

Estimando os Limites Inferiores e Superiores do Erro Residual da Solução Numérica de um Modelo ADR

Alessandro Firmiano, Maria L. Pizarro*
João Paulo Martins, Edson Wendland†

18 de Outubro de 2013

Resumo

Um estimador de erro eficiente inclui uma predição muito próxima do erro real, mesmo quando a solução analítica é desconhecida para a maioria dos problemas da Engenharia. A confiabilidade do estimador surge com a existência de limites inferiores e superiores do erro estimado quando viabilizados por implementação computacional. Neste trabalho, através da disponibilização dos valores dos erros residuais η e dos erros reais $\|e\|$ da solução numérica do transporte do contaminante ^{90}Sr em meio poroso saturado, são apresentadas certas constantes C_1 e C_2 tais que: $C_1\|e\| \leq \eta \leq C_2\|e\|$. Os valores desses limites tornam-se otimizados conforme são empregados estratégias de deformação ou estratégias de refinamento adaptativo sobre a malha inicial de elementos finitos.

Palavras chave: Estimador Residual, Equação de Advecção-Dispersão-Reação, Meio Poroso Saturado, Índice de Eficiência, Código Java, Método dos Elementos Finitos.

Introdução

Resultados computacionais, mesmo quando obtidos de um apropriado modelo matemático que caracteriza um fenômeno físico de interesse, não estão inunes aos erros numéricos inseridos pelos processos de discretização. Equações diferenciais parciais ou equações integrais quando são manipuladas por dispositivos digitais perdem informações, uma vez que as aproximações numéricas diferem do modelo contínuo.

* E-mail: lezandro@sc.usp.br Academia da Força Aérea-AFA, Pirassununga-SP.

† E-mail: ew@sc.usp.br Depto de Hidráulica e Saneamento, SHS/EESC/USP, São Carlos-SP.

Estes erros de aproximação, quando ultrapassam certa magnitude, invalidam a predição numérica do modelo matemático. Embora ocorram com frequência, os erros de aproximação difíceis de identificar e de avaliar com medidas intuitivas ou heurísticas. Nos últimos 20 anos, teorias matemáticas e procedimentos computacionais foram desenvolvidos para estimar o erro de aproximação em soluções numéricas dos problemas de valores iniciais e de fronteiras em diversas áreas da Engenharia. Neste cenário surgem técnicas e demonstrações matemáticas para fundamentar os chamados estimadores de erro *a posteriori*.

As análises destes estimadores, baseadas em informações obtidas no pós-processamento das soluções numéricas, fornecem limites superiores e inferiores do erro de aproximação em uma norma apropriada. Assim, se o erro estimado pode ser controlado, é possível melhorar a qualidade da solução numérica ou pela modificação da malha que representa o domínio, ou pelo aumento da ordem da função de aproximação, ou otimização do passo de tempo ou por outro processo do algoritmo numérico capaz de reduzir o erro. Segundo GRÄTSCH e BATHE (2005), o maior requisito de um estimador η para aproximar ou limitar o erro real $\|e\|$, é a existência de constantes positivas C_1 e C_2 tais que $C_1\|e\| \leq \eta \leq C_2\|e\|$. Assim, se o erro real $\|e\|$ for pequeno, então a desigualdade $\eta \leq C_2\|e\|$ implicará que o estimador η será um valor pequeno, pois a constante C_2 possui um valor não muito grande. Inversamente, se a estimativa η for um valor pequeno, então a desigualdade $C_1\|e\| \leq \eta$ implicará que o erro real $\|e\|$ também será pequeno, pois a constante C_1 possui um valor não muito pequeno. As desigualdades $C_1\|e\| \leq \eta \leq C_2\|e\|$ ainda representam uma estimativa do erro no sentido *global* e indicam o intervalo que contém o erro total sobre um domínio computacional ODEN (2002).

Neste trabalho são obtidos os limites superiores e inferiores do indicador elemento residual do estimador de erro da equação parabólica (1), que descreve os fenômenos de advecção-dispersão-reação (ADR) em meio poroso saturado, considerando o transporte em regime de pequena advecção, conforme descrito em [6].

O modelo matemático que descreve o transporte de contaminantes em água subterrânea, considerando $\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{X}, \mathbf{t})$ a concentração do poluente, é dado por:

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

sendo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ o domínio poligonal limitado e com fronteira Lipschitz Γ consistindo de duas partes disjuntas, Γ_D a fronteira de Dirichlet e Γ_N a fronteira de Neumann, tais que $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Omega$. O tempo final T é arbitrário, no entanto, precisa ser especificado. A matriz de dispersão \mathbf{D} é continuamente diferenciável e simétrica, uniformemente definida positiva e uniformemente isotrópica. E ainda, o campo de velocidades \mathbf{v} é continuamente diferenciável e o termo de reação λ é uma função escalar contínua e não-negativa [11].

Esses modelos computacionais que implementam a migração de soluto em meio poroso saturado surgem constantemente em publicações científicas ([4],[5],[8] e [12]) devido à suma importância dada à compreensão e previsão do transporte de constituintes dissolvidos em água subterrânea.

1 Um Estimador Residual Espacial e a Solução Analítica

Em situações em que na equação (1) o termo advectivo é dominante sobre o termo dispersivo, o método residual apresenta-se como a técnica apropriada para obter estimativas *a posteriori* do erro da solução numérica da equação de transporte de contaminantes [6]. Nesse método residual, a contribuição de cada elemento K da triangulação \mathcal{T} , para a estimativa do erro espacial da malha é obtida pelo indicador:

$$\begin{aligned} R_K = f_I - \frac{1}{\tau_n} (C_{\mathcal{T}_n}^n - C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) + \text{div} (D^n \nabla (\theta C_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1})) \\ - \mathbf{v}^n \cdot \nabla (\theta C_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) - \lambda^n (\theta C_{\mathcal{T}_n}^n + (1-\theta) C_{\mathcal{T}_{n-1}}^{n-1}) \end{aligned} \quad (2)$$

A norma L^2 do indicador elemento residual (2), implementada em linguagem JAVA, foi determinada utilizando os pontos de Gauss do elemento quadrilátero delimitado pelas clássicas funções Lagrangianas $\Phi_j = \frac{1}{4}(1-u_j u)(1-w_j w)$ [7] em

coordenadas locais (u, w) . Desta forma, um estimador de erro espacial *a posteriori* e com características residuais, para a equação parabólica (1), será dado por:

$$\eta = \left\{ \sum_{K \in \mathcal{T}} \alpha_K^2 \|R_K\|_{L^2(K)}^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

sendo $\alpha_K = \min \left\{ h_K \varepsilon^{-\frac{1}{2}}, \beta^{-\frac{1}{2}} \right\}$ a função de ponderação; h_K o diâmetro do elemento K e ε o menor autovalor da matriz \mathbf{D} . A constante $\beta \geq 0$ é tal que $\lambda - \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{v} \geq \beta$.

Visando uma comparação entre a solução numérica da equação do transporte (1) e a correspondente solução analítica 2D disponível na literatura (p. ex. [14]), algumas hipóteses sobre o aquífero em estudo precisam ser consideradas, entre elas:

- o aquífero de extensão infinita tem contaminação não pontual de comprimento finito;
- a densidade e a viscosidade do fluido são constantes;
- o contaminante está sujeito a transformação química de primeira ordem;
- o fluxo uniforme ocorre na direção x com velocidade constante v e
- os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal (D_x, D_y) são constantes.

As condições iniciais e de contorno para obter a solução analítica do transporte de contaminantes em aquíferos, que obedecem às considerações acima, são dadas por:

$$C = C_0, \quad x = 0 \text{ e } Y_1 < y < Y_2 \quad C = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x = \infty$$

$$C = 0, \quad x = 0 \text{ e } y < Y_1 \text{ ou } y > Y_2 \quad C = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad y = \pm\infty$$

sendo Y_1 a ordenada do limite inferior da fonte de contaminante em $x = 0$ e

Y_2 a ordenada do limite superior da fonte de contaminante em $x = 0$.

Assim, segundo WEXLER (1992) a solução analítica 2D é expressa por:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 x}{\sqrt{\pi D_x}} e^{\left[\frac{vx}{2D_x} \right]} \int_0^{\frac{1}{Z^4}} \frac{1}{Z^3} e^{\left[-\left(\frac{v^2}{4D_x} + \lambda \right) Z^4 - \frac{x^2}{4D_x Z^4} \right]} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{Y_1 - y}{2Z^2 \sqrt{D_y}} \right] - \operatorname{erfc} \left[\frac{Y_2 - y}{2Z^2 \sqrt{D_y}} \right] \right\} dZ \quad (4)$$

O termo referente à integral da solução acima é aproximado, no código JAVA, pela implementação da fórmula de translação Gauss-Legendre [9].

2 Resultados e discussão

Para a verificação dos limites do estimador de erro residual para a equação do transporte de contaminantes, é implementada uma fonte não pontual contendo o elemento reativo ^{90}Sr (estrôncio-90) que migra facilmente de um armazenamento de resíduos radioativos para um aquífero confinado. As variáveis do modelo de transporte implementadas no código JAVA são as apresentadas na tabela 1 e a solução numérica é comparada com a solução analítica (4).

Tabela 1 – Variáveis do transporte de ^{90}Sr em aquífero confinado, adaptadas de WEXLER (1992).

VARIÁVEL	DESCRIÇÃO	INPUT DOS DADOS
Velocidade uniforme (m/dia)	Velocidade real do fluxo de água subterrânea na direção horizontal.	<code>double Vx = 1.0; // velocidade em x</code> <code>double Vy = 0.0; // velocidade em y</code>
Dispersividade longitudinal (m)	Estima a dispersão longitudinal $D_x = \alpha_x V_x$ em função da pluma.	<code>double longiDisp = 100.0;</code> <code>// de 0.1m a 100m - (Kumar, 2009)</code>
Dispersividade transversal (m)	Estima a dispersão transversal $D_y = \alpha_y V_x$ em função da pluma.	<code>double transDisp = 20.0;</code>
Porosidade efetiva	Define a porosidade efetiva.	<code>double poro = 0.15; // porosity</code>
Frente de contaminante (m)	Implementa a concentração na fronteira de Dirichlet de 150m.	<code>int Ymed = 3; // nós acima e abaixo da contaminação pontual.</code>
Concentração de ^{90}Sr (mg/L)	Concentração constante estimada na fonte de 100 mg/L.	<code>double solute = 100.0;</code>
Decaimento de 1ª ordem (1/dia)	Escalar que implementa o termo de decaimento de 1ª ordem do ^{90}Sr .	<code>double reaction = 0.0000678; //</code> <code>tempo de meia vida do ^{90}Sr = 28 anos</code>
Coeficiente theta	Escalar da discretização temporal.	<code>double theta = 1.0/2.0; // método de Crank-Nicolson-Galerkin</code>
Solução Analítica	Variável booleana para comparar a solução numérica com a analítica.	<code>boolean AnalyticalSolution = true;</code> <code>// solução 2D de Wexler 1992</code>

`package org.arena.water.gwfem2d.transport2D`

As dimensões do domínio computacional retangular são 1000m de comprimento por 800m de largura. A malha inicial foi dividida de forma que os 1024 elementos retangulares sobreponham os 1089 nós igualmente espaçados na direção x e na direção y . A figura 1 compara a frente de contaminação obtida pela solução analítica com a respectiva solução numérica, ambas implementadas no mesmo código JAVA.

A técnica empregada na solução numérica para evitar o surgimento de concentrações negativas e oscilações espúrias foi o esquema *Symmetrical Streamline Stabilization* (S^3) [13]. A discretização temporal da equação (1) foi obtida pelo popular método de Crank-Nicolson [2].

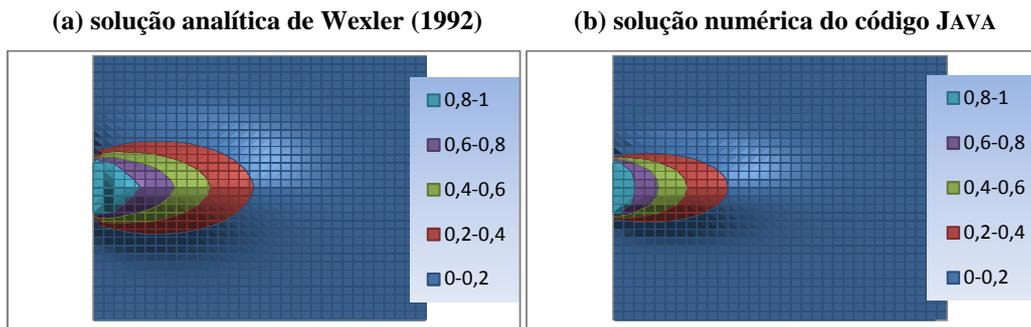


FIGURA 1 – Comparação entre a solução analítica (a) e a solução numérica (b) do transporte do ^{90}Sr em aquífero confinado no instante $t = 800d$

Através da disponibilização computacional dos valores dos erros residuais e dos erros reais da solução numérica do transporte do ^{90}Sr , para a malha original e em todos os passos de tempo, determina-se as constantes $C_1 = 1,7$ e $C_2 = 4,0$, tais que:

$$C_1 \|e\| \leq \eta \leq C_2 \|e\| \quad (5)$$

A figura 2 apresenta o erro residual fornecido pelo estimador espacial (3) limitado pela norma euclidiana do erro real. Verifica-se que o limite inferior $1,7\|e\|$ é válido para todos os passos de tempo da simulação numérica, enquanto que o limite superior aplica-se a partir do 40º passo de tempo. Para limitar superiormente os passos de tempo anteriores ao 40º, basta aumentar o valor da constante C_2 .

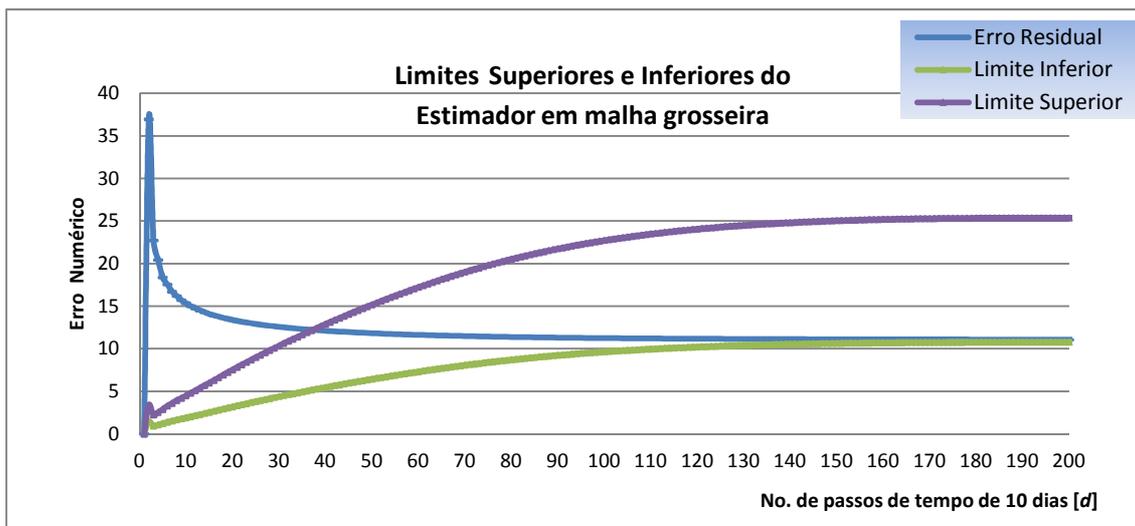


FIGURA 2 – Visualização dos limites inferiores $1,7\|e\|$ e superiores $4,0\|e\|$ do estimador de erro residual em malha grosseira

As desigualdades (5) mostram que o erro residual tende a zero na mesma taxa de convergência em que o erro real tende a zero, e que na simulação do transporte do ^{90}Sr , o índice de eficiência, conforme [10], é limitado por $1,7 \leq E_f = \frac{\eta}{\|e\|} \leq 4,0$ a partir do 40º passo de tempo.

Em uma segunda análise é feita uma reorganização dos nós da malha inicial em uma estratégia que concentra os nós disponíveis junto à frente de contaminação. Nesta nova malha deformada os limites superiores e inferiores do erro residual estimado, conforme apresentado na figura 3, obedecem às desigualdades:

$$\|e\| \leq \eta \leq 2,0\|e\| \quad (6)$$

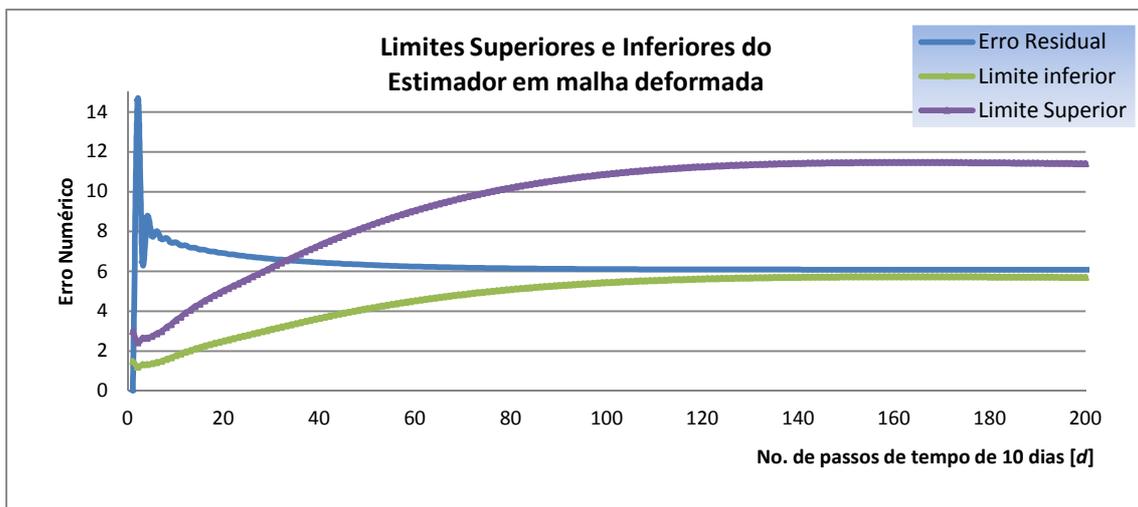


FIGURA 3 – Obtenção dos limites inferiores $1,0\|e\|$ e superiores $2,0\|e\|$ do estimador de erro residual em malha deformada

Desta forma, verifica-se que para limitar o erro residual, a partir do 40º passo de tempo, é necessário constantes $C_1 = 1,0$ e $C_2 = 2,0$, que determinam um intervalo de amplitude 1,0. Isto representa uma melhora de 57%, se comparado ao intervalo de amplitude 2,3 para limitar, a partir do 40º passo de tempo, o erro residual estimado na malha original. O índice de eficiência do estimador residual na malha deformada passa a ser limitado por $1,0 \leq E_f \leq 2,0$ a partir do 40º passo de tempo.

Numa terceira estratégia, um elemento da malha deformada será refinado se o seu resíduo superar, em uma determinada porcentagem τ , o valor do erro máximo obtido sobre todos os elementos dessa malha. O valor do parâmetro τ , geralmente indicada

pelo usuário do código, é considerado neste trabalho como sendo $\tau = 0,5$, uma escolha popular e bem estabelecida [11].

Sendo a malha deformada uma malha estruturada e com elementos quadriláteros, o elemento marcado para o refinamento será subdividido horizontalmente em dois elementos congruentes. Para evitar nós de enforcamento¹, os elementos vizinhos da esquerda e da direita também serão refinados.

Nesta última estratégia verifica-se que o erro residual é limitado pela desigualdade:

$$0,55\|e\| \leq \eta \leq 0,90\|e\| \quad (7)$$

a figura 4 apresenta o estimador residual limitado pelo erro real da malha deformada combinada com a uma estratégia de refinamento adaptativo.

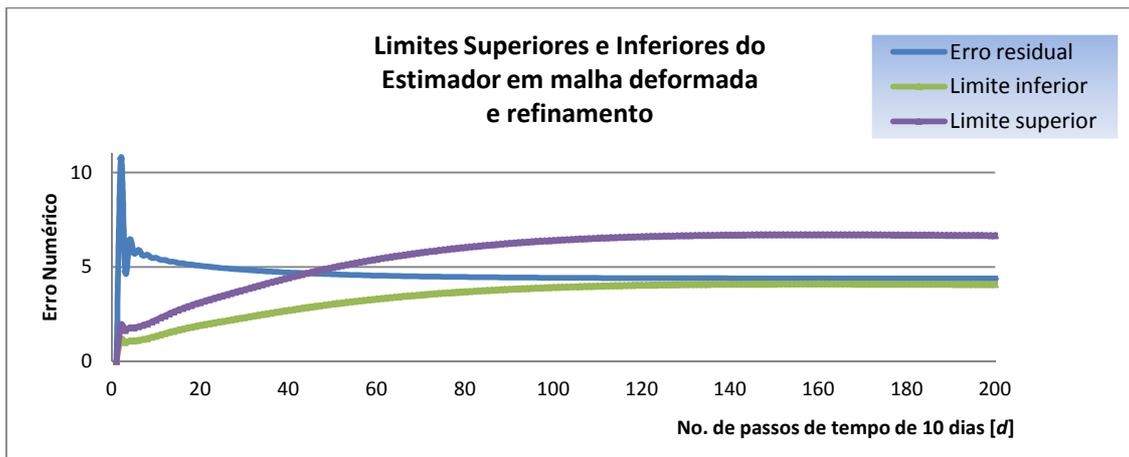


FIGURA 4 – Obtenção dos limites inferiores $0,55\|e\|$ e superiores $0,90\|e\|$ do estimador de erro residual em malha deformada combinada com estratégia de refinamento

Desta forma, para limitar o erro residual a partir do 40° passo de tempo, é necessário um intervalo de amplitude 0,35, o que corresponde a uma melhora de 85% se comparado com a amplitude encontrada para limitar o erro residual na malha original. E ainda, o índice de eficiência do estimador residual espacial na malha deformada com refinamento passa a ser limitado por $0,55 \leq E_f \leq 0,90$, a partir do 40° passo de tempo.

¹ Do inglês *hanging nodes*. Um nó será considerado de enforcamento se na malha existir pelo menos um elemento, tal que o nó pertence ao interior de uma aresta de K , mas não é vértice do elemento K .

3 Conclusão

Foram obtidas constantes específicas C_1 e C_2 como limites inferiores e superiores para um estimador de erro *a posteriori* η da solução numérica do transporte do contaminante ^{90}Sr em água subterrânea. A disponibilização do erro real $\|e\|$ foi realizada através de um código JAVA que determina a solução numérica do modelo ADR em regime predominantemente advectivo e depois compara com a respectiva solução analítica [14] numa implementação que considerou o campo de velocidades uniforme num meio isotrópico e homogêneo.

Sobre malha grosseira, em malha deformada ou em malha com refinamento adaptativo, o estimador de erro residual η foi limitado inferior e superiormente pela norma euclidiana do erro real $\|e\|$, estabelecendo-se a seguinte desigualdade:

$$C_1\|e\| \leq \eta \leq C_2\|e\|$$

para todos os passos de tempo $t \geq t_i$.

Com a reorganização dos nós da malha inicial em uma estratégia que concentra os nós disponíveis com aproximação maior na frente de contaminação, o estimador residual apresentou uma diminuição de 57% na amplitude do intervalo (C_1, C_2) formado pelas constantes positivas que limitam o erro residual na desigualdade indicada acima. E quando essa estratégia foi combinada com a do refinamento adaptativo com parâmetro $\tau = 0,5$, o estimador residual corresponde com uma diminuição de 85% na amplitude do intervalo (C_1, C_2) para limitar o erro residual na malha.

Desta forma, verifica-se que o erro residual estimado tende à zero na mesma taxa de convergência em que o erro real tende à zero. Este fato observado fornece ao estimador residual η características confiáveis quando empregado nas soluções numéricas dos modelos ADR.

Referências

- [1] AKRIVIS G., Makridakis C., Nochetto R. *A posteriori error estimates for the Crank-Nicolson method for parabolic equations*, Mathematics of Computation, vol 75, pp 511-531, (2006).

- [2] DONEA J., Huerta A. *Finite Element Methods for Flow Problems*, John Wiley & Sons, 2004.
- [3] GRÄTSCH T., Bathe K. J. *A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis*, Computers and Structures 83, pg 235-265, (2005).
- [4] HOSSAIN M. A., Miah A. S. *Crank-Nicolson-Galerkin model for transport in groundwater: Refined criteria for accuracy*, Applied Mathematics and Computation, 105: 173-181, (1999).
- [5] HUANG Q, Huang G., Zang H. *A finite element solution for the fractional advection-dispersion equation*, Advances in Water Resources; 31 : 1578-1589, (2008).
- [6] JESUS A. F. *Um Estimador de Erro a posteriori para a Equação do Transporte de Contaminantes em Regime de Pequena Advecção*, 150 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2010.
- [7] KRESIC N., *Hydrogeology and Groundwater Modeling*, CC Press 2nd. ed, 2006.
- [8] KUMAR B. P., Dodagoudar G. R, *Two-dimensional modeling of contaminant transport through saturated porous media using the radial point interpolation method (RPIM)*, Hydrogeology Journal, 16:1497-1505, (2008).
- [9] MATHEWS J., *Numerical Methods Using Matlab*, Prentice Hall, NJ, USA, 2004.
- [10] ODEN J. T. *A Posteriori Error Estimation, Verification and Validation in Computational Solid Mechanics*, Hans Maier, ASME/USACM Standards, 2002.
- [11] VERFÜRT R., *Adaptive Finite Element Methods*, Lecture Notes Winter Term 2007/08 Fakultät für Mathematik, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland, 2008.
- [12] SOREK S. *Two-dimensional adaptive eulerian-lagrangian method for mass transport with spatial velocity distribution*, Transport in Porous Media, 3: 473-489, (1988).
- [13] WENDLAND E. *A symmetrical streamline stabilization scheme for high advective transport*, Inter Journal for Analytical and Num Methods in Geomechanics, 24(1), p. 29-45 (2000).
- [14] WEXLER E. *Applications of Hydraulics Analytical Solutions for One-, Two- and Three-Dimensional solute Transport in Groundwater Systems with Uniform Flow* – Chapter B7 Techniques of Water-Resources Investigations of the USGS, Denver USA, 1992.