

MODELO DE POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA: SOLUÇÃO NUMÉRICA E INSTABILIDADES ASSOCIADAS

Sonia Regina Dal-Ri MURCIA¹
Tânia Maria Vilela Salgado LACAZ²

- **RESUMO:** Neste trabalho elaborou-se um modelo para a dispersão de agentes poluidores gasosos, emitidos na atmosfera por fontes pontuais, para situações específicas. O fenômeno é descrito por uma equação diferencial parcial, tipo advecção-difusiva-reativa transitória, a qual é resolvida pelo Método dos Elementos Finitos, usando a formulação dos resíduos ponderados. A resolução numérica desse tipo de equação gera problemas de oscilações numéricas para altos valores do número de Peclet. Tais problemas foram estudados em função de um parâmetro estabilizador transversal e os resultados obtidos são analisados e comentados.
- **PALAVRAS-CHAVE:** Poluição Atmosférica, Modelagem Matemática, Método dos Elementos Finitos, Estabilidade, Método SUPG, Oscilações Numéricas.

Introdução

Uma das maneiras de se estudar e entender a poluição atmosférica é através da utilização de modelos matemáticos. Existem diversas possibilidades de focar o problema dando origem a diversos modelos. Neste trabalho, interessa particularmente estudar a poluição por emissão

1 Departamento de Matemática – Faculdade de Engenharia – Universidade Estadual Paulista – (UNESP) – 12500-000 – Guaratinguetá – SP, Brasil. E-mail: soniamurcia@feg.unesp.br

2 Departamento de Matemática – Faculdade de Engenharia - Universidade Estadual Paulista (UNESP) – 12500-000 – Guaratinguetá – SP, Brasil. E-mail: tania@feg.unesp.br

de gases industriais usando uma modelagem matemática do problema, e obter sua solução por meio do Método dos Elementos Finitos (MEF). Far-se-á a formulação do MEF pela técnica dos resíduos ponderados. É fato conhecido que a tradicional variante de Galerkin, na qual a função peso é igual à função interpoladora, quando aplicada à mecânica dos sólidos, leva a resultados com excelentes taxas de convergência, porém, quando aplicada a equações do tipo advectiva-difusiva, com termo convectivo preponderante, leva a oscilações numéricas espúrias. Para solucionar o problema das oscilações numéricas espúrias, novas funções peso têm sido utilizadas. Inicialmente, tentou-se utilizar funções peso contínuas, adicionado-se às funções de interpolações clássicas funções que ponderavam mais fortemente as informações à montante do escoamento. Os métodos assim obtidos só funcionam para uma classe restrita de problemas, apresentando na maioria dos casos uma grande difusão transversa ao campo convectivo, implicando soluções aproximadas imprecisas. Surgiu então o método SUPG (Streamline Upwind Petrov-Galerkin Method), o qual utiliza funções interpoladoras descontínuas, nas quais uma perturbação que atua exclusivamente na direção das linhas de corrente é adicionada às funções peso originais do método de Galerkin; essa metodologia resolve uma boa parte dos problemas estudados e, interpretando-a fisicamente, com algumas restrições, pode-se afirmar que ela está associada a uma difusão artificial na direção do escoamento (Zienkiewicz, 1989). Em alguns casos, o método SUPG apresenta resultados com oscilações numéricas espúrias transversais ao escoamento. Para resolver estes casos específicos existem algumas propostas, das quais destacamos o operador de captura de descontinuidade de Codina (1993a) e Codina (1993b). A principal idéia dessa metodologia é manter inalterada a difusão obtida pelo método SUPG, ao longo das linhas de corrente, e somente modificar a difusão transversal. O processo pode, em princípio, provocar uma sobredifusão, por isso é necessário que o fator de dissipação a ser introduzido elimine a oscilação numérica nas regiões de grande gradiente da variável, e seja pequeno na região onde os gradientes o sejam. Codina (1993a) propõe que o termo da difusão artificial seja proporcional ao resíduo e mostra, analisando o caso estacionário, que a metodologia é consistente.

Neste trabalho analisam-se casos estacionários e transitórios, com fontes pontuais e em situações que variam desde puramente difusivos até fortemente convectivos. Tem-se interesse em analisar as variantes numéricas que permitem a solução em todas as situações em estudo.

A aproximação numérica utilizada baseia-se na sugestão de Codina (1993a), a qual foi proposta para o caso estacionário, ampliando-a para o caso transitório mediante uma análise das equações matriciais envolvidas, sendo o resultado expresso por um parâmetro estabilizador transversal. Dessa forma obtêm-se as condições suficientes para que sejam eliminadas as oscilações transversais espúrias.

Modelagem Matemática

Ao efetuar a modelagem de um fenômeno, deve-se saber que é praticamente impossível modelar de maneira perfeita os fenômenos naturais. Todo o processo de modelagem é um processo aproximado. O grande mérito de um analista consiste em elaborar um modelo cuja solução seja exequível e que represente o fenômeno dentro de desvios aceitáveis para a finalidade proposta.

O presente trabalho tem como objetivo principal a determinação da concentração de poluentes em função da posição e do tempo, em determinada região. Admitindo-se que a quantidade de poluente lançada na atmosfera seja relativamente pequena, de modo que não afete sensivelmente os campos de velocidades existentes, analisa-se o problema tendo como base a conservação da massa, isto é, conservação da espécie U num campo de velocidades pré-determinado.

Seja U a espécie de poluente, cuja concentração de massa é dada por u . Considera-se um elemento de volume $\Delta x \Delta y \Delta z$ contido no domínio Ω em estudo. A conservação da espécie U, neste elemento de volume, será dada por

Taxa de entrada (F) + Taxa de produção(P) = Taxa de saída + Taxa de transformação (T) + Taxa de acumulação (A).

O fluxo de entrada e saída do poluente, F , pode ser prioritariamente associado a dois efeitos: o transporte de massa molecular ou difusivo, expresso pela Lei de Fick, e o transporte de massa por convecção. Exprimindo as duas parcelas, difusiva e convectiva, nas direções x , y e z , por unidade de área, atravessando as respectivas superfícies tem-se:

$$F_x = -D_x \frac{\partial u}{\partial x} + u v_x, \quad (1a)$$

$$F_y = -D_y \frac{\partial u}{\partial y} + u v_y, \quad (1b)$$

$$F_z = -D_z \frac{\partial u}{\partial z} + u v_z. \quad (1c)$$

No elemento de volume tem-se ainda que a taxa de produção de U é dada por

$$P = f \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (2)$$

onde f é a taxa de geração do poluente U por unidade de volume. A taxa de transformação de U é dada por

$$T = \sigma u \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (3)$$

onde σ é o fator de reação do poluente U com o meio ambiente, e a taxa de acumulação de U é dada por

$$A = \frac{\partial u}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z. \quad (4)$$

A equação de conservação da espécie U no elemento de volume torna-se

$$\begin{aligned} F_x \Delta y \Delta z + F_y \Delta x \Delta z + F_z \Delta x \Delta y + f \Delta x \Delta y \Delta z = \\ F_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z + F_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z + F_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y + \sigma u \\ \Delta x \Delta y \Delta z + \frac{\partial u}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (5)$$

Dividindo a expressão (5) por $\Delta x \Delta y \Delta z$ e tomando o limite quando Δx , Δy e Δz tendem a zero, obtém-se

$$\frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial F_x}{\partial x} - \frac{\partial F_y}{\partial y} - \frac{\partial F_z}{\partial z} - \sigma u + f. \quad (6)$$

Escrevendo a equação (6) na forma vetorial

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{F} - \sigma u + f, \quad (7)$$

e substituindo (1a), (1b) e (1c) em (7) segue que

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla u) - \nabla \cdot (u \mathbf{v}) - \sigma u + f. \quad (8)$$

O presente trabalho consiste no modelamento de fenômenos cujo efeito prioritário esteja contido numa elevação restrita, tal como acontece em inversões térmicas, ou quando os gases ou partículas envolvidas têm densidades da ordem da densidade do ar na superfície terrestre. Nestas condições as alturas envolvidas no fenômeno são muito menores do que as distâncias no plano superficial terrestre, portanto, torna-se razoável assumir que a variável u , que representa a concentração dos agentes poluidores, assuma um valor médio em relação à altura, isto é, seja independente da altura, sendo da forma $u = u(x, y, t)$ e o modelo seja bidimensional transitório. Admite-se por hipótese que os coeficientes de difusão D_x e D_y sejam constantes. Nestas condições, a equação (8) será expressa por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left(D_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \left(v_x \frac{\partial u}{\partial x} + v_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \sigma u + f \text{ em } \Omega \times (0, T). \quad (9)$$

A equação (9) modela o fenômeno internamente ao domínio em estudo, e a ela deve-se acrescentar a condição inicial e as condições de contorno do problema na fronteira Γ . A solução do conjunto fornecerá a concentração de poluentes na região em estudo.

As condições de contorno mais comuns são as de Neumann, significando o bloqueio da poluição, fato que ocorre devido a cadeias de montanhas ou outras barreiras similares, prescritas no trecho Γ_N , ou de Dirichlet que ocorre para pontos suficientemente longe da fonte emissora, prescritas no trecho Γ_D , de modo que

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \text{ e } \Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset. \quad (10)$$

Solução Numérica

A solução da equação (9) não pode ser obtida por métodos analíticos, deve-se, portanto, optar por uma solução numérica. Entre os métodos possíveis para a solução do problema optou-se pelo método dos elementos finitos.

Existem diversas técnicas possíveis para obter-se as equações algébricas relacionadas ao MEF. Optou-se pela formulação dos resíduos ponderados por ser um dos métodos mais amplos, podendo ser aplicado inclusive quando o operador diferencial associado ao problema não é auto-adjunto, que é o caso em estudo.

Formulação Básica - Resíduos Ponderados

Considere-se $\Omega = H_a \times L$ o domínio, com fronteira Γ , onde o problema está definido. O domínio será subdividido em elementos retangulares, gerando o conjunto $\{\mathcal{O}\}$, no qual o índice “e” indica um elemento genérico, que varia de 1 a N . O comprimento característico do elemento é representado por l^e .

A função do campo incógnita será expressa por funções de forma $\phi \in \Phi$, de modo que

$$\Phi = \{\phi \in H^1(\Omega) / \phi = 0 \text{ sobre } \Gamma_D\}, \quad (11)$$

e as funções peso $w \in W$ serão tais que

$$W = \{w \in H^1(\Omega) / w = 0 \text{ sobre } \Gamma_D\}, \quad (12)$$

onde $H^1(\Omega)$ é o espaço de Sobolev de ordem um, com os produtos escalares e normas usuais.

As condições associadas a equação (9) são:

- condição inicial

$$u(x, y, 0) = 0 \quad (13)$$

- condições de contorno

$$u(0, y, t) = 0 \text{ e } u(L, y, t) = 0 \text{ em } \Gamma_D \quad (14a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x, 0, t) = 0 \text{ e } \frac{\partial u}{\partial y}(x, H_a, t) = 0 \text{ em } \Gamma_N \quad (14b)$$

A incógnita u do problema será aproximada segundo a expressão

$$\widehat{u}(x, y, t) = \sum_1^n \widehat{u}^e(x, y, t), \quad (15)$$

onde

$$\begin{aligned} \widehat{u}^e(x, y, t) = & \phi_1(x, y)u_i^e(t) + \phi_2(x, y)u_j^e(t) + \\ & \phi_3(x, y)u_k^e(t) + \phi_4(x, y)u_l^e(t), \end{aligned} \quad (16)$$

sendo ϕ_i^e funções de forma, e \hat{u}_i^e valores nodais da função \hat{u} .

A substituição desta solução aproximada na equação diferencial (9) resulta em um resíduo denotado por $R(\hat{u})$.

O método dos resíduos ponderados procura determinar as incógnitas u , nos nós da malha, de modo que o resíduo seja muito pequeno no domínio. Isto é obtido fazendo-se uma ponderação média do erro, obrigando-o a desaparecer sobre o domínio, segundo a equação integral

$$\int_{\Omega_e} w_i(x, y)R(\widehat{u}^e)d\Omega_e = 0. \quad (17)$$

Para o problema em estudo, a equação (17) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega_e} \left[\frac{\partial \hat{u}^e}{\partial t} \right] w_i d\Omega_e = \\ & = \iint_{\Omega_e} \left[\left(D_x \frac{\partial^2 \hat{u}^e}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 \hat{u}^e}{\partial y^2} \right) - \left(v_x \frac{\partial \hat{u}^e}{\partial x} + v_y \frac{\partial \hat{u}^e}{\partial y} \right) \right] w_i d\Omega_e. \end{aligned} \quad (18)$$

Integrando por partes a primeira integral do lado direito em (18), com relação à variável u , chega-se a formulação fraca do problema, dada por

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega_e} \left[\frac{\partial \hat{u}^e}{\partial t} \right] w_i d\Omega_e &= - \iint_{\Omega_e} \left(D_x \frac{\partial \hat{u}^e}{\partial x} \frac{\partial w_i}{\partial x} + D_y \frac{\partial \hat{u}^e}{\partial y} \frac{\partial w_i}{\partial y} \right) d\Omega_e - \\ &- \iint_{\Omega_e} \left(v_x \frac{\partial \hat{u}^e}{\partial x} + v_y \frac{\partial \hat{u}^e}{\partial y} \right) w_i d\Omega_e - \sigma \iint_{\Omega_e} \hat{u}^e w_i d\Omega_e + \iint_{\Omega} f w_i d\Omega_e. \end{aligned} \quad (19)$$

Neste trabalho as fontes são localizadas, expressas por uma equação do tipo

$$f(x, y) = f_0 \delta(x_0, y_0), \quad (20)$$

onde (x_0, y_0) é a localização da fonte, e δ é a “função” Delta de Dirac .

Para as condições do problema em estudo, as propriedades serão consideradas constantes, o campo de velocidades será uniforme e as funções de forma serão do tipo bilinear.

Como serão consideradas diversas situações físicas para o problema, é necessário variar a metodologia numérica a fim de obter soluções estáveis, incrementando-a, à medida que o número de Peclet cresça.

Particularizações do Método dos Resíduos Ponderados

Método de Galerkin

Caso se considere a função peso w_i igual à função interpoladora ϕ_i , isto é, $w_i = \phi_i$, o método será denominado Método de Galerkin. Este método é adequado para resolver problemas com número de Peclet muito pequeno ou igual a zero, ou seja, a velocidade do vento é relativamente muito pequena ou zero, e o problema torna-se predominantemente difusivo, isto é, o espalhamento da poluição ocorrerá prioritariamente por efeitos difusivos.

Método Streamline-Upwind/ Petrov-Galerkin - SUPG

Considerando-se a função peso

$$w_i = \phi_i + \frac{\alpha_x l_x^e}{2} \frac{\partial \phi_i}{\partial x}, \quad (21)$$

o método denominar-se-á Streamline-Upwind-Petrov-Galerkin (SUPG), o qual, em determinadas situações estabiliza a equação, conforme Codina (1993a). No caso em estudo, conforme será ilustrado no próximo item, esse método produz resultados aceitáveis para valores de Peclet moderados.

É fato conhecido que, em certas situações (Codina, 1993a), a aproximação de Petrov-Galerkin funciona como a adição de uma difusão artificial na direção do escoamento, ou seja:

$$\bar{D}_x = D_x + \frac{\alpha_x v_x}{2}. \quad (22)$$

Este efeito estabiliza a solução numérica nesta direção.

Variante para Eliminação das Oscilações Transversais

Para altíssimos valores de Peclet e, em parte, em virtude da fonte ser pontual, têm-se oscilações numéricas transversais ao escoamento. Codina (1993a), ou Codina (1993b), para o caso estacionário, propõe um operador em forma de uma difusão artificial na direção transversal para eliminar as oscilações nesta direção, isto é

$$\bar{D}_y = D_y + \frac{\alpha_y v_y}{2}. \quad (23)$$

Neste trabalho utiliza-se a sugestão de Codina (1993a), porém aplicada ao caso transitório. Portanto, deve-se realizar um estudo do impacto desta hipótese na formulação utilizada. A principal idéia da metodologia é manter inalterada a difusão obtida pelo método SUPG ao longo das linhas de corrente, e somente modificar a difusão transversal.

O processo pode, em princípio, provocar uma sobredifusão, portanto é necessário que o fator de dissipação a ser introduzido, elimine a oscilação numérica nas regiões de grande gradiente da variável u , e seja pequeno na região onde os gradientes de u também o sejam.

A metodologia proposta consiste em que o termo artificial da difusão transversal seja proporcional ao resíduo, a saber

$$\alpha_y = a R(\hat{u}). \quad (24)$$

Considerando que os termos espaciais da equação transitória são os mesmos da equação estacionária, e que a consistência da situação estacionária foi mostrada por Codina (1993a), pode-se afirmar que a metodologia em estudo é consistente. Na seqüência, estudam-se as condições necessárias para que a solução seja estável.

Equação Matricial

Desenvolve-se a equação matricial para um elemento considerando a formulação mais geral, que inclui a possibilidade de eliminação das oscilações transversais. Fazendo $\alpha_y = 0$ tem-se o método SUPG, e fazendo $\alpha_y = 0$ e $\alpha_x = 0$, tem-se o método tradicional de Galerkin.

No problema em estudo far-se-á com que o sistema seja concentrado no tempo e no termo reativo, e em função de características físicas tem-se $v_y = 0$.

Admitir-se-á ainda que

$$l_x = l_y = l, \quad e \quad (25a)$$

$$D_x = D_y = D, \quad (25b)$$

logo, o número de Peclet associado é

$$Pe = \frac{v l^e}{2D}. \quad (26)$$

A equação matricial é

$$[M] \left\{ \dot{u} \right\} + [K] \{ u \} - \{ w \} = 0 \quad (27)$$

onde $\{u\}$ é a matriz das incógnitas,

$$[M] = -\frac{l^2}{4} I_4 \quad (28a)$$

sendo I_4 a matriz identidade de ordem 4,

$$[K] = \left(\frac{D}{6} + \frac{v\alpha_x l}{12} \right) K_1 + \left(\frac{D}{6} + \frac{v\alpha_y l}{12} \right) K_2 + \frac{v_x l}{12} K_3 + \frac{\sigma(l)^2}{4} I_4, \quad (28b)$$

onde K_1 , K_2 e K_3 são matrizes de ordem 4 dadas por

$$K_1 = \begin{bmatrix} 2 & -2 & -1 & 1 \\ -2 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ 1 & -1 & -2 & 2 \end{bmatrix},$$

$$K_2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & -2 \\ 1 & 2 & -2 & -1 \\ -1 & -2 & 2 & 1 \\ -2 & -1 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \text{ e}$$

$$K_3 = \begin{bmatrix} -2 & 2 & 1 & -1 \\ -2 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \end{bmatrix}.$$

Finalmente, a matriz coluna $\{w\}$ representa a função fonte, sendo definida por

$$\{w\} = \iint_{\Omega_e} \begin{Bmatrix} fw_1 \\ fw_2 \\ fw_3 \\ fw_4 \end{Bmatrix} d\Omega_e. \quad (28c)$$

De (27) e aplicando o conceito de discretização intermediária no tempo θ , tem-se

$$\begin{aligned} ([M] + \theta \Delta t [K]) \{u\}^{n+1} = \\ ([M] - (1-\theta) \Delta t [K]) \{u\}^n + \Delta t \{w\}. \end{aligned} \quad (29)$$

Análise de Estabilidade

A fim de estudar a estabilidade da equação (29), considere-a escrita do seguinte modo

$$[A]\{u\}^{n+1} = [P]\{u\}^n + \{B\}, \quad (30)$$

sendo as matrizes $[A]$ e $[P]$ definidas por

$$[A] = [M] + \theta \Delta t [K], \text{ e} \quad (31a)$$

$$[P] = [M] - (1 - \theta) \Delta t [K]. \quad (31b)$$

Multiplicando a equação (30) por $[A]^{-1}$ e isolando $\{u\}^{n+1}$ tem-se que

$$\{u\}^{n+1} = [A]^{-1} [P] \{u\}^n + [A]^{-1} \{B\}, \quad (32)$$

e, dessa forma, a estabilidade na equação (30) está condicionada à análise dos auto-valores da matriz $[A]^{-1}[P]$.

Coerência Física

A coerência física está associada ao termo $[A]^{-1}\{B\}$, pois pode-se assumir o campo $\{u\}^n$ como $\{0\}^n$, para o primeiro passo. O resultado seguinte deve ser coerente com a fonte.

Sob as condições do problema proposto, admitindo-se valores positivos, pelo menos um deles, ou nulos para os termos fonte, expressos pelo vetor $\{B\}$, as temperaturas nodais deverão ser maiores, ou no mínimo iguais em qualquer nó em estudo.

Analisando-se uma equação genérica i do produto $[A]^{-1}\{B\}$, sendo p a ordem da matriz $[A]$, o incremento no i ésimo termo será

$$\Delta u_i = A_{i1}^{-1} B_1 + A_{i2}^{-1} B_2 + \dots + A_{ip}^{-1} B_p. \quad (33)$$

Tendo em vista que um ou mais valores B_i são positivos, a única maneira de se ter sempre certeza que Δu_i é positivo, é exigir que cada coeficiente de $[A]^{-1}$ seja positivo. Raciocínio análogo serviria para “fontes” negativas. Maadooliat (1983) mostrou que, para que isso ocorra, a matriz $[A]$ deve ter todos os termos da diagonal positivos e todos os termos fora da diagonal negativos ou iguais a zero. Portanto, a coerência física será satisfeita, quando $[A]$ for uma matriz tal que todos

os termos de sua diagonal sejam positivos, e todos os termos fora de sua diagonal sejam negativos ou zero.

Para o problema em estudo, sabe-se que a matriz $[M]$ é diagonal, com seus termos positivos, e que $\theta > 0$ e $\Delta t > 0$. Logo, $A_{22} > 0$ e $A_{33} > 0$.

Para que $A_{11} > 0$ e $A_{44} > 0$ pode-se exigir que

$$\frac{2D}{3} + \frac{\nu l}{6}(\alpha_x + \alpha_y - 1) + \frac{\sigma(l)^2}{4} > 0, \quad (34a)$$

logo

$$(\alpha_x + \alpha_y) > 1 - \frac{2}{P_e} - \frac{3\sigma(l)^2}{DP_e}. \quad (34b)$$

Para que os termos da matriz $[A]$ sejam negativos ou nulos fora da diagonal principal, basta que os termos da matriz $[K]$ o sejam, o que induz às condições

$$\alpha_x - \frac{1}{2}\alpha_y \geq 1 - \frac{1}{2P_e}, \quad (35a)$$

$$\alpha_x + \alpha_y \geq 1 - \frac{2}{P_e}, \text{ e} \quad (35b)$$

$$\alpha_x - 2\alpha_y \leq -1 + \frac{1}{P_e}. \quad (35c)$$

Nota-se que α_x não pode ser zero, pois, se o fosse, não haveria α_x que satisfizesse o conjunto de equações (35).

Oscilações Numéricas

As oscilações numéricas nos valores dos campos obtidos entre um determinado passo no tempo e o próximo, estão relacionadas aos autovalores do produto matricial $[A]^{-1}[P]$, conforme Myers (1971). As possíveis situações envolvendo autovalores são:

1. Quando todos os autovalores forem positivos, não haverá oscilações e o cálculo é estável.
2. Alguns autovalores sendo negativos, mas maiores do que -1 , o cálculo será estável com oscilações numéricas.

3. Quando um ou mais autovalores forem menores do que -1 , o cálculo será instável.

Logo, o critério para não permitir oscilações numéricas é que todos os autovalores da matriz $[A]^{-1}[P]$ devem ser positivos. Denominando β_i os autovalores de $[A]^{-1}[P]$ segue que

$$\det([A]^{-1}[P] - \beta[I]) = 0. \quad (36)$$

Como $\det([A][B]) = \det[A] \det[B]$, multiplicando (36) por $\det([A])$, obtém-se

$$\det([P] - \beta[A]) = 0. \quad (37)$$

Hildebrand (1965), mostrou que a equação (37) tem autovalores positivos quando as matrizes $[A]$ e $[P]$ são positivas definidas.

Antes de analisar as matrizes $[A]$ e $[P]$, é interessante relembra um desenvolvimento realizado por Fried (1979): “O mínimo autovalor de uma matriz global $[G]$ é maior do que o mínimo autovalor de todas as suas matrizes elementares”, isto é

$$\min_e(\beta_{min}^{(e)}) < \beta_{min}^{[G]} \quad (38)$$

O fato da matriz $[A]$ ser definida positiva é facilmente estabelecido, pois a matriz $[M]$ é obviamente definida positiva, e a ela soma-se parte de $[K]$; cada uma das partes de $[K]$ é singular e esta soma não altera a característica de $[A]$, a saber, $[A]$ continua sendo definida positiva.

Analisando-se a matriz $[P]$, o problema é saber “quanto pode-se subtrair de $[M]$, de modo que a matriz $[P]$ continue sendo positiva definida” conforme Segerlind (1987).

Com o intuito de utilizar a regra de Fried (1979), define-se a equação matricial no elemento (e)

$$[p^{(e)}] = [m^{(e)}] - \delta[k^{(e)}], \quad (39)$$

sendo $\delta = \Delta t(1 - \theta)$.

No presente trabalho é essencial encontrar o valor de α que torna $[p^{(e)}]$ singular, isto é, faz o autovalor mínimo igual a zero. Utilizando-

se a regra de Fried(1979), se o mínimo autovalor de $[p^{(e)}]$ é zero, então sabe-se que $\beta_{min}^{[P]} > 0$ e $[P]$ é definida positiva.

O valor $\beta_{min}^{(e)}$ é o valor de β que satisfaz

$$\det([p^{(e)}] - \beta[I]) = 0. \quad (40)$$

Mas como a matriz é singular, $\beta = 0$, e a equação se torna

$$\det([m^{(e)}] - \delta[k^{(e)}]) = 0. \quad (41)$$

Desta equação encontra-se δ_{min} , impondo

$$\Delta t < \frac{\delta_{min}}{(1-\theta)}. \quad (42)$$

Se os elementos forem diferentes, o menor valor de α ocorrerá no menor dentre eles. Segundo experiência de alguns autores, por exemplo Segerlind (1987), equações análogas a anterior são conservativas para malhas não-uniformes, mas são um bom guia para selecionar os valores de Δt . Para malhas uniformes a equação é uma excelente estimativa de Δt .

Utilizando os conceitos anteriores para o problema em estudo, cuja malha é uniforme, obtêm-se os seguintes valores de δ

$$\delta_1 = \frac{a}{e}, \quad (43a)$$

$$\delta_2 = \frac{a}{6c + e}, \quad (43b)$$

$$\delta_3 = \frac{a}{6b + e}, \text{ e} \quad (43c)$$

$$\delta_4 = \frac{a}{2b + 2c + e}, \quad (43d)$$

onde

$$a = \frac{l^2}{4}, \quad (44a)$$

$$b = \frac{D}{6} + \frac{v\alpha_x l}{12}, \quad (44b)$$

$$c = \frac{D}{6} + \frac{v\alpha_y l}{12}, \quad (44c)$$

$$d = \frac{vl}{12}, \text{ e} \quad (44d)$$

$$e = \frac{\sigma l^2}{4}. \quad (44e)$$

Se $\alpha_x > \alpha_y$, então δ_3 é mínimo, e

$$\Delta t < \frac{l^2}{(4D + 2\alpha_x vl + \sigma l^2)(1-\theta)}. \quad (45)$$

Se $\alpha_x < \alpha_y$, então δ_2 é mínimo, e

$$\Delta t < \frac{l^2}{(4D + 2\alpha_y vl + \sigma l^2)(1-\theta)}. \quad (46)$$

Observe que para $\theta = 1$ no conjunto de equações (29), equivalente a formulação implícita, Δt pode ser arbitrariamente escolhido.

Gráficos

A seguir, analisam-se diversas situações, nas quais as dimensões do domínio variarão de acordo com o alcance do fenômeno, isto é, para simplicidade dos cálculos e da interpretação física as fronteiras foram aproximadas ou afastadas.

Serão analisados diversos cenários nos quais observa-se desde o fenômeno de difusão pura, ou seja, a velocidade é nula e portanto o número de Peclet é igual a zero, até situações fortemente convectivas, expressas por altíssimos números de Peclet.

Caso com Peclet igual a zero

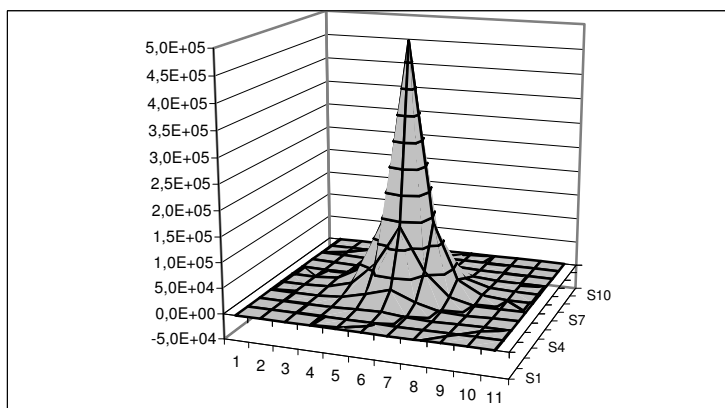


FIGURA 1 – Concentração de poluente para $P_e = 0$, $D = 0.001$ e $\sigma = 0$, após 4.000s, utilizando-se o Método de Bubnov-Galerkin. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10 m.

Casos com Peclet Pequeno

Para ilustrar este cenário utilizar-se-á Peclet igual a 1. Os resultados são expressos pela figura 2.

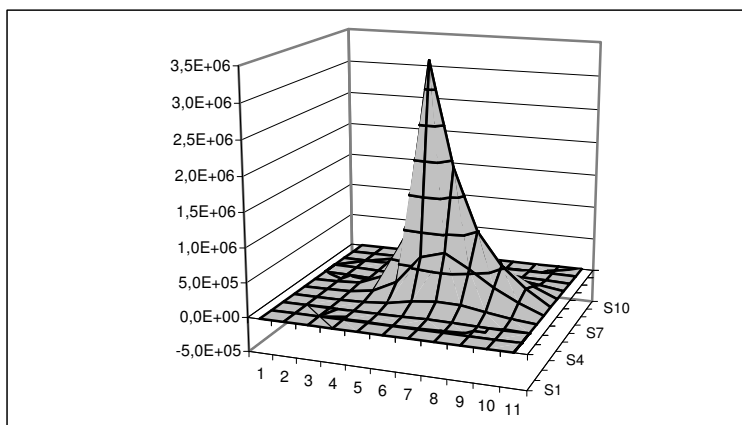


FIGURA 2 – Concentração de poluente para $P_e = 1$ e $\sigma = 0$, após 100.000s, utilizando-se o Método SUPG. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10 m.

Casos com valores moderados de Peclet

Para estes casos utilizar-se-á Peclet igual a 10 e serão ilustrados os resultados obtidos pelas diversas metodologias.

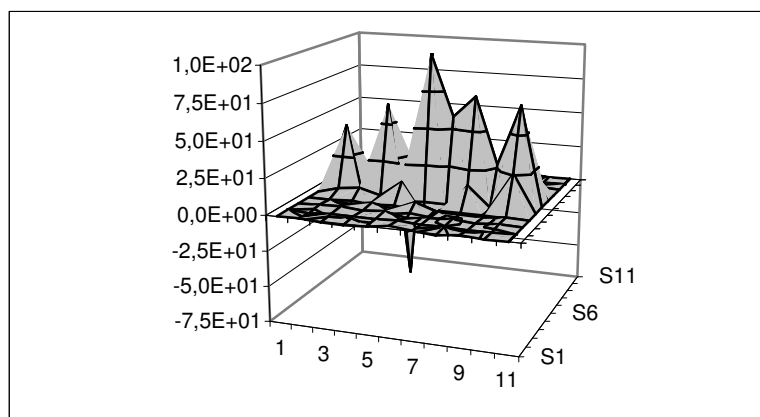


FIGURA 3 – Concentração de poluente para $P_e = 10$ e $\sigma = 0.0001$, após 1.000s, utilizando-se o Método Bubnov-Galerkin. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10 m.

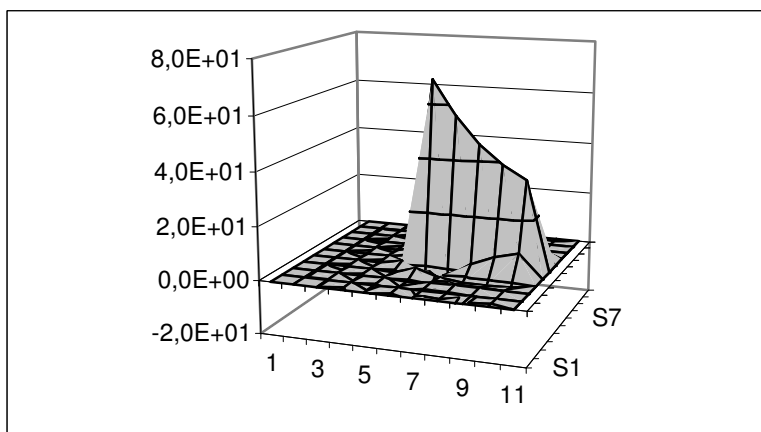


FIGURA 4 – Concentração de poluente para $P_e = 10$ e $\sigma = 0$, após 1.000s, utilizando-se o Método SUPG. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10 m.

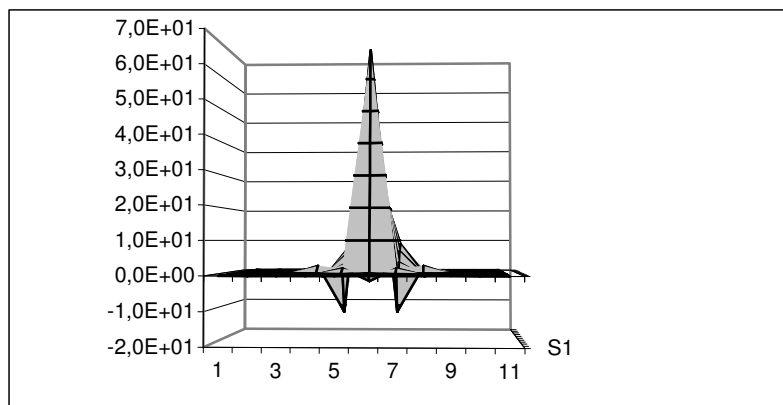


FIGURA 5 – Concentração de poluente para $Pe = 10$ e $\sigma = 0$, após 1.000s, vista na direção do vetor velocidade, utilizando-se o Método SUPG. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10m.

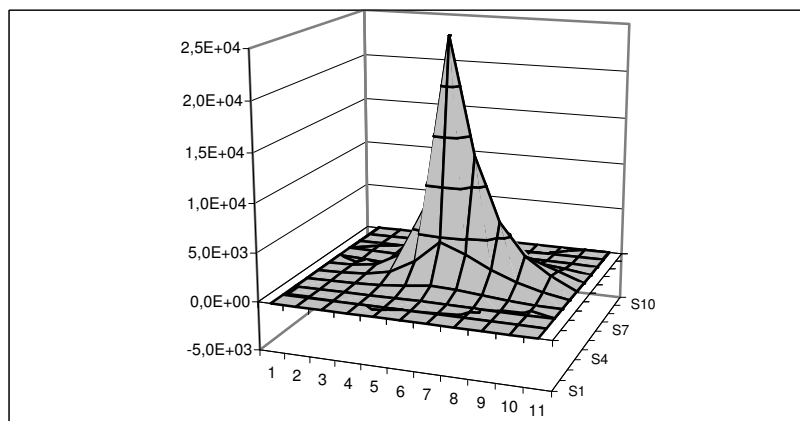


FIGURA 6 – Concentração de poluente para $Pe = 10$ e $\sigma = 0.0001$, após 100.000s, utilizando-se o Método SUPG modificado pela adição da difusão transversal. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 100 m.

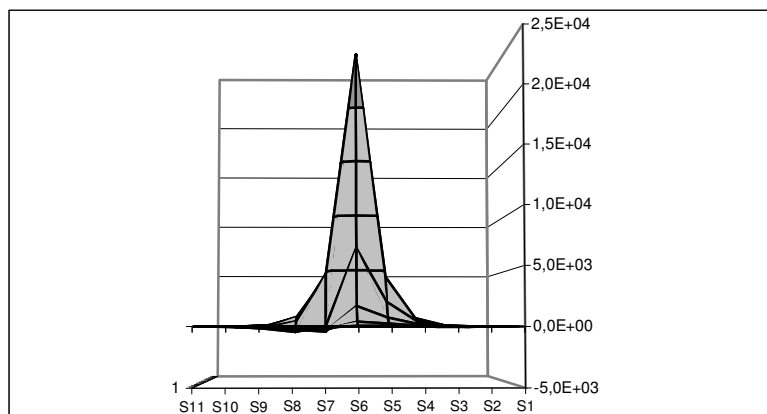


FIGURA 7 – Concentração de poluente para $Pe = 10$ e $\sigma = 0.0001$, após 100.000s, vista na direção do vetor velocidade, utilizando-se o Método SUPG modificado pela adição da difusão transversal. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 100 m.

Casos com altos valores de Peclet

Para estes casos utilizar-se-á altos valores de Peclet, os quais são úteis pois descrevem situações reais, e serão ilustrados os resultados obtidos pelo Método SUPG modificado.

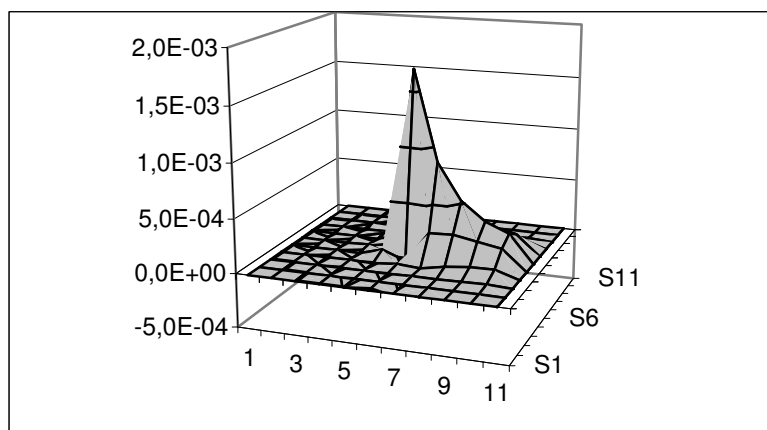


FIGURA 8 – Concentração de poluente para $Pe = 25.000.000$ e $\sigma = 0.0001$, após 50.000s, utilizando-se o Método SUPG modificado pela adição da difusão transversal. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10.000 m.

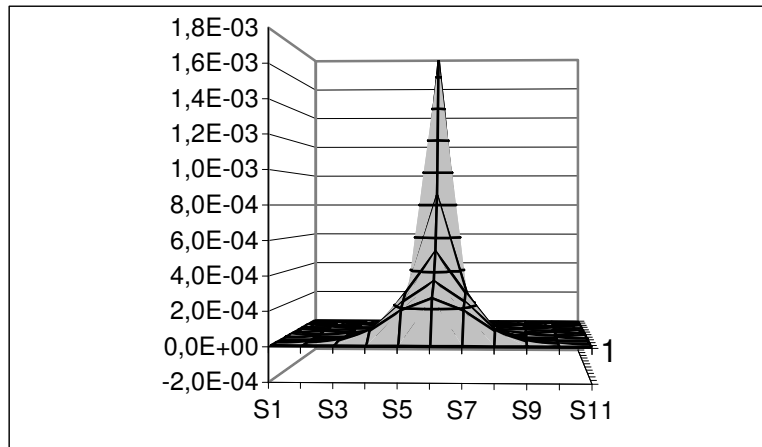


FIGURA 9 – Concentração de poluente para $Pe = 25.000.000$ e $\sigma = 0.0001$, após 50.000s, vista na direção do vetor velocidade, utilizando-se o Método SUPG modificado pela adição da difusão transversal. As distâncias da fonte aos lados do domínio são iguais a 10.000 m.

Comentários e Conclusões

Em todos os casos estudados o domínio foi dividido em 100 elementos retangulares e o valor de f_0 foi arbitrado igual a 1500. Todas as grandezas e constantes físicas estão expressas no sistema internacional S.I.

No caso da velocidade ser nula, o número de Peclet torna-se igual a zero, e o fenômeno torna-se exclusivamente difusivo. Para ilustrar este contexto, foi esboçada a figura 1, cujos valores da concentração dos poluentes foram obtidos com o método de Galerkin (Galerkin-Bubnov). Nota-se, nesta figura, que uma hora depois da fonte estar emitindo poluição continuamente, o efeito poluente está restrito a uma região de 2m em torno da fonte. Isso leva à conclusão de que o fenômeno de difusão é muito localizado, em perfeito sincronismo com as previsões.

Os resultados expressos na figura 2, obtidos pela formulação SUPG, quando o método de Galerkin-Bubnov já atingia seu limite de validade, ilustram o caso com velocidade muito baixa, pois o número de Peclet é igual a 1. Neste caso, após aproximadamente 27 horas, o efeito da poluição atinge a fronteira do domínio, que está a 10m.

Nos casos representados pelas figuras 1 e 2, foi utilizada uma aproximação das fronteiras para melhor visualizar o fenômeno, pois, trabalhando com fronteiras a 10.000 metros, estes fenômenos são imperceptíveis. Observa-se também que as condições de contorno poderiam ser alteradas para Dirichlet, ou seja, colocadas iguais a zero em toda a fronteira. A análise desses casos, nos quais o efeito não chega à fronteira, torna o problema praticamente independente das condições de contorno.

Para Peclet igual a 10, embora a velocidade ainda não seja tão grande, o efeito convectivo começa a se destacar, isto é, constata-se uma predominância do fenômeno na direção da velocidade. Fez-se, nesse caso, uma comparação das metodologias utilizadas. A figura 3 mostra o resultado obtido pelo Método de Bubnov-Galerkin, que é completamente oscilatório, não tendo nenhum significado físico. Nas figuras 4 e 5, vê-se o resultado obtido pelo Método SUPG. Pode-se notar que essa metodologia estabiliza as oscilações na direção da velocidade (figura 4) porém, conforme ilustrado na figura 5, a solução apresenta fortes oscilações na direção perpendicular à velocidade. As figuras 6 e 7 representam os resultados obtidos pelo Método SUPG, modificado pelo incremento do parâmetro estabilizador na direção transversal, obtido com as restrições descritas no item 4. Pode-se notar que essa metodologia, além de eliminar as oscilações na direção da velocidade, elimina também as oscilações transversais.

As figuras 8 e 9 ilustram os resultados obtidos pelo SUPG modificado para grandes valores do número de Peclet, que estão associados às velocidades de ventos razoáveis, cerca de 1m/s ou mais, com fronteiras razoavelmente distantes da fonte, cerca de 10km. É possível observar que depois de 27 horas de emissão constante da fonte o efeito da poluição atinge a fronteira.

Das análises, conclui-se que o fenômeno da poluição atmosférica, devido a agentes lançados por indústrias na atmosfera, é um fenômeno prioritariamente convectivo.

Em relação aos problemas numéricos, pode-se concluir que a análise do fator de estabilização transversal conduziu a uma série de restrições, as quais, impostas ao modelo numérico, levaram a eliminação das oscilações numéricas e a resultados fisicamente coerentes.

Pode-se inferir para um caso real que o controle do lançamento de poluentes na atmosfera deve considerar as configurações freqüentes dos campos de velocidade do vento, principalmente em regiões de grandes velocidades de vento. As possíveis indústrias poluidoras

devem ser construídas em locais onde a direção predominante do vento leve a poluição para regiões inabitadas. Essa preocupação deve ser maior quando houver cidades muito próximas entre si .

O Modelo elaborado poderá fornecer dados iniciais para estudos associados a esta problemática, contribuindo para a confecção do Relatório de Impacto Ambiental (RIMA), no processo de análise de instalação de indústrias potencialmente poluidoras.

MURCIA, S. R. D. R., LACAZ, T. M. V. S. Atmosphere pollution model: numerical solution and associated instability. *Rev. Mat. Estat.* (São Paulo), v.20, p.79-102, 2002.

- *ABSTRACT: The purpose of this work is to elaborate a model for the dispersion of gaseous polluting agents, which are emitted in the atmosphere from punctual sources, in specific situations. The phenomenon is described by a transitory advective-diffusive partial differential equation and resolved by the Finite Elements Method, using the formulation of the weighted residual. The numerical resolution of this type of equation generates problems of numerical oscillations for high Peclet number. The problems are analyzed using a transversal stabilizing parameter and results are presented for many situations.*
- *KEYWORDS: Atmospheric Pollution, Mathematical Modelling, Finite Elements Method, Stability, SUPG Method, Numerical Oscillations.*

Referências

CODINA, R. A discontinuity-capturing crosswind-dissipation for the finite element solution of the convection-diffusion equation. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, v.110, p.325-42, 1993a.

_____. *Finite element formulation for the numerical solution of the convection-diffusion equation*. Barcelona: CIMNE, 1993b. 130p. (Monograph, n.14).

FRIED, I. *Numerical solution of differential equations*. New York: Academic Press, 1979. 261p.

HILDEBRAND, F. B. *Methods of applied mathematics*. 2. ed. New Jersey: Prentice-Hall, 1965. 362p.

LACAZ, T. M. V. S.; MURCIA, S. R. D. R.; MEYER, J. F. C. A.; MARTINS, R. E. Sobre um problema de polución ambiental: el modelamiento matemático (parte uno), In: CONGRESO DE MÉTODOS NUMÉRICOS EN CIENCIAS SOCIALES, 1., 2000, Barcelona. *Actas...* Barcelona: Centro Internacional de Métodos Numéricos in Ingeniería (CIMNE), 2000. v.1, p.341-51.

MAADOOIAT, R. *Element and time step criteria for solving time-dependent field problems using the finite element method*. 1983, 109f. Dissertation (Ph.D) - Michigan State University, East Lansing.

MURCIA, S. R. D.; LACAZ, T. M. V. S.; MEYER, J. F. C. A.; MARTINS, R. E. Solución Numérica y Gráficos para un Problema de Polución Ambiental de la Atmósfera (parte dos). In: CONGRESO DE MÉTODOS NUMÉRICOS EN CIENCIAS SOCIALES, 1., 2000, Barcelona. *Actas....* Barcelona: Centro Internacional de Métodos Numéricos in Ingeniería (CIMNE), 2000. v.1, p.441-51.

MYERS, G. E. *Analytical methods in conduction heat transfer*. New York: MacGraw-Hill, 1971. 429p.

SEGERLIND, L. J. *Applied finite element analysis*. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 1987. 427p.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. *The finite element method*. 4.ed. New York: MacGraw-Hill, 1989. v.1, 865p.

Recebido em 08.12.2001