

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação
Departamento de Engenharia de Sistemas

Área de concentração: Automação

**Dispersão de poluentes num sistema ar-água:
modelagem, aproximação e aplicações**

Geraldo Lúcio Diniz

Orientador: Dr. Jurandir Fernando Ribeiro Fernandes

Co-orientador: Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer

Este exemplar corresponde à redação final da Tese de Doutorado, devidamente corrigida, defendida e aprovada pela comissão julgadora, em 30/05/2003.

Comissão Julgadora:

1. Dra. Cláudia Maria Jacobi
2. Dra. Tânia Maria Vilela Salgado Lacaz
3. Dr. Christiano Lyra Filho
4. Dr. Raul Vinhas Ribeiro
5. Dr. Sílvio D'Alencastro Pregnotatto

Campinas, São Paulo

Maio - 2003

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

D615d Diniz, Geraldo Lúcio
 Dispersão de poluentes num sistema ar-água:
 modelagem, aproximação e aplicações / Geraldo Lúcio
 Diniz. --Campinas, SP: [s.n.], 2003.

 Orientadores: Jurandir Fernando Ribeiro Fernandes e
 João Frederico da Costa Azevedo Meyer.

 Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de
 Computação.

 1. Métodos dos elementos finitos. 2. Modelos
 matemáticos. 3. Poluentes. 4. Difusão. I. Fernandes,
 Jurandir Fernando Ribeiro. II. Meyer, João Frederico da
 Costa Azevedo. III. Universidade Estadual de Campinas.
 Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação. IV.
 Título.

Resumo e Abstract

Resumo

Neste estudo, é descrito um problema de dispersão de poluentes numa região de pantanal. É apresentado um modelo matemático descritivo do problema, assim como as justificativas e usos prévios, em função dos fenômenos físicos considerados. É verificada a existência de solução no sentido fraco e, a seguir, são propostos métodos numéricos para aproximação, cujos resultados são apresentados através de gráficos, de forma a serem, visualmente, mais compreensíveis. Finalmente, são feitos alguns comentários sobre as possibilidades de aplicação do modelo e, portanto, do código numérico para o estudo de atividades agroindustriais em tais regiões.

Abstract

In this study, a problem of environmental pollution is described for impacting products in flooded areas, a mathematical model is presented and justified for their previous uses in function of the physical phenomena that have been considered. The existence of a solution is verified in the weak sense. Numerical means are proposed for defining approximations of which results are shown by graphs. Finally, some remarks are made about the possibilities of application of this model and consequently the numerical codes for studies and levels of activity in these kinds of areas.

Aos meus pais:
Waldemar e Genina

*“... A alma é divina e a obra é imperfeita.
Este padrão assinala ao vento e aos céus
Que, da obra ousada, é minha a parte feita: ... ”*

Fernando Pessoa

*trecho do poema “Padrão” de seu livro **Mensagem**.*

Agradecimentos

Em primeiro lugar, minha eterna gratidão aos professores Drs. Jurandir e João Frederico (Joni), pela orientação e sugestões, sem as quais a conclusão do presente trabalho teria sido mais árdua e penosa.

Aos demais membros da Banca Examinadora, professores Dras. Claudia e Tânia, Drs. Christiano, Raul e Sílvio, pela valiosa contribuição para o aprimoramento do trabalho aqui apresentado.

Ao grupo de Biomatemática do IMEEC, pelas sugestões e críticas apresentadas ao longo dos seminários, que contribuíram para o aperfeiçoamento deste trabalho.

Agradeço aos colegas do Departamento de Matemática/ICET, pelos encargos didáticos assumidos que, desta forma, possibilitou-me desenvolver esta pesquisa. Assim como à Diretoria do Instituto de Ciências Exatas e da Terra, à Coordenação de Ensino de Pós-graduação da Pró-reitoria de Pós-graduação, que viabilizaram o meu afastamento para esta capacitação e à CAPES, que financiou o trabalho através do programa PICDTA.

Aos colegas do Laboratório de Otimização do DENSIS/FEEC, minha gratidão pelo companheirismo, favorecendo um local de trabalho agradável e produtivo.

À Soraia, agradeço com carinho, pelo incentivo e apoio nos momentos cruciais.

Finalmente, agradeço aos meus filhos: Cristiano, Luna, Ana Luiza e Sara, pela paciência e compreensão nos momentos difíceis e de ausência para desenvolver o presente trabalho.

Campinas, SP.

Geraldo Lúcio Diniz

Maio, 2003.

Sumário

Resumo e Abstract	iii
Agradecimentos	vi
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	x
Introdução	1
1 O problema e suas modelagens	3
1 Introdução	3
2 Caracterizando a poluição	4
2.1 Poluição aérea	8
2.2 Poluição aquática	11
2.3 Caracterização dos pesticidas	13
3 Descrição da área de estudo	14
3.1 Breve histórico	15
3.2 Características geográficas da área	16
3.3 Características ecológicas	17
3.4 Características climáticas	20
3.5 Uso e ocupação da área	20
4 Modelos matemáticos	20
4.1 No meio aéreo	21
4.2 Inclusão do Meio Aquático	24
2 Análise e discretização das equações no meio aéreo	29
1 Introdução	29

2	Formulação variacional	31
3	Existência e unicidade de solução	33
4	Discretização do problema	39
3	Análise e discretização das equações incluindo o meio aquático	43
1	Existência e unicidade incluindo o meio aquático	43
2	Formulação variacional incluindo o meio aquático	45
3	Discretização incluindo o meio aquático	48
4	Estudo de estabilidade	52
4	Resultados, análise e discussão	55
1	Introdução	55
2	Simulação de cenários	55
2.1	Dispersão de agrotóxicos em <i>Esteros del Ibera</i>	56
2.2	Simulação de cenários no caso da dispersão só no meio aéreo	58
2.3	Simulação de cenários no caso da dispersão nos meios aéreo e aquático	61
3	Análise dos resultados	66
4	Conclusões	67
	Considerações finais	69
	Bibliografia	71
A	Conceitos e definições	77
1	Conceitos variacionais	77
1.1	Distribuições	77
1.2	Diferenciabilidade de funções Lipschitz contínuas	79
1.3	Convergência fraca de medida e solução fraca	80
2	Conceitos Ambientais	81
B	Códigos fontes	85
1	Códigos para o MATLAB®	85
1.1	Para a dispersão no meio aéreo	85
1.2	Para a dispersão incluindo o meio aquático	93
2	Códigos para o MATHEMATICA®	108

Lista de Figuras

1.1	Processo de transporte e transformação do poluente	8
1.2	Foto de satélite mostrando a região de <i>Iberá</i>	16
1.3	Vista aérea de uma parte de <i>Esteros del Iberá</i> , onde se vêem os canais de captação de água dos esteros para os arrozais correntinos	19
1.4	Escolha do domínio para estudo	21
1.5	Descrição do domínio Ω de estudo	23
1.6	Incluindo o meio aquático no domínio de estudo	25
3.1	Ilustração da função base $\varphi_i(x, y)$	52
4.1	Mapa de ventos nas regiões Tropical e Sul	57
4.2	Simulação do cenário 1 - vento fraco e difusão moderada	59
4.3	Simulação do cenário 2 - vento moderado e difusão moderada	60
4.4	Simulação do cenário 3 - vento forte e difusão alta	62
4.5	Simulação do cenário 4 - vento fraco e difusão moderada	63
4.6	Simulação do cenário 5 - vento moderado e difusão moderada	64
4.7	Simulação do cenário 6 - vento forte e difusão alta	65
B.1	Ilustração dos triângulos de referência	108

Lista de Tabelas

1.1	Gases que compõem a Baixa Troposfera	9
1.2	Principais poluentes atmosféricos e suas fontes majoritárias	10
4.1	Principais pesticidas usados no plantio do arroz na região de Iberá	58
4.2	Parâmetros utilizados na simulação do cenário 1	59
4.3	Parâmetros utilizados na simulação do cenário 2	60
4.4	Parâmetros utilizados na simulação do cenário 3	61
4.5	Parâmetros utilizados na simulação do cenário 4	62
4.6	Parâmetros utilizados na simulação do cenário 5	64
4.7	Parâmetros utilizados na simulação do cenário 6	65

Introdução

O estudo da dispersão de poluentes, através da modelagem matemática, tem se mostrado bastante eficiente para o estudo de perturbações globais ou mesmo de ecossistemas em particular. Neste sentido, é que se propõe o presente estudo do problema da dispersão de poluentes em regiões de áreas alagáveis, onde o processo de dispersão ocorre em meios distintos como o ar e a água.

O rápido desenvolvimento industrial, ocorrido na segunda metade do último século, levou ao agravamento dos problemas ambientais, dificultando os esforços de preservação dos sistemas ecológicos. A poluição local, causada pelos emissores industriais em muitas cidades ou regiões, tem superado o valor máximo permitido para uma boa qualidade de vida (Marchuk, 1986). Em alguns casos, é muito pior: têm sido ultrapassados (e muito!) os limites mínimos.

Nas três últimas décadas, a emissão de poluentes industriais no meio ambiente levou a distúrbios do equilíbrio de vários ecossistemas, como a erosão e a contaminação de extensas áreas por metais ferrosos e não-ferrosos, além de outros metais (Univ. Mata Atlântica, 2002; Gore, 1993; Neto e Bertoni, 1990; Marchuk, 1986).

Isto reforçou a necessidade urgente de estudos e monitoramento de cenários ambientais, abrindo um promissor campo de trabalho para pesquisadores das mais variadas áreas. Como as questões ambientais estão fortemente interrelacionadas, elas não devem ser tratadas de modo isolado para a busca de soluções viáveis.

Desta forma, a proteção ambiental vem, cada vez mais, ganhando um papel relevante no cenário mundial, principalmente nesta última década, tendo como marcos a realização da Conferência Mundial ocorrida no Rio de Janeiro em 1992 (a chamada Rio-92) e mais recentemente com o chamado Protocolo de Quioto.

Se, por um lado, tais estudos ganharam maior destaque nos órgãos governamentais somente nesta última década, por outro, no meio científico isso já vinha ocorrendo desde a década de 70, como por exemplo, a realização em 1970 do *International Environmental Protection Symposium*, ocorrido na antiga Tchecoslováquia com ampla participação de pesquisadores (Marchuk, 1986).

Desde essa época, até o início do século atual, uma plêiade de encontros de todos os níveis continuaram ocorrendo, abrindo um importante espaço para discussão e análise de situações-problema em praticamente todas as regiões do planeta. Bem como para o estudo de cenários possíveis (variando entre prováveis e possíveis de evitar).

Estes últimos, permitiram a realização de análises de planos para a adoção de políticas ou estratégias de preservação de comunidades sustentáveis e, em algumas ocasiões, tornando possível adiar e até evitar situações críticas.

É no quadro do estabelecimento de cenários possíveis, em função de políticas adotadas por autoridades regionais no continente sulamericano que se localiza o presente estudo. Será apresentado no primeiro capítulo um problema real e suas modelagens matemáticas, passando de um estudo restrito ao meio aéreo a um sistema ar-água.

Em seguida, serão feitas a formulação variacional, a demonstração de existência e unicidade das respectivas soluções “fracas” e as discretizações (espacial e temporal) do modelo para os poluentes com dispersão só no meio aéreo (segundo capítulo) e para aqueles cuja dispersão acontece nos dois meios – aéreo e aquático – (terceiro capítulo).

Um estudo de caso, para aplicação do modelo, é desenvolvido no quarto capítulo, com apresentação dos resultados obtidos, através de gráficos para melhor visualização.

Por fim, são feitas as considerações finais no último capítulo.

Capítulo 1

O problema e suas modelagens

Neste capítulo será feita a caracterização de um problema de poluição do meio aquático e aéreo, obtida da literatura atual. Segue-se uma descrição sucinta dos pesticidas presentes neste tipo de situação. Em seguida, é feita a descrição da área de estudo e, por fim, são apresentados modelos matemáticos que descrevem o problema a ser estudado, nas suas formulações clássicas, cujas análises e discretizações serão tratadas nos capítulos seguintes.

1 Introdução

Em muitas situações, tem acontecido a coexistência de regiões de exploração agro-industrial próximas a áreas de proteção e/ou preservação ambiental. No caso da ocorrência de impacto nestas regiões, fruto das atividades naquelas, barreiras isoladoras podem ser estabelecidas em terra, de discutível eficiência. No caso de meios aquáticos e aéreos, as barreiras se tornam muito mais difíceis, se não impossíveis.

Assim, poluentes transportados advectivamente¹ viajam, até planetariamente, invadindo outras regiões que deviam ou necessitam ser protegidas das atividades antrópicas. É o caso, por exemplo, da deriva de agroquímicos em lagoas próximas às regiões de plantio, ou das cinzas provenientes de queimadas, afetando lagoas e baías como ocorre na parte norte do Pantanal Mato-grossense. Neste caso, inclui-se também a pulverização por avião de produtos

¹O termo advecção é usado para designar o fenômeno de transporte no meio, tais como ventos ou correntes que transportam um produto no ar ou na água, enquanto o termo convectivo é usado para os casos em que o transporte está associado ao fenômeno em estudo como, por exemplo, as correntes geradas por variação de temperatura.

agro-químicos em áreas de plantio, vizinhas a áreas alagáveis.

Neste estudo, é considerada a pulverização por avião de áreas de plantio de arroz vizinhas à região de *Esteros del Iberá*, que será melhor descrita na seção 3, adiante. Esta área está situada na província de Corrientes, Argentina (fig. 1.2), a oeste das grandes plantações de trigo e soja do Rio Grande do Sul. Ele faz parte do Projeto INCO-ERB IC18-CT98-0262/Unicamp, denominado “Manejo de Recursos Naturais em Regiões de Pantanal no Mercosul”.

Um estudo integrado do impacto sobre regiões a serem preservadas, próximas a atividades agro-industriais, irá exigir uma modelagem integrada do problema, englobando tanto o meio aéreo quanto o aquático. É o que se está propondo através dos modelos matemáticos apresentados na seção 4, deste capítulo.

Estes modelos destinam-se ao estudo avaliativo, para as possibilidades do desenvolvimento de estratégias de coexistência dessas atividades agro-industriais, em situação compatível com as necessidades de preservação ambiental.

2 Caracterizando a poluição

Na realidade, nosso planeta está repleto de substâncias tóxicas. Muitas delas ocorrem de maneira natural, completamente independentes de qualquer atividade antropogênica. Por exemplo, o vapor de um vulcão em atividade pode conter uma quantidade suficientemente grande de enxofre que não permita o crescimento de plantas nas suas proximidades. Os rios que fluem através das florestas podem tornar-se desoxigenados devido às substâncias orgânicas naturais neles depositadas, as quais, ao se decompor, resultem em contaminações semelhantes àsquelas causadas pelos esgotos domésticos. O mercúrio, que existe naturalmente nos oceanos, pode vir a se concentrar nos peixes em níveis que chegariam a alarmar as autoridades de saúde pública (Mellanby, 1982).

No entanto, quando se fala de poluição, geralmente, a referência é quanto à presença de substâncias tóxicas introduzidas pelo homem no meio ambiente. Isto não quer dizer que apenas a poluição causada pelo homem seja nociva, embora muitos de seus atos tenham, freqüentemente, conseqüências mais dramáticas do que os efeitos dos envenenamentos de

origem natural.

Os modernos métodos químicos são sensíveis a ponto de detectar vestígios de venenos perigosos em qualquer lugar. Nosso próprio corpo, mesmo em perfeito estado de saúde, contém apreciáveis quantidades de substâncias consideradas venenosas, presentes naturalmente, como arsênico, mercúrio e outros metais pesados (Mellanby, 1982).

Além disso, é possível absorver quantidades mensuráveis de venenos elaborados pelo homem, como o DDT e produtos químicos industriais como os policloro-bifenis², sem que isto ocorra em níveis que sejam, em geral, considerados como prejudiciais à saúde (Mellanby, 1982).

Neste sentido, pode-se dizer que nossos corpos são “poluídos”, ao menos pelas substâncias químicas produzidas pelo homem. Entretanto, alguns preferem considerar tais vestígios como contaminação, a menos que estejam produzindo um efeito característico, o que pode ser difícil de se estabelecer, uma vez que a diferença entre poluição nociva e contaminação não é muito clara (Mellanby, 1982). De fato, alguns autores preferem evitar esta distinção, enquanto outros já preferem diferenciar as duas coisas, como Alloway e Ayres (1997), por exemplo, que usam o termo “contaminação” quando a substância está presente no meio ambiente sem causar um dano óbvio, enquanto “poluição” é reservada para os casos onde os efeitos danosos são aparentes. No entanto, com a melhoria dos métodos de análise e diagnóstico, o problema com esta distinção é que, a princípio, o que parecia ser uma contaminação, na realidade trata-se de poluição (Alloway e Ayres, 1997).

Os poluentes persistentes, freqüentemente chamados hoje em dia de “não-biodegradáveis”, mais pela precisão do termo do que por sua elegância, colocam-se como um problema completamente diferente. Quando diluídos a um grau inofensivo, eles podem permanecer no nosso meio ambiente, porém com a possibilidade de serem concentrados, possivelmente por organismos vivos. Além disto, alguns produtos químicos mais persistentes permanecem inalterados indefinidamente, ou têm mudanças extremamente lentas.

Por essas razões, é válido o temor de que substâncias químicas produzidas pelo homem venham causar poluição global permanente. Embora para alguns isto poderia ser

²Os policloro-bifenis, ou bifenis policlorados, mais conhecidos pela sigla PCB, são largamente utilizados na indústria eletroquímica e na fabricação de matérias plásticas.

considerado como um exagero, no entanto, pesquisas recentes³ têm demonstrado o nível preocupante a que se chegou.

Em relatório recente (C.D.C.Environ.Health, 2001), o CDC (Centro de Controle e Prevenção de Doenças dos Estados Unidos) divulgou um relatório sobre a exposição humana aos produtos químicos ambientais, alertando para a gravidade da situação atual.

Um estudo recente da Academia Nacional de Ciências dos Estados Unidos (National Res.Council/USA, 2000), indica que em cada quatro problemas que afetam o desenvolvimento e comportamento das crianças hoje, um pode estar relacionado a fatores genéticos e ambientais, dentre os quais inclui-se a exposição a compostos neurotóxicos como o chumbo e os pesticidas com organofosfatos.

Resumidamente, os riscos conhecidos à saúde de alguns dos produtos tóxicos, conforme apresentado no citado relatório (C.D.C.Environ.Health, 2001), podem ser descritos da seguinte forma:

- Chumbo: é encontrado em tintas, tubulações antigas, na eletrônica, cerâmica esmaltada e solos contaminados. É uma toxina que afeta a reprodução e o desenvolvimento, reduzindo a fertilidade e provocando o aborto.
- Mercúrio: na forma inorgânica é utilizado em equipamentos elétricos e alguns fungicidas. A incineração de lixo hospitalar, baterias, lâmpadas fluorescentes dentre outros produtos, libera mercúrio. O metil-mercúrio é a forma mais perigosa, pois é absorvido pelo corpo e penetra facilmente no cérebro e na placenta. A maior parte dos casos da exposição ao metil-mercúrio advém da ingestão de peixes, tais como o atum, espada, tubarão e lúcio que, por se encontrarem no topo da cadeia alimentícia, têm um risco de contaminação maior devido ao processo de bioacumulação. Assim como o chumbo, o mercúrio é uma toxina que afeta a reprodução e o sistema nervoso.
- Pesticidas com Organofosfatos: compõem cerca de metade de todos os inseticidas utilizados. São pulverizados em lavouras como milho, algodão, frutas, verduras e legumes, sendo também utilizados em produtos domésticos de controle de pragas e aspersores de

³vide Rebouças, 1997b

jardins⁴. São derivados do ácido fosfórico e foram desenvolvidos como agentes neurais durante a II Guerra Mundial.

- Ftalatos: são aditivos aos plásticos, especialmente PVC, que lhes conferem uma variedade de características que vão desde a flexibilidade até a retardação de chamas. Por não estarem ligados ao plástico, os ftalatos podem vazar para o meio ambiente⁵. Em animais silvestres e de laboratório, foram relacionados a efeitos na saúde reprodutiva, inclusive redução da fertilidade, aborto, defeitos congênitos, contagem anormal de espermatozoides e dano testicular, como também câncer de fígado e dos rins.
- Cotinina: fornece uma indicação de exposição à nicotina. Cerca de dois terços da fumaça dos cigarros não é tragada pelos fumantes, mas é liberada no ambiente circunvizinho. Conseqüentemente, os não-fumantes (próximos) inalam os mesmos produtos químicos⁶ contidos nesta fumaça com efeitos semelhantes, que nos fumantes, embora com um grau menor.

Para se ter uma primeira noção do processo de transporte e transformação dos poluentes no meio ambiente, é apresentada a figura 1.1, a seguir. Este processo está relacionado com:

- propriedades físico-químicas dos poluentes;
- processo de transporte no meio ambiente e
- processo de transformação do poluente.

Em geral, o tratamento do problema da poluição tem sido considerado somente de modo isolado em cada um dos compartimentos indicados na figura 1.1, isto é, no ar ou na

⁴A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos cancelou, no verão de 2000, os registros de vários clorpirifós - amplamente utilizados em pulverizações de frutas, verduras e legumes para matar insetos e em produtos para controle de cupins e tratamento de jardins - por provocarem riscos à saúde das crianças (35.000 toneladas são utilizadas anualmente nos Estados Unidos)

⁵Só nos Estados Unidos são produzidos quase 500.000 toneladas, anualmente.

⁶Cerca de 4.000 produtos químicos tóxicos (incluindo benzeno, cianureto, cádmio, chumbo, polônio radioativo, benzo(a)pireno, amônia, monóxido de carbono e nicotina) produtos estes que podem causar câncer, doenças cardíacas e asma, entre outras.

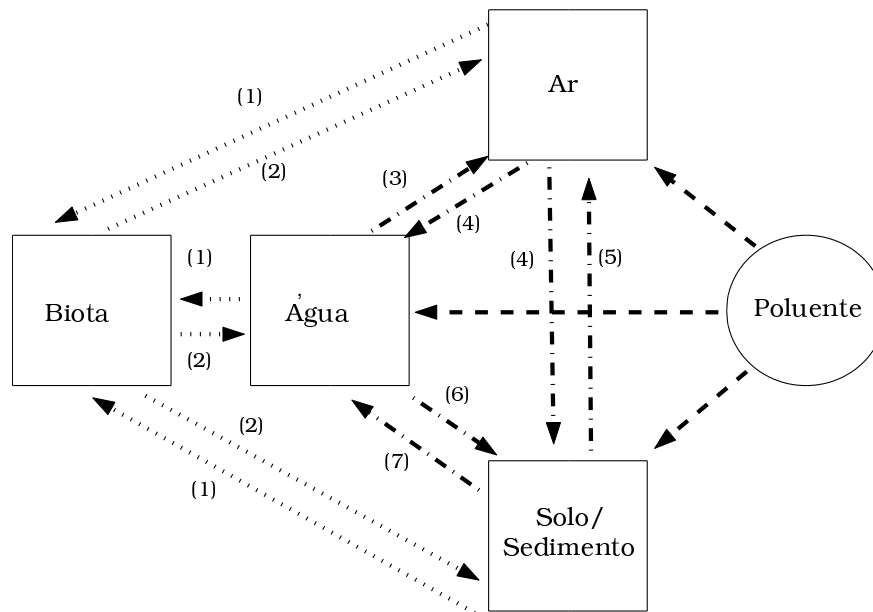


Figura 1.1: Processo de transporte e transformação do poluente
 (1) Bioacumulação; (2) Excreção/Secreção; (3) Evaporação; (4) Precipitação;
 (5) Volatilização; (6) Absorção e (7) Diluição - adaptado de Connel e Miller (1984)

água ou na biota ou nos solos/sedimentos, sendo que a ênfase depende da área de interesse do pesquisador que está realizando tal modelagem ou estudo.

Neste sentido, o presente trabalho procura levar em consideração, senão de forma completa, pelo menos boa parte dos processos indicados pelo diagrama da figura 1.1.

2.1 Poluição aérea

Para se falar sobre a poluição do ar faz-se necessário, antes de mais nada, definir o que se entende por atmosfera limpa, pelo menos na faixa em que se concentra a maioria dos seres vivos, ou seja, a atmosfera próxima ao solo (baixa troposfera – abaixo de 8.000m de altitude). Segundo Seinfeld (1986), seria considerada como atmosfera limpa aquela que apresentasse os gases com as características especificadas pela tabela 1.1.

Além desses gases a atmosfera limpa contém, também, o chamado “Aerossol Atmosférico”, formado pela matéria particulada – partículas sólidas ou líquidas, com diferentes

Tabela 1.1: Gases que compõem a Baixa Troposfera

Tabela adaptada de Seinfeld (1986)

Gás	Concentração média (ppm) aproximada	Tempo de residência	Ciclo	Situação
Ar	9.340	...	nenhum	(Acumulados ao longo da história da Terra)
Ne	18	...	"	
Kr	1,1	...	"	
Xe	0,09	...	"	
N ₂	780 840	10 ⁶ anos	(biológico e microbiológico)	?
O ₂	209 460	10 anos		?
H ₂ O	variável	10 dias	de chuvas, etc.	(Equilíbrio ou estado quase estacionário)
CH ₄	1,65	7 anos	biogênico	
CO ₂	332	15 anos	antropogênico e biogênico	
CO	0,05–0,2	65 dias	antropogênico e químico	
H ₂	0,58	10 anos	biogênico e químico	
N ₂ O	0,33	10 anos	antropogênico e químico	
SO ₂	10 ⁻⁵ – 10 ⁻⁴	40 dias		

composições químicas, formas e tamanhos – que se mistura aos gases especificados na tabela 1.1. Cabe ressaltar a notável diferença nos tempos de residência⁷ na atmosfera dos gases especificados, situação que retrata a maior ou menor interação entre as espécies e seus respectivos receptores.

A poluição do ar seria, portanto, um fenômeno caracterizado pela presença no ar (em geral no nível próximo ao solo) de substâncias estranhas àquelas especificadas na tabela 1.1, em níveis de concentrações que sejam capazes de produzir efeitos indesejáveis ou perniciosos – mensuráveis – nos seres vivos e/ou nos materiais (Orsini e Andrade, 1997).

Assim, tais substâncias passam a ser chamadas de poluentes, sendo que na realidade, mesmo as substâncias presentes na tabela 1.1, quando em concentrações acima do nível lá indicado, podem ser consideradas poluentes, até mesmo o oxigênio (Orsini e Andrade, 1997). A tabela 1.2 apresenta os principais poluentes com suas respectivas fontes geradoras.

⁷Para a definição precisa ver Apêndice A, seção 2 - eq. A.2.1 (pg. 81).

Tabela 1.2: Principais poluentes atmosféricos e suas fontes majoritárias
Tabela modificada do relatório CETESB (1996), obtida de Orsini e Andrade (1997).

Fontes		Poluentes
Fontes Estacionárias	Combustão	Material particulado, SO_x , monóxido de carbono, hidrocarbonetos, óxidos de nitrogênio e cotinina
	Processos industriais	material particulado, SO_x , HCl, Hidrocarbonetos, mercaptanas, HF, H_2S , NO_x
	Queima de resíduo sólido	material particulado, SO_x , HCl, NO_x
	Outros	hidrocarbonetos, material particulado
Fontes Móveis	Veículos: gasolina, diesel, álcool, aviões, motocicletas, etc.	material particulado, monóxido de carbono, óxidos de enxofre, óxidos de nitrogênio, hidrocarbonetos, aldeídos, ácidos orgânicos
Fontes Naturais		material particulado, SO_x , H_2S , CO, NO_x , HC, DMS ^a , DMDS ^b
		^a DMS significa dimetil sulfeto ^b DMDS significa dimetil di-sulfeto
Reações químicas na atmosfera		poluentes secundários: aldeído, ácidos orgânicos, nitratos orgânicos, aerosol fotoquímico, etc.

De acordo com a tabela 1.2 tem-se uma descrição dos principais poluentes atmosféricos, lembrando que, quando uma atmosfera está poluída, ou seja, a qualidade do ar está comprometida, se diz que ela apresenta um “Problema de Poluição do Ar”, comumente designado pela sigla PPA.

Segundo Orsini e Andrade (1997), todo PPA se desenvolve num sistema de poluição do ar com três componentes principais, a saber: **fonte poluidora**, **atmosfera** e **receptor**.

Orsini e Andrade (1997), consideram a existência de vários tipos de PPA, que podem ser classificados sob diferentes aspectos. Quanto ao tamanho de sua área de influência eles podem ser: local, municipal, estadual, regional, continental e global, ou conforme suas características ele pode desdobrar-se em: urbano, industrial, rural ou misto. Em todos os casos podem estar atuando fontes poluidoras móveis e fixas ou estacionárias.

Infelizmente as indicações atuais são no sentido de que ainda se terá de conviver por

muitos anos com esse problema da poluição do ar, uma vez que tem havido pouco empenho com o objetivo de harmonizar os conflitos existentes entre o nosso *modus vivendi* e os reais interesses do meio ambiente, particularmente, os da nossa atmosfera (Orsini e Andrade, 1997).

2.2 Poluição aquática

Segundo Rebouças (1997a), a moderna gestão dos recursos hídricos – águas atmosféricas, superficiais e subterrâneas - impõem a prática de determinados princípios, tais como:

- adoção da bacia hidrográfica como unidade físico-territorial de planejamento;
- usos múltiplos integrados da água;
- reconhecimento da água como um bem natural limitado e de valor econômico;
- gestão descentralizada e participativa.

Neste particular, de acordo com Rebouças (1997a), deve-se ressaltar que, no paradigma do desenvolvimento global sustentável, a disponibilidade de água doce é reconhecida, como fator competitivo ambiental e econômico essencial do mercado global.

O critério mundial de classificação das águas da Terra designa como “água doce”, aquela que tem teores sólidos totais dissolvidos (STD) inferiores a 1000 mg/l. “A água, além de elemento essencial à vida, é recurso econômico valioso e exerce papel fundamental no equilíbrio dos ecossistemas” (Rebouças, 1997a).

O Brasil possui um dos maiores potenciais de água doce distribuídos numa das mais extensas e densas redes hidrográficas do mundo, dando-lhe com esse grande potencial, um capital ecológico de inestimável importância e um fator competitivo fundamental para um desenvolvimento sócio-econômico sustentado. No entanto, conforme Rebouças (1997a), a falta de conhecimento desta perspectiva vem colocando o Brasil na vala comum dos países – desenvolvidos e periféricos – que estão, relativamente, ameaçados pela crise da água.

Efetivamente, nosso país apresenta em todo seu território condições bem favoráveis ao desenvolvimento da vida e ao ciclo de renovação dos seus potenciais de água doce. Entretanto, boa parte desta água já perdeu a sua característica de recurso natural renovável, exatamente nos locais onde ela se faz mais necessária, ou seja, nas regiões mais densamente povoadas (Rebouças, 1997a).

As principais causas dessa deterioração se devem aos processos pouco estruturados de urbanização, industrialização e de produção agrícola, que são estimulados, consentidos ou tolerados, sem que se levem em conta “os limites de suporte dos respectivos ecossistemas” e, em especial, seus potenciais de água doce (Rebouças, 1997a).

Essa degradação dos recursos hídricos está associada ao lançamento – deliberado ou tolerado – de mais de 90% dos esgotos domésticos e cerca de 70% dos efluentes industriais não tratados, o que tem gerado uma poluição dos corpos de água doce de superfície a níveis nunca imaginados (Rebouças, 1997a).

Infelizmente, no Brasil, rio ainda é sinônimo de esgoto e convive-se com a maior parte do lixo que se produz, fruto de uma intervenção político-institucional altamente predatória do espaço, atrelada à questão cultural da falta de conhecimento da população em geral, para atitudes cotidianas efetivas no sentido da “consciência ambiental”.

O principal resultado da Conferência das Nações Unidas para o Meio Ambiente e desenvolvimento – Rio/92, foi um documento de 40 capítulos, chamado de Agenda 21. Ela propõe um novo paradigma onde o desenvolvimento econômico deve promover a sustentabilidade ambiental e a melhoria da qualidade de vida da população (Rebouças, 1997a).

O capítulo 18 da Agenda 21 trata especialmente dos recursos de água doce, como componente essencial da hidrosfera da Terra e necessária em todos os aspectos da vida. Nesta abordagem, ressalta-se a necessidade de proteção da qualidade e do abastecimento dos recursos hídricos, por meio da aplicação de critérios integrados no desenvolvimento, manejo e uso dos recursos hídricos. De acordo com Rebouças (1997a), a Agenda 21 propõe as seguintes áreas de programa para o setor de água doce:

- Desenvolvimento e manejo integrado dos recursos hídricos.
- Avaliação dos recursos hídricos.
- Proteção dos recursos hídricos, da qualidade da água e dos ecossistemas aquáticos.

- Abastecimento de água potável e saneamento.
- Água e desenvolvimento urbano sustentável.
- Água para produção sustentável de alimentos e desenvolvimento rural sustentável.
- Impactos da mudança do clima sobre os recursos hídricos.

Desta forma, a avaliação do problema da água de uma dada região não pode restringir-se ao simples balanço entre oferta e demanda. Deve abranger também os inter-relacionamentos entre seus recursos hídricos com as demais peculiaridades geoambientais e sócio-culturais, buscando alcançar e garantir a qualidade de vida da sociedade, a qualidade do desenvolvimento sócio-econômico e a conservação das suas reservas de capital ecológico – água doce e biodiversidade, em particular (Rebouças, 1997a).

2.3 Caracterização dos pesticidas

Dentre os agroquímicos em geral, será dedicada mais atenção aos pesticidas, devido ao seu alto poder tóxico, o que implica num impacto maior na qualidade ambiental, sobretudo para a biota.

O uso de pesticidas na agricultura tem possibilitado ao agricultor a produção de alimentos a um custo menor. Assim como os fertilizantes, têm sua aplicação na produção de grãos e de algodão, sendo também empregados nos campos de cultivo de hortaliças e frutíferas em geral (Loehr, 1984).

Quanto à sua aplicabilidade os pesticidas podem ser agrupados em cinco categorias distintas (Loehr, 1984):

- a) Fungicidas;
- b) Herbicidas;
- c) Inseticidas;
- d) Formicidas e
- e) Raticidas.

Os pesticidas utilizados em maior escala, na produção agrícola, são aqueles que se encontram nas três primeiras categorias, sendo que os demais são bem menos utilizados, se comparados àqueles.

A produção e aplicação de pesticidas, em larga escala, começou por volta dos anos 40, aumentando gradativamente até a década de 70, quando o uso de fungicidas e inseticidas diminuiu, devido a restrições ambientais, enquanto o uso dos herbicidas continuou a crescer (Loehr, 1984).

Uma propriedade importante dos poluentes é a *solubilidade*, uma característica intrínseca da substância química que nos indica a facilidade com que ela se mistura ao meio líquido, formando um sistema homogêneo (Thibodeaux, 1979). Tal propriedade é um dos fatores determinantes no transporte de poluentes no ambiente aquático (Haque et al., 1980).

Quanto à solubilidade no ambiente aquático, de uma maneira geral, pode-se classificar os poluentes em dois grupos principais, a saber:

- (i) os não-solúveis e
- (ii) os solúveis.

Esta classificação faz-se necessária para um melhor tratamento do problema, de modo a obter modelos mais adequados à realidade. Estes modelos serão descritos na seção 4, mais adiante.

3 Descrição da área de estudo

Nesta seção será feita a descrição da área de estudo, com um breve relato histórico do “Projeto *Iberá*”, uma apresentação sucinta das características físicas da região e da sua biodiversidade. Esta descrição apoia-se no texto relativo ao Projeto Iberá, elaborado por Canziani *et al.* (1998), bem como em Pregnotatto (2002).

3.1 Breve histórico

Conforme é relatado em Pregnolato (2002), no início do século passado, houve um movimento da sociedade argentina para a inclusão do parque hidrográfico, denominado *Esteros del Iberá*, no circuito econômico e legal daquele país. Em 1905, este movimento culminou com a organização e realização de uma expedição de reconhecimento, denominada “Expedição Iberá”, proposta pela Sociedade Científica Argentina. À Sociedade, coube a elaboração dos objetivos da expedição e a indicação dos responsáveis científicos pelas diferentes áreas temáticas a serem abordadas, cabendo ao governo central o financiamento da expedição.

As questões abordadas nesta expedição se tornaram muito atuais em função de um comentado projeto de hidrovía sulamericana, que possivelmente seria financiado pelo Banco Mundial, com o objetivo de retificar a calha do Rio Paraná, na região de Iberá. Com este projeto, buscava-se aumentar a eficiência do transporte fluvial dos grãos produzidos na Macro-bacia do Prata (Pregnolato, 2002).

Em 1998, durante a realização de um dos Workshops de Ecologia Matemática, realizado no ICTP (Trieste – Itália), discutiu-se a formulação de um projeto no qual se estudassem diversos aspectos e estratégias que contribuíssem para um manejo sustentável na região de pantanal, da Província de Corrientes, no referido *Esteros del Iberá*.

De acordo com Pregnolato (2002), este projeto recebeu alguns apoios imediatos, tais como: os de pesquisadores em Ecologia Matemática das Universidades de Tandil e Lujan (Argentina), UFRGS (Porto Alegre), UFMG (Belo Horizonte) e de pesquisadores do grupo de Biomatemática da Unicamp. Além destes, também teve o apoio de pesquisadores do Depto. de Ecologia Química da Universidade de Siena e do Instituto Oceanográfico ligado à Universidade de Roma, os quais assumiram a coordenação do projeto.

Outros pesquisadores se agregaram a esta equipe inicial, como os da Universidade de Cádiz (Espanha), de Aveiro (Portugal), de York (Inglaterra) e da Universidad del Salvador (Buenos Aires). O projeto foi constituído e avaliado de modo relativamente rápido e recebeu o apoio financeiro da Comunidade Européia (Pregnolato, 2002).

No projeto final, coube ao grupo da Unicamp a modelagem e análise numérica de dois aspectos básicos. Primeiro, o da presença e influência de produtos impactantes nos meios aquáticos, sobre a biota local, devido as atividades antrópicas, particularmente o cultivo

de arroz na região circunvizinha. Segundo, o da modelagem e simulação numérica de uma endemia que atinge ciclicamente a população de uma das espécies “carismáticas” da região, a das capivaras (*Hydrochoerus hydrochoeris*).

3.2 Características geográficas da área

A figura 1.2 mostra uma foto de satélite (GOES-12) com a composição das imagens visível e infravermelho, onde está indicada a localização da região de *Iberá*.

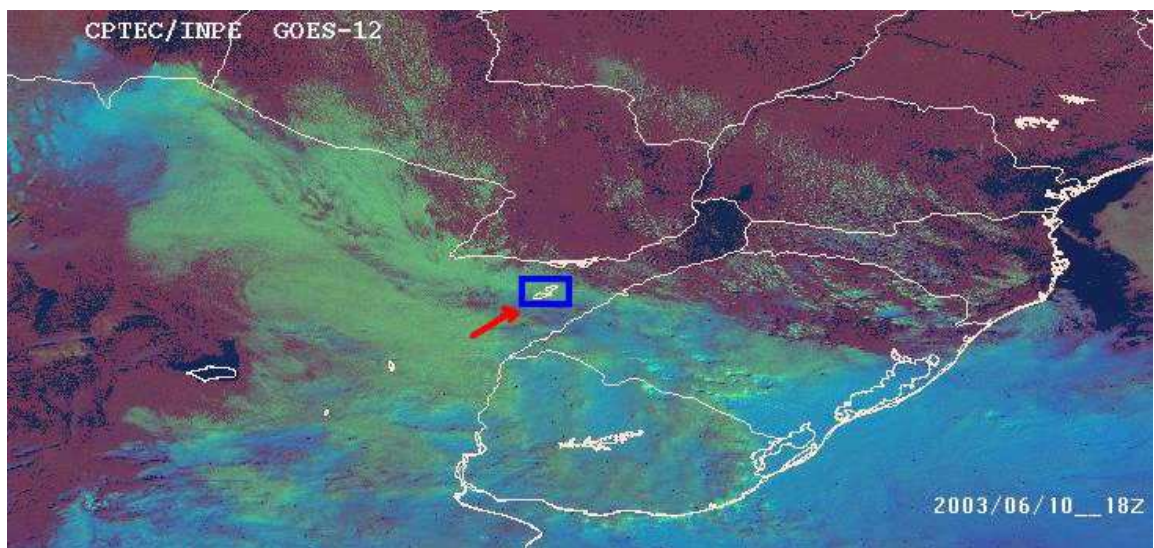


Figura 1.2: Foto de satélite mostrando a região de *Iberá*.

Os *Esteros del Iberá* se localizam na região nordeste da Argentina (fig. 1.2) entre os paralelos 27° 35' e 28° 41' sul e os meridianos 58° 58' e 60° a oeste de Paris (Pregnotatto, 2002). Esta região ocupa boa parte da província de Corrientes, sendo parte integrante da Bacia do Prata. A dinâmica trófica e hídrica de Iberá não habilita a região a ser classificada como um sistema pantanoso tropical, mas como eutrófico⁸ temporário ou semipermanente, semelhante aos sistemas que ocorrem na bacia do Prata (Canziani *et al.*, 1998).

Iberá é abastecido, em boa parte, por aportes pluviométricos diretamente ou através do escoamento superficial ou subsuperficial (*run off*), ao longo de uma bacia de captação que supera os 13.000 km². Apresenta um regime de flutuação hidrométrica gradual e estacionária,

⁸Ambientes produtivos, com abundância de nutrientes cf. Odum (1988), pg. 91.

com baixa circulação de água em razão do relevo quase plano e do abundante tamponamento por macrófitas (Canziani *et al.*, 1998).

A profundidade média das lagoas, canais e esteros oscila entre 2 e 3 metros, com uma variação anual em seu nível de aproximadamente 1 metro. Os registros mais profundos são de até 4 metros, que correspondem às partes mais profundas de alguns canais ou lagunas. O lago de Iberá apresenta uma profundidade média de cerca de 3 metros, com um leito completamente plano de pouquíssimos micro-relevos.

3.3 Características ecológicas

Este sistema sustenta algumas espécies de fauna vulnerável e ameaçada, sendo considerado um ecossistema extremamente frágil e sensível a perturbações de acordo com o tratado de Ramsar⁹. É um sítio com alta diversidade biológica, contendo um número apreciável de espécies endêmicas, possui uma porção representativa dos habitats da região e abriga elementos característicos da região biogeográfica.

Registram-se cerca de 81 espécies de peixes para o macrosistema geral, com uma importante avifauna em torno de 200 espécies, características dos alagados. Se destacam pelo menos 3 famílias de anfíbios (Hilidae, Leptodactylidae e Pseudidae). Entre os mamíferos destacam-se o cervo pantaneiro (*Blastoceros dichotomus*), a lontra (*Lontra longicaudis*) e a capivara (*Hydrochaeris hydrochaeris*). A fauna de répteis é caracterizada por grande abundância de jacarés (*Caiman yacare* e, em menor grau, *Caiman latirostris*, Canziani *et al.* (1998)).

Dentre as espécies ameaçadas ou protegidas por tratados internacionais tal como o CITES¹⁰, os Esteros abrigam populações importantes dentre as quais, na nomenclatura local: jacaré “overo” (*Caiman latirostris*), jacaré “negro” (*C. Yareare*), sucuri amarela (*Eunectes*

⁹O tratado de terras inundadas, assinado em Ramsar, Irã, em 1971, é um tratado intergovernamental que fornece a estrutura de ação nacional e cooperação internacional para a conservação e uso racional de áreas alagáveis e seus recursos. Há, atualmente, 136 partidários que assinaram à convenção, com 1288 locais catalogados, totalizando 108,9 milhões de hectares, designados para a inclusão na lista Ramsar de áreas alagáveis de importância internacional. Para mais informações ver: <http://www.ramsar.org/>.

¹⁰Sigla em inglês do tratado internacional para espécies ameaçadas da flora e fauna selvagens. Seu texto final foi firmado por representantes de 80 países, em Washington – DC/USA, no dia 3 de março de 1973 – cf. <http://www.cites.org/>.

notaeus), pato “crestudo” (*Sarkidiornis melanotos*), lontra (*Lontra longicaudis*) e o cervo pantaneiro (*Blastoceros dichotomus*), entre outras.

Os Esteros sustentam uma proporção significativa de subespécies, espécies ou famílias de peixes autóctonos e etapas de seus ciclos biológicos, bem como as interações interespecíficas ou interpopulacionais, contribuindo de modo significativo para a diversidade biológica. Dentre as espécies mais significativas, pode-se destacar a presença do dourado (*Salminus maxillosus*) – cf. Canziani *et al.* (1998).

Floristicamente, nas terras inundadas se destacam as comunidades de “estero”, de “embalsado” e de corpos aquáticos abertos como lagoas e riachos. O estero, fisionalmente é um pirizal (*Cyperus giganteus*), geralmente associado com diversos *Scirpus* ou *Schoenoplectus*. Na parte mais elevada, menos sujeita a inundações, nas áreas úmidas desenvolvem-se agrupamentos de *Zizaniopsis bonariensis*, acompanhados por *Panicum grumosum*, enquanto nas pequenas depressões encontramos colônias de *Thalis spp.* O fundo das depressões com pirizal é rico em sedimentos orgânicos parcialmente decompostos, de onde emerge o terreno, caracterizando o solo aí encontrado.

Os embalsados ocupam uma superfície importante dos 46 km de perímetro (aproximadamente) do lago de Iberá e das nascentes do rio Miriñay. Fisionalmente, trata-se de um pirizal flutuante, basicamente constituído por *Cyperus giganteus* e/ou *Fuirena robusta*, sendo que também são encontrados os gêneros *Talia*, *Panicum* e *Zizaniopsis*, formando distintas comunidades de embalsados (Canziani *et al.*, 1998).

Nas etapas iniciais de formação do embalsado, predominam *Scirpus cubensis*, depois de consolidados são mais ricos em espécies que os esterios, incluindo Pteridófitas e até vários elementos arbóreos dos gêneros *Sapium*, *Ocotea* ou *Croton*. Seu solo é caracterizado por seu baixo peso específico e agregado de materiais orgânicos pouco decompostos. Estes embalsados são refúgio e habitat para muitos vertebrados característicos de Iberá (Canziani *et al.*, 1998).

O lago de Iberá e os riachos que dela partem constituem outra importante unidade de paisagem que cobrem cerca de 5.500 hectares. Nele, são encontradas comunidades de plantas submersas instaladas nas águas profundas e claras, nas áreas protegidas de vento das lagoas e dos leitos dos riachos. Chegam a formar pradarias submersas ocupando uma área de até 50% de seu leito, onde ocorrem os gêneros *Egeria*, *Cabomba* e *Ultricularia*. Sobre

estas pradarias estruturam-se comunidades bióticas complexas, que sustentam grande parte das redes tróficas do sistema (Canziani *et al.*, 1998).

Também são encontradas comunidades de plantas flutuantes e emergentes dos gêneros *Eichornia*, *Nymphoides* e *Nymphaea*, em certos lugares das lagoas e recantos dos riachos, onde a correnteza é menos ativa. As associações de *Lemma*, *Salvinia*, *Azolla* ou *Ricciocarpus*, estendem-se pelas depressões e setores de baixa profundidade. Entretanto, estas associações periféricas ocupam uma área reduzida deste sistema, uma vez que 90% da lagoa se encontra submetida aos efeitos do vento e das ondas provocadas por ele (Canziani *et al.*, 1998).

A seguir (fig.1.3), uma vista aérea de parte da região de Iberá, onde pode ser observado ao fundo os campos de cultivo de arroz, próximo à área de preservação.



Foto: J.F.C.A. Meyer

Figura 1.3: Vista aérea de uma parte de *Esteros del Iberá*, onde se vêem os canais de captação de água dos esteros para os arrozais correntinos

3.4 Características climáticas

A temperatura média anual na região é de 21⁰C, com médias mensais indo dos 16⁰C em junho/julho aos 27⁰C em janeiro/fevereiro. As máximas absolutas chegam aos 44⁰C, com mínimas de -2⁰C. A umidade relativa é elevada, com mínimas de 60%, no período de seca, e máximas no período das chuvas que superam os 75%.

As chuvas oscilam entre 1.200 e 1.500 mm anuais, mas estes valores podem variar periodicamente, cuja evapo-transpiração é de 1.040 mm (média anual). Não existe uma estabilidade hídrica nítida, não obstante registram-se chuvas pronunciadas, principalmente na primavera e outono.

3.5 Uso e ocupação da área

Em relação ao manejo, observa-se a extração de água para irrigar os arrozais da região circunvizinha, mas que tem diminuído em razão da situação econômica por que passa a Argentina. Das atividades agrícolas, as mais desenvolvidas são o cultivo de arroz e as atividades silvícolas.

Especificamente, não vêm sendo aplicadas as Diretrizes do Uso Racional de Terras Inundadas de Ramsar, nem suas Orientações Adicionais. Entretanto, existe um plano de manejo integrado do macrosistema, elaborado na província, ainda que não tenha sua aplicação plena.

Segundo denunciou a Fundação Mundial para a Vida Silvestre (WWF), a região estaria sofrendo um processo de inundação, por infiltração subterrânea, devido a represa de Jaciretá.

Cabe ressaltar que, apesar disso, este sistema ainda está pouco alterado, mesmo com as atividades humanas nas suas proximidades, daí a importância deste projeto.

4 Modelos matemáticos

Na descrição dos modelos que serão apresentados a seguir, haverá uma distinção entre dois tipos de poluentes, seja devido à densidade ou à solubilidade, a saber: **(i)** aqueles

que não penetram na água e **(ii)** aqueles que penetram na água.

4.1 No meio aéreo

Na primeira parte do trabalho aqui proposto, será modelado o transporte aéreo do poluente e seu depósito na superfície da lagoa ou baía¹¹. A escolha do domínio se deve a uma suposição inicial de simetria por translação, levando, portanto, à escolha de um domínio bidimensional, conforme ilustrado na figura 1.4, a seguir.

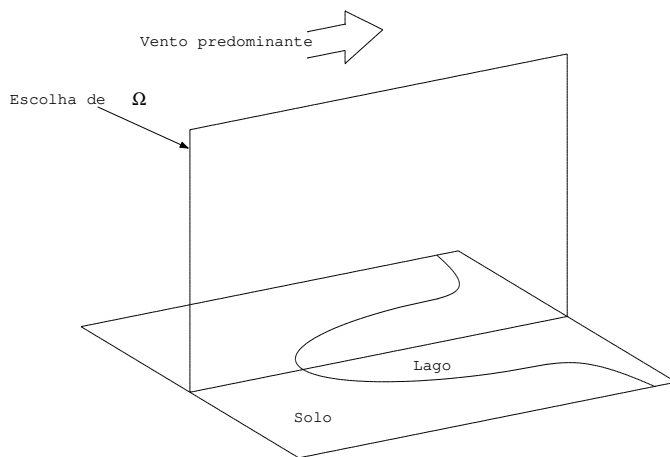


Figura 1.4: Escolha do domínio para estudo

O plano é escolhido na vertical e contendo o vetor que indica magnitude e direção predominantes do vento na região.

No modelo deverão ser considerados os fenômenos de difusão (ou dispersão, conforme Okubo (1980)), o transporte advectivo, os diversos fenômenos de decaimento aproximados em conjunto, as possíveis fontes poluidoras e a penetração no meio aquático, no caso **(ii)**.

Assim, chamando de $u(x, y, t)$ a concentração do poluente, no ponto (x, y) , para o instante t , o modelo é descrito, de forma genérica, por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \{\text{difusão}\} - \{\text{transporte}\} - \{\text{decaimento}\} + \{\text{fonte}\}$$

¹¹ Usa-se, no escopo deste trabalho, a terminologia lagoa ou baía no sentido de indicar corpos aquáticos de baixa circulação, como ocorre em Iberá e no pantanal matogrossense.

Em termos de modelagem clássica destes fenômenos, tem-se:

$$\begin{aligned}\{\text{difusão}\} &= \operatorname{div} [\alpha_u \nabla u] && (\text{cf. Okubo (1980)}); \\ \{\text{transporte}\} &= \operatorname{div} [\vec{W} \cdot u] && (\text{cf. Edelstein-Keshet (1988)}); \\ \{\text{decaimento}\} &= \text{cte.} u = \sigma_u u && (\text{cf. Bassanezi (2002)})\end{aligned}$$

Finalmente, em termos da modelagem da fonte, será considerada ora sua ausência, ora fontes pontuais (o fenômeno de *run off* – como descrito na pg.16 – indica uma fonte pontual na margem do corpo aquático, o ponto (x_L, y_L) na fig.1.6 – pg.25) ou ainda no ingresso de poluentes no domínio considerado, por deriva.

Resulta, portanto, que a equação que modela o processo de dispersão efetiva do poluente no domínio aéreo indicado na figura 1.4 e descrito acima, é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}(\alpha_u \nabla u) - \operatorname{div}(\vec{W} u) - \sigma_u u + f, \quad (1.4.1)$$

$$\text{onde} \left\{ \begin{array}{ll} \alpha_u = \alpha_u(x, y, t), & (\text{aproxima a difusibilidade efetiva no meio aéreo}), \\ \vec{W} = \langle v_1(x, y, t); v_2(x, y, t) \rangle & \text{com} \\ \operatorname{div}(\vec{W}) = 0 & (\text{aproximando um campo “bem comportado” no} \\ & \text{sentido dos fluxos aéreos}), \\ \sigma_u & (\text{aproxima linearmente o decaimento total} \\ & \text{no meio aéreo}) \\ f & (\text{é o termo fonte}). \end{array} \right.$$

Desta forma, o domínio¹² Ω (descrito pela figura 1.5) a ser considerado neste problema de valor de contorno (Boyce e Diprima, 1979), terá as condições de contorno genericamente indicadas por:

Ingresso de poluente no domínio: por parte ou partes do contorno, pode haver o ingresso de poluente, numa quantidade que depende de situações externas. Este ingresso pode dar-se num só ponto (como, por exemplo, um vazamento num duto) ou ao longo de toda uma parte do bordo (que é o que ocorre no fenômeno da deriva).

¹² $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ sendo que $\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ e Γ_4 são disjuntos

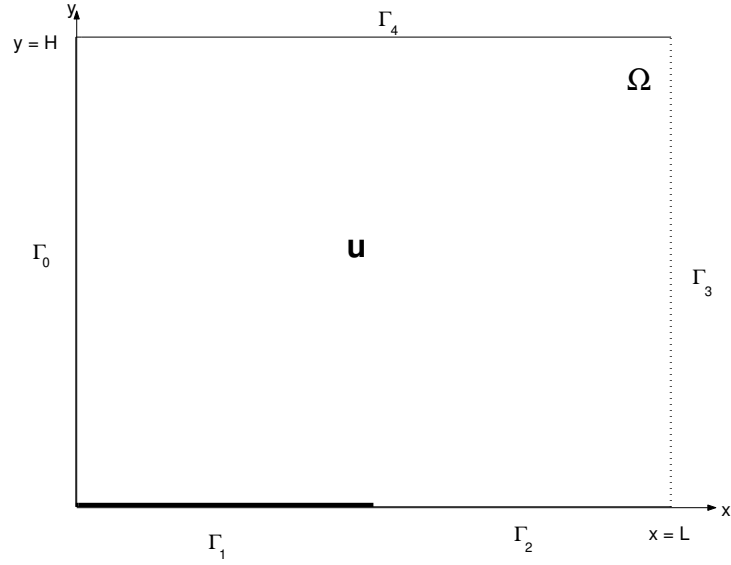


Figura 1.5: Descrição do domínio Ω de estudo
 $\Omega = (0, L) \times (0, H) \subset \mathbb{R}^2$

Neste caso, denominando η o vetor normal exterior unitário ao longo do contorno, tem-se:

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = g \quad \forall t, (x, y) \in \Gamma_0 \quad (1.4.2)$$

Perda de poluente para o solo: muitas vezes ocorre uma perda de poluente para o solo, seja por infiltração, por percolação, ou por algum tipo de biodegradação. A modelagem desta perda será por aproximação linear e, assim, sua equação é dada por:

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = k_1 u \quad (1.4.3)$$

Em outros casos, pode não ocorrer uma perda por parte da fronteira. É plausível supor, por exemplo, que não haja passagem de poluente do meio aéreo para o aquático, gerando uma condição de contorno natural dita homogênea, dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = 0 \quad (1.4.4)$$

Esta condição pode, em alguns casos de simetria, indicar a parte da fronteira por onde ocorre tal simetria.

Finalmente, podem ser identificados mais dois tipos de ocorrência de condições homogêneas:

A primeira,

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_3} = 0 \quad (1.4.5)$$

indica uma fronteira suficientemente distante, de modo que o comportamento, relativamente ao espaço, possa ser considerado assintoticamente estacionário, ou que o balanço entre o que sai e o que entra seja nulo. Esta condição de contorno é denominada condição de Neumann (Bassanezi e Ferreira Jr., 1988).

A segunda, denominada condição de Dirichlet (Bassanezi e Ferreira Jr., 1988), dada por:

$$\left. u \right|_{\Gamma_4} = 0 \quad (1.4.6)$$

caracteriza um trecho da fronteira, também suficientemente longe da fonte (e a montante de $\vec{V}$) de modo que não se registre a presença de poluente nessa região.

4.2 Inclusão do Meio Aquático

Em segunda aproximação, inclui-se o meio aquático, no caso de substâncias poluentes que penetrem na água. Neste caso, além da concentração de poluente no ar, indicada por $u(x, y, t)$, será designada por $a(x, y, t)$ a concentração do poluente na água no ponto (x, y) , para o instante t , na parte do domínio a ser considerada (ver figura 1.6).

Como em (1.4.1 – 1.4.6) no ar, em termos gerais, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & \{ \text{difusão} \} - \{ \text{transporte} \} - \{ \text{decaimento} \} + \{ \text{fonte} \} \\ & + \{ \text{poluente proveniente do meio aquático} \} \\ & (\text{ou} - \{ \text{poluente indo do ar para a água} \}) \end{aligned}$$

sendo este ultimo termo o que diferencia esta equação de (1.4.1), enquanto que, no meio aquático, a taxa de variação da concentração do poluente $a(x, y, t)$, pode ser genericamente

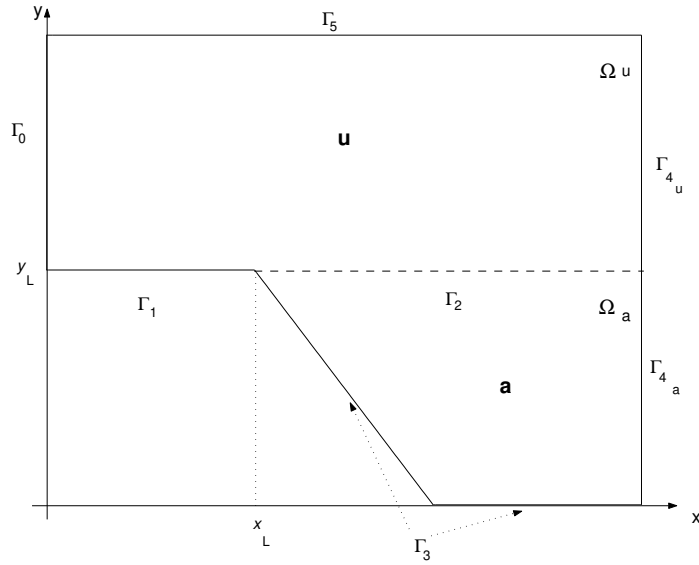


Figura 1.6: Incluindo o meio aquático no domínio de estudo

designada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} = & \{ \text{difusão} \} - \{ \text{transporte} \} - \{ \text{decaimento} \} + \{ \text{fonte} \} \\ & + \{ \text{poluente proveniente do meio aéreo} \} \\ & (\text{ou} - \{ \text{poluente indo da água para o ar} \}) \end{aligned}$$

O que se obtém, então, é o sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \text{div}(\alpha_u \nabla u) - \text{div}(\vec{W}u) - \sigma_u u + f, \\ \text{e} \\ \frac{\partial a}{\partial t} = \alpha_a \Delta a - \text{div}(\vec{W}a) - \sigma_a a + \mathcal{F} \end{array} \right. \quad (1.4.7)$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha_a, & (\text{é a constante de difusibilidade efetiva no meio aquático}) \\ \vec{W}, & (\text{é o campo de velocidade em } \Omega_a) \\ \sigma_a & (\text{é o decaimento global no meio aquático}) \end{array} \right.$$

Pode-se observar que o movimento de poluente do meio aéreo para o aquático, ou

vice-versa, não figura no sistema (1.4.7) acima, já que ocorre na fronteira entre os dois meios, aparecendo como condição de contorno, cujas expressões são:

No meio aéreo:

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0} = g \quad (\text{como em 1.4.2}) \quad (1.4.8)$$

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = k_1 u \quad (\text{perda para o solo, como em 1.4.3}) \quad (1.4.9)$$

$$-\alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = \beta_{12}(u - a) \Big|_{\Gamma_2} \quad (1.4.10)$$

que descreve a passagem de poluente de um a outro meio com uma taxa proporcional à diferença de concentração (condição do tipo Fick), com constante de proporcionalidade β_{12} .

$$u \Big|_{\Gamma_5} = 0 \quad (\text{como em 1.4.6}) \quad (1.4.11)$$

Como em 1.4.4, a condição de estabilidade assintótica para a parte da fronteira no ar (Γ_{4_u}), é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4_u}} = 0 \quad (1.4.12)$$

No meio aquático:

A condição de estabilidade assintótica, como em 1.4.12, para a parte da fronteira no meio aquático, é dada por:

$$\frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_{4_a}} = 0 \quad (1.4.13)$$

A penetração do poluente no sedimento, analogamente como em 1.4.9 substituindo o solo pelo sedimento, é dada por:

$$-\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_3} = k_3 a \quad (1.4.14)$$

Na interface água-ar, a passagem de poluente é descrita pela equação:

$$-\alpha_a \frac{\partial a}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = \beta_{21}(a - u) \quad (1.4.15)$$

onde o fenômeno já descrito (na eq. 1.4.10) apresenta diferença na constante de proporcionalidade, que indica a passagem no sentido contrário: β_{21} (passagem de poluente da água para o ar).

Finalmente, o termo $\mathcal{F}$, presente em (1.4.7) irá descrever a fonte existente precisamente na intersecção dos meios aéreo com o aquático e em contato com o solo: o *run off* no ponto $P = (x_L, y_L)$. Esta fonte será modelada por:

$$\mathcal{F} = \begin{cases} A_0 e^{-\kappa t} & \text{se } (x, y) = (x_L, y_L) \\ 0 & \text{se } (x, y) \neq (x_L, y_L) \end{cases} \quad \forall t \in [0, T], \quad (1.4.16)$$

ou, numa notação mais condensada, $\delta_P A_0 e^{-\kappa t}$ onde δ_P é o operador de Dirac no ponto P (a fonte é pontual).

Esta escolha de $\mathcal{F}$ se deu, considerando que haja um acúmulo do poluente na fronteira Γ_1 e que o mesmo seja transportado pelos canais de drenagem e/ou afluentes até o ponto de descarga no meio aquático – ponto (x_L, y_L) do domínio – tal como o efeito “*run off*”, no caso de campos de cultivo de arroz em várzea, comum em áreas alagáveis (Soderquist et al., 1977).

Estas equações é que constituem a chamada formulação clássica ou “forte” do problema. Tendo em vista a necessidade de demonstrar e obter, de algum modo, a existência e unicidade de solução do problema. E, visando a aplicação do método de Elementos Finitos, via Petrov/Galerkin para a discretização espacial, de modo a obter as aproximações numéricas adequadas da solução para cada instante $t \in [0, T]$, faz-se necessária a obtenção da formulação variacional ou “fraca” do problema, feita para os dois casos, nos capítulos 2 e 3, a seguir.

A formulação fraca é preferível pois permite uma maior amplitude de ação, tanto do analista (visto que facilita a demonstração de garantia que a solução existe e é única), quanto do analista numérico (porque os algoritmos computacionais são, nessa formulação, mais flexíveis e mais robustos).

Há, ainda, a favor da formulação fraca, ou variacional, o fato de se poder incorporar incômodos analíticos, como a descontinuidade (de condições iniciais ou parâmetros) ou como a existência de fontes pontuais, visto que as derivações se dão no sentido das distribuições (Kolmogorov e Fomin, 1976), um universo em que os “incômodos” acima inexistem na forma

de incômodo ou são o arroz-com-feijão.

Capítulo 2

Análise e discretização das equações no meio aéreo

Neste capítulo, será obtida a formulação variacional do problema 1.4.1–1.4.6, apresentado no capítulo anterior em sua formulação clássica. Aqui, o objetivo será o de propor uma solução “fraca”, ou no sentido de distribuições; uma vez que neste contexto variacional, hilbertiano, obtêm-se com maior simplicidade os resultados de existência e unicidade da solução fraca. Neste caso, são definidos processos de aproximação, cuja convergência pode ser provada (analiticamente) e comprovada (numericamente). E, por fim, a formulação variacional foi obtida em função da escolha de aproximação pelo Método dos Elementos Finitos, via Método de Galerkin.

1 Introdução

A formulação variacional do modelo consiste em obter uma outra formulação das equações 1.4.1 e 1.4.7, cuja solução, denominada solução fraca, deve ser procurada num espaço métrico conveniente. A justificativa de tal procedimento está na possibilidade de se poder usar funções que comportem modelos de descontinuidade, por exemplo, para a função que modela alguns dos fenômenos presentes no problema, como no caso de fontes pontuais no domínio, típico de problemas como o que foi proposto neste estudo, ou de “manchas” de poluentes.

O processo para obtenção da formulação variacional é desenvolvido da seguinte forma:

1. Considerar as derivadas de 1.4.1–1.4.6 e 1.4.7–1.4.15 no sentido de distribuições;
2. efetuar o produto interno de cada termo das equações por uma função ν , denominada função teste, sendo esta pertencente a um subespaço conveniente de

$$\mathcal{H}^1(\Omega) = \left\{ \nu(x, y) \in \mathcal{L}^2(x, y) : \frac{\partial \nu}{\partial x} \text{ e } \frac{\partial \nu}{\partial y} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \right\},$$

que será denotado por $\mathcal{U}$ (caracterizado mais adiante), onde $\mathcal{L}^2$ é o espaço das funções de quadrado integrável, no sentido de Lebesgue. Em $\mathcal{U}$, o produto interno é definido da seguinte forma:

$$\left(f \middle| g \right)_{0;\Omega} := \iint_{\Omega} f \cdot g \, d\mu; \quad (2.1.1)$$

$$\left(\vec{f} \middle| \vec{g} \right)_{0;\Omega} := \iint_{\Omega} (\vec{f}) \cdot (\vec{g}) \, d\mu; \quad (2.1.2)$$

$$\left\langle f \middle| g \right\rangle_{0;\Gamma} := \int_{\Gamma} f \cdot g \, d\gamma. \quad (2.1.3)$$

cuja integração é feita no sentido de Lebesgue.

Na situação de dispersão somente no meio aéreo, o subespaço a ser considerado é dado por:

$$\mathcal{U} = \{ u \in \mathcal{H}^1(\Omega) : u = 0 \text{ em parte de } \Gamma(\Gamma_4), \forall t \in [0, T] \}$$

No segundo caso, incluindo o meio aquático, serão procuradas as soluções $u(x, y, t)$ e $a(x, y, t)$ em $\mathcal{V}$ e $\mathcal{W}$, respectivamente, dados por:

$$\mathcal{V} = \{ \nu \in \mathcal{L}^2 \left[(0, T], \mathcal{H}^1(\Omega_u) \right] : \nu = 0 \text{ em parte de } \Gamma(\Gamma_5), \forall t \in [0, T] \}.$$

$$\mathcal{W} = \{ \omega \in \mathcal{L}^2 \left[(0, T], \mathcal{H}^1(\Omega_a) \right] : \omega = 0 \text{ em parte de } \Gamma(\Gamma_5), \forall t \in [0, T] \}.$$

Os subespaços serão caracterizados, adiante, de forma mais específica, para os casos apresentados nas seções 4.1 e 4.2, do primeiro capítulo (pg.21 e 24).

2 Formulação variacional

Considerando as equações apresentadas na seção 4.1 do capítulo anterior, será obtida, a seguir, a formulação variacional para o caso dos poluentes que não penetram na água, conforme comentado na seção prévia.

Para este problema, caracterizando o subespaço $\mathcal{V}_1$ de $\mathcal{H}^1(\Omega)$, como se segue:

$$\mathcal{V}_1 = \left\{ \nu \in \mathcal{L}^2((0, T), \mathcal{H}^1(\Omega)) : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_4 \text{ e } \frac{\partial \nu}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega); \forall t \in [0, T] \right\}$$

Neste caso, tomando f genérica, com a entrada (por deriva) de poluente pela fronteira Γ_0 e, além disso, considerando o coeficiente de difusão aérea α_u variável com relação somente à altura y , uma vez que a densidade do ar tem maior variação em relação a altitude, tem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_u(y) \nabla u) + \operatorname{div}(\vec{W} u) + \sigma_u u = f \quad (2.2.1)$$

Assim, realizando o produto interno conveniente em $\mathcal{V}_1$, vem:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega} \nabla(\alpha_u(y) \nabla u) \nu d\mu + \iint_{\Omega} \nabla(\vec{W} u) \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]$

Desta forma, considerando funções e derivadas primeiras de quadrado integráveis, no sentido fraco, e tomando $\vec{W} = \langle V_1(y); -V_2 \rangle$ (conforme justificativa adiante – pg.32), obtem-se:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega} \nabla(\alpha_u(y) \nabla u) \nu d\mu + \iint_{\Omega} V_1(y) \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu - \iint_{\Omega} V_2 \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T].$

Ao fazer uso de um teorema de Green, aplicado no segundo termo do lado esquerdo da equação 2.2.3, vem:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} \alpha_u(y) \nabla u \nabla \nu d\mu + \iint_{\Omega} V_1(y) \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu - \iint_{\Omega} V_2 \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega} \sigma_u u \nu d\mu - \int_{\Gamma} \alpha_u(y) \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \quad (2.2.4) \\ \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T] \end{aligned}$$

Daí, supondo uma variação linear crescente no coeficiente de difusão, ou seja,

$$\alpha_u(y) = \alpha_0 + \alpha_1 y, \alpha_1, \alpha_0 > 0 ; y \in [0, H];$$

que o decaimento global σ_u seja constante e $\vec{V}$ dado por:

$$\vec{V} = \langle V_1 \sqrt{y}; -V_2 \rangle$$

onde $V_1 \sqrt{y}$ representa uma primeira aproximação do campo de velocidade para a componente horizontal do vento predominante (no transporte por deriva). E, nesta primeira abordagem, V_2 constante para a componente vertical da velocidade resultante da ação gravitacional. Conforme Figueiredo (1979), supondo que a resistência do ar seja linearmente proporcional à velocidade, resulta na aproximação (V_{∞}), assintoticamente, desta componente por uma constante. Daí, a equação (2.2.4) se torna:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla u \nabla \nu d\mu + V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu \\ + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu - \int_{\Gamma} \alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma = \iint_{\Omega} f \nu d\mu \quad (2.2.5) \\ \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T] \end{aligned}$$

Finalmente, considerando as condições de contorno dadas por (1.4.2–1.4.6), substituindo no último termo do lado esquerdo da eq. (2.2.5), vem:

$$\begin{aligned}
& \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left(\nabla u \cdot \nabla \nu \right) d\mu + V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\
& - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma = \iint_{\Omega} f \nu d\mu + \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma \quad (2.2.6) \\
& \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]
\end{aligned}$$

Agora, usando a notação para o produto interno definida anteriormente na seção 1, a equação 2.2.6 pode ser reescrita na forma:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial u}{\partial t} \middle| \nu \right)_{0;\Omega} + \left((\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla u \middle| \nabla \nu \right)_{0;\Omega} + V_1 \left(\sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \middle| \nu \right)_{0;\Omega} - V_2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \middle| \nu \right)_{0;\Omega} \\
& + \sigma_u \left(u \middle| \nu \right)_{0;\Omega} + k_1 \left\langle u \middle| \nu \right\rangle_{0;\Gamma_1} = \left\langle g \middle| \nu \right\rangle_{0;\Gamma_0} + \left(f \middle| \nu \right)_{0;\Omega} \quad (2.2.7) \\
& \forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T]
\end{aligned}$$

É importante observar que em (2.2.6) aparecem apenas as derivadas de primeira ordem, no sentido de distribuições ou “fraca”, da solução $u(x, y, t)$, enquanto na equação (1.4.1) aparecem as derivadas de segunda ordem, no sentido clássico.

Desta forma, passando dessa formulação clássica (1.4.1-1.4.6) para a formulação variacional (2.2.6), são enfraquecidas as hipóteses de regularidade da solução, o que proporciona um aumento da classe de funções para as quais o problema faz sentido.

Além disso, na formulação variacional, a demonstração de existência e unicidade da solução fraca, cuja demonstração será tratada na próxima seção, se torna bem mais simples e, hoje, viável em comparação com a da solução clássica.

3 Existência e unicidade de solução

Considerando a formulação variacional obtida na seção prévia, será feita a demonstração de existência e unicidade da solução para a equação (2.2.6), de acordo com o que se segue.

Para estabelecer a existência e unicidade da solução de (2.2.6), será utilizado o Teorema de Lions (Lions, 1961, Teor. 1.1 – Cap. IV, pg. 46). Deverá ser provado que este problema na sua formulação variacional (eq. 2.2.6) satisfaz as hipóteses do citado teorema, seguindo o procedimento adotado, por exemplo, em (Diniz, 1994), (Castro, 1993) e (Mistro, 1992).

De fato, agrupando termos de (2.2.6) na forma abaixo e introduzindo a notação usada no referido teorema (Lions, 1961), tem-se:

$$\widehat{A}(t; \bullet) = \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(A_{ij}(x, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} A_i(x, t) + A_0 \quad (2.3.1)$$

o que, em (2.2.6) mediante as escolhas indicadas mais abaixo, fornece:

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega} \widehat{A}(t; u) \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma = \\ & = \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma + \iint_{\Omega} f \nu d\mu + \left(\iint_{\Omega} u_0 \nu d\mu \right) \delta_0(t) \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

$$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \forall t \in (0, T)$$

ou, numa notação mais compacta:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, \nu \right) + A(t, u, \nu) = L_f(\nu) \quad (2.3.3)$$

onde

$$A(t; u, \nu) = \iint_{\Omega} \widehat{A}(t; u) \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma$$

e

$$L_f(\nu) = \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma + \iint_{\Omega} f \nu d\mu + \left(\iint_{\Omega} u_0 \nu d\mu \right) \delta_0(t)$$

dadas as escolhas em (2.3.2) de:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \begin{cases} \alpha_0 + \alpha_1 y & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \\ A_i &= \begin{cases} V_1 \sqrt{y} & \text{se } i = 1 \\ -V_2 & \text{se } i = 2 \end{cases} \\ A_0 &= \sigma_u \end{aligned}$$

lembrando que δ_0 é o operador de Dirac que “fixa” a condição inicial.

Para a demonstração de existência e unicidade da solução, será verificado se (2.3.3) satisfaz as hipóteses do citado teorema, enunciado na forma a seguir.

Teorema 3.1 (Lions). *Dado o conjunto aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, considere os espaços $\mathcal{H}^1(\Omega)$,*

$\mathcal{H}_0^1(\Omega)$ e $\mathcal{V}_1$ tais que: $\mathcal{H}_0^1(\Omega) \subset \mathcal{V}_1 \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$

para $w = w(\mathbf{x}, t)$ e $v = v(\mathbf{x}, t)$, seja o operador A dado por¹:

$$A(t; w, v) = \sum_{i,j=1}^n \int_{\Omega} a_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial w}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} a_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial w}{\partial x_i} v dx + \int_{\Omega} a_0(\mathbf{x}, t) w v dx$$

Se

i) a_{ij} , a_i e $a_0 \in \mathcal{L}^2(\Omega \times (0, T))$;

ii) $\forall w, v \in \mathcal{V}_1$, a função: $\Lambda : t \mapsto A(t; w, v)$ é mensurável;

iii) $\exists \lambda \in \mathbb{R}$ tal que: $|A(t, w, w)|^2 + \lambda \|w\|_{\mathcal{L}^2}^2 \geq \delta \|w\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}^2$, $\delta > 0$, $w \in \mathcal{V}_1$, q.t.p.;

iv) $|A(t; w, v)| \leq M \|w\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$;

v) $L_f(v) = \int_{\Omega} f v dx + \left(\int_{\Omega} w_0 v dx \right) \delta_0(t)$ é contínuo;

vi) $f \in \mathcal{L}^2((-\infty, T); \mathcal{L}^2(\Omega))$ e $w_0(\mathbf{x}) \in \mathcal{L}^2(\Omega)$

então, existe uma única função $w \in \mathcal{L}^2((-\infty, T); \mathcal{L}^2(\Omega))$ e $\{w : (-\infty, 0) \rightarrow 0\}$ que é solução do problema variacional (2.3.3).

Prova: Para a demonstração do teorema consultar (Lions, 1961, Teor.1.1-Cap.IV). $\square$

Para averiguar que (2.3.3) satisfaz as hipóteses acima, tem-se:

¹ Em $\mathbb{R}^n$ será considerado $dx = dx_1 dx_2 \cdots dx_n$

1. Com efeito, é imediato verificar que A satisfaz as hipóteses i) e ii) do teorema enunciado acima, tendo em vista as escolhas de a_{ij} , a_i e a_0 .
2. A hipótese iii) em (2.3.3) – denominada coercividade do operador A – pode ser obtida pelo que se segue:

Como

$$\begin{aligned}
A(t, \nu, \nu) + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 &= \iint_{\Omega} \widehat{A}(t; \nu) \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \nu^2 d\gamma + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&= \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla \nu \cdot \nabla \nu d\mu + V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \nu}{\partial x} \nu d\mu - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial \nu}{\partial y} \nu d\mu \\
&\quad + \sigma_u \iint_{\Omega} \nu^2 d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \nu^2 d\gamma + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
A(t, \nu, \nu) + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 &= \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left[\left(\frac{\partial \nu}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \nu}{\partial y} \right)^2 \right] d\mu \\
&\quad + V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \nu}{\partial x} \nu d\mu - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial \nu}{\partial y} \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \nu^2 d\gamma + (\lambda + \sigma_u) \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2
\end{aligned} \tag{2.3.4}$$

temos que:

$$\begin{aligned}
\left| V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \nu}{\partial x} \nu d\mu \right| &\leq V_1 \iint_{\Omega} \left| \sqrt{y} \frac{\partial \nu}{\partial x} \nu \right| d\mu \leq V_1 \sqrt{H} \iint_{\Omega} \left| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right| |\nu| d\mu \leq \\
&\quad V_1 \sqrt{H} \left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \quad \forall y \in [0, H]
\end{aligned}$$

logo

$$-\left| V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \nu}{\partial x} \nu d\mu \right| \geq -V_1 \sqrt{H} \left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}$$

e como

$$\iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left[\left(\frac{\partial \nu}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \nu}{\partial y} \right)^2 \right] d\mu \geq \alpha_0 \iint_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial \nu}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \nu}{\partial y} \right)^2 \right] d\mu \quad \forall y \in (0, H]$$

Assim, seja $\zeta = \max\{|V_1| \sqrt{H}, |V_2|\}$ e aplicando a desigualdade de Hölder ao 2º e 3º termos do lado direito da equação (2.3.4) vem:

$$\begin{aligned}
A(t, \nu, \nu) + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 &\geq \alpha_0 \iint_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial \nu}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \nu}{\partial y} \right)^2 \right] d\mu + (\lambda + \sigma_u) \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 \\
&\quad - \zeta \left[\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \right] + k_1 \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2
\end{aligned}$$

ou

$$A(t, \nu, \nu) + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 \geq \alpha_0 \left(\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right) + (\lambda + \sigma_u + k_1) \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 - \zeta \left[\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \right] \quad (2.3.5)$$

Usando o recurso clássico da desigualdade

$$ab \leq \frac{\epsilon}{2} a^2 + \frac{1}{4\epsilon} b^2 \quad \forall a, b \text{ positivos}$$

que, aplicado aos termos:

$$\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \leq \frac{\epsilon}{2} \left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \frac{1}{4\epsilon} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

e

$$\left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \leq \frac{\epsilon}{2} \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \frac{1}{4\epsilon} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

somando membro a membro, chega-se a desigualdade:

$$\left[\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2} \right] \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \leq \frac{\epsilon}{2} \left(\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right) + \frac{1}{2\epsilon} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

daí,

$$-\zeta \left[\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2} \right] \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \geq -\frac{\zeta \epsilon}{2} \left(\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right) - \frac{\zeta}{2\epsilon} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

logo, a desigualdade (2.3.5) torna-se:

$$A(t, \nu, \nu) + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 \geq \left(\alpha_0 - \frac{\zeta \epsilon}{2} \right) \left[\left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right] + \left(\lambda + \sigma_u + k_1 - \frac{\zeta}{2\epsilon} \right) \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

Assim, tomando

$$\delta = \min \left\{ \left(\alpha_0 - \frac{\zeta \epsilon}{2} \right); \left(\lambda + \sigma_u + k_1 - \frac{\zeta}{2\epsilon} \right) \right\}$$

podemos escolher ζ e ϵ , de modo que $\delta > 0$ e, portanto, tem-se:

$$A(t, \nu, \nu) + \lambda \|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 \geq \delta \left(\|\nu\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \left\| \frac{\partial \nu}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 \right) = \delta \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}^2$$

$$\forall \nu \in \mathcal{V}_1, \text{ para cada } t \in (0, T)$$

3. A condição dada na hipótese *iv*) em (2.3.3) – denominada continuidade do operador A – pode ser obtida da seguinte forma:

Dado que $\iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + A(t, u, \nu) = L_f(\nu)$ onde

$$A(t; u, v) = \iint_{\Omega} \hat{A}(t; u) \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma$$

e

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \hat{A}(t; u) \nu d\mu &= \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla u \cdot \nabla \nu d\mu + V_1 \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ &\quad - V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu \end{aligned}$$

como

$$\iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla u \cdot \nabla \nu d\mu \leq |\alpha_0 + \alpha_1 H| \iint_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \nu d\mu$$

daí, para cada $t \in (0, T)$, seja $\varepsilon = \max\{|\alpha_0 + \alpha_1 H|, |\sigma_u|\}$ e usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, obtem-se:

$$|\alpha_0 + \alpha_1 H| \iint_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega} u \nu d\mu \leq \varepsilon \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$$

além disso,

$$|V_1| \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \leq |V_1 \sqrt{H}| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu$$

e, pela desigualdade de Hölder, tem-se:

$$|V_1 \sqrt{H}| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \leq |V_1 \sqrt{H}| \left\| \frac{\partial u}{\partial x} \right\|_{\mathcal{L}^2} \left\| \nu \right\|_{\mathcal{L}^2} \leq |V_1 \sqrt{H}| \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$$

$$|V_2| \iint_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu \leq |V_2| \left\| \frac{\partial u}{\partial y} \right\|_{\mathcal{L}^2} \left\| \nu \right\|_{\mathcal{L}^2} \leq |V_2| \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$$

dada a continuidade da imersão de $\mathcal{H}^1(\Omega)$ em $\mathcal{L}^2$, obtem-se:

$$\begin{aligned} k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\mu &\leq |k_1| \|u\|_{\mathcal{L}^2(\Gamma_1)} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2(\Gamma_1)} \leq |k_1| \|u\|_{\mathcal{L}^2(\partial\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2(\partial\Omega)} \leq \\ &\leq |k_1| \|u\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq |k_1| \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \end{aligned}$$

daí

$$\begin{aligned} |A(t, u, \nu)| &\leq \varepsilon \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + |V_1 \sqrt{H}| \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + |V_2| \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \\ &\quad + |k_1| \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \end{aligned}$$

logo, tomando $M = \varepsilon + |V_1\sqrt{H}| + |V_2| + |k_1|$ vem:

$$|A(t, u, \nu)| \leq M \|u\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$$

4. Como o termo $L_f(v)$ de (2.3.3) é dado por:

$$L_f(\nu) = \int_{\Gamma_0} g\nu d\gamma + \iint_{\Omega} f\nu d\mu + \left(\iint_{\Omega} u_0\nu d\mu \right) \delta_0(t)$$

e, além disso,

$$\|v\|_{\mathcal{L}^2} \leq \mu(\Omega) \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \quad \forall v \in \mathcal{V}_1,$$

dadas as escolhas de f, g e $u_0 \in \mathcal{L}^2(\Omega \times [0, T])$ tem-se que:

$$\begin{aligned} |L_f(v)| &= \left| \int_{\Gamma_0} g\nu d\gamma + \iint_{\Omega} f\nu d\mu + \left(\iint_{\Omega} u_0\nu d\mu \right) \delta_0(t) \right| \leq \\ &\leq \int_{\Gamma_0} |g\nu| d\gamma + \iint_{\Omega} |f\nu| d\mu + \left(\iint_{\Omega} |u_0\nu| d\mu \right) \delta_0(t) \leq \\ &\leq \|g\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} + \|f\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} + \|u_0\|_{\mathcal{L}^2} \|\nu\|_{\mathcal{L}^2} \leq \\ &\leq \left(\|g\|_{\mathcal{L}^2} + \|f\|_{\mathcal{L}^2} + \|u_0\|_{\mathcal{L}^2} \right) \|\nu\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \end{aligned}$$

o que satisfaz as hipóteses $v)$ e $vi)$ do teorema.

Portanto, existe uma única solução do problema (2.3.3), formulado variacionalmente.

4 Discretização do problema

Nesta seção, será feita a discretização do modelo, para a formulação obtida na seção 2 deste capítulo (eq. 2.2.6), através do Método dos Elementos Finitos (discretização espacial) e Crank-Nicolson (discretização temporal), descritos a seguir.

O primeiro passo da discretização, no caso a espacial, será via Método dos Elementos Finitos. Este método é uma técnica geral para construção de aproximações da solução de um problema de valor de contorno, que envolve a divisão do domínio da solução num

número finito de subdomínios simples (os Elementos Finitos) e usando conceitos variacionais, construir uma aproximante da solução sobre a coleção de Elementos Finitos (ver Becker et al. (1981) ou Carey e Oden (1981)).

O segundo passo, será o da discretização da variável temporal (no caso, Crank-Nicolson), optou-se por um método implícito com diferenças centradas (Carnahan et al., 1969; Kardestuncer e Norrie, 1987), de modo a transformar os modelos, discretizados espacialmente, num sistema de equações algébricas implicitamente definido como em (Lacaz, 1999; Sossae, 1995; Diniz, 1994; Castro, 1993; Mistro, 1992).

Para isso, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema, dada pela equação (2.2.6). Denominando de $\mathcal{V}_{h_1}$ o subespaço de $\mathcal{V}_1$ gerado pelas N_{h_1} funções φ_i (chamadas de funções teste). Assim, $\forall \nu_{h_1} \in \mathcal{V}_{h_1}$ é da forma:

$$\nu_{h_1} = \sum_{j=1}^{N_{h_1}} \nu_j(t) \varphi_j(x, y)$$

Neste modelo, como o processo de dispersão se dá apenas no ar, será feita a discretização do domínio aéreo (Ω), considerando o subespaço $\mathcal{V}_{h_1}$ de $\mathcal{V}_1$, a eq. (2.2.6) pode ser reescrita na forma do seguinte sistema de EDO's:

$$\left(\widehat{A}(t; u_{h_1}) \Big| \nu_{h_1} \right)_{0;\Omega} + \left(\frac{\partial u_{h_1}}{\partial t} \Big| \nu_{h_1} \right)_{0;\Omega} + k_1 \left\langle u_{h_1} \Big| \nu_{h_1} \right\rangle_{0;\Gamma_1} = \left\langle g \Big| \nu_{h_1} \right\rangle_{0;\Gamma_0} + \left(f \Big| \nu_{h_1} \right)_{0;\Omega} \quad (2.4.1)$$

$$\forall \nu_{h_1} \in \mathcal{V}_{h_1}, \forall t \in (0, T)$$

o que, mediante as escolhas de A_{ij} , A_i e A_0 indicadas anteriormente, nos fornece o seguinte sistema de EDO's discretizado:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_{h_1}} \frac{du_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mu \\ & + V_1 \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ & + \sigma_u \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma = \\ & = \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \iint_{\Omega} \left(f \varphi_i \right) d\mu \quad \forall \varphi_i \text{ da base de } \mathcal{V}_{h_1} \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

A discretização seguinte é a da variável temporal, isso será feito pelo método de Crank-Nicolson, com diferenças centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, fazendo as seguintes aproximações:

$$\frac{du_j}{dt} \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \quad \text{onde} \quad u_j^{n+1} = u_j(t_{n+1}) \quad (2.4.3)$$

e

$$u_j \left(t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \cong \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2} \quad (2.4.4)$$

daí, levando (2.4.3) e (2.4.4) em (2.4.2), obtem-se o sistema linear

$$\mathcal{A}u^{(n+1)} = \mathcal{B}u^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}}, \quad \text{dado} \quad u^{(0)} \quad (2.4.5)$$

onde

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \sigma_u \right) \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu + \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i d\mu \\ &\quad + V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu - V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu \\ &\quad + k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ b_{ij} &= \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \sigma_u \right) \iint_{\Omega} \varphi_j \varphi_i d\mu - \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \nabla \varphi_j \nabla \cdot \varphi_i d\mu \\ &\quad - V_1 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i d\mu + V_2 \frac{\Delta t}{2} \iint_{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i d\mu \\ &\quad - k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ d_i^{n+\frac{1}{2}} &= \iint_{\Omega} f(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \cdot) \varphi_i d\mu + \int_{\Gamma_0} g(t_{n+\frac{\Delta t}{2}}, \cdot) \varphi_i d\gamma \\ (u^{(0)} | \varphi_i) &= \sum_{j=1}^{N_{h_1}} u_j^{(0)} (\varphi_j | \varphi_i) \quad i = 1, 2, \dots, N_{h_1} \end{aligned}$$

A matriz $\mathcal{A}$ é chamada matriz de rigidez e o vetor resultante das operações $\mathcal{B}.u^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}}$, para cada instante $t_{n+\frac{\Delta t}{2}}$, é denominado vetor carga.

A ordem das aproximações temporais é, localmente, $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

A escolha das funções teste φ_i será a de elementos finitos triangulares de primeira ordem, que consiste em:

- Construir uma malha (dos Elementos Finitos) sobre o domínio Ω , que será denotado por Ω_T .
- Escolher as funções base $\left\{ \varphi_1(x, y), \varphi_2(x, y), \dots, \varphi_{N_{h_1}}(x, y) \right\}$ definidas globalmente, do tipo linear por partes e satisfazendo a seguinte condição:

$$\varphi_i(x_j, y_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

onde (x_j, y_j) são as coordenadas do j -ésimo nó da malha.

Desta forma, obtem-se uma função “pirâmide” sobre cada nó, que é linear por partes, assumindo o valor 1 no j -ésimo nó e ZERO nos demais.

No capítulo seguinte, é feito esse mesmo estudo para o caso dos poluentes que penetram na água. Neste caso, inclui-se o meio aquático, o que implica num novo domínio e, portanto, uma nova formulação variacional.

Capítulo 3

Análise e discretização das equações incluindo o meio aquático

Neste capítulo, será demonstrada a existência e unicidade de solução para condições homogêneas do problema apresentado no primeiro capítulo (na seção 4.2) em sua formulação clássica. Conforme justificado no segundo capítulo, aqui também será obtida a formulação variacional do problema, buscando encontrar aproximações da solução “fraca”, ou no sentido de distribuições, em função da opção de aproximação pelo Método dos Elementos Finitos, via Método de Galerkin.

1 Existência e unicidade incluindo o meio aquático

Nesta seção, será obtida uma condição de existência e unicidade de solução para o problema de dispersão de poluentes que penetram na água (1.4.7 – do primeiro capítulo). Conforme denominado anteriormente, sendo $u(x, y, t)$ e $a(x, y, t)$ as concentrações do poluente nos meios aéreo e aquático, respectivamente, o sistema de equações (1.4.7), pode ser escrito (levando as incógnitas para o primeiro membro), na forma:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_u(y) \nabla u) + \operatorname{div}(\vec{V}u) + \sigma_u u = f \\ \frac{\partial a}{\partial t} - \alpha_a \Delta a + \operatorname{div}(\vec{W}a) + \sigma_a a = \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Um resultado bastante geral de existência de soluções para sistemas de equações parabólicas (como em 3.1.1) foi provado por Amann (1978), tratando de sistemas de equações

diferenciais parciais dados por:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A}(t, \mathbf{x})\mathbf{u} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) & em \quad \Omega \times (0, T] \\ \mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{u} = 0 & em \quad \partial\Omega \times (0, T] \\ \mathbf{u}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) & em \quad \overline{\Omega} \end{array} \right. \quad (3.1.2)$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_m)$, $\nabla \mathbf{u} = (\nabla u_1, \nabla u_2, \dots, \nabla u_m)$ é uma matriz $m \times n$, com o operador $\mathbf{A}$ dado por:

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{x})\mathbf{u} = (A^1(t, \mathbf{x})u_1, A^2(t, \mathbf{x})u_2, \dots, A^m(t, \mathbf{x})u_m)$$

$$A^i(t, \mathbf{x})\nu = \sum_{j,k=1}^n p_{jk}^i(t, \mathbf{x}) \frac{\partial^2 \nu}{\partial x_j \partial x_k} + \sum_{j=1}^n q_j^i(t, \mathbf{x}) \frac{\partial \nu}{\partial x_j} + r^i(t, \mathbf{x})\nu \quad i = 1, \dots, m$$

Agora, seguindo o procedimento adotado em Pregolatto (2002), supondo:

1. os números $\delta h^i \in \{0, 1\}$;
2. as funções $b^i \in \mathcal{C}^{1+\alpha}(\partial\Omega, \mathbb{R})$, $b^i > 0$;
3. os vetores $\eta^i \in \mathcal{C}^{1+\alpha}(\partial\Omega, \mathbb{R})$ com direções apontando ao exterior da superfície e não tangentes a ela;
4. $B^i(\mathbf{x})\nu := b^i(\mathbf{x})\nu(\mathbf{x}) + h^i \frac{\partial \nu}{\partial \eta^i}(\mathbf{x})$, sendo $b^i(\mathbf{x}) = 1 \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega$ quando $\delta h^i = 0$.

Assim, considerando o operador $\mathbf{B}$ (para $i = 1, \dots, m$) dado por:

$$\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{u} = (B^1(\mathbf{x})u_1, B^2(\mathbf{x})u_2, \dots, B^m(\mathbf{x})u_m) \quad \text{para } \mathbf{u} : \partial\Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^m$$

e, além disso, pelo teorema enunciado a seguir.

Teorema 1.1 (Amann). *Se a função vetorial $\mathbf{f}(\circ, \circ, \xi, \zeta)$ é:*

- i) α -Hölder uniformemente contínua em relação a ξ e ζ , pertencentes a subconjuntos limitados de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$;*

- ii) $\mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \circ, \circ) : [0, T] \times \overline{\Omega} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ é localmente Lipschitz-contínua, uniformemente em relação a $(\mathbf{x}, t) \in \overline{\Omega} \times [0, T]$ e
- iii) Existe uma constante $c > 0$ tal que $\|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \xi, \zeta)\| \leq c(1 + \|\zeta\|^2)$ para todo $(t, \mathbf{x}, \xi, \zeta) \in [0, T] \times \overline{\Omega} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$.

Então existe uma única solução clássica em $\mathcal{C}^{2+\alpha}(\overline{\Omega} \times (0, T])$ para o sistema (3.1.2).

Prova: Para a demonstração do teorema, consultar Amann (1978). □

Nestas condições, aplicando o teorema de Amann (*Op. cit*) e para algumas escolhas das condições de contorno (1.4.8 a 1.4.15) tem-se a existência de uma única solução clássica de (3.1.1) em $\mathcal{C}^{2+\alpha}(\overline{\Omega} \times (0, T])$.

Isto resolve o problema de existência e unicidade de solução para uma escolha das condições de contorno que caem no problema de Dirichlet homogêneo. Infelizmente, isto não ocorre no caso das equações (1.4.8 a 1.4.15), denominado problema de contorno com condições mistas (Dirichlet e Neumann).

Um resultado de existência e unicidade global exige (além das esperadas exigências de regularidade) um tratamento analítico para a parte da fronteira interna do domínio total, em que ocorrem as trocas entre o meio aéreo e o meio aquático.

As demonstrações de cada um dos casos isolados está feita (no meio aéreo – ver capítulo anterior; no meio aquático – ver Meyer e Diniz (1997)). Do ponto de vista prático, isto é suficiente para que se aceitem as aproximações realizadas neste capítulo.

2 Formulação variacional incluindo o meio aquático

Nesta seção, será considerado o problema dos poluentes que penetrem na água (solúveis), o que implica na reformulação do domínio conforme apresentado na figura 1.6 (pg.25), bem como as novas condições de contorno, estabelecidas pelas equações (1.4.8 a 1.4.15) do primeiro capítulo, de modo a obter a formulação variacional para o poluente nos dois meios (ar e água).

Para este problema, os subespaços $\mathcal{V}_{2_u}$ e $\mathcal{V}_{2_a}$ de $\mathcal{H}^1(\Omega = \Omega_u \cup \Omega_a)$, serão caracterizados da seguinte forma:

$$\mathcal{V}_{2_u} = \left\{ \nu \in \mathcal{L}^2[(0, T), \mathcal{H}^1(\Omega_u)] : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_5 \text{ e } \frac{\partial \nu}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \forall t \in [0, T] \right\}$$

$$\mathcal{V}_{2_a} = \left\{ \nu \in \mathcal{L}^2[(0, T), \mathcal{H}^1(\Omega_a)] : \nu = 0 \text{ em } \Gamma_5 \text{ e } \frac{\partial \nu}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \forall t \in [0, T] \right\}$$

Neste caso, considerando o sistema (3.1.1) da seção anterior e aplicando o produto interno indicado na seção 1 do segundo capítulo (pg.31), em cada termo do sistema 3.1.1, vem:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_u} \nabla [(\alpha_u(y) \nabla u) \nu] d\mu + \iint_{\Omega_u} \nabla(\vec{W} \cdot u) \nu d\mu \\ \quad + \iint_{\Omega_u} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu, \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_a} \alpha_a \Delta a \nu d\mu + \iint_{\Omega_a} \nabla(\vec{W} \cdot a) \nu d\mu \\ \quad + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (3.2.1)$$

Novamente, considerando funções e derivadas primeiras de quadrado integráveis, no sentido fraco, tomando $\vec{W} = \langle V_1 \sqrt{y}; -V_2 \rangle$, $\vec{W} = \langle W_1; -W_2 \rangle$ e f genérica (como em (2.2.5) da seção 2, do segundo capítulo) obtém-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_u} \nabla [(\alpha_u(y) \nabla u) \nu] d\mu + V_1 \iint_{\Omega_u} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ \quad - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} \sigma_u u \nu d\mu = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu, \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu - \iint_{\Omega_a} \alpha_a \Delta a \nu d\mu + \iint_{\Omega_a} \left(W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right) \nu d\mu \\ \quad + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (3.2.2)$$

Tomando os coeficientes de difusão no ar (Ω_u) e na água (Ω_a), respectivamente, por:

$$\alpha_u(y) = \alpha_0 + \alpha_1 y, \quad \alpha_0, \alpha_1 > 0; \quad y \in [0, H] \quad \text{e} \quad \alpha_a \quad \text{constante};$$

daí, fazendo uso de um teorema de Green, aplicado no segundo termo do lado esquerdo de cada uma das equações do sistema 3.2.2, vem:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu + V_1 \iint_{\Omega_u} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu - \int_{\partial\Omega_u} \alpha_u \frac{\partial u}{\partial \eta} \nu d\gamma \\ = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu \\ + \iint_{\Omega_a} \sigma_a a \nu d\mu - \alpha_a \int_{\partial\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial \eta} \nu d\gamma = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \nu d\mu \\ \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a} \quad \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (3.2.3)$$

Por fim, considerando as condições de contorno dadas pelas equações (1.4.8–1.4.15) e levando-as no sistema 3.2.3, tem-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu + V_1 \iint_{\Omega_u} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu - \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma \\ + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} (u - a) \nu d\gamma = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu \\ + \sigma_a \iint_{\Omega_a} a \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} (a - u) \nu d\gamma + k_3 \int_{\Gamma_3} a \nu d\gamma \\ = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \nu d\mu \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \quad \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (3.2.4)$$

que, após a separação das incógnitas, se torna:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial t} \nu d\mu + \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) [\nabla u \cdot \nabla \nu] d\mu + V_1 \iint_{\Omega_u} \sqrt{y} \frac{\partial u}{\partial x} \nu d\mu \\ - V_2 \iint_{\Omega_u} \frac{\partial u}{\partial y} \nu d\mu + \sigma_u \iint_{\Omega_u} u \nu d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} u \nu d\gamma + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma \\ = \iint_{\Omega_u} f \nu d\mu + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + \int_{\Gamma_0} g \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_u} \\ \\ \iint_{\Omega_a} \frac{\partial a}{\partial t} \nu d\mu + \alpha_a \iint_{\Omega_a} [\nabla a \cdot \nabla \nu] d\mu + \iint_{\Omega_a} \left[W_1 \frac{\partial a}{\partial x} - W_2 \frac{\partial a}{\partial y} \right] \nu d\mu \\ + \sigma_a \iint_{\Omega_a} a \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} a \nu d\gamma + k_3 \int_{\Gamma_3} a \nu d\gamma \\ = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \nu d\mu + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} u \nu d\gamma \quad \forall \nu \in \mathcal{V}_{2_a}, \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (3.2.5)$$

Como observado anteriormente, em (3.2.5) aparecem apenas as derivadas de primeira ordem, no sentido de distribuições, das soluções $u(x, y, t)$ e $a(x, y, t)$, enquanto nas equações do sistema (3.1.1) aparecem as derivadas de segunda ordem, no sentido clássico.

Passando da formulação clássica (3.1.1) para a variacional (3.2.5), as hipóteses de regularidade da solução são enfraquecidas, o que proporciona um aumento na classe de funções para as quais o problema faz sentido, como já mencionado no capítulo anterior.

Na seção seguinte, será feita a discretização do problema em sua formulação variacional.

3 Discretização incluindo o meio aquático

Nesta seção, será feita a discretização do modelo, para a formulação (3.2.5) obtida na seção 2 deste capítulo, através do Método dos Elementos Finitos (discretização espacial) e Crank-Nicolson (discretização temporal), conforme o procedimento adotado no capítulo anterior. Neste caso, deve-se trabalhar com a formulação variacional do problema, dada pelo sistema (3.2.5).

Denominando de $\mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ os subespaços de $\mathcal{V}_{2u}$ e $\mathcal{V}_{2a}$, respectivamente, gerado pelas $N_{h_{2u}}$ e $N_{h_{2a}}$ funções φ_i (chamadas de funções teste).

Assim, qualquer $\nu_{h_{2\bullet}} \in \mathcal{V}_{h_{2u}}$ ou $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ pode ser escrita na forma:

$$\nu_{h_{2u}} = \sum_{i=1}^{N_{h_{2u}}} \nu_i(t) \varphi_i(x, y) \quad \nu_{h_{2a}} = \sum_{i=1}^{N_{h_{2a}}} \nu_i(t) \varphi_i(x, y)$$

Neste modelo, o processo de dispersão ocorre em ambos os meios. Com isso, será feita a discretização dos domínios aéreo e aquático (Ω_u e Ω_a , respectivamente), considerando os subespaços $\mathcal{V}_{h_{2u}}$ e $\mathcal{V}_{h_{2a}}$ de $\mathcal{V}_{2u}$ e $\mathcal{V}_{2a}$, o que fornece para o sistema (3.2.5):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} \frac{du_j}{dt} \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mu \\ + V_1 \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ + \sigma_u \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \sum_{j \in \Gamma_1} u_j \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ = \iint_{\Omega_u} f \varphi_i d\mu + \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2u}} \\ \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} \frac{da_j}{dt} \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + \alpha_a \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mu \\ + W_1 \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - W_2 \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ + \sigma_a \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_3 \sum_{j \in \Gamma_3} a_j \int_{\Gamma_3} \varphi_j \varphi_i d\gamma + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \varphi_i d\mu + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2a}} \end{array} \right. \quad (3.3.1)$$

Novamente, via o método de Crank-Nicolson, com diferenças centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, usando as aproximações (2.4.3) e (2.4.4) em (3.3.1), para a discretização temporal, obtem-se

o sistema linear acoplado:

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} \left\{ \frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\Delta t} \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu \right. \\ & \quad + \frac{u_j^{(n+1)} + u_j^{(n)}}{2} \times \left[\iint_{\Omega_u} (\alpha_0 + \alpha_1 y) \left(\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \right) d\mu \right. \\ & \quad + V_1 \iint_{\Omega_u} \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - V_2 \iint_{\Omega_u} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ & \quad \left. \left. + \sigma_u \iint_{\Omega_u} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_1 \int_{\Gamma_1} \varphi_j \varphi_i d\gamma + \beta_{12} \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \right] \right\} \\ & = \iint_{\Omega_u} f \varphi_i d\mu + \int_{\Gamma_0} g \varphi_i d\gamma + \beta_{12} \sum_{j \in \Gamma_2} \frac{a_j^{(n+1)} + a_j^{(n)}}{2} \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ & \qquad \qquad \qquad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2u}} \\ & \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} \left\{ \frac{a_j^{(n+1)} - a_j^{(n)}}{\Delta t} \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu \right. \\ & \quad + \frac{a_j^{(n+1)} + a_j^{(n)}}{2} \times \left[\alpha_a \iint_{\Omega_a} \left(\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \right) d\mu \right. \\ & \quad + W_1 \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_i \right) d\mu - W_2 \iint_{\Omega_a} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_i \right) d\mu \\ & \quad \left. \left. + \sigma_a \iint_{\Omega_a} \varphi_j \varphi_i d\mu + k_3 \int_{\Gamma_3} \varphi_j \varphi_i d\gamma + \beta_{21} \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \right] \right\} \\ & = \iint_{\Omega_a} \mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \varphi_i d\mu + \beta_{21} \sum_{j \in \Gamma_2} \frac{u_j^{(n+1)} + u_j^{(n)}}{2} \int_{\Gamma_2} \varphi_j \varphi_i d\gamma \\ & \qquad \qquad \qquad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2a}} \end{aligned} \right. \tag{3.3.2}$$

Multiplicando por Δt e reagrupando para os termos $(n+1)$ e (n) , com as notações dos produtos internos dadas por (2.1.1) e (2.1.2), tem-se:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_u \Delta t}{2} \right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} + \frac{\Delta t}{2} \left[\left([\alpha_0 + \alpha_1 y] \nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} \right. \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + V_1 \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} - V_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} + k_1 \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_1} + \beta_{12} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} \\
& \quad \left. - \frac{\beta_{12} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j^{(n+1)} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right\} = \\
& = \sum_{j=1}^{N_{h_{2u}}} u_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_u \Delta t}{2} \right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} - \frac{\Delta t}{2} \left[\left([\alpha_0 + \alpha_1 y] \nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + V_1 \left(\sqrt{y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} - V_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} + k_1 \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_1} + \beta_{12} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} \\
& \quad \left. + \frac{\beta_{12} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} a_j^{(n)} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} + \left(f \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_u} + \left\langle g \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_0} \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2u}} \right\} \\
& \left\{ \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j^{(n+1)} \left\{ \left(1 + \frac{\sigma_a \Delta t}{2} \right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} + \frac{\Delta t}{2} \left[+\alpha_a \left(\nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + W_1 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} - W_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} + k_3 \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} + \beta_{21} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} \\
& \quad \left. - \frac{\beta_{21} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j^{(n+1)} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right\} = \\
& = \sum_{j=1}^{N_{h_{2a}}} a_j^{(n)} \left\{ \left(1 - \frac{\sigma_a \Delta t}{2} \right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} - \frac{\Delta t}{2} \left[+\alpha_a \left(\nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + W_1 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} - W_2 \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} + k_3 \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_3} + \beta_{21} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} \right] \right\} \\
& \quad \left. + \frac{\beta_{21} \Delta t}{2} \sum_{j \in \Gamma_2} u_j^{(n)} \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle_{0;\Gamma_2} + \left(\mathcal{F} \delta_L(\Omega_a) \middle| \varphi_i \right)_{0;\Omega_a} \quad \forall \varphi_i \in \text{base de } \mathcal{V}_{h_{2a}} \right\}
\end{aligned}
\tag{3.3.3}$$

Denominado $\mathbb{U}$ o vetor coluna formado pelos vetores $u_{h_{2u}}$ e $a_{h_{2a}}$, ou seja,

$$\mathbb{U} = \begin{bmatrix} u_{h_{2u}} \\ a_{h_{2a}} \end{bmatrix}$$

o sistema de equações lineares algébrico (3.3.3) pode ser escrito de maneira mais compacta

na forma matricial:

$$\mathcal{A} \cdot \mathbb{U}^{(n+1)} = \mathcal{B} \cdot \mathbb{U}^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}} \quad \text{dado} \quad \mathbb{U}^{(0)} = \begin{bmatrix} u^{(0)} \\ a^{(0)} \end{bmatrix} \quad (3.3.4)$$

A figura 3.1, a seguir, ilustra a discretização do domínio, incluindo os dois meios, e apresenta a função base $\varphi_i(x, y)$ para o i -ésimo nó. Neste caso, também foi escolhida a discretização por elementos triangulares de primeira ordem.

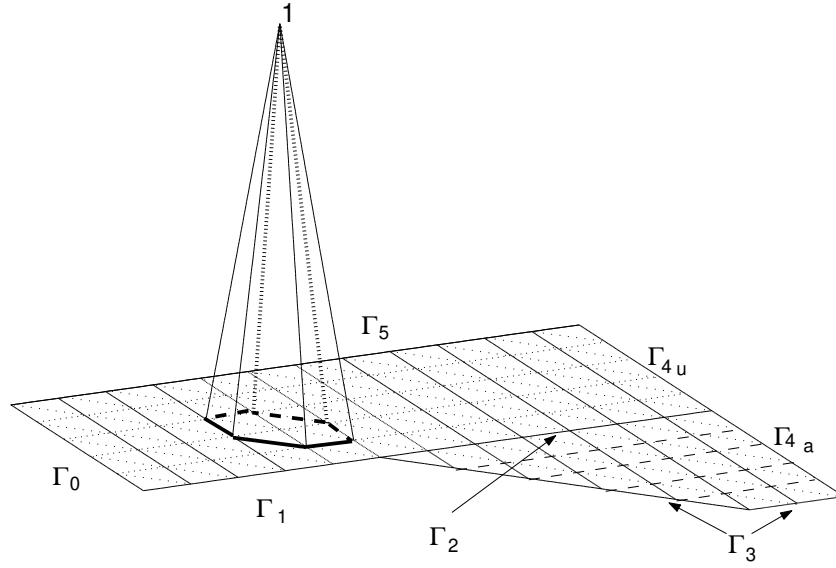


Figura 3.1: Ilustração da função base $\varphi_i(x, y)$

Na seção seguinte é descrito um critério de estabilidade para o método numérico adotado para as aproximações da solução fraca.

4 Estudo de estabilidade

Os métodos de aproximação numérica para a solução de equações evolutivas denominadas “de transporte”, como as apresentadas nos modelos para este problema, podem trazer sérias dificuldades, usualmente devido a componente advectiva, quando ela é preponderante na equação.

Isto pode ser testado pela simples comparação entre os parâmetros $\vec{W}$ e α_u ou $\vec{W}$ e α_a . Naqueles casos em que $\vec{W}$ é bem maior que α_u ou $\vec{W} \gg \alpha_a$, certamente aparecerão

oscilações numéricas na aproximação, quando o tamanho da malha excede um valor crítico (Heinrich et al., 1977). Em mecânica dos fluídos, problemas semalhantes aparecem com relação a componente convectiva da equação de Navier-Stokes.

A principal razão destes problemas é que a matriz associada ao termo convectivo/adectivo é não simétrica, podendo gerar sistemas mal-condicionados (Moreira e Wrobel, 1983). Uma maneira de suprimir tais fenômenos é usar malhas bem refinadas, de maneira que a convecção/advecção perca sua preponderância a nível de elemento. Entretanto, tal estratégia tem um custo operacional alto, pois com uma malha mais refinada a ordem do sistema obtido deverá ser bem maior, o que torna o sistema mais pesado do ponto de vista computacional.

Nas simulações apresentadas no capítulo seguinte, a escolha dos parâmetros de discretização levou em conta a condição de estabilidade do método, com base no número de Peclet (Brooks e Hughes, 1982; Heinrich et al., 1977; Christie et al., 1976). Esta condição é dada por:

$$\frac{V_i \Delta x_i}{\alpha} \leq 2 \quad (3.4.1)$$

onde

- V_i é a componente do termo advectivo $\vec{W}$ na direção x_i
- Δx_i é o comprimento máximo do intervalo na direção x_i
- α é o coeficiente de difusão.

Outro critério, utilizado nos casos de advecção transiente (com o coeficiente de difusão nulo), é a condição dada pelo número de Courant (Brooks e Hughes, 1982), que estabelece:

$$Cr = \frac{V_i \Delta t}{\Delta x_i} \leq 2 \quad (3.4.2)$$

No problema em estudo, este critério não se aplica, uma vez que o coeficiente de difusão apesar de ser pequeno, é sempre diferente de zero, exceto para o mercúrio metálico, cujo coeficiente de difusão é tão pequeno que pode ser considerado como nulo (Mistro, 1992).

No capítulo seguinte são apresentados os resultados numéricos obtidos pelo método descrito anteriormente.

Capítulo 4

Resultados, análise e discussão

Neste capítulo serão apresentados alguns cenários para simular a dispersão de poluentes em regiões próximas a lagoas/baías e, vale a pena ressaltar, a possibilidade de obter tais simulações foi a grande motivação do árduo trabalho dos capítulos precedentes.

1 Introdução

Alguns dos parâmetros utilizados foram encontrados na literatura, entretanto, dado o caráter inédito do modelo proposto, muitos dos parâmetros tiveram de ser estimados, dentro de espectros presumidamente plausíveis, para a simulação dos cenários e teste dos códigos numéricos desenvolvidos.

Neste sentido, os resultados apresentados na seção seguinte servem mais para efeito de teste dos modelos, mesmo considerando a busca de uma abordagem o mais realística possível.

2 Simulação de cenários

Nas simulações apresentadas em seguida, a principal característica, que merece ser ressaltada, é sua visualização através de gráficos, cuja compreensão pode ser melhor assimilada por não-matemáticos, uma vez que o problema de dispersão de poluentes tem despertado o interesse de pesquisadores das mais variadas áreas, bem como de organizações

não-governamentais ligadas aos problemas ambientais, cujo caráter interdisciplinar é inquestionável.

Os códigos foram desenvolvidos para utilização no ambiente do MATLAB®, cuja facilidade de interface gráfica, permite a obtenção de animações que descrevem o processo evolutivo de dispersão do poluente no domínio discretizado, para um determinado período de tempo previamente escolhido.

2.1 Dispersão de agrotóxicos em *Esteros del Ibera*

Na região de *Esteros del Ibera* existem 5 produtores agrícolas que utilizam uma área de cerca de 2.500 ha para o plantio de arroz de várzea, utilizando aproximadamente 1,5 m³ de água por m² de arroz plantado, durante 100 dias. Nos canteiros, a lâmina d'água tem uma altura de 10 a 15 cm. Após sua utilização, grande parte evapora ou infiltra no solo e o restante escorre pelos canais de drenagem. A produção anual é de 6 ton/ha.

No cultivo do arroz, apesar de não existir uma lista específica homologada de pesticidas, na Argentina o IASCAV (Instituto Argentino de Sanidad y Calidad Vegetal) autoriza o uso de numerosos produtos, de acordo com a praga. Entretanto, o quadro 4.1 apresenta alguns dos mais usados na região de Iberá.

Com base nos dados apresentados na tabela 4.1, levando em consideração a dosagem usada pelos agricultores na preparação dos pesticidas e no esquema de aplicação, ou seja, número de aplicações e período de uso durante o ano, foram realizadas algumas simulações, cujos resultados são apresentados na seção seguinte.

O mapa de ventos (fig. 4.1, obtido de url: <http://www2.cptec.inpe.br>) foi utilizado para uma melhor avaliação do regime de ventos na região de Iberá, servindo para uma estimativa, em termos qualitativos, para a velocidade do vento na região considerada, tomando por base as indicações nas áreas mais próximas.

Na implementação dos códigos numéricos para a obtenção dos resultados apresentados mais adiante, como em Cantão (1998); Sossae (1995), foram desenvolvidas algumas rotinas específicas para este caso. Os códigos numéricos foram implementados no Matlab 6.1-R.12 em ambiente Sun/Unix. Na seção 3, mais adiante, é feita a análise dos resultados obtidos.

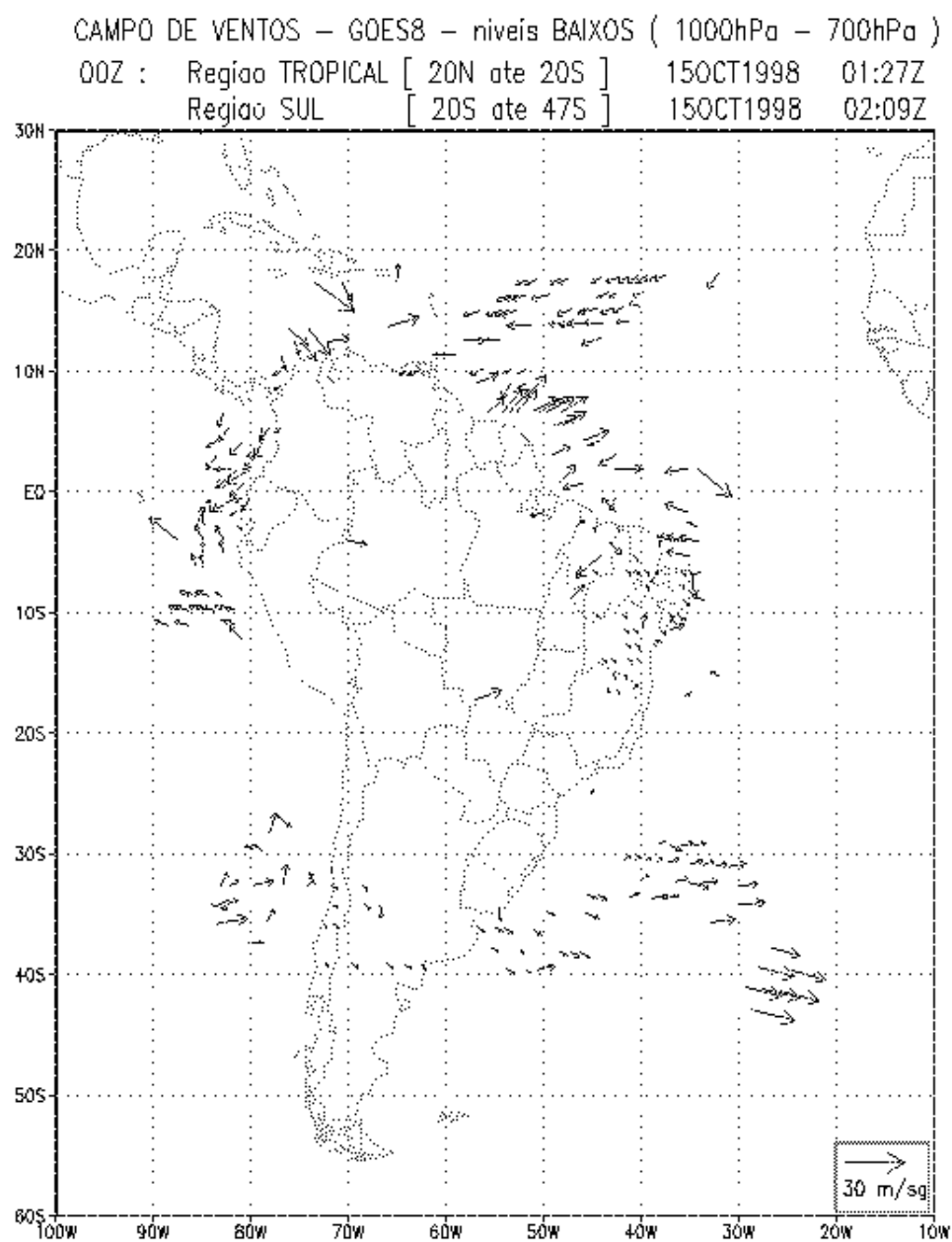


Figura 4.1: Mapa de ventos nas regiões Tropical e Sul

Tabela 4.1: Principais pesticidas usados no plantio do arroz na região de Iberá
Dados obtidos do relatório parcial do projeto INCO-ERB IC18-CT98-0262/UNICAMP

	Herbicidas	Inseticidas	Fungicidas
Marcas comerciais	Round up; Comand; Facett S.C.; Stam; Misil e Bagasagran	Furadán 47F; Decis e Thiodan	Benlate
Vendas anuais	17.500 Lts.	1.000 Lts.	500 Lts.
Fórmulas dos pesticidas mais usados: composição de rótulo	Glifosato 48%; Clomazone 48% ; Quinclorac 25%; Propanil 48%; Bentazón 48%	Deltametrina 5 %; Carbofurán 47%; Endosulfán 35%	Benomil 50%
Doses de cada marca comercial usada pelos agricultores na preparação dos pesticidas	Glisofato 2-4 L/ha; Clomazone 1-1,5 L/ha; Quinclorac 1-1,5 L/ha Propanil 4-6 L/ha; Bentazon 2-2,5 L/ha	Deltametrina 50-100 cc/ha; Endosulfán 1-3 L/ha; Carbofuran 5000 cm ³ /ha	Benomil 1 L/ha
Período de uso de cada marca durante o ano	Glisofato: Ago-Set; Clomazone, Propanil, Bentazon e Quinclorac: Set-Jan	Deltametrina e Endosulfán: Out-Jan; Carbofurán: Out-Nov	Benomil: Out-Fev
Número de aplicações de cada marca	Glisofato, Clomazone, Propanil, Bentazon e Quinclorac: 1 aplicação	Deltametrina e Endosulfán: 1 ou 2 aplicações	Benlate: 1 aplicação

2.2 Simulação de cenários no caso da dispersão só no meio aéreo

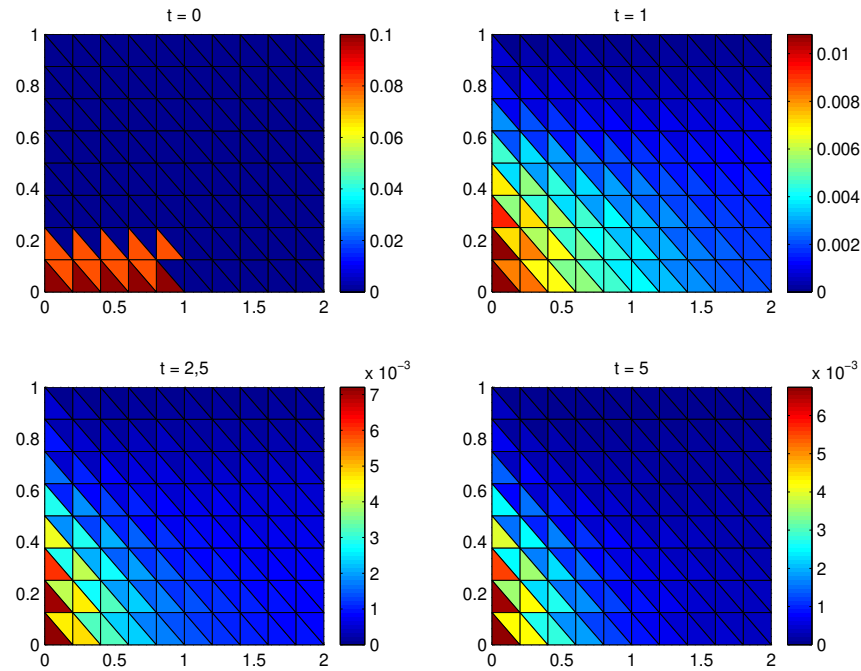
As três simulações a seguir foram obtidas, considerando diferentes discretizações do domínio aéreo mostrado na fig.1.5 (pg. 23), os dados apresentados na tabela 4.1, para uma mesma estimativa de condição inicial e supondo que não há fontes no interior do domínio.

No primeiro caso, considerou-se uma difusão moderada e a predominância de ventos fracos, ou melhor, com velocidade média inferior 5 km/h. Daí, foi feita a simulação para um cenário caracterizado pelos parâmetros constantes da tabela 4.2, cujos resultados estão apresentados nos gráficos da fig. 4.2.

Agora, para uma difusão moderada e supondo a predominância de ventos moderados, isto é, ventos com velocidade superior a 5 km/h e inferior a 15 km/h. Neste caso, os parâmetros utilizados na simulação do cenário 2 (fig.4.3), são os constantes da tabela 4.3.

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados na simulação do cenário 1

Parâmetros do modelo	Valores	Unidades
α_0	0,3	km^2/h
α_1	0,01	km/h
σ_u	0,001	h^{-1}
V_1	2,0	km/h
V_2	0,01	km/h
k_1	0,1	km/h
g_0	0,005	$1/(\text{km}.\text{h})$
Parâmetros da discretização	Valores	Unidades
Δx	0,2	km
Δy	0,125	km
Δt	0,025	horas



No. Peclet = 1,333

Figura 4.2: Simulação do cenário 1 - vento fraco e difusão moderada

Tabela 4.3: Parâmetros utilizados na simulação do cenário 2

Parâmetros do modelo	Valores	Unidades
α_0	0,15	km^2/h
α_1	0,01	km/h
σ_u	0,00015	h^{-1}
V_1	12,0	km/h
V_2	0,9	km/h
k_1	0,005	km/h
g_0	0,023	$\text{l}/(\text{km}.\text{h})$
obs.: $g_0 = 0 \forall t \geq 5$		
Parâmetros da discretização	Valores	Unidades
Δx	0,02	km
Δy	0,111	km
Δt	0,02	horas

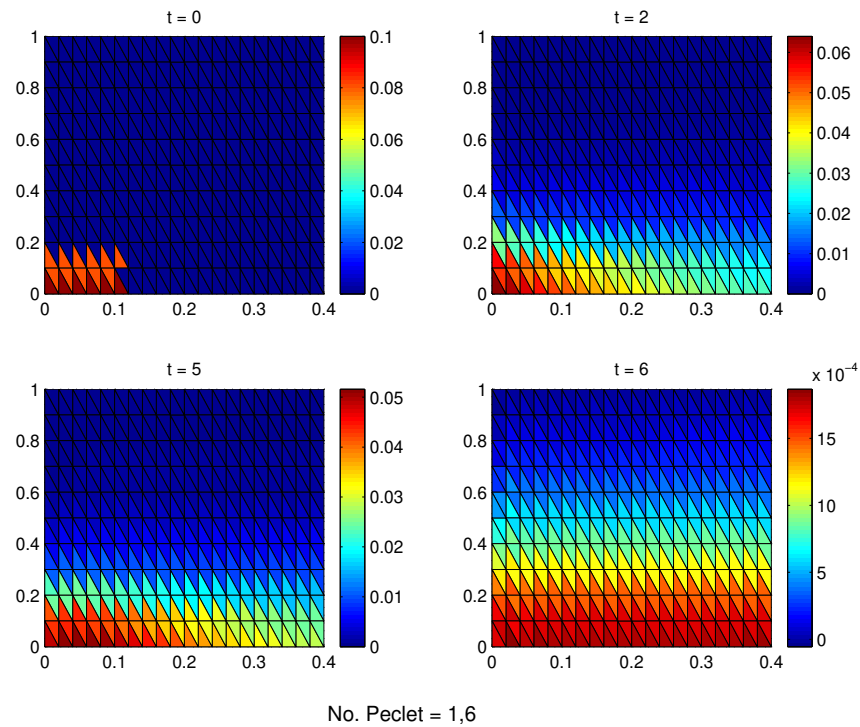


Figura 4.3: Simulação do cenário 2 - vento moderado e difusão moderada

Para a simulação do cenário 3 (fig. 4.4), considerando uma difusão alta e a predominância de ventos fortes, isto é, ventos com velocidade superior a 15 km/h. Neste caso, os parâmetros utilizados são os constantes da tabela 4.4, a seguir.

Tabela 4.4: Parâmetros utilizados na simulação do cenário 3

Parâmetros do modelo	Valores	Unidades
α_0	0,5	km ² /h
α_u	0,1	km/h
σ_u	0,001	h ⁻¹
V_1	20,0	km/h
V_2	0,2	km/h
k_1	0,0001	km/h
g_0	$0,1 e^{-0.0005t}$	l/(km.h)
Parâmetros da discretização	Valores	Unidades
Δx	0,046875	km
Δy	0,1	km
Δt	0,0333	horas

2.3 Simulação de cenários no caso da dispersão nos meios aéreo e aquático

No caso de poluentes que penetram na água, com a inclusão do meio aquático, o domínio considerado nas simulações apresentadas a seguir, para as diferentes discretizações, é como aquele mostrado na fig. 1.6 da pg. 25. O domínio foi escolhido com alguma regularidade de forma a simplificar os códigos implementados, para testar o modelo e o código.

Para as simulações a seguir, foi feita uma mesma estimativa da condição inicial, supondo que a fonte no domínio Ω é aquela dada por $\mathcal{F}$, através da descarga dos canais de drenagem no ponto $(x_L; y_L)$.

Na simulação do cenário 4, foi considerada uma difusão moderada e suposto a predominância de ventos fracos, ou seja, ventos com velocidade inferior a 5 km/h, cujos parâmetros são os constantes da tabela 4.5. Os resultados estão apresentados nos gráficos da figura 4.5.

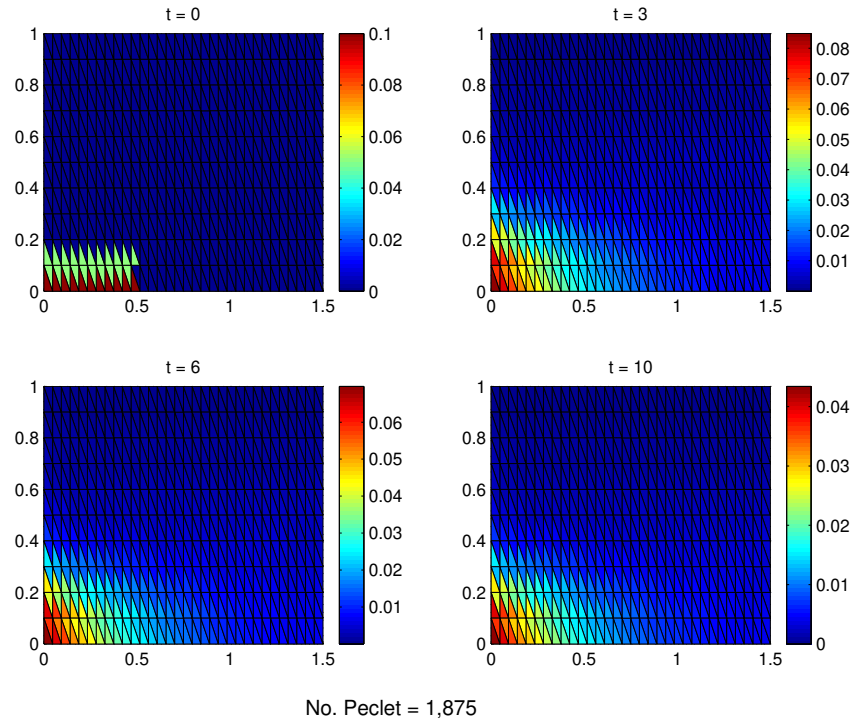


Figura 4.4: Simulação do cenário 3 - vento forte e difusão alta

Tabela 4.5: Parâmetros utilizados na simulação do cenário 4

Parâmetros do modelo					
Parâmetros	Valores	Unidades	Parâmetros	Valores	Unidades
α_0	0,11	km ² /h	A_0	0,5	l/(km ² h)
α_1	0,01	km/h	α_a	0,01	km ² /h
σ_u	0,0001	h ⁻¹	σ_a	0,0001	h ⁻¹
V_1	3,0	km/h	W_1	0,2	km/h
V_2	1,0	km/h	W_2	0,18	km/h
k_1	0,001	km/h	k_3	0,0001	km/h
β_{12}	0,02	km/h	β_{21}	0,01	km/h
g_0	0,5	l/(km.h)	κ	0,05	h ⁻¹
Parâmetros da discretização					
Parâmetros	Valores		Unidades		
Δx	0,0667		km		
Δy	0,1		km		
Δt	0,1		horas		

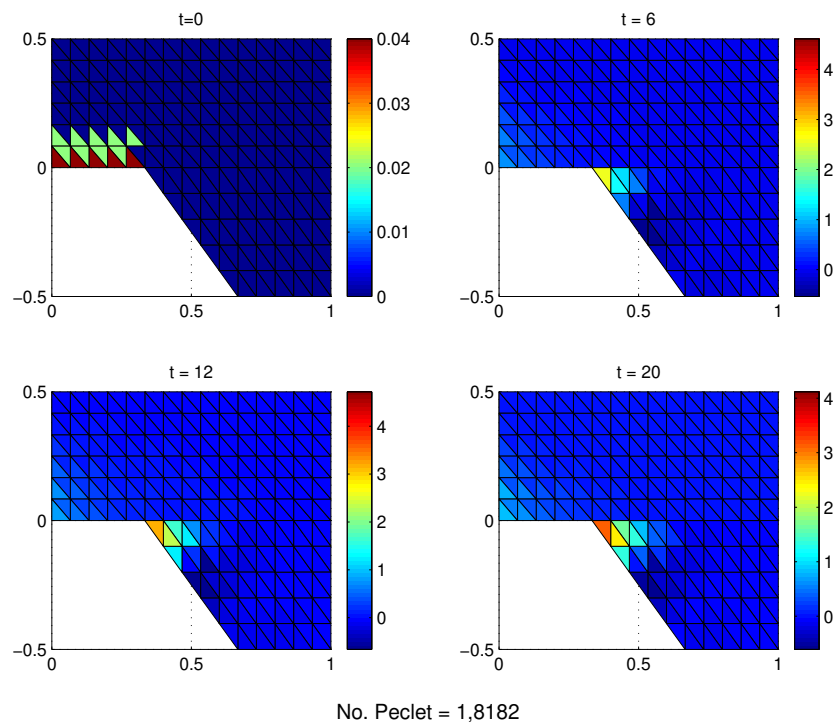


Figura 4.5: Simulação do cenário 4 - vento fraco e difusão moderada

Na simulação do cenário 5, as hipóteses são de difusão moderada e que haja a predominância de ventos moderados, isto é, ventos com velocidade compreendida entre 5 km/h e 15 km/h. Neste caso, os parâmetros utilizados para esta simulação (fig.4.6), são os constantes da tabela 4.6.

Na simulação do cenário 6 (fig. 4.7), foi considerada uma difusão alta e a predominância de ventos fortes, cujos parâmetros são os constantes da tabela 4.7.

Tabela 4.6: Parâmetros utilizados na simulação do cenário 5

Parâmetros do modelo					
Parâmetros	Valores	Unidades	Parâmetros	Valores	Unidades
α_0	0,3	km ² /h	A_0	0,5	1/(km ² h)
α_1	0,01	km/h	α_a	0,01	km ² /h
σ_u	0,0001	h ⁻¹	σ_a	0,0001	h ⁻¹
V_1	8,0	km/h	W_1	0,2	km/h
V_2	1,0	km/h	W_2	0,1	km/h
k_1	0,0001	km/h	k_3	0,00001	km/h
β_{12}	0,2	km/h	β_{21}	0,1	km/h
g_0	0,5	1/(km.h)	κ	0,5	h ⁻¹

Parâmetros da discretização		
Parâmetros	Valores	Unidades
Δx	0,0667	km
Δy	0,1	km
Δt	0,1	horas

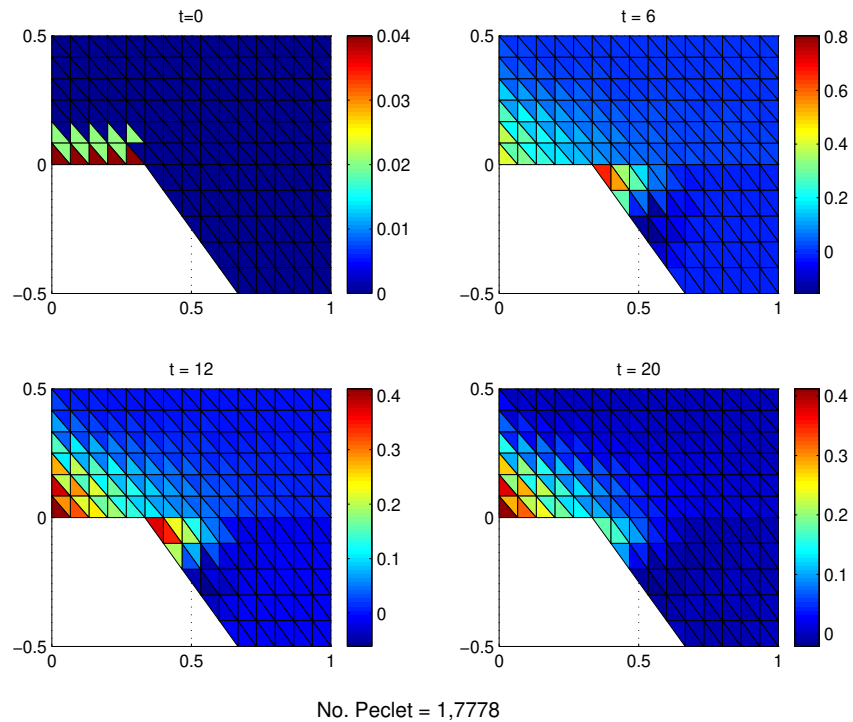


Figura 4.6: Simulação do cenário 5 - vento moderado e difusão moderada

Tabela 4.7: Parâmetros utilizados na simulação do cenário 6

Parâmetros do modelo					
Parâmetros	Valores	Unidades	Parâmetros	Valores	Unidades
α_0	0,5	km ² /h	A_0	0,25	l/(km ² h)
α_1	0,01	km/h	α_a	0,01	km ² /h
σ_u	0,0001	h ⁻¹	σ_a	0,0001	h ⁻¹
V_1	20,0	km/h	W_1	0,3	km/h
V_2	1,0	km/h	W_2	0,15	km/h
k_1	0,0001	km/h	k_3	0,00001	km/h
β_{12}	0,1	km/h	β_{21}	0,2	km/h
g_0	0,25	l/(km.h)	κ	0,0001	h ⁻¹

Parâmetros da discretização		
Parâmetros	Valores	Unidades
Δx	0,05	km
Δy	0,1	km
Δt	0,1	horas

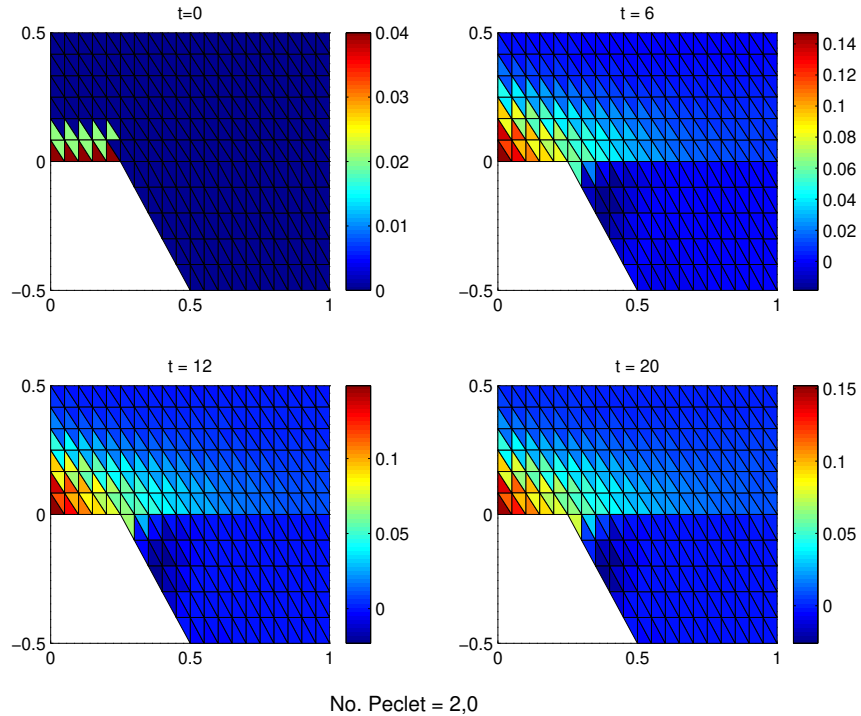


Figura 4.7: Simulação do cenário 6 - vento forte e difusão alta

3 Análise dos resultados

No primeiro cenário, foi estabelecida como condição inicial (em $t = 0$) uma concentração de 100 ml/km^2 em cada nó ao longo de Γ_1 (intersecção do plano vertical com o solo próximo da área de cultivo – nos gráficos, os 5 primeiros nós sobre o eixo x) e de 80 ml/km^2 nos nós adjacentes e acima destes. Os gráficos seguintes ($t = 0,5; 1$ e 2) mostram a dispersão do poluente pelo domínio com maior propagação na direção do eixo x (direção do vento predominante).

Pode-se observar também, uma concentração decrescente com a altura sobre o eixo y . O que reflete a entrada do poluente, por deriva, (condição estabelecida pela equação 1.4.2), ao longo desta fronteira. Com o passar do tempo, este poluente é transportado pelo domínio concentrando-se nos pontos mais próximos ao eixo x , de acordo com a hipótese do campo de velocidade de transporte para o meio aéreo ($\vec{W}$) que, neste caso, foi de vento fraco na direção de x (2 km/h) e uma queda a $0,9 \text{ km/h}$ na direção de y (componente vertical de $\vec{W}$).

No segundo cenário, a condição inicial foi estabelecida de modo semelhante ao do primeiro cenário, com concentração de 100 ml/km^2 nos 5 primeiros nós do eixo x e de 80 ml/km^2 nos nós adjacentes acima destes. Neste cenário, supondo que a entrada de poluente no domínio, por deriva, aconteceu somente até o instante $t = 5$. Para $t > 5$ foi considerado $g = 0$ na equação 1.4.2. Com isso, o gráfico seguinte ($t = 6$) mostra uma queda da concentração do poluente em todo o domínio, mas com acúmulo na região mais próxima do eixo x .

Levando em conta a hipótese de vento moderado na direção de x (12 km/h), os resultados mostram que o processo de dispersão do poluente foi mais rápido nesta direção, se comparado aos resultados da primeira simulação, como era de se esperar.

O terceiro cenário apresenta resultados semelhantes ao primeiro, diferenciando-se deste pela concentração significativamente menor, uma dispersão mais rápida na direção do eixo x e maior concentração nas suas proximidades. O que está de acordo com as hipóteses de vento forte (21 km/h) na direção de x , difusão alta ($\alpha_u = 0,55 + 0,1y$) e baixa entrada de poluentes por deriva (considerando $g_0 = 0,1e^{-0.0005t} \text{ l/(km.h)}$).

Nas simulações seguintes, com o novo domínio incluindo o meio aquático, ficou

evidente a contaminação da lagoa, nos três cenários considerados, a partir do ponto de descarga $P = (x_L; y_L)$, assim como a passagem pela interface ar-água.

Nos três casos, a velocidade do vento influenciou na rapidez do processo de contaminação do meio aquático, ou seja, na presença de ventos moderados ou fortes a contaminação se deu de forma mais acelerada que na simulação do cenário 4.

Neste sentido, o modelo pode ser útil para o estudo de riscos de contaminação e, eventualmente, através do código numérico seria possível avaliar estratégias de contenção e/ou tratamentos dos efluentes dos canais de descarga, de modo a minimizar os danos ecológicos.

Esta seria, portanto, uma grande contribuição do presente trabalho. Uma vez que o grau de contaminação do meio aquático irá se propagar por toda a cadeia trófica do sistema considerado. Com o agravante que, a cada nível da cadeia, a biomagnificação¹ do poluente se torna cada vez mais alta, podendo chegar a níveis toxicológicos graves. Isto teria um perigoso efeito nas populações ribeirinhas que, de uma forma ou de outra, estariam se utilizando dos recursos naturais de uma região contaminada.

4 Conclusões

Nas simulações apresentadas na seção 2, os resultados obtidos mostraram-se de acordo com as expectativas para os fenômenos considerados. Naqueles cenários, o comportamento do processo de dispersão apresentado nos gráficos foi compatível com o que ocorre em situações reais.

Apesar das limitações impostas pela condição de Peclet, foi possível fazer simulações com condições de vento bem adversas, que impuseram um número de Peclet bem próximo de seu limite. Mesmo assim, as oscilações numéricas inerentes neste tipo de aproximação ocorreram apenas nas primeiras iterações. De modo que o comportamento do processo de dispersão do poluente pode ser avaliado, qualitativamente ao longo do tempo, em termos de seu efeito sobre o domínio.

Outra vantagem na escolha dos métodos de aproximação (Petrov/Galerkin – para a discretização espacial – e Crank-Nicolson – para a discretização temporal) pode ser percebida

¹cf. Connel e Miller (1984)

no tratamento de descontinuidades. Como nos três últimos cenários (fig. 4.5, 4.6 e 4.7), em que a fonte de poluentes foi colocada no ponto de intersecção de Γ_1 , Γ_2 e Γ_3 , que foi denominado por P. Os resultados das aproximações mostraram-se coerentes com situações em que ocorre o efeito *run off*, onde se observa um salto na concentração do poluente na vizinhança da interface ar-água.

No caso das limitações impostas pela condição de Peclet, estas podem ser contornadas usando técnicas como SUPG (Streamline Upwind Petrov/Galerkin), que dão um tratamento adequado para as oscilações indesejáveis (Brooks e Hughes, 1982; Heinrich et al., 1977), nas situações de advecção dominante, como nos casos de vento moderado e vento forte. É o que pretendemos fazer num futuro próximo, como primeiro aperfeiçoamento do presente trabalho.

Os modelos e os códigos numéricos aqui apresentados poderão integrar futuros estudos sobre o manejo sustentável de regiões de proteção próximas de áreas de intenso cultivo agro-industrial, incluindo recomendações e/ou políticas de proteção ambiental.

Considerações finais

Neste momento, cabe uma reflexão do que foi desenvolvido nos capítulos precedentes, do ponto de vista da contribuição para o conhecimento de um modo geral, no desenvolvimento desta tese.

Em primeiro lugar, quanto ao modelo matemático aqui proposto, podem ser destacados os seguintes pontos, em termos de originalidade:

- No modelo do sistema aéreo:
 - A fonte por deriva.
- No modelo do sistema ar-água:
 - A fonte por *run-off* e
 - O acoplamento dos sistemas.

Outra contribuição original foi a abordagem numérica e algorítmica, ao longo da fronteira ar-água, com a dupla atribuição dos nós ao longo desta fronteira.

Merece ser destacada, também, a compatibilização da formulação do problema para a demonstração de existência e unicidade de solução.

Temos consciência das limitações, tanto do modelo proposto, quanto do algoritmo implementado. Neste sentido, novos desafios apontam, em primeiro lugar, para a melhoria do algoritmo de forma a tratar o problema para domínios mais irregulares, o que já vem acontecendo dentro de nosso grupo de pesquisa em Ecologia Matemática.

Em relação às possibilidades para trabalhos futuros, podem ser explorados os seguintes pontos:

- Demonstração de existência e unicidade de solução para o sistema acoplado;
- Uso de elementos finitos de ordem superior;
- Análise e simulação para um domínio tridimensional;
- Inclusão de SUPG (cf. Cantão (1998); Oliveira (2003));
- Inclusão de características *fuzzy*.

O uso da “modelagem fuzzy”, na linha do que já vimos desenvolvendo com o chamado processo “fuzzyness” para a condição inicial (Diniz et al., 2001a,b), pode ser mais apropriado nos casos em que há incerteza ou imprecisão na condição inicial.

Para o tratamento dos parâmetros nos modelos, como em Barros et al. (2000); Hüllermeier (1993), pode ser adequado o uso de *fuzzy*, uma vez que a presença de vento traz, naturalmente, alguma incerteza para o termo advectivo. Assim, podemos vislumbrar uma série de trabalhos futuros que podem melhorar o modelo aqui proposto.

Isto posto, fica evidente que este trabalho não se encerra por aqui. Buscando melhorar tanto os modelos quanto os algoritmos, faz-se necessária a elaboração de projetos em conjunto com pesquisadores de outras áreas, como por exemplo, as de Engenharia Química e Engenharia Ambiental – em cooperação com outras instituições como EMBRAPA e CETESB – garantido assim um envolvimento interdisciplinar e interinstitucional para o aprimoramento do presente trabalho.

Bibliografia

- Alloway, B. J., D. C. Ayres, 1997. Chemical Principles of Environmental Pollution. Blackie Academic & Professional, London.
- Amann, H., 1995. Linear and Quasilinear Parabolic Problems. Birkhäuser, Basel.
- Amann, H., 1978. Invariant sets and existence theorems for semilinear parabolic and elliptic systems. J. Math. Analysis and Applications 65, 432–467.
- Barros, L. C., R. C. Bassanezi, P. A. Tonelli, 2000. Fuzzy modelling in population dynamics. Ecological Modelling 128, 27–33.
- Bassanezi, R. C., 2002. Ensino–aprendizagem com modelagem matemática. Ed. Contexto, S. Paulo.
- Bassanezi, R. C., W. C. Ferreira Jr., 1988. Equações Diferenciais com Aplicações. Ed. Harbra, S. Paulo.
- Becker, E. B., G. F. Carey, J. T. Oden, 1981. Finite Elements: an introduction. Vol. 1. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Boyce, W. E., R. C. DiPrima, 1979. Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno. Ed. Guanabara Dois, R. Janeiro.
- Bressan, A., 2000. Hyperbolic Systems of Conservation Laws. Oxford Lectures Series in Mathematics and its Applications, vol. 20. Oxford Univ. Press, Oxford.

- Brooks, A. N., T. J. R. Hughes, 1982. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 32, 199–259.
- Cantão, R. F., 1998. Modelagem e simulação numérica de derrames de óleo no canal de São Sebastião, SP. Tese de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Canziani, G., C. Rossi, S. Loisel, *et al.*, 1998. Projeto “*Esteros del Iberá*”, Univ. Tandil (UNCPBA-Argentina) e Univ. Siena (Itália).
- Carey, G. F., J. T. Oden, 1981. *Finite Elements: mathematical aspects*. Vol. 4. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Carnahan, B., H. A. Luther, J. O. Wilkes, 1969. *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, N. York.
- Castro, S. P. E., 1993. Modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes no ar. Tese de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- C.D.C. Environmental Health, 2001. National report on human exposure to environmental chemicals, url: <http://www.cdc.gov/nceh/dls/report>. Centers for Disease Control and Prevention for Environmental Health. Atlanta, Georgia. 72p.
- Christie, I., D. Griffiths, A. R. Mitchell, O. C. Zienkiewicz, 1976. Finite elements methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 10, 1389–1396.
- Connel, D. W., G. J. Miller, 1984. *Chemistry and Ecotoxicology of Pollution*. John Wiley & Sons, N. York.
- Diniz, G. L., 1994. A mudança no habitat de populações de peixes: De rio a represa - o modelo matemático. Tese de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Diniz, G. L., J. F. R. Fernandes, J. F. C. A. Meyer, L. C. Barros, 2001a. A fuzzy Cauchy problem modelling the decay of the biochemical oxygen demand in water, *Proceedings of 9th IFSA World Congress and 20th NAFIPS International Conference*, Vancouver/BC, Canada, Jul 25–28. 512–516.

- Diniz, G. L., J. F. C. A. Meyer, L. C. Barros, 2001b. Solução numérica para um problema de Cauchy *fuzzy* que modela o decaimento radioativo. TEMA – Tendências em Matemática Aplicada, Seleta do XXIII CNMAC/2000, Santos/SP. vol. 2.1, 63–72.
- Edelstein-Keshet, L., 1988. Mathematical Models in Biology. Random-House, N. York.
- Figueiredo, D. G., 1979. Equações diferenciais aplicadas. IMPA, R. Janeiro.
- Gore, A., 1993. A Terra em balanço: ecologia e o espírito humano. Augustus, S. Paulo.
- Haque, R., J. Falco, S. Cohen, C. Riordan, 1980. Role of Transport and Fate Studies in the Exposure Assessment and Screening of Toxic Chemicals in: *Dynamics, Exposure and Hazard Assessment of Toxic Chemicals*. Ann Arbor Science, Ann Arbor, Cap. I, pp. 47–67p.
- Heinrich, J. C., P. S. Huyakorn, A. R. Mitchell, O. C. Zienkiewicz, 1977. An upwind finite elements scheme for two-dimensional convective transport equation. Int. J. for Numerical Methods in Engineering 11, 131–143.
- Hüllermeier, E., 1993. An approach to modelling and simulation of uncertain dynamical systems, submitted to Int. J. of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-based Systems.
- Kardestuncer, H., D. H. Norrie, 1987. Finite Element Handbook. McGraw-Hill, N. York.
- Kolmogorov, A. N., S. V. Fomin, 1976. Elementos da Teoria das Funções e de Análise Funcional, traduzido do russo por M. Dombrovsky. Ed. Mir, Moscou.
- Lacaz, T. M. V. S., 1999. Análise de problemas populacionais intraespecíficos com difusão densidade-dependente. Tese de Doutorado, IMECC-Unicamp, Campinas/SP.
- Lions, J. L., 1961. Equations Differentielles Operationelles. Springer.
- Loehr, R. C., 1984. Pollution Control for Agriculture. Academic Press Inc., Orlando.
- Marchuk, G. I., 1986. Mathematical models in environmental problems. Studies in Mathematical and its Applications, Vol. 16. North-Holland, Amsterdam.

- Mellanby, K., 1982. *Biologia da poluição*, tradução Lúcia Baugartner Lamberti. EDUSP, S. Paulo.
- Meyer, J. F. C. A. e G. L. Diniz, 1997. Changes of habitat of fish populations: a mathematical model. *Int. J. Math. Educ. Sci. Technol.* 28 (4), 519–529.
- Mistro, D. C., 1992. O problema de poluição em rios por mercúrio metálico: modelagem e simulação. Tese de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Moreira, J. C., L. C. Wrobel, 1983. Um modelo de elementos finitos para análise de dispersão, relatório interno COPPE-UFRJ.
- National Research Council – USA, 2000. Scientific frontiers in developmental toxicology and risk assessment, url: <http://www.nap.edu/books/0309070864/html/>. National Academy Press, 10–16.
- Neto, F. L., J. Bertoni, 1990. *Conservação do solo*. Ed. Icone, S. Paulo.
- Odum, E. P., 1988. *Ecologia* – trad. Christopher J. Tribe. Ed. Guanabara, R. Janeiro.
- Okubo, A., 1980. *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer, Berlin.
- Oliveira, R. F., 2003. O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande/RJ: modelagem, análise numérica e simulações. Tese de Doutorado, IMECC-Unicamp, Campinas/SP.
- Orsini, C., M. F. Andrade, 1997. Panorama da poluição do ar no Brasil in: *Panoramas da degradação ambiental do ar, da água doce e da terra no Brasil, organizado por Aldo da Cunha Rebouças*. Academia Brasileira de Ciências (Ed.), R. Janeiro, Cap. I, 7–57.
- Pregnotatto, S. A., 2002. Mal-das-cadeiras em capivaras: Estudo, modelagem e simulação de um caso. Tese de Doutorado, FEEC-Unicamp, Campinas/SP.
- Rebouças, A. C., 1997a. Panorama da poluição da água no Brasil in: *Panoramas da degradação ambiental do ar, da água doce e da terra no Brasil, organizado por Aldo da Cunha Rebouças*. Academia Brasileira de Ciências (Ed.), R. Janeiro, Cap. II, 58–95.

- Rebouças, A. C., 1997b. Panoramas da degradação ambiental do ar, da água doce e da terra no Brasil. Academia Brasileira de Ciências (Ed.), R. Janeiro.
- Seinfeld, J., 1986. Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. John Wiley & Sons, N. York.
- Slinn, W. G. N., 1980. Relationships between removal and residence times for Atmospheric pollutants. *AIChE Symposium Series*, #196, vol. 76. Air Pollution: 1. Energy Needs. 185-203.
- Simmons, G. F., 1963. Introduction to Topology and Modern Analysis. McGraw-Hill, N. York.
- Soderquist, C. J., J. B. Bowers, D. G. Crosby, 1977. Dissipation of molinate in a rice field. *J. Agric. Food Chem.* 25, 940-945.
- Sossae, R. C., 1995. Dinâmica populacional densidade-dependente em processos de dispersão e migração. Tese de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.
- Thibodeaux, L. J., 1979. Chemodynamics. John Wiley & Sons, N. York.
- Universidade Mata Atlântica, 2002. O Estado do Mundo. Ed. UMA, S. Paulo.

Apêndice A

Conceitos e definições

Neste apêndice, são apresentados alguns conceitos básicos de Análise Funcional, utilizados nos capítulos 2 e 3, de modo a facilitar a compreensão dos termos ali empregados. São apresentadas, também, algumas definições cuja terminologia é mais específica, ou que não tenham sido dadas no decorrer dos capítulos.

1 Conceitos variacionais

Nas subseções seguintes serão abordados alguns conceitos básicos de forma a definir os termos empregados ao longo desta tese. Outros conceitos mais comuns, que por ventura tenham sido omitidos, podem ser encontrados em referências como, por exemplo, Bassanezi e Ferreira Jr. (1988) – para equações diferenciais, ou Kolmogorov e Fomin (1976) e Simmons (1963) – para Análise Funcional.

1.1 Distribuições

Para o estudo de soluções de equações diferenciais parciais dentro da classe de funções localmente integráveis, possivelmente funções descontínuas, a diferenciação precisa ser interpretada num sentido generalizado. Aqui, será feita uma revisão breve de alguns conceitos

básicos sobre distribuições.

Seja Ω um subconjunto aberto de $\mathbb{R}^m$. Para todo compacto $K \subset \Omega$, denotamos por $\mathcal{D}_K(\Omega)$ o conjunto de todas as funções de classe $\mathcal{C}^\infty$ definidas de Ω em $\mathbb{R}$ que se anulam fora de K . Denota-se por $\mathcal{D}(\Omega)$ o conjunto de todas as funções $\mathcal{C}^\infty$, $\phi : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ com suporte compacto contido em Ω .

Denomina-se multi-índice à m-upla de inteiros não negativos $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$. A todo multi-índice α associamos o operador diferencial:

$$D^\alpha = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{\alpha_1} \cdots \left(\frac{\partial}{\partial x_m} \right)^{\alpha_m}$$

com ordem $|\alpha| = \alpha_1 + \cdots + \alpha_m$. Para cada $N \geq 0$, definimos a norma:

$$\|\phi\|_N = \max \{ |D^\alpha \phi(x)|; x \in \Omega, |\alpha| \leq N \}.$$

Com as notações acima, o espaço de *distribuições* a valores vetoriais, denotado por $\mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^n)$, é o conjunto de todas as aplicações $\Lambda : \mathcal{D}(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R}^n$, com a seguinte propriedade:

- Para todo compacto $K \subset \Omega$, existem um inteiro N não-negativo e uma constante C , tais que:

$$|\Lambda(\phi)| \leq C \|\phi\|_N \quad \forall \phi \in \mathcal{D}_K(\Omega).$$

Se existe algum inteiro N para o qual a inequação acima vale $\forall K$ (possivelmente com diferentes valores de C), o menor desses N determina a *ordem* de Λ . Se Λ tem ordem 0, então tal aplicação pode ser estendida por continuidade ao conjunto de todas as funções contínuas $\varphi : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ com suporte compacto. Neste caso, Λ pode ser identificada com a medida do vetor sobre Ω .

A *função característica* de um conjunto K é definida por:

$$\chi_K(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in K, \\ 0 & \text{se } x \notin K. \end{cases}$$

Dizemos que uma função $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^n$ é *integrável localmente* se, para todo compacto $K \subset \Omega$, o produto $f \cdot \chi_K$ de f pela função característica de K é integrável o que denotamos por $f \in \mathcal{L}_{loc}^1$.

- Uma sequência de funções $(f_\nu)_{\nu \geq 1}$ converge para $f \in \mathcal{L}_{loc}^1$ se a sequência $(f_\nu) \cdot \chi_K \in \mathcal{L}^1$, para todo conjunto compacto K .
- Toda $f \in \mathcal{L}_{loc}^1(\Omega; \mathbb{R}^n)$ determina uma distribuição de ordem 0, definida por:

$$\Lambda_f(\phi) = \int_{\Omega} f(x)\phi(x)dx \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

- Se α é um multi-índice e $\Lambda \in \mathcal{D}'(\Omega)$, então a derivada $D^\alpha \Lambda$ é a distribuição:

$$D^\alpha \Lambda(\phi) = (-1)^{|\alpha|} \Lambda(D^\alpha \phi) \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

- Se uma função f é N vezes continuamente diferenciável e $|\alpha| \leq N$, então usando a notação acima tem-se $D^\alpha \Lambda_f = \Lambda_{D^\alpha f}$.

1.2 Diferenciabilidade de funções Lipschitz contínuas

Seja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$. Dizemos que f é *diferenciável* num ponto x_0 , se existe uma aplicação linear $Df(x_0) : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ tal que:

$$\lim_{w \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + w) - f(x_0) - [Df(x_0)]w}{|w|} = 0.$$

Dizemos que f é *Lipschitz contínua*, se $|f(x) - f(y)| \leq L|x - y|$ para alguma constante L e x, y no domínio de f . Um resultado importante que se tem para funções de uma variável, é que toda função que é Lipschitz contínua é absolutamente contínua e, portanto, diferenciável. O teorema a seguir estende este resultado para funções de várias variáveis, e usa o conceito de quase toda parte da Teoria da Medida (denotado por “qtp”).

Teorema 1.1 (Rademacher). *Seja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ localmente Lipschitz contínua. Então f é diferenciável qtp.*

Prova: A demonstração deste teorema se encontra em (Bressan, 2000, Teor. 2.8 – Cap.2, pg.23–25). □

1.3 Convergência fraca de medida e solução fraca

Um conceito básico muito utilizado em Teoria da Medida e Análise Funcional é o da convergência fraca, descrito a seguir.

Denominando $\mathcal{C}_C(\Omega)$ o espaço normado de todas as funções contínuas $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ com suporte compacto, cuja norma é dada por: $\|u\| = \sup_{x \in \Omega} |u(x)|$. O completado deste espaço é o espaço de Banach $\mathcal{C}_0(\Omega)$ de todas as funções contínuas f que têm a seguinte propriedade:

$$\forall \epsilon > 0 \text{ existe um compacto } K \subset \Omega, \text{ tal que } |f(x)| < \epsilon, \forall x \notin K$$

Sejam Ω um aberto de $\mathbb{R}^n$ e μ uma medida sobre Ω . O teorema de representação de Riesz estabelece um isomorfismo isométrico entre o espaço $\mathcal{M}(\Omega)$ das medidas limitadas sobre Ω , munido da norma $\|\mu\| := |\mu|(\Omega)$ e o espaço dual $\mathcal{C}_0(\Omega)^*$, cujos elementos são funcionais lineares contínuos sobre $\mathcal{C}_0(\Omega)$. Isto é, para toda $\mu \in \mathcal{M}(\Omega)$ a aplicação

$$f \mapsto \int_{\Omega} f \, d\mu$$

é um funcional linear limitado. Mais ainda:

$$\sup_{f \in \mathcal{C}_0(\Omega), \|f\| \leq 1} \left| \int_{\Omega} f \, d\mu \right| = |\mu|(\Omega).$$

Definição 1.1. Diz-se que uma sequência de medidas $\mu_\nu \in \mathcal{M}(\Omega)$ converge fracamente para μ e denota-se $\mu_\nu \rightharpoonup \mu$, se

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f \, d\mu_\nu = \int_{\Omega} f \, d\mu \quad \forall f \in \mathcal{C}_C(\Omega).$$

Outro conceito importante em Análise Funcional é o de solução fraca, que tem sua aplicação no campo das soluções descontínuas, ou soluções no sentido de distribuições para sistemas onde se tem a lei de conservação satisfeita. A vantagem de se trabalhar com este tipo de solução, está no fato de que nenhuma regularidade é exigida a priori, como por exemplo, o conjunto de pontos de descontinuidade pode até ser denso. Isto amplia, consideravelmente, o conjunto de candidatas à solução. A definição para este tipo de solução, apresentada a seguir, é dada em Bressan (2000).

Definição 1.2 (Solução fraca). Seja $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ um campo vetorial suave. Uma função mensurável $u = u(x, t)$, definida sobre um domínio aberto $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, com imagem em $\mathbb{R}^n$, é uma *solução fraca*, ou no sentido de distribuições, para o sistema¹ com a lei de conservação:

$$u_t + f(u)_x = 0 \quad (\text{A.1.1})$$

Se, para toda função de classe $\mathcal{C}^1$, $\phi : \Omega \mapsto \mathbb{R}^n$, com suporte compacto, u satisfaz a equação:

$$\iint_{\Omega} [u\phi_t + f(u)\phi_x] dx dt = 0. \quad (\text{A.1.2})$$

Outros conceitos variacionais podem ser encontrados em Bressan (2000); Amann (1995) e Kolmogorov e Fomin (1976).

2 Conceitos Ambientais

A tabela 1.1 da subseção 2.1 (pg. 9) introduz o conceito de tempo de residência que merece uma apresentação mais detalhada de sua definição e de sua estimativa.

Segundo, Seinfeld (1986) o ciclo global de uma determinada substância é determinado por todas as fontes significativas e mecanismos de perda na elaboração do balanceamento do material. Se M é a massa total de material num reservatório, então a equação de balanço é dada por:

$$\frac{dM}{dt} = P + E - R - S$$

onde $\left\{ \begin{array}{l} P = \text{taxa de produção total de massa} \\ E = \text{taxa de entrada total de massa} \\ R = \text{taxa de remoção total de massa} \\ S = \text{taxa de saída total de massa} \end{array} \right.$

¹Os índices nas equações A.1.1 e A.1.2 referem-se às derivadas parciais de u .

Uma constante de tempo característica τ_r , de cada substância dentro de um reservatório, é definida por:

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{M} \frac{dM}{dt} = \frac{P + E}{M} - \frac{R + S}{M}$$

Com isso, podem ser definidas também as seguintes constantes:

$$\begin{aligned}\tau_P &= \frac{M}{P} && \text{tempo de produção,} \\ \tau_E &= \frac{M}{E} && \text{tempo de entrada,} \\ \tau_R &= \frac{M}{R} && \text{tempo de remoção,} \\ \tau_S &= \frac{M}{S} && \text{tempo de saída;}\end{aligned}$$

a taxa de crescimento total:

$$\tau_C^{-1} = \tau_P^{-1} + \tau_E^{-1}$$

e a taxa de decaimento total:

$$\tau_D^{-1} = \tau_R^{-1} + \tau_S^{-1}.$$

Assim, temos que:

$$\frac{1}{\tau_r} = \frac{1}{\tau_C} - \frac{1}{\tau_D}.$$

Em regime de estado estacionário, $dM/dt = 0$ e $P + E = R + S$, daí, $\tau_C = \tau_D$ e $\tau_r \rightarrow \infty$. Desta forma, em média, o tempo de residência de um dado composto num reservatório, é dado por (Slinn, 1980):

$$\tau = \frac{M}{P + E} = \frac{M}{R + S} \quad (\text{A.2.1})$$

Como exemplo, o tempo de residência de compostos sulfurosos na troposfera pode ser obtido usando a definição dada pela eq. A.2.1 e os seguintes dados (Seinfeld, 1986):

- A concentração média de compostos sulfurosos é: 1 ppb (parte por bilhão);
- A massa de ar da troposfera é em torno de $4 \times 10^{21}g$, o que nos dá uma massa do composto sulforoso: $M \cong 4 \text{ Tg}$ (Teragramas);

- As fontes naturais e antropogênicas destes compostos contribuem com um crescimento por volta de 200 Tg/ano.

Assim, o tempo médio de residência de tais compostos sulfurosos na troposfera pode ser estimado por:

$$\tau \cong \frac{4Tg}{200Tg/ano} \cong 1 \text{ semana.}$$

Apêndice B

Códigos fontes

Neste apêndice, são apresentados os códigos numéricos utilizados na implementação do método numérico escolhido para as aproximações da solução do problema. Foram utilizados dois códigos, um para o caso dos poluentes não-solúveis e outro para o caso de poluentes solúveis, uma vez que os domínios são bem distintos e, conseqüentemente, suas discretizações. Ao final (seção 2), é apresentado o código implementado no Mathematica[®] para o cálculo das integrais dadas pelos produtos internos que aparecem nas equações 2.4.5 e 3.3.4.

1 Códigos para o MATLAB[®]

O código a seguir, foi implementado em ambiente Sun/Unix - no Matlab[®] versão 6.1.0.450 Release 12.1, para as simulações de poluentes não-solúveis, figuras 4.2, 4.3 e 4.4, do capítulo 4 (pg. 59 e 62, respectivamente).

1.1 Para a dispersão no meio aéreo

```
1 %  
2 %      Aproximacao de um sistema linear para simular a dispersao  
3 %      de poluente nao-soluvél num dominio retangular  
4 %
```

```

5  clear all; t0=clock;
6  %
7  %      parametros do modelo
8  %
9  a0=0.3; au=0.01;      % componentes do termo difusivo
10 g0=0.005; g1=0; g2=0;% para as escolhas de deriva: g0 ou g1*y ou g2*sqrt(y)
11 sgu=0.001;           % coef. do decaimento
12 v1= 0.4e+1;          % componente horizontal advectiva
13 v2= 0.1e-1;          % componente vertical advectiva
14 k1= 0.1;             % permeabilidade do solo
15 %
16 %      parametros do dominio (espaco e tempo)
17 %
18 xmax=1.50; ymax=1.0;
19 tfinal=5.0;
20 %
21 %      parametros da discretizacao
22 %
23 nx=10;               % no. de subintervalos em x
24 nxs=4;               % no. de subintervalos em Gama-1 (solo)
25 ny=8;                % no. de subintervalos em y
26 nnx=nx+1;           % no. de nos na direcao x
27 nny=ny+1;           % no. de nos na direcao y
28 npt=200;            % no. de passos no tempo
29 dx=xmax/nx; % comprimento do subintervalo na direcao x
30 dy=ymax/ny; % comprimento do subintervalo na direcao y
31 %
32 %      parametros auxiliares da discretizacao
33 %
34 dxy=dx*dy;
35 dx dy=dx/dy;
36 dy dx=dy/dx;
37 dt=tfinal/npt;
38 mdt=dt/2;
39 nn=nnx*ny;          % no. total de nos nao-nulos
40 ntr=2*nx*ny; % no. total de triangulos
41 nty=2*ny;           % no. de triangulos na direcao y
42 %
43 %      calculo do no. de Peclet
44 %
45 npec = [v1*dx/(a0+au*ymax); v2*dy/(a0+au*ymax)];
46 %

```

```

47 %      montagem da malha de elementos finitos
48 %
49 malha=zeros(nn,3);
50 k=0;
51 for i=1:nx;
52     for j=1:ny-1;
53         k=k+1;
54         ind = (i-1)*ny + j;
55         malha(k,1)=ind;
56         malha(k,2)=ind+ny;
57         malha(k,3)=ind+1;
58         k=k+1;
59         malha(k,1)=ind+ny+1;
60         malha(k,2)=ind+1;
61         malha(k,3)=ind+ny;
62     end;
63     k=k+1;
64     ind=i*ny;
65     malha(k,1)=ind;
66     malha(k,2)=ind+ny;
67     k=k+1;
68     malha(k,3)=ind+ny;
69 end;
70 %
71 %      montagem da malha de coordenadas dos nos
72 %
73 k=0;
74 for i=1:nnx
75     x = (i-1)*dx;
76     for j = 1:nny
77         y = (j-1)*dy;
78         k = k + 1;
79         coord(k,1) = x;
80         coord(k,2) = y;
81     end;
82 end;
83 %
84 %      condicao inicial
85 %
86 u0 = zeros(nn,1);
87 for i = 1:ny:(nxs)*nny
88     u0(i)=0.1;

```

```

89     u0(i+1)=0.1;
90 end;
91 mm = max(u0);
92 %
93 %     submatrizes de rigidez
94 %
95 %     (fi-j)*(fi-i)
96 %
97 mfi=(dxy/24)*[2 1 1; 1 2 1; 1 1 2];
98 %
99 %     [Sqrt(y)*(dfi-j/dx)*fi-i] e [(dfi-j/dy)*fi-i]
100 %     para os triangulos inferiores e superiores
101 %
102 mdx1i=[ 1 -1 0; 0 0 0; 0 0 0];
103 mdx2i=[ 0 0 0; 1 -1 0; 0 0 0];
104 mdx3i=[ 0 0 0; 0 0 0; -4 4 0];
105 mdx1s=[-1 1 0; -1 1 0; 0 0 0];
106 mdx2s=[ 0 0 0; 0 0 0; 4 -4 0];
107 %
108 mdy=(dx/6)*[-1 0 1; -1 0 1; -1 0 1];
109 %
110 %     ( (alpha_0 + alpha_u y)*grad(fi-j) | grad(fi-i) )
111 %
112 mg1=[dxdy + dydx -dydx -dxdy; -dydx dydx 0; -dxdy 0 dxdy];
113 %
114 %     termo de entrada (por deriva) na lateral esquerda
115 %
116 %     < g | fi-i > (em Gama-0)
117 %
118 me1 = [1; 0; 1];
119 me2 = [1; 0; 1];
120 me3a= [ 2; 0; 3];
121 me3b= [-1; 0; 1];
122 me3c= [ 1; 0; 0];
123 me3d= [ 0; 0; 1];
124 %
125 %     penetracao no solo
126 %
127 %     < fi-j | fi-i > (em Gama-1)
128 %
129 ms1=(dx/6)*[2 1; 1 2];
130 %

```

```

131 %      preparacao dos parametros que independem das coordenadas
132 %
133 crs = mdt*sgu; % coef. (fi-j | fi-i)
134 cgs1 = mdt*(a0/2 +au*dy/6); % coef. (grad fi-j | grad fi-i) tri.inf.
135 cgs2 = mdt*(a0/2 +au*dy/3); % coef. ( y grad fi-j | fi-i ) tri.sup.
136 vpx = mdt*v1*(1/(105*dy*dy)); % coef. V-1 dt/2 (dfi-j/dx | fi-i)
137 vpy = v2*mdt; % coef. V-2 dt/2 (dfi-j/dy | fi-i)
138 csk1 = k1*mdt; % coef. k_1 dt/2 <fi_j | fi-i> (Gama-1)
139 gme1 = g0*dt*(dy/2); % coef. g0 dt <g | fi-i> se g=g_0
140 gme2 = g1*dt*(dy/6); % coef. g1 dt <g | fi-i> se g=g_1 y
141 gme3 = g2*dt*(2/(15*dy)); % coef. g2 dt <g | fi-i> se g=g_1 sqrt(y)
142 %
143 %      montagem das matrizes do sistema
144 %
145 A = sparse(nn,nn);
146 B = sparse(nn,nn);
147 d = zeros(nn,1);
148 %
149 for iel=1:ntr;
150     itr = mod(iel,nty);
151         if itr~=0
152             y1 = fix((itr-1)/2)*dy;
153             y2 = y1+dy;
154         else
155             y1 = (ny-1)*dy;
156             y2 = ny*dy;
157         end;
158     for il=1:3
159         ig=malha(iel,il);
160         if ig~=0;
161             for jl=1:3;
162                 jg=malha(iel,jl);
163                 if jg~=0;
164                     if mod(iel,2)==1
165                         A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs)*mfi(il,jl)+
166                             (cgs1+y1*au*mdt/2)*mg1(il,jl)+
167                             vpx*(mdx1i(il,jl)*(35*(dy^2)*sqrt(y1^3)+
168                                 28*dy*sqrt(y1^5)+8*sqrt(y1^7)-8*(dy^3)*sqrt(y2)-
169                                 24*(dy^2)*y1*sqrt(y2)-2*dy*(y1^2)*sqrt(y2)-
170                                 8*(y1^3)*sqrt(y2))+mdx2i(il,jl)*(35*(dy^2)*sqrt(y1^3)+
171                                 28*dy*sqrt(y1^5)+8*sqrt(y1^7)-8*sqrt(y2^7))+
172                                 mdx3i(il,jl)*(7*dy*sqrt(y1^5)+4*sqrt(y1^7))+

```

```

173         (3*dy-4*y1)*sqrt(y2^5))) - vpy*mdy(il,jl);
174     B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs)*mfi(il,jl)-
175         (cgs1+y1*au*mdt/2)*mg1(il,jl)-
176         vpx*(mdx1i(il,jl)*(35*(dy^2)*sqrt(y1^3)+
177         28*dy*sqrt(y1^5)+8*sqrt(y1^7)-8*(dy^3)*sqrt(y2)-
178         24*(dy^2)*y1*sqrt(y2)-2*dy*(y1^2)*sqrt(y2)-
179         8*(y1^3)*sqrt(y2))+mdx2i(il,jl)*(35*(dy^2)*sqrt(y1^3)+
180         28*dy*sqrt(y1^5)+8*sqrt(y1^7)-8*sqrt(y2^7))+
181         mdx3i(il,jl)*(7*dy*sqrt(y1^5)+4*sqrt(y1^7)+
182         (3*dy-4*y1)*sqrt(y2^5))) + vpy*mdy(il,jl);
183     else
184         A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs)*mfi(il,jl)+
185         (cgs2+y1*au*mdt/2)*mg1(il,jl)+
186         vpx*(mdx1s(il,jl)*(8*sqrt(y1^7)-15*(dy^3)*sqrt(y2)-
187         3*(dy^2)*y1*sqrt(y2)+4*dy*(y1^2)*sqrt(y2)-
188         8*(y1^3)*sqrt(y2))+mdx2s(il,jl)*(7*dy*sqrt(y1^5)+
189         4*sqrt(y1^7)+7*dy*sqrt(y2^5)-4*sqrt(y2^7)))+
190         vpy*mdy(il,jl);
191         B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs)*mfi(il,jl)-
192         (cgs2+y1*au*mdt/2)*mg1(il,jl)-
193         vpx*(mdx1s(il,jl)*(8*sqrt(y1^7)-15*(dy^3)*sqrt(y2)-
194         3*(dy^2)*y1*sqrt(y2)+4*dy*(y1^2)*sqrt(y2)-
195         8*(y1^3)*sqrt(y2))+mdx2s(il,jl)*(7*dy*sqrt(y1^5)+
196         4*sqrt(y1^7)+7*dy*sqrt(y2^5)-4*sqrt(y2^7)))-
197         vpy*mdy(il,jl);
198     end;
199 end;
200 end;
201 end;
202 end;
203 end;
204 %
205 %   inclusao do termo na fronteira Gama-1
206 %
207 for iel=1:nty:nty*nxs;
208     for il=1:2
209         ig=malha(iel,il);
210         if ig~=0;
211             for jl=1:2;
212                 jg=malha(iel,jl);
213                 if jg~=0;
214                     A(ig,jg)=A(ig,jg)+csk1*ms1(il,jl);

```

```

215             B(ig,jg)=B(ig,jg)-csk1*ms1(il,jl);
216         end
217     end;
218 end
219 end;
220 end;
221 %
222 %     inclusao do termo independente.
223 %
224 for iel=1:1:nty
225     for il=1:3
226         ig=malha(iel,il);
227         if ig~=0;
228             if mod(iel,2)~=0
229                 d(ig) = d(ig) + gme1*me1(il);
230             end;
231         end;
232     end;
233 end;
234 r = rcond(full(A));
235 %
236 %     Fatoracao L U da matriz de rigidez
237 %
238 [ll uu] = lu(A);
239 %
240 %     abertura da janela para montagem do grafico
241 %
242 %
243 fig=figure;
244 %
245 %     refazendo a matriz malha para o grid
246 %
247 k=0;
248 for i=1:nx;
249     for j=1:ny;
250         k=k+1;
251         ind = (i-1)*nny + j;
252         malha(k,1)=ind;
253         malha(k,2)=ind+nny;
254         malha(k,3)=ind+1;
255         k=k+1;
256         malha(k,1)=ind+nny+1;

```

```

257         malha(k,2)=ind+1;
258         malha(k,3)=ind+nnny;
259     end;
260 end;
261 %
262 %   estruturando o vetor solucao para o grafico
263 %
264 sol = zeros(size(coord(:,1)));
265 in=1;
266 aux = nn+nnx;
267 for ii=1:aux;
268     if mod(ii,nnny)~=0;
269         sol(ii) = u0(in);
270         in=in+1;
271     end
272 end;
273 mm = max(u0);
274 subplot(2,2,1)
275 trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 0'),view(0,90),colorbar;
276 %
277 %   resolucao dos sucessivos sistemas.
278 %
279 for it = 1:npt
280
281     t = it*dt;
282     ys = ll\ (B*u0+d);
283     s = uu\ys;
284
285     if t==1
286         in=1;
287         aux = nn+nnx;
288         for ii=1:aux;
289             if mod(ii,nnny)~=0;
290                 sol(ii) = s(in);
291                 in=in+1;
292             end
293         end;
294         mm = max(sol);
295         subplot(2,2,2)
296         trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 1'),view(0,90),colorbar;
297     end
298     if t==2.5

```

```

299         in=1;
300         aux = nn+nnx;
301         for ii=1:aux;
302             if mod(ii,nnny)~=0;
303                 sol(ii) = s(in);
304                 in=in+1;
305             end
306         end;
307     %         mm = max(sol);
308     subplot(2,2,3)
309     trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 2,5'),view(0,90),colorbar;
310 end
311 if t==5
312     in=1;
313     aux = nn+nnx;
314     for ii=1:aux;
315         if mod(ii,nnny)~=0;
316             sol(ii) = s(in);
317             in=in+1;
318         end
319     end;
320 %         mm = max(sol);
321 subplot(2,2,4)
322 trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 5'),view(0,90),colorbar;
323 end
324
325 u0=s;
326
327 end;
328 etime(clock,t0)

```

1.2 Para a dispersão incluindo o meio aquático

Em seguida, o código utilizado para as simulações de poluentes solúveis, obtidas pelas figuras (4.5, 4.6 e 4.7), do capítulo 4 (pg. 63, 64 e 65, respectivamente).

```

1 %
2 %     Aproximacao de um sistema linear para simular a dispersao
3 %     de poluente soluvel num dominio irregular
4 %

```

```

5  clear all; t0=clock;
6  %
7  %      parmetros do modelo
8  %
9  a0=0.11; au=0.01; aa=0.01;% componentes do termo difusivo
10 g0=0.5; g1=0; g2=0;      % para as escolhas de deriva:
11                             % g0 ou g1*y ou g2*sqrt(y)
12 sgu=0.1e-3;               % coef. de decaimento no ar
13 sga=0.1e-3;               % coef. de decaimento na agua
14 v1= 0.3e+1;               % componente horizontal advectiva no ar
15 v2= 0.1e+1;               % componente vertical advectiva no ar
16 w1= 2.0e-1;               % componente horizontal advectiva na agua
17 w2= 1.8e-1;               % componente vertical advectiva na agua
18 k1= 0.1e-2;               % permeabilidade do solo
19 k3= 0.1e-3;               % permeabilidade do sedimento
20 b12 = 0.02;               % permeabilidade do ar para a agua
21 b21 = 0.01;               % permeabilidade da agua para o ar
22 Ain = 5.0e-1;             % concentracao inicial poluente na fonte
23 kk  = 0.05;               % taxa de decaimento da fonte
24 %
25 %      parametros do dominio (espaco e tempo)
26 %
27 xmax=1.0; ymax=0.5; ymin=-0.5;
28 tfinal=20.0;
29 %
30 %      parametros da discretizacao
31 %
32 nx=15;                     % total de subintervalos em x
33 nxs=5;                     % no. de subinterv. Gama-1 (solo)
34 nxa1=5;                    % no. de subinterv. Gama-2 (declive)
35 nxa2=nx-nxa1-nxs;         % no. de subinterv. Gama-2 (plano)
36 ny1=6;                     % no. de subinterv. em y (no ar)
37 ny2=nxa1;                  % no. de subinterv. em y (na agua)
38 nnx=nx+1;                  % no. de nos na dir. x (no ar)
39 nnxa1=nxa1+1;              % no. de nos na dir. x (na agua - declive)
40 nnxa2=nxa2+1;              % no. de nos na dir. x (na agua - plano)
41 nny1=ny1+1;                % no. de nos na dir. y (no ar)
42 nny2=ny2+1;                % no. de nos na dir. y (na agua)
43 npt=200;                   % no. de passos no tempo
44 dx=xmax/nx;                % comp. do subintervalo na direcao x
45 dy1=ymax/ny1;              % comp. do subintervalo na direcao y (no ar)
46 dy2=-ymin/ny2;             % comp. do subintervalo na direcao y (agua)

```

```

47 %
48 %   parametros auxiliares da discretizacao
49 %
50 dxy1 = dx*dy1;
51 dx dy1= dx/dy1;
52 dy1dx= dy1/dx;
53 dxy2 = dx*dy2;
54 dx dy2= dx/dy2;
55 dy2dx= dy2/dx;
56 dt = tfinal/npt;
57 mdt= dt/2;
58 ntn= nnx*ny1 + nnxa2*nny2 + nnxa1*nxal/2; % total de nos
59 nn = nnx*ny1; % no. de nos nao-nulos no ar
60 ntr= 2*nx*ny1; % total de triangulos no ar
61 ntt= ntr+2*nnxa2*ny2+nnxa1*ny2; % no. total de triangulos
62 nty= 2*ny1; % no. de tri. na dir. y no ar
63 nty2=2*ny2; % no. triang. em y, na agua
64 %
65 %   calculo do no. de Peclet
66 %
67 npec = [v1*dx/a0 v2*dy1/a0 w1*dx/aa w2*dy2/aa];
68 %
69 %   montagem da malha de elementos finitos
70 %
71 malha=zeros(ntn,3);
72 k=0;
73 for i=1:nx;
74     for j=1:ny1-1;
75         k=k+1;
76         ind = (i-1)*ny1 + j;
77         malha(k,1)=ind;
78         malha(k,2)=ind+ny1;
79         malha(k,3)=ind+1;
80         k=k+1;
81         malha(k,1)=ind+ny1+1;
82         malha(k,2)=ind+1;
83         malha(k,3)=ind+ny1;
84     end;
85     k=k+1;
86     ind=i*ny1;
87     malha(k,1)=ind;
88     malha(k,2)=ind+ny1;

```

```

89         k=k+1;
90         malha(k,3)=ind+ny1;
91     end;
92     for i=1:nxa2
93         for j=1:ny2
94             k=k+1;
95             ind = nn + (i-1)*nny2 + j;
96             malha(k,1) = ind;
97             malha(k,2) = ind+nny2;
98             malha(k,3) = ind + 1;
99             k=k+1;
100            ind = i*nny2 + nn + j + 1;
101            malha(k,1) = ind;
102            malha(k,2) = ind - nny2;
103            malha(k,3) = ind - 1;
104        end;
105    end;
106    nau = nn+1+nxa2*nny2;
107    for i=nxa1:-1:1
108        for j=1:i
109            ind = nau + j-1;
110            k=k+1;
111            malha(k,1) = ind;
112            malha(k,2) = ind+(nny2-(nxa1-i));
113            malha(k,3) = ind + 1;
114            if j < i
115                k=k+1;
116                malha(k,1) = ind+1+(nny2-(nxa1-i));
117                malha(k,2) = ind+1;
118                malha(k,3) = malha(k,1) - 1;
119            end
120        end;
121        nau = malha(k,3)+1;
122    end;
123    %
124    %     montagem da malha de coordenadas dos nos no ar
125    %
126    k=0;
127    for i=1:nnx
128        x = (i-1)*dx;
129        for j = 1:nny1
130            y = (j-1)*dy1;

```

```

131         k = k + 1;
132         coord(k,1) = x;
133         coord(k,2) = y;
134     end;
135 end;
136 %
137 %     malha de coordenadas dos nos na agua (parte plana)
138 %
139 aux = nx-nxa2;
140 for i=nxa2:-1:0
141     x = (aux+i)*dx;
142     for j = 1:nny2
143         y = (j-1)*dy2;
144         k = k + 1;
145         coord(k,1) = x;
146         coord(k,2) = -y;
147     end;
148 end;
149 %
150 %     malha de coordenadas dos nos na agua (pte inclinada)
151 %
152 nau = nx - nnxa2 - nxa1;
153 for i=nxa1:-1:1
154     x = (nau+i)*dx;
155     for j = 1:i
156         y = (j-1)*dy2;
157         k = k + 1;
158         coord(k,1) = x;
159         coord(k,2) = -y;
160     end;
161 end;
162 %
163 %     condicao inicial
164 %
165 u0 = zeros(ntn,1);
166 for i = 1:ny1:nxs*ny1
167     u0(i)=0.04;
168     u0(i+1)=0.02;
169 end;
170 %
171 %     submatrizes de rigidez para o ar
172 %

```

```

173 %      (fi-j)*(fi-i)
174 %
175 mufi=(dxy1/24)*[2 1 1; 1 2 1; 1 1 2];
176 %
177 %      [Sqrt(y)*(dfi-j/dx)*fi-i] e [(dfi-j/dy)*fi-i]
178 %      para os triangulos inferiores e superiores
179 %
180 mudx1i=[ 1 -1 0; 0 0 0; 0 0 0];
181 mudx2i=[ 0 0 0; 1 -1 0; 0 0 0];
182 mudx3i=[ 0 0 0; 0 0 0; -4 4 0];
183 mudx1s=[-1 1 0; -1 1 0; 0 0 0];
184 mudx2s=[ 0 0 0; 0 0 0; 4 -4 0];
185 %
186 mudy=(dx/6)*[-1 0 1; -1 0 1; -1 0 1];
187 %
188 %      ( (alpha_0 + alpha_u y)*grad(fi-j) | grad(fi-i) )
189 %
190 mug1=[dxdy1+dy1dx -dy1dx -dxdy1; -dy1dx dy1dx 0; -dxdy1 0 dxdy1];
191 %
192 %      termo de entrada (por deriva) na lateral esquerda
193 %
194 %      < g | fi-i > (em Gama-0)
195 %
196 me1 = [ 1; 0; 1];
197 me2 = [ 1; 0; 1];
198 me3a= [ 2; 0; 3];
199 me3b= [-1; 0; 1];
200 me3c= [ 1; 0; 0];
201 me3d= [ 0; 0; 1];
202 %
203 %      penetracao no solo
204 %
205 %      < fi-j | fi-i > (em Gama-1)
206 %
207 ms1=(dx/6)*[2 1; 1 2];
208 %
209 %      submatrizes de rigidez para a agua
210 %
211 %      (fi-j)*(fi-i)
212 %
213 mafi=(dxy2/24)*[2 1 1; 1 2 1; 1 1 2];
214 %

```

```

215 %      ( (dfi-j/dx)*fi-i ) e ( (dfi-j/dy)*fi-i )
216 %
217 madx=(dy2/6)*[-1 1 0; -1 1 0; -1 1 0];
218 mady= (dx/6)*[-1 0 1; -1 0 1; -1 0 1];
219 %
220 %      ( alpha_a *grad(fi-j) | grad(fi-i) )
221 %
222 mag2=(1/2)*[dxdy2+dy2dx -dy2dx -dxdy2;-dy2dx dy2dx 0;-dxdy2 0 dxdy2];
223 %
224 %      penetracao no sedimento
225 %
226 %      < fi-j | fi-i > (em Gama-3)
227 %
228 mse1=sqrt(dx^2+dy2^2)*(dx/6)*[0 0 0; 0 2 1; 0 1 2]; % parte inclinada
229 mse2=(dx/6)*[2 1 0; 1 2 0; 0 0 0]; % parte plana
230 %
231 %      interface ar-agua
232 %
233 %      < fi-j | fi-i > (em Gama-2)
234 %
235 maa=(dx/6)*[2 1; 1 2];
236 %
237 %      preparacao dos parametros que independem das coordenadas
238 %
239 crs1 = mdt*sgu; % coef. (fi-j | fi-i) p/ ar
240 crs2 = mdt*sga; % coef. (fi-j | fi-i) p/ agua
241 cgs1 = mdt*(a0/2 +au*dy1/6); % coef. (grad fi-j | grad fi-i) tri.inf.
242 cgs2 = mdt*(a0/2 +au*dy1/3); % coef. (grad fi-j | fi-i) tri.sup.
243 cgs3 = mdt*aa; % coef. (grad fi-j | grad fi-i) agua
244 vpx = mdt*v1*(1/(105*dy1*dy1)); % coef. V-1 dt/2 (dfi-j/dx | fi-i)
245 vpy = v2*mdt; % coef. V-2 dt/2 (dfi-j/dy | fi-i)
246 wpx = w1*mdt; % coef. W-1 dt/2 (dfi-j/dx | fi-i)
247 wpy = w2*mdt; % coef. W-2 dt/2 (dfi-j/dy | fi-i)
248 csk1 = k1*mdt; % coef. k_1 dt/2 <fi_j | fi-i> (Gama-1)
249 csk3 = k3*mdt; % coef. k_3 dt/2 <fi_j | fi-i> (Gama-3)
250 ck12 = b12*mdt; % coef. b_12 dt/2 <fi_j | fi-i> (Gama-2)
251 ck21 = b21*mdt; % coef. b_21 dt/2 <fi_j | fi-i> (Gama-2)
252 gme1 = g0*mdt*(dy1/2); % coef. g0 dt <g | fi-i> se g=g_0
253 %gme2 = g1*mdt*(dy/6); % coef. g1 dt <g | fi-i> se g=g_1 y
254 %gme3 = g2*mdt*(2/(15*dy)); % coef. g2 dt <g | fi-i> se g=g_1 sqrt(y)
255 %
256 %      zerando as matrizes/vetores do sistema

```

```

257 %
258 A = sparse(ntn,ntn);
259 B = sparse(ntn,ntn);
260 d1 = sparse(ntn,1);
261 %
262 % atribuindo os valores nas matrizes A e B
263 %
264 for iel=1:ntr;
265     itr = mod(iel,nty);
266     if itr~=0
267         y1 = fix((itr-1)/2)*dy1;
268         y2 = y1+dy1;
269     else
270         y1 = (ny1-1)*dy1;
271         y2 = ny1*dy1;
272     end;
273     for il=1:3
274         ig=malha(iel,il);
275         if ig~=0;
276             for jl=1:3;
277                 jg=malha(iel,jl);
278                 if jg~=0;
279                     if mod(iel,2)==1
280                         A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs1)*mufi(il,jl)+(cgs1+y1*au*mdt/2)*mug1(il,jl)
281                         +vpx*(mudx1i(il,jl)*(35*(dy1^2)*sqrt(y1^3)+28*dy1*sqrt(y1^5)
282                         +8*sqrt(y1^7)-8*(dy1^3)*sqrt(y2)-24*(dy1^2)*y1*sqrt(y2)
283                         -2*dy1*(y1^2)*sqrt(y2)-8*(y1^3)*sqrt(y2))
284                         +mudx2i(il,jl)*(35*(dy1^2)*sqrt(y1^3)+28*dy1*sqrt(y1^5)
285                         +8*sqrt(y1^7)-8*sqrt(y2^7))+mudx3i(il,jl)*(7*dy1*sqrt(y1^5)
286                         +4*sqrt(y1^7)+(3*dy1-4*y1)*sqrt(y2^5)))-vpy*mudy(il,jl);
287                         B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs1)*mufi(il,jl)-(cgs1+y1*au*mdt/2)*mug1(il,jl)
288                         -vpx*(mudx1i(il,jl)*(35*(dy1^2)*sqrt(y1^3)+28*dy1*sqrt(y1^5)
289                         +8*sqrt(y1^7)-8*(dy1^3)*sqrt(y2)-24*(dy1^2)*y1*sqrt(y2)
290                         -2*dy1*(y1^2)*sqrt(y2)-8*(y1^3)*sqrt(y2))
291                         +mudx2i(il,jl)*(35*(dy1^2)*sqrt(y1^3)+28*dy1*sqrt(y1^5)
292                         +8*sqrt(y1^7)-8*sqrt(y2^7))+mudx3i(il,jl)*(7*dy1*sqrt(y1^5)
293                         +4*sqrt(y1^7)+(3*dy1-4*y1)*sqrt(y2^5)))+vpy*mudy(il,jl);
294                     else
295                         A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs1)*mufi(il,jl)+(cgs2+y1*au*mdt/2)*mug1(il,jl)
296                         +vpx*(mudx1s(il,jl)*(8*sqrt(y1^7)-15*(dy1^3)*sqrt(y2)
297                         -3*(dy1^2)*y1*sqrt(y2)+4*dy1*(y1^2)*sqrt(y2)-8*(y1^3)*sqrt(y2))
298                         +mudx2s(il,jl)*(7*dy1*sqrt(y1^5)+4*sqrt(y1^7)+7*dy1*sqrt(y2^5)

```

```

299         -4*sqrt(y2^7)))+vpy*mudy(il,jl);
300     B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs1)*mufi(il,jl)-(cgs2+y1*au*mdt/2)*mug1(il,jl)
301         -vpx*(mudx1s(il,jl)*(8*sqrt(y1^7)-15*(dy1^3)*sqrt(y2)
302         -3*(dy1^2)*y1*sqrt(y2)+4*dy1*(y1^2)*sqrt(y2)-8*(y1^3)*sqrt(y2))
303         +mudx2s(il,jl)*(7*dy1*sqrt(y1^5)+4*sqrt(y1^7)+7*dy1*sqrt(y2^5)
304         -4*sqrt(y2^7)))-vpy*mudy(il,jl);
305         end
306     end
307 end;
308 end
309 end;
310 end;
311 %
312 %   inclusao do termo na fronteira Gama-1
313 %
314 for iel=1:nty:nty*nxs;
315     for il=1:2
316         ig=malha(iel,il);
317         for jl=1:2;
318             jg=malha(iel,jl);
319             A(ig,jg)=A(ig,jg)+csk1*ms1(il,jl);
320             B(ig,jg)=B(ig,jg)-csk1*ms1(il,jl);
321         end;
322     end;
323 end;
324 %
325 %   inclusao do termo independente (entrada por deriva)
326 %
327 for iel=1:(nty-4)
328     if mod(iel,2)~=0
329         for il=1:3
330             ig=malha(iel,il);
331             if ig~=0;
332                 d1(ig) = d1(ig) + gme1*me1(il);
333             end
334         end;
335     end
336 end;
337 %
338 %   Passagem ar-agua
339 %
340 aux1 = nxs*nty+1;

```

```

341 aux2 = ntr-nty+1;
342 for iel=aux1:nty:aux2
343     if mod(iel,2)~=0
344         for il=1:2
345             ig=malha(iel,il);
346             for jl=1:2
347                 jg=malha(iel,jl);
348                 A(ig,jg) = A(ig,jg) + (ck12-ck21)*maa(il,jl);
349                 B(ig,jg) = B(ig,jg) - (ck12-ck21)*maa(il,jl);
350             end;
351         end;
352     end
353 end;
354 %
355 %     montagem da matriz de rigidez na agua
356 %
357 aux1= ntr+1;
358 for iel=aux1:ntt;
359     for il=1:3
360         ig=malha(iel,il);
361         for jl=1:3;
362             jg=malha(iel,jl);
363             if mod(iel,2)==1
364                 A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs2)*mafi(il,jl)+cgs3*mag2(il,jl)
365                 +wpx*madx(il,jl)-wpy*mady(il,jl);
366                 B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs2)*mafi(il,jl)-cgs3*mag2(il,jl)
367                 -wpx*madx(il,jl)+wpy*mady(il,jl);
368             else
369                 A(ig,jg)=A(ig,jg)+(1+crs2)*mafi(il,jl)+cgs3*mag2(il,jl)
370                 -wpx*madx(il,jl)+wpy*mady(il,jl);
371                 B(ig,jg)=B(ig,jg)+(1-crs2)*mafi(il,jl)-cgs3*mag2(il,jl)
372                 +wpx*madx(il,jl)-vpy*mady(il,jl);
373             end
374         end;
375     end;
376 end;
377 %
378 %     inclusao do termo na fronteira Gama-3 (parte plana)
379 %
380 aux2= ntt-nxa1*ny2;
381 for iel=aux1:2*ny2:aux2;
382     for il=1:2

```

```

383         ig=malha(iel,il);
384     for jl=1:2;
385         jg=malha(iel,jl);
386         A(ig,jg)=A(ig,jg)+csk3*mse2(il,jl);
387         B(ig,jg)=B(ig,jg)-csk3*mse2(il,jl);
388     end;
389 end;
390 end;
391 %
392 %   inclusao do termo na fronteira Gama-3 (parte inclinada)
393 %
394 aux1 = ntt-nxa1*ny2;
395 pas  = 2*ny2 - 1;
396 for iel = aux1:pas:ntt;
397     for il=2:3
398         ig=malha(iel,il);
399     for jl=2:3;
400         jg=malha(iel,jl);
401         A(ig,jg)=A(ig,jg)+csk3*mse1(il,jl);
402         B(ig,jg)=B(ig,jg)-csk3*mse1(il,jl);
403     end;
404 end;
405     pas = pas - 2;
406 end;
407 %
408 %   Passagem ar-agua - parte plana
409 %
410 aux1= ntr+1;
411 aux2= ntt-nxa1*ny2;
412 for iel=aux1:2*ny2:aux2;
413     if mod(iel,2)~=0
414         for il=1:2
415             ig=malha(iel,il);
416             for jl=1:2
417                 jg=malha(iel,jl);
418                 A(ig,jg) = A(ig,jg) + (ck21-ck12)*maa(il,jl);
419                 B(ig,jg) = B(ig,jg) - (ck21-ck12)*maa(il,jl);
420             end;
421         end;
422     end
423 end;
424 %

```

```

425 %      Passagem ar-agua - parte inclinada
426 %
427 aux2 = ntt-nxa1*ny2;
428 pas  = 2*ny2 - 1;
429 for iel=aux2:pas:ntt
430     if mod(iel,2)~=0
431         for il=1:2
432             ig=malha(iel,il);
433             for jl=1:2
434                 jg=malha(iel,jl);
435                 A(ig,jg) = A(ig,jg) + (ck21-ck12)*maa(il,jl);
436                 B(ig,jg) = B(ig,jg) - (ck21-ck12)*maa(il,jl);
437             end;
438         end;
439     end
440     pas = pas - 2;
441 end;
442 r = rcond(full(A));
443 %
444 %      Fatoracao L U da matriz de rigidez
445 %
446 [ll uu] = lu(A);
447 %
448 %      abertura da janela para montagem do grafico
449 %
450 fig=figure;
451 %
452 %      refazendo a matriz malha para o grid
453 %
454 k=0;
455 for i=1:nx;
456     for j=1:ny1;
457         k=k+1;
458         ind = (i-1)*nny1 + j;
459         malha(k,1)=ind;
460         malha(k,2)=ind+nny1;
461         malha(k,3)=ind+1;
462         k=k+1;
463         malha(k,1)=ind+nny1+1;
464         malha(k,2)=ind+1;
465         malha(k,3)=ind+nny1;
466     end;

```

```

467 end;
468 for i=1:nxa2
469     for j=1:ny2
470         k=k+1;
471         ind = nn + nnx + (i-1)*nny2 + j;
472         malha(k,1) = ind;
473         malha(k,2) = ind+nny2;
474         malha(k,3) = ind + 1;
475         k=k+1;
476         ind = i*nny2 + nn + nnx + j + 1;
477         malha(k,1) = ind;
478         malha(k,2) = ind - nny2;
479         malha(k,3) = ind - 1;
480     end;
481 end;
482 nau = nn+nnx+nxa2*nny2+1;
483 for i=nxa1:-1:1
484     for j=1:i
485         ind = nau + j-1;
486         k=k+1;
487         malha(k,1) = ind;
488         malha(k,2) = ind+(nny2-(nxa1-i));
489         malha(k,3) = ind + 1;
490         if j < i
491             k=k+1;
492             malha(k,1) = ind+1+(nny2-(nxa1-i));
493             malha(k,2) = ind+1;
494             malha(k,3) = malha(k,1) - 1;
495         end
496     end;
497     nau = malha(k,3)+1;
498 end;
499 %
500 %   estruturando o vetor solucao para o grafico
501 %
502 sol = zeros(size(coord(:,1)));
503 in=1;
504 aux = nn+nnx;
505 for ii=1:aux;
506     if mod(ii,nny1)~=0;
507         sol(ii) = u0(in);
508         in=in+1;

```

```

509     end
510 end;
511 aux=aux+1;
512 for ii=aux:length(sol);
513     sol(ii) = u0(in);
514     in=in+1;
515 end;
516
517 mm = max(u0);
518 subplot(2,2,1)
519 trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t=0'),view(0,90),colorbar;
520 %
521 %   resolucao dos sucessivos sistemas.
522 %
523 t = 0;
524 for it = 1:npt
525     f = Ain*exp(-kk*t);
526     d1(ntn) = f*dx*dy2;
527     ys=ll\ (B*u0+d1);
528     s=uu\ys;
529 %
530 %   visualizacao e montagem dos graficos
531 %
532     if it==60
533         in=1;
534         aux = nn+nnx;
535         for ii=1:aux;
536             if mod(ii,nnny1)~=0;
537                 sol(ii) = s(in);
538                 in=in+1;
539             end
540         end;
541         aux=aux+1;
542         for ii=aux:length(sol);
543             sol(ii) = s(in);
544             in=in+1;
545         end;
546         subplot(2,2,2)
547         trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 6'),view(0,90),colorbar;
548     end
549     if it==120
550         in=1;

```

```

551         aux = nn+nnx;
552         for ii=1:aux;
553             if mod(ii,nnny1)~=0;
554                 sol(ii) = s(in);
555                 in=in+1;
556             end
557         end;
558         aux=aux+1;
559         for ii=aux:length(sol);
560             sol(ii) = s(in);
561             in=in+1;
562         end;
563         subplot(2,2,3)
564         trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 12'),view(0,90),colorbar;
565     end
566     if it==200
567         in=1;
568         aux = nn+nnx;
569         for ii=1:aux;
570             if mod(ii,nnny1)~=0;
571                 sol(ii) = s(in);
572                 in=in+1;
573             end
574         end;
575         aux=aux+1;
576         for ii=aux:length(sol);
577             sol(ii) = s(in);
578             in=in+1;
579         end;
580         subplot(2,2,4)
581         trisurf(malha,coord(:,1),coord(:,2),sol),title('t = 20'),view(0,90),colorbar;
582     end
583     %
584     %     atualizando o tempo e o vetor u_0
585     %
586     t = t + dt;
587     u0=s;
588 end;
589 etime(clock,t0)
590 cputime

```

2 Códigos para o MATHEMATICA®

Para o cálculo das variáveis de entrada das matrizes $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, dadas pelas integrais dos produtos internos que aparecem nas equações discretizadas que modelam os problemas (eqs.2.4.5 e 3.3.4), foram utilizados dois triângulos genéricos de referência, um inferior e o outro superior, conforme ilustra a fig.B.1, a seguir.

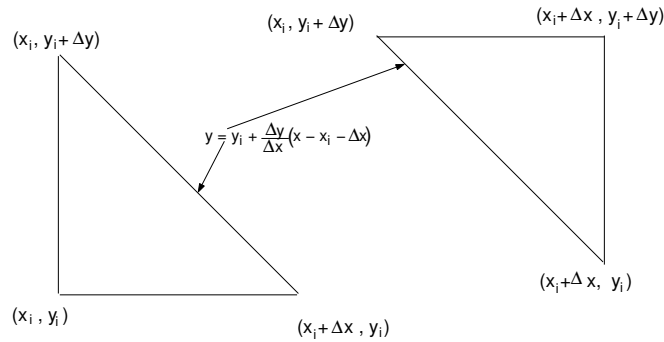


Figura B.1: Ilustração dos triângulos de referência

O código a seguir foi implementado, em ambiente Sun/Unix no Mathematica® para o cálculo dos produtos internos nos elementos de referência, de modo a construir as matrizes $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ e o vetor d dos códigos implementados no Matlab® e apresentados na seções 1.1 e 1.2, anteriormente.

```

1  %    Calculo da integral para o termo fonte, no triangulo inferior
2  %
3  ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
4  ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
5  ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
6  ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H122,H131,H132,H133];
7
8  F1[x_,y_] := 1 - (x-xi)/dx - (y-yi)/dy;
9  F2[x_,y_] := (x-xi)/dx;
10 F3[x_,y_] := (y-yi)/dy;
11
12 A[x_,y_,t_] = A0 Exp[ -k t];
13
14 xmin = xi;
15 xmax = xi + dx;
16 ymin = yi;
17 ymax = yi - dy/dx (x - xi -dx);
18
19 G11[x_,y_] = Integrate[A[x,y,t] F1[x,y], y];
20 G111[x_]   = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];

```

```

21 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
22 FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
23 G12[x_,y_] = Integrate[A[x,y,t] F2[x,y], y];
24 G112[x_] = G12[x, ymax] - G12[x,ymin];
25 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
26 FI112 = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
27 G13[x_,y_] = Integrate[A[x,y,t] F3[x,y], y];
28 G113[x_] = G13[x, ymax] - G13[x,ymin];
29 H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
30 FI113 = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
31 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
32 Mat1 = MatrixForm[{TRID1}]
33 %
34 % Calculo da integral do termo fonte, no triangulo superior
35 %
36 ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
37 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
38 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
39 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H131,H132,H133];
40
41 F1[x_,y_] = -1 + (x-xi)/dx + (y-yi)/dy;
42 F2[x_,y_] = 1-(x-xi)/dx;
43 F3[x_,y_] = 1-(y-yi)/dy;
44
45 xmin = xi;
46 xmax = xi + dx;
47 ymin = yi - dy/dx (x - xi -dx);
48 ymax = yi + dy;
49
50 A[x_,y_,t_] = A0 Exp[ -k t];
51
52 G11[x_,y_] = Integrate[A[x,y,t] F1[x,y], y];
53 G111[x_] = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];
54 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
55 FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
56 G12[x_,y_] = Integrate[A[x,y,t] F2[x,y], y];
57 G112[x_] = G12[x, ymax] - G12[x,ymin];
58 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
59 FI112 = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
60 G13[x_,y_] = Integrate[A[x,y,t] F3[x,y], y];
61 G113[x_] = G13[x, ymax] - G13[x,ymin];
62 H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
63 FI113 = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
64 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
65 Mat1 = MatrixForm[{TRID1}]
66 %
67 % Calculo das integrais nos triangulos inferiores de
68 % (d Fi-j /dx | Fi-i)
69 %
70 ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
71 ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
72 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
73 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];

```

```

74 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H122,H131,H132,H133];
75
76 F1[x_,y_] = 1 - (x-xi)/dx - (y-yi)/dy;
77 F2[x_,y_] = (x-xi)/dx;
78 F3[x_,y_] = (y-yi)/dy;
79 DF1x = D[F1[x,y],x];
80 DF2x = D[F2[x,y],x];
81 DF3x = D[F3[x,y],x];
82
83 xmin = xi;
84 xmax = xi + dx;
85 ymin = yi;
86 ymax = yi - dy/dx (x - xi -dx);
87
88 G11[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF1x F1[x,y], y];
89 G11[x_] = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];
90 H111[x_] = Integrate[G11[x], x];
91 FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
92 G12[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF2x F1[x,y], y];
93 G12[x_] = G12[x,ymax] - G12[x,ymin];
94 H112[x_] = Integrate[G12[x], x];
95 FI112 = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
96 G13[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF3x F1[x,y], y];
97 G13[x_] = G13[x,ymax] - G13[x,ymin];
98 H113[x_] = Integrate[G13[x], x];
99 FI113 = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
100 G21[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF1x F2[x,y], y];
101 G21[x_] = G21[x,ymax] - G21[x,ymin];
102 H121[x_] = Integrate[G21[x], x];
103 FI121 = Simplify[H121[xmax] - H121[xmin]];
104 G22[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF2x F2[x,y], y];
105 G22[x_] = G22[x,ymax] - G22[x,ymin];
106 H122[x_] = Integrate[G22[x], x];
107 FI122 = Simplify[H122[xmax] - H122[xmin]];
108 G23[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF3x F2[x,y], y];
109 G23[x_] = G23[x,ymax] - G23[x,ymin];
110 H123[x_] = Integrate[G23[x], x];
111 FI123 = Simplify[H123[xmax] - H123[xmin]];
112 G31[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF1x F3[x,y], y];
113 G31[x_] = G31[x,ymax] - G31[x,ymin];
114 H131[x_] = Integrate[G31[x], x];
115 FI131 = Simplify[H131[xmax] - H131[xmin]];
116 G32[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF2x F3[x,y], y];
117 G32[x_] = G32[x,ymax] - G32[x,ymin];
118 H132[x_] = Simplify[ Integrate[G32[x], x]];
119 FI132 = Simplify[H132[xmax] - H132[xmin]];
120 G33[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF3x F3[x,y], y];
121 G33[x_] = G33[x,ymax] - G33[x,ymin];
122 H133[x_] = Integrate[G33[x], x];
123 FI133 = Simplify[H133[xmax] - H133[xmin]];
124 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
125 TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
126 TRID3 = {FI131,FI132,FI133};

```

```

127 Mat1 = MatrixForm[{{TRID1},{ TRID2},{TRID3}}]
128 %
129 %          Calculo das integrais nos triangulos superiores de
130 %          (d Fi-j /dx | Fi-i)
131 %
132 ClearAll[F1,F2,F3,ymin,ymax,xmin,xmax, TRID1,TRID2,TRID3,Mat1];
133 ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x];
134 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
135 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
136 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H131,H132,H133];
137
138 F1[x_,y_] := -1+ (x-xi)/dx + (y-yi)/dy;
139 F2[x_,y_] := 1-(x-xi)/dx;
140 F3[x_,y_] := 1-(y-yi)/dy;
141 DF1x = D[F1[x,y],x];
142 DF2x = D[F2[x,y],x];
143 DF3x = D[F3[x,y],x];
144
145 xmin = xi;
146 xmax = xi + dx;
147 ymin = yi - dy/dx (x - xi -dx);
148 ymax = yi + dy;
149
150 G11[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF1x F1[x,y], y];
151 G111[x_] = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];
152 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
153 FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
154 G12[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF2x F1[x,y], y];
155 G112[x_] = G12[x,ymax] - G12[x,ymin];
156 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
157 FI112 = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
158 G13[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF3x F1[x,y], y];
159 G113[x_] = G13[x,ymax] - G13[x,ymin];
160 H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
161 FI113 = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
162 G21[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF1x F2[x,y], y];
163 G121[x_] = G21[x,ymax] - G21[x,ymin];
164 H121[x_] = Integrate[G121[x], x];
165 FI121 = Simplify[H121[xmax] - H121[xmin]];
166 G22[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF2x F2[x,y], y];
167 G122[x_] = G22[x,ymax] - G22[x,ymin];
168 H122[x_] = Integrate[G122[x], x];
169 FI122 = Simplify[H122[xmax] - H122[xmin]];
170 G23[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF3x F2[x,y], y];
171 G123[x_] = G23[x,ymax] - G23[x,ymin];
172 H123[x_] = Integrate[G123[x], x];
173 FI123 = Simplify[H123[xmax] - H123[xmin]];
174 G31[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF1x F3[x,y], y];
175 G131[x_] = G31[x,ymax] - G31[x,ymin];
176 H131[x_] = Integrate[G131[x], x];
177 FI131 = Simplify[H131[xmax] - H131[xmin]];
178 G32[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF2x F3[x,y], y];
179 G132[x_] = G32[x,ymax] - G32[x,ymin];

```

```

180 H132[x_] = Simplify[ Integrate[G132[x], x]];
181 FI132 = Simplify[H132[xmax] - H132[xmin]];
182 G33[x_,y_] = Integrate[Sqrt[y] DF3x F3[x,y], y];
183 G133[x_] = G33[x,ymax] - G33[x,ymin];
184 H133[x_] = Integrate[G133[x], x];
185 FI133 = Simplify[H133[xmax] - H133[xmin]];
186 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
187 TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
188 TRID3 = {FI131,FI132,FI133};
189 Mat1 = MatrixForm[{{TRID1},{ TRID2},{TRID3}}]
190 %
191 %          Calculo das integrais nos triangulos inferiores de
192 %          (d Fi-j /dy | Fi-i)
193 %
194 ClearAll[F1,F2,F3,lim1y,lim2y,lim1x,lim2x];
195 ClearAll[DF1,DF2,DF3];
196 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
197 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
198 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H122,H131,H132,H133];
199
200 F1[x_,y_] = 1- (x-xi)/dx - (y-yi)/dy;
201 F2[x_,y_] = (x-xi)/dx;
202 F3[x_,y_] =(y-yi)/dy;
203 DF1 = D[F1[x,y],y];
204 DF2 = D[F2[x,y],y];
205 DF3 = D[F3[x,y],y];
206
207 lim1y = yi;
208 lim2y = yi - dy/dx (x-xi-dx);
209 lim1x = xi;
210 lim2x = xi + dx;
211
212 G11[x_,y_] = Integrate[DF1 F1[x,y] , y];
213 G111[x_] = G11[x,lim2y] - G11[x,lim1y];
214 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
215 FI111 = Simplify[H111[lim2x] - H111[lim1x]];
216 G12[x_,y_] = Integrate[DF2 F1[x,y], y];
217 G112[x_] = G12[x, lim2y] - G12[x,lim1y];
218 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
219 FI112 = Simplify[H112[lim2x] - H112[lim1x]];
220 G13[x_,y_] = Integrate[DF3 F1[x,y], y];
221 G113[x_] = G13[x, lim2y] - G13[x,lim1y];
222 H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
223 FI113 = Simplify[H113[lim2x] - H113[lim1x]];
224 G21[x_,y_] = Integrate[DF1 F2[x,y], y];
225 G121[x_] = G21[x,lim2y] - G21[x,lim1y];
226 H121[x_] = Integrate[G121[x], x];
227 FI121 = Simplify[H121[lim2x] - H121[lim1x]];
228 G22[x_,y_] = Integrate[DF2 F2[x,y], y];
229 G122[x_] = G22[x,lim2y] - G22[x,lim1y];
230 H122[x_] = Integrate[G122[x], x];
231 FI122 = Simplify[H122[lim2x] - H122[lim1x]];
232 G23[x_,y_] = Integrate[DF3 F2[x,y], y];

```

```

233 G123[x_] = G23[x,lim2y] - G23[x,lim1y];
234 H123[x_] = Integrate[G123[x], x];
235 FI123 = Simplify[H123[lim2x] - H123[lim1x]];
236 G31[x_,y_] = Integrate[DF1 F3[x,y], y];
237 G131[x_] = G31[x,lim2y] - G31[x,lim1y];
238 H131[x_] = Integrate[G131[x], x];
239 FI131 = Simplify[H131[lim2x] - H131[lim1x]];
240 G32[x_,y_] = Integrate[DF2 F3[x,y], y];
241 G132[x_] = G32[x,lim2y] - G32[x,lim1y];
242 H132[x_] = Integrate[G132[x], x];
243 FI132 = Simplify[H132[lim2x] - H132[lim1x]];
244 G33[x_,y_] = Integrate[DF3 F3[x,y], y];
245 G133[x_] = G33[x,lim2y] - G33[x,lim1y];
246 H133[x_] = Integrate[G133[x], x];
247 FI133 = Simplify[H133[lim2x] - H133[lim1x]];
248 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
249 TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
250 TRID3 = {FI131,FI132,FI133};
251 Mat1 = MatrixForm[{TRID1, TRID2, TRID3}]
252 %
253 %          Calculo das integrais nos triangulos superiores de
254 %          (d Fi-j /dy | Fi-i)
255 %
256 ClearAll[F1,F2,F3,lim1y,lim2y,lim1x,lim2x];
257 ClearAll[DF1,DF2,DF3];
258 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
259 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
260 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H122,H131,H132,H133];
261
262 F1[x_,y_] = -1+ (x-xi)/dx + (y-yi)/dy;
263 F2[x_,y_] = 1-(x-xi)/dx;
264 F3[x_,y_] = 1-(y-yi)/dy;
265 DF1 = D[F1[x,y],y];
266 DF2 = D[F2[x,y],y];
267 DF3 = D[F3[x,y],y];
268
269 lim1y = yi - dy/dx (x-xi-dx);
270 lim2y = yi + dy;
271 lim1x = xi;
272 lim2x = xi + dx;
273
274 G11[x_,y_] = Integrate[DF1 F1[x,y], y];
275 G111[x_] = G11[x,lim2y] - G11[x,lim1y];
276 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
277 FI111 = Simplify[H111[lim2x] - H111[lim1x]];
278 G12[x_,y_] = Integrate[DF2 F1[x,y], y];
279 G112[x_] = G12[x, lim2y] - G12[x,lim1y];
280 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
281 FI112 = Simplify[H112[lim2x] - H112[lim1x]];
282 G13[x_,y_] = Integrate[DF3 F1[x,y], y];
283 G113[x_] = G13[x, lim2y] - G13[x,lim1y];
284 H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
285 FI113 = Simplify[H113[lim2x] - H113[lim1x]];

```

```

286 G21[x_,y_] = Integrate[DF1 F2[x,y], y];
287 G121[x_] = G21[x,lim2y] - G21[x,lim1y];
288 H121[x_] = Integrate[G121[x], x];
289 FI121 = Simplify[H121[lim2x] - H121[lim1x]];
290 G22[x_,y_] = Integrate[DF2 F2[x,y], y];
291 G122[x_] = G22[x,lim2y] - G22[x,lim1y];
292 H122[x_] = Integrate[G122[x], x];
293 FI122 = Simplify[H122[lim2x] - H122[lim1x]];
294 G23[x_,y_] = Integrate[DF3 F2[x,y], y];
295 G123[x_] = G23[x,lim2y] - G23[x,lim1y];
296 H123[x_] = Integrate[G123[x], x];
297 FI123 = Simplify[H123[lim2x] - H123[lim1x]];
298 G31[x_,y_] = Integrate[DF1 F3[x,y], y];
299 G131[x_] = G31[x,lim2y] - G31[x,lim1y];
300 H131[x_] = Integrate[G131[x], x];
301 FI131 = Simplify[H131[lim2x] - H131[lim1x]];
302 G32[x_,y_] = Integrate[DF2 F3[x,y], y];
303 G132[x_] = G32[x,lim2y] - G32[x,lim1y];
304 H132[x_] = Integrate[G132[x], x];
305 FI132 = Simplify[H132[lim2x] - H132[lim1x]];
306 G33[x_,y_] = Integrate[DF3 F3[x,y], y];
307 G133[x_] = G33[x,lim2y] - G33[x,lim1y];
308 H133[x_] = Integrate[G133[x], x];
309 FI133 = Simplify[H133[lim2x] - H133[lim1x]];
310 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
311 TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
312 TRID3 = {FI131,FI132,FI133};
313 Mat1 = MatrixForm[{TRID1, TRID2, TRID3}]
314 %
315 %      Calculo das integrais nos triangulos inferiores
316 %      ( Fi-i | Fi-j )
317 %
318 ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
319 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
320 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
321 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H122,H131,H132,H133];
322
323 F1[x_,y_] = 1 - (x-xi)/dx - (y-yi)/dy;
324 F2[x_,y_] = (x-xi)/dx;
325 F3[x_,y_] = (y-yi)/dy;
326
327 xmin = xi;
328 xmax = xi + dx;
329 ymin = yi;
330 ymax = yi - dy/dx (x - xi -dx);
331
332 G11[x_,y_] = Integrate[F1[x,y] F1[x,y], y];
333 G111[x_] = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];
334 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
335 FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
336 G12[x_,y_] = Integrate[F1[x,y] F2[x,y], y];
337 G112[x_] = G12[x, ymax] - G12[x,ymin];
338 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];

```

```

339 FI112      = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
340 G13[x_,y_] = Integrate[F1[x,y] F3[x,y], y];
341 G113[x_]   = G13[x,ymax] - G13[x,ymin];
342 H113[x_]   = Integrate[G113[x], x];
343 FI113      = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
344 G21[x_,y_] = Integrate[F2[x,y] F1[x,y], y];
345 G121[x_]   = G21[x,ymax] - G21[x,ymin];
346 H121[x_]   = Integrate[G121[x], x];
347 FI121      = Simplify[H121[xmax] - H121[xmin]];
348 G22[x_,y_] = Integrate[F2[x,y] F2[x,y], y];
349 G122[x_]   = G22[x,ymax] - G22[x,ymin];
350 H122[x_]   = Integrate[G122[x], x];
351 FI122      = Simplify[H122[xmax] - H122[xmin]];
352 G23[x_,y_] = Integrate[F2[x,y] F3[x,y], y];
353 G123[x_]   = G23[x,ymax] - G23[x,ymin];
354 H123[x_]   = Integrate[G123[x], x];
355 FI123      = Simplify[H123[xmax] - H123[xmin]];
356 G31[x_,y_] = Integrate[F3[x,y] F1[x,y], y];
357 G131[x_]   = G31[x,ymax] - G31[x,ymin];
358 H131[x_]   = Integrate[G131[x], x];
359 FI131      = Simplify[H131[xmax] - H131[xmin]];
360 G32[x_,y_] = Integrate[F3[x,y] F2[x,y], y];
361 G132[x_]   = G32[x,ymax] - G32[x,ymin];
362 H132[x_]   = Simplify[ Integrate[G132[x], x]];
363 FI132      = Simplify[H132[xmax] - H132[xmin]];
364 G33[x_,y_] = Integrate[F3[x,y] F3[x,y], y];
365 G133[x_]   = G33[x,ymax] - G33[x,ymin];
366 H133[x_]   = Integrate[G133[x], x];
367 FI133      = Simplify[H133[xmax] - H133[xmin]];
368 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
369 TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
370 TRID3 = {FI131,FI132,FI133};
371 Mat1 = MatrixForm[{TRID1, TRID2,TRID3}]
372 %
373 %      Calculo das integrais nos triangulos superiores
374 %      ( Fi-i | Fi-j )
375 %
376 ClearAll[F1,F2,F3,xmin,xmax,ymin,ymax];
377 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
378 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
379 ClearAll[H111,H112,H113,H121,H123,H122,H131,H132,H133];
380
381 F1[x_,y_] = -1 + (x-xi)/dx + (y-yi)/dy;
382 F2[x_,y_] = 1-(x-xi)/dx;
383 F3[x_,y_] = 1-(y-yi)/dy;
384
385 xmin = xi;
386 xmax = xi + dx;
387 ymin = yi - dy/dx (x - xi -dx);
388 ymax = yi + dy;
389
390 G11[x_,y_] = Integrate[F1[x,y] F1[x,y], y];
391 G111[x_]   = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];

```

```

392 H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
393 FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
394 G12[x_,y_] = Integrate[F1[x,y] F2[x,y], y];
395 G112[x_] = G12[x, ymax] - G12[x,ymin];
396 H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
397 FI112 = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
398 G13[x_,y_] = Integrate[F1[x,y] F3[x,y], y];
399 G113[x_] = G13[x, ymax] - G13[x,ymin];
400 H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
401 FI113 = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
402 G21[x_,y_] = Integrate[F2[x,y] F1[x,y], y];
403 G121[x_] = G21[x,ymax] - G21[x,ymin];
404 H121[x_] = Integrate[G121[x], x];
405 FI121 = Simplify[H121[xmax] - H121[xmin]];
406 G22[x_,y_] = Integrate[F2[x,y] F2[x,y], y];
407 G122[x_] = G22[x,ymax] - G22[x,ymin];
408 H122[x_] = Integrate[G122[x], x];
409 FI122 = Simplify[H122[xmax] - H122[xmin]];
410 G23[x_,y_] = Integrate[F2[x,y] F3[x,y], y];
411 G123[x_] = G23[x,ymax] - G23[x,ymin];
412 H123[x_] = Integrate[G123[x], x];
413 FI123 = Simplify[H123[xmax] - H123[xmin]];
414 G31[x_,y_] = Integrate[F3[x,y] F1[x,y], y];
415 G131[x_] = G31[x,ymax] - G31[x,ymin];
416 H131[x_] = Integrate[G131[x], x];
417 FI131 = Simplify[H131[xmax] - H131[xmin]];
418 G32[x_,y_] = Integrate[F3[x,y] F2[x,y], y];
419 G132[x_] = G32[x,ymax] - G32[x,ymin];
420 H132[x_] = Simplify[ Integrate[G132[x], x]];
421 FI132 = Simplify[H132[xmax] - H132[xmin]];
422 G33[x_,y_] = Integrate[F3[x,y] F3[x,y], y];
423 G133[x_] = G33[x,ymax] - G33[x,ymin];
424 H133[x_] = Integrate[G133[x], x];
425 FI133 = Simplify[H133[xmax] - H133[xmin]];
426 TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
427 TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
428 TRID3 = {FI131,FI132,FI133};
429 Mat1 = MatrixForm[{TRID1, TRID2,TRID3}]
430 %
431 % Calculo das integrais para os triangulos inferiores de:
432 % (grad Fi-j | grad Fi-i)
433 %
434 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
435 ClearAll[G111,G112,G113,G121,G122,G123,G131,G132,G133];
436 ClearAll[H11,H12,H13,H21,H22,H23,H31,H32,H33];
437 ClearAll[F112,F113,F121,F122,F123,F131,F132,F133];
438 ClearAll[GRAF1,GRAF2,GRAF3,GRTF1,GRTF2,GRTF3];
439 ClearAll[ymin,ymax,xmin,xmax,TRID1,TRID2,TRID3,Mat1];
440
441 GRAF1[x_,y_] = {D[1-(x-xi)/dx-(y-yi)/dy,x],D[1-(x-xi)/dx-(y-yi)/dy,y]};
442 GRAF2[x_,y_] = {D[(x-xi)/dx,x], D[(x-xi)/dx,y]};
443 GRAF3[x_,y_] = {D[(y-yi)/dy,x], D[(y-yi)/dy,y]};
444 GRTF1[x_,y_] = {{D[1-(x-xi)/dx-(y-yi)/dy,x]},{D[1-(x-xi)/dx-(y-yi)/dy,y]}};

```

```

445   GRTF2[x_,y_] = {{D[(x-xi)/dx,x]},{D[(x-xi)/dx,y]}};
446   GRTF3[x_,y_] = {{D[(y-yi)/dy,x]},{D[(y-yi)/dy,y]}};
447
448   xmin = xi;
449   xmax = xi + dx;
450   ymin = yi;
451   ymax = yi - dy/dx (x - xi - dx);
452
453   G11[x_,y_] = Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF1[x,y]) (a0+au y), y];
454   G11[x_] = G11[x,ymax] - G11[x,ymin];
455   H111[x_] = Integrate[G111[x], x];
456   FI111 = Simplify[H111[xmax] - H111[xmin]];
457   G12[x_,y_] = Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF2[x,y]) (a0+au y), y];
458   G112[x_] = G12[x,ymax] - G12[x,ymin];
459   H112[x_] = Integrate[G112[x], x];
460   FI112 = Simplify[H112[xmax] - H112[xmin]];
461   G13[x_,y_] = Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF3[x,y]) (a0+au y), y];
462   G113[x_] = G13[x,ymax] - G13[x,ymin];
463   H113[x_] = Integrate[G113[x], x];
464   FI113 = Simplify[H113[xmax] - H113[xmin]];
465   G21[x_,y_] = Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF1[x,y]) (a0+au y), y];
466   G121[x_] = G21[x,ymax] - G21[x,ymin];
467   H121[x_] = Integrate[G121[x], x];
468   FI121 = Simplify[H121[xmax] - H121[xmin]];
469   G22[x_,y_] = Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF2[x,y]) (a0+au y), y];
470   G122[x_] = G22[x,ymax] - G22[x,ymin];
471   H122[x_] = Integrate[G122[x], x];
472   FI122 = Simplify[H122[xmax] - H122[xmin]];
473   G23[x_,y_] = Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF3[x,y]) (a0+au y), y];
474   G123[x_] = G23[x,ymax] - G23[x,ymin];
475   H123[x_] = Integrate[G123[x], x];
476   FI123 = Simplify[H123[xmax] - H123[xmin]];
477   G31[x_,y_] = Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF1[x,y]) (a0+au y), y];
478   G131[x_] = G31[x,ymax] - G31[x,ymin];
479   H131[x_] = Integrate[G131[x], x];
480   FI131 = Simplify[H131[xmax] - H131[xmin]];
481   G32[x_,y_] = Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF2[x,y]) (a0+au y), y];
482   G132[x_] = G32[x,ymax] - G32[x,ymin];
483   H132[x_] = Simplify[ Integrate[G132[x], x]];
484   FI132 = Simplify[H132[xmax] - H132[xmin]];
485   G33[x_,y_] = Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF3[x,y]) (a0+au y), y];
486   G133[x_] = G33[x,ymax] - G33[x,ymin];
487   H133[x_] = Integrate[G133[x], x];
488   FI133 = Simplify[H133[xmax] - H133[xmin]];
489   TRID1 = {FI111,FI112,FI113};
490   TRID2 = {FI121,FI122,FI123};
491   TRID3 = {FI131,FI132,FI133};
492   Mat1 = MatrixForm[{{TRID1},{ TRID2},{TRID3}}]
493   %
494   %   Calculo das integrais para os triangulos superiores de:
495   %           (grad Fi-j | grad Fi-i)
496   %
497   ClearAll[DF1x,DF2x,DF3x,DF1y,DF2y,DF3y];

```

```

498 ClearAll[G11,G12,G13,G21,G22,G23,G31,G32,G33];
499 ClearAll[GI11,GI12,GI13,GI21,GI22,GI23,GI31,GI32,GI33];
500 ClearAll[H11,H12,H13,H21,H22,H23,H31,H32,H33];
501 ClearAll[FI12,FI12,FI13,FI21,FI22,FI23,FI31,FI32,FI33];
502
503 GRAF1[x_,y_] = {D[-1 + x/dx + y/dy,x],D[-1 + x/dx + y/dy,y]};
504 GRAF2[x_,y_] = {D[1 - x/dx,x], D[1 - x/dx,y]};
505 GRAF3[x_,y_] = {D[1 - y/dy,x], D[1 - y/dy,y]};
506 GRTF1[x_,y_] = {{D[-1 + x/dx + y/dy,x]},{D[-1 + x/dx + y/dy,y]}};
507 GRTF2[x_,y_] = {{D[1 - x/dx,x]},{D[1 - x/dx,y]}};
508 GRTF3[x_,y_] = {{D[1 - y/dy,x]},{D[1 - y/dy,y]}};
509
510 G11[x_,y_] = Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF1[x,y]) (a0+au y), y];
511 GI11[x_] = G11[x,yi+dy] - G11[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
512 H11[x_] = Integrate[GI11[x], x];
513 FI11 = Simplify[H11[xi+dx] - H11[xi]];
514 G12[x_,y_] = Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF2[x,y]) (a0+au y), y];
515 GI12[x_] = G12[x,yi+dy] - G12[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
516 H12[x_] = Integrate[GI12[x], x];
517 FI12 = Simplify[H12[xi+dx] - H12[xi]];
518 G13[x_,y_] = Integrate[(GRAF1[x,y].GRTF3[x,y]) (a0+au y), y];
519 GI13[x_] = G13[x,yi+dy] - G13[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
520 H13[x_] = Integrate[GI13[x], x];
521 FI13 = Simplify[H13[xi+dx] - H13[xi]];
522 G21[x_,y_] = Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF1[x,y]) (a0+au y), y];
523 GI21[x_] = G21[x,yi+dy] - G21[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
524 H21[x_] = Integrate[GI21[x], x];
525 FI21 = Simplify[H21[xi+dx] - H21[xi]];
526 G22[x_,y_] = Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF2[x,y]) (a0+au y), y];
527 GI22[x_] = G22[x,yi+dy] - G22[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
528 H22[x_] = Integrate[GI22[x], x];
529 FI22 = Simplify[H22[xi+dx] - H22[xi]];
530 G23[x_,y_] = Integrate[(GRAF2[x,y].GRTF3[x,y]) (a0+au y), y];
531 GI23[x_] = G23[x,yi+dy] - G23[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
532 H23[x_] = Integrate[GI23[x], x];
533 FI23 = Simplify[H23[xi+dx] - H23[xi]];
534 G31[x_,y_] = Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF1[x,y]) (a0+au y), y];
535 GI31[x_] = G31[x,yi+dy] - G31[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
536 H31[x_] = Integrate[GI31[x], x];
537 FI31 = Simplify[H31[xi+dx] - H31[xi]];
538 G32[x_,y_] = Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF2[x,y]) (a0+au y), y];
539 GI32[x_] = G32[x,yi+dy] - G32[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
540 H32[x_] = Integrate[GI32[x], x];
541 FI32 = Simplify[H32[xi+dx] - H32[xi]];
542 G33[x_,y_] = Integrate[(GRAF3[x,y].GRTF3[x,y]) (a0+au y), y];
543 GI33[x_] = G33[x,yi+dy] - G33[x,yi-dy/dx (x-xi-dx)];
544 H33[x_] = Integrate[GI33[x], x];
545 FI33 = Simplify[H33[xi+dx] - H33[xi]];
546 TRID1 = {FI11,FI12,FI13};
547 TRID2 = {FI21,FI22,FI23};
548 TRID3 = {FI31,FI32,FI33};
549 MaTRID1 = MatrixForm[{TRID1,TRID2,TRID3}]
550 %

```

```

551 %      Calculo das integrais para os triangulos inferiores ao longo de Gama-0
552 %
553 ClearAll[F1,F2,F3,G1,G2,G3,xmin,xmax,ymin,ymax];
554 ClearAll[g11,g12,g13,g21,g22,g23,g31,g32,g33];
555 ClearAll[h11,h12,h13,h21,h22,h23,h31,h32,h33];
556
557 F1[x_,y_] = 1 - (x-xi)/dx - (y-yi)/dy;
558 F2[x_,y_] = (x-xi)/dx;
559 F3[x_,y_] = (y-yi)/dy;
560 G1[y_] = 1;
561 G2[y_] = y;
562 G3[y_] = Sqrt[y];
563
564 xmin = xi;
565 xmax = xi + dx;
566 ymin = yi;
567 ymax = yi + dy;
568
569 g11[y_] = Integrate[ F1[xmin,y] G1[y], y];
570 h11      = Simplify[g11[ymax] - g11[ymin]];
571 g12[y_] = Integrate[ F2[xmin,y] G1[y], y];
572 h12      = Simplify[g12[ymax] - g12[ymin]];
573 g13[y_] = Integrate[ F3[xmin,y] G1[y], y];
574 h13      = Simplify[g13[ymax] - g13[ymin]];
575 g21[y_] = Integrate[ F1[xmin,y] G2[y], y];
576 h21      = Simplify[g21[ymax] - g21[ymin]];
577 g22[y_] = Integrate[ F2[xmin,y] G2[y], y];
578 h22      = Simplify[g22[ymax] - g22[ymin]];
579 g23[y_] = Integrate[ F3[xmin,y] G2[y], y];
580 h23      = Simplify[g23[ymax] - g23[ymin]];
581 g31[y_] = Integrate[ F1[xmin,y] G3[y], y];
582 h31      = Simplify[g31[ymax] - g31[ymin]];
583 g32[y_] = Integrate[ F2[xmin,y] G3[y], y];
584 h32      = Simplify[g32[ymax] - g32[ymin]];
585 g33[y_] = Integrate[ F3[xmin,y] G3[y], y];
586 h33      = Simplify[g33[ymax] - g33[ymin]];
587 MATR0    = {h11, h12, h13};
588 MATR1    = {h21, h22, h23};
589 MATR2    = {h31, h32, h33};
590 VETO = MatrixForm[MATR0]
591 VET1 = MatrixForm[MATR1]
592 VET2 = MatrixForm[MATR2]
593 %
594 %      Calculo das integrais para os triangulos inferiores
595 %      ao longo de Gama-1
596 %
597 ClearAll[F1,F2,F3,G1,G2,G3];
598 ClearAll[g11,g12,g13,g21,g22,g23,g31,g32,g33];
599 ClearAll[h11,h12,h13,h21,h22,h23,h31,h32,h33];
600 F1[x_,y_] = 1 - (x-xi)/dx - (y-yi)/dy;
601 F2[x_,y_] = (x-xi)/dx;
602 F3[x_,y_] = (y-yi)/dy;
603 xmin = xi;

```

```

604  xmax = xi + dx;
605  ymin = yi;
606  ymax = yi + dy;
607
608  g11[x_] = Integrate[ F1[x,ymin] F1[x,ymin], x];
609  h11      = Simplify[g11[xmax] - g11[xmin]];
610  g12[x_] = Integrate[ F1[x,ymin] F2[x,ymin], x];
611  h12      = Simplify[g12[xmax] - g12[xmin]];
612  g13[x_] = Integrate[ F1[x,ymin] F3[x,ymin], x];
613  h13      = Simplify[g13[xmax] - g13[xmin]];
614  g21[x_] = Integrate[ F2[x,ymin] F1[x,ymin], x];
615  h21      = Simplify[g21[xmax] - g21[xmin]];
616  g22[x_] = Integrate[ F2[x,ymin] F2[x,ymin], x];
617  h22      = Simplify[g22[xmax] - g22[xmin]];
618  g23[x_] = Integrate[ F2[x,ymin] F3[x,ymin], x];
619  h23      = Simplify[g23[xmax] - g23[xmin]];
620  g31[x_] = Integrate[ F3[x,ymin] F1[x,ymin], x];
621  h31      = Simplify[g31[xmax] - g31[xmin]];
622  g32[x_] = Integrate[ F3[x,ymin] F2[x,ymin], x];
623  h32      = Simplify[g32[xmax] - g32[xmin]];
624  g33[x_] = Integrate[ F3[x,ymin] F3[x,ymin][xmax], x];
625  h33      = Simplify[g33[xmax] - g33[xmin]];
626  MATR0    = {{h11,h12,h13},{h21,h22,h23},{h31,h32,h33}};
627  VETO     = MatrixForm[MATR0]
628  %
629  %      Calculo das integrais para os triangulos superiores,
630  %      ao longo de Gama-3 - parte inclinada
631  %
632  ClearAll[F1,F2,F3,G1,G2,G3];
633  ClearAll[g11,g12,g13,g21,g22,g23,g31,g32,g33];
634  ClearAll[h11,h12,h13,h21,h22,h23,h31,h32,h33];
635
636  F2[x_,y_] = 1 - (x-xi)/dx;
637  F3[x_,y_] = 1 - (y-yi)/dy;
638  r[x_] = yi - dy/dx (x - xi -dx);
639
640  xmin = xi;
641  xmax = xi + dx;
642
643  g22[x_] = Integrate[ F2[x,r[x]] F2[x,r[x]] Sqrt[dx^2+dy^2], x];
644  h22      = Simplify[g22[xmax] - g22[xmin]];
645  g23[x_] = Integrate[ F2[x,r[x]] F3[x,r[x]] Sqrt[dx^2+dy^2], x];
646  h23      = Simplify[g23[xmax] - g23[xmin]];
647  g32[x_] = Integrate[ F3[x,r[x]] F2[x,r[x]] Sqrt[dx^2+dy^2], x];
648  h32      = Simplify[g32[xmax] - g32[xmin]];
649  g33[x_] = Integrate[ F3[x,r[x]] F3[x,r[x]] Sqrt[dx^2+dy^2], x];
650  h33      = Simplify[g33[xmax] - g33[xmin]];
651  MATR0    = {{h22,h23},{h32,h33}};
652  VETO     = MatrixForm[MATR0]

```