ - 10 ⁻⁵	10 ⁻² - 10 ⁰

2.4 Escala de trabalho

Os diversos tipos de estudo a serem realizados envolvendo águas subterrâneas, variam naturalmente com os objetivos a serem alcançados. Desta forma, assim como os métodos utilizados para exploração de águas superficiais, para águas subterrâneas são utilizados procedimentos e técnicas de trabalho (mais complexos), através de análises de abrangência (estudo da área de interesse; aspectos sócio-econômicos, legais, jurídicos, e políticos; etc.) e pormenorizadas (características hidrogeologias da área estudada; etc.), onde será possível estabelecer as condições gerais e específicas de contorno do problema estudado. A determinação da escala de trabalho em função de cada estudo específico é imprescindível para a definição do modelo a ser desenvolvido para os objetivos pré-definidos.

Capítulo 3

Modelos matemáticos de fluxo

A equação diferencial que descreve o movimento da água subterrânea é obtida pela combinação da equação da continuidade com a lei de Darcy para meios porosos, que nada mais é do que uma forma da equação da quantidade de movimento para o escoamento laminar. No desenvolvimento da equação básica do fluxo subterrâneo será admitido que as forças de capilaridade são pequenas, e portanto desprezíveis, e que a força viscosa é proporcional à velocidade do fluxo, de modo a considerar o regime como laminar.

3.1 Equação diferencial da continuidade

De uma forma geral, qualquer processo físico na Natureza pode ser descrito matematicamente através de um balanço de volume (fluidos incompressíveis) ou de massa (fluidos compressíveis) em um volume de controle infinitesimal (fig.3.1). À expressão matemática resultante desse balanço dá-se o nome de Equação da Continuidade.

O procedimento de construção da Equação de Continuidade pode ser iniciado através de uma interpretação física do problema, para em seguida proceder-se à descrição matemática dos fenômenos.

Dado o volume de controle elementar ($V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$), apresentado na figura 3.1, o balanço de massa é definido para fisicamente como:

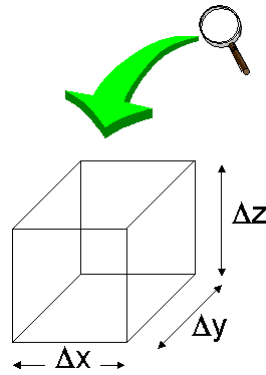


Figura 3.1: Volume de controle para formulação da equação da continuidade

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Variação de massa} \\ \text{no V.C.} \\ \text{no tempo} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Fluxo de massa} \\ \text{através da superfície} \\ \text{do V.C.} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Ganho (injeção) ou} \\ \text{perda (produção)} \\ \text{de massa no V.C.} \end{array} \right\}$$

Acumulação = Fluxo + Fonte

Esses termos de acumulação, fluxo e fonte podem ser expressos matematicamente.

Acumulação:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Variação de massa} \\ \text{no V.C.} \\ \text{no tempo} \end{array} \right\} = \frac{\partial m}{\partial t}$$

Sendo t , o tempo e m , a massa de fluido no V.C. definida como o produto da massa específica (ρ) pelo volume de fluido (V_f):

$$m = \rho \cdot V_f$$

e ϕ a porosidade do aquífero,

$$V_f = \phi \cdot \Delta V$$

a formulação final do termo de acumulação resulta em:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Variação de massa} \\ \text{no V.C.} \\ \text{no tempo} \end{array} \right\} = \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} \Delta V.$$

Fluxo:

O fluxo de massa (\dot{m}_x) através da superfície do Volume de Controle (fig. 3.2) será igual ao produto da massa específica (ρ) pelo fluxo volumétrico (q_x) através da seção transversal (A_x):

$$\dot{m}_x = \rho \cdot q_x \cdot A_x = \rho \cdot q_x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$$

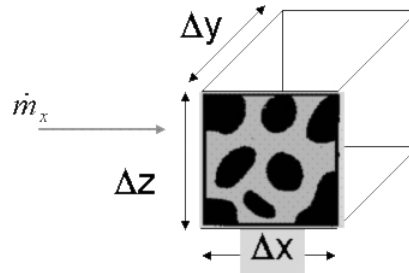


Figura 3.2: Esquema do fluxo de massa através da superfície do volume de controle

Como o fluxo em qualquer direção pode sofrer variações dentro do volume de controle, o esquema de fluxo para as direções x e y pode ser expresso de acordo com a figura 3.3.

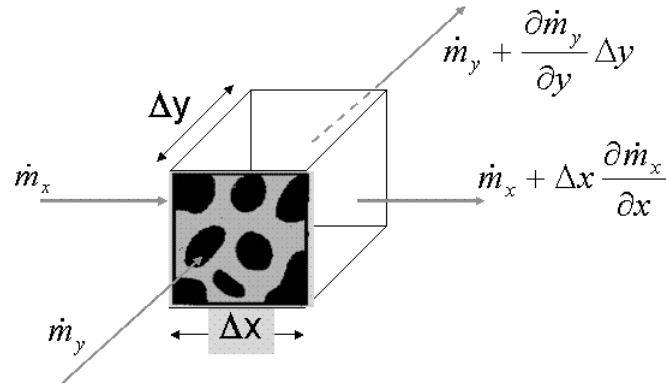


Figura 3.3: Esquema de fluxo de massa nas direções x e y

O balanço de fluxo de massa em cada direção é expresso por:

	Entra (+)	Sai (-)	Fluxo total
Direção x	\dot{m}_x	$-\left(\dot{m}_x + \frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} \Delta x\right)$	$= -\frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} \Delta x$
Direção y	\dot{m}_y	$-\left(\dot{m}_y + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} \Delta y\right)$	$= -\frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} \Delta y$
Direção z	\dot{m}_z	$-\left(\dot{m}_z + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} \Delta z\right)$	$= -\frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} \Delta z$

Assim, o fluxo de massa resultante através do V.C. pode ser definido como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Fluxo de massa} \\ \text{atrás da superfície} \\ \text{no V.C.} \end{array} \right\} = -\left(\frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} \Delta y + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} \Delta z \right)$$

ou

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Fluxo de massa} \\ \text{atrás da superfície} \\ \text{no V.C.} \end{array} \right\} = -\left(\frac{\partial \rho q_x}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial \rho q_y}{\partial y} \Delta y + \frac{\partial \rho q_z}{\partial z} \Delta z \right)$$

Fonte:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ganho (injeção) ou} \\ \text{perda (produção)} \\ \text{de massa no V.C.} \end{array} \right\} = \frac{\partial m}{\partial t}$$

Sendo Q , a taxa de ganho ou perda volumétrica por unidade de volume do V.C.

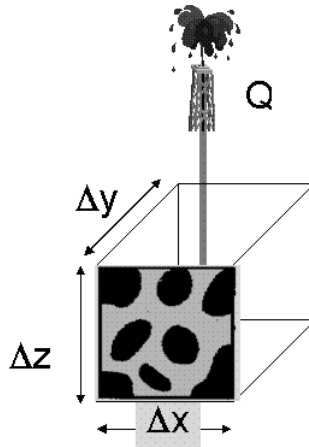


Figura 3.4: Perda de massa no volume de controle

(fig. 3.4), a variação de massa no V.C. pode ser definida como:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \rho \cdot Q \cdot \Delta V$$

A formulação final do termo de fonte resulta em:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ganho (injeção) ou} \\ \text{perda (produção} \\ \text{de massa no V.C.} \end{array} \right\} = \rho \cdot Q \cdot \Delta V$$

O balanço de massa pode finalmente ser escrito matematicamente como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Variação da massa} \\ \text{no V.C.} \\ \text{no tempo} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Fluxo de massa} \\ \text{através da superfície} \\ \text{do V.C.} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Ganho (injeção) ou} \\ \text{perda (produção)} \\ \text{de massa no V.C.} \end{array} \right\}$$

Acumulação = Fluxo + Fonte

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \cdot \Delta V = -\left(\frac{\partial\rho q_x}{\partial x} + \frac{\partial\rho q_y}{\partial y} + \frac{\partial\rho q_z}{\partial z}\right) \cdot \Delta V + \rho \cdot Q \cdot \Delta V$$

ou

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\nabla(\rho q) + \rho Q$$

Substituindo a definição para o fluxo de água subterrânea, expresso pela Lei de Darcy,

$$q = -\vec{K} \frac{\partial h}{\partial l} = -\frac{\vec{k} \cdot g}{\nu} \frac{\partial h}{\partial l}$$

na equação da continuidade, obtém-se a Equação da Difusividade

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\nabla(\rho\vec{K}\nabla h) + \rho Q \quad (3.1)$$

Simplificações:

A equação geral 3.1 é válida para fluidos compressíveis, podendo ser simplificada para fluidos incompressíveis através da adoção de uma massa específica constante ($\rho = \text{cte.}$).

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \nabla(\vec{K}\nabla h) + Q$$

Na ausência de termos de fonte ($Q=0$, perdas ou ganhos no volume de controle), a equação é simplificada para

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \nabla(\vec{K}\nabla h)$$

Em aquíferos homogêneos e isotrópicos, a condutividade hidráulica K é expressa por um escalar. Nesse caso

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = K\nabla^2 h$$

Em regime permanente de escoamento, não há variação de carga hidráulica ao longo do tempo ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) e a equação da continuidade resulta na Equação de Laplace

$$\nabla^2 h = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0$$

3.2 Analogias

Na sua forma bidimensional, a equação de Laplace está presente em diversas disciplinas da ciência, e dá origem à chamada *Teoria Potencial*, que tem sido estudada por diferentes abordagens de resolução tais como: *mapeamento* - baseado em variáveis complexas, *métodos gráficos* - baseado na teoria de redes de fluxo, além do desenvolvimento de *métodos numéricos* bastante eficientes na sua resolução específica, existindo para alguns casos particulares, também *solução analítica*.

Dentre os problemas modelados matematicamente por equações de Laplace estão, além do escoamento em meios porosos, o de transferência de calor e o fluxo elétrico em corpos. Esses problemas apresentam variáveis e leis de formação semelhantes, sendo que, em muitos casos, as soluções analíticas desenvolvidas para um problema, podem ser utilizadas em outro. Na tabela 3.1 é apresentada uma comparação dos diversos tipos de variáveis e leis de formação entre os três tipos de problemas citados anteriormente.

Tabela 3.1: Comparação entre as variáveis de fenômenos regidos pela Teoria Potencial

	Água Subterrânea	Eletricidade	Calor
Variável Potencial	h carga hidráulica	U tensão	T temperatura
Característica Física	K condutividade hidráulica	σ condutividade elétrica	λ condutividade térmica
Grandeza de armazenamento	S coeficiente de armazenamento	C capacitância	C_v capacidade térmica
Componente de Fluxo	Q vazão	I Corrente elétrica	W Fluxo de calor
Lei de formação	$Q = -KA \frac{\partial h}{\partial x}$ Lei de Darcy	$I = -\sigma A \frac{\partial U}{\partial x}$ Lei de Ohm	$W = -\lambda A \frac{\partial T}{\partial x}$ Lei de Fourier

3.3 Condições de contorno

Em geral, as equações diferenciais parciais (EDP), têm uma família de soluções possíveis. Porém, como esta equação está representando um modelo físico, será preciso adicionar condições auxiliares de modo a caracterizar melhor a situação modelada. Essas condições são denominadas, dependendo do problema, de condições *iniciais* e de *fronteira*. Se as condições auxiliares forem prescritas em excesso, pode haver incompatibilidade entre elas e o problema não terá solução. Se forem insuficientes, o problema será indefinido, podendo ter infinitas soluções. Assim, somente

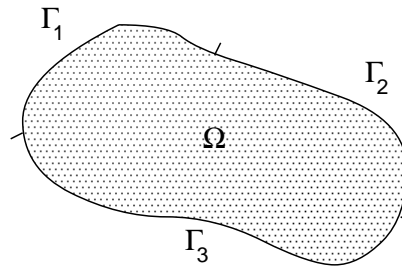


Figura 3.5: Caracterização de um domínio Ω e sua região de contorno Γ_1, Γ_2 e Γ_3

na medida certa se terá o que pode se chamar de problema *bem posto* [15].

Pode se distinguir na natureza dois tipos básicos de fenômenos físicos: aqueles que evoluem com o tempo (transientes) e aqueles que estão em um estado de equilíbrio. Estes processos invariavelmente aparecem juntos.

Problemas de equilíbrio:

Os problemas de equilíbrio são aqueles nos quais a propriedade de interesse não se altera com o passar do tempo. Matematicamente, esses problemas são, em geral, representados por equações diferenciais parciais elípticas, cujas equações modelo são a de *Laplace* e a de *Poisson*.

A solução única para esse tipo de EDP é obtida especificando-se condições sobre a fronteira Γ_i da região Ω , em que se quer resolver o problema (fig. 3.5). Problemas que exigem condições ao longo da fronteira de toda a região são denominados de *problemas de valor de contorno*.

Uma característica dos problemas regidos por equações elípticas, é que toda a região é imediatamente afetada por qualquer mudança no valor da variável dependente em um ponto P no interior da região Ω , ou em sua fronteira Γ_i . Ou seja, qualquer perturbação desloca-se em todas as direções dentro de Ω , afetando todos os demais pontos internos, sendo que essa influência diminui com o aumento da distância do ponto da perturbação. Isso equivale a dizer, que, numericamente, os problemas de equilíbrio variam suavemente dentro da região de domínio Ω [25].

Existem três tipos de condições de fronteira.

1. Condição do primeiro tipo, denominado de condição de *Dirichlet*:

Os valores da grandeza, que se está procurando, no caso de escoamento subterrâneo h , são conhecidos e podem ser empregados no cálculo dos pontos internos. Esse tipo de condição surge ao longo de cursos d'água, em que

o contato hidráulico com o aquífero é bem definido, de forma que se tenha a mesma carga hidráulica em ambos sistemas. Pode ser utilizado, também, quando se dispõe de medições de nível em piezômetros posicionados ao longo do contorno.

$$h = h_0, \text{ em } \Gamma_1$$

2. Condição do segundo tipo, denominado de condição de Neuman:

Apenas o gradiente (normal ou tangencial) é conhecido na fronteira. Nesse caso, o fluxo é especificado. Dessa forma, a variável de interesse h na fronteira, também é uma incógnita e deve ser determinada como parte do processo de solução. Se o gradiente normal na fronteira for nulo, diz-se que a condição de fronteira utilizada é normal ou homogênea. É utilizada quando se conhece o fluxo subterrâneo na fronteira. Dada a dificuldade de obtenção desses dados, normalmente aplica-se somente quando a fronteira do domínio coincide com um divisor de águas subterrâneas ($q_n=0$). O fluxo é considerado nulo num contorno impermeável, numa linha de simetria ou numa linha de corrente, ou de fluxo. Se ao longo de todo o contorno a condição é do tipo Neuman, será necessário especificar pelo menos um ponto com carga hidráulica conhecida para que o problema torne-se determinado.

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial n} = q_0, \text{ em } \Gamma_2$$

3. Condição do terceiro tipo, chamada de Cauchy, Robin ou mista:

É uma combinação linear dos tipos anteriores. Ocorre em contorno semi-permeável, que é representado matematicamente como sendo uma combinação linear da carga hidráulica e do fluxo.

$$a \cdot q_n + b \cdot h = c, \text{ em } \Gamma_3$$

Problemas transientes:

Os problemas transientes, ou de propagação, envolvem a variação temporal das grandezas físicas de interesse. A partir dos valores iniciais dessas grandezas em um certo instante t_o , são calculados os seus novos valores em um instante final de simulação t_f .

Quando se resolve um problema transiente, busca-se a evolução temporal da grandeza física. Para que essa evolução seja representativa do problema estudado, faz-se necessário que a solução inicial seja fisicamente correta. Qualquer outra condição inicial poderá produzir, a princípio, um resultado diferente, não representativo do escoamento que se quer simular.

Os problemas transientes são modelados por equações diferenciais *parabólicas* ou *hiperbólicas*. Quando essas equações apresentam mecanismos dissipadores de energia, os fenômenos são ditos *dissipativos* e as equações que os descrevem são parabólicas. As equações hiperbólicas são responsáveis pela modelagem de problemas de vibração ou de convecção, em que os fenômenos dissipativos são mínimos ou podem ser desprezados.

No caso dos problemas de escoamento de água subterrânea, além das condições de contorno do meio, será necessário conhecer as condições iniciais do aquífero, ou seja, é preciso que no instante, t_0 , os valores de h ao longo da superfície do aquífero sejam conhecidos.

Capítulo 4

Introdução aos métodos numéricos

Na grande maioria dos problemas de escoamento subterrâneo analisados torna-se impraticável qualquer tratamento analítico, devido às geometrias e condições de contorno a que os problemas estão submetidos, mesmo para aqueles casos onde as equações diferenciais que descrevem o fenômeno já se encontram bastante simplificadas. Daí a grande importância dos métodos numéricos. Desta forma, os métodos numéricos encontram-se em uma posição de destaque junto às diversas áreas de pesquisa, sendo objeto de estudo de inúmeros pesquisadores que se concentram no aprimoramento e busca de novas técnicas numéricas que satisfaçam as crescentes exigências da Engenharia Moderna.

A análise de fluxo, dispersão e processos de deformações em meios heterogêneos têm uma longa história em comum com a produção de óleo de reservatórios subterrâneos, por exemplo. No entanto, foi apenas nos últimos vinte anos que se passou a descrever detalhadamente a distribuição de propriedades de materiais nos diversos ramos da Física, como meios porosos e fraturados.

As aproximações clássicas utilizadas em engenharia, chamadas modelos contínuos, são desenvolvidos na forma de equações diferenciais aplicadas a regiões elementares representativas (macroscópicas) cujas propriedades são definidas em termos efetivos por valores médios que representam características microscópicas. Sobre estes intervalos (diferenciais) pequenos o suficiente para o domínio e grandes o bastante para serem homogêneos são aplicadas as leis constitutivas.

As aproximações de processos observados em estruturas desordenadas deram origem aos chamados modelos discretos, que têm sido desenvolvidos, em princípio, para descrever fenômenos a nível microscópico, sido estendido nos últimos anos para descrever fenômenos macro e megascópicos, representados através de redes de fra-

turas ou interstícios. Problemas como a difusão em meios porosos têm sido tratados a partir de formulações específicas [18].

4.1 Modelos Contínuos

Método de Diferenças Finitas (FDM)

Um dos primeiros métodos numéricos desenvolvidos foi o Método de Diferenças Finitas, sendo aplicado, até a atualidade, a uma extensa gama de problemas. Neste método, utiliza-se uma malha sobre todo o domínio físico do problema, a qual contém determinados pontos onde são efetuadas as aproximações envolvidas.

No Método de Diferenças Finitas, as derivadas existentes na equação diferencial de governo são aproximadas utilizando-se uma expansão truncada da série de Taylor. Assim, a equação algébrica resultante de tal aproximação é expressa em termos dos valores da função incógnita em alguns pontos específicos da malha utilizada, os pontos nodais. O sistema de equações algébricas formado por tal procedimento é então resolvido aplicando-se as condições de contorno do problema.

Geralmente, tal esquema de aproximação mostra-se suficientemente robusto para representar de forma adequada a equação diferencial de governo. A principal dificuldade do Método de Diferenças Finitas consiste em sua aplicação para problemas contendo um domínio físico com formas geométricas intrincadas, pois, neste caso, tem-se dificuldades para o estabelecimento adequado da malha a ser utilizada para a discretização. Outra dificuldade surge na aplicação das condições de contorno que, em alguns casos, são tratadas de forma iterativa.

A vantagem na utilização de esquemas envolvendo o Método de Diferenças Finitas consiste em tais esquemas serem comparativamente econômicos, em relação a outros métodos numéricos, para a montagem do sistema linear de equações algébricas resultante, devido à simplicidade das operações envolvidas. Por este motivo, tais esquemas ainda são largamente utilizados atualmente, principalmente em aplicações em áreas como a Mecânica dos Flúidos, a qual requer a aplicação de uma malha altamente refinada.

A solução numérica fornece valores para apenas um número predeterminado e finito de pontos no interior do domínio considerado. Para a solução sobre N pontos do domínio, constroem-se N equações e determina-se N incógnitas [56].

A aplicação deste método a problemas de fluxo de água subterrânea será vista detalhadamente no decorrer do curso.

Método de Elementos Finitos (FEM)

O método numérico mais amplamente utilizado atualmente na Engenharia é o Método de Elementos Finitos. Este método apresenta pouca penetração junto às aplicações da Geofísica para a simulação da propagação de ondas.

Neste método numérico, para a discretização do domínio físico do problema é utilizada uma série de elementos dispostos sobre o domínio cuja forma independe da equação diferencial do problema. Tais elementos são compostos por pontos nodais sobre os quais é equacionado o sistema de equações algébricas resultante.

Os denominados elementos finitos são pequenas porções do domínio físico do problema, onde a variação das incógnitas do problema no interior de tais elementos é aproximada através da aplicação das chamadas funções de interpolação. Estabelece-se, então, uma sentença de Resíduos Ponderados, a fim de proporcionar uma distribuição do erro envolvido em tal aproximação ao longo de todos os elementos finitos que compõem o domínio físico do problema, através do uso de funções auxiliares ou de ponderação, que compõem o núcleo das integrais. Outra forma de interpretação para este processo de minimização do erro pode ser dada como sendo a obtenção do mínimo energético associado a um funcional.

O Método de Elementos Finitos foi inicialmente largamente utilizado em aplicações relacionadas à Aeronáutica, Engenharia Estrutural e Mecânica dos Sólidos, mas atualmente apresenta-se altamente difundido nos diversos ramos da Engenharia. Tal método foi gerado com o intuito de melhor representar problemas possuindo domínios físicos contendo uma geometria intrincada e de forma a simplificar as aplicações das condições de contorno associadas, eliminando assim algumas das dificuldades do Método de Diferenças Finitas.

A implementação computacional do Método de Elementos Finitos consiste na montagem de sub-matrizes que computam as propriedades de cada elemento, através de coeficientes de influência, para então se formar o sistema de equações algébricas associado ao domínio físico do problema, isto é, ao conjunto de elementos utilizados para a discretização. A aplicação das condições de contorno processa-se de maneira simples, e tem-se a possibilidade da representação de problemas com domínios possuindo uma geometria intrincada. Tais características fazem deste método uma ferramenta numérica muito mais versátil quando comparada ao Método de Diferenças Finitas.

As desvantagens do método consistem da dificuldade de modelar meios infinitos e na grande entrada de dados necessária para a discretização de todo o domínio físico do problema. Este fato torna-se ainda mais relevante em problemas tridimensionais. Além disso, em algumas situações o método apresenta resultados imprecisos, embora apresente convergência com o aumento do grau de refinamento utilizado na discretização. O fato do método apresentar resultados imprecisos ocorre,

principalmente, para os casos onde as incógnitas apresentam descontinuidades, singularidades ou uma elevada taxa de variação. Têm-se também dificuldades para modelar problemas com fronteira móvel.

A implementação baseada em elementos finitos pode ser feita com vários tipos de elementos, em cujos nós são computados os valores com base em funções de interpolação (fig. 4.1). O uso de funções de interpolação para definir o potencial através do interior do domínio é um conceito importante que distingue o método de elementos finitos do método de diferenças finitas. No método das diferenças finitas o potencial é definido apenas nos próprios pontos nodais. A definição do potencial pelo interior do domínio permite a aplicação dos princípios dos *resíduos ponderados* e do *variacional*. A subdivisão do interior do domínio em elementos é apontada, geralmente, como uma flexibilidade para problemas de contornos irregulares e domínios heterogêneos ou anisotrópicos [56].

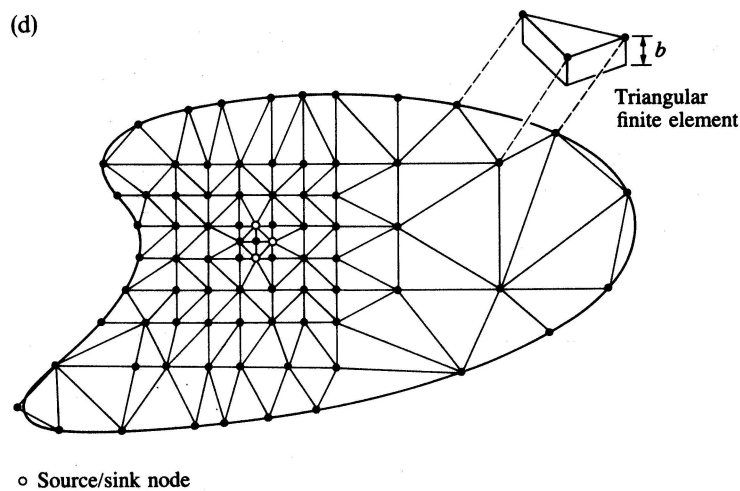


Figura 4.1: Malha de elementos finitos com elementos triangulares

O princípio do variacional é que uma quantidade física, como dissipação de calor, por exemplo, seja minimizada sobre o domínio. O princípio do resíduo ponderado é expresso diretamente pelo erro obtido de uma solução proposta a uma equação diferencial sem relação com alguma grandeza física.

A aplicação do Método de Elementos Finitos a problemas de fluxo de água subterrânea e transporte de poluentes foi descrita detalhadamente por Pinder & Gray [43] e Huyakorn & Pinder [32].

Método de Elementos de Contorno (BEM)

O Método de Elementos de Contorno foi desenvolvido como sendo uma possível alternativa a algumas das dificuldades e problemas associados aos métodos numéricos acima descritos. Este método requer a discretização apenas do contorno do domínio físico do problema, reduzindo assim enormemente o volume de dados necessários para a modelagem de um determinado problema.

A idéia básica deste método é a utilização de um procedimento matemático consistente, baseado em princípios da Teoria das Equações Integrais, a fim de transformar a equação diferencial associada ao modelo matemático em uma expressão integral, onde os limites das integrações encontram-se somente sobre o contorno do domínio físico do problema.

Em seguida, tal expressão integral é discretizada utilizando-se diversos elementos dispostos sobre o contorno do domínio físico do problema. Daí a denominação de Método de Elementos de Contorno, sendo que tais elementos são definidos por um conjunto de pontos nodais. As equações são expressas através de um sistema de equações algébricas, formado pelos denominados coeficientes de influência, que computam a influência de uma ação de domínio concentrada em determinado ponto sobre os pontos nodais de um determinado elemento de contorno.

É interessante destacar que enquanto o Método de Diferenças Finitas envolve apenas aproximações realizadas sobre a equação diferencial de governo do problema, tanto o Método de Elementos Finitos quanto o Método de Elementos de Contorno envolvem o cálculo de integrais realizadas ao longo de seus respectivos elementos.

Para a resolução do sistema de equações algébricas resultante da aplicação e, por conseguinte, a obtenção da solução do problema, aplicam-se as condições de contorno associadas a cada ponto nodal. Como neste método a discretização é feita somente utilizando-se do contorno do domínio físico do problema, a dimensão do problema se reduz de uma unidade. Isto, em termos práticos, implica em uma redução considerável da quantidade de dados necessária à definição da malha a ser utilizada e do esforço computacional, já que o sistema de equações, apesar de ser formado por matrizes cheias e não simétricas, é geralmente de dimensão muito menor que as matrizes que seriam produzidas por outros métodos numéricos.

O Método de Elementos de Contorno pode ser utilizado para modelar, sem dificuldades especiais, problemas envolvendo descontinuidades e singularidades associadas ao modelo matemático. Outra importante característica do método consiste no fato de ser utilizado para modelar problemas com domínio físico infinito, sem a necessidade de truncar o domínio.

Para problemas bi e tri-dimensionais o modelo de elementos de contorno é aplicado através das integrais de Cauchy em termos de variáveis complexas, com a

vantagem de se obter a solução em termos do potencial complexo Ω . A aplicação do método a fluxos de águas subterrâneas é discutida por Liggett e Liu [35]. Dado um potencial Φ em C (contorno discretizado), a equação diferencial deste potencial no domínio é integrada pela aproximação de polinômios para cada elemento do contorno (fig. 4.2). A solução no interior é obtida diferenciando-se o potencial Φ pelo equacionamento original.

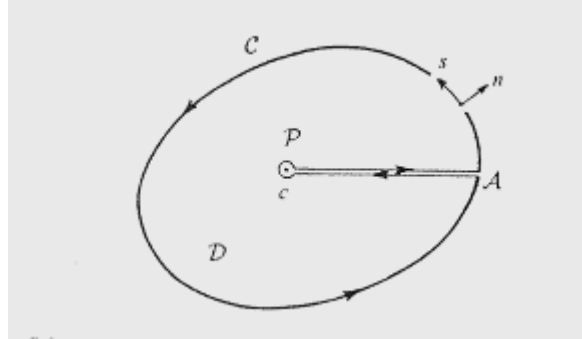


Figura 4.2: Contorno C , caminhamento de integração/diferenciação c (P-A/A-P) com diferencial dn e ds , respectivamente.

Método de Volumes Finitos (FVM)

O Método de Volumes Finitos (FVM) é mais uma forma de se obter uma versão discreta de uma EDP. Diferentemente de outros métodos, entretanto, ele fundamenta-se em uma abordagem física do problema representado pela EDP.

O seu desenvolvimento está intrinsecamente ligado ao conceito de fluxo entre regiões, ou volumes adjacentes, onde o fluxo de uma grandeza ϕ , como massa ou energia, é a quantidade dessa grandeza que atravessa uma fronteira com área A .

A quantidade líquida de ϕ que atravessa um volume de controle V , por unidade de tempo é calculada pela integração, sobre essas fronteiras, da diferença entre os fluxos que entram e os que saem de V , o que é conseguido de forma mais geral pela integração das EDPs ???. O método dos volumes finitos se constitui na aproximação da integração da equação diferencial sobre domínios discretos chamados *volumes finitos*.

A aplicação da técnica de volumes finitos permite escrever equações de diferenças que exprimem as relações de conservação de massa e energia. A interpretação física direta resultante da aplicação do FVM, bem como, a possibilidade de aplicá-lo diretamente sobre malhas com espaçamentos não-uniformes são duas de suas vantagens.

A discretização para volumes finitos, por exemplo, das equações de Navier-Stokes, é feita em malhas deslocadas sobre três tipos diferentes de volumes, mostrados na figura 4.3 [25]. Os volumes de controle das equações de momento na direção x e na direção y são centrados nas velocidades.

Já o volume de controle para a equação da continuidade tem seu centro comum com a célula da malha deslocada.

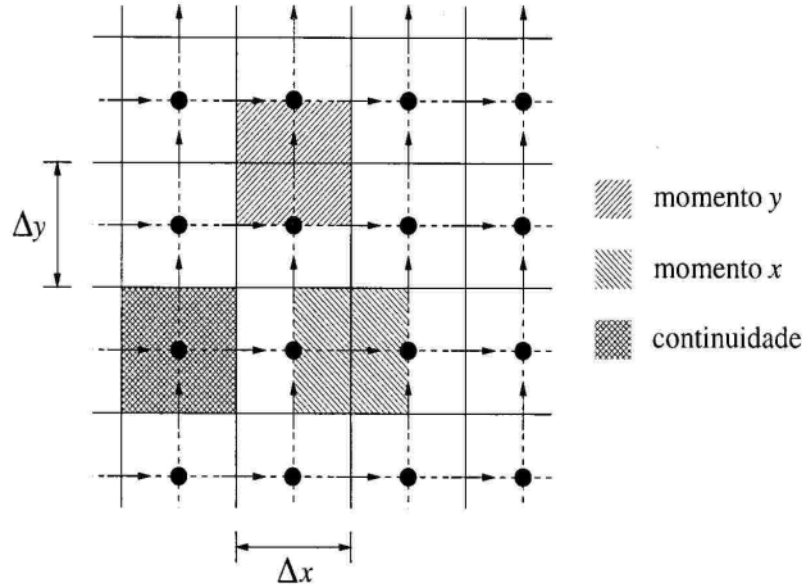


Figura 4.3: Malha deslocada mostrando os três tipos de volumes de controle utilizados para integrar as equações de momento e de continuidade

As equações de Navier-Stokes podem ser integradas tanto nos "volumes" mostrados na figura como também no tempo. Portanto, a derivada temporal presente na equação de momento na direção x ,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (4.1)$$

pode ser aproximada por

$$\begin{aligned} \int_s^w \int_p^t \int_{x,y}^{\Delta x, \Delta y} \frac{\partial u}{\partial t} dt dx dy &\approx u_{i+1/2,j}^{t+\Delta t} - u_{i+1/2,j}^t \vartheta \\ &\approx u_{i+1/2,j}^{n+1} - u_{i+1/2,j}^n \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde ϑ é o volume da célula de volumes finitos ($\Delta x \Delta y \Delta t$).

Da mesma forma as demais derivadas são aproximadas, de maneira que ao final das aproximações a solução esteja escrita para o equacionamento da célula e assim aplicada a todo o domínio.

Método de Elementos Analíticos (AEM)

O método de elementos analíticos foi desenvolvido ?? para a modelagem matemática do fluxo de águas subterrâneas, originalmente em aquíferos regionais. O método difere de modelos analíticos clássicos em que possui graus de liberdade para a escolha da solução elementar. Esse método lembra o método de elementos de contorno, que utiliza as soluções de Cauchy. As soluções empregadas aqui, não são sempre as de Cauchy. Elas são construídas por superposições.

O método de elementos analíticos é baseado na superposição de convenientes funções analíticas e é aplicado geralmente em aquíferos infinitos. Por "conveniente" pode-se entender que a função é construída para modelar uma característica particular de modo eficiente, considerando-se uma liberdade de escolha do elemento que o representará no modelo. Isso é uma vantagem em relação à modelagem por elementos de contorno que não deixa muita liberdade na determinação dos elementos e é, por definição, aplicado a problemas com limites fechados.

A maior diferença entre os modelos de elementos analíticos e os de elementos de contorno é o uso de *regiões de interação* (area-sink), funções que representam a interação sobre áreas limitadas por polígonos (fig. 4.4). Isso permite o emprego do modelo a aquíferos com variações contínuas de permeabilidade e outras propriedades por técnicas de *super-especificação* e *aproximações superblocos*.

Os parâmetros do aquífero são determinados via processo iterativo quando ocorrem cargas freáticas.

Têm sido estudadas, no entanto ainda sem aplicações realizadas, técnicas para a modelagem de escoamentos rotacionais com elementos analíticos baseadas no teorema de Helmholtz, que decompõe o fluxo por regiões de vórtice e para escoamentos transientes através de regiões de interação com resistência variável ou integração de poços transientes ao longo dos contornos [53].

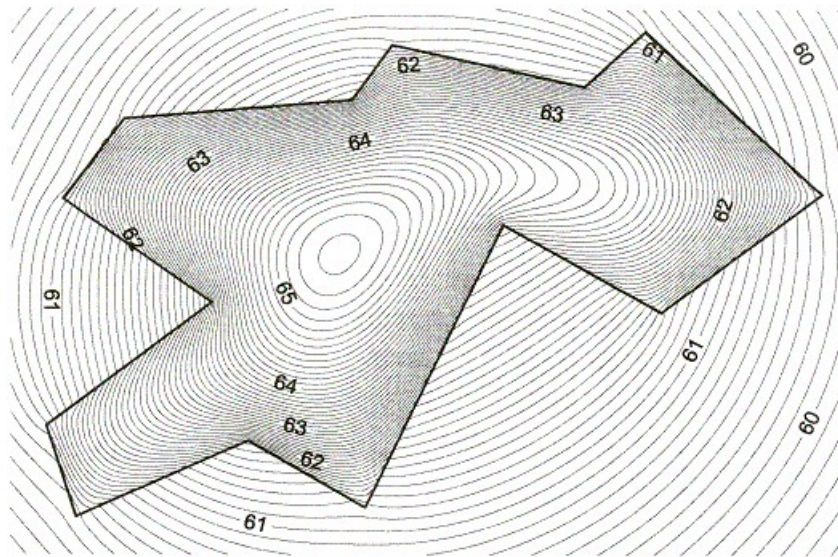


Figura 4.4: Curvas piezométricas para o fluxo em um aquífero não-homogêneo

4.2 Modelos Discretos

Método de Elementos Distintos & Método de Elementos Discretos (DEM)

O método de simulação por elementos discretos foi inicialmente proposto por [17], onde o movimento da partícula de sedimento é simulado pelo traçado do movimento de cilindros rígidos com diâmetros uniformes em um plano vertical. Entre cada cilindro é introduzido o sistema de forças (fig. ??) que comporão a equação de transferência de quantidade de movimento para expressar a interação da partícula.

Goth e Sakai [27] propuseram uma simulação numérica do transporte de sedimentos em estuários com escoamento laminar baseada no método dos elementos distintos focalizando a interação entre partículas, uma vez que a concentração de sedimentos é muito alta, reproduzindo o resultado de trabalhos experimentais. Para o problema de transporte de sedimento, é especificada uma força de superfície pelo atrito do escoamento, calculada pela tensão no fundo, τ_0 , como condição inicial. Apresenta esquematização (fig.4.5) da condição inicial do problema.

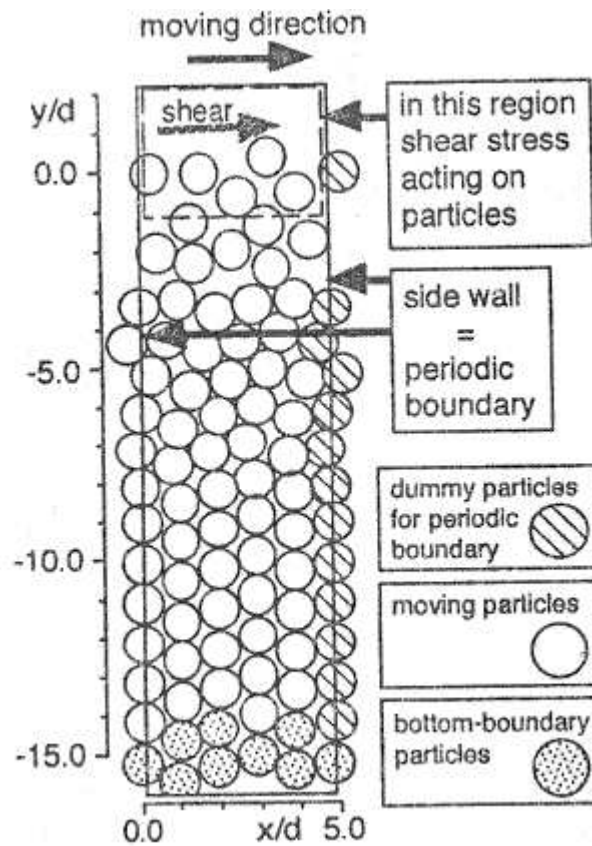


Figura 4.5: Esquematização do domínio de cálculo

Os modelos baseados no Método de Elementos Discretos são primordialmente dirigidos para a simulação de problemas relacionados com comportamentos descontínuos de sistemas particulados. Esses modelos permitem a modelagem de centenas de milhares de partículas ao custo de um significativo trabalho computacional para manter a interdependência de cada partícula. É esse custo computacional que limita sua aceitação. No entanto, os modelos de elementos discretos oferecem mais precisão e dão melhor entendimento dos processos micro-mecânicos no nível da partícula.

Em elementos discretos, a posição de cada partícula é determinada de forma incremental pela aplicação da segunda lei de Newton de movimento e a lei de força deslocamento. O incremento de tempo é escolhido de forma que nenhum outro novo contato entre partículas seja gerado ainda. O modelo será tão bem sucedido quanto for eficiente o esquema de identificação dos contatos e o incremento de tempo escolhido. A identificação de cada partícula é feita mapeando-se o domínio da simulação

através de uma grade cúbica. Assim, pela checagem de cada cubo onde os elementos entraram, pode ser identificado todo contato potencial e existente. O cálculo das forças de contato é feito segundo a metodologia de elementos distintos.

O efeito do fluido no movimento das partículas é computado de uma maneira simplificada. Quando a partícula passa pelo fluido é calculado seu número de Reynolds (Re). Então o coeficiente de arraste é determinado usando uma equação empírica, assim como a força devido ao arraste viscoso que é composta com o empuxo. A posição da partícula é calculada por integração numérica.

Teoria da Percolação e Distribuições Fractais

Uma vez aceito que um meio natural é heterogêneo em vários níveis de escala, também se tem que lidar com suas implicações. Observa-se, por exemplo, que a distribuição da permeabilidade de um meio poroso segue a mesma correlação para todos níveis de escala. A existência dessas correlações tem exigido a introdução de *geometrias fractais* chamadas de auto-semelhantes, que descrevem como valores de propriedades físicas se correlacionam em um sistema, de modo a produzir um modelo realista do meio [37]. Antes disso, há quarenta anos atrás, os fenômenos de polimerização e congelamento foram descritos pela *teoria da percolação* [11], explicando a distribuição de propriedades em um sistema pela interconexão entre suas regiões, mas somente nos anos oitenta foram elaborados algoritmos que mapeavam um meio desordenado por uma rede equivalente, como na fig4.6.

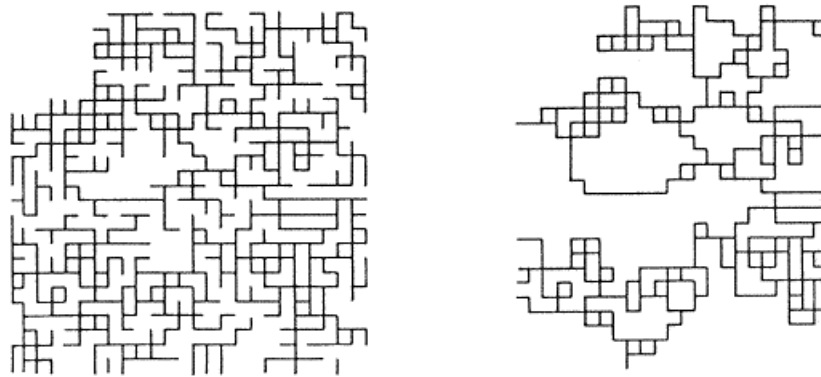


Figura 4.6: Ilustração de uma pequena geração de caminhos possíveis (esquerda) e seu traçado efetivo com 58% de preenchimento (direita).

A teoria da percolação ganhou uma grande importância na interpretação de dados experimentais de propriedades geométricas e topológicas de sistemas porosos juntamente com a lei da escala universal (auto-semelhança), que permite compreen-

der propriedades em escalas maiores a partir de escalas menores e vice-versa.

Tomemos como exemplo o problema de determinação do tamanho dos poros de uma amostra de solo. Dentre os diversos métodos, pode-se ensaiar, a partir de sua relação com o tamanho efetivo dos poros, o fenômeno de adsorção de líquidos. Através do equacionamento do fenômeno aplicado a uma rede de percolação simulada, pode-se pesquisar a rede que fornece as mesmas condições à ocorrência do fenômeno que as reais .

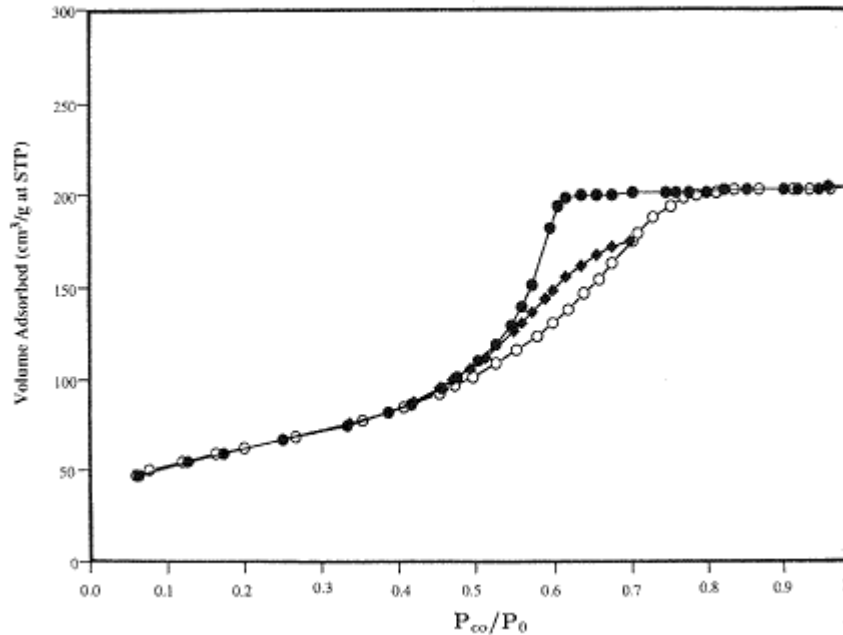


Figura 4.7: Isotermas obtidas experimentalmente. Adsorção/dessorção de nitrogênio para uma amostra de alumínio poroso: adsorção (círculos abertos), desorção (círculos fechados)

A figura 4.7 apresenta isotermas obtidas experimentalmente. A figura 4.8 apresenta as isotermas obtidas com o modelo de percolação, onde Y e X^A são variáveis que descrevem a ocupação dos poros da simulação.

Margolin et al. [40] apresentam uma formulação apropriada para a simulação de redes fraturadas, baseada na teoria da percolação.

A utilização de processos estocásticos que usam, em vez de distribuições de probabilidade, distribuições fractais Gaussianas e Brownianas de propriedades com média zero e variância $|x-x_0|^{2H}$, onde H é o expoente de Hurst [38], podem produzir

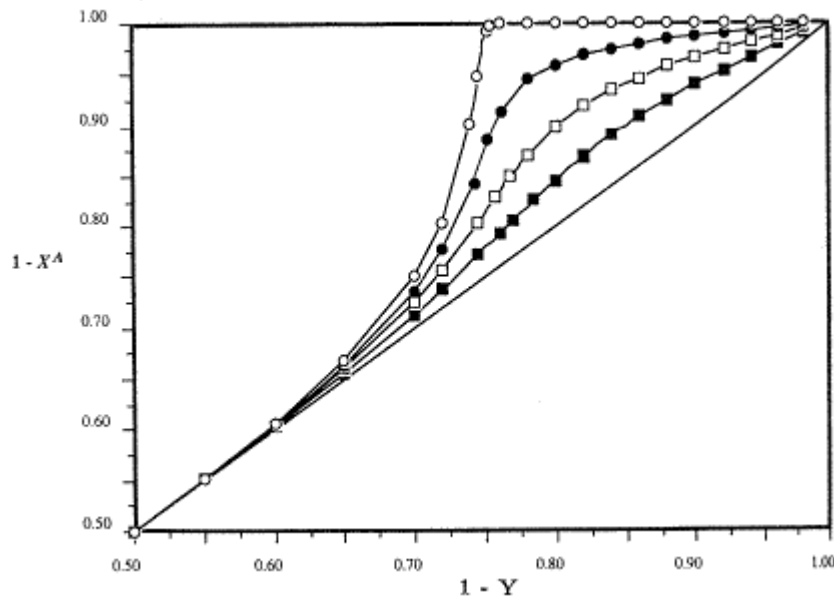


Figura 4.8: Isothermas obtidas com o modelo de percolação para o experimento de adsorção/dessorção

uma modelagem realista de meios porosos em mega-escala (fig. 4.9). Em rochas fraturadas o modelo pode ser obtido também com processos estocásticos, utilizando o conceito de *dimensão fractal*, estimada pela contagem de elementos (fraturas) similares e a distribuição de outras propriedades do meio baseado na distribuição de Poisson [3].

Lattice-gas automata & Lattice-Boltzmann automata

As simulações de reservatórios que normalmente são usadas na indústria de petróleo podem admitir que o fluido (que geralmente é uma mistura de óleo, gás e água) é homogêneo ou representá-lo como uma mistura de diversos hidrocarbonetos e determinar a distribuição desses componentes entre as fases do fluido. Ambas simulações exigem um largo tempo computacional e por isso a elaboração de métodos numéricos eficientes para a solução das equações de transporte tem sido uma área de pesquisa atuante.

Provavelmente Broadwell [11] foi o primeiro a desenvolver um modelo do tipo autômato para problemas de escoamento de fluidos [48]. No seu modelo a velocidade era uma variável discreta, mas o tempo e o espaço contínuos.



Figura 4.9: Campo de permeabilidade bi-dimensional gerado por uma distribuição Browniana com $H=0,89$. Áreas mais escuras e mais claras representam as regiões menos e mais permeáveis, respectivamente.

Os modelos *Lattice gas automata* são grandes malhas onde cada parte pode estar em um dos diversos estados físicos discretos. Essas malhas são ocupadas por partículas e as variáveis que descrevem seu estado são booleanas, indicando a presença ou a ausência de partículas nos nós das malhas. A evolução do sistema é governada por regras de colisões que nos diz como as partículas se movem numa malha após o choque com uma outra partícula (fig. 4.10). A total discretização do fenômeno e o estabelecimento de regras criam condições ideais para a simulação de escoamentos de alta velocidade em processadores paralelos ou vetoriais. Apesar da natureza discreta dos modelos LGA, esses modelos são capazes de exibir uma rica complexidade macroscópica como a turbulência.

Para introduzir o fundamento dos modelos LBA e tornar a exposição mais concreta, considere-se o LGA sobre malhas triangulares e descrito em termos de velocidades de partículas. Nesse modelo as partículas têm momento dado pelo vetor

$$M_i = \left[\cos\left(\pi \frac{(i-1)}{3}\right), \text{sen}\left(\pi \frac{(i-1)}{3}\right) \right], i = 1, \dots, 6 \quad (4.3)$$

A densidade microscópica correspondente ao número de partículas e a conservação do momento na posição x no tempo t são respectivamente

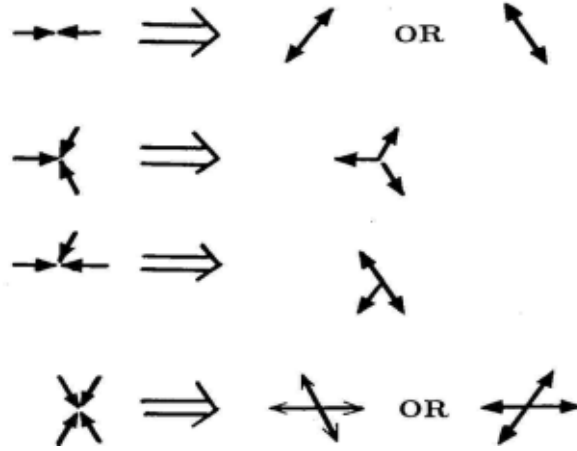


Figura 4.10: Regras de colisão para o movimento da partícula em uma malha triangular

$$n(x, t) = \sum_i n(x, t)_i \quad (4.4)$$

e

$$M(l) = \sum_i M(l)_i n(x, t)_i \quad (4.5)$$

onde $n(x, t)_i$ é a variável booleana que indica a presença ($n_i=1$) ou ausência ($n_i=0$) de uma partícula movendo-se com momento M_i na posição x e tempo t . Usa-se i, j, k, l, \dots referindo-se a coordenadas cartesianas.

Pode-se escrever uma equação para a evolução do sistema se se admitir que a partícula primeiro se mova na direção de sua velocidade e então colida com outras partículas:

$$n(x + v_i, t + 1)_i = n(x, t)_i + \beta(n(x, t)_i) \quad (4.6)$$

onde β_i é um operador de colisão microscópica com expressões booleanas que correspondem às regras de colisão descritas acima e v_i é o vetor velocidade da partícula. Os modelos LGA sofrem com ruídos estatísticos. Para alguns fenômenos físicos isso resulta, entre outras coisas, em divergência da viscosidade em duas dimensões, além de demonstrarem uma dependência da velocidade com a pressão que não é física. Sua aplicabilidade se torna então restrita a escoamentos de baixas velocidades.

Capítulo 5

Método de Diferenças Finitas

A idéia geral do método de diferenças finitas é obter a solução aproximada de uma EDP, em pontos discretos do domínio considerado, mediante a adoção de expansões de Séries de Taylor. Na prática substituem-se as derivadas parciais pela razão incremental com a qual o problema foi *aproximado*. Quando o domínio tem mais de uma variável, a idéia acima é aplicada para cada uma das variáveis separadamente [15].

Para facilitar o entendimento será tratado nesta seção apenas o problema unidimensional, pois sua generalização pode ser obtida sem muitas dificuldades.

5.1 Séries de Taylor

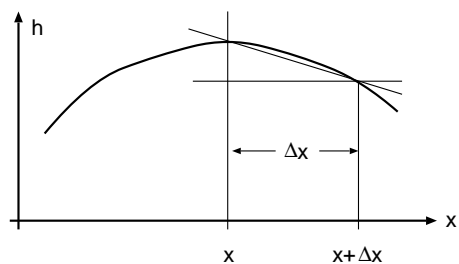


Figura 5.1: Função $h(x)$ para a expansão da série de Taylor

Dada uma função qualquer h (fig. 5.1), o valor dessa função a uma distância Δx de um ponto x qualquer $h(x + \Delta x)$ pode ser estimado através de uma expansão da série de Taylor em torno de $h(x)$:

$$h(x + \Delta x) = h(x) + \Delta x \frac{dh}{dx} \Big|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 h}{dx^2} \Big|_x + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 h}{dx^3} \Big|_x + \dots \quad (5.1)$$

Essa equação pode ser reformulada, para a determinação de $\frac{dh}{dx}$

$$\Delta x \frac{dh}{dx} \Big|_x = h(x + \Delta x) - h(x) - \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 h}{dx^2} \Big|_x - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 h}{dx^3} \Big|_x - \dots$$

Dividindo essa expressão por Δx ,

$$\frac{dh}{dx} \Big|_x = \frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} - \frac{(\Delta x)}{2!} \frac{d^2 h}{dx^2} \Big|_x - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 h}{dx^3} \Big|_x - \dots$$

obtém-se a primeira derivada de h em x na posição x

$$\frac{dh}{dx} \Big|_x = \frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} - O(\Delta x). \quad (5.2)$$

Essa expressão é um quociente de diferenças que representa uma aproximação de primeira ordem para a primeira derivada de h na direção x , utilizando *diferenças ascendentes* ou progressivas (*forward difference*, em inglês). Esse nome surge porque, no cálculo da derivada em x , foi utilizado um ponto adiante, no caso em $x + \Delta x$. De acordo com a figura 5.1, essa derivada é aproximada pela declividade da reta que une os pontos $h(x)$ e $h(x + \Delta x)$.

O termo $O(\Delta x)$ representa o erro local de truncamento (ELT), expresso pelos termos truncados da série de Taylor

$$O(\Delta x) = -\frac{(\Delta x)}{2!} \frac{d^2 h}{dx^2} \Big|_x - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 h}{dx^3} \Big|_x - \dots$$

Esse erro aparece devido à utilização de um número finito de termos na série de Taylor. Como não podemos tratar os infinitos termos dessa série na aproximação numérica para a derivada de h , a série foi truncada a partir da derivada de segunda ordem.

Quando $\Delta x \rightarrow 0$ o erro resultante do truncamento também tende a zero (ELT $\rightarrow 0$). Assim, o termo $O(\Delta x)$ (leia-se “da ordem Δx ”) fornece uma medida da diferença entre o valor exato da derivada e sua aproximação numérica, indicando

também como essa diferença varia com a redução do espaçamento Δx , isto é, com o refinamento da malha. Deve-se notar que uma expressão de tipo $O(\Delta x)$ só indica como o erro local de truncamento varia com o refinamento da malha, e não o valor do erro [25].

Raciocínio análogo permite a expansão da série de Taylor, em torno do ponto x para estimar o valor da função h em um ponto anterior $h(x - \Delta x)$ (fig. 5.2).

$$h(x - \Delta x) = h(x) - \Delta x \left. \frac{dh}{dx} \right|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2h}{dx^2} \right|_x - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{d^3h}{dx^3} \right|_x + \dots \quad (5.3)$$

e assim

$$\left. \frac{dh}{dx} \right|_x = \frac{h(x) - h(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (5.4)$$

Essa aproximação recebe o nome de *diferença descendente*, retrógrada ou atrasada (do inglês *backward difference*). Também neste caso, o primeiro termo truncado é da ordem de Δx ($O(\Delta x)$), e o erro varia linearmente com Δx .

Uma terceira alternativa é obtida subtraindo a equação 5.3 da 5.1

$$h(x + \Delta x) - h(x - \Delta x) = 2\Delta x \left. \frac{dh}{dx} \right|_x + O(\Delta x^2)$$

Essa aproximação resulta em um esquema de *diferenças finitas centrais*

$$\left. \frac{dh}{dx} \right|_x = \frac{h(x + \Delta x) - h(x - \Delta x)}{2\Delta x} - O(\Delta x^2) \quad (5.5)$$

Na qual o erro varia com $(\Delta x)^2$. Dividindo Δx por 2, o erro é dividido por 4. Essa afirmação não se refere ao erro absoluto, mas é uma estimativa de como o erro deve variar quando Δx é reduzido.

Para a descrição de processos de escoamento no subsolo, no entanto, é necessária a aproximação de derivadas de segunda ordem. O quociente de diferenças para esse caso pode ser definido considerando na aproximação, o segundo termo da expansão da série de Taylor.

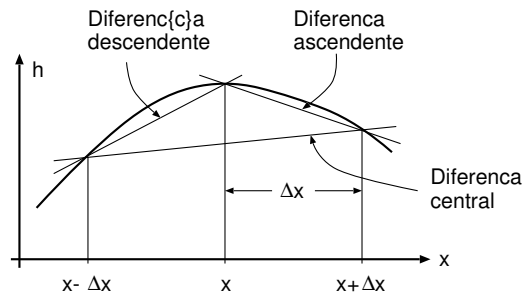


Figura 5.2: Diferentes formas para a definição de quocientes de diferenças.

Somando as equações 5.3 e 5.1

$$h(x + \Delta x) + h(x - \Delta x) = 2 \cdot h(x) + 2 \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 h}{dx^2} \Big|_x + O(\Delta x^4)$$

obtém-se

$$\frac{d^2 h}{dx^2} \Big|_x = \frac{h(x + \Delta x) - 2h(x) + h(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} - O(\Delta x^2) \quad (5.6)$$

Seguindo os procedimentos acima, a partir da expansão da Série de Taylor, podem ser derivados quocientes de diferenças para diferentes ordens de derivada e erro. As tabelas 5.1 a 5.5 apresentam um resumo da primeira à quarta ordem das derivadas de $h(x)$ para diferenças ascendentes, descendentes e centrais [57].

Tabela 5.1: Diferenças ascendentes $O(\Delta x)$

	h_i	h_{i+1}	h_{i+2}	h_{i+3}	h_{i+4}
$\Delta x \frac{\partial h}{\partial x} =$	-1	1			
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} =$	1	-2	1		
$\Delta x^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} =$	-1	3	-3	1	
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} =$	1	-4	6	-4	1

$+O(\Delta x)$

Tabela 5.2: Diferenças descendentes $O(\Delta x)$

	h_{i-4}	h_{i-3}	h_{i-2}	h_{i-1}	h_i
$\Delta x \frac{\partial h}{\partial x} =$				-1	1
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} =$			1	-2	1
$\Delta x^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} =$		-1	3	-3	1
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} =$	1	-4	6	-4	1

$+O(\Delta x)$

Tabela 5.3: Diferenças ascendentes $O(\Delta x^2)$

	h_i	h_{i+1}	h_{i+2}	h_{i+3}	h_{i+4}	h_{i+5}
$2\Delta x \frac{\partial h}{\partial x} =$	-3	4	-1			
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} =$	2	-5	4	-1		
$2\Delta x^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} =$	-5	18	-24	14	-3	
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} =$	3	-14	26	-24	11	-2

$+O(\Delta x^2)$

Tabela 5.4: Diferenças descendentes $O(\Delta x^2)$

	h_i	h_{i+1}	h_{i+2}	h_{i+3}	h_{i+4}	h_{i+5}
$2\Delta x \frac{\partial h}{\partial x} =$				1	-4	3
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} =$			-1	4	-5	2
$2\Delta x^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} =$		3	-14	24	-18	5
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} =$	-2	11	-24	26	-14	3

$+O(\Delta x^2)$

Tabela 5.5: Diferenças centrais $O(\Delta x^2)$

	h_{i-2}	h_{i-1}	h_i	h_{i+1}	h_{i+2}	
$2\Delta x \frac{\partial h}{\partial x} =$		-1	0	1		+ $O(\Delta x^2)$
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} =$		1	-2	1		
$2\Delta x^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} =$	1	2	0	-2	1	
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} =$	-1	-4	6	-4	1	

Tabela 5.6: Diferenças centrais $O(\Delta x^4)$

	h_{i-3}	h_{i-2}	h_{i-1}	h_i	h_{i+1}	h_{i+2}	h_{i+3}	
$12\Delta x \frac{\partial h}{\partial x} =$		1	-8	0	8	-1		+ $O(\Delta x^4)$
$12\Delta x^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} =$		-1	16	-30	16	-1		
$8\Delta x^3 \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} =$	1	-8	13	0	-13	8	-1	
$6\Delta x^4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} =$	-1	12	-39	56	-39	12	-1	

Os quocientes de diferenças apresentados têm validade geral e podem ser aplicados a diferentes processos físicos (Transmissão de Calor, Corrente Elétrica, etc).

5.2 Estimativa de erros

Vários tipos de erros estão, em geral, associados à modelagem e à solução numérica das equações diferenciais que representam o fenômeno físico. Nem sempre esses erros são fáceis de identificar; em geral eles se misturam, podendo ou não haver algum cancelamento. É importante que se saiba da existência desses erros para que eles sejam levados em consideração no momento de se avaliar a qualidade da solução numérica.

Antes de definirmos os possíveis tipos de erros no Método de Diferenças Finitas, é necessário conhecer os tipos de soluções:

h_E \Rightarrow Solução exata (analítica)

h_D \Rightarrow Solução aproximada do Método das Diferenças Finitas [$O(\Delta x)^n$]

h_N \Rightarrow Solução numérica do sistema de equações (arredondamento)

Erros de modelagem (EM)

Normalmente, durante a elaboração do modelo matemático que representa o fenômeno físico são feitas algumas simplificações, como, por exemplo, supor que coeficientes são constantes e que termos podem ser desprezados. O resultado é que a solução numérica fornecida pela implementação do modelo, em geral, apresenta diferenças em relação à solução real do problema físico. Dependendo da magnitude dessas diferenças, a solução obtida pode não ser representativa do fenômeno físico.

Erros geométricos (EG)

Quando o sistema de coordenadas não está alinhado com a fronteira do domínio computacional, muitas vezes é necessária a realização de algum tipo de interpolação das condições de fronteira. Por exemplo, na figura 5.3, em que a fronteira F não está alinhada com as linhas $x=cte$ e $y=cte$ do sistema de coordenadas cartesianas, o cálculo da componente do fluxo de água q normal à fronteira F perto do ponto P exige interpolações. Essas interpolações, que utilizam valores da carga hidráulica em pontos adjacentes a P , introduzem imprecisões que podem afetar negativamente a qualidade da solução numérica. Em geral, esse erro pode ser reduzido pelo refinamento da malha, o que aumenta o custo computacional da solução numérica, pela adoção de um sistema de *coordenadas generalizadas*⁵ ou por uma discretização com malhas não-estruturadas.

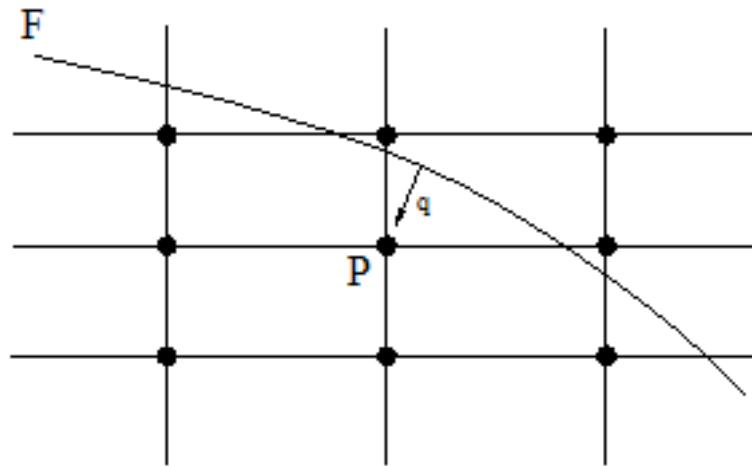


Figura 5.3: Fronteira não-alinhada com o sistema de coordenadas.

Erros de discretização (ED) ou Erro local de truncamento (ELT)

É o erro local de truncamento apresentado na seção 5.1. Surge devido ao truncamento das séries de Taylor empregadas nas aproximações das derivadas por expressões algébricas. É reduzido conforme aumentamos a ordem da discretização, isto é, ao passarmos de, por exemplo, uma discretização de $O(\Delta x)$ para uma de $O(\Delta x)^2$. A *qualidade* da solução numérica, porém, não melhora, necessariamente, com o aumento da ordem da discretização, pois quanto maior a ordem de uma discretização, mais sujeita à instabilidade é o método numérico que a utiliza. Em geral, é melhor utilizarmos uma discretização que seja de $O(\Delta x)^2$, por exemplo, em uma malha “fina”, do que uma de $O(\Delta x)^4$ em uma malha “grossa”. O erro local de truncamento é definido como a diferença entre a solução exata da EDP e a solução exata da EDF (equação de diferenças finitas).

$$ED = |h_E - h_D| \approx O(\Delta x)^n$$

Erros de convergência (EC)

Em um método iterativo de solução devemos escolher um critério de convergência, ou de parada, para encerrar os cálculos. Diminuindo-se a tolerância do critério de convergência, pode-se reduzir os erros de convergência com um aumento do custo computacional no cálculo da solução numérica. Os erros de convergência são definidos como a diferença entre a solução fornecida pelo método numérico iterativo e a solução exata das EDFs.

$$EC = |h_D - h_N|$$

Erros de arredondamento

Devido à representação finita dos números no computador. Não pode ser evitado, mas, pela utilização de precisão dupla nas operações aritméticas e na representação dos números pelo computador, pode ter seu efeito reduzido.

Erro total (ET)

Quando não existem erros do tipos geométrico ou de modelagem, é possível estimar o erro total:

$$ET = |h_E - h_N| \leq |h_E - h_D| + |h_D - h_N|$$

5.3 Diferenças Finitas no caso uni-dimensional

Com o auxílio de um exemplo uni-dimensional, será apresentada a metodologia para aplicação do método numérico para a solução da equação de fluxo subterrâneo

(Equação de Laplace). O objetivo é determinar a distribuição de carga hidráulica no interior do domínio.

Considere o caso mais simples, de fluxo homogêneo (Experimento de Darcy) entre os pontos x_1 com h_{x_1} e x_2 com h_{x_2} (fig. 5.4).

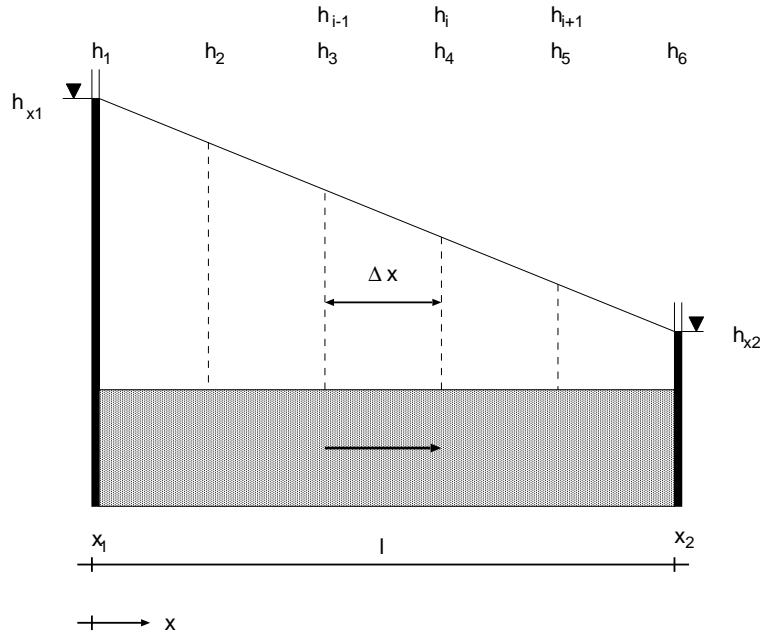


Figura 5.4: Esquema do experimento de Darcy e a distribuição de carga hidráulica ao longo da direção de escoamento.

A equação de Laplace para esse caso é reduzida a

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = 0, \quad (5.7)$$

já que as componentes de fluxo nas direções x e y nesse caso linear são nulas e, conseqüentemente, as segundas derivadas das cargas hidráulicas também são.

Uma solução analítica para esse exemplo pode ser facilmente determinada. Como

$$\frac{\partial h}{\partial x} = const$$

a solução é representada pela equação da reta, que passa pelos pontos (x_1, h_{x_1}) e (x_2, h_{x_2}) :

$$h = \frac{h_{x_2} - h_{x_1}}{l} \cdot x + h_{x_1} \quad (5.8)$$

Contudo, esse caso simples permite a compreensão do procedimento para a solução numérica da equação diferencial.

Pretende-se obter a solução da equação diferencial para alguns pontos discretos (x_i) do domínio, utilizando quocientes de diferenças. Para este exemplo, pode-se escolher, por exemplo, uma aproximação por diferenças centrais de $O(\Delta x^2)$.

Da tabela 5.5 obtém-se o quociente

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{1 \cdot h_{i+1} - 2h_i + 1 \cdot h_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (5.9)$$

Da equação 5.7 resulta, para $\Delta x = \text{constante}$ em todo o domínio

$$h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1} = 0.$$

Para o caso uni-dimensional apresentado na figura 5.4, com 4 nós internos no domínio, obtém-se 4 equações algébricas

$$\begin{array}{cccccc} \mathbf{h_1} & -2h_2 & +h_3 & & & = 0 \\ & h_2 & -2h_3 & +h_4 & & = 0 \\ & & h_3 & -2h_4 & +h_5 & = 0 \\ & & & h_4 & -2h_5 & +\mathbf{h_6} = 0 \end{array} \quad (5.10)$$

com 4 incógnitas, uma vez que as variáveis em negrito $\mathbf{h_1}$ e $\mathbf{h_6}$ são condições de contorno conhecidas.

O procedimento de aproximação apresentado para esse caso uni-dimensional é conhecido como o *Método de Diferenças Finitas*. O sistema de equações construído pode ser resolvido através de algoritmos *diretos* ou *iterativos* de solução.

5.4 Solução do sistema de equações

Considerando as condições de contorno em $h_1 = 50m$ e $h_6 = 10m$, para o caso uni-dimensional, o sistema de equações a ser resolvido resulta em

$$\begin{array}{rcccccc} -2h_2 & +h_3 & & & & = & -50 \\ h_2 & -2h_3 & +h_4 & & & = & 0 \\ & h_3 & -2h_4 & +h_5 & & = & 0 \\ & & h_4 & -2h_5 & & = & -10 \end{array} \quad (5.11)$$

Em forma matricial

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} h_2 \\ h_3 \\ h_4 \\ h_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -50 \\ 0 \\ 0 \\ -10 \end{Bmatrix} \quad (5.12)$$

Essa matriz é conhecida como tri-diagonal, uma vez que somente a diagonal central e as adjacentes apresentam coeficientes diferentes de zero.

Para a solução do sistema foram desenvolvidos métodos diretos (Eliminação de Gauss, Eliminação de Gauss-Jordan, Cholesky, decomposição LU, etc), cujos algoritmos de implementação foram amplamente publicados [45]. Em geral, esses esquemas são demorados e consomem muita memória. Para o caso especial de matriz tri-diagonal, foi desenvolvido um algoritmo especial, conhecido como Método de Thomas. Detalhes da implementação desse algoritmo, cujo esforço computacional cresce com N (= número de incógnitas) são encontrados na literatura.??

A aplicação do algoritmo de Thomas ao sistema proposto, permite encontrar as cargas hidráulicas no interior do domínio:

$$\begin{aligned} h_5 &= 18 \\ h_4 &= 26 \\ h_3 &= 34 \\ h_2 &= 42 \end{aligned}$$

Essa solução corresponde à solução exata, obtida da equação (5.8).

5.4.1 Métodos iterativos

Para a descrição dos esquemas iterativos, será utilizado o mesmo exemplo do escoamento permanente uni-dimensional. Eram conhecidos $h_1 = 50 m$ e $h_6 = 10 m$, sendo incógnitas as cargas hidráulicas nos 4 nós interiores do domínio (h_2 até h_4).

O fenômeno físico é descrito pela equação 5.7 ou em forma aproximada (discreta)

$$h_{i-1} - 2h_i + h_{i+1} = 0$$

Reformulando em termos da incógnita h_i

$$h_i = \frac{h_{i+1} + h_{i-1}}{2}$$

obtem-se o sistema de equações

$$\begin{aligned} h_2 &= \frac{h_3 + h_1}{2} \\ h_3 &= \frac{h_4 + h_2}{2} \\ h_4 &= \frac{h_5 + h_3}{2} \\ h_5 &= \frac{h_6 + h_4}{2} \end{aligned}$$

Sendo as condições de contorno $h_1 = 50m$ e $h_6 = 10m$ conhecidas.

O Método de **Jacobi** permite calcular o valor da variável em cada nó, como uma função dos valores dos nós adjacentes na iteração anterior

$$h_i^\nu = \frac{h_{i+1}^{\nu-1} + h_{i-1}^{\nu-1}}{2}$$

sendo

- ν = Iteração atual
- $\nu - 1$ = Iteração anterior

Esse processo também pode ser apresentado graficamente (fig. 5.5).

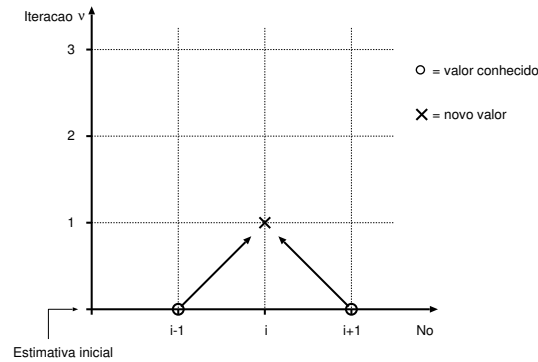


Figura 5.5: Apresentação esquemática da iteração pelo método de Jacobi

Para os nós internos são escolhidos valores iniciais, dando início ao processo de solução iterativa. A escolha desses valores iniciais é de extrema importância para acelerar a convergência do processo iterativo. A tabela a seguir ilustra o processo de cálculo para o exemplo proposto.

	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	Dif. Max. Δ
Início	50.00	0.00	0.00	0.00	0.00	10.00	
1. Iteração	50.00	25.00	0.00	0.00	5.00	10.00	25.00
2. Iteração	50.00	25.00	12.75	2.50	5.00	10.00	12.50
3. Iteração	50.00	31.25	13.75	8.75	6.25	10.00	6.25
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
35. Iteração	50.00	41.99	33.98	25.98	17.99	10.00	0.008
Solução exata	50.00	42.00	34.00	26.00	18.00	10.00	

A iteração é realizada até que a diferença (Δ) entre o passo atual e o anterior em todos os nós seja menor que um limite pré-definido (no exemplo 0,01), que serve de critério de parada. O *chute inicial* nesse exemplo não é considerado bom. Valores iniciais de 30 conduziram a resultados satisfatórios em menos iterações.

Um esquema conhecido como Método de **Gauss-Seidel** incorpora nos cálculos da iteração atual, os valores nos nós já atualizados, convergindo mais rapidamente para a solução final. Formalmente, o esquema é definido para o caso uni-dimensional como

$$h_i^\nu = \frac{h_{i+1}^{\nu-1} + h_{i-1}^\nu}{2}$$

A interpretação gráfica é apresentada na figura 5.6.

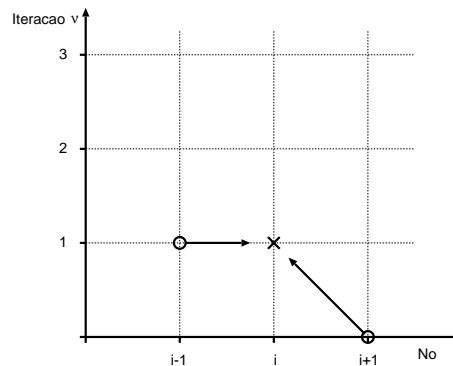


Figura 5.6: Apresentação esquemática da iteração pelo método de Gauss-Seidel

O exemplo anterior processado pelo esquema de Gauss -Seidel conduz aos seguintes resultados:

	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	Dif. Max. Δ
Início	50.00	0.00	0.00	0.00	0.00	10.00	
1. Iteração	50.00	25.00	12.50	6.25	8.13	10.00	25.00
2. Iteração	50.00	31.25	18.75	13.43	11.72	10.00	7.19
3. Iteração	50.00	34.38	23.91	17.81	13.91	10.00	5.16
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
18. Iteração	50.00	41.99	33.98	25.99	17.99	10.00	0.009
Solução exata	50.00	42.00	34.00	26.00	18.00	10.00	

De forma a acelerar o processo de convergência, principalmente na início da iteração, são utilizados esquemas de relaxação **SOR** ou **Successive Over Relaxation**) (fig. 5.8). Em cada nó, a diferença Δ entre a última iteração e a atual é multiplicada por um fator peso (ω , *coeficiente de relaxação*), antes de ser somada ao valor antigo. Formalmente isso significa:

$$\Delta = h_i^\nu - h_i^{\nu-1}$$

$$h_i^\nu = h_i^{\nu-1} + \omega \cdot \Delta$$

ou resumido

$$h_i^\nu = (1 - \omega)h_i^{\nu-1} + \omega \frac{h_{i+1}^{\nu-1} + h_{i-1}^\nu}{2} \quad (5.13)$$

Para o exemplo uni-dimensional proposto foi encontrado por tentativas o valor ótimo $\omega = 1.3$. Os resultados da iteração foram:

	h₁	<i>h₂</i>	<i>h₃</i>	<i>h₄</i>	<i>h₅</i>	h₆	Dif. Max. Δ
Início	50.00	0.00	0.00	0.00	0.00	10.00	
1. Iteração	50.00	32.50	21.13	13.73	15.42	10.00	32.50
2. Iteração	50.00	36.48	26.30	23.00	16.82	10.00	9.27
3. Iteração	50.00	38.65	32.19	24.96	17.67	10.00	5.93
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
9. Iteração	50.00	42.00	34.00	26.00	18.00	10.00	0.003
Solução exata	50.00	42.00	34.00	26.00	18.00	10.00	

Valores usuais para ω encontram-se entre 1 e 2. Escolhendo ω muito grande, o esquema aproxima-se da solução exata muito rapidamente, passando desta. O resultado correto vai ser encontrado somente após algumas iterações, em um processo oscilatório (fig. 5.7). Para ω maior ainda, o processo se torna instável, e a solução correta não é encontrada (fig. 5.7: $\omega = 2.1$). O valor ideal de ω , o qual varia para diferentes modelos, pode ser determinado por tentativas *trial and error* ou através de técnicas específicas [46].

No caso de $\omega = 1$, o esquema SOR corresponde ao Método de Gauss-Seidel. Esquemas com $0 < \omega < 1$ são definidos como *sub-relaxação*.

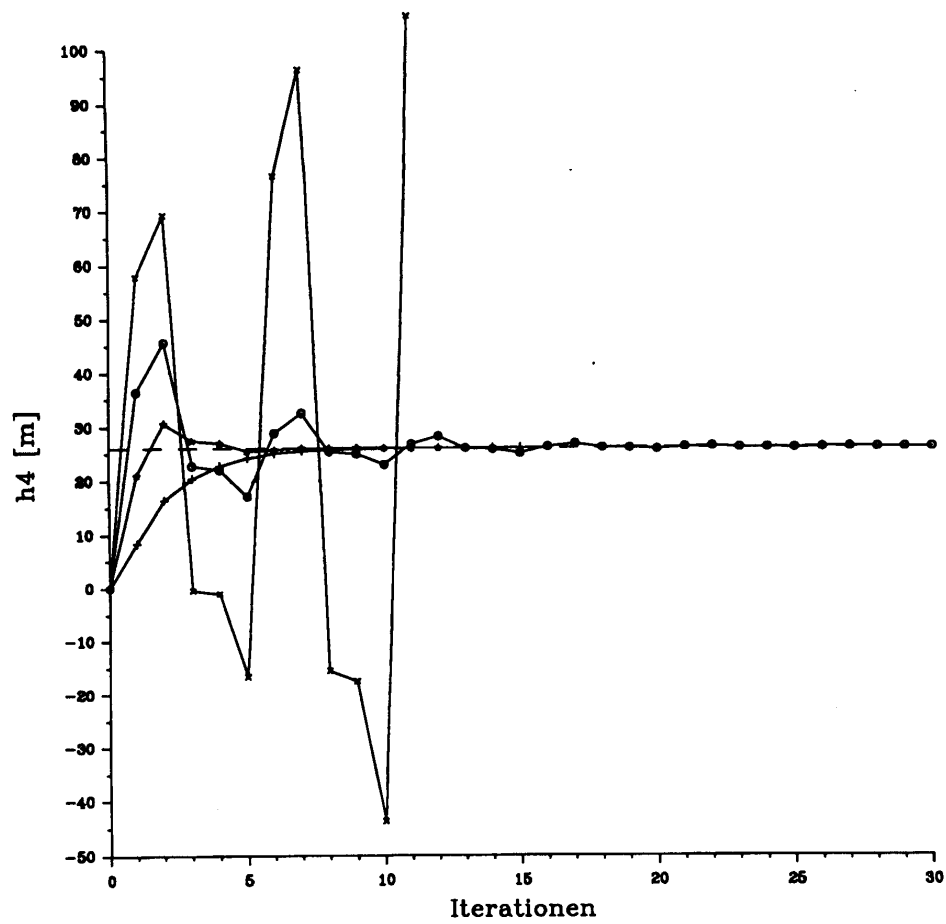


Figura 5.7: Convergência do Esquema SOR para diferentes valores de ω . Para $\omega = 1.1$ (+), o comportamento da solução é semelhante ao da figura 5.8, sendo o resultado encontrado após 12 iterações. Os valores de ω ($\star = 1.5$, $o = 1.8$), são muito grandes e conduzem a oscilação em torno do valor exato (linha contínua). Para $\omega = 2.1$ (\times) o esquema não converge (cálculo interrompido após 11 iterações).

A figura 5.8 apresenta comparativamente a convergência dos esquemas iterativos (Jacobi, Gauss-Seidel e SOR com $w=1,3$), para o nó 4 do problema unidimensional.

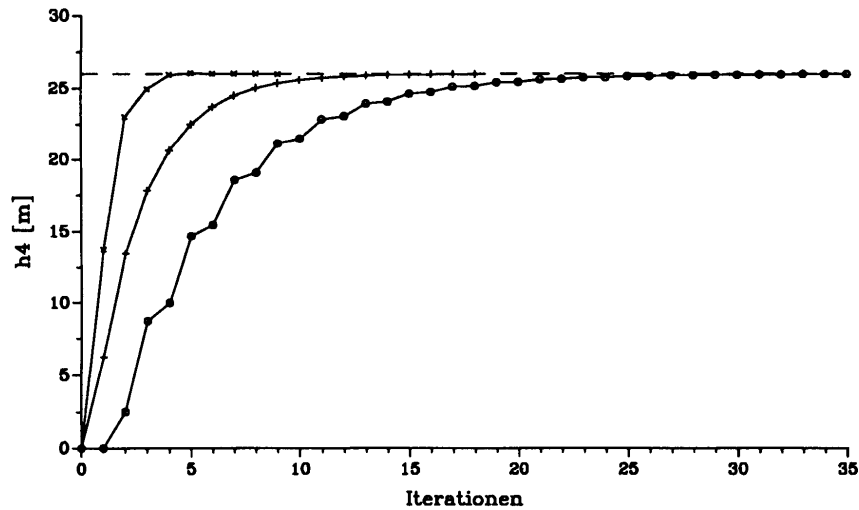


Figura 5.8: Convergência dos diferentes esquemas iterativos (\circ = Jacobi, $+$ = Gauss-Seidel, \times = SOR com $\omega = 1.3$). Variação da carga hidráulica h_4 durante o processo iterativo. Para o esquema SOR foi utilizado o valor ótimo de $\omega = 1.3$, conduzindo a uma rápida convergência ao valor exato (linha pontilhada), sem oscilação (ver fig. 5.7).

5.4.2 Critérios de parada da iteração

Conforme visto, métodos iterativos são normalmente usados para solução de sistemas matriciais do tipo $[A] \cdot \{h\} = \{f\}$, sendo:

$[A]$ - a matriz de coeficientes;

$\{h\}$ - o vetor de incógnitas do sistema de equações;

$\{f\}$ - o vetor dos esforços atuantes no sistema.

Nos métodos iterativos, o vetor solução é obtido recursivamente por consequência de uma série de correções aplicadas a uma aproximação inicial $\{h\}^0 = (\{h\}_1^0, \{h\}_2^0, \dots, \{h\}_n^0)$.

$\{h\}_j^0$ representa o j -ésimo componente do vetor solução, e o índice superior indica o número da iteração, contado a partir de zero, que é a estimativa inicial.

A partir do vetor $\{h\}^0$, o método iterativo gera, então, uma sequência de vetores

$$\{h\}^1, \{h\}^2, \dots, \{h\}^v$$

Se esta sequência satisfaz

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \{h\}^v = \{h\}$$

então, dizemos que o método iterativo converge para a solução do sistema de equações, caso ela exista. Essa sequência de vetores pode ser gerada de acordo com os métodos iterativos vistos (Jacobi, Gauss-Seidel, etc).

A v -ésima iteração gera, a partir de um vetor solução $\{h\}^v$, o vetor $\{h\}^{v+1}$; este é uma melhor representação do vetor solução $\{h\}$. A qualidade da aproximação da solução exata do sistema linear, após um dado número de iterações dentro de uma dada tolerância, depende do método iterativo empregado e das propriedades da matriz de coeficientes A . O processo iterativo é terminado quando um *critério de parada* é satisfeito. Esse critério indica se a solução obtida na v -ésima iteração é representativa. Diz-se, então, que a solução numérica convergiu para a solução do sistema de equações.

A aproximação inicial $\{h\}^0$ para o vetor solução $\{h\}$, pode ser qualquer, uma vez que, a convergência dos métodos de solução adotados é, em geral, independente do vetor inicial escolhido. O número de iterações até a convergência é que aumenta ou diminui, dependendo da diferença entre $\{h\}^0$ e a solução $\{h\}$.

Dispondo de dois vetores solução $\{h\}^v$ e $\{h\}^{v-1}$, com N elementos cada, e de uma tolerância $\varepsilon_i > 0$, alguns critérios de parada frequentemente adotados são:

Critério do Erro Absoluto:

$$\Delta^v = \text{máx. } |h_i^v - h_i^{v-1}|,$$

sendo $1 \leq i \leq N$.

Itera-se até que $\Delta^\nu \leq \varepsilon$ ou seja, o erro absoluto entre iterações sucessivas para todas as incógnitas do problema é, menor que a tolerância estabelecida.

Critério do Erro Relativo

$$E^\nu = \frac{\Delta^\nu}{M^\nu}, \text{ sendo } M^\nu = \max_i |h_i^\nu| \text{ ou } M^\nu = \min_i |h_i^\nu| \text{ e } 1 \leq i \leq N.$$

Itera-se até que $E^\nu \leq \varepsilon$ ou seja, o erro relativo máximo é menor que a tolerância. Obs.: Este é o método mais usado!

Soma dos Erros

$$S^\nu = \sum_{i=1}^m |h_i^\nu - h_i^{\nu-1}|$$

Itera-se até que $S^\nu \leq \varepsilon$ ou seja, a somatória dos erros de todas as incógnitas é menor que a tolerância.

Norma Euclidiana do Resíduo

Dado o sistema de equações,

$$[A] \cdot \{h\} = \{f\}$$

pode-se estimar o erro residual após cada iteração

$$R^\nu = \{f\} - [A] \cdot \{h\}^\nu \neq 0, \text{ sendo:}$$

R^ν - vetor de resíduo,

$[A]$ - matriz de coeficientes,

$\{h\}^\nu$ -vetor de solução na iteração ν .

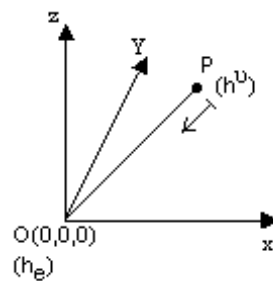
A norma euclidiana pode ser calculada pela expressão:

$$\|R^\nu\|_2 = \left[\sum_{i=1}^N (R_i^\nu)^2 \right]^{1/2}$$

* Iterar até $\|R^\nu\|_2 \leq \varepsilon$

A norma euclidiana do resíduo fornece um escalar positivo que indica “a distância” entre a solução $\{h\}^\nu$ e a solução exata h_e . Esta última é alcançada quando $R^\nu=0$. Analogamente em \mathbf{R} , a distância de um ponto até a origem pode ser determinada pela expressão:

$$d = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$



Interpretando a solução exata (h_e) como origem do sistema e a solução encontrada ($\{h\}^\nu$), como um ponto qualquer, têm-se uma interpretação gráfica da norma euclidiana.

Portanto, em geral, quanto menor a norma euclidiana, mais próxima da solução real do sistema linear está o vetor $\{h\}^\nu$.

A exceção quando um sistema linear é mal condicionado, ou seja, aquele em que ocorre pequenas alterações nos elementos da matriz $[A]$ causam grandes alterações no vetor solução $\{h\}$.

Número Máximo de Iterações

Este é um critério adicional, quando os critérios anteriores adotados exigirem um número muito grande de iterações para atingire a convergência. Pode-se definir um número máximo de iterações, após o qual o processo de cálculo é interrompido. Nesse caso, a solução obtida geralmente é inválida. Por exemplo:

Definindo-se

IT – número de iterações e $IT_{máx.} \leq 10^3$,

itera-se até $IT = IT_{máx.}$

5.4.3 Esquemas iterativos avançados

As vantagens e desvantagens dos algoritmos de solução são discutidas por MSAL [?], de forma muito ilustrativa.

Com os algoritmos diretos de solução são obtidos tempos relativamente baixos para $n=100$ (n = número de incógnitas) até mesmo em computadores lentos. A partir de $n=100$ são escolhidos esquemas que exploram características específicas do problema (largura da banda da matriz). Para $n>1000$ são utilizados quase exclusivamente algoritmos iterativos.

Para sistemas muito grandes são utilizados esquemas baseados em gradientes. Esses esquemas de programação sofisticada não necessitam de parâmetros de otimização e podem ser utilizados como “Black-Box”. Esses esquemas solucionam um sistema de n equações com n incógnitas em no máximo n iterações. Cada iteração é computacionalmente intensiva, de forma que o esquema só é interessante quando o problema inicial $Ax = a$ é transformado em $Bx = b$, através de operações especiais, atingindo a convergência em menos iterações. Essa transformação é denominada pré-condicionamento.

A tabela 5.7 apresenta uma comparação de tempos de processamento para a solução de sistemas de equações lineares em função do número de incógnitas (n). O tempo de processamento foi determinado em uma máquina com processador de 100 MFlops.

Tabela 5.7: Tempo de processamento para solução de sistemas de equações em processador de 100 MFlops.

	Aplicação Geral		Problemas Elipticos		
	Regra de Cramer	Eliminação de Gauss	em R	em R	
			Eliminação de Gauss Otimizado		Esquema PCG
Número de operações	$(n+1)!$	$\frac{2}{3}n^3$	$\approx 2n^2$	$\approx 2n^{7/3}$	$\approx 200n^{5/4}$
Multiplicador	>1	2	2.5	2.5	3
n					
10	0.4 sec	13 μ sec			
12	1 min				
14	3.6 h				
15	2.4 dias				
16	41 dias				
18	38 anos				
20	16000 anos	0.1 msec			
50		1.7 msec			
100		13 msec	0.5 msec		2 msec
1000		13sec	0.05 sec	0.5 sec	0.03 sec
5000		28 min	1.25 sec	20 sec	0.2 sec
10000		3.7 h	5 sec	2 min	0.6 sec
20000		30 h	20 sec	9 min	1.5 sec
50000		19 dias	2 min	1 h	5 sec
100000		150 dias	6.5 h	6.5 h	10 sec

Experiências indicam que os sistemas de equações podem ser divididos em:

1. *Problemas pequenos* ($n \leq 400$):

Equações lineares podem ser solucionadas mesmo com esforço computacional proporcional a n^3 com esquemas diretos:

- Algoritmo de Thomas
- Eliminação de Gauss
- Eliminação de Gauss-Jordan

2. *Problemas médios* ($400 < n \leq 1000$):

Esquemas iterativos são aplicados. Não é problemático, que sejam necessárias mais de n iterações, para atingir a precisão desejada:

- Jacobi

- Gauss-Seidel
- Successive Over-Relaxation (SOR)
- Symmetric SOR (SSOR)

3. *Problemas muito grandes:*

São considerados somente esquemas iterativos que precisam menos de n iterações para atingir a precisão desejada. Esses esquemas são definidos como “Não-estacionários (*nonstationary*)”:

- Gradiente Conjugados (CG)
- Minimal Residual (MINRES)
- Generalized Minimal Residual (GMRES)
- Biconjugate Gradient (BiCG)
- Biconjugate Gradient stabilized (BiCGSTAB)
- etc.

Uma comparação enfocando o tempo de processamento e a necessidade de memória para os diferentes algoritmos é apresentada por Arrett et al. [2].

5.5 Método de Diferenças Finitas em duas dimensões

Analogamente à seção 5.1, o Método de Diferenças Finitas pode ser estendido para a descrição do caso de escoamento bi-dimensional. A discretização do domínio e a correspondente numeração ou indexação dos nós segue a convenção da figura 5.9.

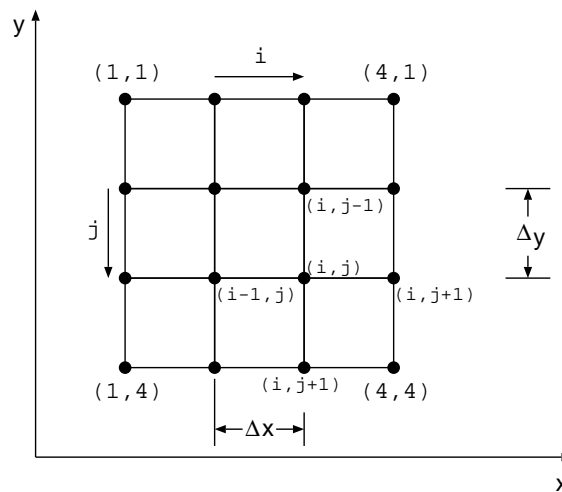


Figura 5.9: Identificação dos nós em uma malha de diferenças finitas (de [56]).

Para o caso de escoamento bi-dimensional em regime permanente, a Equação de Laplace

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = 0, \quad (5.14)$$

é válida, uma vez que $\frac{\partial^2 h}{\partial z^2}$ no caso de escoamento em um plano horizontal é nulo. Com o uso das tabelas apresentadas no item (5.1), as derivadas parciais podem ser transformadas em quocientes de diferenças centrais ($O(\Delta x^2)$)

$$\frac{h_{i+1,j} - 2h_{i,j} + h_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{h_{i,j+1} - 2h_{i,j} + h_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (5.15)$$

Adotando $\Delta x = \Delta y = \text{const}$ e operando-se algebricamente a equação como no caso unidimensional, obtém-se

$$h_{i,j} = \frac{h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1}}{4} \quad (5.16)$$

Neste caso, 5 nós foram envolvidos para a determinação do valor em um ponto. Essa aproximação é conhecida como "estrela de cinco pontos" do inglês (*five-point star*). Para os 4 nós internos da malha no exemplo apresentado na figura 5.9 obtém-se 4 equações algébricas com 4 incógnitas, supondo que nos demais nós as cargas hidráulicas sejam conhecidas como condições de contorno (em negrito):

$$\begin{aligned} h_{2,2} &= \frac{h_{3,2} + \mathbf{h_{1,2}} + h_{2,3} + \mathbf{h_{2,1}}}{4} \\ h_{3,2} &= \frac{\mathbf{h_{4,2}} + h_{2,2} + h_{3,3} + \mathbf{h_{3,1}}}{4} \\ h_{2,3} &= \frac{h_{3,3} + \mathbf{h_{1,3}} + \mathbf{h_{2,4}} + h_{2,2}}{4} \\ h_{3,3} &= \frac{\mathbf{h_{4,3}} + h_{2,3} + \mathbf{h_{3,4}} + h_{3,2}}{4} \end{aligned}$$

A solução iterativa desse sistema de equações pode ser obtida de forma análoga ao caso uni-dimensional (Jacobi, Gauss-Seidel ou SOR).

5.6 Inclusão da Condição de Neuman (2º Tipo)

Conforme visto, a inclusão de condições de Dirichlet (1º Tipo) no Método de Diferenças Finitas pode ser realizada sem problemas. No caso de condição de Neuman (2º Tipo), em que o fluxo normal através do contorno é conhecido, o procedimento é mais elaborado. Para implementação dessa situação, é necessária a definição de nós fictícios, externos ao domínio de interesse. O valor da carga hidráulica nesses nós fictícios pode ser calculado com base na carga dos nós adjacentes interiores e no fluxo conhecido, q_n .

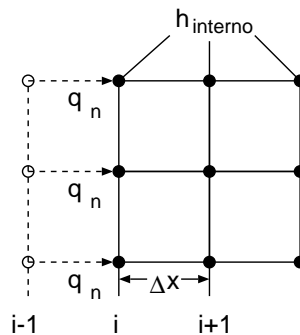


Figura 5.10: Introdução de uma coluna de nós fictícios para aproximação do fluxo através do contorno.

O cálculo pode ser efetuado com o auxílio da Lei de Darcy (??)

$$q_x = -K_x \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x}$$

ou

$$\Delta h = -\frac{q_x \cdot \Delta x}{K_x}.$$

Para a carga hidráulica do nó fictício h_{i-1} pode-se escrever

$$h_{i-1} = \frac{q_x \cdot \Delta x}{K_x} + h_i.$$

Nessa aproximação deve-se sempre verificar a dimensão do problema (uni, bi ou tri-dimensional) e efetuar as necessárias correções de espessura.

Um caso especial é representado pelas linhas de fluxo nulo, $q_x = 0$. Disso resulta que $\frac{\Delta h}{\Delta x} = 0$ e assim $h_{i-1} = h_i$. Uma segunda possibilidade é dada pelo espelhamento do valor de h_{i+1} no nó fictício h_{i-1} . Nos dois casos, o fluxo através do contorno é eliminado matematicamente. Aproximação análoga pode ser efetuada

para a direção y . De qualquer forma, deve ser verificado que ao menos em um ponto a carga hidráulica deve ser definida, pois em caso contrário, o sistema de equações é subdeterminado e uma solução única não pode ser encontrada.

5.7 Solução da equação de fluxo transiente

Nesta seção, não é abordada somente a solução espacial do sistema de equações para o regime permanente. O objetivo é determinar a distribuição de potencial hidráulico ao longo do tempo. Para isso é necessário discretizar, além do espaço, também a variável temporal. O eixo do tempo será dividido em intervalos de tempo Δt . A solução desse problema exige, além das **condições de contorno** em cada instante, também **condições iniciais**, que descrevem a distribuição do potencial (h) no instante ($t = t_0$) em todos os nós do modelo (domínio). Para um problema com estado inicial permanente, as condições iniciais podem eventualmente ser determinadas em todo o domínio com o auxílio da técnica desenvolvida anteriormente. Para a solução de problemas transientes, existem esquemas denominados explícitos e implícitos.

Solução explícita

Para a aproximação por diferenças finitas de $\frac{\partial h}{\partial t}$ em cada nó, é necessária a discretização do eixo temporal em intervalos de tempo Δt . O instante atual é denominado k ($\equiv t_0 + k \cdot \Delta t$), o instante anterior, $k - 1$ ($\equiv t_0 + (k - 1)\Delta t$) e o instante posterior, $k + 1$ ($\equiv t_0 + (k + 1)\Delta t$). A transformação da derivada parcial em um quociente de diferenças é obtida com o auxílio de uma aproximação por diferença ascendente (5.2):

$$\frac{\partial h}{\partial t} \cong \frac{h_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (5.17)$$

ou, de forma equivalente, por diferença descendente (5.4):

$$\frac{\partial h}{\partial t} \cong \frac{h_{i,j}^k - h_{i,j}^{k-1}}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (5.18)$$

e por diferença central (5.5)

$$\frac{\partial h}{\partial t} \cong \frac{h_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^{k-1}}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (5.19)$$

A aproximação por diferença central, apesar de apresentar um erro de truncamento de $O(\Delta x \sup 2)$, não é usada, por conduzir a uma solução instável.

Através da utilização do esquema de diferença ascendente (5.17), a equação de fluxo para um escoamento bi-dimensional horizontal pode ser aproximada por:

$$\frac{h_{i+1,j}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i-1,j}^k}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{i,j+1}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i,j-1}^k}{(\Delta y)^2} = \frac{S}{T} \frac{\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t} - \frac{R_{i,j}^k}{T} \quad (5.20)$$

A derivada espacial nesse caso foi aproximada para um instante conhecido k , de forma que em toda a equação surge somente um potencial no instante desconhecido $k+1$ (em negrito). Formulando a equação de forma a determinar a incógnita $\mathbf{h}_{i,j}^{k+1}$ e escolhendo $\Delta x = \Delta y = a$, obtém-se

$$\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} = \left(1 - \frac{4T\Delta t}{Sa^2}\right) h_{i,j}^k + \left(\frac{4T\Delta t}{Sa^2}\right) \left(\frac{h_{i+1,j}^k + h_{i-1,j}^k + h_{i,j+1}^k + h_{i,j-1}^k}{4}\right) + \frac{W_{i,j}^k \Delta t}{S} \quad (5.21)$$

No lado direito dessa equação encontram-se somente grandezas conhecidas, de forma que a incógnita h no ponto (i,j) e instante $k+1$ pode ser determinada a partir do potencial da estrela de 5 pontos (*five-point star*), em torno do nó (i,j) no instante conhecido k (fig. 5.11a). Esse procedimento extremamente simples e fácil de implementar é conhecido como **aproximação ou solução explícita**. A desvantagem do esquema surge em problemas de instabilidade, quando Δt é muito grande, sendo que o erro aumenta a cada instante. Para evitar problemas de estabilidade em problemas de escoamento bi-dimensional, deve-se observar o critério

$$\frac{T\Delta t}{Sa^2} \leq 0.25 \quad (5.22)$$

em todos os pontos do domínio [?]. De forma análoga, deve-se observar $\frac{T\Delta t}{Sa^2} \leq 0.5$ para escoamento linear (1D) e $\frac{T\Delta t}{Sa^2} \leq 0.125$ para escoamento volumétrico (3D).

Solução implícita

Uma solução estável é obtida quando a derivada espacial é aproximada entre as derivadas nos instantes k e $k + 1$ e, não no início do intervalo de tempo Δt . A proporção, com que cada derivada entra na interpolação, é definida por um fator peso α , sendo $0 \leq \alpha \leq 1$. Sendo o instante $k + 1$ interpolado com peso α , o instante k deve ser interpolado com peso $1 - \alpha$. Disso resulta para a derivada na direção x

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \cong \alpha \frac{\mathbf{h}_{i+1,j}^{k+1} - 2\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} + \mathbf{h}_{i-1,j}^{k+1}}{(\Delta x)^2} + (1 - \alpha) \frac{h_{i+1,j}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i-1,j}^k}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2) \quad (5.23)$$

e de forma equivalente para a derivada na direção y

$$\frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \cong \alpha \frac{\mathbf{h}_{i,j+1}^{k+1} - 2\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} + \mathbf{h}_{i,j-1}^{k+1}}{(\Delta y)^2} + (1 - \alpha) \frac{h_{i,j+1}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i,j-1}^k}{(\Delta y)^2} + O(\Delta x^2) \quad (5.24)$$

Aproximando a equação de fluxo para um escoamento bi-dimensional horizontal por esse esquema e escolhendo $\Delta x = \Delta y = a$, obtém-se

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha(\mathbf{h}_{i+1,j}^{k+1} - 2\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} + \mathbf{h}_{i-1,j}^{k+1}) + (1 - \alpha)(h_{i+1,j}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i-1,j}^k)}{a^2} + \\ & \frac{\alpha(\mathbf{h}_{i,j+1}^{k+1} - 2\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} + \mathbf{h}_{i,j-1}^{k+1}) + (1 - \alpha)(h_{i,j+1}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i,j-1}^k)}{a^2} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{W}{T} \quad (5.25) \\ & \alpha \left(\frac{\mathbf{h}_{i+1,j}^{k+1} + \mathbf{h}_{i-1,j}^{k+1} + \mathbf{h}_{i,j+1}^{k+1} + \mathbf{h}_{i,j-1}^{k+1}}{4} - \mathbf{h}_{i,j}^{k+1} \right) + \\ & (1 - \alpha) \left(\frac{h_{i+1,j}^k + h_{i-1,j}^k + h_{i,j+1}^k + h_{i,j-1}^k}{4} - h_{i,j}^k \right) = \frac{Sa^2}{T} \frac{\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t} - \frac{Wa^2}{T} \quad (5.26) \end{aligned}$$

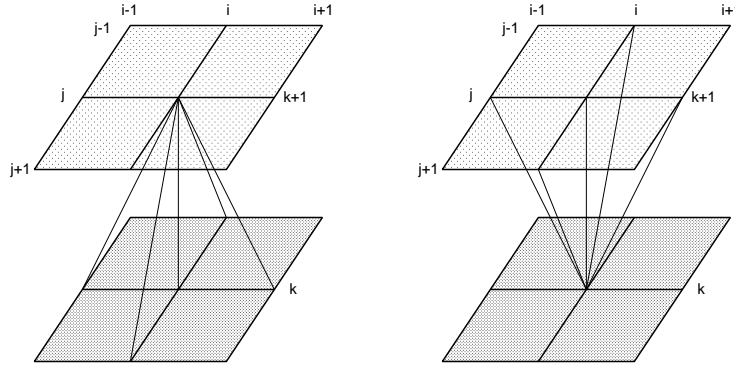


Figura 5.11: Dependência entre os nós nos instantes k e $k + 1$ para solução (a) explícita e (b) implícita.

Substituindo ainda a estrela de quatro pontos $(\frac{h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1}}{4})$ em torno do nó (i, j) pelo símbolo $\diamond_{i,j}$, a equação resulta em

$$\alpha (\diamond_{i,j}^{k+1} - \mathbf{h}_{i,j}^{k+1}) + (1 - \alpha) (\diamond_{i,j}^k - h_{i,j}^k) = \frac{Sa^2}{T} \frac{\mathbf{h}_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t} - \frac{Wa^2}{T} \quad (5.27)$$

Para $\alpha = 0$ obtém-se a solução explícita. Para os demais casos, o valor da incógnita $\mathbf{h}_{i,j}^{k+1}$ não pode ser determinado através da solução de uma única equação em cada instante, uma vez que na equação surgem também os potenciais desconhecidos da estrela de quatro pontos no instante $k + 1$ (fig. 5.11b).

Aqui é necessária a solução do sistema de equações completo e o esquema é conhecido como **esquema de solução implícita**.

A equação aproximada pode ser reescrita como:

$$\left(\frac{a^2 S}{4T\Delta t} + \alpha \right) \mathbf{h}_{i,j}^{k+1} - \alpha \diamond_{i,j}^{k+1} = \frac{a^2 S}{4T\Delta t} h_{i,j}^k + (1 - \alpha) (\diamond_{i,j}^k - h_{i,j}^k) + \frac{a^2 W}{4T} \quad (5.28)$$

Estabelecendo essa equação para todos os potenciais desconhecidos $(h_{i,j})$ no instante $k + 1$, o sistema de equações resultante pode ser resolvido por um esquema direto ou iterativo de solução:

$$\mathbf{h}_{i,j}^{\mathbf{k}+1} = \frac{1}{\left(\frac{a^2 S}{4T\Delta t} + \alpha\right)} \left(\alpha \diamond_{i,j}^{\mathbf{k}+1} + \frac{a^2 S}{4T\Delta t} + (1 - \alpha)(\diamond_{i,j}^k - h_{i,j}^k) + \frac{a^2 W_{i,j}^k}{4T} \right) \quad (5.29)$$

Escolhendo $\alpha = 1$, o esquema de solução é conhecido como **totalmente implícito**, isto é, a derivada espacial é aproximada no instante $k + 1$.

Um caso especial das diversas possíveis aproximações para ($0 < \alpha < 1$) é o esquema de **Crank-Nicholson**, com $\alpha = 0.5$. Nesse caso, é feita uma média das derivadas espaciais em ambos instantes. O esquema de Crank-Nicholson é de extrema importância na prática, por representar geralmente a melhor solução. Enquanto que em todos os outros esquemas de aproximação temporal o erro é da ordem de Δt ($O(\Delta t)$), para $\alpha = 0.5$ o erro é de $O(\Delta t)^2$. Essa observação não se refere ao erro absoluto, mas indica como erro deve reduzir em caso de refinamento.

A tabela (5.8) apresenta uma comparação de resultados de aproximação explícita, por Crank-Nicholson e pelo esquema totalmente implícito, para o rebaixamento transiente do nível do lençol em um aquífero. A solução exata é obtida através da solução analítica de Theis para esse problema. A tabela demonstra a instabilidade da solução explícita, devido ao intervalo de tempo muito grande, e, para esse caso, a melhor aproximação com menos iterações pelo esquema de Crank-Nicholson.

5.8 Convergência, Consistência e Estabilidade

Convergência

Um método numérico aplicado a uma determinada equação diferencial é chamado convergente se, assumindo que não há nenhum erro de contorno, a solução numérica aproxima-se da solução exata da equação diferencial quando o tamanho do intervalo de tempo Δt estiver próximo de zero. Em geral não é um problema de preocupação prática, dado que todas as técnicas numéricas comuns são convergentes quando aplicado a virtualmente qualquer equação diferencial. Isto não significa que na prática a solução numérica sempre chegará à solução exata da equação diferencial quando $\Delta t \rightarrow 0$, desde que erro de contorno estará inevitavelmente presente em qualquer problema computacional [?].

Estabilidade

A estabilidade do método numérico usada para uma determinada equação diferencial é uma questão de considerável importância prática. Nós deveríamos enfatizar primeiro que a propriedade de estabilidade (ou instabilidade) é de fato uma

Tabela 5.8: Comparação de diferentes esquemas de solução para um exemplo de rebaixamento transiente do nível do lençol em um poço [?].

Rebaixamento ($h_0 - h$) em metros para $r = 100$ m de um poço bombeando água de um aquífero confinado [†]

t (dias)	Δt (dias)	$(h_0 - h)$ para $\alpha = 0$	$(h_0 - h)$ para $\alpha = \frac{1}{2}$	Número de iterações	$(h_0 - h)$ para $\alpha = 1$	Número de iterações	$(h_0 - h)$ para Theis solução
0.01	0.01	0.00	0.05	4	0.06	4	0.04
0.05	0.02	0.46	0.41	5	0.38	6	0.42
0.13	0.05	0.83	0.88	7	0.82	9	0.86
0.49	0.17	$0.22 \cdot 10^{3*}$	1.55	14	1.49	19	1.51
1.13	0.38	$0.27 \cdot 10^{3*}$	1.98	22	1.92	31	1.94
5.82	1.95	$0.60 \cdot 10^{3*}$	2.81	59	2.71	74	2.80
13.12	4.38	$0.10 \cdot 10^{3*}$	3.26	101	3.10	114	3.23

* Solução instável

[†] Erro máximo = 0.001

propriedade comum do método e das equações diferenciais e não de um fato só. (O termo "estabilidade" também é usado amplamente para descrever um certo comportamento da solução exata de uma equação diferencial. Não são relacionados os dois conceitos de estabilidade diretamente, embora às vezes seja difícil distinguir os efeitos).

A idéia de estabilidade dos métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias pode ser melhor ilustrada considerando métodos de múltiplos intervalos de tempo. Estes métodos envolvem valores de $f(y,t)$ em vários pontos ao longo do eixo de t . As fórmulas de múltiplos intervalos são, claro que, nada além da representação da equação diferencial original. Estas equações diferenciais podem, teoricamente, ser resolvidas analiticamente, embora normalmente podem ser obtidas só soluções analíticas atuais para casos extremamente simples. Não obstante, a forma geral das soluções analíticas é tal que a presença dos valores múltiplos de $f(y,t)$ ao longo do eixo de t resulta em soluções múltiplas da equação diferencial. Se o método é convergente para o problema considerado, uma destas soluções para a equação diferencial (chamada de solução fundamental) aproximará a solução exata à equação diferencial, e chegará a solução exata arbitrariamente próximo quando $\Delta t \rightarrow 0$ (com exceção de erro de contorno). As soluções restantes para a equação diferencial são chamadas de soluções parasitárias, e é o comportamento destas soluções que determinam se a solução numérica é ou não estál.

Estas soluções parasitárias adquirem este nome do fato que elas se mantêm dos

erros da solução numérica (tais erros sempre estarão presentes, devido a truncamento e à aproximação do contorno). Instabilidade é o resultado de um processo de repetição, no qual as soluções parasitárias crescem sucessivamente a cada instante e o erro aumenta causando uma taxa de crescimento maior nestas soluções. O crescimento da solução parasitária é normalmente exponencial (da forma Ae^{ct}) e é frequentemente oscilatório. A solução fundamental é dominada logo, e o resultado da solução numérica não comporta a semelhança à solução exata da equação diferencial.

Tendo discutido instabilidade, podemos ver agora que uma solução numérica estável é a qual as soluções parasitárias permanecem aparentemente pequena à solução fundamental da equação diferencial, e que a solução fundamental resta uma aproximação razoavelmente boa para a solução exata da equação diferencial (contanto que Δt é suficientemente pequeno). Isto não significa que não pode haver crescimento acumulativo de erro de truncamento e de contorno. Como já se mencionou, a solução do tipo limite para um problema de valor inicial corresponde em muitas formas a uma extrapolação, e é completamente razoável ter erro acumulativo com a extrapolação estendo-se mais distante. Porém, qualquer erro crescerá na pior das hipóteses a uma taxa quase constante em uma solução estável, mas será ampliada fortemente em um instável, devido ao crescimento das soluções parasitárias.

Em quase todas situações, é fácil de distinguir uma solução numérica instável de uma estável, devido ao crescimento exponencial do erro em uma solução instável. Porém, se a solução exata da equação diferencial cresce fortemente com tempo (o qual em alguns contextos também é chamada um instabilidade), pode ser difícil de distinguir entre os dois efeitos. Porém, os efeitos numéricos instáveis são dependentes em tamanho do intervalo (Δt). Assim, se são obtidas soluções numéricas significativamente diferentes (e razoavelmente pequenos tamanhos de intervalo), é razoável assumir que a instabilidade numérica está presente. Se as duas soluções são essencialmente a mesma, então a solução numérica é provavelmente estável e está reproduzindo razoavelmente bem a solução da equação diferencial.

Nós antecedemos uma apresentação matemática formal de estabilidade, simplesmente porque não é prático para executar uma análise de estabilidade formal em qualquer problema real. Na prática, o procedimento é escolher um método satisfatório, e assumindo isso não haverá nenhuma dificuldade com estabilidade. Se instabilidade é encontrada, então pode valer a pena tentar o mesmo método com um intervalo de tamanho reduzido com esperanças de sanar o problema.

Consistência

A consistência está relacionada com a aproximação do sistema contínuo de equações por um sistema discreto. Um esquema de diferenças finitas é dito consistente quando, ao refinarem-se as aproximações por diferenças finitas, no limite as mesmas se tornam matematicamente equivalentes às equações diferenciais origi-

nais. Isto significa que, quando os incrementos espacial e temporal tendem a zero, o erro de truncamento obtido na expansão da solução aproximada por série de Taylor também tende a zero.

Para a solução numérica de um problema linear de valor inicial bem posto, por uma discretização consistente, a estabilidade do método numérico é condição necessária e suficiente para a convergência. A grosso modo, temos:

Capítulo 6

Técnicas especiais de discretização em diferenças finitas

6.1 Derivadas mistas

Nesse item abordaremos a solução pelo método de diferenças finitas em expressões que apresentem derivadas mistas. Uma das possibilidades para essa resolução compete na expansão da expressão utilizando a série de Taylor, conforme abordado em capítulos anteriores. Outra maneira é o desenvolvimento da derivada por partes, considerando a malha da figura 6.1.

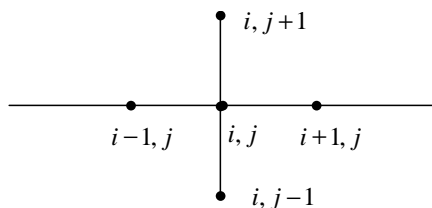


Figura 6.1: Esquema de discretização

A derivada parcial mista $\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = 0$ pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) = 0 \quad (6.1)$$

Aproximando inicialmente a derivada na direção x com diferenciais centrais, temos:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{h_{i+1,j} - h_{i-1,j}}{2\Delta x} \right)$$

Retirando a constante relativa ao espaçamento, pode-se aproximar o termo em y .

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{\partial h_{i+1,j}}{\partial y} - \frac{\partial h_{i-1,j}}{\partial y} \right)$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{h_{i+1,j+1} - h_{i+1,j-1}}{2\Delta y} - \frac{h_{i-1,j+1} - h_{i-1,j-1}}{2\Delta y} \right)$$

E obtemos na expressão 6.2 a aproximação por diferenças finitas da derivada mista 6.1.

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} = \left(\frac{h_{i+1,j} - h_{i+1,j-1} - h_{i-1,j+1} + h_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y} \right) \quad (6.2)$$

6.2 Discretização em meios heterogêneos

Em meios heterogêneos, há a associação de vários subdomínios estatisticamente homogêneos definidos cada um por uma condutividade hidráulica específica $K_{m\theta}$. Segundo Cirillo Cabral [14], são utilizadas as mesmas equações de água subterrânea apresentadas para os meios homogêneos, exceto na superfície de separação entre as regiões, onde aplica-se equações de compatibilização de pressão e do fluxo normal à superfície de separação.

No método de diferenças finitas, uma das possibilidades para resolução desse tipo de problema é fazer a aproximação por partes. Como exemplo, utilizaremos a equação 6.3, assumindo que K é variável ao longo do domínio.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) = 0 \quad (6.3)$$

Para resolução, criam-se dois pontos fictícios $i + \frac{1}{2}$ e $i - \frac{1}{2}$ distanciados por um passo Δx , como na figura 6.2.

A aproximação por partes em torno de i iniciando pela derivada interna, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) = \frac{K \frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} - K \frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{x=x_{i-\frac{1}{2}}}}{\Delta x}$$

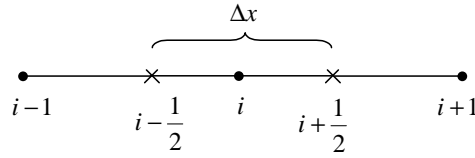


Figura 6.2: Pontos fictícios

Em seguida são aproximadas as derivadas internas:

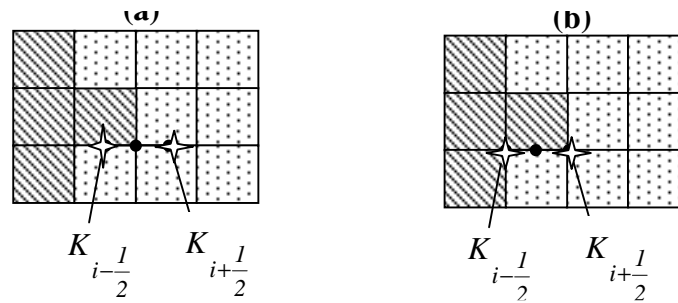
$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) = \frac{K_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} \right) - K_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{h_i - h_{i-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x}$$

Como solução discreta da expressão 6.3 obtemos a expressão 6.4.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) = \frac{K_{i+\frac{1}{2}} (h_{i+1} - h_i) - K_{i-\frac{1}{2}} (h_i - h_{i-1})}{\Delta x^2} \quad (6.4)$$

Em regiões de interface das áreas homogêneas, podem ocorrer duas situações, segundo a posição dos nós da discretização. No primeiro caso (fig 6.3(a)), cada um dos pontos fictícios está localizado em uma das regiões, desta forma h_{i-1} e h_{i+1} possuem cada um seu valor correspondente de K , respectivamente $K_{i-\frac{1}{2}}$ e $K_{i+\frac{1}{2}}$.

No segundo caso, figura 6.3 (b), o coeficiente K associado ao termo h_{i+1} pode receber qualquer um dos valores, tanto $K_{i-\frac{1}{2}}$ como $K_{i+\frac{1}{2}}$.



- ✧ Nó fictício para aproximação
- Nó real para aproximação.

Figura 6.3: (a) Nó localizado na interface das sub-áreas homogêneas; (b) Nó localizado na vizinhança de uma das áreas homogêneas.

- Dependendo do problema físico abordado, o valor da condutividade pode ser determinado pela média aritmética das duas regiões :

$$K_{i+\frac{1}{2}} = \frac{K_1 + K_2}{2} \quad (6.5)$$

- Uma das formas de resolver esse problema é utilizando a média harmônica (equação 6.2) para determinação de $K_{i+\frac{1}{2}}$.

$$K_{i+\frac{1}{2}} = \frac{2K_i K_{i+1}}{K_i + K_{i+1}}$$

- A utilização da média harmônica não infere em problemas quando parte do domínio é caracterizada por K nulo, ou seja, em áreas impermeáveis.

6.3 Discretização variável

A discretização de malhas com espaçamento variável entre os nós é comum, quando se pretende um maior refinamento em certas regiões do domínio. Uma discretização desse tipo pode ser usada próximo à fronteira, para um melhor ajuste da malha ao domínio ou em regiões de elevado gradiente das variáveis de interesse.

A seguir, serão apresentados alguns métodos de resolução para esse tipo de problema.

Expansão por Taylor

Para exemplificarmos a discretização variável, resolveremos o operador laplaciano (equação 6.6) e utilizaremos a expansão de Taylor para obtermos a expressão para a derivada da segunda ordem do operador, segundo apresentado por Cunha [16].

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = 0 \quad (6.6)$$

Nesse caso, faz-se $x_{i+1} - x_i = \Delta x_i$ e $y_{i+1} - y_i = \Delta y_i$.

Para a derivada de segunda ordem em x, obtemos a expressão.

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_{x=x_i} &= 2 \frac{\Delta x_i h_{i+1,j} - (\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) h_{i,j} + \Delta x_i h_{i-1,j}}{\Delta x_i \Delta x_{i+1} (\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} + \\ &+ (\Delta x_{i+1} - \Delta x_i) \left. \frac{\partial^3 h}{\partial x^2} \right|_{x=x_i} + \frac{\Delta x_i^3 \alpha + \Delta x_{i+1}^3 \beta}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \end{aligned}$$

De forma análoga, para y temos a expressão.

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right|_{y=y_j} &= 2 \frac{\Delta y_j - (\Delta y_j + \Delta y_{j+1}) h_{i,j} + \Delta y_j h_{i,j-1}}{\Delta y_j \Delta y_{j+1} (\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} + \\ &+ (\Delta y_{j+1} - \Delta y_j) \left. \frac{\partial^3 h}{\partial y^2} \right|_{y=y_j} + \frac{\Delta y_j^3 \delta + \Delta y_{j+1}^3 \phi}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}} \end{aligned}$$

Onde α , β , δ e ϕ são valores que dependem de $x_i, y_j, \Delta x_i, \Delta x_{i+1}, \Delta y_j$ e Δy_{j+1} .

Juntando-se as expressões supra desenvolvidas e eliminado-se os termos de ordem superior, temos a expressão discretizada não uniforme desenvolvida pela série de Taylor:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} &\cong 2 \left\{ \frac{h_{i-1,j}}{\Delta x_{i+1} (\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} + \frac{h_{i+1,j}}{\Delta x_i (\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} + \frac{h_{i,j-1}}{\Delta y_{j+1} (\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} + \right. \\ &\left. + \frac{h_{i,j}}{\Delta y_j (\Delta y_j + \Delta y_{j+1})} - \left(\frac{1}{\Delta x_i \Delta x_{i+1}} + \frac{1}{\Delta y_j \Delta y_{j+1}} \right) h_{i,j} \right\} \end{aligned}$$

Aproximação por partes

Um outro método de discretização variável baseia-se na aproximação por partes. Aqui também mostraremos como exemplo a discretização do operador laplaciano (equação 6.6).

Discretizando as duas derivadas de segunda ordem, temos:

$$\frac{\frac{h_{i+1,j}-h_{i,j}}{x_{i+1}-x_i} - \frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{x_i-x_{i-1}}}{\frac{x_{i+1}+x_i}{2} - \frac{x_i+x_{i-1}}{2}} + \frac{\frac{h_{i,j+1}-h_{i,j}}{y_{i+1}-y_i} - \frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{y_i-y_{i-1}}}{\frac{y_{i+1}+y_i}{2} - \frac{y_i+y_{i-1}}{2}} = 0 \quad (6.7)$$

fazendo:

$$DP_x(\text{diferença posterior em } x) = x_{i+1} - x_i$$

$$DA_x(\text{diferença anterior em } x) = x_i - x_{i-1}$$

$$DP_y(\text{diferença posterior em } y) = y_{i+1} - y_i$$

$$DA_y(\text{diferença anterior em } y) = y_i - y_{i-1}$$

$$DC_x(\text{diferença central em } x) = \frac{x_{i+1}+x_i}{2} - \frac{x_i+x_{i-1}}{2}$$

$$DC_y(\text{diferença central em } y) = \frac{y_{i+1}+y_i}{2} - \frac{y_i+y_{i-1}}{2}$$

e substituindo na equação 6.7, temos:

$$\frac{\frac{h_{i+1,j}-h_{i,j}}{DP_x} - \frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{DA_x}}{DC_x} + \frac{\frac{h_{i,j+1}-h_{i,j}}{DP_y} - \frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{DA_y}}{DC_y} = 0$$

$$\frac{h_{i+1,j} - h_{i,j}}{DP_x \cdot DC_x} - \frac{h_{i,j} - h_{i-1,j}}{DA_x \cdot DC_x} + \frac{h_{i,j+1} - h_{i,j}}{DP_y \cdot DC_y} - \frac{h_{i,j} - h_{i,j-1}}{DA_y \cdot DC_y} = 0 \quad (6.8)$$

$$D_{yy} = DP_y \cdot DA_y \cdot DC_y$$

$$D_{xx} = DP_x \cdot DA_x \cdot DC_x$$

(6.9)

Estabelecendo a relação 6.9 e retornando à expressão 6.8, temos:

$$\frac{(h_{i+1,j} - h_{i,j})DA_x}{D_{xx}} - \frac{(h_{i,j} - h_{i-1,j})DP_x}{D_{xx}} + \frac{(h_{i,j+1} - h_{i,j})DA_y}{D_{yy}} - \frac{(h_{i,j} - h_{i,j-1})DP_y}{D_{yy}} = 0$$

Isolando o termo $h_{i,j}$, tem-se a expressão 6.10 abaixo:

$$h_{i,j} = \frac{D_{yy}(h_{i+1,j} \cdot DA_x + h_{i-1,j} \cdot DP_x) + D_{xx}(h_{i,j+1} \cdot DA_y + h_{i,j-1} \cdot DP_y)}{D_{yy}(DA_x + DP_x) + D_{xx}(DA_y + DP_y)} \quad (6.10)$$

Interpolação polinomial

A interpolação polinomial constitui uma das técnicas de aproximação de diferenças finitas. Nesse método, uma função $f(x)$ é aproximada por um polinômio de grau $n - 1$ e os coeficientes polinomiais são determinados com base no conjunto dos pares de dados representados por $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ [?].

A equação polinomial é descrita da seguinte forma:

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n-1} \quad (6.11)$$

e utilizada para n pares de dados que constituem as n equações de coeficientes a_i . Estas equações formam um sistema linear de equações algébricas:

$$f(x_j) = a_0 + a_1x_j + a_2(x_j)^2 + \dots + a_{n-1}(x_j)^{n-1}$$

Fortuna [25] apresenta a aproximação de diferenças finitas pela técnica de interpolação polinomial utilizando uma aproximação atrasada de três pontos com espaçamento não uniforme para uma função f com derivada $\frac{\partial f}{\partial x}$. Para tal, é necessário que sejam determinados os coeficientes de um polinômio do segundo grau $p_2(x) = ax^2 + bx + c$. Os pontos x_i, x_{i-1} e x_{i-2} passam respectivamente por $\theta, -\Delta x$ e $-\alpha\Delta x$ ($\alpha \neq 1$) e constituem respectivamente os pares ordenados $(x_i, f_i), (x_{i-1}, f_{i-1})$ e (x_{i-2}, f_{i-2}) .

Como representado na figura 6.4, $x_i - x_{i-1} = \Delta x$ e $x_{i-1} - x_{i-2} = \alpha \Delta x$.

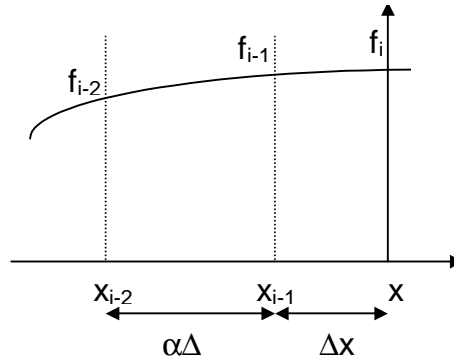


Figura 6.4: Detalhe da discretização variável [25].

Os valores do polinômio nos pontos f_{i-2} , f_{i-1} e f_i são mostrados abaixo (6.12):

$$f_{i-2} = p_2(-\Delta x - \alpha \Delta x) = p_2(-(1 + \alpha)\Delta x) = (1 + \alpha)^2 a (\Delta x)^2 - (1 + \alpha)b(\Delta x) + c$$

$$p_2(-\Delta x) = f_{i-1} = a(\Delta x)^2 - b(\Delta x) + c \quad (6.12)$$

$$p_2(0) = f_i = c$$

Resolvendo o sistema, obteve-se os coeficientes a , b e c da equação polinomial $p_2(x)$:

$$a = \frac{f_{i-2} - (1 + \alpha)f_{i-1} + \alpha f_i}{\alpha(\alpha + 1)(\Delta x)^2}$$

$$b = \frac{f_{i-2} - (1 + \alpha)^2 f_{i-1} + \alpha(\alpha + 2)f_i}{\alpha(\alpha + 1)\Delta x} \quad (6.13)$$

$$c = f_i$$

Substituindo os coeficientes supra calculados (6.13) no polinômio, obtemos a expressão 6.14:

$$p_2(x) = \left(\frac{f_{i-2} - (1 + \alpha) f_{i-1} + \alpha f_i}{\alpha (\alpha + 1) (\Delta x)^2} \right) x^2 + \left(\frac{f_{i-2} - (1 + \alpha)^2 f_{i-1} + \alpha (\alpha + 2) f_i}{\alpha (\alpha + 1) \Delta x} \right) x + c \quad (6.14)$$

As derivadas de primeira e segunda ordem, respectivamente $\frac{\partial f}{\partial x}$ e $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$, no ponto x_i igual a zero, são mostradas a seguir, equações 6.15 e 6.16:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i \approx \left. \frac{dp}{dx} \right|_{x=0} = 2 \times a(0) + b = b = \frac{f_{i-2} - (1 + \alpha)^2 f_{i-1} + \alpha (\alpha + 2) f_i}{\alpha (\alpha + 1) \Delta x} \quad (6.15)$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i \approx \left. \frac{d^2 p}{dx^2} \right|_{x=0} = 2 \times a = \frac{2 \times f_{i-2} - 2(1 + \alpha) f_{i-1} + 2 \times \alpha f_i}{\alpha (\alpha + 1) (\Delta x)^2} \quad (6.16)$$

6.4 Geração de malhas

O primeiro passo para a resolução de problemas utilizando o método de diferenças finitas é a discretização do domínio onde a equação será definida. Dessa forma, define-se uma malha sobre a qual será calculada a solução aproximada.

Segundo Wesseling [59], um malha bidimensional de domínio R constituída de pontos (x,y) é construída baseada no domínio físico Ω e no contorno Γ (fig. 6.5).

Uma malha pode ser escrita definida da seguinte forma [16]:

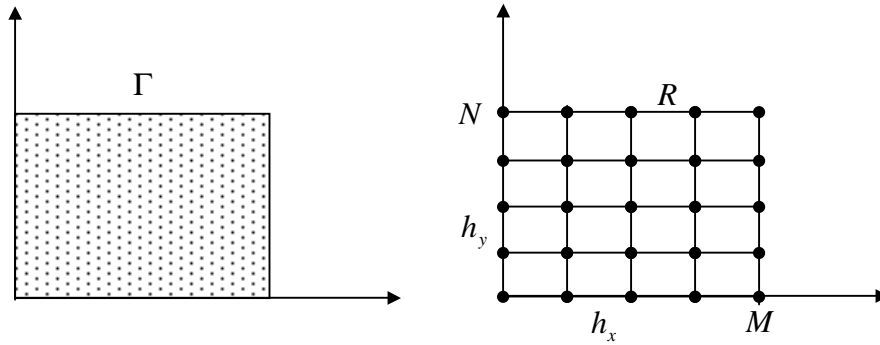


Figura 6.5: Definição da malha R com base no domínio físico [59].

$$R = \{(x_i, y_i) = (x + ih, y + jh), i, j = \pm 1, \pm 2, \dots\}$$

onde (x, y) é um ponto de referencia arbitrário, mas fixo, do plano, e h é uma constante positiva denominada passo da malha.

Uma malha pode ser considerada uniforme (fig. 6.6) em uma de suas direções se a diferença entre seus pontos, por exemplo $(x + (j + 1)h) - (x + (j)h)$; $j = \pm 1, \pm 2, \dots, M$, constante para todo o intervalo. No caso de uniformidade em ambos os eixos da malha e também igualdade entre os passos, temos um malha denominada quadrada.

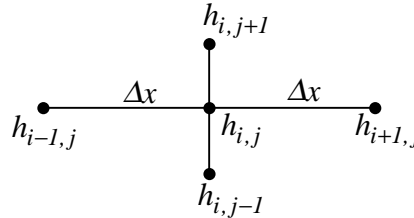


Figura 6.6: Discretização uniforme [16].

Uma outra opção de discretização da malha pelo método de diferenças finitas é denominada discretização variável (fig. 6.7). Esse tipo de malha é utilizada na necessidade de um maior refinamento em determinados pontos da malha. Nesse caso, o passo (h) passa a variar conforme necessidade de refinamento da malha.

Fortuna [25] descreve que uma boa solução numérica depende de uma malha de

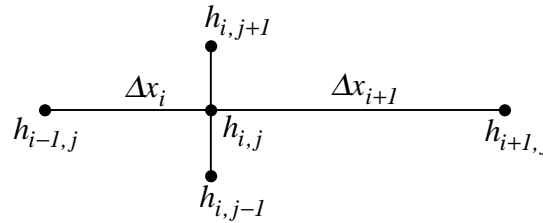


Figura 6.7: Discretização variável [16].

pontos de boa qualidade, isto é, que seja refinada em regiões nas quais os gradientes das variáveis dependentes são elevados, por exemplo. Um maior refinamento da malha também é requerido nos pontos próximos à fronteira, para um melhor ajuste da malha ao domínio físico. Na resolução de problemas relacionados à água subterrânea, Wendland [57], faz algumas considerações básicas a respeito do refinamento das malhas (ver figura 6.3).

- O refinamento é função do modelo físico, desta forma, em regiões em que haja um elevado gradiente das variáveis é necessário um maior refinamento;
- Regiões com variações bruscas nas condições de fluxo, regiões próximas aos poços, regiões mais heterogêneas e regiões em que se deseja um mapeamento mais detalhado das condições de fluxo necessitam um maior refinamento;
- Na área de refinamento, deve-se evitar mudanças bruscas da dimensão do passo. Recomenda-se uma razão máxima de 1,5 da dimensão do passo maior para o menor na seqüência.
- Em geral, um maior refinamento na malha infere em maiores custos, sejam relacionados ao tempo para geração da malha ou ao aspecto de esforço computacional. Desta forma, a análise da sensibilidade ao tamanho dos blocos é o ideal na discretização da malha.

Outras considerações ainda relacionadas à resolução de modelos de água subterrânea pelo método de diferenças finitas diz respeito à orientação da malha. Em geral, a orientação da malha deve obedecer a orientação das permeabilidades e em seções transversais deve seguir as camadas geológicas (fig. 6.8. Inferentemente à estas observações, produz-se um resultado mais rápido em razão do direcionamento da solução, que é paralelo à orientação da malha.

As malhas retangulares são geralmente mais utilizadas na resolução de problemas utilizando o método de diferenças finitas. Contudo, há ainda outros tipos de malhas que são geradas com base na distribuição retangular. Shashkov [49] apresenta alguns exemplos que são brevemente descritos a seguir.

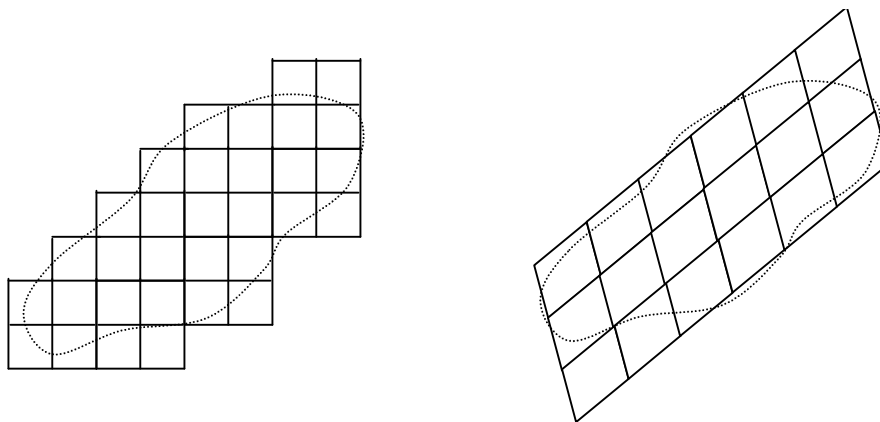


Figura 6.8: Malha cartesiana e malha orientada.

Suponha uma malha numa área unitária $(0 < \xi < 1) \times (0 < \eta < 1)$ e $\xi_{i,j} = (i - 1)h$,

$\eta_{i,j} = (j - 1)h$ sejam as coordenadas dos nós na malha. Desta forma, as coordenadas dos nós na área unitária $(0 < x < 1) \times (0 < y < 1)$ pode ser obtida como resultado da transformação

$$x_{i,j} = X(\xi_{i,j}, \eta_{i,j})$$

$$y_{i,j} = Y(\xi_{i,j}, \eta_{i,j})$$

e as funções $X(\xi, \eta), Y(\xi, \eta)$ determinam a transformação. Como exemplo, na figura 6.9 está representada a malha que é resultado das funções 6.17 e 6.18:

$$X(\xi, \eta) = \xi^2 \tag{6.17}$$

$$Y(\xi, \eta) = \eta^3 \tag{6.18}$$

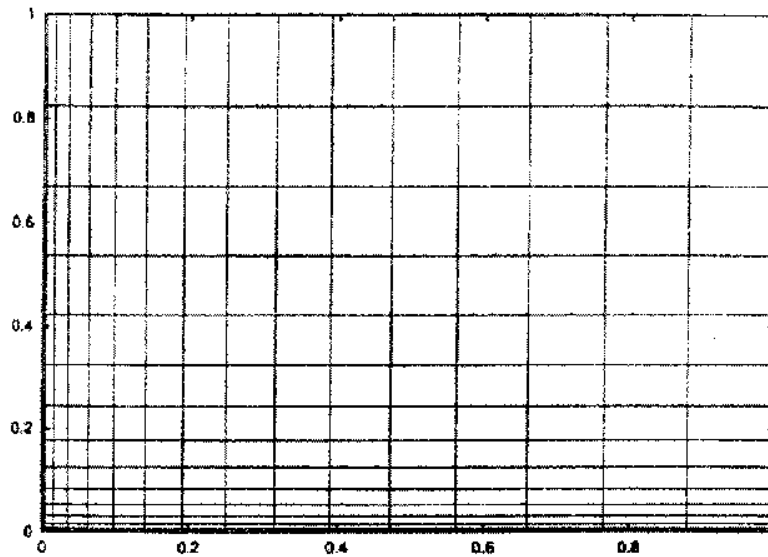


Figura 6.9: Malha gerada pela transformação 6.16 e 6.17 [49].

Num outro exemplo, que representa um problema do movimento de partículas num fluido, a malha pode ser definida através de uma função randômica de uma malha uniforme:

$$\xi_i = (i - 1) h \quad i = 1, \dots, M$$

$$\eta_j = (j - 1) h \quad j = 1, \dots, N$$

$$h = \frac{1}{M - 1}$$

A determinação das coordenadas dos nós para a nova malha é dada pelas relações 6.19 e 6.20.

$$x_{i,j} = \xi_i - 0,25h + 0,5hR_x \quad (6.19)$$

$$y_{i,j} = \eta_i - 0,25h + 0,5hR_y \quad (6.20)$$

em que R_x e R_y são números randômicos no intervalo $(0,1)$. A malha transformada é representada na figura 6.10 a seguir.

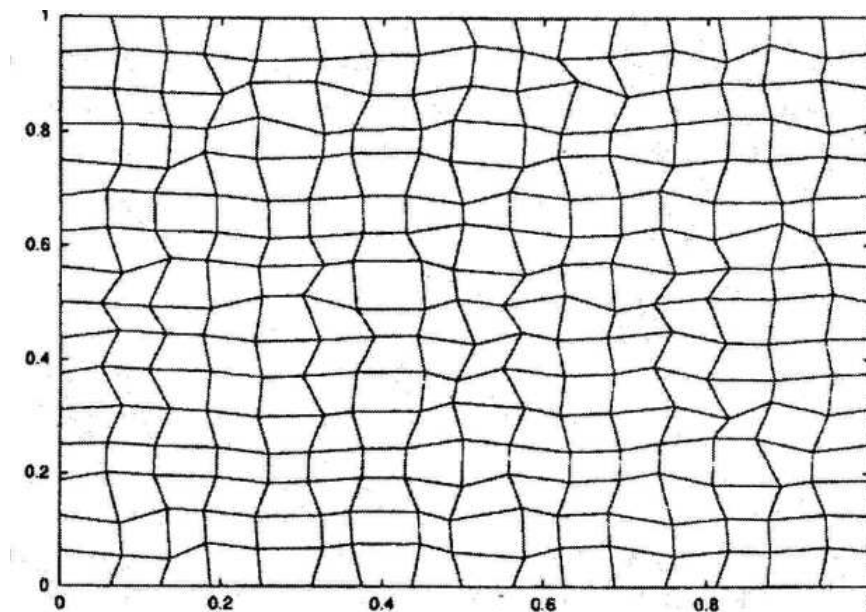


Figura 6.10: Malha randômica.

Discretização em nós e blocos

Neste item, são abordados duas formas de distribuição das funções na malha em duas dimensões. Na primeira, denominada discretização nodal [49] ou discretização no vértice [59], os valores discretos das funções são representados nos nós. Nesse caso, a malha é definida pela união das células, R .

$$R \equiv \left\{ x \in \Omega : x = jh, j = (j_1, j_2), j_\alpha = 0, 1, 2, \dots, n_\alpha, h = (h_1, h_2), h_\alpha = \frac{1}{n_\alpha} \right\}$$

A solução da malha discretizada dessa forma, apresenta a solução aproximada nos nós pertencentes à R .

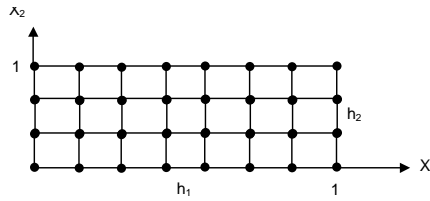


Figura 6.11: Malha discretizada nos nós ou vértices [59].

No caso da malha discretizada no centro da célula, o domínio Ω é dividido em células como anteriormente, porém, os pontos de solução aproximada de função são representados no centro das células ou blocos. Malha R é definida da seguinte forma:

$$R = \left\{ x \in \Omega : x = x_j = (j - s)h, j = (j_1, j_2), s = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), h = (h_1, h_2), j_\alpha = 1, 2, \dots, n_\alpha, h_\alpha = \frac{1}{n_\alpha} \right\}$$

A célula com centro x_j é denominada Ω_j . Nesse método de discretização não há pontos pertencentes ao contorno Γ .

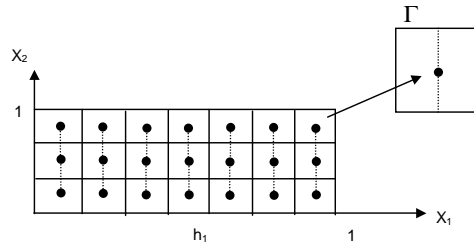


Figura 6.12: Malha discretizada nas células ou blocos [59].

Segundo Kinzelbach [33], para aplicações em água subterrânea, a malha centrada no meio da célula é preferida em função da maior eficiência computacional e também da representação física que caracteriza a média de cada célula.

Wang & Anderson [56] mostram a discretização de uma malha baseado no problema, por exemplo da determinação da carga hidráulica, de um aquífero limitado por um rio em uma de seus lados sujeito à recarga devido à precipitação. Na figura

6.13 , estão representadas as malhas discretas sobre os nós e sobre os blocos.

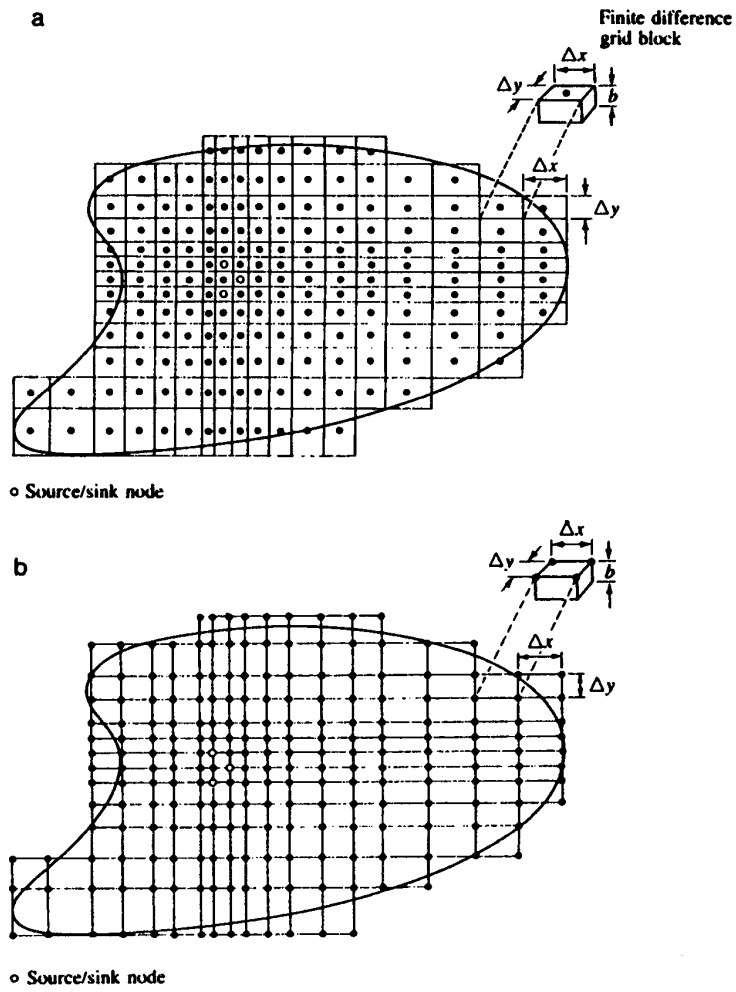


Figura 6.13: (a) Discretização nos vértices ou nós; (b) discretização nos blocos ou células [56].

Bibliografia

- [1] T.J. AKAI, "Applied Numerical Methods for Engineers", John Wiley & Sons, New York, 1993.
- [2] R. Barrett et al., "Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods", SIAM, Philadelphia, p.124, 1994.
- [3] R.T. de V. Barros et alli, "Manual de Saneamento e Proteção Ambiental para os Municípios", v.2, Escola de Engenharia da UFMG , Belo Horizonte, 1995.
- [4] Barton, T.A. Schutter, W.R. Page and J.K. Samuel, *Trans. Amer. Geophysics Union*, **68**, 1295, 1987.
- [5] J. Bear, "Dynamics of Fluids in Porous Media", McGraw-Hill Inc., New York, 1972.
- [6] J. Bear, "Hydraulics of Groundwater", McGraw-Hill Inc., New York, p.569, 1979.
- [7] J. Bear, T. Chin-Fu and C. Marsily, "Flow and Contaminant Transport in Fractured Rock", 1993.
- [8] A.L. Bortoli, "Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional", Ed. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 134 p., 2000.
- [9] A.A. Björck and G. Dahlquist, "Numerische Methoden", Oldenbourg, Munique, p. 374, 1972.
- [10] D. Braess, "Numerische Mathematik für Ingenieure", Fakultät für Mathematik, Ruhr-Universität Bochum, 1997.
- [11] S.R. Broadbent and J.M. Hammersley, *Proc. Camb. Phil. Sci.*, **53**, 629, 1957.
- [12] N.L. Caicedo, "Água Subterrânea", in: Hidrologia: Ciência e Aplicação, 2ª Edição, ABRH., p. 289-333, 1997.
- [13] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger, "Conduction of Heat in Solids", Oxford University Press, London, 1959.

- [14] J.A. Cirillo e J.P. Cabral, "Modelos de Água Subterrânea" in Métodos Numéricos em Recursos Hídricos , Volume 1, ABRH, 302-380, 1989.
- [15] J.A. Cuminato e M. Meneguete Junior, "Discretização de Equações Diferenciais Parciais: Técnicas de Diferenças Finitas", ICMC/USP, p203, 1999.
- [16] M.C. Cunha, "Métodos Numéricos", Editora da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, p. 256, 2000.
- [17] Cundall e Strack (1979)
- [18] J.H. Cushman, *Water Resource Research*, **27** , 643, 1991.
- [19] H. Darcy, "Les fontaines publiques de la ville de Dijon", Dalmont, Paris, p. 674, 1856.
- [20] S.N. Davis and R.J.M. DeWiest, "Hydrogeology", John Wiley & Sons, New York, p. 463, 1966.
- [21] P. Dijk, B. Berkowitz and P. Bendel, Investigation of flow in water saturated rock fractures using nuclear magnetic resonance imaging (NMRI), *Water Resource Research*, **35** 2, 347-360, 1999.
- [22] P. Duchateau and D.W. Zachmann, "Schaum's Outline Theory and Problems of Partial Differential Equations", McGraw-Hill Book Company, 241 p., 1986.
- [23] J. Dupuit, "Etudes théoriques et pratiques sur le mouvement des eaux dans les canaux découverts et à travers les terrains perméables", - 2.ed, Dunod, Paris, p. 304, 1863.
- [24] F.A.C. Feitosa e J. Manoel Filho, "Hidrogeologia - Conceitos e Aplicações", CPRM, LABHID-UFPE, p. 412, 1997.
- [25] A.O. Fortuna, "Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações", Edusp, p.428 ,2000.
- [26] R.A. Freeze and J.A. Cherry, "Groundwater", Prentice-Hall, p.604, 1979.
- [27] H. Goth and T. Sakai, Numerical simulation of Sheetflow as Granular Material, *Journal of Waterway Port Coast and Ocean Eng.*, **123** (6):329-336, 1997.
- [28] H.M. Haitjema, "Analytic Element Modeling of Groundwater Flow", Academic Press, 1995.
- [29] J. Hardy, O. de Pazzis e Y. Pomeau, *Physical Review A* **13** 1949, 1976.
- [30] R.C. Heath, "Hidrologia Básica de Água Subterrânea", IPH/UFRGS, p.84, 1983.
- [31] R.W. Hornbeck, "Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos - Conceitos Básicos e Aplicações", Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, p. 426, 2000.

- [32] P.S. Huyakorn and G.F. Pinder, "Computational Methods in Subsurface Flow", Academic Press, New York, p. 473, 1983.
- [33] W. Kinzelbach, "Groundwater Modelling; An Introduction with Sample Programs in BASIC", Developments in Water Science, 25, Elsevier, Amsterdam, 333 p., 1986.
- [34] S.E. Jorgensen, "Fundamentals of Ecological Modelling", Copenhagen, Elsevier Science Publishers B. V., 1986.
- [35] J.A. Liggett and P.L.-F. Liu, "The Boundary Integral Equation Method for Porous Media Flow", Allen & Unwin, London, 1983.
- [36] R.K. Linsley e J.B. Franzini, "Engenharia de Recursos Hídricos", McGraw-Hill do Brasil, Ed. da Universidade de São Paulo, 1978.
- [37] B.B. Mandelbrot, "The fractal geometry of nature", W.H. Freeman, New York, p. 486, 1983.
- [38] B.B. Mandelbrot and J.W. van Ness, *SIAM Review* **10**, 422, 1968.
- [39] G. Margolin, B. Berkowitz and H. Scher, Structure, flow, and generalized conductivity scaling in fractured networks, *Water Resources Research* **34** (9):2103-2121, 1998.
- [40] D. Marsal, "Finite Differenzen und Elemente", Springer, Berlin, 1989.
- [41] J.C. Parker and R.J. Lenhard, A Model for Hysteretic Constitutive Relations Governing Multiphase Flow, 2. Permeability-Saturation Relations *Water Resources Research*, **23** (12):2197-2206, 1987.
- [42] C.F. Pimenta, "Curso de Hidráulica Geral", Volume 1, CTH, p. 480, 1978.
- [43] G.F. Pinder and W.G. Gray, "Finite Element Simulation in Surface and Subsurface Hydrology", Academic Press, New York, p. 295, 1977.
- [44] N.L.S. Pinto e A.C.T. Holtz, "Hidrologia básica", Edgard Blücher, São Paulo, p. 278, 1976.
- [45] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky and W.T. Vetterling, "Numerical Recipes in C", Cambridge University Press, Cambridge, p. 735, 1988.
- [46] I. Remson, G.M. Hornberger and F. Moltz Jr., "Numerical methods in subsurface hydrology", Wiley, New York, p. 389, 1971.
- [47] K.R. Rushton and S.C. Redshaw, "Seepage and Groundwater Flow", Wiley, New York, p. 339, 1979.
- [48] M. Sahimi, "Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock", VCH, Weinheim, 1995.

- [49] M. Shashkov, "Conservative Finite-Difference Methods on General Grids", CRC, New York, 1993.
- [50] K. Spitz and J. Moreno, "Numerical Methods", Quantum Publishers, New York, 310 p., 1975.
- [51] K. Spitz and J. Moreno, "A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modeling", John Wiley & Sons, New York, 461 p., 1996.
- [52] O.D.L Strack, "Groundwater Mechanics", Prentice-Hall, 1989.
- [53] O.D.L Strack, Principles of Analytic Element Methods, *Journal of Hydrology*, **226** (3/4): 128-138, 1999.
- [54] C.V. Theis, "The Relation between the Lowering of the Piezometric Surface and the Rate and Duration of Discharge of a Well Using Groundwater Storage", *Trans. Amer. Geophys. Union*, **2**, p.519-524, 1935.
- [55] C.E.M. Tucci, "Modelos Hidrológicos", Porto Alegre, Editora da Universidade/UFRGS, 1998.
- [56] H.F. Wang and M.P. Anderson, "Introduction to Groundwater Modeling: Finite Difference and Finite Element Methods", Academic Press, 1982.
- [57] E. Wendland and O. Rüber, "Hydrogeologische Modelle", Lehrstuhl für Angewandte Hydrogeologie, Ruhr-Universität Bochum, 141 p., 1998.
- [58] E. Wendland, "Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Recursos Hídricos – SHS 5896", Notas de Aula, EESC/USP, 2001.
- [59] P. Wesseling, "An Introduction to Multigrid Methods", John Wiley & Sons., New York, p. 284, 1991.