


# Modelagem Matemática e Aproximação Numérica do Estudo de Poluentes no Ar

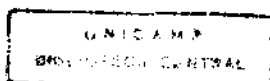
Este exemplar corresponde a redação final da tese devidamente corrigida e defendida pela Sra. SONIA ELENA PALOMINO CASTRO e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 21 de Dezembro de 1993.

Prof. Dr. 

João F. D. C. Azevedo Meyer

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em MATEMÁTICA APLICADA.



# Modelagem Matemática e Aproximação Numérica do Estudo de Poluentes no Ar

Sonia Elena Palomino Castro 229

IMECC

Matemática Aplicada

João F. D. C. Azevedo Meyer 1

Mestrado em Matemática Aplicada

*João F. D. C. Azevedo Meyer*

### **Abstract**

In this work the mathematical modelling, and the numerical simulation of the concentration of pollutants in the air is presented. An advective-diffusive evolution partial differential equation is used, where pollutants transport is caused by the predominant air movement. Finite Elements of first and second order are used for space variables, and Crank-Nicolson techniques for Finite Differences for the time variable.

## Agradecimentos

Agradeço a entidade financiadora Capes pelo apoio fornecido até o mês de Março.

A meu orientador que sempre esteve disposto a me atender.

Aos Profs. Vera Rocha, Cristina Cunha e A. Letelier pelas facilidades outorgadas.

Aos Profs. do Dpto. de Matemática Aplicada que contribuíram na minha capacitação profissional.

A Sonia Barbosa pela sua cordialidade e ajuda incondicional como membro do NEPAM.

Aos meus compatriotas e a todas as pessoas que me circundaram nos meus momentos difíceis e de tribulação e que souberam me oferecer sua ajuda quando eu mais precisei.

A todos os meus colegas que me deram seu constante apoio.

E a meus filhos por me darem a força para a conclusão deste trabalho.

*Con todo mi amor para mis hijos  
Andrea Isabel y Paulo César.*

*"Tu recuerdo quedó sellado en las semillas  
que dejaste. Si estuvieses conmigo estos  
momentos serian inolvidables."*

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>A Motivação do Problema</b>	<b>11</b>
1.1	Introdução . . . . .	11
1.2	Características da Poluição Atmosférica em Zonas de Usinas Termoelétricas Existentes . . . . .	13
1.3	Agentes Atmosféricos que Determinam Poluição e o Impacto Sobre a Biota . . . . .	14
1.4	O Enfoque do Problema com um Exemplo . . . . .	16
<b>2</b>	<b>Modelagem Ecotoxicológica e Apresentação do Modelo Ma- temático</b>	<b>18</b>
2.1	Introdução . . . . .	18
2.2	Modelagem da Poluição do Ar . . . . .	18
2.3	O Modelo Matemático . . . . .	21
2.3.1	O Fenômeno Modelado . . . . .	21
2.3.2	A Descrição Matemática . . . . .	22
2.3.3	As Condições Iniciais e de Fronteira . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Uma Primeira Abordagem do Problema</b>	<b>26</b>
3.1	Formulação Clássica do Problema . . . . .	26
3.2	Formulação Variacional do Problema . . . . .	27
3.3	O Teorema de Lions . . . . .	29
3.4	Existência e Unicidade da Solução . . . . .	30
3.5	Discretização do Problema . . . . .	33
3.5.1	Discretização Espacial . . . . .	34
3.5.2	Discretização Temporal . . . . .	37
3.6	Experiências Computacionais e Simulações . . . . .	38
3.6.1	Resultados com Elementos Finitos de Primeira Ordem	39

3.6.2	Resultados com Elementos Finitos de Segunda Ordem .	48
4	Uma Segunda Abordagem do Problema	56
4.1	Formulação Clássica do Problema . . . . .	56
4.2	Formulação Variacional do Problema . . . . .	57
4.3	Existência e Unicidade . . . . .	59
4.4	Discretização do Problema . . . . .	64
4.4.1	Discretização Espacial . . . . .	64
4.4.2	Discretização Temporal . . . . .	66
4.5	Experiências Computacionais e Simulações . . . . .	68
5	Conclusões e Recomendações	80
A		82
B		86
C		92



# Lista de Figuras

2.1	Modelo de Dispersão de Jørgensen . . . . .	20
2.2	Dominio $\Omega$ com fluxo nulo nas faces superior e inferior . . . .	24
2.3	Dominio $\Omega$ com fluxo nulo em cada uma das faces . . . . .	25
3.1	A Ilustração das condições mistas na Primeira Abordagem . .	27
3.2	Redução ao caso Bidimensional na Primeira Abordagem . . . .	35
3.3	Caso A.1: $\alpha = 0.005, \sigma = 0.01, V_2 = 0$ e $f = 1$ . . . . .	40
3.4	Caso A.2: $\alpha = 0.005, \sigma = 0.01, V_2 = 0$ e $f = 1$ . . . . .	42
3.5	Caso B.1: $\alpha = 0.01, \sigma = 0.1, V_2 = 0$ e $f = 1$ . . . . .	44
3.6	Caso B.2: $\alpha = 0.01, \sigma = 0.1, V_1 = 0.1, V_2 = 0$ e $f = 1$ . . . .	45
3.7	Caso B.3: $\alpha = 0.01, \sigma = 0.1, V_1 = 0.5, V_2 = 0$ e $f = 1$ . . . .	47
3.8	Condição Inicial Nula . . . . .	49
3.9	Caso D.1: $\alpha = 0.005, \sigma = 0.01, V_1 = 0.1, V_2 = 0, f = 1$ e $u_0 = 1$ . . . . .	51
3.10	Caso D.2: $\alpha = 0.01, \sigma = 0.01, V_1 = 0.1, V_2 = 0, f = 1$ e $u_0 = 1$	52
3.11	Caso D.3: $\alpha = 0.005, \sigma = 0.01, V_1 = 0.1, V_2 = 0, f = 1$ e $u_0 = 1$ . . . . .	53
3.12	Caso D.4: $\alpha = 0.01, \sigma = 0.1, V_2 = 0, f = 1$ e $u_0 = 1$ . . . . .	55
4.1	Redução ao caso Bidimensional na Segunda Abordagem . . . .	65
4.2	Caso E.1: $a = 0.1, \sigma = 0.005, f = 1, u_0 = 1$ e $V_1 = 0$ . . . . .	69
4.3	Caso E.2: $a = 0.1, \sigma = 0.005, f = 1, u_0 = 1$ e $V_1 = 0.1$ . . . .	70
4.4	Caso E.3: $a = 0.01, \sigma = 0.005, f = 1, u_0 = 1$ . . . . .	72
4.5	Caso E.4: $a = 0.1, \sigma = 0.005, V_2 = 0, f = 1$ e $L_x = 2$ . . . . .	74
4.6	Caso F.1: $a = 0.1, \sigma = 0.005, V_2 = 0, f = 1, u_0 = 1$ . . . . .	76
4.7	Caso F.2: $a = 0.1, \sigma = 0.005, V_1 = 0.1, V_2 = 0, f = 1, u_0 = 1$ .	78
B.1	Base de um Elemento Finito de Primer Ordem . . . . .	90

B.2 Base de um Elemento Finito de Segunda Ordem . . . . .	90
---	----

## Introdução

Inspirados pelo iminente mas felizmente anulado projeto de construção de uma usina termoeletrica na cidade vizinha de Paulínia, foi que optamos por fazer a modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes no ar.

Segundo S. Barbosa [18], pesquisadora do Núcleo de Estudos e Pesquisas Ambientais – NEPAM/UNICAMP – a poluição atmosférica, expressão concreta das transformações ambientais ocasionada em geral pelas usinas e centros industriais em regiões como o Sudeste e no Brasil em geral, aumenta os ataques de asma, provoca enfisema e bronquite e aumenta os casos de pessoas com problemas respiratórios e de ordem cardíaca; isto acontece, por exemplo, nas cidades de Perus, Cubatão, Pólo Petroquímico de Camaçari, Bahia; onde se impõe há muito tempo um quadro de saúde nos seus moradores dos mais deprimentes. Numa pesquisa da mesma autora analisa as características epidemiológicas que o Município de Paulínia apresenta de forma histórica no período de 1975–1989 constatando que, embora o curto espaço de tempo, as alterações significativas nesse período confirmam os padrões de industrialização de regiões de países onde os padrões epidemiológicos estão associados a “modernização” e a industrialização. É de se destacar que não é apenas que a saúde da população é afetada, também a Biota toda é submetida a esses riscos de contaminação.

Só conhecendo os valores da concentração de poluentes emitidos pelas fontes poluidoras no ambiente e comparando-os com os padrões permitidos que poderia-se inferir o nível de prejuízo ocasionado. É por tal motivo que o objetivo deste trabalho é o de apresentar um modelo para descrever a concentração de certos poluentes do ar em termos dos fenômenos de difusão e de advecção – além de apresentar alguns métodos de aproximação numérica, servindo assim como ponto de partida para um trabalho posterior.

Enfocamos o problema da poluição no ar, no primeiro capítulo, caracterizando-a principalmente nas zonas de usinas termoeletricas existentes, descrevendo alguns efeitos da contaminação sobre a saúde identificada pelos agentes atmosféricos mais daninhos ( $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ , etc.). É no segundo capítulo que se apresenta uma introdução teórica da modelagem ecotoxicológica: destacam-se classes de poluição no caso de modelagem matemática. A saber, os modelos analíticos, numéricos e estatísticos dos quais o interesse de nosso trabalho é o de abordar os modelos numéricos de aproximação e

por tal estabeleceremos em primeira instância o modelo matemático dado por uma equação diferencial parcial. Esta equação descreve o fenômeno evolutivo de difusão-advecção com duas sucessivas simplificações do problema. Nos capítulos 3 e 4, depois de ter garantidas existência e unicidade da solução, são apresentadas aproximações para cada uma das duas abordagens usando Elementos Finitos de primeira e segunda ordem nas variáveis espaciais e Crank-Nicolson na variável temporal. Em ambos os casos e para garantir a estabilidade da solução trabalhamos dentro da condição dada pelo número de Péclet. Finalmente no último capítulo apresentamos as conclusões. Comentamos finalmente que a realização deste trabalho foi feita com a intenção de poder no futuro utilizar o modelo aqui simulado e que se constitua em mais uma ferramenta de decisão na construção de complexos industriais, garantindo para o homem uma melhor qualidade de vida e respeitando a natureza para as populações futuras.

# Capítulo 1

## A Motivação do Problema

### 1.1 Introdução

Ao longo da História, momentos de rápido desenvolvimento têm ocasionado muitos problemas na preservação (e até na sobrevivência !) dos sistemas ecológicos. Localmente a poluição ocasionada por emissões industriais em muitas cidades do mundo têm ultrapassado os valores máximos permitidos em diversos padrões de segurança. Se considerarmos também as concentrações de dióxido de carbono como resultado de grandes quantidades de hidrocarbonetos liberados por queimadas para a geração de potência em grande escala, o resultado global é o de um severo distúrbio de sistemas ecológicos existentes.

Já no século XVII, um decreto proibía que se ateassem fogos durante a sessão do Parlamento, e no entanto, ainda não existia indústria em Londres.

Este problema assumiu atualmente proporções tais que se consegue sensibilizar a opinião pública por tratar-se de um assunto de grande interesse para a saúde do homem, assim como para toda a natureza. É nessa linha e segundo o trabalho desenvolvido por [1] que nos referiremos.

A poluição da atmosfera é produzida tanto pelos gases como pelos sólidos em suspensão. Os primeiros provêm especialmente da combustão dos múltiplos fogões domésticos e fornos industriais. Os mais importantes são o gás carbônico e o monóxido de carbono, cuja influência sobre o homem pode ser considerável.

Os produtos da oxidação do carbono não são os únicos poluentes, pois

a combustão mais ou menos incompleta das impurezas combustíveis utilizadas produz muitas outras, principalmente a amônia e uma série de derivados de cloro, flúor, nitratos e enxofre. Os derivados de enxofre existem em proporções consideráveis nos produtos das combustões domésticas, mas são mais abundantes ainda nos das combustões industriais (exemplo: uma só grande central térmica rejeita por dia, 500 toneladas de compostos de enxofre, especialmente sob a forma de dióxido de enxofre, que se oxida e se transforma em ácido sulfúrico, cujas propriedades corrosivas se conhecem); essas combustões produzem abundantes produtos sólidos que permanecem em suspensão no ar, alguns deles formando verdadeiras nuvens artificiais: os aerossóis. Informações como as obtidas no Projeto da Termoelétrica de Paulínia [17] fazem referências que inúmeros produtos químicos, indo dos sais minerais à sílica e aos compostos sulfurados, alguns deles seriamente tóxicos, podem encontrar-se sob essa forma de poeira. A complexidade dessas suspensões misturadas com os gases naturais é ainda acentuada pelas diversas reações químicas que se dão na atmosfera sob a ação do oxigênio, do ozônio e da radiação solar.

Os problemas de desequilíbrios ecológicos e poluição atmosférica são de caráter internacional, sendo nas maioria dos casos o produto da não adoção de medidas para evitá-los ou fazê-los de menor intensidade poluidora. Numa região industrial pode-se determinar de muitos modos partículas de cimento, partículas de borracha, mau cheiro (naquelas que expõem gases sulfurosos), substâncias mutagênicas e cancerígenas; daí o alto risco para a saúde da população vizinha e a biota toda em geral.

O interesse no presente trabalho adveio da possibilidade da construção de uma usina termoelétrica em Paulínia, e sendo que desde a década de 70 essa região se constituiu em industrializada, pela existência de refinarias e complexos industriais que usam o petróleo e derivados nos seus processos de produção, é que existe preocupação com a piora da qualidade do ar, já afetado. Para a análise do impacto nessa qualidade do ar é necessário considerar a magnitude e direção do vento predominante na região de interesse e determinar a quantidade da concentração do poluente emitido através do tempo e comparar com os máximos dos padrões estabelecidos, pode-se assim, dar uma contribuição efetiva na avaliação do impacto ambiental – ajuda importante para facilitar ou impedir a factibilidade da construção de um complexo deste porte.

## 1.2 Características da Poluição Atmosférica em Zonas de Usinas Termoeletricas Existentes

A contaminação atmosférica [19] emitida por grandes complexos industriais existentes, produzida pela extração ou refino de petróleo ou indústrias de derivados e pelas centrais termoeletricas constitui um sério problema de riscos nas populações residentes e vizinhas e cujos efeitos agravam a crise energética e ambiental por causa dos gases que alteram o equilíbrio geo-térmico, dos gases que provocam acidificação da atmosfera (e das águas e solos) além dos acidentes como explosão e incêndio.

São poucas as centrais termoeletricas de grande porte (gerando 600 MW de potência) operando no país. Aquelas movidas a óleo combustível (em Santa Cruz no Rio, a Central de Piratininga, às margens da Represa de Guarapiranga em São Paulo) e aquelas movidas a carvão mineral nas regiões mineiras do Rio Grande do Sul e Santa Catarina.

De forma paralela, muitos conglomerados industriais se construíram nas áreas vizinhas nessas regiões de produção energética, química, mineração e metalurgia implantando-se instalações com processos de fabricação química a partir de derivados do petróleo (os agroquímicos: herbicidas, inseticidas, fungicidas) produtos químicos para construção (impermeabilizantes, aglomerantes, tintas, vernizes, isolantes) e para a indústria têxtil e de couro (corantes, colas, solventes), os artefatos plásticos e de borracha, etc.

Com as instalações de centrais termoeletricas se garante o suprimento de eletricidade nessas atividades produtoras que não podem ser interrompidas pois seus processos de produção estão planejados durante as 24 horas do dia (indústrias de cloro-soda, de insumos químicos básicos, fábrica de celulose e de muitas metalúrgicas que produzem alumínio, chumbo, etc.)

Mencionados os mecanismos industriais de produção podemos caracterizar a poluição atmosférica pelo transporte dos gases, as partículas metálicas pesadas e os aerossóis. Este transporte será mais distante quanto mais altas as chaminés das caldeiras industriais, assim se a altura delas está entre 10 e 20 metros serão atingidos bairros e faixas vizinhas, no entanto para alturas entre 120 e 200 metros a zona afetada oscila entre 100 e 500 kilometros.

A queima do carvão e dos derivados do petróleo consome grandes quantidades de ar e devolve grandes quantidades de compostos químicos gasosos

e particulados (gás carbônico, compostos nitrogenados, compostos sulfurosos, etc.) cujos efeitos serão detalhados na próxima seção com um breve comentário sobre o impacto sobre a vida.

### 1.3 Agentes Atmosféricos que Determinam Poluição e o Impacto Sobre a Biota

Os efeitos da contaminação sobre a vida e os da contaminação atmosférica sobre a saúde (desde o incidente do grande *smog* de Londres em 1952 causando a morte de 4000 pessoas e outro similar ocorrido em Los Angeles, Califórnia), sem dúvida obrigam a valorizar a ameaça do neblão-humo em muitas cidades como México, São Paulo, Lima, Santiago, etc.

Estudos epidemiológicos realizados na Cidade do México [21] têm identificado alguns dos agentes atmosféricos mais daninhos:

1. O dióxido de enxofre em diferentes concentrações afeta as vias respiratórias e, em particular, a atividade ciliar vê-se reduzida. O sinergismo deste composto com partículas que contém catalisadores metálicos, conduz a sua oxidação e eventual formação de ácido sulfúrico, muito mais irritante. As partículas inaladas durante vários meses podem afetar a árvore respiratória, ainda depois de mudanças atmosféricas.
2. O dióxido de nitrogênio, muito nocivo por si mesmo, está associado com os fenômenos foto-químicos da contaminação e a parcial ionização da atmosfera nas inversões térmicas. Em concentrações de 0.5 ppm, que são responsáveis por reações funcionais irritantes, são produzidas certas mudanças morfológicas na árvore respiratória, como a contração bronquial e a diminuição da capacidade de ventilação respiratória.
3. Ozônio e oxidantes. O ozônio é um contaminante cuja concentração aumenta no chamado *smog* foto-químico, que ocorre nos dias ensolarados do verão. Em concentrações de 0.1 ppm, produz ressecamento da garganta, irritação do trato e mucosa respiratória, aumentando a suscetibilidade às infecções bacterianas. Em concentrações de 0.3 ppm produz irritação e contração bronquial. Se associado a outros oxidantes pode provocar asma, tosse, cefaléia e certa dificuldade respiratória, além da constante irritação óculo-palpebral.



4. **Monóxido de carbono.** Este contaminante é produto da combustão de hidrocarbonetos utilizados na maioria dos veículos automotores. É inodoro e particularmente perigoso porque une-se estritamente à hemoglobina e reduz a capacidade sanguínea de transporte de oxigênio. Tem efeitos tóxicos evidentes e em concentrações maiores põe em perigo as vidas das pessoas mais expostas.
5. As partículas suspensas no ar e seu sinergismo com o dióxido de enxofre na atmosfera são particularmente nocivas por concentrar elementos tóxicos voláteis, tais como o tálio e o chumbo, além de microorganismos e de material orgânico diverso, em particular de compostos policíclicos (aminas aromáticas) de efeitos deletérios demonstrados, como o benzo-pireno que é comumente encontrado em concentrações perigosas [21].

Embora os efeitos da contaminação atmosférica sejam enfocados na saúde humana, o impacto sobre a vegetação e o gado tem sido um problema de grande evolução e no que se comprovam consequências perniciosas.

A vegetação é muito sensível aos contaminantes do ar e deve tomar-se em conta as concentrações desses agentes e o tempo de exposição, como por exemplo: o dióxido de enxofre (que são emitidos pelas indústrias químicas e as termoeletricas, geradoras de energia elétrica) com derivados dos hidrocarbonetos da combustão de automotores que, com o ozônio, atuam sinergicamente sobre a função clorofiliana, com repercussões negativas no ambiente (efeitos tóxicos da clorosis e despigmentação verde, etc.), acumulando metais tais como chumbo, níquel, cádmio, alumínio, cobre, com fitotoxinas oxidantes que afetam as plantas em áreas muito extensas de bosques e selvas.

As plantas podem ser então monitores passivos da contaminação, em particular quando acontecem acidentes industriais e radioativos. Quando se libera um produto tóxico, os seres humanos e os animais podem (até instintivamente) ficar longe da área contaminada, mas as espécies vegetais são fixas e a agressão bio-fisiológica que recebem pode-se traduzir numa resposta que oscila entre mudanças de cor até a morte, em relação com a magnitude do prejuízo accidental ou cumulativo.

## 1.4 O Enfoque do Problema com um Exemplo

A tonelage diária emitida principalmente pelo dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e o dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ) apresentam um risco geral.

No caso do dióxido de enxofre, é produzida uma acidez que cairá nas áreas localizadas na direção dos ventos e das chuvas, e, dependendo da quantidade de gás sulfuroso emitido, e da área coberta pela precipitação, a acidez das chuvas (e dos solos e águas) será maior ou menor; habitualmente essa acidez oscilava entre 6.0 e 5.0 mas depois da industrialização e, dependendo da quantidade de gás sulfuroso emitido, esse valor atualmente decresce até 5.0 e às vezes assume valores menores que 5.0.

Atualmente na Europa e na América do Norte existe a tendência de usar petróleo e carvão de baixos teores de enxofre e de baixos índices de cinzas, de compostos metálicos pesados e de outros materiais agressivos ou tóxicos, os quais são provenientes, em geral, de países do terceiro mundo, passando previamente pela inspeção da EPA (Environmental Protection Agency), do governo norteamericano.

Tem-se calculado, vide [17], em áreas críticas da Europa que as emissões são da ordem de 50 mil toneladas por ano de  $\text{SO}_2$ , envolvendo uma área de 10000 quilômetros quadrados por ano, no entanto no Brasil em regiões altamente industrializadas como é o caso do Trio Industrial que inclui a região Metropolitana, o eixo Anhangera e a Baixada Santista, em São Paulo, que determinam um território definido por um polígono que tem por lado entre 150 e 200 quilômetros; as emissões somam um total entre 150000 e 200000 toneladas por ano, sendo que cada uma dessas regiões libera uma quantia aproximada de 50000 toneladas por ano.

Na região dada pelo Trio Industrial, os ventos predominantes são de Sudeste para Noroeste e tem como efeito, além da contaminação dos bairros vizinhos, a poluição das vertentes das Serra do Mar, da Cantareira, da Mantiqueira, do Japui e das cuestas de São Paulo e Botucatu.

Assim, se a Usina de Paulínia tivesse sido implementada, se estima que suas descargas teriam acrescentado às emissões de  $\text{SO}_2$  de 60.000 a 120.000 toneladas por ano, sendo que os valores exatos estão em posse da PETROBRÁS e da CESP.

O apresentado anteriormente nos motiva a considerar no próximo capítulo

as emissões de poluentes emitidas por fontes poluidoras localizadas em zonas industriais onde consideraremos a influência da magnitude e da direção do vento predominante e onde não consideraremos, nos exemplos numéricos, o fator chuva que poderá ser considerado em trabalhos posteriores.

## Capítulo 2

# Modelagem Ecotoxicológica e Apresentação do Modelo Matematico

### 2.1 Introdução

O termo *Ecotoxicológico* é aqui utilizado no ambiente da Ecologia Matemática: o uso de modelos para estudo da presença de poluentes em um meio.

Na modelagem de poluição do ar destacam-se três classes: os modelos analíticos, os numéricos e os estatísticos, sendo que os dois primeiros são determinísticos e podem prever concentrações que são totais no espaço e tempo em um determinado domínio. O terceiro tipo de modelo, estatístico, toma em consideração processos estocásticos e não será tratado aqui. Nós optaremos pela modelagem numérica de nosso problema.

### 2.2 Modelagem da Poluição do Ar

O grande interesse em modelos de substâncias tóxicas surgiu durante a última década devido ao rápido crescimento dos problemas relacionados com o ambiente. A maior dificuldade da modelagem do efeito e distribuição das substâncias tóxicas é obter um conhecimento relevante da conduta das substâncias tóxicas no ambiente e usar este conhecimento para fazer as simplificações práticas.

Em [7], são considerados modelos que incluem os aerossóis:  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_2$  como tóxicos, caracterizando-os como modelos de poluentes cumulativos. Também são citados modelos de substâncias tóxicas tais como cádmio, mercúrio e metais pesados entre outros. A maioria desses modelos, no campo da modelagem ecológica, refletem que um bom conhecimento do problema e do ecossistema pode ser usado para fazer simplificações razoáveis.

Muitos modelos de poluição no ar contêm um vasto sistema de equações que consideram processos aerodinâmicos.

## Modelos Analíticos

A determinação da concentração de poluentes atmosféricos emitidos por uma fonte pontual é um exemplo importante do uso do princípio da conservação da massa.

Segundo [7] o modelo analítico chamado Modelo de Gauss se apresenta nas condições de ter uma fonte de poluição pontual de intensidade  $Q$  sem absorções (na região de trabalho ou domínio).

Nesta ótica a equação da conservação de massa tem a seguinte solução:

$$u(x, y, z) = \frac{Q}{\pi \delta_x \delta_y \delta_z V} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x}{\delta_x} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{y}{\delta_y} \right)^2 - \right. \\ \left. -\frac{1}{2} \left( \frac{z - H}{\delta_z} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{z + H}{\delta_z} \right)^2 \right]$$

onde:

- $u$ : é a concentração do poluente;
- $z$ : é a altura sobre o solo;
- $H$ : altura efetiva da fonte;
- $\delta_x, \delta_y, \delta_z$ : as variações horizontal e vertical da dispersão;
- $V$ : velocidade média do ar predominante.

A figura 2.1 ilustra uma pluma de uma fonte localizada em  $x = 0, y = 0$ , conforme a pluma se move sob a ação do vento (*downwind*) ela cresce através

da ação da difusão turbulenta. Na mesma figura pode-se observar que a pluma de poluente instantânea tem uma alta concentração sobre uma faixa estreita. No decorrer do tempo, porém, a pluma atingirá uma área maior mas a concentração será obviamente menor. A distribuição da concentração perpendicular aos eixos do vento apresentará forma gaussiana, daí que se assumirá que a distribuição gaussiana será o modelo usual para o cálculo da concentração pluma; sendo o interesse do modelo de dispersão de Jørgensen determinar a concentração  $u$  de poluente proveniente da fonte como função de sua posição vento abaixo (*downwind*).

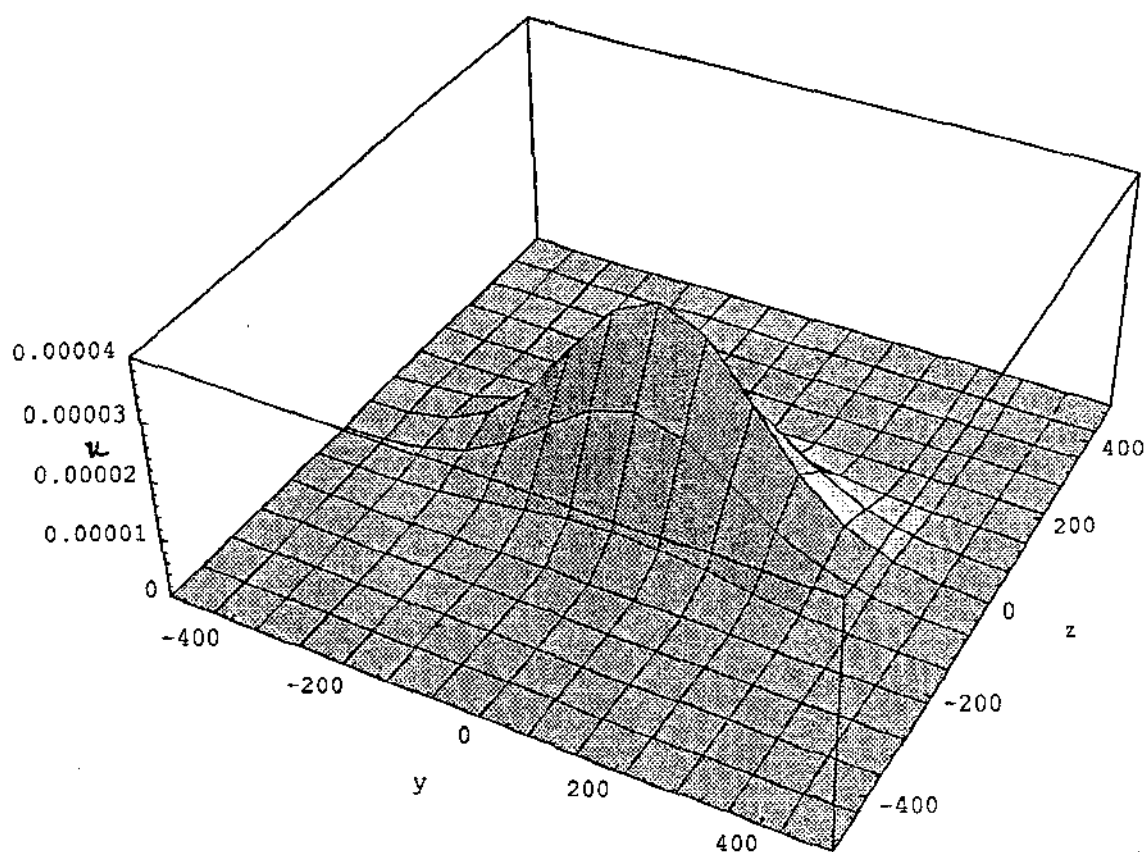


Figura 2.1: Modelo de Dispersão de Jørgensen

Um modelo deste tipo tem como principal qualidade a de ser de fácil uso e bom para trabalhar em situações simples, por exemplo: nas situações de terra plana e um pequeno tempo de permanência dos poluentes.

A debilidade destes modelos é que eles não podem tratar, ou o fazem de modo muito pobre, problemas de dispersão e de transformações químicas. Outra limitação – e esta mais séria – desta formulação é a de apresentar só o caso estacionário.

## **Modelos Numéricos**

Os modelos numéricos tentam aliviar as limitações comentadas na seção acima, logrando abranger outros problemas tais como aqueles onde o vento tem uma grande influência, podendo considerar diversos fatores. Esses modelos conduzem a equações diferenciais parciais as quais podem ser aproximadas numericamente.

Esses modelos numéricos fornecem a facilidade de poderem ser usados também em problemas de qualidade do ar urbano e no transporte de poluentes de longo alcance pela fácil adaptabilidade nessas áreas.

Para a determinação da solução nesses modelos de Equações (ou Sistemas) a Derivadas Parciais podem ser usadas diversas técnicas, como as de Diferenças Finitas ou a técnica dos Elementos Finitos (FEM).

Neste trabalho serão utilizados os modelos numéricos usando FEM para aproximação espacial da solução, além de diferenças finitas na variável tempo.

## **2.3 O Modelo Matemático**

### **2.3.1 O Fenômeno Modelado**

O comportamento do fluxo das substâncias carregadas pelo ar neste modelo tem componentes advectivas. Assim, o comportamento dos movimentos flutuacionais podem ser consideradas como difusão ao longo da corrente advectiva principal do ar. Os entes poluidores de tipo aerossol que encontramos no ar são diversos; deles nos interessa conhecer as concentrações com que se apresentam no meio em que vivemos. Considerando uma zona específica onde geralmente o desenvolvimento industrial é elevado, sob a influência da magnitude e direção do vento predominante, estabelecemos um modelo geral segundo:

1. Considerar um paralelepípedo, com uma fonte emissora de poluentes suficientemente longe da fronteira  $\partial\Omega$  – de tal modo que a concentração de poluentes é aí nula; exceto nas faces superior e inferior do paralelepípedo onde se assume o fluxo nulo, isto é: o poluente não ultrapassa certa altura (face superior) nem penetra no solo (face inferior), como se mostra na figura 2.2.

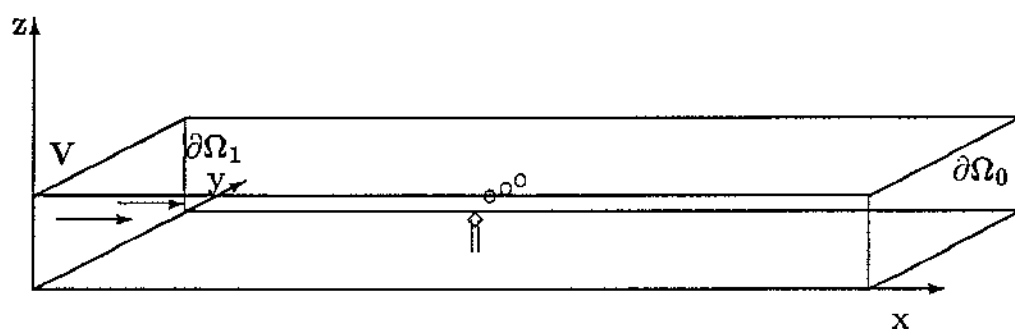


Figura 2.2: Domínio  $\Omega$  com fluxo nulo nas faces superior e inferior



$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left\{ \begin{array}{c} \text{difusão} \\ \text{propriamente} \\ \text{dita} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{transporte} \\ \text{advectivo} \\ \text{do poluente} \end{array} \right\} \\ - \left\{ \begin{array}{c} \text{reação com} \\ \text{o meio ambiente} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{alimentadora da} \\ \text{poluição} \end{array} \right\}$$

Nesta equação  $\frac{\partial u}{\partial t}$  é a taxa de variação da concentração do poluente  $u = u(x, y, z, t)$  por unidade de tempo no intervalo de tempo  $I_T = [0, T]$ , na região dada pelo domínio:

$$\Omega = \{ \mathbf{x} = (x, y, z) \in R^3 / x \in I_x, y \in I_y, z \in I_z \}$$

com  $I_x, I_y, I_z$  intervalos da reta real. A fronteira de  $\Omega$  sera denotada por  $\partial\Omega$ .

Ou seja, o domínio de trabalho do nosso problema será :

$$\Omega \times I_T \subset R^4$$

O modelo assim dado descreve de forma geral um modelo evolutivo do problema sujeito a condições iniciais e de fronteira que dependerão do problema a ser especificado mais adiante.

### 2.3.2 A Descrição Matemática

Seguindo os modelos estabelecidos por [1], [2] e [3] entre outros, podemos, para formular matematicamente o modelo apresentado na subseção anterior, utilizar o seguinte:

1.  $\text{div}(\alpha \nabla u)$ : este termo representa a difusão propriamente dita, onde  $\alpha = \alpha(u, \mathbf{x}, t)$  é o coeficiente de difusão, que em geral pode depender do próprio poluente, da posição e inclusive do tempo;
2.  $\text{div}(\mathbf{V}u)$ : representa o transporte do poluente seguindo a direção dada pelo vetor velocidade  $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$  das correntes de vento predominantes;

2. Ainda considerando o mesmo paralelepípedo (e com um coeficiente de difusão  $\alpha$  variável com respeito à altura na qual se encontra o poluente) consideramos que a concentração emitida não atravessa os bordos da região, ou seja, o fluxo deles é nulo em cada uma das faces do domínio, isto se mostra na figura 2.3.

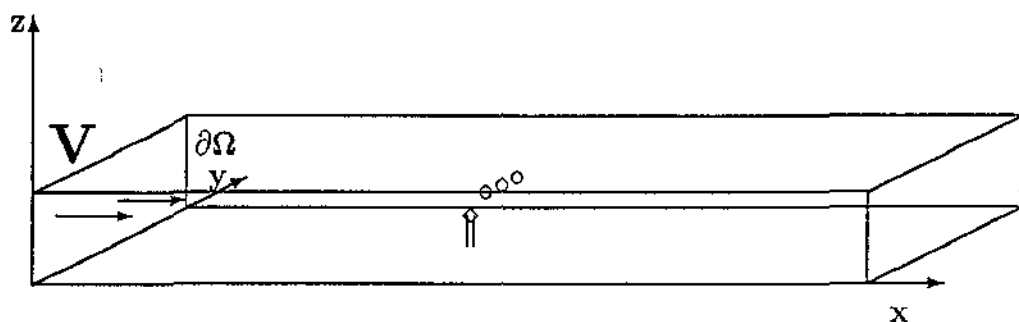


Figura 2.3: Domínio  $\Omega$  com fluxo nulo em cada uma das faces

O capítulo seguinte irá estabelecer o modo de se passar da equação 2.1 com condições inicial e de contorno fornecidas de modo contínuo a aproximações discretas. Outras possibilidades – que podem ser objeto de estudo posterior – podem ser apresentadas, como, por exemplo, ao invés de considerar fluxos nulos nas faces, considerar que esse fluxo depende proporcionalmente, da concentração, e da velocidade respectivamente; assim, nas faces laterais ( $\partial\Omega_0$ ), esta expressão poderia ser expressa matematicamente por:

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial n} = \lambda u V_n \quad \text{em } \partial\Omega_0$$

onde  $\frac{\partial u}{\partial n}$  e  $V_n$  são o fluxo normal e a componente da velocidade na direção normal às faces, respectivamente.

## Capítulo 3

# Uma Primeira Abordagem do Problema

Nesta abordagem trata-se numericamente o problema considerando condições de fronteira mistas na região, garantem-se a existência e a unicidade da solução na formulação variacional e faz-se uma primeira redução do problema ao caso bidimensional apresentando-se os resultados obtidos.

### 3.1 Formulação Clássica do Problema

Consideremos o domínio  $\Omega$  como um paralelepípedo de dimensões  $L_x$ ,  $L_y$  e  $L_z$  e uma situação como aquela descrita em (1), na seção 2.3.3, isto é:

$$u(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ em } \partial\Omega_0 \text{ e} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ em } \partial\Omega_1. \quad (3.2)$$

Assim podemos ilustrar esta situação segundo a figura 3.1.

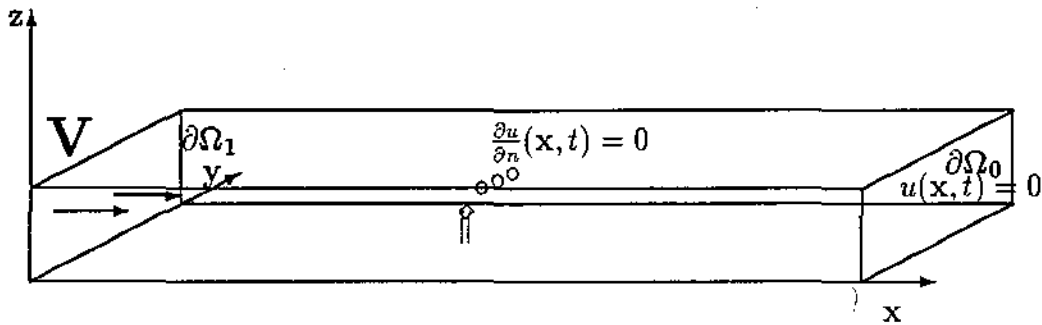


Figura 3.1: A Ilustração das condições mistas na Primeira Abordagem

Considerando ainda uma poluição inicial constante  $u_0$  no instante  $t = 0$ , a equação dada em 2.1, junto às condições iniciais e de fronteira definem a seguinte formulação clássica :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha \nabla u) + \operatorname{div}(\mathbf{V}u) + \sigma u = f, \\ (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T], \text{ com} \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0 \text{ em } \Omega, \\ u(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ em } \partial\Omega_0, \text{ e} \\ \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ em } \partial\Omega_1. \end{array} \right. \quad (3.3)$$

## 3.2 Formulação Variacional do Problema

Definimos o nosso problema no Espaço de Hilbert dado por:

$$\mathcal{V} = \{v \in L^2(I_t; H^1(\Omega)) : v(x, t) = 0, \text{ em } \partial\Omega_0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x, t) = 0 \text{ em } \partial\Omega_1, \quad \forall t \in I_t\}$$

O problema 3.3 dado em sua formulação clássica tem a sua equivalente formulação variacional ou formulação fraca [4]; assim, se  $v$  é uma função em  $\mathcal{V}$  denominada função teste, a formulação estará dada por:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v \, dx + \int_{\Omega} \alpha \nabla u \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v \, ds + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{V}u) v \, dx \\ + \int_{\Omega} \sigma uv \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde o Teorema de Green foi usado e as integrais são no sentido de Lebesgue.

Usando as condições de fronteira 3.1 e 3.3, o terceiro termo da última equação fica determinado como:

$$\int_{\partial\Omega_0} \frac{\partial u}{\partial n} v \, ds + \int_{\partial\Omega_1} \frac{\partial u}{\partial n} v \, ds = 0$$

Daí a formulação variacional do problema ser dada por:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v \, dx + \int_{\Omega} \alpha \nabla u \nabla v \, dx + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{V}u) v \, dx + \int_{\Omega} \sigma uv \, dx = \\ \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (3.5)$$

que, em termos do produto interno, vide Apêndice A, pode ainda ser expressa segundo:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial u}{\partial t} | v \right) + (\alpha \nabla u | \nabla v) + (\operatorname{div}(\mathbf{V}u) | v) + (\sigma u | v) = \\ (f | v), \quad \forall t \in I_t, \quad \forall v \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (3.6)$$

No que segue demonstramos a existência e unicidade da solução após apresentação do Teorema de Lions que será usado nessa demonstração.

### 3.3 O Teorema de Lions

Para estabelecer a existência e a unicidade da solução de 3.6 fazemos uso do Teorema de Lions [6] no caso de trabalhar no corpo dos números reais:

**Teorema 3.3.1 (Lions)** *Dado o conjunto aberto  $\Omega \subset \mathcal{R}^n$ , consideramos os espaços  $H^1(\Omega)$ ,  $H_0^1(\Omega)$  e  $\mathcal{V}$  tais que:*

$$H_0^1(\Omega) \subset \mathcal{V} \subset H^1(\Omega)$$

*Para  $u = u(\mathbf{x}, t)$  e  $v = v(\mathbf{x}, t)$ , seja a função dada por<sup>1</sup>:*

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

onde:

- $a_{ij}, a_i, a_0 \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$ ;
- Se existe  $\gamma > 0$  tal que para  $\mathbf{x} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$   
 $\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(\mathbf{x}, t) \xi_j \xi_i \geq \gamma (|\xi_1|^2 + \dots + |\xi_n|^2)$ , q.t.p.;
- $a(t; u, v)$  mensurável;
- $|a(t; u, v)| \leq M \|u\| \|v\|$ ,  $M$  constante independente de  $t, u$  e  $v$ ;
- Existe  $\lambda$  tal que  $a(t; u, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \gamma_1 \|v\|_{H^1(\Omega)}^2$ ,  $\gamma_1 > 0$ ,  $\forall v \in V$ .

então para  $f \in L^2(\Omega \times [0, T])$  e  $u_0 \in L^2(\Omega \times [0, T])$  existe uma única  $u \in L^2((-\infty, T), \mathcal{V})$  nula para  $t < 0$  que satisfaz:

$$a(t; u(t), v) + \left( \frac{\partial u(t)}{\partial t}, v \right) = (f(t), v), \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

□

### Prova

Vide [6].

<sup>1</sup>Em  $\mathcal{R}^n$  consideramos  $d\mathbf{x} = dx_1 dx_2 \dots dx_n$

### 3.4 Existência e Unicidade da Solução

Identificaremos nosso problema com as condições do Teorema de Lions segundo uma simplificação feita no Apêndice A.

Nesta abordagem consideramos o coeficiente de difusão constante, ou seja,  $\alpha(\mathbf{x}, t) = \alpha$ , daí que:

$$\operatorname{div}(\alpha \nabla u) = \alpha \Delta u$$

e no caso da velocidade constante,

$$\operatorname{div}(\mathbf{V}u) = \operatorname{div}((u V_1, u V_2, u V_3)) = \mathbf{V} \cdot \nabla u.$$

Na formulação variacional, para toda função  $v \in \mathcal{V}$ , temos

$$\int_{\Omega} (-\alpha \Delta u + \mathbf{V} \cdot \nabla u + \sigma u) v \, dx = \int_{\Omega} (-\alpha \nabla u \cdot \nabla v + \mathbf{V} \cdot \nabla u : v + \sigma uv) \, dx = a(t; u, v),$$

Iremos, à semelhança do Teorema, fazer uso de operadores convenientes, para que esta equação possa ser expressa como:

$$\left( \frac{\partial u(t)}{\partial t}, v \right) + a(t; u, v) = (f, v),$$

onde

$$a(t; u, v) = \int_{\Omega} \left( \sum_{i,j} a_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_j} + \sum_i a_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_i} v + a_0(\mathbf{x}, t) uv \right) dx$$

com a situação modelada caracterizada por:

$$a(t; u, v) = \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \alpha \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} \, dx + \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} V_i \frac{\partial u}{\partial x_i} v \, dx + \int_{\Omega} \sigma uv \, dx$$

assim, referindo-nos ao Apêndice A:

$$\begin{aligned} a_{ii}(\mathbf{x}, t) &= \alpha, & i &= 1, 2, 3, & a_{ij}(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ a_i(\mathbf{x}, t) &= V_i, & a_0(\mathbf{x}, t) &= \sigma \end{aligned}$$

determinamos agora que nosso problema se encontra nas condições do teorema, a serem satisfeitas:

- As funções  $a_{ij}$ ,  $a_i$ ,  $a_0 \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$  pelo fato delas serem constantes sobre domínio limitado  $\Omega \times (0, T)$ ;
- $\sum_{i=1}^3 a_{ij}(x, t) \xi_j \xi_i = \alpha(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 + |\xi_3|^2)$ , daí que o valor de  $\gamma$  procurado é igual ao valor do coeficiente de difusão, isto é:  $\gamma = \alpha > 0$ ;
- $a(t; u, v)$  é mensurável, pois colocada na terminologia de produto interno em  $L^2(\Omega)$ :

$$a(t; u, v) = \sum_{i=1}^3 \left( \alpha \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^3 (V_i \frac{\partial u}{\partial x_i}, v) + (\sigma u, v)$$

é a soma de funções mensuráveis;

- Condição de continuidade:

$$\begin{aligned} |a(t; u, v)| &= \left| \sum_{i=1}^3 \alpha \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \sum_{i=1}^3 V_i \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i} v dx + \sigma \int_{\Omega} u v dx \right| \\ &\leq \left| \alpha \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \sigma \int_{\Omega} u v dx \right| + \sum_{i=1}^3 |V_i| \int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right| |v| dx \end{aligned}$$

como  $\sigma, \alpha > 0$ , então, tomando  $\beta = \max\{\alpha, \sigma\} > 0$ :

$$\begin{aligned} |a(t; u, v)| &\leq \beta \left| \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \int_{\Omega} u v dx \right| + \\ &\quad \sum_{i=1}^3 |V_i| \int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right| |v| dx \\ &= \beta |(u, v)_{H^1}| + \sum_{i=1}^3 |V_i| \int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right| |v| dx; \end{aligned}$$

mas, pela desigualdade de Cauchy:

$$|(u, v)_{H^1}| \leq \|u\|_{H^1} \|v\|_{H^1}$$



e pela desigualdade de Hölder e a imersão contínua<sup>2</sup> de  $\mathcal{V}$  em  $H^1$

$$\int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right| |v| dx \leq \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u\|_{H^1} \|v\|_{H^1(\Omega)}$$

daí que:

$$|a(t; u, v)| \leq (\beta + \sum_{i=1}^3 |V_i|) \|u\|_{H^1} \|v\|_{H^1}$$

e assim  $M = (\beta + \sum_{i=1}^3 |V_i|)$  e  $a(t; u, v)$  é uma função contínua;

- Condição de coercividade<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} a(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \\ &= \alpha \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \left| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right|^2 dx + (\sigma + \lambda) \int_{\Omega} |v|^2 dx + V_1 \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_1} v dx \\ &= \alpha \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 + V_1 \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_1} v dx \end{aligned} \quad (3.7)$$

mas como:

$$V_1 \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_1} v dx \geq -V_1 \left| \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_1} v dx \right| \geq -V_1 \left\| \frac{\partial v}{\partial x_1} \right\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)}$$

e considerando que existe  $\epsilon > 0$  tal que:

$$-ab \geq -\frac{\epsilon}{2} |a|^2 - \frac{1}{2\epsilon} |b|^2, \quad \forall a, b \in \mathcal{R}$$

então:

---

<sup>2</sup>estas e outras noções teóricas estão resumidas no Apêndice de [16]

<sup>3</sup>Restringimo-nos apenas ao caso da velocidade  $\mathbf{V} = (V_1, 0, 0)$ . Outros casos possuem demonstrações análogas.

$$V_1 \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_1} v \, dx \geq -V_1 \frac{\epsilon}{2} \left\| \frac{\partial u}{\partial x_1} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{V_1}{2\epsilon} \|v\|_{L^2(\Omega)}^2$$

e, em 3.7, tem-se

$$\begin{aligned} a(t; , u, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 &\geq \\ &\geq \alpha \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left( \sigma + \lambda - \frac{V_1}{2\epsilon} \right) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 - V_1 \frac{\epsilon}{2} \left\| \frac{\partial u}{\partial x_1} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\geq \left( \alpha - V_1 \frac{\epsilon}{2} \right) \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left( \sigma + \lambda - \frac{V_1}{2\epsilon} \right) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

considerando

$$\gamma_0 = \min \left\{ \left( \alpha - V_1 \frac{\epsilon}{2} \right), \left( \sigma + \lambda - \frac{V_1}{2\epsilon} \right) \right\} > 0,$$

basta considerar uma escolha conveniente para  $\epsilon$  e  $\lambda$ , e assim:

$$a(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \gamma_0 \|v\|_{H^1(\Omega)}^2.$$

Por último, por escolha,

$$f \in L^2(\Omega \times [0, T]) \text{ e } u_0 \in L^2(\Omega \times [0, T])$$

Satisfeitas, assim, as condições do Teorema de Lions, podemos dizer que existe uma única solução do problema formulado variacionalmente.

### 3.5 Discretização do Problema

Uma solução aproximada do problema se obtém fazendo uma discretização espacial via Elementos Finitos aplicando o Método de Galerkin para a variável espacial e uma discretização via Crank Nicolson na variável temporal. Neste contexto vamos trabalhar em um subespaço de dimensão finita de  $\mathcal{V}$ , método cujos passos detalharemos a seguir.

### 3.5.1 Discretização Espacial

Sobre a região  $\Omega$  dada, estabelecemos uma triangularização que determina, além dos triângulos, um número de nós igual a  $N$ .

Seja  $\mathcal{V}_h$  um subespaço de dimensão finita do espaço  $\mathcal{V}$ , ou seja

$$\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V} \text{ e } \dim \mathcal{V}_h = N < \infty$$

de modo que  $\mathcal{V}_h$  é gerado pelas funções de base:

$$\{\phi_i\}_{i=1}^N$$

onde cada  $\phi_i$ , junto com os  $N$  nós e os triângulos é comumente chamado **elemento finito**, cada um dos quais sendo composto por pedaços de funções (lineares ou quadráticas) definidas sobre cada elemento da triangularização do domínio (elementos finitos de primeira ordem ou de segunda ordem). Assim, nesta forma segundo o método de Galerkin, cada elemento do subespaço  $\mathcal{V}_h$  pode ser escrito como:

$$v_h = \sum_{i=1}^N p_i(t) \phi_i(\mathbf{x}) \quad (3.8)$$

Então em  $\mathcal{V}_h$  a formulação dada por 3.6, considerando os produtos internos de  $\mathcal{V}$ , pode ser expressa por:

$$\left( \frac{\partial u}{\partial t} | v_h \right) + (\alpha \nabla u | \nabla v_h) + (\operatorname{div}(\mathbf{V}u) | v_h) + (\sigma u | v_h) = \quad (3.9)$$

$$(f | v_h), \quad \forall t \in I_t, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h$$

Neste estágio da discretização precisamos especificar a função dos parâmetros no problema, bem como as características dos termos dados pela fonte poluidora e o vetor velocidade do vento predominante.

Foi dito na seção anterior que os parâmetros de difusão e de decaimento são considerados constantes. A direção do vento predominante considera-se apontando no lado positivo do eixo  $X$ , ou seja:

$$\mathbf{V} = (V_1, 0, 0) \text{ com } V_1 > 0 ; \text{ e}$$

assim o termo dado pelo transporte dos poluentes se reduz a:

$$\operatorname{div}(\mathbf{V}u) = V_1 \frac{\partial u}{\partial x} + 0 \frac{\partial u}{\partial y} + 0 \frac{\partial u}{\partial z} = V_1 \frac{\partial u}{\partial x}.$$

Nesta primeira Primeira Abordagem tomaremos a aproximação do problema formulado para  $\Omega \subset \mathcal{R}^3$  reduzindo o domínio para apenas duas dimensões. E isto se justifica, em primeira instância quando fazemos na região  $\Omega$  as considerações

$$L_z \ll L_x \text{ e } L_z \ll L_y$$

e assim o fenômeno pode ser visto como ocorrendo numa região determinada praticamente por um lençol na superfície terrestre como se mostra na figura 3.2:

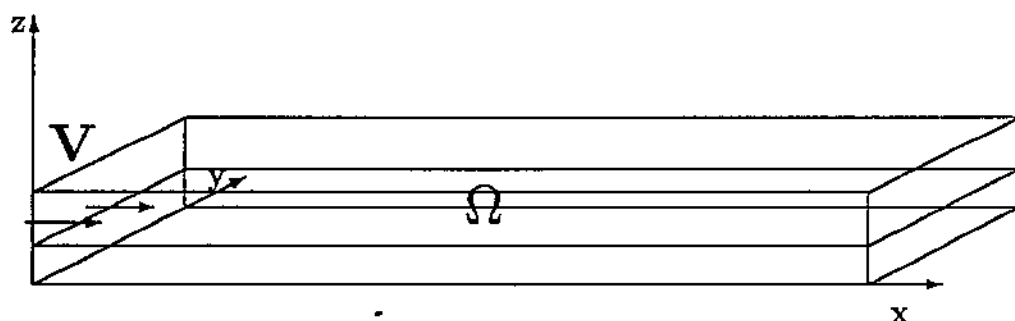


Figura 3.2: Redução ao caso Bidimensional na Primeira Abordagem

Com estas hipóteses é possível a redução do problema ao caso bidimensional. Neste caso a formulação clássica é:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \Delta u + V_1 \frac{\partial u}{\partial x} + \sigma u = f & (x, y, t) \in \Omega \times [0, T] \\ u(x, y, 0) = u_0 \text{ em } \Omega \\ u(x, y, t) = 0 \text{ em } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.10)$$

cuja formulação variacional em  $\mathcal{V}_h$ , gerado pela base  $\{\phi_i(x, y)\}_{i=1}^N$ , se reduz a:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial u}{\partial t} | v_h \right) + \alpha (\nabla u | \nabla v_h) + V_1 \left( \frac{\partial u}{\partial x} | v_h \right) + \sigma (u | v) = \\ (f | v_h), \quad \forall t \in I_t \text{ e } \forall v_h \in \mathcal{V}_h. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Estamos interessados em encontrar  $u \in \mathcal{V}_h$  que resolva 3.11, assim:

$$u = \sum_{i=1}^N c_i(t) \phi_i(x, y) \quad (3.12)$$

e

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt} c_i(t) \phi_i(x, y), \quad (3.13)$$

nestas condições a equação 3.11 se transforma em um sistema ordinário de equações diferenciais dado por:

$$A \dot{\mathbf{c}} + B \mathbf{c} = \mathbf{d} \quad (3.14)$$

onde  $\dot{\mathbf{c}}$  representa a derivada do vetor  $\mathbf{c} = \mathbf{c}(t)$  de componentes:

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \text{ e}$$

$$\mathbf{A} = [(\phi_i|\phi_j)],$$

$$\mathbf{B} = \left[ \alpha(\nabla\phi_i|\nabla\phi_j) + V_1 \left( \frac{\partial\phi_i}{\partial x}|\phi_j \right) + \sigma(\phi_i|\phi_j) \right], \text{ e}$$

$$\mathbf{d} = [(f|\phi_j)]$$

### 3.5.2 Discretização Temporal

Feita a discretização espacial o passo seguinte é fazer a discretização temporal da equação 3.14 via o método de Crank Nicolson. Para simplicidade denotaremos:

$$c_i^n = c_i(t_n).$$

As seguintes aproximações serão usadas em 3.14 :

$$\frac{dc_i}{dt} \Big|_{(t_n + \frac{\Delta t}{2})} \approx \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \quad (3.15)$$

$$c_i \left( t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \approx \frac{c_i^{n+1} + c_i^n}{2} . \quad (3.16)$$

Assim sendo, obtemos o seguinte sistema linear:

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{c}^{(n+1)} = \mathbf{B}_1 \mathbf{c}^{(n)} + \Delta t \mathbf{d}_1 \quad (3.17)$$

onde

$$\mathbf{A}_1 = \left( \mathbf{A} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{B} \right),$$

$$\mathbf{B}_1 = \left( \mathbf{A} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{B} \right),$$

$$\mathbf{d}_1 = [(f(t_n + \frac{1}{2})|\phi_j)] \text{ e}$$

$$\mathbf{c}^{(0)} = \begin{pmatrix} c_1^{(0)} \\ \vdots \\ c_N^{(0)} \end{pmatrix}$$

$$c_i^{(0)} = u(x_i, y_i, 0), \quad i = 1, \dots, N.$$

os termos dessas matrizes sendo:

$$\mathbf{A}_1 = \left[ \alpha \frac{\Delta t}{2} (\nabla \phi_i | \nabla \phi_j) + V_1 \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} | \phi_j \right) + \left( 1 + \sigma \frac{\Delta t}{2} \right) (\phi_i | \phi_j) \right] \text{ e}$$

$$\mathbf{B}_1 = \left[ -\alpha \frac{\Delta t}{2} (\nabla \phi_i | \nabla \phi_j) - V_1 \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} | \phi_j \right) + \left( 1 - \sigma \frac{\Delta t}{2} \right) (\phi_i | \phi_j) \right]$$

onde as ordens das aproximações são respectivamente  $\mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta y^2)$  e  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ .

As soluções aproximadas das equações de difusão-advecção como as apresentadas ao longo deste trabalho são de caráter parabólico-hiperbólico, cuja característica depende dos valores dos parâmetros  $\alpha$  (difusão) e  $V = (V_1, 0)$  (magnitude e direção da velocidade predominante) e a equação é mais de caráter hiperbólico quando  $V_1 > \alpha$ , então, é de se esperar um comportamento oscilatório na solução aproximada; é por isto que nos restringiremos a trabalhar com um conjunto de parâmetros ajustados à condição do número de Peclet:

$$Pe_{x_i} = \frac{V_i \Delta x_i}{\alpha}$$

que garante a estabilidade nas soluções quando  $Pe_{x_i} \leq 2$ , [10].

### 3.6 Experiências Computacionais e Simulações

Nesta abordagem se desenvolveram dois programas em FORTRAN 77 (ver Apêndice C) fazendo uso das rotinas SGECO e SGESL do LINPACK para a decomposição LU da matriz  $\mathbf{A}_1$  e a resolução da equação 3.17 respectivamente com o dado inicial  $c^{(0)}$  para cada passo no tempo. Os dados obtidos na execução do programa foram levados ao *software Mathematica* para obtenção dos gráficos.

Todos os cálculos se realizaram inicialmente em microcomputadores IBM PC AT 386 e pelas suas limitações e para obter melhores resultados passamos a usar as estações de trabalho em sistema UNIX.

Os resultados de  $(\nabla \phi_i | \nabla \phi_j)$ ,  $(\phi_i | \phi_j)$ ,  $\left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} | \phi_j \right)$  foram obtidos analiticamente e com quadratura gaussiana com número de pontos para se ter resultados exatos (e posteriormente, com *Mathematica*).

Com o intuito de descrever a dispersão dos poluentes pela influência do vento numa determinada região é que os resultados seguintes serão comparados com aqueles onde a influência do vento é nula.

Os gráficos foram traçados usando o *software Mathematica* disponível nas estações SUN, em sistema **UNIX** do **LABMA** e foram obtidos usando diversos conjuntos de parâmetros e em duas situações : quando a fonte poluidora esta localizada no centro da região e, para aproveitar a simetria do fenomeno, a fonte situada no extremo dela.

### 3.6.1 Resultados com Elementos Finitos de Primeira Ordem

#### Caso A - Fonte no Centro do Dominio

##### A.1

Com a fonte no centro do dominio e os parâmetros  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$ . Para dez passos no tempo (NPT=10) na figura 3.3 quando a velocidade  $V_1 = 0$ ; na mesma figura nota-se ligeiramente a influência da velocidade sobre a distribuição da concentração quando  $V_1 = 0.1$ .



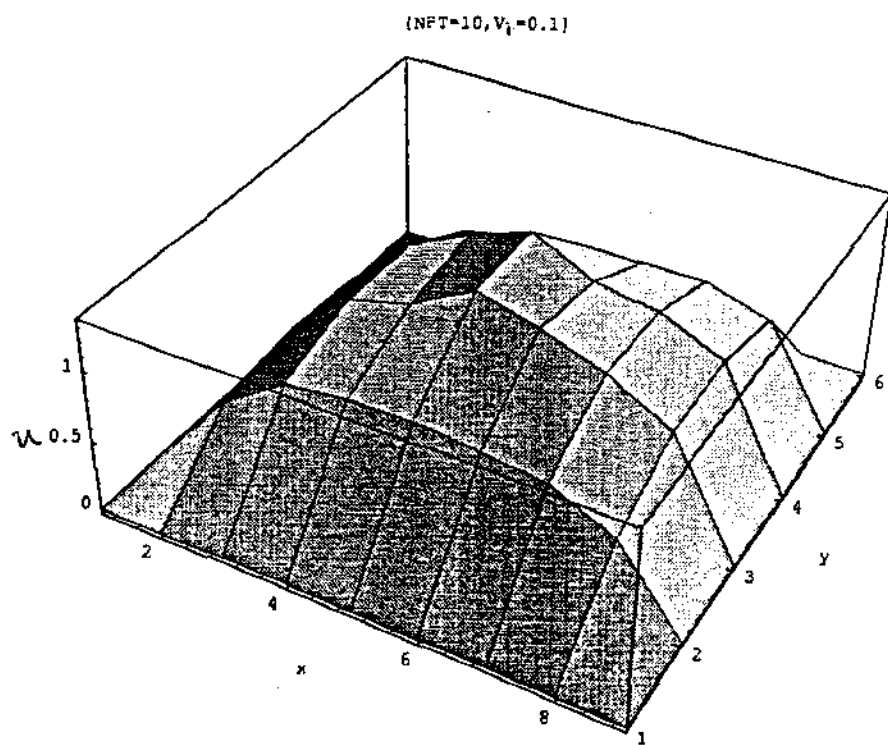
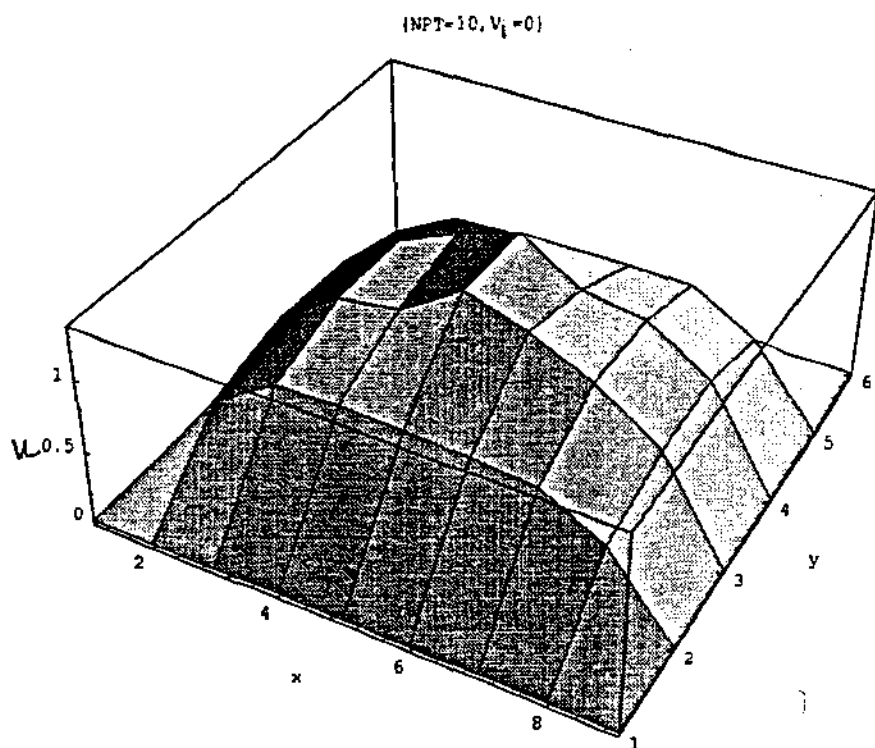


Figura 3.3: Caso A.1:  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$

## A.2

Com o mesmo conjunto de parâmetros e com 50 passos no tempo dá para perceber a influência da velocidade o que é melhorado quando  $NPT = 100$  e com uma malha mais refinada (fig. 3.4).

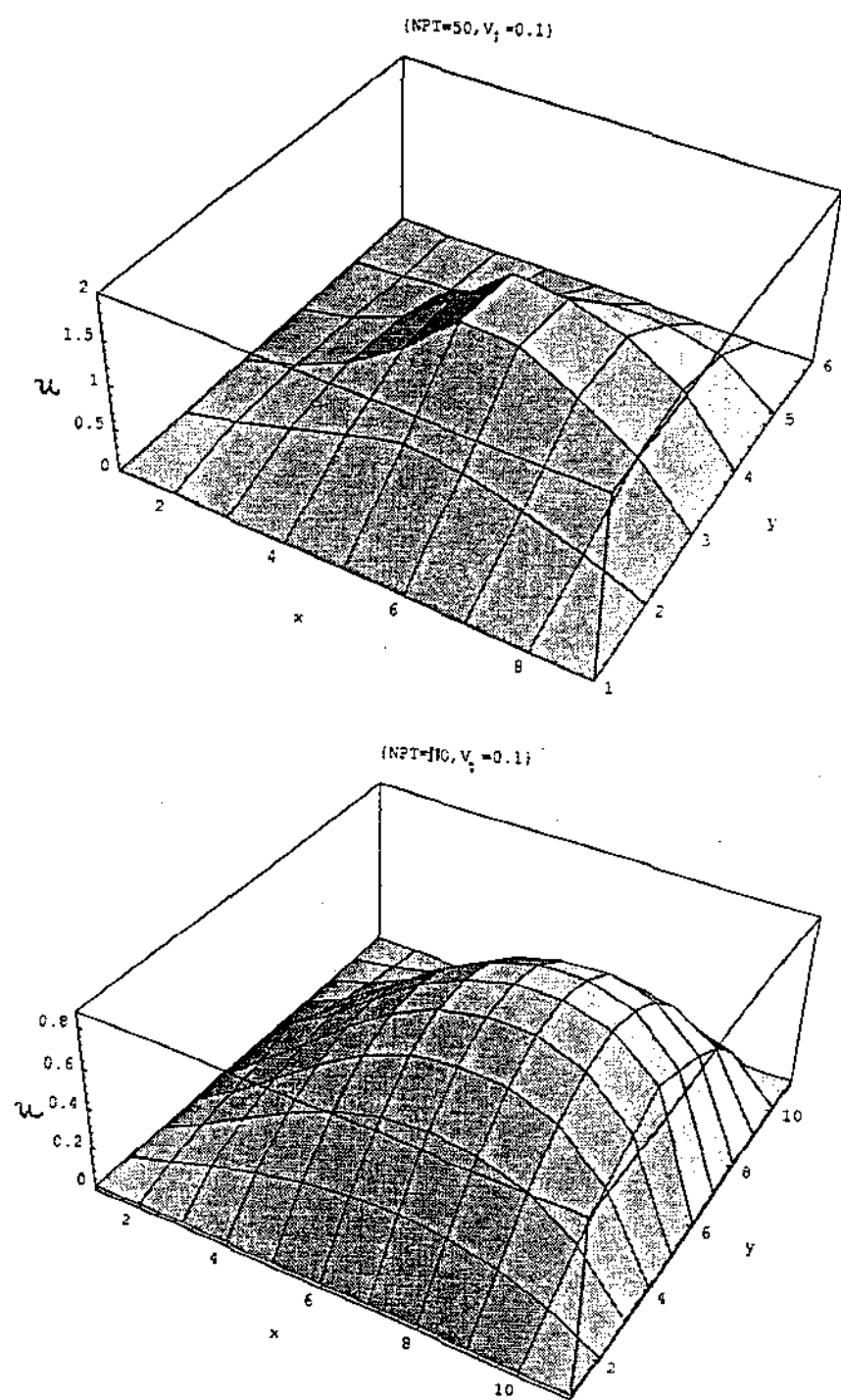


Figura 3.4: Caso A.2:  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$

Aproveitando o comportamento observado nas simulações feitas nos casos A.1 e A.2 colocaremos a seguir a fonte no canto.

## **Caso B - Fonte no Canto do Dominio**

### **B.1**

Com os parâmetros  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$  e com a fonte poluidora no canto observa-se o comportamento, na figura 3.5, quando a velocidade é nula. No caso do valor  $V_1 = 0.1$  a influência que ejerce a velocidade é notável; ambas se realizaron para 20 passos no tempo.

### **B.2**

Na figura 3.6, mantendo a velocidade e o mesmo conjunto de parâmetros de B.1, observamos que depois de 100 passos no tempo as zonas afetadas serão aquelas no sentido da velocidade. E pode-se inferir já que a região vizinha localizada no ângulo superior esquerdo da região será afetada com a menor incidência.

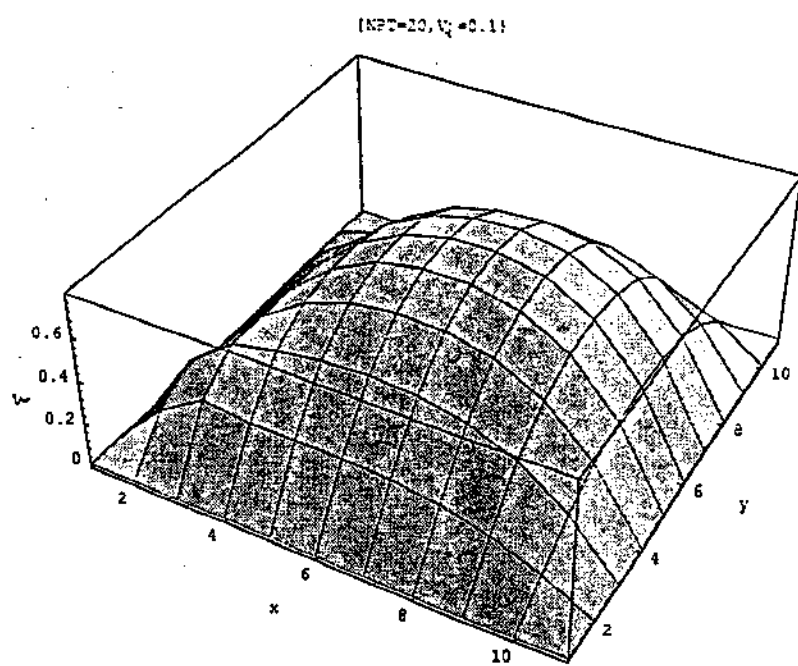
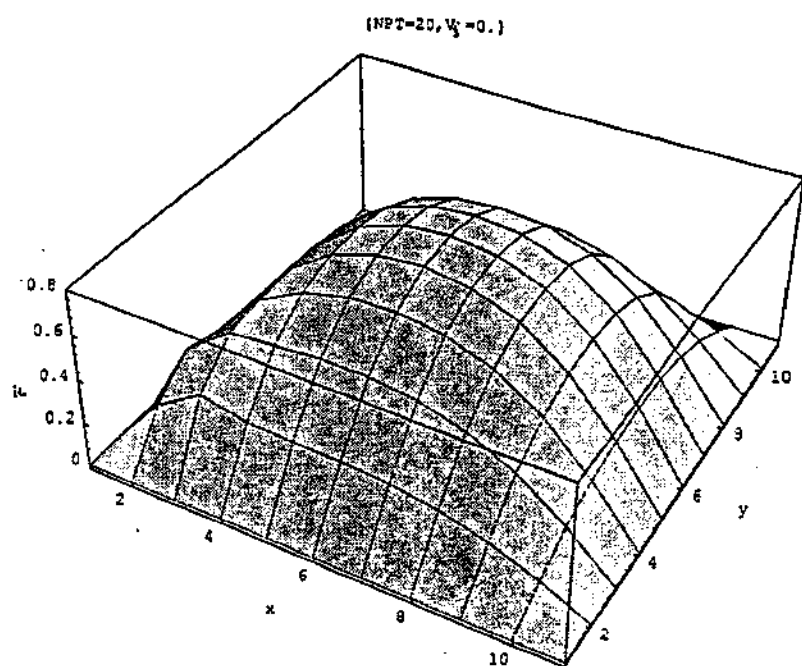


Figura 3.5: Caso B.1:  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$

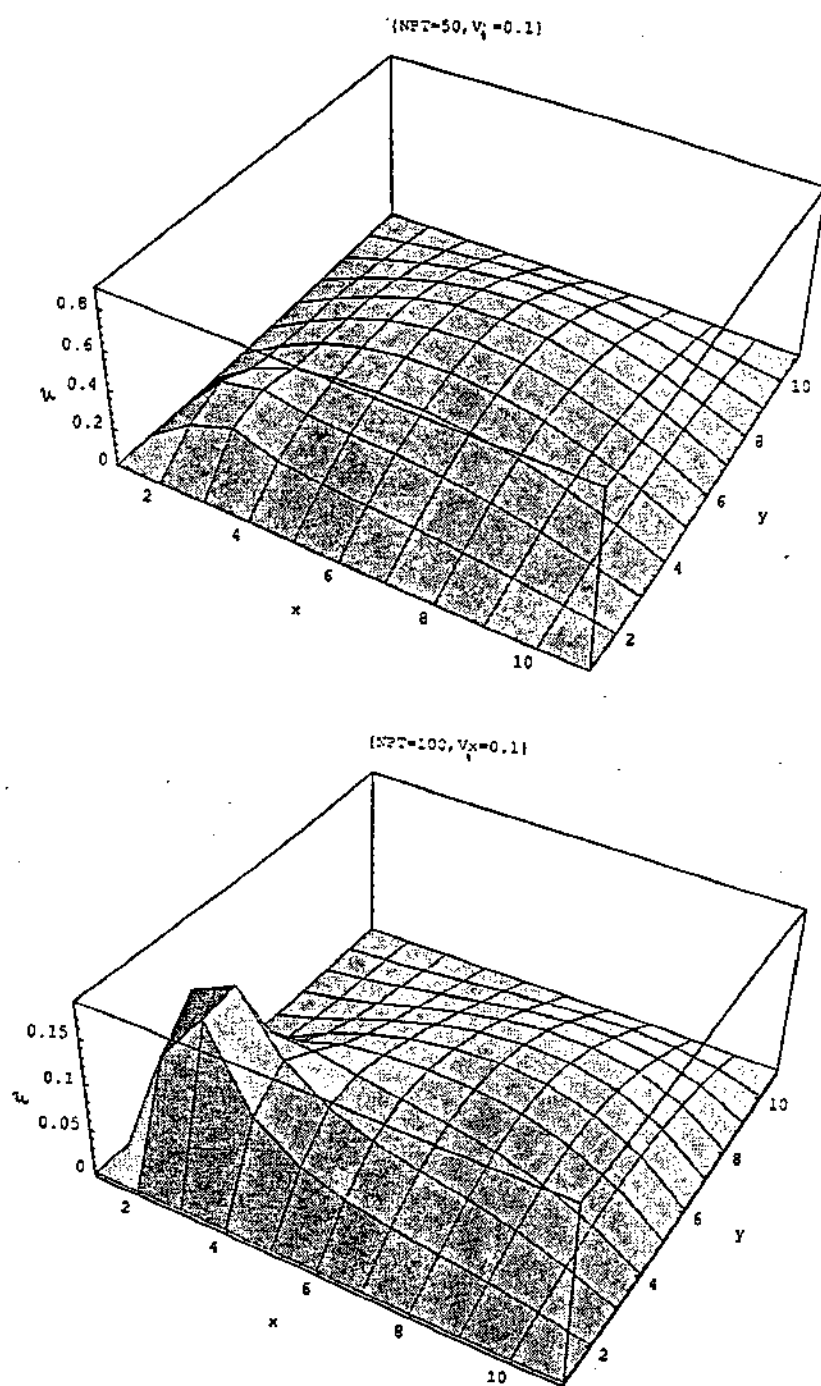


Figura 3.6: Caso B.2:  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$

### B.3

A título de ilustração observemos o que acontece na figura 3.7, ainda com a fonte no canto, com o conjunto de parâmetros  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_1 = 0.5$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$ .

Com apenas 10 passos no tempo a concentração ficou deslocada no sentido da velocidade e para  $NPT = 50$  ela fica acumulada segundo o ângulo inferior direito do domínio, mostrando assim que quanto maior a velocidade, a difusão dos poluentes é transportada mais rapidamente no decorrer do tempo.

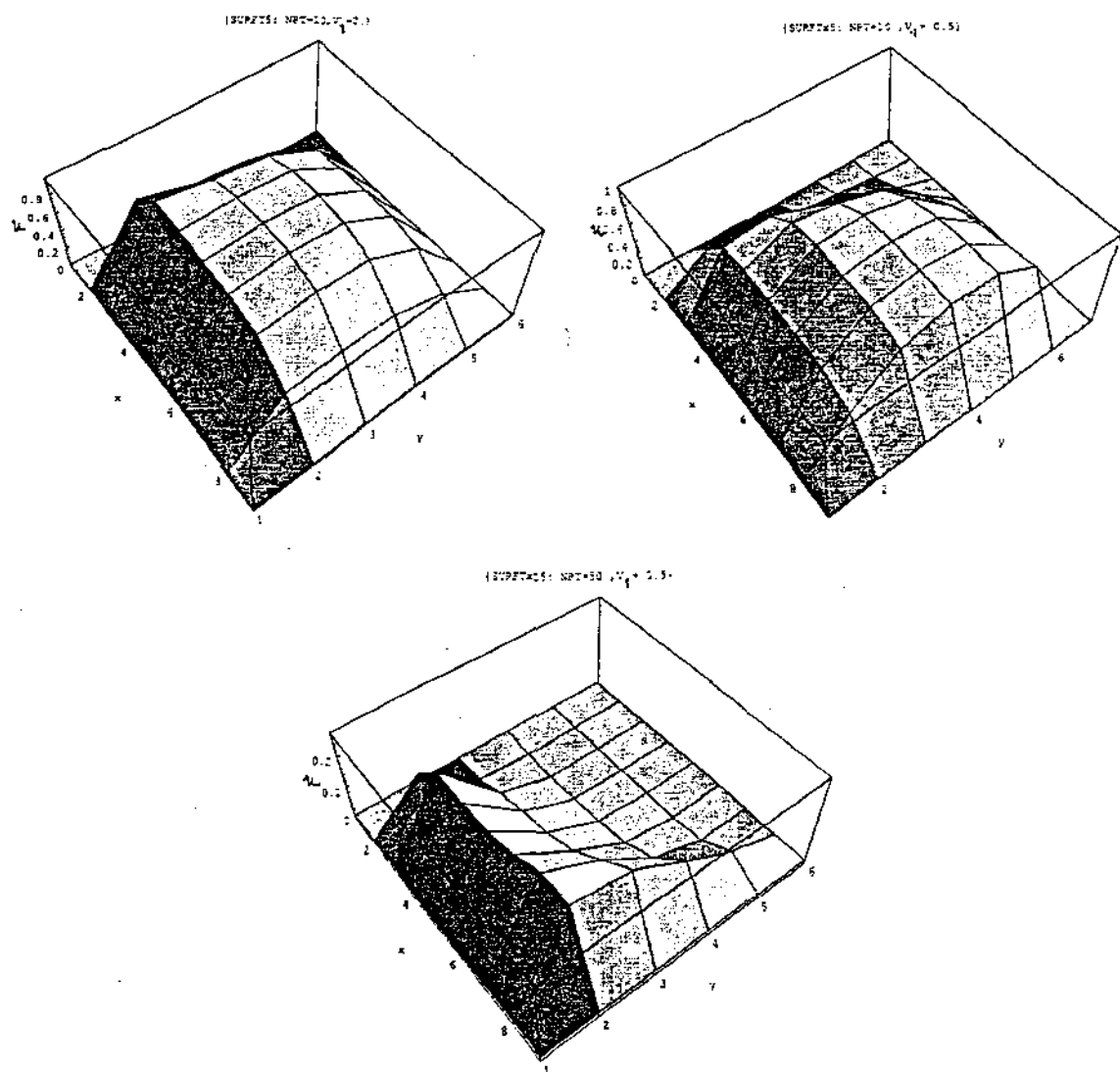


Figura 3.7: Caso B.3:  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_1 = 0.5$ ,  $V_2 = 0$  e  $f = 1$



### 3.6.2 Resultados com Elementos Finitos de Segunda Ordem

Nos resultados anteriores o programa permite o trabalho com uma matriz de rigidez de ordem máxima igual a 125 cuja ordem pode ser acrescentada fazendo algumas mudanças simples; pelas condições de Dirichlet do problema, o número de nós é igual a  $NN = (N_x - 1)(N_y - 1)$ , onde  $N_x$ ,  $N_y$  são o número de subintervalos nos eixos  $X$  e  $Y$  respectivamente. Usando elementos finitos de segunda ordem (ver Apêndice B), a matriz de rigidez requer uma dimensão  $NN' = (2N_x - 1)(2N_y - 1)$ , onde para determinados valores de  $N_x$  e  $N_y$  na discretização teremos  $NN'$  comparavelmente maior que  $NN$ ; com a facilidade de trabalho da estação elaborá-se outro programa que suporta dimensões de matrizes cuja ordem vão até 400 e se obtiveram resultados muito melhores que os anteriores, cuja visualização é evidente.

#### Caso C: Condição Inicial Nula

No teste anterior consideramos  $u_0 = 1$ ; aqui exemplificamos  $u_0 = 0$  (fig. 3.8) que é o caso de contar com uma zona ainda não poluída e poder observar como se distribui a concentração dos poluentes sujeitos á ação de uma fonte poluidora no meio da região quando não se tem velocidade e quando a velocidade é 0.1 para 10 e 50 passos no tempo. Os parâmetros usados são:  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$ . Observe a similaridade com aquele no modelo da Pluma onde a participação da velocidade é mínima.

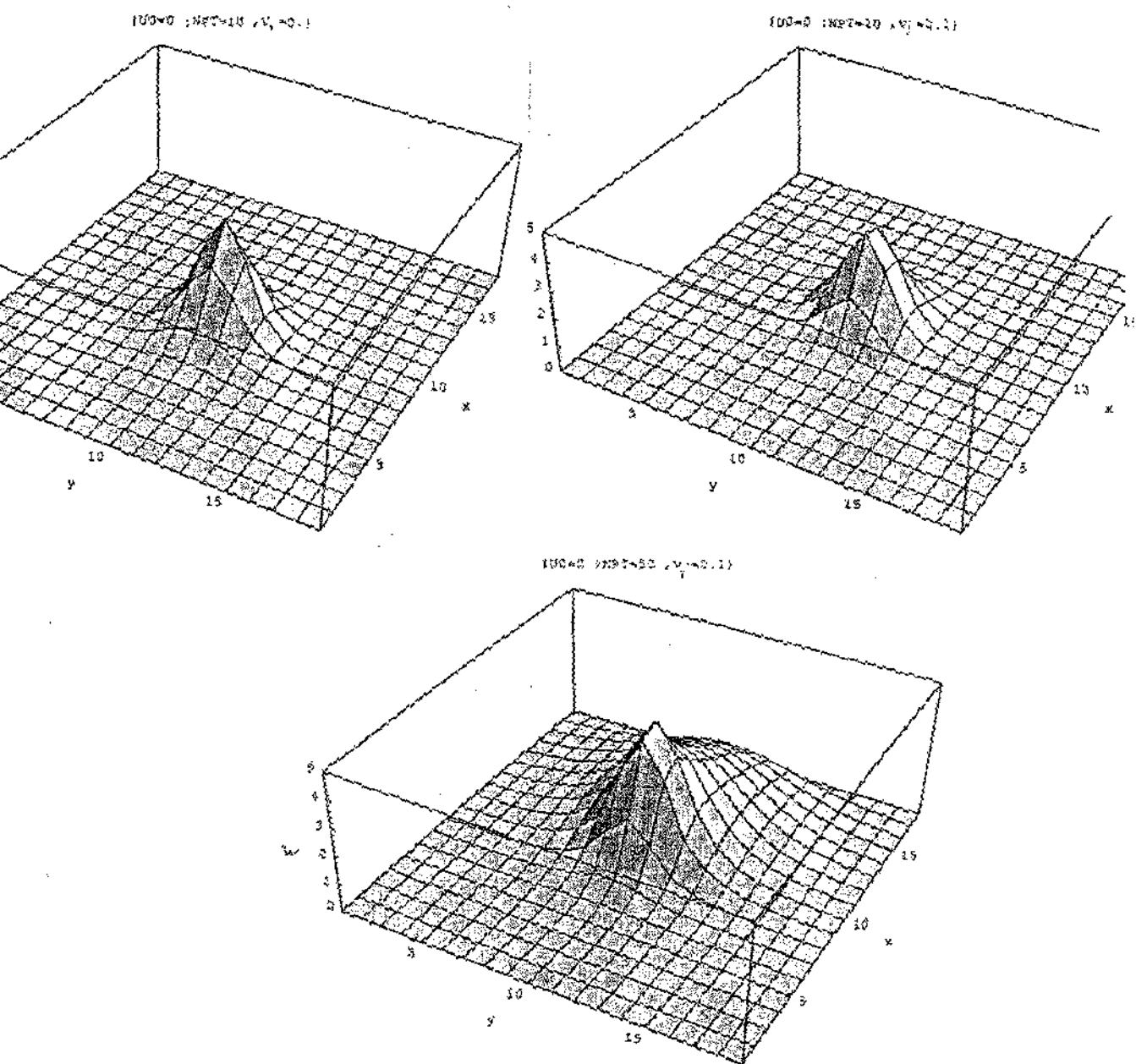


Figura 3.8: Condição Inicial Nula

## Caso D - Fonte no Centro do Dominio

### D.1

Na figura 3.9, com  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$ .

### D.2

Com os parâmetros  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$ ; na figura 3.10.

### D.3

Usando os parâmetros  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$ ; observe a figura 3.11.

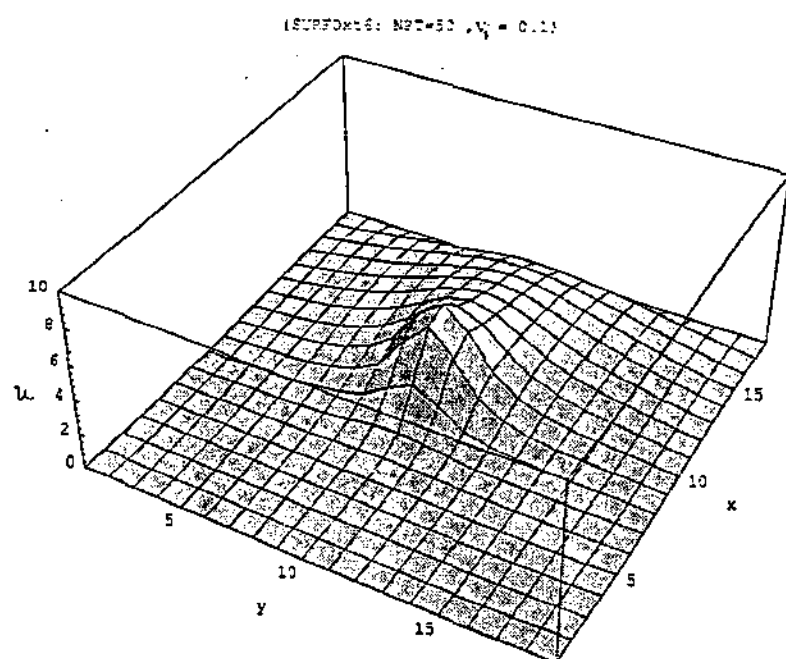
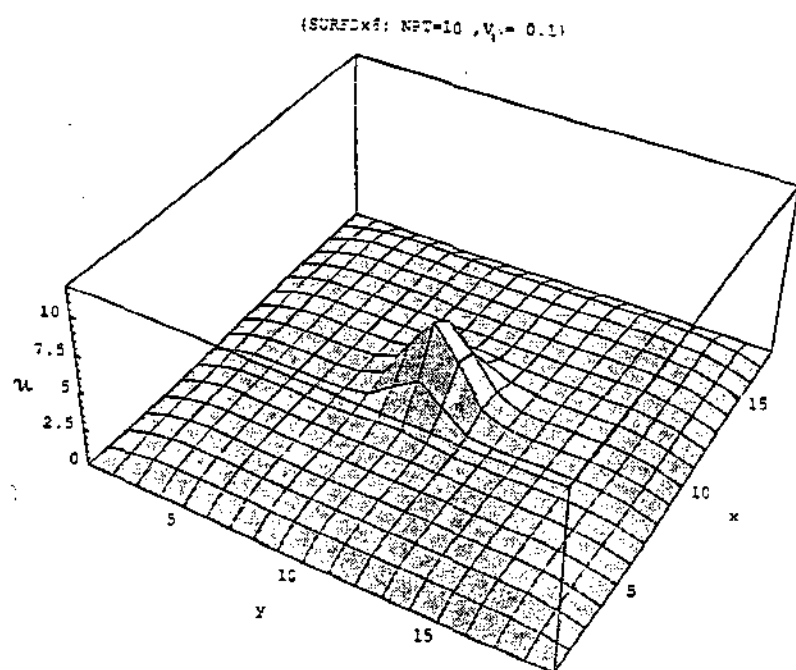


Figura 3.9: Caso D.1:  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$

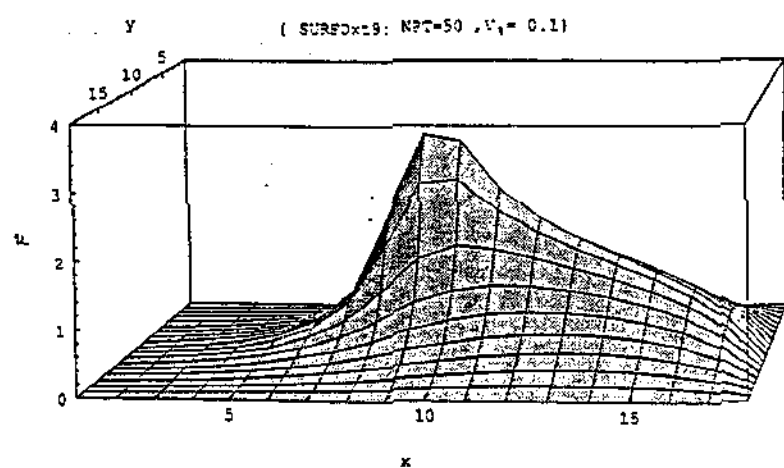
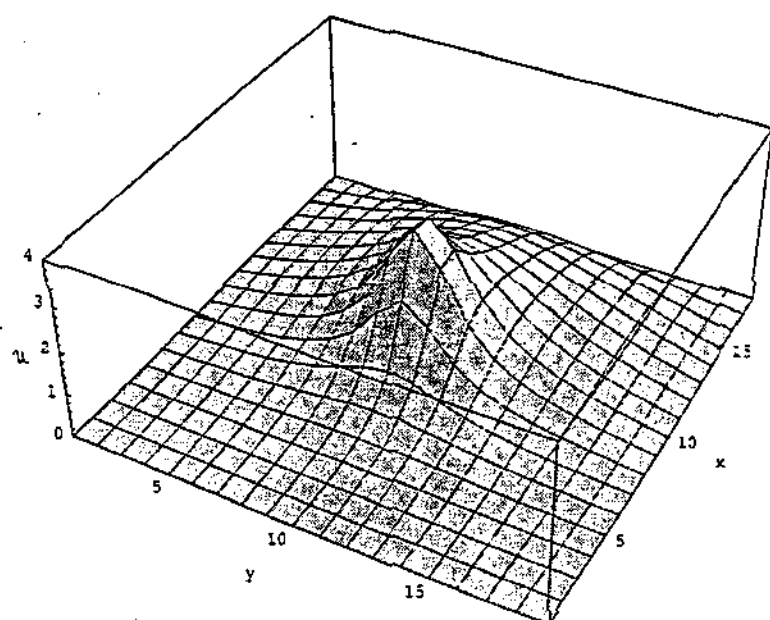


Figura 3.10: Caso D.2:  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$

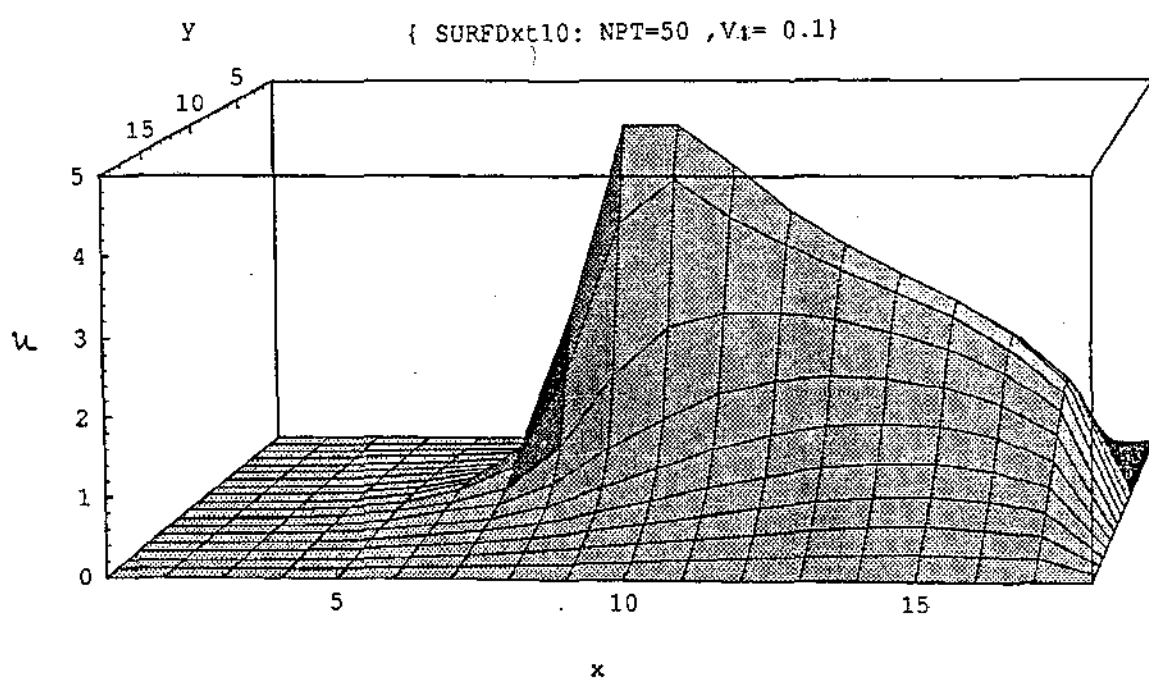


Figura 3.11: Caso D.3:  $\alpha = 0.005$ ,  $\sigma = 0.01$ ,  $V_1 = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$

#### D.4

Novamente a título de ilustração mais alguns resultados para 50 passos no tempo, no caso  $V_1 = 0.5$  e os seguintes parâmetros:  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$  (fig. 3.12) onde a instabilidade no bordo superior do domínio é devida ao forte deslocamento dos poluentes.

{ SURFDxt8: NPT=50 ,  $V_1 = 0.5$  }

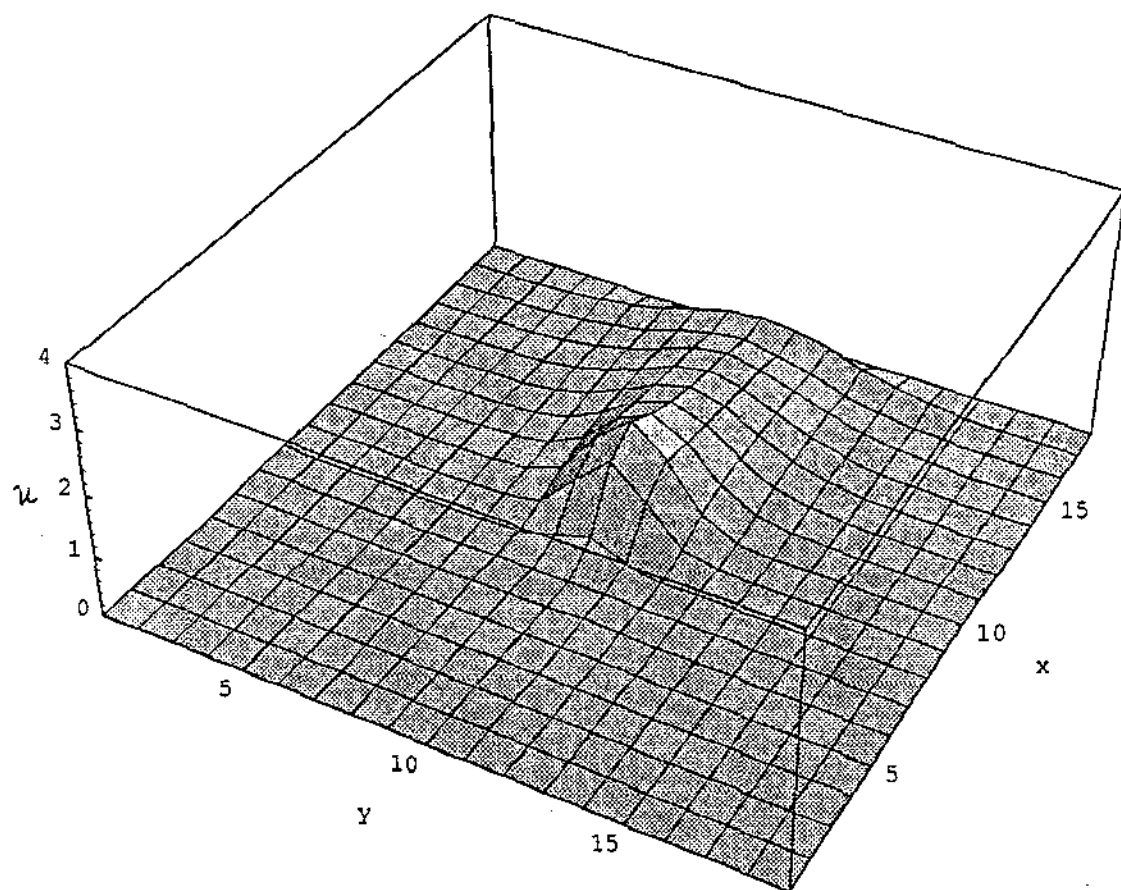


Figura 3.12: Caso D.4:  $\alpha = 0.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $u_0 = 1$



## Capítulo 4

# Uma Segunda Abordagem do Problema

Neste capítulo iremos reconsiderar algumas hipóteses simplificadoras assumidas anteriormente, embora mantendo o problema num domínio bidimensional agora nas direções dos eixos  $x$  e  $z$ . O coeficiente de difusão não será mais considerado constante. Serão garantidas existência e unicidade e métodos numéricos de aproximação serão apresentados.

### 4.1 Formulação Clássica do Problema

Tomando em consideração que a difusão é variável em relação à altura da fonte poluidora o parâmetro de difusão  $\alpha(x, t)$  será variável com respeito à altura do eixo  $z$ , ou seja:

$$\alpha(x, t) = \alpha(z).$$

Trabalha-se sobre um paralelepípedo  $\Omega$  definido por:

$$\Omega = \{(x, y, z) \in R^3 / x \in I_x, y \in I_y, z \in I_z\}$$

com  $I_x = [0, L_x]$ ,  $I_y = [0, L_y]$ ,  $I_z = [z_0, z_1]$ . Com  $z_0 > 0$  e  $L_z = z_1 - z_0$ , os comprimentos desses intervalos são respectivamente  $L_x$ ,  $L_y$  e  $L_z$ .

Se as faces laterais são denotadas por  $\partial\Omega_0$ , e  $\partial\Omega_1$  denota as faces superior e inferior, então:

$$\partial\Omega = \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1,$$

com

$$\partial\Omega_0 \cap \partial\Omega_1 = \emptyset.$$

De acordo com [1] e [3], neste caso, consideramos um domínio tal que uma vez feita a emissão de poluentes pela fonte poluidora não há transmissão de poluentes nas faces laterais, ou seja, o fluxo em  $\partial\Omega_1$  é nulo:

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{em} \quad \partial\Omega_0$$

Sendo que os poluentes de tipo aerossol ficam depositados no chão, isto é, sem penetrar no solo, e pelas condições de vento e a ação da gravidade eles não chegam à face superior, então em  $\partial\Omega_1$ :

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{em} \quad \partial\Omega_1 \quad (4.1)$$

Assumimos também que no início a concentração de poluente é dada por:

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(x) \quad \text{em} \quad \Omega.$$

Então o modelo matemático formulado classicamente é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha(z)\nabla u) + \operatorname{div}(\mathbf{V}u) + \sigma u = f, \\ \text{em } \Omega \times [0, T], \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0 \quad \text{em } \Omega \text{ e} \\ \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{em } \partial\Omega. \end{array} \right. \quad (4.2)$$

## 4.2 Formulação Variacional do Problema

Considerando a velocidade  $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$  de componentes constantes e sendo que:

$$\operatorname{div}(\alpha(z)\nabla u) = \alpha(z)\Delta u + \frac{d\alpha(z)}{dz} \frac{\partial u}{\partial z}$$

então em 4.2, teremos:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha(z)\Delta u + \mathbf{V} \cdot \nabla u + \sigma u = f & \text{em } \Omega \times [0, T], \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0 & \text{em } \Omega, \text{ e} \\ \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{em } \partial\Omega. \end{cases} \quad (4.3)$$

com  $\mathbf{V} = (V_1, V_2, \tilde{V}_3)$  e  $\tilde{V}_3 = V_3 - \frac{d(\alpha(z))}{dz}$ .

Similarmente à primeira abordagem, aqui definimos o problema no espaço de Hilbert dado por:

$$\mathcal{V} = \left\{ v \in L^2(I_t; H^1(\Omega)) : \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ em } \partial\Omega, \forall t \in I_t \right\}$$

onde os produtos internos são aqueles definidos na seção 2 do capítulo 3. Multiplicando a equação diferencial pela função teste  $v \in \mathcal{V}$  e integrando sobre  $\Omega$ :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v \, dx - \int_{\Omega} \alpha(z) \Delta u \, dx - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{V}u) v \, dx + \\ + \int_{\Omega} \sigma u v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Aplicando mais uma vez o Teorema de Green e considerando as condições de contorno de 4.3:

$$\int_{\Omega} \alpha(z) \Delta u \, dx = - \int_{\Omega} \left( \alpha(z) \nabla u \cdot \nabla v + \frac{d\alpha}{dz} \frac{\partial u}{\partial z} v \right) dx. \quad (4.5)$$

Considerando uma variação linear crescente no coeficiente de difusão, ou seja:

$$\alpha(z) = az, \quad a > 0 \text{ e } z \in [z_0, z_1] \quad (4.6)$$

a equação 4.5 se tornará:

$$- a \int_{\Omega} \left( z \nabla u \nabla v + \frac{\partial u}{\partial z} v \right) dx \quad (4.7)$$

Substituindo-se 4.7 em 4.4 obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v dx + \int_{\Omega} a z \nabla u \nabla v dx + \int_{\Omega} \left( \mathbf{V} \cdot \nabla u + a \frac{\partial u}{\partial z} \right) v dx + \\ + \int_{\Omega} \sigma u v dx = \int_{\Omega} f v dx. \end{aligned}$$

Por outro lado, como:

$$\mathbf{V} \cdot \nabla u + a \frac{\partial u}{\partial z} = \mathbf{V} \cdot \nabla u$$

em termos do produto interno, temos que a formulação variacional é:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial u}{\partial t} | v \right) + a(z \nabla u | \nabla v) + (\mathbf{V} \cdot \nabla u | v) + (\sigma u | v) = \\ (f | v), \quad \forall v \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (4.8)$$

### 4.3 Existência e Unicidade

Remetendo-nos novamente ao Apêndice A e em forma similar àquilo que foi feito na primeira abordagem, vejamos que a equação 4.8 tem uma única solução.

Identifiquemos o operador  $A \left( \mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)$ , mencionado nesse Apêndice, com a função  $a(t; u, v)$  na formulação 4.3.

Observamos os termos de A.4 e assim:

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_1(\mathbf{x}, t) &= (\alpha(z), 0, 0) \\ \bar{\alpha}_2(\mathbf{x}, t) &= (0, \alpha(z), 0) \\ \bar{\alpha}_3(\mathbf{x}, t) &= (0, 0, \alpha(z)) \end{aligned}$$

Escolhendo

$$a_{ii}(\mathbf{x}, t) = \alpha(z), \text{ e } a_{ij}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \forall i \neq j, \text{ e com}$$

a consideração 4.6, teremos

$$\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3 - a)$$

daí

$$a_1(\mathbf{x}, t) = V_1, \quad a_2(\mathbf{x}, t) = V_2, \quad a_3(\mathbf{x}, t) = V_3 - a$$

e

$$a_0(\mathbf{x}, t) = \sigma,$$

então se

$$V'_1 = V_1, \quad V'_2 = V_2, \quad V'_3 = V_3 - a$$

identificamos facilmente:

$$A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^3 V'_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \sigma \quad (4.9)$$

obtendo o operador variacional associado

$$\begin{aligned} a(t; u, v) &= \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} (a_i) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} V'_i \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} v(x) dx + \\ &+ \int_{\Omega} \sigma u(x) v(x) dx \end{aligned} \quad (4.10)$$

Vejamos que as condições do Teorema de Lions são satisfeitas:

- Assumidas  $f$  e  $u_0 \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$ ;
- $a_{ij}, a_i, a_0 \in L^\infty(\Omega \times [0, T])$ ;
- Temos

$$\sum_{i,j=1}^3 a_{ij}(\mathbf{x}, t) \xi_j \xi_i = \sum_{i=1}^3 a_{ii}(\mathbf{x}, t) \xi_i^2 = (a_{33})(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 + |\xi_3|^2)$$

como  $z_0 \leq \xi_3 \leq z_1$  então com a escolha  $\gamma = az_0 > 0$ :

$$\sum_{i,j=1}^3 a_{ij}(x, t) \xi_j \xi_i \geq \gamma (|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2 + |\xi_3|^2)$$

- Como

$$a(t; u, v) = \sum_{i=1}^3 \left( az \frac{\partial u}{\partial x_i} \middle| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^3 \left( V'_i \frac{\partial u}{\partial x_i} | v \right) + (\sigma u | v)$$

então é uma função mensurável;

- A continuidade<sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} |a(t; u, v)| &\leq \sum_{i=1}^3 \left[ \left| \left( az_3 \frac{\partial u}{\partial x_i} \middle| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{L^2(\Omega)} \right| + |V'_i| \left| \left( \frac{\partial u}{\partial x_i} \middle| v \right)_{L^2(\Omega)} \right| \right] + \\ &+ |(\sigma u | v)_{L^2(\Omega)}| \end{aligned} \quad (4.11)$$

Como  $0 < z_0 \leq x_3 \leq z_1$  facilmente pode-se determinar que:

$$\left| \left( az_3 \frac{\partial u}{\partial x_i} \middle| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) \right| \leq az_1 \left| \left( \frac{\partial u}{\partial x_i} \middle| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) \right|. \quad (4.12)$$

Usando 4.12 em 4.11 onde ainda se considera  $\beta_0 = \max\{az_1, \sigma\} > 0$  e se faz uso da desigualdade de Cauchy:

$$\begin{aligned} |a(t; u, v)| &\leq \\ &\leq \beta_0 \left( \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} + \|u\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} \right) + \\ &\sum_{i=1}^3 |V'_i| \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

---

<sup>1</sup>Sem perda de generalidade, considera-se  $x_3 = z$  e de acordo com o contexto especificamos  $(\cdot | \cdot)_{H^1}$  ou  $(\cdot | \cdot)_{L^2(\Omega)}$  se for necessário.

Pela imersão contínua de  $\mathcal{V}$  em  $H^1$ :

$$\|u\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|u\|_{H^1(\Omega)} \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u\|_{H^1(\Omega)}^2$$

e

$$\left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \leq \|v\|_{H^1(\Omega)}.$$

Substituindo os dois últimos termos em 4.13 obtemos que:

$$|a(t; u, v)| \leq \left( 4\beta_0 + \sum_{i=1}^3 |V'_i| \right) \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}.$$

Assim se

$$M = 4\beta_0 + \sum_{i=1}^3 |V'_i| > 0$$

demonstra-se que:

$$|a(t; u, v)| \leq M \|u\| \|v\|.$$

- A Coercividade:

$$\begin{aligned} a(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \\ &= \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} a z \left( \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)^2 dx + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} V'_i \frac{\partial v}{\partial x_i} v dx \\ &\geq a z_1 \left( \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|^2 \right) + (\sigma + \lambda) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^3 V'_i \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i} v dx \end{aligned} \quad (4.14)$$

mas como:

$$V'_i \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i} v \, dx \geq -V'_i \left| \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i} v \, dx \right| \geq -V'_i \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)}$$

e considerando que:

$$-ab \geq -\frac{\epsilon}{2} |a|^2 - \frac{1}{2\epsilon} |b|^2$$

então:

$$\sum_{i=1}^3 V'_i \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i} v \, dx \geq \sum_{i=1}^3 \left( -\frac{\epsilon}{2} V'_i \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2V_i\epsilon} \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \right),$$

que em 4.14:

$$a(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \left( \sum_{i=1}^3 \left( az_1 - \frac{\epsilon}{2} V'_i \right) \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + \left( \sigma + \lambda - \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2V_i\epsilon} \right) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Tomando

$$\delta = \min \left\{ az_1 - \frac{\epsilon}{2} V'_i \right\}_{i=1,2,3},$$

então

$$a(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \delta \sum_{i=1}^3 \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left( \sigma + \lambda - \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2V_i\epsilon} \right) \|v\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Para

$$\gamma_0 = \min \left\{ \delta, \left( \sigma + \lambda - \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2V_i\epsilon} \right) \right\}$$

e fazendo uma escolha conveniente para  $\lambda$  e  $\epsilon$  tal que  $\delta > 0$ ,  $\gamma_0 > 0$  podemos garantir que:

$$a(t; v, v) + \lambda \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \gamma_0 \|v\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

Satisfeitas as condições do Teorema de Lions podemos dizer que existe uma única solução  $u$  do problema dado por 4.8.



## 4.4 Discretização do Problema

Procedendo de forma similar ao capítulo anterior usamos a técnica dos Elementos Finitos para a discretização espacial e Crank-Nicolson na variável temporal.

### 4.4.1 Discretização Espacial

Usando o subespaço  $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$  de dimensão finita e considerando uma base de elementos finitos  $\{\phi_i\}_{i=1}^N$  tal que  $\mathcal{V}_h$  é gerado por  $\{\phi_i\}_{i=1}^N$  onde  $N$  é o número de nós da triangularização em  $\Omega$ . Então a formulação 4.8 em  $\mathcal{V}_h$  vem dada por:

$$\left( \frac{\partial u}{\partial t} | v_h \right) + (az \nabla u | \nabla v_h) + (\mathbf{V} \nabla u | v_h) + (\sigma u | v_h) = (f | v_h) \quad (4.15)$$

Procura-se uma solução<sup>2</sup>  $u_h \in \mathcal{V}_h$  de 4.15 tal que:

$$u_h = \sum_{i=1}^N c_i(t) \phi_i(\mathbf{x}) \quad (4.16)$$

Como o parâmetro de difusão é variável com respeito a  $z$  e que  $z_0 \leq z \leq z_1$ , então há difusão máxima,  $\alpha_{\max} = az_1$  e difusão mínima  $\alpha_{\min} = az_0$ .

Consideremos a superfície terrestre no eixo  $XY$  e o vento predominante ao longo do eixo  $X$ , assim nosso domínio tem o plano  $XY$  como base. Os poluentes influenciados pela gravidade apresentam uma velocidade na direção do eixo  $Z$  (apontando na direção negativa) mas pelo fato de eles serem, em geral, metais não pesados essa velocidade é muito pequena comparada com o valor daquela no eixo  $X$  e pode ser considerada desprezível.

Fazemos um corte transversal no paralelepípedo justo na posição da fonte ( $y = y_f$ ) tal que o problema pode ser considerado num domínio bidimensional do plano  $XZ$  segundo a ilustração dada pela figura 4.1:

Assim a formulação clássica do problema bidimensional em 4.3 é para  $\mathbf{V} = (V_1, V_3)$  com  $V_1 > 0$  e  $V_3 \leq 0$ .

---

<sup>2</sup>Como  $u_h$  aproxima  $u$ , no contexto do problema  $u_h$  pode ser considerado como  $u$ .

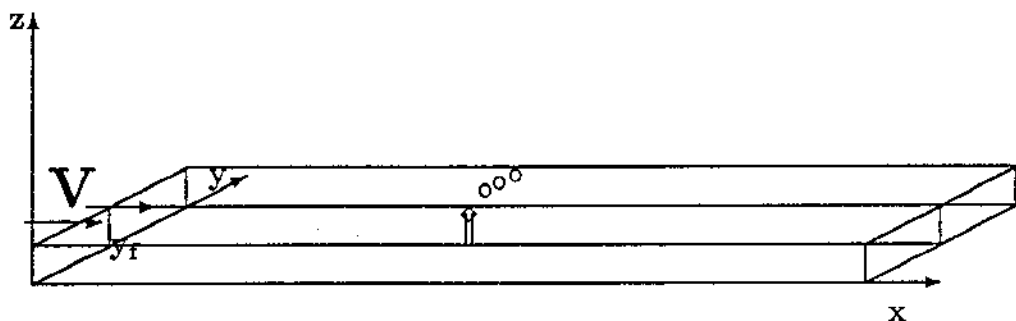


Figura 4.1: Redução ao caso Bidimensional na Segunda Abordagem

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - az \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + V_1 \frac{\partial u}{\partial x} + (V_3 - a) \frac{\partial u}{\partial z} + \sigma u = f, & \text{em } \Omega \times [0, T] \\ u(x, z, 0) = u_0 & \text{em } \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n}(x, z, t) = 0 & \text{em } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.17)$$

e a respectiva formulação variacional em  $\mathcal{V}_h$ :

$$\left( \frac{\partial u}{\partial t} | v_h \right) + (az \nabla u | \nabla v) + \left( V_1 \frac{\partial u}{\partial x} + V_3 \frac{\partial u}{\partial z} | v_h \right) + \sigma(u | v_h) = \quad (4.18)$$

$$(f | v_h), \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h$$

onde

$$\nabla u = \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

Assim procurando  $u \in \mathcal{V}_h$ ,  $u = u(x, z, t)$ :

$$u = \sum_{i=1}^N c_i(t) \phi_i(x, z) \quad (4.19)$$

e para  $v_h = \phi_j$  em 4.18 obtemos o sistema ordinário:

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{c}} + \mathbf{B}\mathbf{c} = \mathbf{d} \quad (4.20)$$

onde  $\dot{\mathbf{c}}$  é a derivada do vetor  $\mathbf{c} = \mathbf{c}(t)$  e:

$$\mathbf{A} = [(\phi_i | \phi_j)],$$

$$\mathbf{B} = \left[ a(z \nabla \phi_i | \nabla \phi_j) + V_1 \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} | \phi_j \right) + V_3 \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial z} | \phi_j \right) + \sigma(\phi_i | \phi_j) \right] \text{ e}$$

$$\mathbf{d} = [(f | \phi_j)].$$

A variante deste problema com o problema do capítulo anterior está nos termos da matriz  $\mathbf{B}$  originando uma submatriz de rigidez que dependerá da posição do ponto na discretização .

#### 4.4.2 Discretização Temporal

Se por simplicidade:

$$c_i^n = c_i(t_n)$$

com as mesmas aproximações na equação 3.14, obtemos o seguinte sistema linear:

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{c}^{(n+1)} = \mathbf{B}_1 \mathbf{c}^{(n)} + \Delta t \mathbf{d} \quad (4.21)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \left(\mathbf{A} + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{B}\right) \\ \mathbf{A}_1 &= \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{2}\sigma\right) (\phi_i|\phi_j) + \frac{\Delta t\alpha}{2}(z\nabla\phi_i|\nabla\phi_j) + \frac{\Delta t}{2}V_1\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial x}|\phi_j\right) + \frac{\Delta t}{2}V_3\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial z}|\phi_j\right)\right], \\ \mathbf{B}_1 &= \left(\mathbf{A} - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{B}\right) \\ \mathbf{B}_1 &= \left[\left(1 - \frac{\Delta t}{2}\sigma\right) (\phi_i|\phi_j) - \frac{\Delta t\alpha}{2}(z\nabla\phi_i|\nabla\phi_j) - \frac{\Delta t}{2}V_1\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial x}|\phi_j\right) - \frac{\Delta t}{2}V_3\left(\frac{\partial\phi_i}{\partial z}|\phi_j\right)\right], \end{aligned}$$

e

$$\mathbf{c}^{(0)} = \begin{pmatrix} c_1^{(0)} \\ \vdots \\ c_N^{(0)} \end{pmatrix}$$

$$c_i^{(0)} = u(x_i,y_i,0), \;\; i = 1,\ldots,N.$$

## 4.5 Experiências Computacionais e Simulações

Com a mesma observação feita no final da seção 3.5, desenvolveu-se um programa em FORTRAN 77 (vide Apêndice C) que com a ajuda do LINPACK usado no capítulo anterior e com uso do *software Mathematica* obtivemos os seguintes gráficos (inicialmente para  $L_z = 0.05$  e  $L_x = 2$ ):

### Caso E - Fonte no Centro do Dominio

#### E.1

Com os parâmetros  $a = 0.1$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $f = 1$ ,  $u_0 = 1$ .  $V_1 = 0$  (fig. 4.2).

#### E.2

Agora usando os parametros de E.1 e a velocidade  $V_1 = 0.1$  (fig. 4.3).

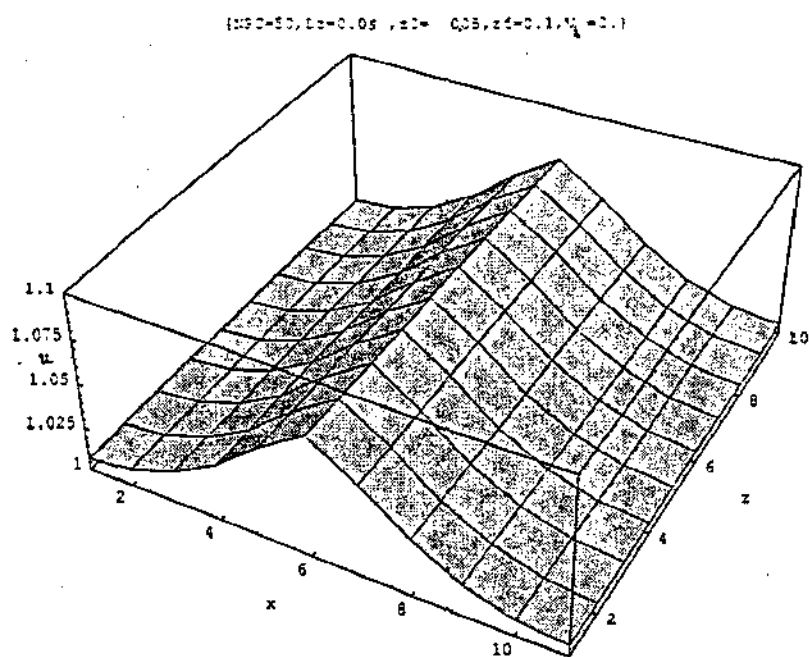
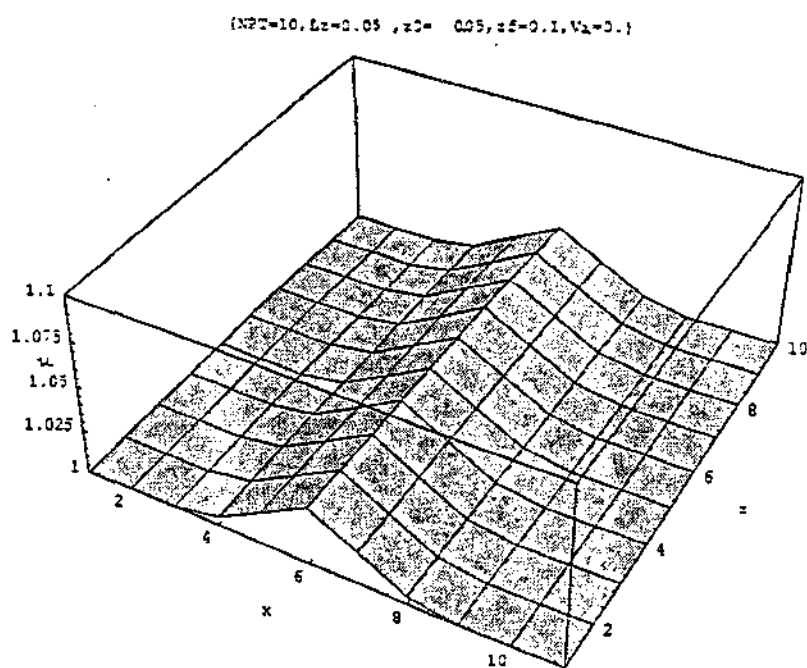


Figura 4.2: Caso E.1:  $\alpha = 0.1$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $f = 1$ ,  $u_0 = 1$  e  $V_1 = 0$

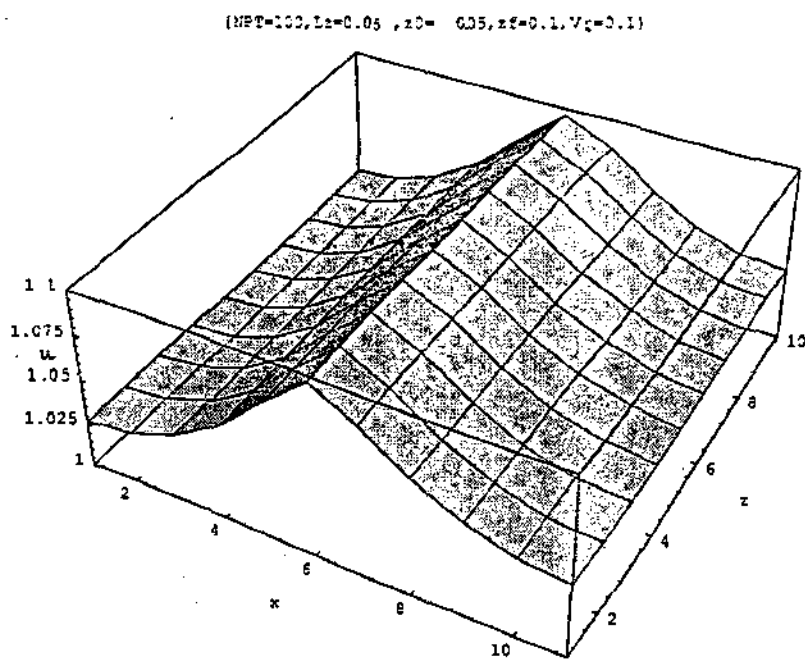
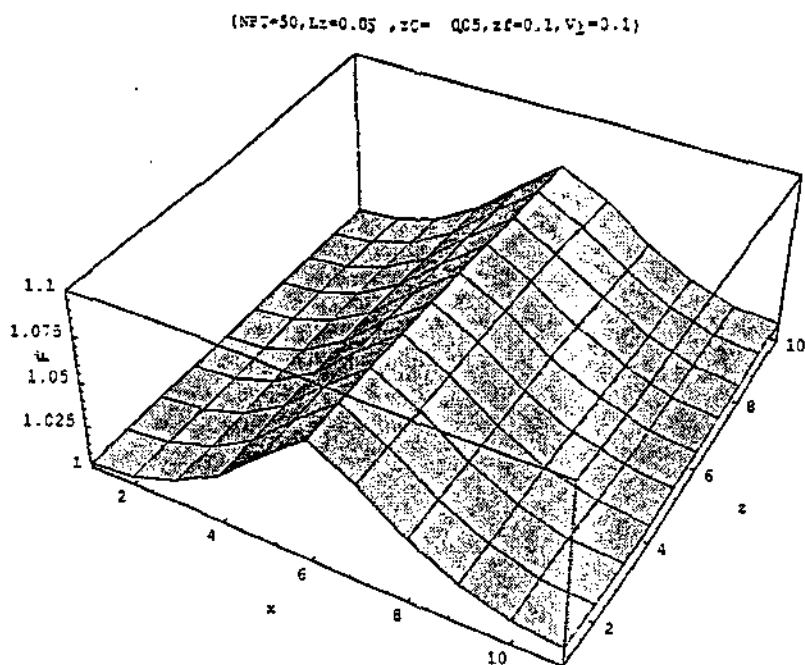


Figura 4.3: Caso E.2:  $a = 0.1$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $f = 1$ ,  $u_0 = 1$  e  $V_1 = 0.1$

Nas figuras observamos o seguinte:

- O comprimento em  $Z$  é muito pequeno e não dá para perceber variações e, para  $z$  fixo, a distribuição descreve o mesmo comportamento ao longo do eixo  $X$ ;
- Quando não há transporte e após 50 passos no tempo a concentração de poluentes passa ser ligeiramente maior do que a concentração inicial, apresentando os mesmos efeitos para  $z$  fixo ao longo do eixo  $X$ . E se fixamos  $x$  a distribuição ao longo de  $Z$  é a mesma se estabelecemos uma simetria imaginária na reta definida pela sexta partição do eixo  $X$ ;
- Com a presença de transporte e para 50 passos no tempo, notamos o acréscimo da concentração no sentido da velocidade o que é mais notório após 100 passos no tempo;
- $\alpha$  varia no intervalo  $[5 \cdot 10^{-3}, 10^{-2}]$ .

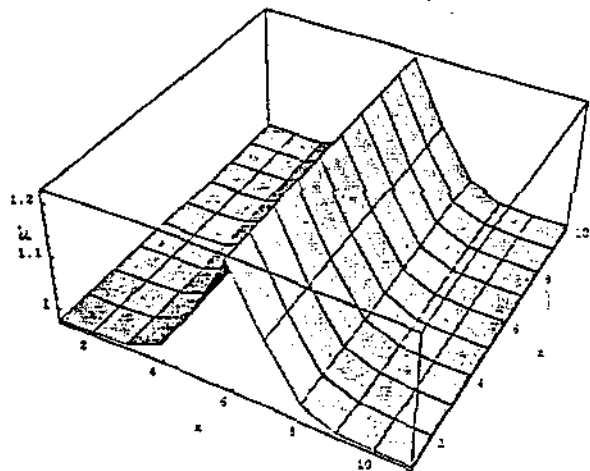
### E.3

O descrito anteriormente também é observado ao mudar o valor da constante  $a$  para  $a = 0.01$  com um ganho na concentração total atingindo uma faixa próxima a 1.2 (maior, portanto, que  $u_0$ ).

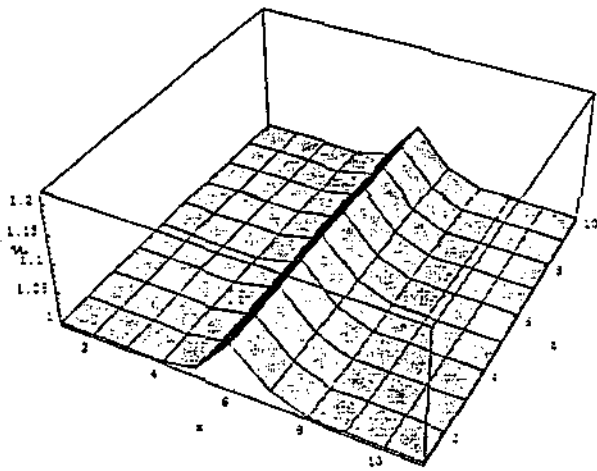
Os efeitos da velocidade são observados para  $NPT = 50$  e mais ainda para  $NPT = 100$ ; aqui a faixa para o parâmetro de difusão é  $[5 \cdot 10^{-4}, 10^{-3}]$  (fig. 4.4).



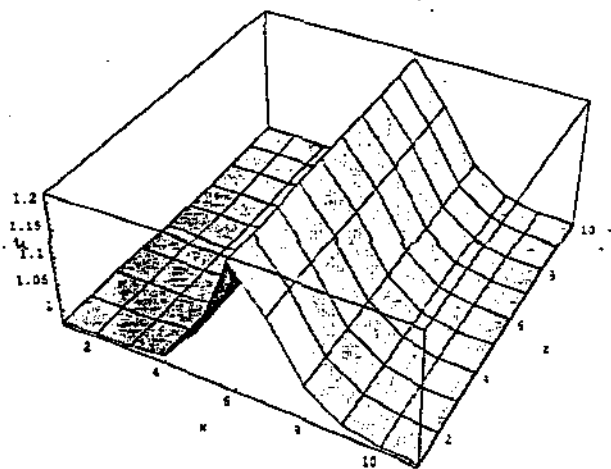
(NFC=50,  $\Delta t=0.25$ ,  $\Delta x=0.5$ ,  $\Delta z=0.1$ ,  $\nu_0=0.1$ )



(NFC=10,  $\Delta t=0.2$ ,  $\Delta x=0.5$ ,  $\Delta z=0.1$ ,  $\nu_0=0.1$ )



(NFC=50,  $\Delta t=0.05$ ,  $\Delta x=0.5$ ,  $\Delta z=0.1$ ,  $\nu_0=0.1$ )



(NFC=100,  $\Delta t=0.05$ ,  $\Delta x=0.5$ ,  $\Delta z=0.1$ ,  $\nu_0=0.1$ )

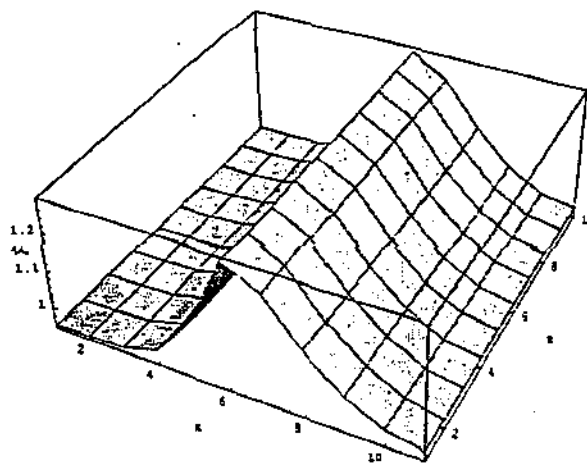


Figura 4.4: Caso E.3:  $a = 0.01$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $f = 1$ ,  $u_0 = 1$

Para o problema modelado nesta abordagem, o eixo  $Z$  tem a ver com a altura da localização da fonte. Deve ser levado em consideração para a região em questão, que o comprimento no eixo  $X$  é maior em relação aquele no eixo  $Z$ . Os testes feitos mostram que tais comprimentos guardam a relação de 1 para 40 de modo que, se trabalharmos com unidade de comprimento em km, 1 km no eixo  $Z$  seria mais que suficiente pois na verdade a altura da fonte não ultrapassa os 300 m (0.3 km). É por isto que na continuação fazemos mais simulações acrescentando o comprimento em  $L_z$ , mantendo o mesmo valor no caso de  $L_x$ . E assim podemos visualizar as variações ao longo de  $Z$ . Optamos então por tomar  $L_z = 0.45$ .

#### E.4

Obtemos na figura 4.5 notáveis diferenças quando temos  $V_1 = 0$ ,  $V_1 = 0.1$  para  $NPT = 50$  e  $100$ , usando os parâmetros:  $\alpha = 0.1$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$  e  $L_x = 2$ ; o parâmetro de difusão pertence ao intervalo  $[5 \cdot 10^{-3}, 5 \cdot 10^{-2}]$ .

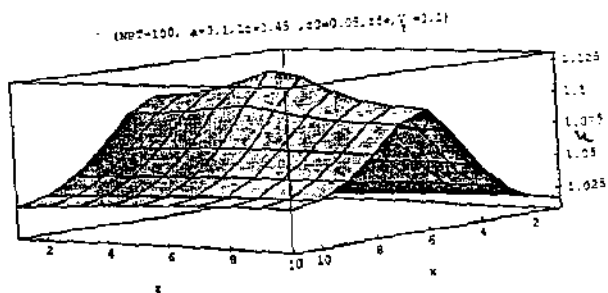
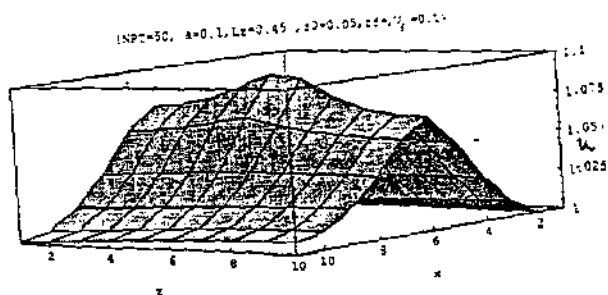
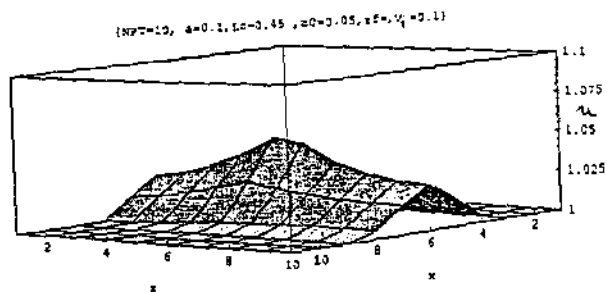
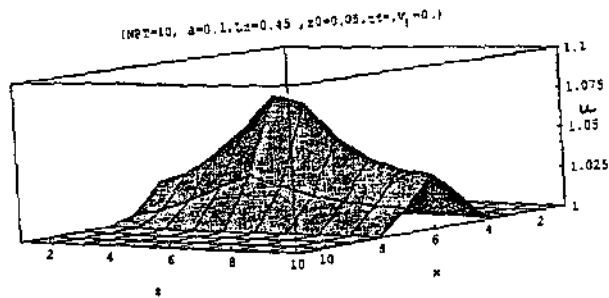


Figura 4.5: Caso E.4:  $a = 0.1, \sigma = 0.005, V_2 = 0, f = 1$  e  $L_x = 2$

## Caso F - Fonte no Canto do Dominio

### F.1

Por último, conservando o comprimento anterior e aproveitando a simetria nos resultados já obtidos, deslocamos a fonte poluidora no canto do domínio para observar como se distribui a concentração dos poluentes quando a velocidade é nula e com os parâmetros:  $\alpha = 0.1$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$ ,  $u_0 = 1$ , resultando a difusão numa faixa dada pelo intervalo  $[5.10^{-3}, 5.10^{-2}]$  (figura 4.6)

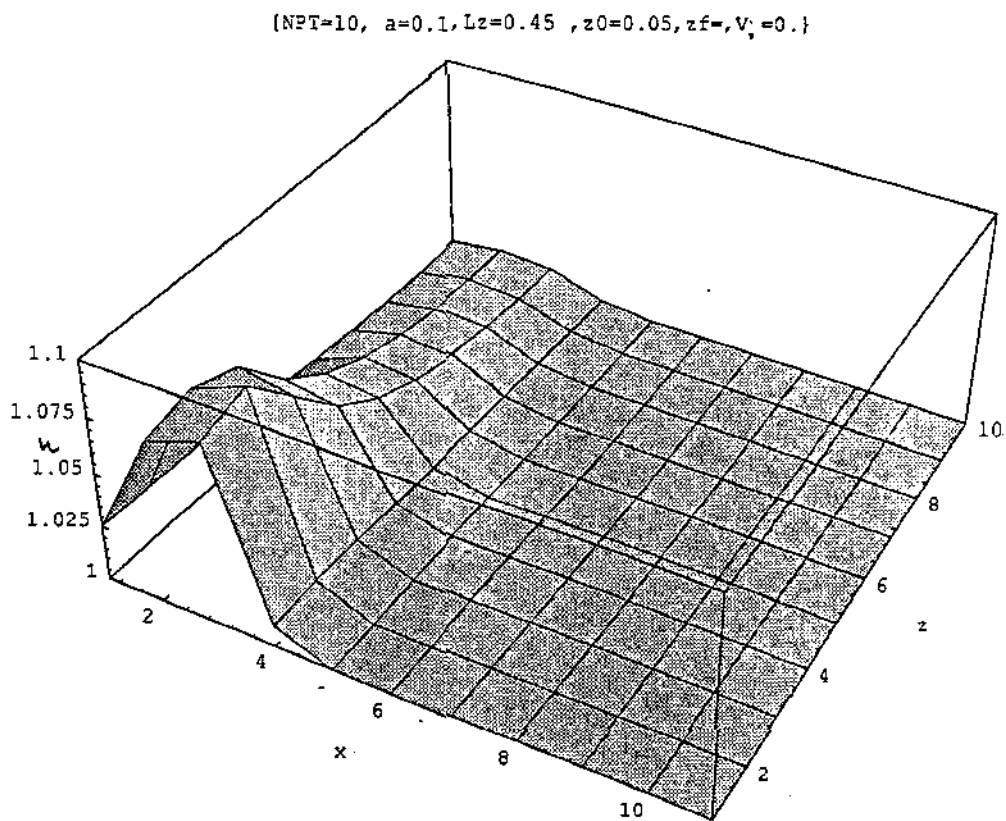


Figura 4.6: Caso F.1:  $a = 0.1$ ,  $\sigma = 0.005$ ,  $V_2 = 0$ ,  $f = 1$ ,  $u_0 = 1$

## F.2

Quando submetida a uma velocidade  $V_1 = 0.1$  para 10, 50 e 100 passos no tempo e com os mesmos parâmetros (figura 4.7).

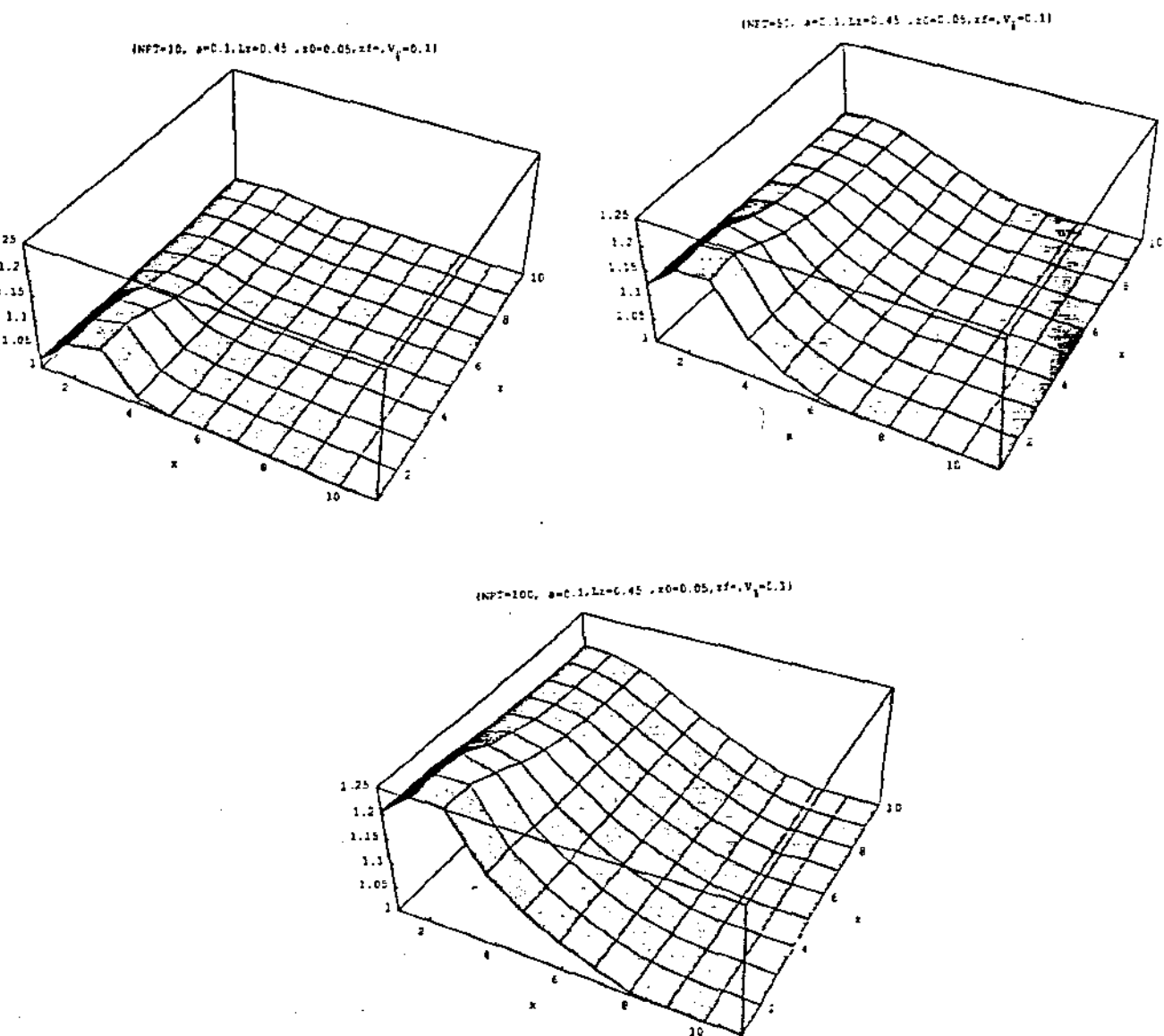


Figura 4.7: Caso F.2:  $a = 0.1, \sigma = 0.005, V_1 = 0.1, V_2 = 0, f = 1, u_0 = 1$

Assim, se hipoteticamente uma indústria está localizada em uma cidade no canto do domínio, as cidades ou bairros vizinhos começariam a ter problemas, pois no futuro (ex.:  $NPT = 100$ ) elas poderiam ser atingidas por uma poluição alheia ao bairro ou cidades em questão. Com esse comentário final passamos as conclusões e recomendações deste trabalho.



## Capítulo 5

# Conclusões e Recomendações

Existem muitos trabalhos em contaminação ambiental. Por um lado, há tratados desde o ponto de vista de Biologia, Química, Ecologia e Ciências Ambientais. Também trabalham neste campo genericamente definido, entre outros profissionais em Técnicas Sanitárias, em Saúde Pública, e em Direito. Infelizmente, há relativamente pouco registro bibliográfico de participação de Matemáticos neste campo – guardadas as proporções.

É assim que na bibliografia disponível praticamente não têm sido encontrados trabalhos que enfoquem o problema de evolução da poluição atmosférica usando a linguagem das Equações Diferenciais Parciais e ainda menos na obtenção de soluções aproximadas usando seja técnicas de Diferenças Finitas ou ainda de Elementos Finitos (FEM). O Modelo da Pluma de Gauss, como método analítico, apenas ilustra o problema em certos casos estacionários. Constitui-se pois o presente trabalho em um dos pontos de partida para trabalhos posteriores em que fenômenos condizentes com a complexidade do assunto devem ser encarados no âmbito de Equações ou Inequações Funcionais não lineares.

As soluções aproximadas de nosso problema de difusão-advecção com FEM de primeira ordem são visivelmente melhoradas quanto maior o refinamento da malha na discretização da variável espacial, observando-se uma concentração maior na zona de incidência da fonte poluidora, onde a presença do termo advectivo nas duas abordagens é notável segundo a ilustração dos gráficos pelo deslocamento desses poluentes no decorrer do tempo. Isto significa que pode dar-se o caso que em cidades ou bairros vizinhos o prejuízo seja bem maior do que na região onde a fonte está localizada, dependendo, obvi-

amente, da magnitude e direção do vento e da quantidade e tipo de poluente emitido. Na primeira abordagem, em que o problema foi reduzido apenas às variáveis horizontais, optamos pela utilização de um código numérico com Elementos Finitos de 2ª ordem (FEM/2ª). Além de verificar resultados anteriormente aproximados via FEM/1ª, isto visava abrir a possibilidade de usar esta ordem em futuras aplicações. A possibilidade de recorrer á rede SUN em ambiente UNIX foi importante nesta escolha. Trabalhos futuros (porém imediatos) devem incluir o recurso de técnicas SUPG (Streamline-Upwind-Petrov-Galerkin), possibilitando que seja desrespeitada a imposição da condição de Peclet, aumentando tanto a malha espacial quanto a extensão temporal do estudo, segundo uma linha já desenvolvida por outros colegas, [15] e [16]. Além do desenvolvimento de melhores técnicas numéricas, trabalhos futuros também irão fazer uso de contatos já existentes com o NEPAM (Núcleo de Estudos de Pesquisas Ambientais) e com a CETESB (Cia de Tecnologia de Saneamento Básico) para o uso de parâmetros em estudos reais - visando efetiva contribuição em situações de estudos, de avaliação e de decisão sobre centros poluidores para o justo e imprescindível equilíbrio, no real interesse e bem estar tanto da coletividade presente, como das gerações futuras.

# Apêndice A

Para  $\Omega \subset \mathcal{R}^n$  usamos os espaços:

- $H = L^2(\Omega)$ : o espaço das funções quadrado integráveis no sentido de Lebesgue;
- $H^1(\Omega)$  e  $H_0^1(\Omega)$ : o espaço das funções em  $L^2(\Omega)$  cujas derivadas de primeira ordem pertencem a  $L^2(\Omega)$ , entendendo-se que elas são consideradas no sentido das distribuições.

onde os produtos internos e normas são:

- Em  $L^2(\Omega)$ :

$$(f, g)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} f g \, dx$$

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} = \left( \int_{\Omega} |f|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

- Em  $H^1(\Omega)$ :

$$(u, v)_{H^1(\Omega)} = (u, v)_{L^2(\Omega)} + \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{L^2(\Omega)}$$

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} = (u, u)_{H^1(\Omega)}^{1/2} = \left[ \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^n \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \right]^{1/2},$$

- Em  $H_0^1(\Omega)$ : similar ao caso em  $H^1(\Omega)$ .

Com a finalidade de identificar os termos de nosso problema apresentado na primeira e segunda abordagem com os termos do Teorema de Lions precisamos Estabelecer o seguinte operador diferencial:

$$A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) = - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_j} \right) + \sum_{i=1}^n a_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} + a_0(\mathbf{x}, t)$$

e dentro do contexto do Teorema, fazemos a formulação clássica do seguinte problema:

$$\begin{cases} A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) u + \frac{\partial u}{\partial t} = f & \text{sobre } \Omega \times [0, T] \\ \text{ci e cc}^1 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

sendo a sua correspondente formulação variacional:

$$\int_{\Omega} A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) u v(x) dx + \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v(x) dx = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}, t) v(x) dx \quad (\text{A.2})$$

usando produto interno a equação A.2 no contexto do Teorema de Lions, faz com que:

$$a(t; u(t), v) = \int_{\Omega} A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) u v(x) dx \quad (\text{A.3})$$

Sendo que na passagem de A.2 e A.3 têm-se considerado algumas modificações pelo uso do Teorema de Green e as condições de contorno.

Na continuação exemplificamos a expressão do operador  $A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right)$  no caso  $n = 3$ .

$$A\left(\mathbf{x}, t, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) u = - \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial u}{\partial x_j} \left( a_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + \sum_{i=1}^3 a_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_i} + a_0(\mathbf{x}, t) u \quad (\text{A.4})$$

com

- $u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$
- $\int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v(x) ds = 0, \quad \forall v \in \mathcal{V}^2$

---


$$^2 \frac{\partial u}{\partial n} = \sum_{i,j=1}^3 a_{ij}(\mathbf{x}, t) \cos(n, x_i) \frac{\partial u}{\partial x_j}, \text{ onde } n \text{ é o vetor normal à superfície } \partial\Omega$$

Vejamos como simplificar os dois primeiros termos de A.4:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{ij}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( a_{11}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_1} + a_{12}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_2} + a_{13}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( a_{21}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_1} + a_{22}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_2} + a_{23}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( a_{31}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_1} + a_{32}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_2} + a_{33}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_3} \right) = \\
& = \text{div}(\bar{\alpha}_1(\mathbf{x}, t). \nabla u, \bar{\alpha}_2(\mathbf{x}, t). \nabla u, \bar{\alpha}_3(\mathbf{x}, t). \nabla u)
\end{aligned}$$

com a previa definição :

$$\begin{aligned}
\bar{\alpha}_1(\mathbf{x}, t) &= (a_{11}(\mathbf{x}, t), a_{12}(\mathbf{x}, t), a_{13}(\mathbf{x}, t)) \\
\bar{\alpha}_2(\mathbf{x}, t) &= (a_{21}(\mathbf{x}, t), a_{22}(\mathbf{x}, t), a_{23}(\mathbf{x}, t)) \\
\bar{\alpha}_3(\mathbf{x}, t) &= (a_{31}(\mathbf{x}, t), a_{32}(\mathbf{x}, t), a_{33}(\mathbf{x}, t)).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^3 a_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_i} &= a_1(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_1} + a_2(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_2} + a_3(\mathbf{x}, t) \frac{\partial u}{\partial x_3} = \\
&= \mathbf{V}(\mathbf{x}, t). \nabla u
\end{aligned}$$

com

$$\bar{\mathbf{V}}(\mathbf{x}, t) = (a_1(\mathbf{x}, t), a_2(\mathbf{x}, t), a_3(\mathbf{x}, t))$$

Assim, a expansão em A.4, no caso tridimensional, pode ser facilmente considerada como:

$$A \left( \mathbf{x}, t; \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) u = -\text{div}(\bar{\alpha}_1(\mathbf{x}, t). \nabla u, \bar{\alpha}_2(\mathbf{x}, t). \nabla u, \bar{\alpha}_3(\mathbf{x}, t). \nabla u)$$

$$+ \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla u + a_0(\mathbf{x}, t) u$$

então a equação A.3 fica<sup>3</sup>:

$$a(t; u(t), v) = \int_{\Omega} (-\operatorname{div}(\bar{\alpha}_1 \cdot \nabla u, \bar{\alpha}_2 \cdot \nabla u, \bar{\alpha}_3 \cdot \nabla u) + \mathbf{V} \cdot \nabla u + a_0 u) v(x) dx$$

assim se, por exemplo,  $a_{ii} = \alpha$ ;  $a_{ij} = 0 \quad i \neq j$ , teremos que:

$$a(t; u(t), v) = \int_{\Omega} (-\alpha \Delta u + \bar{V} \cdot \nabla u + a_0 u) v(x) dx.$$

---

<sup>3</sup>Entenda-se  $\bar{\alpha}_i = \bar{\alpha}_i(\mathbf{x}, t)$ ,  $i = 1, 2, 3$  e  $a_0 = a_0(\mathbf{x}, t)$

## Apêndice B

Os espaços dos elementos finitos  $\mathcal{V}_h$  são determinados por pedaços de funções polinomiais sobre subdivisões ou triangularizações  $T_h = \{K\}$  de um domínio denotado  $\Omega \subset \mathcal{R}^d$ ,  $d = 1, 2, 3$ . No caso  $d = 2$  os elementos  $K$  podem ser triângulos ou quadriláteros.

No caso correspondente a problemas de contorno de segunda ordem é necessário que seja satisfeito que:

$$\mathcal{V}_h \subset H^1(\Omega)$$

Desde que  $\mathcal{V}_h$  consiste em pedaços de funções polinomiais temos que:

$$\mathcal{V}_h \subset H^1(\Omega) \Leftrightarrow \mathcal{V}_h \subset C^0(\bar{\Omega}) \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$$

e

$$C^0(\bar{\Omega}) = \{v : \bar{\Omega} \rightarrow \mathcal{R} / v \text{ é contínua}\}.$$

A equivalência B.1 depende do fato das funções  $v$  em  $\mathcal{V}_h$  serem polinomiais sobre cada elemento  $K$ , ou seja, se  $v$  é contínua ao longo do bordo comum de elementos adjacentes, então a primeira derivada  $D^\alpha v$ ,  $|\alpha| = 1$ , existe<sup>1</sup> e são pedaços contínuos, ou seja,  $v \in H^1(\Omega)$ .

---

<sup>1</sup> $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$  é um superíndice e definimos  $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2$ .

Por outro lado se  $v$  não é contínua ao longo de algum bordo entre elementos, assim  $v \notin C^0(\bar{\Omega})$ , então as derivadas  $D^\alpha v$ ,  $|\alpha| = 1$  não existem como funções em  $L^2(\Omega)$ <sup>2</sup>, e assim  $v \notin H^1(\Omega)$ .

Definimos formalmente um elemento finito como a terna  $(K, P_K, \Sigma)$  onde:

- $K$ : um objeto geométrico, no nosso caso o triângulo;
- $P_K$ : um espaço vetorial de dimensão finita de funções definidas em  $K$ ;
- $\Sigma$ : é o conjunto de graus de liberdade.

Assim uma função  $v \in P_K$  é unicamente determinada pelos graus de liberdade  $\Sigma$ .

Nós usamos duas situações:

- $K$  um triângulo,  $P_K = P_1(K)$  o espaço dos polinômios de grau menor ou igual a um definidos sobre  $K$  e três graus de liberdade dados pelos valores nos vértices do triângulo;
- $K$  um triângulo,  $P_K = P_2(K)$  o espaço dos polinômios de grau menor ou igual a dois definidos sobre  $K$  e seis graus de liberdade dados pelos valores nos vértices e os pontos médios dos lados do triângulo.

Segundo temos trabalhado nos capítulos 3 e 4 explicaremos aqui as características dos elementos finitos tomados em consideração.

Sendo  $\Omega \subset \mathcal{R}^2$  um domínio de fronteira poligonal  $\partial\Omega$  e  $T_h = \{K\}$  uma triangularização de  $\Omega$  dada pelos triângulos  $K^3$ .

Usamos para  $r = 1, 2$ :

$$P_r(K) = \{v : v \text{ é um polinômio de grau } \leq r \text{ sobre } K\}$$

Assim para qualquer elemento  $v$  em  $P_1(K)$  e com três graus de liberdade tem-se a seguinte representação :

$$v(x, y) = a + bx + cy, \quad (x, y) \in K$$

<sup>2</sup>Se  $v$  é descontínua ao longo de uma fronteira  $\Gamma$ , então  $D^\alpha v$ ,  $|\alpha| = 1$ , poderia ser a função de Dirac  $\delta$  com suporte  $\Gamma$ , que não é uma função quadrado integrável.

<sup>3</sup> $T_h = \{K_1, \dots, K_m\}$  de não "overlapping" triângulos  $K_i$  onde nenhum vértice de triângulo qualquer cai sobre o lado de outro triângulo e  $\Omega = \cup_{K \in T_h} K = K_1 \cup K_2 \cup \dots \cup K_m$ .



Seja o triângulo padrão  $\hat{K}_1$ , de vértices numerados no sentido anti-horário. E ainda

$$\begin{aligned}\phi_1(x, y) &= 1 - x - y \\ \phi_2(x, y) &= x \\ \phi_3(x, y) &= y\end{aligned}$$

tal que se  $\mathbf{x} = (x, y)$  e os vértices são denotados por  $\hat{x}_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , teremos que:

$$\phi_i(\hat{x}_j) = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

ou simplesmente:

$$\phi_i(\hat{x}_j) = \delta_{ij}$$

assim  $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$  é uma base local para  $P_1(K)$  (figura B.1).

Nas equações de contorno de segunda ordem que constam do termo advectivo, como no nosso caso, acontece que na construção da matriz de rigidez do problema é preciso fazer diferença na posição do triângulo na triangulação. E assim que tendo mais um triângulo padrão: onde as funções de base local seran  $\{\psi_i\}$  com  $\psi_i(\bar{x}_j) = \delta_{ij}$  são:

$$\begin{aligned}\psi_1(x, y) &= 1 + x + y \\ \psi_2(x, y) &= -x \\ \psi_3(x, y) &= -y\end{aligned}$$

Similarmente, para  $v \in P_2(K)$  e com seis graus de liberdade:

$$v(x, y) = a + bx + cy + dxy + ex^2 + fy^2, \quad (x, y) \in K$$

onde, além dos vértice do triângulo padrão  $\hat{K}_i$ ,  $i = 1, 2$  usamos os pontos médios dos lados, teremos então:

$$\begin{aligned}\phi_1(x, y) &= 1 - 3y - 3x + 4xy + 2y^2 + 2x^2 \\ \phi_2(x, y) &= 4x - 4xy - 4x^2 \\ \phi_3(x, y) &= -x + 2x^2 \\ \phi_4(x, y) &= 4xy \\ \phi_5(x, y) &= -y + 2y^2 \\ \phi_6(x, y) &= 4y - 4xy - 4y^2\end{aligned}$$

$$\psi_1(x, y) = 3 - 5y - 5x + 4xy + 2y^2 + 2x^2$$

$$\psi_2(x, y) = -4 + 4y + 8x - 4xy - 4x^2$$

$$\psi_3(x, y) = 1 - 3x + 2x^2$$

$$\psi_4(x, y) = 4 - 4y - 4x + 4xy$$

$$\psi_5(x, y) = 1 - 3y + 2y^2$$

$$\psi_6(x, y) = -4 + 4x + 8y - 4xy - 4y^2$$

e em ambos os casos:

$$\phi_i(\hat{x}_j) = \delta_{ij}, \text{ em } \hat{K}_1$$

$$\psi_i(\hat{x}_j) = \delta_{ij}, \text{ em } \hat{K}_2$$

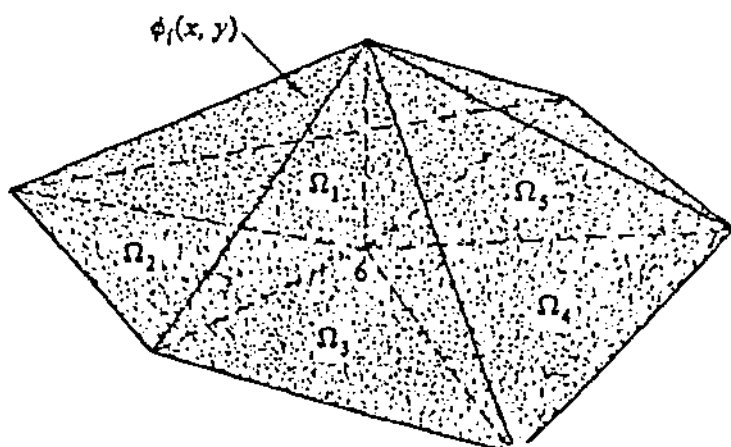


Figura B.1: Base de um Elemento Finito de Primer Ordem

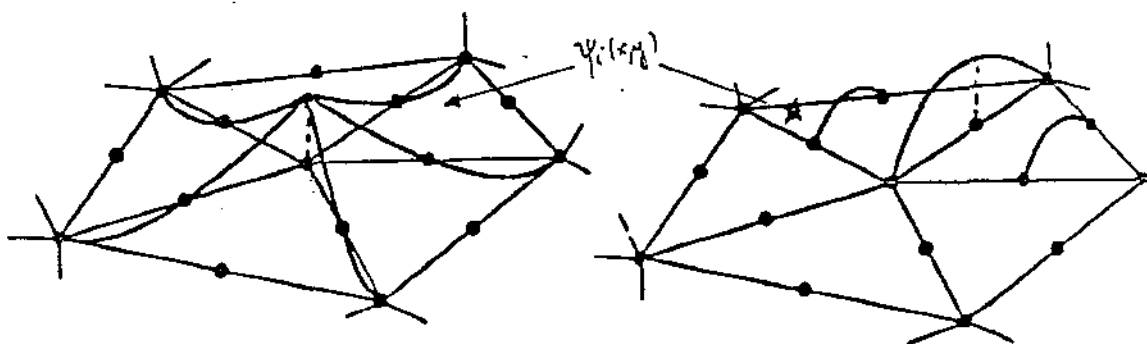


Figura B.2: Base de um Elemento Finito de Segunda Ordem

É fácil de demonstrar que tanto no caso de  $P_1(K)$  e  $P_2(K)$  uma função  $v \in P_r(K)$ ,  $r = 1, 2$  está unicamente determinada pelos graus de liberdade que possuem [4]. A figura B.2 ilustra como são as funções de base no caso dos elementos de segunda ordem.

É também de observar que para facilidade nos cálculos nos elementos das matrizes, os que são integrações, fizemos a consideração:

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \int_0^{1-\xi} f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \\ & = \int_{x_i}^{x_i+\Delta x} \int_{y_i}^{\frac{1}{\Delta x}(-x\Delta y+y_i\Delta x+\Delta yx_i+\Delta x\Delta y)} f(\xi(x, y), \eta(x, y)) |J(\xi(x, y), \eta(x, y))| dx dy \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \int_{1-\xi}^1 f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \\ & = \int_{x_i}^{x_i+\Delta x} \int_{\frac{1}{\Delta x}(-x\Delta y+y_i\Delta x+\Delta yx_i+\Delta x\Delta y)}^{y_i} f(\xi(x, y), \eta(x, y)) |J(\xi(x, y), \eta(x, y))| dx dy \end{aligned}$$

onde  $J(\xi(x, y), \eta(x, y))$  é o Jacobiano da transformação que leva os pontos do sistema de coordenadas  $\xi\eta$  em pontos no respectivo sistema  $xy$ .

# Apêndice C

```
*****
*  PROGRAMA QUE FAZ  A SOLUCAO  DE:                                     *
*                                                                 *
*   $U_t - \text{ALPHA} * \text{LAP}(U) + \text{DIV}(V * U) + \text{SIGMA} * U = F$   COM  $\text{DIV}(V * U) = V_1 * U_x + V_2 * U_y$  *
*                                                                 *
*  COM F UMA FONTE LOCAL CONSTANTE E ALPHA, SIGMA, V1, V2 CONSTANTES. *
*                                                                 *
*  RESOLUCAO VIA ELEMENTOS FINITOS NO DOMINIO RETANGULAR [a,b]X[c,d] *
*                                                                 *
*  CONDICAO DE BORDE:   $U=0$  NO BORDE DO DOMINIO.                    *
*                                                                 *
*****
* .....
*  PROGRAMA PRINCIPAL
* .....
```

```
PARAMETER(NA=125,ML=288)
IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
DIMENSION D1(NA)
COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
COMMON /SINT/DX,DY,DT
COMMON /MANTR/MALHA(ML,3),L(ML),IRA(ML)
COMMON /PAR/F,ALPHA,SIGMA,VX,VY,IND1
COMMON /DAUX/IPVT(NA),Z(NA),RCOND
COMMON /MAUX/GSU(3,3),SIG(3,3),VEL1(3,3),VEL2(3,3),SUB1(3,3),
1          SUB2(3,3),BU(3),A(NA,NA),A1(NA,NA),AD(NA,NA),
```

2

AE(NA,NA),D(NA)

CALL LETDAD

CALL INFO

CALL CALC

CALL RESOLVE(D1)

) CALL GRAFIC(D1)

END

\*.....

\*-----

\* SUBROTINA PEDE E CALCULA DADOS PARA A CONSTRUCAO DAS MATRICES

\*-----

SUBROUTINE LETDAD

COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR

COMMON /SINT/DX,DY,DT

COMMON /PAR/F,ALPHA,SIGMA,VX,VY,IND1

\* DADOS PARA A VARIABEL ESPACIAL E VALOR DOS PARAMETROS

WRITE(\*,\*)'O INTERVALO [XO,XF]'

WRITE(\*,\*)'XO= '

READ(\*,\*)XO

WRITE(\*,\*)'XF= '

READ(\*,\*)XF

WRITE(\*,\*)'O INTERVALO [YO,YF]'

WRITE(\*,\*)'YO= '

```

READ(*,*)YO
WRITE(*,*)'YF='
READ(*,*)YF
WRITE(*,*)'DAR O NUMERO DE SUBINTERVALOS NX'
READ(*,*)NX
WRITE(*,*)'DAR O NUMERO DE SUBINTERVALOS NY'
READ(*,*)NY
WRITE(*,*)'DAR VALOR DE LA FONTE CONSTANTE F'
READ(*,*)F
      WRITE(*,*)'POSICAO DA FONTE'
      READ(*,*)IND1
WRITE(*,*)'O VALOR DO PARAMETRO ALPHA'
READ(*,*)ALPHA
WRITE(*,*)'O PARAMENTRO DE DECAIMENTO SIGMA'
READ(*,*)SIGMA
WRITE(*,*)'OS VALORES DAS VELOCIDADES'
WRITE(*,*)'VX='
READ(*,*)VX
WRITE(*,*)'VY='
READ(*,*)VY
      WRITE(*,*)'O DT:'
      READ(*,*)DT
      WRITE(*,*)'ITERACAO REQUERIDA,NTR>=5'
      READ(*,*)NTR

      NT=2*NX*NY
      NV=(NX+1)*(NY+1)
      NN=(NX-1)*(NY-1)

      DX=(XF-XO)/NX
      DY=(YF-YO)/NY

      RETURN
      END

```

```

*-----
*-----
* SUBROTINA FORNECE INFORMACOES NO PROCEDIMENTO PARA OBTEN A

```

\* SOLUCAO

\*-----

SUBROUTINE INFO

COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR  
COMMON /SINT/DX,DY,DT  
COMMON /PAR/F,ALPHA,SIGMA,VX,VY ,IND1

OPEN(UNIT=2, FILE='EVOL.OUT')  
WRITE(2,\*)' INFORMACOES DO PROBLEMA DE DIFUSAO-ADVECCAO '  
WRITE(2,\*)' POLUENTES NA SUPERFICIE TERRESTRE '  
WRITE(2,\*)' F= ',F  
WRITE(2,\*)' ALPHA= ',ALPHA  
WRITE(2,\*)' SIGMA= ',SIGMA  
WRITE(2,\*)' VX E VY = ',VX,VY  
WRITE(2,\*)' NX E DX= ',NX,DX  
WRITE(2,\*)' NY E DY= ',NY,DY  
WRITE(2,\*)' NN = ',NN  
WRITE(2,\*)' NV= ',NV  
WRITE(2,\*)' NT = ',NT  
WRITE(2,\*)' DT= ',DT  
WRITE(2,\*)' ITERACAO REQUERIDA,NTR= ',NTR

RETURN  
END

\*-----

\*-----

\* SUBROTINA CALCULA OS ELEMENTOS DAS MATRICES DO PROBLEMA

\*-----

SUBROUTINE CALC

PARAMETER(NA=125,ML=288)  
COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR  
COMMON /SINT/DX,DY,DT  
COMMON /MANTR/MALHA(ML,3),L(ML),IRA(ML)



```

COMMON /PAR/F,ALPHA,SIGMA,VX,VY,IND1
COMMON/MAUX/GSU(3,3),SIG(3,3),VEL1(3,3), VEL2(3,3),
1 SUB1(3,3), SUB2(3,3),BU(3),A(NA,NA),A1(NA,NA),
2 AD(NA,NA),AE(NA,NA),D(NA)

```

```

CALL MALHAM

```

```

IND2=IND1+1
M1=MALHA(IND1,1)
M4=MALHA(IND2,1)
M2=M1+1
M3=M4-1
WRITE(2,*)'LOCALIZACAO DA FONTE:'
WRITE(2,*)'NA REGIAO DOS TRIANGULOS:', 'NTf=',IND1,'E',IND2
WRITE(2,*)'NOS NODOS:',M1,M2,M3,M4

```

```

* LA SUBMATRIZ DE RIGIDEZ

```

```

ALPH1=0.5*(1.0/(DX*DX)+1.0/(DY*DY))
ALPH2=0.5/(DX*DX)
ALPH3=0.5/(DY*DY)

```

```

GSU(1,1)=ALPH1
GSU(1,2)=-ALPH2
GSU(1,3)=-ALPH3
GSU(2,1)=GSU(1,2)
GSU(2,2)=ALPH2
GSU(2,3)=0.0
GSU(3,1)=GSU(1,3)
GSU(3,2)=GSU(2,3)
GSU(3,3)=ALPH3

```

```

SIG(1,1)=1.0/12
SIG(1,2)=0.5/12
SIG(1,3)=0.5/12
SIG(2,1)=SIG(1,2)

```

```
SIG(2,2)=SIG(1,1)
SIG(2,3)=0.5/12
SIG(3,1)=SIG(1,3)
SIG(3,2)=SIG(2,3)
SIG(3,3)=SIG(1,1)
```

```
V=1.0/6
```

```
DO 65 I=1,3
```

```
VEL1(I,1)=-V
```

```
VEL1(I,2)=V
```

```
VEL1(I,3)=0
```

```
VEL2(I,1)=-V
```

```
VEL2(I,2)=0
```

```
VEL2(I,3)=V
```

```
65 CONTINUE
```

```
DO 70 I=1,3
```

```
DO 70 J=1,3
```

```
GSU(I,J)=DX*DY*GSU(I,J)
```

```
SIG(I,J)=DX*DY*SIG(I,J)
```

```
VEL1(I,J)=DY*VEL1(I,J)
```

```
VEL2(I,J)=DX*VEL2(I,J)
```

```
70 CONTINUE
```

```
DO 80 I=1,3
```

```
DO 80 J=1,3
```

```
SUB1(I,J)=ALPHA*GSU(I,J)+SIGMA*SIG(I,J)
```

```
SUB1(I,J)=SUB1(I,J)+VX*VEL1(I,J)+VY*VEL2(I,J)
```

```
80 CONTINUE
```

```
DO 85 J=1,3
```

```
VEL1(1,J)=-VEL1(1,J)
```

```
VEL2(1,J)=-VEL2(1,J)
```

```
85 CONTINUE
```

```

DO 90 I=1,3
  DO 90 J=1,3
    SUB2(I,J)=ALPHA*GSU(I,J)+SIGMA*SIG(I,J)
    SUB2(I,J)=SUB2(I,J)+VX*VEL1(I,J)+VY*VEL2(I,J)
90  CONTINUE

```

\* O SIVETOR BU

```

  BU(1)=F*DX*DY*DT/6
  BU(2)=BU(1)
  BU(3)=BU(1)

```

\* O ASSEMBLE DA MATRIZ DE RIGIDEZ E O VETOR DE CARGA D

```

  DO 92 I=1,NN
    D(I)=0
    DO 92 J=1,NN
      A(I,J) = 0
92  CONTINUE

```

```

  DO 100 K=1,NT
    DO 100 I=1,3
      MIK=MALHA(K,I)
      IF(MIK.NE.0) THEN
        DO 110 J=1,3
          MJK=MALHA(K,J)
          IF(MJK.NE.0) THEN
            A1(MIK,MJK)=A1(MIK,MJK)+SIG(I,J)
            IF(K.EQ.((K/2)*2)) THEN
              A(MIK,MJK)=A(MIK,MJK)+SUB2(I,J)
            ELSE
              A(MIK,MJK)=A(MIK,MJK)+SUB1(I,J)
            ENDIF
          ENDIF
        ENDIF
      ENDIF
    ENDIF
  ENDIF

```

```

110  CONTINUE

```

```

        IF((K.EQ.IND1) .OR. (K.EQ.IND2)) D(MIK)=D(MIK)+BU(I)
    ENDIF
100    CONTINUE

```

```

        DO 150 I=1,NN
DO 150 J=1,NN
    AE(I,J)=A1(I,J)+0.5*DT*A(I,J)
    AD(I,J)=A1(I,J)-0.5*DT*A(I,J)
150    CONTINUE

```

```

    RETURN
    END

```

```

*-----
*  SUBROTINA MATRIZ MALHA
*-----

```

#### SUBROUTINE MALHAM

```

*DECLARACAO DAS VARIAVEIS
*NX :NUMERO DE SUBINTERVALOS NO EIXO-X
*NY :NUMERO DE SUBINTERVALOS NO EIXO-Y
*NV :NUMERO DE VERTICES NA DISCRETIZACAO
*NT :NUMERO DE TRIANGULOS
*NN :NUMERO DE NOS
*MALHA :MATRIZ MALHA

```

```

    IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
    PARAMETER(NA=125,ML=288)
    COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
    COMMON /SINT/DX,DY,DT
    COMMON /MANTR/MALHA(ML,3),L(ML),IRA(ML)

```

```

    NX1 = NX+1
    NY1 = NY+1

```

```

    DO 10 I=1,NV
L(I)=0

```

```

        IRA(I)=0
10    CONTINUE

*BORDE DA BASE

        DO 20 I=1,NX1
        L(I)=1
20    CONTINUE

*BORDE IZQUIERDO

        DO 30 I=1,NY1
        K=I*NX1+1
        L(K)=1
30    CONTINUE

* BORDE DIREITO
        DO 40 I=2,NY+1
        K=I*NX1
        L(K)=1
40    CONTINUE

*BORDE SUPERIOR
        K1=NY*NX1+2
        K2=NY1*NX1-1
        DO 50 I=K1,K2
        L(I)=1
50    CONTINUE

5    J=0

        DO 80 I=1,NV
        IRA(I)=0
        IF(L(I).EQ.0) THEN
            J=J+1
IRA(I)=J
        ENDIF

```

```
80    CONTINUE
* A MALHA INCLUINDO O BORDE
```

```
      K=0
      DO 100 J=1,NY
      DO 200 I=1,NX
K=K+1
      MALHA(K,1)=(J-1)*NX1+I
      MALHA(K,2)=(J-1)*NX1+(I+1)
      MALHA(K,3)=J*NX1+I
```

```
K=K+1
```

```
      MALHA(K,1)=J*NX1 +(I+1)
      MALHA(K,2)=J*NX1+I
      MALHA(K,3)=(J-1)*NX1+(I+1)
```

```
200  CONTINUE
```

```
100  CONTINUE
```

```
* A RENUMERACAO DOS NOS DA MALHA
```

```
DO 110 KE=1,NT
      MALHA(KE,1)= IRA(MALHA(KE,1))
      MALHA(KE,2)= IRA(MALHA(KE,2))
      MALHA(KE,3)= IRA(MALHA(KE,3))
110  CONTINUE
```

```
      RETURN
```

```
      END
```

```
*-----
*-----
* RESOLVE  $AE*U(N+1)=AD*U(N)+D$  E COLOCA O RESULTADO EM D1, $U(0)=U0$ 
*-----
```

```
      SUBROUTINE RESOLVE(D1)
```

```
      PARAMETER(NA=125)
```

```

    DIMENSION UO(NA),D1(*)
    COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
    COMMON /MAUX/GSU(3,3),SIG(3,3),VEL1(3,3),VEL2(3,3),
1      SUB1(3,3),SUB2(3,3),BU(3),A(NA,NA),
2      A1(NA,NA),AD(NA,NA),AE(NA,NA),D(NA)
    COMMON /DAUX/IPVT(NA),Z(NA),RCOND

```

\* A CONDICAO INICIAL UO

```

        DO 140 K=1,NN
    UO(K)=UO(X,Y)
140    CONTINUE

```

```

        CALL SGECO(AE,NA,NN,IPVT,RCOND,Z)

```

```

        DO 170 N=1,NTR

```

\* FAZ  $AD \cdot U(N) + D$  COM RESULTADO EM D1

```

        CALL PROD(NN,AD,UO,D,D1)

```

\* RESOLVE  $AE \cdot U(N+1) = D1$  COM RESULTADO EM D1

```

        CALL SGESL(AE,NA,NN,IPVT,D1,0)

```

```

        DO 180 I=1,NN
    UO(I)=D1(I)
180    CONTINUE

```

```

        NTR1=NTR-3
        IF(N.GT.NTR1) THEN

```

```

        WRITE(2,11) N

```

```

11      FORMAT('O VETOR SOLUCAO NA ITERACAO N= ',I3)

```

```

        DO 190 J=1,NY-1

```

```

        J1=(J-1)*(NX-1)+1

```

```

        J2=J*(NX-1)

```

```

        WRITE(2,*)(D1(I),I=J1,J2 )

```

190       CONTINUE

      ENDIF

170       CONTINUE

RETURN

END

\*-----

\*-----

\*       SUBROTINA PREPARA O ARQUIVO PARA O GRAFICO DA SUPERFICIE

\*       SOLUCAO NA ULTIMA ITERACAO:NTR

\*-----

      SUBROUTINE GRAFIC(D1)

      DIMENSION D1(\*)

      COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR

      OPEN(UNIT=3, FILE='GRAFEVOL')

      NX1=NX-1

      NY1=NY-1

      WRITE(3, '(1X,6A)') 'GRAF={'

      WRITE(3, '(1X,6A)') '{0,'

      WRITE(3, '(1X,6A)') ('0,', I=1, NX1)

      WRITE(3, '(1X,6A)') '0},'

      DO 200 J=1, NY1

WRITE(3, '(1X,3H{0,,\}')

DO 210 I=(J-1)\*NX1+1, J\*NX1

  IF(J.EQ.NY1) THEN

    IF(I.EQ.(NX1\*NY1)) THEN

      WRITE(3, '(1X,F12.6,4H,0},,\}')D1(I)

    ELSE

      WRITE(3, '(1X,F12.6,1H,,\}')D1(I)

    ENDIF

  ELSE

    IF(I.EQ.NX1\*J) THEN

      WRITE(3, '(1X,F12.6,4H,0},,\}')D1(I)

    ELSE



WRITE(3,'(1X,F12.6,1H,,\)' )D1(I)

ENDIF

ENDIF

210 CONTINUE

200 CONTINUE

WRITE(3,'(1X,6A)') '{0,'  
WRITE(3,'(1X,6A)') ('0,',I=1,NX1)  
WRITE(3,'(1X,6A)') '0}'

RETURN

END

\*-----  
\*-----  
\* A CONDICAO INICIAL U0(X,Y)  
\*-----

REAL\*4 FUNCTION U0(X,Y)  
REAL\*4 X,Y  
U0=1  
END

\*-----  
\*-----  
\*SUBROTINA PRODUTO FAZ: AD\*U(N)+D =D1  
\*-----

SUBROUTINE PROD(N,A,X,Y,D1)  
PARAMETER(NA=125)  
REAL\*4 A(NA,\*),X(\*),Y(\*),D1(\*)

DO 10 I=1,N  
S=0  
DO 20 J=1,N  
S= S+A(I,J)\*X(J)  
20 CONTINUE

```
      D1(I)=S+Y(I)
10    CONTINUE
      RETURN
      END
```

\*-----

\*=====

)

```

*****
*
*    $U_t - \text{ALPHA} * \text{LAP}(U) + \text{DIV}(V * U) + \text{SIGMA} * U = F$    COM  $\text{DIV}(V * U) = V_1 * U_x + V_2 * U_y$ 
*
*   ONDE F E UMA FONTE LOCAL
*
*   RESOLUCAO VIA ELEMENTOS FINITOS DE SEGUNDA ORDEN NO RETANGULO
*
*    $[a, b] \times [c, d]$ 
*
*   CONDICAO DE BORDE:  $U = 0$  NO BORDE DE  $[a, b] \times [c, d]$ 
*
*****

```

```

PARAMETER(NA=400,MNA=200)
IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
DIMENSION X1(NA)
COMMON /INT/ NX,NY,NT,NNX,NNY,NN
COMMON /CIN/ DX,DY,DT,ALFA,SIGMA,V1,V2,FCT,IND1,IND2
COMMON /TEM/ NPT
COMMON /COM/ XL,YL
COMMON /DAUX/IPVT(NA),Z1(NA),RCOND
COMMON /MAT1/ MALHA(MNA,6),SA1(6,6),SB1(6,6),SFI(6)
COMMON /MAT2/A(NA,NA),B(NA,NA),D(NA),SAS(6,6),SBS(6,6)
COMMON /MAUX1/ RF(6,6),RFG(6,6),RFX(6,6),RFY(6,6)
COMMON /MAUX2/ RFS(6,6),RFGS(6,6),RFXS(6,6),RFYS(6,6)

```

```

CALL LETDAD
CALL MALHA2
CALL ASSEMBLER
CALL RESOLV(X1)
CALL GRAFIC(X1)

```

```

END

```

\*-----  
\* SUBROTINA LETURA DE DADOS E CALCULO DE PARAMETROS DA DISCRETIZACAO  
\*-----

SUBROUTINE LETDAD

COMMON /INT/ NX,NY,NT,NNX,NNY,NN  
COMMON /CIN/ DX,DY,DT,ALFA,SIGMA,V1,V2,FCT,IND1,IND2  
COMMON /TEM/ NPT  
COMMON /COM/ XL,YL

OPEN(UNIT=12,FILE='FEM2.DAT')

WRITE(\*,\*)'O COMPRIMENTO EM X'  
READ(\*,\*)XL  
WRITE(\*,\*)'O COMPRIMENTO EM Y'  
READ(\*,\*)YL  
WRITE(\*,\*)'O NUMERO DE SUBINTERVALOS EM X'  
READ(\*,\*)NX  
WRITE(\*,\*)'O NUMERO DE SUBINTERVALOS EM Y'  
READ(\*,\*)NY  
WRITE(\*,\*)'O PARAMETRO DE DIFUSAO ALFA'  
READ(\*,\*)ALFA  
WRITE(\*,\*)'O PARAMETRO DE DECAIMENTO SIGMA'  
READ(\*,\*)SIGMA  
WRITE(\*,\*)'A VELOCIDADE EM X: VX'  
READ(\*,\*)V1  
WRITE(\*,\*)'A VELOCIDADE EM Y: VY'  
READ(\*,\*)V2  
WRITE(\*,\*)'O VALOR DA FUNCAO FONTE'  
READ(\*,\*)FCT  
WRITE(\*,\*)'FONTE NA REGIAO DOS TRIANGULOS'  
WRITE(\*,\*)'IND1'  
READ(\*,\*)IND1  
WRITE(\*,\*)'IND2'  
READ(\*,\*)IND2

```

        WRITE(*,*)'O DT:'
        READ(*,*)DT
        WRITE(*,*)' ENTRE COM O NUMERO DE PASSOS NO TEMPO:'
READ(*,*)NPT

```

```

        DX=XL/NX
        DY=YL/NY
        NT=2*NX*NY
        NNX=2*NX+1
        NNY=2*NY+1
        NN=(2*NX-1)*(2*NY-1)
        WRITE(12,25) NNX,NNY,DX,DY,NN,NT,NPT
25      FORMAT(/' NNX,NNY:',2I8,5X,'DX,DY:',2E14.5,5X,
1         'NN,NT,NPT:',3I8)
        RETURN
        END

```

```

*-----
*-----
*   SUBROTINA MALHA DOS TRIANGULOS DE 6 NOS CADA
*-----

```

```

        SUBROUTINE MALHA2
        PARAMETER(MNA=200)
        DIMENSION L(400),IRA(400)
        COMMON /INT/ NX,NY,NT,NNX,NNY,NN
        COMMON /MAT1/ MALHA(MNA,6),SA1(6,6),SB1(6,6),SFI(6)

        NV=NNX*NNY

        NX1 = NNX+1
        NY1 = NNY+1

        DO 10 I=1,NV
L(I)=0
10      CONTINUE

```

\*BORDE EZQUERDO

```
      DO 20 I=1,NNY
      L(I)=1
20    CONTINUE
```

\*BORDE DA BASE

```
      DO 30 I=1,NNX-2
      K=I*NNY+1
      L(K)=1
30    CONTINUE
```

\* BORDE SUPERIOR

```
      DO 44 I=2,NNX-1
      K=I*NNY
      L(K)=1
44    CONTINUE
```

\*BORDE DIREITO

```
      K1=(NNX-1)*NNY+1
      K2=NNY*NNX
```

```
      DO 50 I=K1,K2
      L(I)=1
50    CONTINUE
```

J=0

```
      DO 80 I=1,NV
      IRA(I)=0
      IF(L(I).EQ.0) THEN
        J=J+1
      IRA(I)=J
      ENDIF
```

80 CONTINUE

\* A MALHA INCLUINDO O BORDE

```

      K = 0
DO 40 I = 1, NX
DO 40 J = 1, NY
K = K + 1
MALHA(K,1) = 2*(I-1)*NNY + 2*(J-1)+1
MALHA(K,2) = MALHA(K,1) + NNY
MALHA(K,3) = MALHA(K,2) + NNY
MALHA(K,4) = MALHA(K,2) + 1
MALHA(K,5) = MALHA(K,1) + 2
MALHA(K,6) = MALHA(K,1) + 1
K = K + 1
MALHA(K,1) = 2*I*NNY + 2*J + 1
MALHA(K,2) = MALHA(K,1) - NNY
MALHA(K,3) = MALHA(K,2) - NNY
MALHA(K,4) = MALHA(K,2) - 1
MALHA(K,5) = MALHA(K,1) - 2
40    MALHA(K,6) = MALHA(K,1) - 1

```

\* A RENUMERACAO DOS NOS DA MALHA

```

DO 110 KE=1,NT
      DO 110 J=1,6
        MALHA(KE,J)= IRA(MALHA(KE,J))
110    CONTINUE

```

```

      RETURN
      END

```

```

*-----
*-----
C      SUBROTINA  SUBMATRICES E ASSEMBLING DAS MATRICES
*-----

      SUBROUTINE ASSEMBLER

      PARAMETER(NA=400,MNA=200)

```

```

COMMON /INT/ NX,NY,NT,NNX,NNY,NN
COMMON /CIN/ DX,DY,DT,ALFA,SIGMA,V1,V2,FCT,IND1,IND2
COMMON /MAT1/ MALHA(MNA,6),SA1(6,6),SB1(6,6),SFI(6)
COMMON /MAT2/ A(NA,NA),B(NA,NA),D(NA),SAS(6,6),SBS(6,6)
COMMON /MAUX1/ RF(6,6),RFG(6,6),RFX(6,6),RFY(6,6)
COMMON /MAUX2/ RFS(6,6),RFGS(6,6),RFXS(6,6),RFYS(6,6)

```

\* OS ARQUIVOS GERADOS PELO SOFTWARE MATHEMATICA

```

OPEN(UNIT=111,FILE='arF',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=112,FILE='arFX',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=113,FILE='arFY',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=114,FILE='arG',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=116,FILE='arFX2',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=117,FILE='arFY2',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=119,FILE='arF12',STATUS='OLD')

```

\* CONSTRUCAO DAS SUBMATRICES DE RIGIDEZ

```
DO 251 I=1,6
```

```

      READ(111,*)(RF(I,J),J=1,6)
      READ(112,*)(RFX(I,J),J=1,6)
      READ(113,*)(RFY(I,J),J=1,6)
      READ(114,*)(RFG(I,J),J=1,6)
      READ(116,*)(RFXS(I,J),J=1,6)
      READ(117,*)(RFYS(I,J),J=1,6)
251   READ(119,*) SFI(I)

```

```
DO 252 I=1,6
```

```

      SFI(I)=DX*DY*SFI(I)
DO 252 J=1,6
      RF(I,J)=DX*DY*RF(I,J)
      RFS(I,J)=RF(I,J)

```



```

RFX(I,J)=DY*RFX(I,J)
RFXS(I,J)=DY*RFXS(I,J)
RFY(I,J)=DX*RFY(I,J)
RFYS(I,J)=DX*RFYS(I,J)
252   RFG(I,J)=(DY/DX)*RFG(I,J)

```

\* ENTRADA DE ELEMENTOS DAS MATRICES GRADIENTES

```

RFG(1,1)=0.5*DX/DY +0.5*DY/DX
RFG(1,5)=DX/(6*DY)
RFG(5,1)= RFG(1,5)
RFG(1,6)= -(2.0*DX)/(3.0*DY)
RFG(6,1)= RFG(1,6)
RFG(2,2)= (4.0*DX)/(3.0*DY)+(4.0*DY)/(3.0*DX)
RFG(2,4)=- (4.0*DX)/(3.0*DY)
RFG(4,2)=RFG(2,4)
RFG(4,4)=RFG(2,2)
RFG(5,5)=0.5*DX/DY
RFG(5,6)=RFG(1,6)
RFG(6,5)=RFG(1,6)
RFG(6,6)=RFG(2,2)

DO 311 I=1,6
  DO 311 J=1,6
311   RFGS(I,J)=RFG(I,J)

```

\* CALCULOS COM OS PARAMETROS E A POSICAO DA FONTE(IND1,IND2)

```

WRITE(12,*)'DT=',DT,'IND1=',IND1,' IND2=',IND2

```

```

SDT2 = SIGMA*DT/2.0
ADT2 = ALFA*DT/2.0
V1DT = V1*DT/2.0
V2DT = V2*DT/2.0
DXY8 = DX*DY/8.0
FDT = DT*FCT

```

```

DO 261 I=1,6
DO 261 J=1,6
SA1(I,J)=(1+sdt2)*RF(I,J)+adt2*RFG(I,J)+v1dt*RFX(I,J)
SA1(I,J)= SA1(I,J)+v2dt*RFY(I,J)

SB1(I,J)=(1-sdt2)*RF(I,J)-adt2*RFG(I,J)-v1dt*RFX(I,J)
SB1(I,J)= SB1(I,J)-v2dt*RFY(I,J)

SAS(I,J)=(1+sdt2)*RFS(I,J)+adt2*RFGS(I,J)+v1dt*RFXS(I,J)
SAS(I,J)=SAS(I,J)+v2dt*RFY(I,J)

) SBS(I,J)=(1-sdt2)*RFS(I,J)-adt2*RFGS(I,J)-v1dt*RFXS(I,J)
261   SBS(I,J)=SBS(I,J)-v2dt*RFY(I,J)

WRITE(12,*)'ALFA,SIGMA,V1,V2,FCT:'
WRITE(12,*)ALFA,SIGMA,V1,V2,FCT

DO 150 IND = 1, NT
DO 294 IL=1,6
IG=MALHA(IND,IL)
IF(IG.NE.0) THEN
DO 292 JL=1,6
JG=MALHA(IND,JL)
IF(JG.NE.0) THEN
IF(MOD(IND,2).EQ.1) THEN
A(IG,JG) = A(IG,JG) + SA1(IL,JL)
B(IG,JG) = B(IG,JG) + SB1(IL,JL)
ELSE
A(IG,JG) = A(IG,JG) + SAS(IL,JL)
B(IG,JG) = B(IG,JG) + SBS(IL,JL)
ENDIF
ENDIF
292 CONTINUE
ENDIF
IF((IND.EQ.IND1).OR.(IND.EQ.IND2)) D(IG)=D(IG)+SFI(IL)
294 CONTINUE

```

150 CONTINUE

RETURN

END

\*-----

\*-----

\* RESOLVE  $A \cdot X_1(N+1) = B \cdot X_0(N) + D$  E COLOCA O RESULTADO EM X1

\*-----

SUBROUTINE RESOLV(X1)

PARAMETER(NA=400,MNA=200)

DIMENSION X0(NA),X1(\*)

COMMON /INT/ NX,NY,NT,NNX,NNY,NN

COMMON/MAT2/A(NA,NA),B(NA,NA),D(NA),SAS(6,6),SBS(6,6)

COMMON /DAUX/IPVT(NA),Z1(NA),RCOND

COMMON /TEM/ NPT

C A CONDICAÇÃO INICIAL

DO 301 I=1,NN

301 X0(I)=1.0

CALL SGECO(A,NA,NN,IPVT,RCOND,Z1)

DO 170 N=1,NPT

\* FAZ  $B \cdot X_0 + D$  COM RESULTADO EM X1

DO 290 I = 1, NN

S = 0.0

DO 280 J = 1, NN

280 S = S + B(I,J)\*X0(J)

290 X1(I) = S + D(I)

\* RESOLVE  $A \cdot X = X_1$  COM RESULTADO EM X1

```
CALL SGESL(A,NA,NN,IPVT,X1,0)
```

```
DO 180 I=1,NN
```

```
X0(I)=X1(I)
```

```
180 CONTINUE
```

```
NPT1=NPT-3
```

```
IF(N.GT.NPT1) THEN
```

```
WRITE(12,11) N
```

```
11 FORMAT('O VETOR SOLUCAO NA ITERACAO N= ',I3)
```

```
L1=2*NX-1
```

```
L2=2*NY-1
```

```
DO 190 J=1,L1
```

```
J1=(J-1)*L2+1
```

```
J2=J*L2
```

```
WRITE(12,*)(X1(I),I=J1,J2 )
```

```
190 CONTINUE
```

```
ENDIF
```

```
170 CONTINUE
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
*-----
```

```
*-----
```

```
* SUBROTINA PREPARA O ARQUIVO PARA O GRAFICO DA SUPERFICIE
```

```
* SOLUCAO NA ULTIMA ITERACAO:NPT
```

```
*-----
```

```
SUBROUTINE GRAFIC(X1)
```

```
DIMENSION X1(*)
```

```
COMMON /INT/ NX,NY,NT,NNX,NNY,NN
```

```
OPEN(UNIT=13,FILE='GRAFICO.DAT')
```

```

        NX1=2*NX-1
        NY1=2*NY-1
        WRITE(13,'(1X,6A)')'GRAF={ '
        WRITE(13,'(1X,6A)')'{0,'
        WRITE(13,'(1X,6A)')('0,',I=1,NY1)
        WRITE(13,'(1X,6A)')'0}'
        DO 200 J=1,NX1
WRITE(13,'(1X,3H{0,,\} ')
DO 210 I=(J-1)*NY1+1,J*NY1
    IF(J.EQ.NX1) THEN
        IF(I.EQ.(NX1*NY1)) THEN
            WRITE(13,'(1X,F16.6,4H,0},\}')X1(I)
        ELSE
            WRITE(13,'(1X,F16.6,1H,,\}')X1(I)
        ENDIF
    ELSE
        IF(I.EQ.NY1*J) THEN
            WRITE(13,'(1X,F16.6,4H,0},,\}')X1(I)
        ELSE
            WRITE(13,'(1X,F16.6,1H,,\}')X1(I)

        ENDIF
    ENDIF
210 CONTINUE
200 CONTINUE
        WRITE(13,'(1X,6A)')'{0,'
        WRITE(13,'(1X,6A)')('0,',I=1,NY1)
        WRITE(13,'(1X,6A)')'0}'

        RETURN
        END

```

```

*-----
*****

```

```

*****
*
* PROGRAMA QUE FAZ A SOLUCAO DE:
*
*  $U_t - \text{ALPHA} * \text{LAP}(U) + \text{DIV}(V * U) + \text{SIGMA} * U = F$  COM  $\text{DIV}(V * U) = V_1 * U_x + V_2 * U_y$ 
*
* COM F UMA FONTE LOCAL CONSTANTE, ALPHA, SIGMA, V1 E V2 SAO CONSTANTES
*
* RESOLUCAO VIA ELEMENTOS FINITOS NO RETANGULO [a,b]X[c,d]
*
* .....
* PROGRAMA PRINCIPAL
* .....

```

```

PARAMETER(NA=125,NM=288)
IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
DIMENSION D1(NA)
COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
COMMON /SINT/DX,DY,DT
COMMON /MATR/MALHA(NM,3),COOR(NA,2)
COMMON /PAR/F,ALPMAX,ALPHA,SIGMA,VX,VY,KF1
COMMON /XEM/XO,YO
COMMON /DAUX/IPVT(NA),Z(NA),RCOND
COMMON /MAUX/GSU(3,3),SIG(3,3),VEL1(3,3),VEL2(3,3),SUB1(3,3),
1          SUB2(3,3),BU(3),A(NA,NA),A1(NA,NA),AD(NA,NA),
2          AE(NA,NA),D(NA)

```

CALL LETDAD

CALL INFO

CALL CALC

CALL RESOLVE(D1)

CALL GRAFIC(D1)

END

\*.....

\*-----

\* SUBROTINA PEDE E CALCULA DADOS PARA A CONSTRUCAO DAS MATRICES

\*-----

SUBROUTINE LETDAD

IMPLICIT REAL\*4(A-H,O-Z)

COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR

COMMON /SINT/DX,DY,DT

COMMON /PAR/F,ALPMAX,ALPHA,SIGMA,VX,VY,KF1

COMMON /XEM/XO,YO

\* DADOS PARA A VARIABEL ESPACIAL E OS PARAMETROS

WRITE(\*,\*)'O INTERVALO [XO,XF]'

WRITE(\*,\*)'XO= '

READ(\*,\*)XO

WRITE(\*,\*)'XF='

READ(\*,\*)XF

WRITE(\*,\*)'O INTERVALO [YO,YF]'

WRITE(\*,\*)'YO= '

READ(\*,\*)YO

WRITE(\*,\*)'YF='

READ(\*,\*)YF

WRITE(\*,\*)'DAR O NUMERO DE SUBINTERVALOS NX'

READ(\*,\*)NX

WRITE(\*,\*)'DAR O NUMERO DE SUBINTERVALOS NY'

READ(\*,\*)NY

WRITE(\*,\*)'DAR VALOR DE LA FONTE CONSTANTE F'

READ(\*,\*)F

```

        WRITE(*,*)'A FONTE NA REGIAO DO TRIANG. '
        READ(*,*)KF1
        WRITE(*,*)'A INCLINACAO DA RETA: ALPHA(Z)=ALPMAX*X, ALPMAX'
READ(*,*)ALPMAX
WRITE(*,*)'O PARAMETRO DE DECAIMENTO SIGMA'
READ(*,*)SIGMA
WRITE(*,*)'OS VALORES DAS VELOCIDADES'
WRITE(*,*)'VX='
READ(*,*)VX
WRITE(*,*)'VY='
READ(*,*)VY

```

```

* DADOS PARA A VARIABEL TEMPORAL

```

```

        WRITE(*,*)'O DT:'
        READ(*,*)DT
        WRITE(*,*)'ITERACAO REQUERIDA,NTR>=5'
        READ(*,*)NTR

```

```

        NT=2*NX*NY
        NV=(NX+1)*(NY+1)
        NN=(NX+1)*(NY+1)
        IF (YF.NE.0) ALPHA=ALPMAX/YF
        DX=(XF-XO)/NX
        DY=(YF-YO)/NY

```

```

RETURN
END

```

```

*-----
*-----
* SUBROTINA FORNECE INFORMACOES NO PROCEDIMENTO PARA OBTEN A SOLUAO
*-----

```

```

SUBROUTINE INFO
IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)

COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
COMMON /SINT/DX,DY,DT

```



```
COMMON /PAR/F,ALPMAX,ALPHA,SIGMA,VX,VY,KF1
```

```
OPEN(UNIT=2, FILE='PEVOL2.OUT')
```

```
WRITE(2,*)' INFORMACOES DO PROBLEMA DE DIFUSAO-ADVECCAO'
```

```
WRITE(2,*)' DE POLUENTES COM PARAMETRO DIF. VARIABEL '
```

```
WRITE(2,*)'F=',F
```

```
WRITE(2,*)'INCLINACAO: ALPMAX',ALPMAX
```

```
WRITE(2,*)'SIGMA=',SIGMA
```

```
WRITE(2,*)'VX E VY = ',VX,VY
```

```
WRITE(2,*)'NX E DX= ',NX,DX
```

```
WRITE(2,*)'NY E DY= ',NY,DY
```

```
WRITE(2,*)'NN =',NN
```

```
WRITE(2,*)'NV= ',NV
```

```
WRITE(2,*)'DT= ',DT
```

```
WRITE(2,*)'ITERACAO REQUERIDA,NTR= ',NTR
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
*-----  
*-----  
* SUBROTINA CALCULA OS ELEMENTOS DAS MATRICES DO PROBLEMA  
*-----
```

```
SUBROUTINE CALC
```

```
PARAMETER(NA=125,NM=288)
```

```
IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
```

```
COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
```

```
COMMON /SINT/DX,DY,DT
```

```
COMMON /MATR/MALHA(NM,3),COOR(NA,2)
```

```
COMMON /PAR/F,ALPMAX,ALPHA,SIGMA,VX,VY,KF1
```

```
COMMON /MAUX/GSU(3,3),SIG(3,3),VEL1(3,3),VEL2(3,3),SUB1(3,3),
```

```
1 SUB2(3,3),BU(3),A(NA,NA),A1(NA,NA),AD(NA,NA),
```

```
2 AE(NA,NA),D(NA)
```

```
CALL MALHAM
```

```

KF2=KF1+1
M1=MALHA(KF1,1)
M4=MALHA(KF2,1)
M2=M1+1
M3=M4-1
WRITE(2,*)'LOCALIZACAO DA FONTE:'
WRITE(2,*)'NA REGIAO DOS TRIANGULOS:', 'NTf=',KF1,'      E ',KF2
WRITE(2,*)'NOS NODOS:',M1,M2,M3,M4
      WRITE(2,*)'POSICAO DOS NOS NA MALHA'

```

\* LAS SUBMATRICES DE RIGIDEZ

```

ALPH1=1.0/(DX*DX)+1.0/(DY*DY)
ALPH2=1.0/(DX*DX)
ALPH3=1.0/(DY*DY)

```

```

GSU(1,1)=ALPH1
GSU(1,2)=-ALPH2
GSU(1,3)=-ALPH3
GSU(2,1)=GSU(1,2)
GSU(2,2)=ALPH2
GSU(2,3)=0.0
GSU(3,1)=GSU(1,3)
GSU(3,2)=GSU(2,3)
GSU(3,3)=ALPH3

```

```

SIG(1,1)=1.0/12
~ SIG(1,2)=0.5/12
SIG(1,3)=0.5/12
SIG(2,1)=SIG(1,2)
SIG(2,2)=SIG(1,1)
SIG(2,3)=0.5/12
SIG(3,1)=SIG(1,3)
SIG(3,2)=SIG(2,3)
SIG(3,3)=SIG(1,1)

```

V=1.0/6

```
DO 65 I=1,3
  VEL1(I,1)=-V
  VEL1(I,2)=V
  VEL1(I,3)=0
```

```
  VEL2(I,1)=-V
  VEL2(I,2)=0
  VEL2(I,3)=V
```

```
65    CONTINUE
```

```
DO 70 I=1,3
  DO 70 J=1,3
    GSU(I,J)=DX*DY*GSU(I,J)
    SIG(I,J)=DX*DY*SIG(I,J)
    VEL1(I,J)=DY*VEL1(I,J)
    VEL2(I,J)=DX*VEL2(I,J)
```

```
70    CONTINUE
```

```
DO 80 I=1,3
  DO 80 J=1,3
    SUB1(I,J)=SUB1(I,J)+SIGMA*SIG(I,J)+VX*VEL1(I,J)+VY*VEL2(I,J)
```

```
80    CONTINUE
```

```
DO 85 J=1,3
  VEL1(1,J)=-VEL1(1,J)
  VEL2(1,J)=-VEL2(1,J)
```

```
85    CONTINUE
```

```
DO 90 I=1,3
  DO 90 J=1,3
    SUB2(I,J)=SUB2(I,J)+SIGMA*SIG(I,J)+VX*VEL1(I,J)+VY*VEL2(I,J)
```

```
90    CONTINUE
```

\* 0 SUVETOR BU

BU(1)=F\*DT\*DX\*DY/6

```
BU(2)=BU(1)
BU(3)=BU(1)
```

```
* O ASSEMBLE DA MATRIZ DE RIGIDEZ E O VETOR DE CARGA D
```

```
DO 92 I=1,NN
  D(I)=0
DO 92 J=1,NN
  A(I,J) = 0
    A1(I,J)=0
92  CONTINUE
```

```
CALL MACOOR
```

```
DO 100 K=1,NT
```

```
YI=COOR(MALHA(K,1),2)
Z1=0.5*YI+DY/6
Z2=0.5*YI-DY/6
```

```
DO 100 I=1,3
  MIK=MALHA(K,I)
  DO 110 J=1,3
    MJK=MALHA(K,J)
    A1(MIK,MJK)=A1(MIK,MJK)+SIG(I,J)
    IF(K.EQ.((K/2)*2)) THEN
      AUX2=Z2*GSU(I,J)
      AUX2=SUB2(I,J)+ALPHA*AUX2
      A(MIK,MJK)=A(MIK,MJK)+AUX2
    ELSE
      AUX1=Z1*GSU(I,J)
      AUX1=SUB1(I,J)+ALPHA*AUX1
      A(MIK,MJK)=A(MIK,MJK)+AUX1
    ENDIF
  110 CONTINUE
```

```
IF((K.EQ.KF1) .OR. (K.EQ.KF2)) D(MIK)=D(MIK)+BU(I)
```

100       CONTINUE

          DO 150 I=1,NN  
DO 150 J=1,NN  
  AE(I,J)=A1(I,J)+0.5\*DT\*A(I,J)  
  AD(I,J)=A1(I,J)-0.5\*DT\*A(I,J)  
150       CONTINUE

      RETURN  
      END

\*-----

\*-----

\*SUBROTINA MATRIZ MALHA

\*-----

      SUBROUTINE MALHAM

  \*

\*DECLARACAO DAS VARIAVEIS

\*NX :NUMERO DE SUBINTERVALOS NO EIXO-X

\*NY :NUMERO DE SUBINTERVALOS NO EIXO-Y

\*NV :NUMERO DE VERTICES NA DISCRETIZACAO

\*NT :NUMERO DE TRIANGULOS

\*NN :NUMERO DE NOS

\*MALHA :MATRIZ MALHA

  PARAMETER(NA=125,NM=288)

  IMPLICIT REAL\*4(A-H,O-Z)

  COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR

  COMMON /SINT/DX,DY,DT

  COMMON /MATR/MALHA(NM,3),COORD(NA,2)

  NX1 = NX+1

  NY1 = NY+1

  K=0

  DO 100 J=1,NY

    DO 200 I=1,NX

K=K+1

MALHA(K,1)=(J-1)\*NX1+I

MALHA(K,2)=(J-1)\*NX1+(I+1)

MALHA(K,3)=J\*NX1+I

K=K+1

MALHA(K,1)=J\*NX1 +(I+1)

MALHA(K,2)=J\*NX1+I

MALHA(K,3)=(J-1)\*NX1+(I+1)

200 CONTINUE

100 CONTINUE

RETURN

END

\*-----  
\*-----  
\* SUBROTINA MATRIZ COORDENADAS DOS NOS  
\*-----

SUBROUTINE MACOOR

\*DECLARACAO DAS VARIAVEIS

\*NX :NUMERO DE SUBINTERVALOS NO EIXO-X

\*NY :NUMERO DE SUBINTERVALOS NO EIXO-Y

\*NV :NUMERO DE VERTICES NA DISCRETIZACAO

\*NT :NUMERO DE TRIANGULOS

\*NN :NUMERO DE NOS

\*COOR :MATRIZ DAS COORDENADAS DOS NOS

PARAMETER(NA=125,NM=288)

IMPLICIT REAL\*4(A-H,O-Z)

COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR

COMMON /SINT/DX,DY,DT

COMMON /MATR/MALHA(NM,3),COOR(NA,2)

COMMON /XEM/XO,YO

\*CALCULO DA MATRIZ DAS COORDENADAS DOS NOS

```
K=0
DO 10 J=1,NY+1
DO 10 I=1,NX+1
K=K+1
COORD(K,1)=(I-1)*DX+XO
COORD(K,2)=(J-1)*DY+YO
10  CONTINUE
```

RETURN  
END

\*-----  
\*-----  
\* RESOLVE  $AE*U(N+1)=AD*U(N)+D$  E COLOCA O RESULTADO EM D1,  $U(0)=U0$   
\*-----

SUBROUTINE RESOLVE(D1)

```
PARAMETER(NA=125)
IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
DIMENSION UO(NA),D1(*)
COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,NTR
COMMON /MAUX/GSU(3,3),SIG(3,3),VEL1(3,3),VEL2(3,3),SUB1(3,3),
1      SUB2(3,3),BU(3),A(NA,NA),A1(NA,NA),AD(NA,NA),
2      AE(NA,NA),D(NA)
COMMON /DAUX/IPVT(NA),Z(NA),RCOND
```

\* A CONDICAO INICIAL U0

```
DO 140 K=1,NN
UO(K)=UO(X,Y)
140  CONTINUE
```

CALL SGECO(AE,NA,NN,IPVT,RCOND,Z)

DO 170 N=1,NTR

\* FAZ  $AD \cdot U(N) + D$  COM RESULTADO EM D1

CALL PROD(NA,NN,AD,UO,D,D1)

\* RESOLVE  $AE \cdot U(N+1) = D1$  COM RESULTADO EM D1

CALL SGESL(AE,NA,NN,IPVT,D1,0)

DO 180 I=1,NN

UO(I)=D1(I)

180 CONTINUE

NTR1=NTR-5

IF(N.GT.TR1) THEN

WRITE(2,\*)'O VETOR SOLUCAO NA ITERACAO N',N

DO 190 J=1,NY+1

J1=(J-1)\*(NX+1)+1

J2=J\*(NX+1)

WRITE(2,\*)(D1(I),I=J1,J2 )

190 CONTINUE

ENDIF

170 CONTINUE

RETURN

END

\*-----

\*-----

\* A CONDICAO INICIAL UO(X,Y)

\*-----

REAL\*4 FUNCTION UO(X,Y)

REAL\*4 X,Y



U0=1

END

```
*-----  
*-----  
*SUBROTINA PRODUTO FAZ: AD*U(N)+D =D1  
*-----
```

SUBROUTINE PROD(NA,N,A,X,Y,D1)

REAL\*4 A(NA,\*),X(\*),Y(\*),D1(\*)

DO 10 I=1,N

S=0

DO 20 J=1,N

S= S+A(I,J)\*X(J)

20 CONTINUE

D1(I)=S+Y(I)

10 CONTINUE

RETURN

END

```
*-----  
*-----  
* SUBROTINA PREPARA O ARQUIVO PARA O GRAFICO DA SUPERFICIE  
* SOLUCAO NA ULTIMA ITERACAO:TR  
*-----
```

SUBROUTINE GRAFIC(D1)

IMPLICIT REAL\*4(A-H,O-Z)

DIMENSION D1(\*)

COMMON /DATA/NX,NY,NT,NN,NV,TR

OPEN(UNIT=3, FILE='GRAFSOL')

NX1=NX+1

```

        NY1=NY+1
        WRITE(3,'(1X,6A)')'GRAF={ '
        DO 200 J=1,NY1
WRITE(3,'(1X,1H{,\})')
DO 210 I=(J-1)*NX1+1,J*NX1
    IF(J.EQ.NY1) THEN
        IF(I.EQ.(NX1*NY1)) THEN
            WRITE(3,'(1X,F12.6,2H}{,\})')D1(I)
        ELSE
            WRITE(3,'(1X,F12.6,1H,,\')')D1(I)
        ENDIF
    ELSE
        IF(I.EQ.NX1*J) THEN
            WRITE(3,'(1X,F12.6,2H}{,,\')')D1(I)
        ELSE
            WRITE(3,'(1X,F12.6,1H,,\')')D1(I)
        ENDIF
    ENDIF
210 CONTINUE
200 CONTINUE

        RETURN
        END

```

```

*-----
*=====

```

# Bibliografia

- [1] Marchuk, G. I.: *Mathematical Models in Environmental Problems, Studies in Mathematical and its Applications*, Vol 16, North Holland, Amsterdam, 1986.
- [2] Okubo, A.: *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*, Biomathematics, Vol 10, Springer, Berlin, 1980.
- [3] Murray, J. D.: *Mathematical Biology*, Springer, Berlin, 1989.
- [4] Johnson, C.: *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.
- [5] Edelstein-Keshet, L.: *Mathematical Models in Biology*, Random House/Birkhauser, 1987.
- [6] Lions, J. L.: *Equations Diferentielles Operationelles et Problems aux Limites*, Springer Verlag, 1961.
- [7] Jørgensen, S. E.: *Fundamentals of Ecological Modelling*, Developments in Environmental Modelling, Vol 9, Elsevier, Amsterdam, 1986.
- [8] Carey, G. F., Oden, J. T.: *The Texas Finite Elements Series*, Volumes I, II, III e IV, Inc, 1983.
- [9] Fairweather, G.: *Finite Elements Galerkin Methods for Differential Equations*, New York, 1978.
- [10] Kandestuncer, H.: *Finite Element Handbook*, McGraw-Hill, New York, 1987.

- [11] Medeiros, L. A., Miranda, M. M.: *Introdução aos Espaços de Sobolev e as Equações Diferenciais Parciais*, Rio de Janeiro, 1989.
- [12] Moura, C. A.: *Análise Funcional e Aplicações*, Rio de Janeiro, 1978.
- [13] Strang, G., Fix, J. G.: *An Analysis of the Finite Element Method*, Prentice Hall, 1973.
- [14] Zienkiewicz, O. C., Morgan, K.: *Finite Elements and Approximation*, Wiley, 1983.
- [15] Gilli, J.C.: *Modelagem e Simulação Numérica do Processo de Diálise via o Método dos Elementos Finitos*, Dissertação de Mestrado, IMECC/UNICAMP, 1991.
- [16] Mistro, D.: *O problema da Poluição em rios por Mercúrio Metálico Modelagem e Simulação Numérica*, Dissertação de Mestrado, IMECC/UNICAMP, 1992.
- [17] Sevá, O., Ferreira, L. C.: *O projeto da Termoelétrica em Paulínia, SP. A questão energética e a depredação Sócio Ambiental*, Coletânea de Ensaio e Estudos, Campinas, NEPAM/UNICAMP, 1989.
- [18] Barbosa, S.: *Industrialização , ambiente e condições de vida em Paulínia, SP: as representações de qualidade ambiental para médicos e pacientes*, Dissertação de mestrado em Sociologia, DCS/IFCH/UNICAMP, 1990.
- [19] Barbosa, S.: *Ambiente Qualidade de Vida e Cidadania. Algumas Reflexões sobre centros urbanos industriais*, in Hogan, D. J.: *Dilemas Sócioambientais e Desenvolvimento Sustentável*, Campinas, Editora da UNICAMP, 1992.
- [20] *Modernização e Desenvolvimento no interior de São Paulo*, Editora UNESP, 1988.
- [21] Velasco-Suarez, M.: *Bioética y Salud Ambiental*, Salud Pública de México, 35:214-220, 1993.
- [22] Ana Guimaraes F.: *Ecologia e Poluição* , 1976, USP.