

RESUMO

JESUS, A. F., (2010). **Um Estimador de Erro *a posteriori* para a Equação do Transporte de Contaminantes em Regime de Pequena Advecção**. 2010. 150 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2010.

Orientador: Prof. Assoc. Edson Cezar Wendland

Vários modelos computacionais que implementam o transporte de soluto em meio poroso saturado surgem constantemente em publicações científicas devido à suma importância dada à compreensão e previsão do transporte de constituintes dissolvidos em água subterrânea. As soluções numéricas obtidas por esquemas computacionais não estão imunes aos erros de discretização. No entanto, a confiabilidade nos resultados obtidos das complexas operações provenientes da dinâmica de fluidos computacional pode ser aumentada através de estimadores de erro *a posteriori* que indicam a precisão da solução numérica de um modelo matemático que simula o fenômeno físico de interesse. Neste trabalho é apresentado um estimador residual para a equação parabólica que descreve os fenômenos de advecção-dispersão-reação (ADR) em meio poroso saturado, considerando o transporte em regime de pequena advecção. A solução numérica da equação ADR é obtida pelo método dos elementos finitos que emprega termos *upwind* para minimizar as inconvenientes oscilações espúrias. A implementação do código computacional para obter essa solução numérica e o seu correspondente erro *a posteriori*, é feita em linguagem JAVA na plataforma Eclipse seguindo o paradigma da Programação Orientada a Objetos (POO). A solução numérica da equação elíptica do fluxo subterrâneo e o seu estimador de erro com características de recuperação do gradiente, o estimador ZZ, também são implementados no código JAVA. Assim, a solução da equação do transporte é obtida em função da reusabilidade POO prevista na implementação da equação do fluxo. A comparação da solução numérica do modelo ADR 2D com a correspondente solução analítica disponível na literatura, demonstra que o estimador residual apresenta excelentes índices de eficiência. Os resultados numéricos obtidos mostraram que o estimador residual encontra-se limitado inferior e superiormente pelo erro real da solução em malha grosseira. O estimador ZZ mostrou-se inadequado para a análise do erro de aproximação das equações ADR. Os exemplos selecionados para verificação e aplicação do estimador residual abrangem, em diferentes escalas, modelos que descrevem reação de primeira ordem e modelos com fenômenos de sorção e retardamento na migração do contaminante em meio poroso saturado. Em consequência, o estimador residual proposto provou ser computável, eficiente e robusto no sentido de abranger uma grande variedade das aplicações dos fenômenos de transporte de contaminantes em meio poroso saturado e regime de pequena advecção.

Palavras Chave: Águas Subterrâneas, Estimador Residual, Equação Parabólica, Transporte Advectivo, Meio Poroso, Código JAVA, Método dos Elementos Finitos, Indicador Temporal.

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia Hidráulica e Saneamento

O resumo aqui apresentado é de responsabilidade exclusiva de seu autor, sendo uma cópia fiel do resumo contido no documento final defendido e aprovado em sua instituição de origem.