UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional

Nelson Fernando Inforzato

Tese de Doutorado orientada pelo
Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer

Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional

Este exemplar corresponde à redação final da tese de doutorado devidamente corrigida e defendida por Nelson Fernando Inforzato e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 26 de junho de 2008.

Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer - orientador

Banca Examinadora:

1. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer
2. Dr^{a}. Sandra Mara Cardoso Malta
3. Dr. Mauro Cirano
4. Dr^{a}. Vera Lúcia Rocha Lopes
5. Dr. Laécio Carvalho de Barros

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Matemática Aplicada.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP
Bibliotecária: Miriam Cristina Alves – CRB8a / 5094

	Inforzato, Nelson Fernando
In3d	Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem matemática, aproximação numérica e simulação computacional/Nelson Fernando Inforzato -- Campinas, [S.P. :s.n.], 2008.
	Orientador : João Frederico da Costa Azevedo Meyer
	Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.
	1. Impacto ambiental. 2. Equações diferenciais parciais. 3. Método dos elementos finitos. 4. Simulação por computador. I. Meyer, João Frederico da Costa Azevedo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: Pollutant dispersal in an air-water system: mathematical modeling, numerical approximation and computational simulations

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Environmental impact. 2. Partial differential equations. 3. Finite elements method. 4. Computational simulations.

Área de concentração: Ecologia matemática

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora: Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer (IMECC-Unicamp)
Profa. Dra. Vera Lúcia da Rocha Lopes (IMECC - Unicamp)
Prof. Dr. Laécio Carvalho de Barros (IMECC-Unicamp)
Profa. Dra. Sandra Mara Cardoso Malta (LNCC)
Prof. Dr. Mauro Cirano (UFBA)

Data da defesa: 26/06/2008

Programa de Pós-Graduação: Doutorado em Matemática Aplicada

Tese de Doutorado defendida em 26 de junho de 2008 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.

Prof. (a). Dr (a). JOÃO FREDERICO DA COSTA AZEVEDO MEYER

Rocha Lopes

Prof. (a). Dr (a). VÉRA LÚCIA DA ROCHA LOPES

Laécio C. Barros

Prof. (a). Dr (a). LAÉCIO CARVALHO DE BARROS

Sandra Mara Cardoso Malta

Prof. (a). Dr (a). SANDRA MARA CARDOSO MALTA

Mauro Cirano

Prof. (a) Dr. (a) MAURO CIRANO

Resumo

Este trabalho estuda um problema evolutivo de difusão-advecção num sistema ar-água tri-dimensional. Apresenta-se um modelo e o correspondente sistema de EDPs que reúne as equações clássicas de Difusão-advecção/reação em 3D e a equação de Stokes, junto com condições de contorno descritivas da dinâmica do poluente também na interface entre ar e água. Verificam-se existência e unicidade de solução na formulação variacional. São apresentadas discretizações espacial (elementos finitos de segunda ordem com SUPG) e temporal (Crank-Nicolson). São obtidas estimativas de erro a priori para Galerkin contínuo e Galerkin/Crank-Nicolson. Apresenta-se um programa computacional para simulações de diferentes cenários com resultados numéricos e saída gráfica para visualização de caráter qualitativo. Evidencia-se, assim, o potencial deste trabalho como suporte robusto na avaliação de estratégias de descarte de poluentes.

Abstract

This work considers a three-dimensional air-water system pollution discharge problem, modelling it with a system of partial differential equations which includes both the diffusion-advection evolutionary and Stoke's equations. Appropriate boundary conditions are considered, including for the air-water interface, and special attention is dedicated to existence and uniqueness results. In terms of the numerical approximation, space discretization is undertaken with three-dimensional second-order finite elements, and, in time, a Crank-Nicolson scheme is adopted. A priori estimates are given for the continuous Galerkin and for the Galerkin/Crank-Nicolson approximations. A numerical algorithm is presented and the qualitative visual output is used to emphasize the potential for simulating and discussing pollution discharge strategies.

À minha Família.

Agradecimentos

Inicialmente agradeço a Deus, por ter me dado forças suficientes a fim de superar os obstáculos e conquistar o meu objetivo. Agradeço ao meu orientador e grande amigo Prof. Joni pela sua grande dedicação, paciência e amizade; à minha esposa Drica, que esteve sempre ao meu lado com seu amor, carinho e amizade; aos meus pais e minha irmã, que sempre acreditaram nessa conquista; à minha família que me apoiou e incentivou todo o tempo; aos amigos que aqui conquistei, em especial ao Moiseis, Marcos e Igor; a todos meus professores pelos conhecimentos transmitidos; aos membros da banca examinadora que se dispuseram a colaborar com este trabalho; ao pessoal da secretaria de pós-graduação do Imecc; à CAPES pelo financiamento parcial deste trabalho; ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina pela liberação de minhas atividades docentes; e a todos que direta ou indiretamente contribuiram para o andamento e conclusão deste trabalho.

Conteúdo

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Introdução

Nos tempos atuais, a atividade humana de uma forma geral vem aumentando muito sua capacidade de produção e, consequentemente, o ingresso de poluentes em nosso meio, causando assim inúmeros problemas ambientais a curto, a médio e longo prazos dificultando a preservação da biodiversidade, dos sistemas ecológicos e seu manejo sustentável.

Observamos que, da metade para o final do século passado, houve um rápido desenvolvimento no setor industrial e agrícola, o que, com certeza, levou ao agravamento dos problemas ambientais dificultando assim a preservação de nossos sistemas ecológicos. Segundo *Marchuk* [22], em muitas regiões a poluição local causada pelos emissores industriais tem superado o valor máximo permitido para níveis aceitáveis de qualidade de vida.

Nas três últimas décadas, a emissão de poluentes industriais e agrícolas no meio ambiente levou a distúrbios do equilíbrio de vários ecossistemas, como exemplos mais conhecidos, o aquecimento global (ONU, 2007), a erosão e a contaminação de extensas áreas por metais ferrosos e não-ferrosos, além de outros metais [16], [22], [32] e [35]. Num primeiro momento, ar, água e solo são os primeiros a sentirem os impactos desta poluição de modo mais direto. No caso dos lagos, ou represas, esta poluição pode ingressar nos diversos domínios de muitos modos; pelo ar e se depositar na água, escorrendo pela margem do lago, podendo se depositar no sedimento ou até voltar ao meio aéreo, entre outros modos.

Na realidade, nosso planeta está repleto de substâncias tóxicas. Existem fontes naturais de poluentes aéreos, como por exemplo vulcões, incêndios florestais e gases provenientes das atividades anaeróbicas. Em alguns casos, as dimensões dessas emissões naturais de poluentes aéreos podem se igualar ou exceder àquelas associadas com a atividade humana. Em outros casos antropogênicos, porém, as emissões são mais importantes e de modo crescente por causa do crescimento da população e do desenvolvimento tecnológico.

Em geral, quando se fala de poluição, estamos falando das substâncias tóxicas introduzidas pelo homem no meio ambiente. Isto não quer dizer que apenas a poluição causada pelas ações do homem seja nociva, mesmo que, na maioria das vezes, é a poluição introduzida pelo homem que tem consequências mais dramáticas. Nosso próprio corpo saudável contém apreciáveis quantidades de substâncias consideradas venenosas, presentes naturalmente, como arsênio, mercúrio e outros metais pesados [24]. Além disso, nosso organismo pode absorver quantidades de substâncias nocivas sem que atinjam limites a partir dos quais sejam prejudiciais à saúde (*op. cit.*).

Assim, podemos dizer também que nossos corpos, de certa forma, são poluídos, ou seja, há uma contaminação de fato (não nociva). Alguns preferem não considerar isto como contaminação, a menos que esteja sendo produzido algum efeito (poluição nociva). Segundo Alloway e Ayres [1], devido à melhoria dos métodos de análise e diagnósticos, o que parecia ser uma contaminação, passa a ser poluição nociva.

Outro problema diferente é o de poluentes persistentes, chamados de não-biodegradáveis. Se não diluídos a um grau considerado hoje como inofensivo, podem permanecer no meio ambiente e podem ser concentrados por outros seres vivos. Por isso, é válido o temor de que substâncias produzidas pelo homem venham causar a poluição global permanente.

O CDC (Centro de Controle e Prevenção de Doenças dos EUA) [5], divulgou um relatório sobre a exposição humana aos produtos químicos ambientais, alertando para a gravidade da situação atual.

Conforme o relatório C.D.C. (*op. cit.*), os riscos à saúde conhecidos de alguns dos produtos tóxicos podem ser descritos da seguinte forma:

1. Chumbo: é encontrado em tintas, tubulações antigas, produtos eletrônicos, cerâmica esmaltada e solos contaminados. É uma toxina que afeta a reprodução e o desenvolvimento, reduzindo a fertilidade e provocando o aborto.

2. Mercúrio: na forma inorgânica é utilizado em equipamentos elétricos e alguns fungicidas. A incineração de lixo hospitalar, baterias, lâmpadas fluorescentes, dentre outros, libera mercúrio (Hg). O metil-mercúrio (Hg^+) é a forma mais perigosa, pois é absorvido pelo corpo e penetra facilmente no cérebro e na placenta. A maior parte dos casos da exposição ao metil-mercúrio advém da ingestão de peixes, tais como o atum, espada, tubarão e lúcio, pois se encontram no topo da cadeia alimentícia. Assim como o chumbo, o mercúrio é uma toxina que afeta a reprodução e o sistema nervoso, causando assim o chamado "mal dos gatos".

3. Pesticidas com organofosfatos: compõem cerca da metade de todos os inseticidas utilizados. São pulverizados em lavouras como milho, algodão, frutas, verduras e legumes, sendo também utilizados em produtos domésticos de controle de pragas e aspersores de jardins.

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

4. Ftalatos: são aditivos dos plásticos, especialmente o PVC, que lhes conferem uma variedade de características que vão desde a flexibilidade até a retardação de chamas. Por não estarem ligados ao plástico, os ftalatos podem vazar para o meio ambiente. Em animais silvestres e de laboratórios, foram relacionados a efeitos na saúde reprodutiva, inclusive com redução da fertilidade, aborto, defeitos congênitos, contagem anormal de esperma e dano testicular, como também câncer de fígado e dos rins.

5. Cotinina: fornece uma indicação de exposição à nicotina. Cerca de dois terços da fumaça dos cigarros não é tragada pelos fumantes, mas é liberada no ambiente circunvizinho. Consequentemente, os não-fumantes (próximos) inalam os mesmos produtos químicos contidos nesta fumaça, com efeitos semelhantes àqueles nos fumantes, embora com um grau menor.

Quando a industrialização torna-se um aspecto dominante de modo crescente, a poluição aérea torna-se bem mais ampla. Em particular, o nascimento do carvão gerou uma severa poluição do ar por dióxido de enxofre e fuligem, causando um dano à saúde humana e aos ecossistemas. Poluentes secundários também são formados da emissão de dióxido de enxofre e óxido nítrico, são os ions sulfato e nitrato respectivamente que, nesta forma, podem se depositar em ecossistemas terrestre e aquático como deposição ácida.

Em muitas situações, tem acontecido a coexistência de regiões de exploração agroindustrial próximas a áreas de proteção e/ou preservação ambiental. No caso da ocorrência de impacto nestas regiões, barreiras isoladoras podem ser estabelecidas em terra, muitas vezes de discutível eficiência. No caso de meios aquáticos e aéreos, as barreiras embora existentes e, em alguns casos funcionais, se tornam de uso muito mais difícil.

Assim, poluentes transportados advectivamente, como por exemplo por ventos ou correntezas, viajam (até planetariamente) invadindo outras regiões. É o caso, por exemplo, da deriva de agroquímicos para lagoas próximas às regiões de plantio, ou das cinzas provenientes de queimadas, afetando lagoas e baías como ocorre, por exemplo, na parte norte do Pantanal mato-grossense. Neste caso, inclui-se também a pulverização por avião em áreas de plantio vizinhas a áreas alagáveis.

Pesticidas são substâncias usadas para a proteção humana contra insetos, inclusive os transmissores de doenças e, na agricultura contra espécies competidoras e ervas daninhas, contra roedores etc.

O uso de pesticidas não é uma prática moderna. Um dos primeiros registros de seu uso data de época por volta de 1550 AC quando egípcios usaram produtos químicos em seus lares para o combate às pulgas. Por volta de 900 AC foi usado arsênio como inseticida na China e, em 1870, muitos produtos químicos inorgânicos foram usados como pesticidas. Atualmente há um intenso uso de pesticidas, principalmente na agricultura e em muitos centros urbanos.

Os pesticidas abrangem um diverso grupo de substâncias químicas que podem ser classificados de acordo a: (1) o organismo a combater, (2) o setor a ser usado, tal como agricultura, uso doméstico ou em área florestal, e (3) suas similaridades quanto à estrutura química. Podem ser classificados também baseados na peste a ser combatida conforme a descrição abaixo:

i) Fungicida

ii) Herbicida

iii) Inseticida

iv) Formicidas

v) Raticidas

Basicamente, o processo de transporte e transformação dos poluentes no meio ambiente está relacionado com:

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

Em geral, os trabalhos referentes à poluição do meio ambiente são feitos em compartimentos isolados, isto é, somente no ar ou somente na água ou somente no sedimento, dependendo dos principais interesses envolvidos.

Em síntese, a atividade humana juntamente com o seu crescimento e seu desenvolvimento, sem a devida ou adequada preocupação com a preservação do meio ambiente, culminaram com práticas que se relacionam, ou melhor, que não acontecem sem que haja um ingresso nocivo de poluentes em nosso meio.

Com isso, é crescente a necessidade de estudos para o monitoramento, a simulação e o controle da poluição em nosso meio, poluição esta que se dá basicamente pelas atividades industrial e agrícola, podendo ser emissão de gases, dejetos industriais, pesticidas, adubos e até mesmo cinzas. Abriu-se então um promissor campo de trabalho para pesquisadores das mais diversas áreas e, pelo fato de que as questões ambientais estão fortemente interrelacionadas, elas não devem ser tratadas de modo isolado na busca de soluções viáveis.

Neste sentido, observamos alguns marcos importantes referente à proteção ambiental no cenário mundial, dentre os quais destacam-se a Conferência Mundial no Rio de Janeiro (Rio 92) e o Protocolo de Quioto.

Nas duas últimas décadas é que os órgãos governamentais deram uma maior importância para tais estudos, diferentemente da comunidade científica, onde esta preocupação já vinha ocorrendo desde a década de 70 com a realização do *International Environmental Protection Symposium* (Tchecoslováquia, 1970), em que se reuniram muitos pesquisadores de renome para debates, resolução e estudos de estratégias.

A motivação desse trabalho é a de estudar a poluição em corpos aquáticos. No grupo de Ecologia Matemática - UNICAMP, alguns esforços têm sido efetivamente feitos no sentido de se estudarem situações desse tipo mas, na grande maioria dos casos, os meios estudados são de proporções muito amplas, nas quais a profundidade é praticamente inexistente devido às enormes dimensões horizontais. No entanto, outras situações de poluição da água podem (e de fato o fazem!) afetar de modo significativo populações locais em termos de corpos aquáticos de dimensões horizontais menores - em uma combinação de medidas que impedem, na realidade, que se desprezem profundidades.

Um caso que ilustra esta preocupação é o da comunidade de Londrina que, como a Universidade Estadual de Londrina - UEL, vive e trabalha nas circunvizinhanças de lagos artificiais formados pelo represamento do ribeirão Cambezinho, os Igapós. O Lago foi projetado em 1957, na gestão de Antonio F. Sobrinho e inaugurado no dia 10 de dezembro de 1959, dia do Jubileu de Prata da cidade, através do represamento do Ribeirão Cambezinho inundando assim, o fundo de vale em que repousava. Na figura 1, podemos ver dois desse lagos.

Figura 1: Igapó 1 e Igapó 2

Bem próximo da região central de Londrina, o lago serve como uma forma de solução para o problema da drenagem, dificultada por uma barragem natural de pedra. Inicialmente, pensou-se em dinamitar a barragem, mas prevaleceu a idéia de formar um lago. O nome Igapó vem da língua tupi, que significa transvazamento de rios. No caso dos Igapós, e considerando materiais poluentes que não são de superfície, mas que, além de marcarem a coluna d'água, interagem com margens e sedimento.

As dimensões dos Igapós com 200 m de largura, 2000 m de comprimento e 10 m de profundidade aproximadamente, a nosso ver, justificam, então, um processo de evolutivo simulação em três dimensões espaciais, e o algoritmo definido no presente trabalho pode ser adaptado de modo a incluir parâmetros e variáveis espaciais de cada um desses lagos artificiais da vida de Londrina, PR, de maneira a servirem para melhores compreensões de problemas de impacto, além da preparação de ações de recuperação e de sustentabilidade.

Outro caso que podemos citar é o da represa do rio Manso - usina da chapada dos Guimarães, onde os poluentes que não são só de superfície marcam a coluna d'água e, devido a grande profundidade é necessário estudar qual o impacto desses poluentes no decorrer da profundidade. Em geral, sempre que a profundidade desempenha um papel nos processos evolutivos de impacto, vale a pena o esforço adicional de trabalhar em três dimensões.

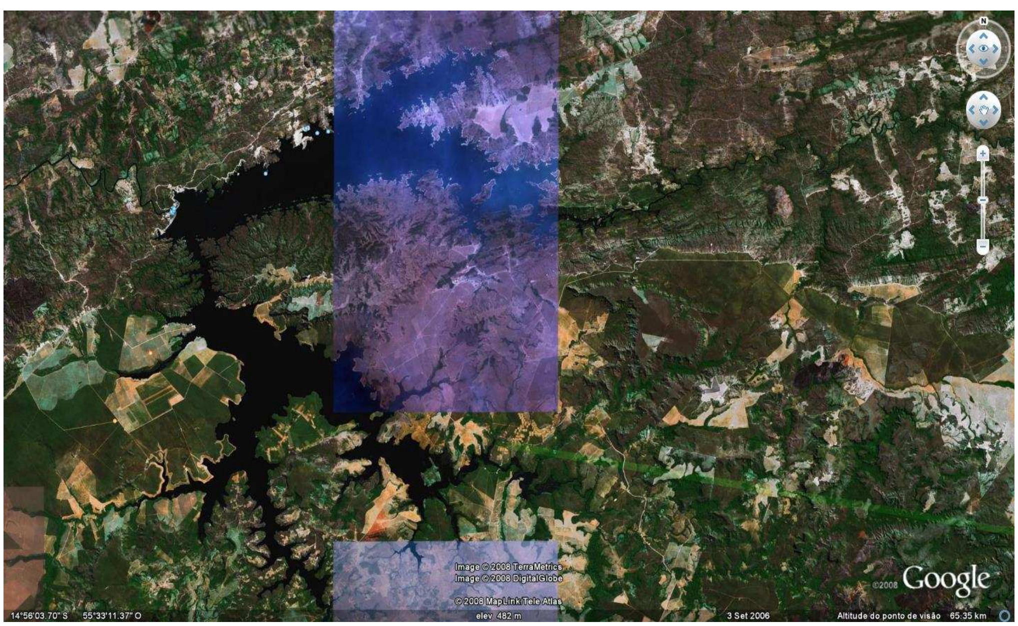

Figura 2: Represa da Usina na Chapada dos Guimarães

Esta tese visa, então, produzir um instrumental matemático que permita a simulação de situações de risco e a aplicação de estratégias de combate e contingência num domínio tridimensional, ações que devem ser testadas teoricamente antes de se passar à experimentação in loco. Desta forma, trabalharemos num domínio específico que será definido mais adiante.

A modelagem matemática tem-se mostrado muito eficaz no estudo, na análise e na simulação de fenômenos de dispersão de poluentes, tanto em seu comportamento global como em estudos de certos comportamentos locais ou em ecossistemas em particular. O presente estudo se estende à criação de um instrumental de simulações para o estabelecimento de estratégias de contenções e avaliações.

À luz desse comentário é que propomos o presente estudo da dispersão de poluentes num sistema tridimensional ar-água, sistema que, no presente caso, será uma parte de um curso aquático, como um lago ou uma represa juntamente com o meio aéreo e sedimento ao seu redor.

A modelagem aqui proposta será feita usando as equações clássicas para os fenômenos de dispersão e transporte de poluentes juntamente com algumas condições de contorno adequadas. O aspecto inovador neste quadro é o de integrar simultaneamente no modelo dois meios distintos, uma dupla condição de Robin na interface entre esses domínios e trabalhando, ainda, em três dimensões. Nisto difere de Diniz [11] que, mesmo trabalhando com um sistema ar-água fê-lo em $\Omega \in \mathbb{R}^2$; enquanto que Saavedra-Vásquez [36], que trabalhou com $\Omega \in \mathbb{R}^3$, considerou apenas o meio aquático focando o descarte de água de produção em profundidade.

Em resumo, faremos a modelagem referente à concentração de poluente no meio em questão, usaremos o recurso da formulação variacional para obter aproximações da solução das equações envolvidas no modelo, aproximações estas que serão obtidas utilizando uma discretização espacial com vistas ao uso do Método de Elementos Finitos, bem como uma discretização temporal conveniente, e verificaremos a existência de solução para o problema na sua forma fraca. Finalmente faremos simulações de alguns cenários característicos.

No capítulo 1 é descrito o domínio com o qual trabalharemos, juntamente com alguns esforços no sentido de modelar a dispersão de poluentes em certos domínios específicos.

No capítulo 2, são apresentadas as equações que modelam nosso problema também em seu tratamento conjunto, juntamente com as condições de contorno formuladas adequadamente.

No capítulo 3, é apresentada a formulação variacional, bem como resultados originais de existência e unicidade de solução.

No capítulo 4, são apresentadas as discretizações no espaço (Galerkin) e tempo (Crank-Nicolson), bem como suas respectivas estimativas de erro. Apresenta-se também um breve comentário sobre a implementação.

Finalmente, no capítulo 5 são apresentados os resultados (simulações de cenários), conclusões e as considerações finais.

Nos apêndices A e B, encontramos o código principal e o cálculo dos produtos internos utilizados na implementação.

Capítulo 1

O Problema e alguns Modelos

Neste capítulo descreveremos o problema de impacto que será o foco deste trabalho a partir de agora e faremos também a apresentação de alguns esforços para a modelagem do fenômeno da dispersão de poluente em certos meios aquáticos como lagos ou represas. Apresentaremos modelos clássicos que usam uma única Equação Diferencial Ordinária, passando pelos que fazem o uso de sistemas de Equações Diferencias Ordinárias e modelos compartimentais e, finalmente, abordando os modelos com a equação de difusão-reação ou difusão-advecção.

1.1 O Problema

Primeiramente vamos descrever o domínio $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \subset \mathbb{R}^3$ modelando três meios distintos. Ele será uma descrição de um lago genérico juntamente com uma parte da margem; teremos na parte superior o meio aéreo e, na parte inferior, uma parte da terra e outra da água como mostra a Figura 1.1:

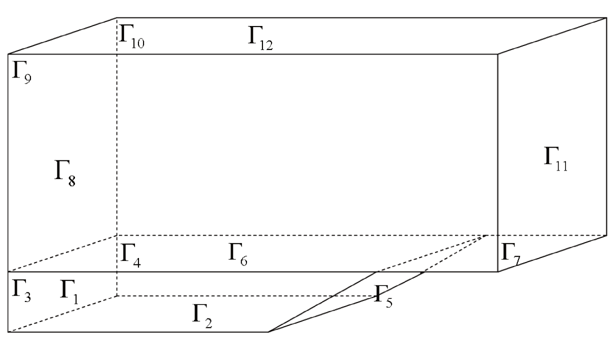

Figura 1.1: Domínio Ω do problema

Vamos separar o domínio múltiplo em duas partes e estudar o problema nos meios aéreo e aquático separadamente, conforme as Figuras 1.2 e 1.3 respectivamente:

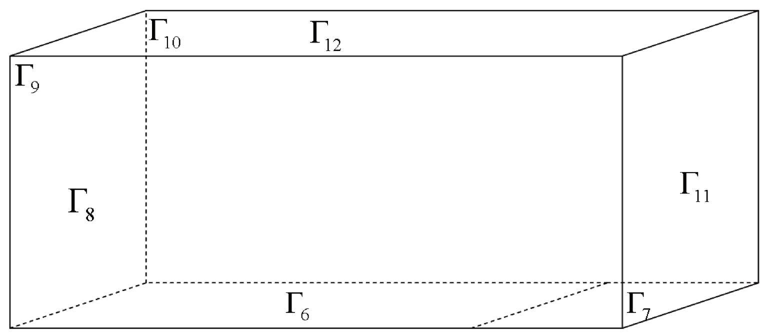

Figura 1.2: Meio Aéreo Ω_1

Na Figura 1.2, Γ_6 é identificada com a superfície do lago e Γ_7 uma parte da margem; ambas juntas formam a fronteira inferior do meio aéreo Ω_1. As outras fronteiras são: Γ_8 a fronteira lateral esquerda, Γ_9 a fronteira frontal, Γ_{10} a fronteira posterior, Γ_{11} a fronteira lateral direita e Γ_{12} a fronteira superior.

Já na Figura 1.3, que representa o meio aquático, as fronteiras são: Γ_1 a fronteira lateral esquerda, Γ_2 a fronteira inferior - o fundo, Γ_3 a fronteira frontal, Γ_4 a fronteira posterior, Γ_5 fronteira lateral direita - a margem inclinada e Γ_6 a fronteira superior - superfície do lago.

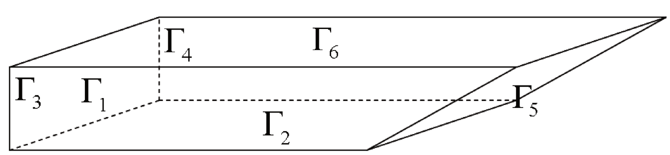

Figura 1.3: Meio Aquático Ω_w e Superfície

A entrada de poluente no meio aéreo será ao longo da fronteira $\Gamma_{11} \subset \mathbb{R}^2$ (por deriva), que é, na figura 1.2, a face à direita (além de fontes pontuais no ar). Já a entrada de poluente na água será pela superfície do lago (pelo ingresso de poluente que vem do ar e, pela superfície penetra no meio aquático), que é a fronteira $\Gamma_6 \subset \mathbb{R}^2$ nas figuras 1.2 ou 1.3; também por escorrimento na margem (em um ou mais pontos). Este escorrimento pela margem é chamando também de *run-off* na literatura específica.

1.2 Um Modelo Simples para a Poluição

Vamos considerar uma represa onde o fluxo de água é constante, isto é, as quantidades de água que entram e que saem são as mesmas. Um primeiro modelo para a presença de poluente nesta represa é obtido usando Equações de Diferenças Finitas:

$C_{n+1} = C_n - \frac{F}{V}C_n - \sigma C_n + q$, com C_0 suposto conhecido

onde:

C_n é a quantidade de poluente no período n, cuja homogeneização no meio é suposta imediata

$F = \left[\frac{\text{unidade de volume}}{\text{unidade de tempo}}\right]$ é o fluxo,

V é o volume da represa, considerado constante

σ é a taxa de degradação global do poluente em estudo e

q é o aporte de poluente por unidade de tempo.

Este modelo nos fornecerá, evidentemente, uma aproximação da informação para cada unidade de tempo escolhida, como, por exemplo, dia ou semana. Por mais simples que seja este modelo, ele permite um estudo da presença de poluentes em corpos aquáticos de baixa circulação. Nele, se tomarmos uma quantidade inicial C_o e não considerarmos fontes, teremos um decaimento cuja expressão é uma progressão geométrica de razão menor que 1. Tomando como base o modelo citado acima e passando ao limite com $\Delta t \to 0$, podemos passar para o modelo contínuo descrito por uma equação diferencial ordinária:

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\frac{F}{V}C(t) - \sigma C(t) + q, \text{ com } C(0) = C_0.$$

O coeficiente $\frac{F}{V}$ pressupõe também uma homogeneização instantânea, isto é, assim que o poluente é introduzido no meio em estudo, ele se espalha automaticamente por toda a represa, o que, evidentemente, não ocorre. Em [4], por exemplo podemos observar que há regiões com e sem a presença do poluente, situação esta que foi comprovada na prática.

Uma saída para este problema é dividir a represa em n partes chamadas compartimentos e cada compartimento será considerado com o que contém de poluente, com o que ele recebe dos compartimentos vizinhos e com o que é perdido para esses outros compartimentos contíguos ou por decaimento. Podemos dizer então que consideramos o modelo em compartimento juntamente com uma regra de passagem-recepção de um compartimento a outro. Deste modo, obtemos um sistema de n equações diferenciais ordinárias ou, analogamente de n equações de diferenças. Uma crítica que fazemos a esta modelagem é que estes modelos não tratam de fenômenos de difusão e transporte, a não ser pela passagem de um compartimento a outro, simulando assim, numa técnica que se assemelha àquela de autômatos celulares.

No caso de rios de pequeno e médio portes é usual considerar apenas um compartimento em toda a largura do rio, de modo que um compartimento interage só com o seu anterior e seu posterior e um sistema linear de Equações de Diferenças ou de Equações Diferenciais Ordinárias pode ser usado para aproximar o comportamento evolutivo de manchas de poluentes que "descem"o rio, advectivamente transportados.

Apesar da simplicidade deste modelo, ele tem sido usado por diversos usuários e em diversos locais diferentes, como por exemplo pela principal agência de proteção ambiental nos Estados Unidos (Environmental Protection Agency) e também em institutos europeus de pesquisa (através, por exemplo, de um *software* **HYDRO/Ecolex**).

Para rios de porte maior pode ser feita uma subdivisão dos compartimentos tanto no sentido do comprimento quanto no da largura, isto é, um compartimento agora pode interagir com mais de dois compartimentos, passando a ter compartimentos em toda a sua volta. Um trabalho realizado por Georges [27] forneceu, ao longo de diversos passos no tempo, os exemplos/modelos apresentados Figuras 1.4 e 1.5 simulam o movimento de uma mancha de poluente transportada num rio.

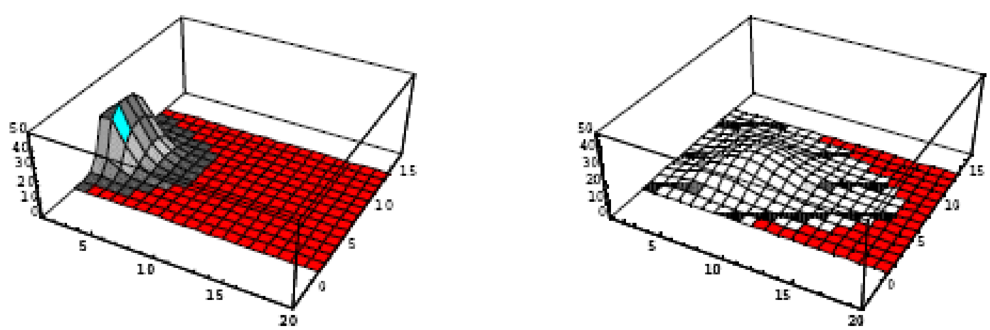

Figura 1.4: Mancha de Poluente Transportada num Rio - primeiro e segundo momentos

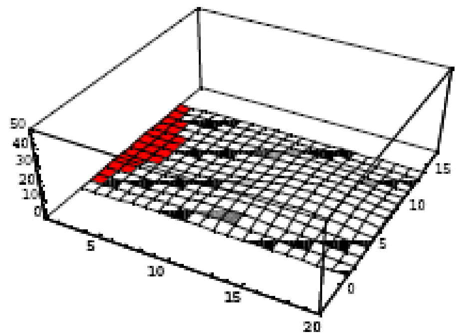

Figura 1.5: Mancha de Poluente Transportada num Rio - terceiro momento

Neste tipo de abordagem ainda se considera que a homogeneização ocorre instantaneamente em cada compartimento, ou seja, ainda temos esta limitação relativa.

Não é só esta limitação que este modelo possui. Dentre as limitações deste modelo podemos destacar que ele não considera continuamente as correntes, ventos, o movimento do poluente por difusão e as interações com outros meios como, por exemplo, o sedimento, as margens e o ar.

Uma outra crítica relevante é que conforme aumenta a mobilidade do poluente, maior deveria ser o número de compartimentos necessários para se "ver"o comportamento evolutivo do poluente, e isso sem que sejam modelados outros fenômenos relevantes envolvidos.

1.3 Conservação de Massa e a Equação de Difusão

Na seção anterior, os modelos apresentados consideravam apenas a variável temporal. O próximo passo então, é considerar também em nossa modelagem as variáveis espaciais.

A equação básica com a qual trabalha grande parte dos pesquisadores de Ecologia Matemática no campo que se convencionou chamar de **Ecotoxicologia** é a Equação de Conservação de Massa. Uma das formas dessa Lei é:

> *"Em uma dada região, a taxa de variação da concentração da massa por unidade de tempo é igual à taxa de variação da massa que entra menos a que sai dessa região, a menos de sorvedouros ou fontes que possam aí existir."*

Expressando em termos matemáticos e chamando a concentração daquilo que se pretende estudar de $c = c(t, X)$, onde t é o tempo e $X \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 1$, 2 ou 3, temos:

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t, X) = -\mathrm{div}(\vec{J}\,(t, X) + \vec{V}\,.c) + f(t, X) \text{ no domínio estudado,}$$

onde o fluxo $\vec{J}$ é dado por $\vec{J} = -\alpha.\nabla c(t, X)$ sendo α o coeficiente de difusibilidade.

A dedução desta fórmula pode ser achada em diversos trabalhos: duas das provas clássicas encontram-se em [9] e em [13].

Aqui, temos que o fluxo é considerado não somente como aquela parte do poluente que é transportado por um campode velocidades $\vec{V}\,(t, X)$, mas também o fluxo devido à difusão de fato que ocorre no sentido contrário ao do gradiente da concentração, seja essa difusão de partículas, seja ela turbulenta. Esta última se refere a fenômenos em escala significativamente maior: é o que denomina Marchuk de difusão *efetiva.* Além disso, temos uma fonte (ou um sorvedouro que podem ser múltiplos) dada por $f(t, X)$.

Portanto, a equação a derivadas parciais, com a qual iremos modelar fenômenos de difusão-advecção será predominantemente esta, acrescida de um termo linear de decaimento do poluente no meio em estudo:

$$c = c(X, t),$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathrm{div}(\alpha \nabla c - \vec{V}\,.c) - \sigma c + f(t, X), \text{ para } X \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \text{ e } t \in (0, T].$$

com adequadas condições inicial e de contorno onde: α representa a difusibilidade no meio, $\vec{V}$ é o campo de velocidades, σ o decaimento e f é o termo fonte.

É importante salientar que os parâmetros podem variar com o tempo, o espaço e até mesmo com a concentração do poluente.

1.3.1 O Modelo 1D

Um dos exemplos em que a simetria por translação permite uma abordagem em dimensão 1 é aquele da presença de cinzas provenientes de queimadas, um caso de poluição de corpos aquáticos em diversos lugares no mundo. Em especial, a queimada da cana de açúcar, tão comum em nosso país, que é efetuada para aumentar o rendimento na época da colheita, provoca uma "chuva"de cinzas que acidifica a coluna de água, afetando a cadeia trófica de modo significativo.

No caso de regiões de circulação muito reduzida, temos o seguinte modelo:

$c = c(t, X)$,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\alpha \frac{\partial c}{\partial x} - V.c) - \sigma c + f(t, x), \text{ para } x \in [0, F] = \Omega \subset \mathbb{R} \text{ e } t \in (0, T],$$

desde que simetrias geométricas da região sob análise o permitam, e com α a difusão vertical efetiva, V o campo de velocidades verticais, σ o decaimento e f a fonte.

Surge então a necessidade de tratarmos das condições de contorno. São alguns os casos possíveis,

- $c(F) = 0 \rightarrow$ uma coluna suficientemente alta de modo que o poluente não chega até o fundo ($x = F$), e
- $\frac{\partial c}{\partial \eta}|_{x=0} = 0 \rightarrow$ o poluente não sai da coluna d'água por evaporação na superfície, ou
- $\frac{\partial c}{\partial \eta}|_{x=0} = k.c(0) \rightarrow$ uma primeira abordagem caso o poluente sofra evaporação na superfície, isto é, a perda de matéria através da superfície é considerada como proporcional à quantidade de poluente aí existente.

Algumas das maiores dificuldades no tratamento analítico deste problema residem nos tipos possíveis de fontes poluentes $f(x)$ ou $f(x, t)$. Evidentemente, no caso de fontes regulares bem comportadas, as soluções analíticas podem ser facilmante obtidas com as técnicas de Equações Diferenciais Ordinárias.

Uma dessas situações de dificuldades é aquela correspondente à modelagem de uma chuva leve de cinzas, em que as cinzas são depositadas com uma velocidade baixíssima no sentido vertical, resultando em uma fonte pontual que existe somente para $x = 0$. Isto acontece quando se trata de fontes que se comportam como funções de *Dirac* em determinados pontos. Este tipo de fonte impede o uso de técnicas analíticas clássicas aplicadas imediatamente, exigindo, algumas vezes, uma regularização mínima.

1.3.2 O Modelo 2D ou Modelos de Superfície

Sem a presença de marés, correntes aquáticas e correntes induzidas no meio aquático pelo vento, situações em $\mathbb{R}^3$ podem ser abordadas inicialmente como descrito em 1.3.1.

No entanto, na presença destas componentes horizontais de transporte, é necessário ampliar a dimensão do espaço, originando assim os modelos cujo domínio Ω está em $\mathbb{R}^2$, cuja equação geral é a mesma:

$c = c(X,t)$,

$\dfrac{\partial c}{\partial t} = \mathrm{div}(\alpha \nabla c - \vec{V}.c) - \sigma c + f(t,x,y)$, para $(x,y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in (0,T]$, sendo os mesmos os parâmetros considerados.

Um dos primeiros estudos para este tipo de aproximação bidimensional é aquele em que se estuda a localização de fontes poluidoras do ar. Embora este problema seja tridimensional, quando se consideram domínios amplos, de dezenas de quilômetros de largura e comprimento e no máximo algumas centenas de metros para a altura, usa-se o "mapa", ou seja, este domínio se reduz às dimensões x e y, como na formulação acima. É um tipo de situação em que se considera a direção e a magnitude predominante do vento, considerando-o como um vetor constante, e escolhendo uma das direções como a mesma desse vetor vento, reduzindo-o a um vetor com apenas uma das componentes. O domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ para esta abordagem está representado na Figura 1.6:

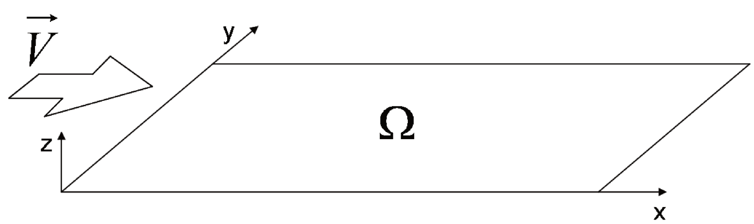

Figura 1.6: Simplificação no plano xy

Assim, obtemos uma formulação do tipo:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \alpha \Delta c - V.\frac{\partial c}{\partial x} - \sigma c + f(t,x,y), \text{ para } (x,y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0,T].$$

Neste exemplo, outras hipóteses simplificadoras foram adotadas além daquela que reduz o domínio a um retângulo:

- a difusibilidade é constante em todas a direções (algo que não seria possível se a variável

z fosse considerada);

- O decaimento foi considerado como diretamente proporcional à própria concentração do poluente;
- o fluxo de ar está sendo considerado como laminar, algo suficientemente longe da realidade.

Apesar desta última observação, este modelo fornece resultados indicando comportamentos qualitativos com os quais certas estratégias podem ser tratadas. Em Meyer e Palomino-Castro [29], um caso genérico foi estudado motivado por uma ação privada em conjunto com autoridades locais, em que o governo do estado de São Paulo propôs a construção de uma nova usina termo-elétrica no município de Paulínia - SP, perto da Universidade estadual de Campinas.

Na simplificação bidimensional feita anteriormente desconsideramos a altura representada pela variável z. Também podemos considerar o que acontece num domínio contido no plano vertical formados pelas variáveis x e z conforme mostrado na Figura 1.7, que representa a abordagem que supõe uma simetria por translação horizontal.

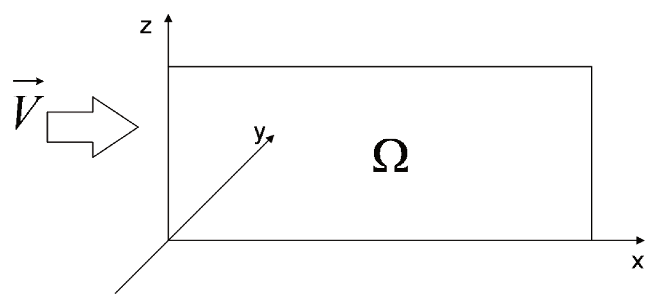

Figura 1.7: Simplificação no plano xz

Neste caso, temos a influência local do vento e, respeitadas as hipóteses que simplificam o problema, temos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathrm{div}(\alpha(z)\nabla c - \vec{V}(z).c) - \sigma c + f(t,x,z), \text{ para } (x,z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0,T].$$

Assumindo que $\vec{V} = (V_1, V_2)$ com $V_2 = 0$, $V_1 = W.z^2$ onde W é uma constante, a equação acima se torna:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \mathrm{div}(\alpha(z)\nabla c) + W.z^2\frac{\partial c}{\partial x} + \sigma c = f(t,x,z), \text{ para } (x,z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ e } t \in (0,T].$$

Uma situação semelhante a esta é encontrada em Diniz e Meyer [26], porém com dois meios envolvidos, água e ar. Na figura 1.8 podemos ter uma noção do domínio Ω estudado em Diniz-Meyer (*op. cit.*), é uma porção de água juntamente com o meio aéreo acima:

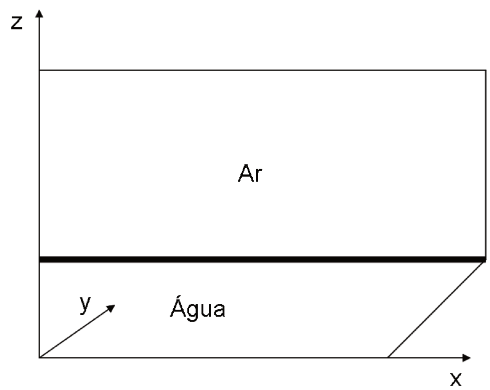

Figura 1.8: Simplificação no plano xz, Ar-Água

O traço mais escuro indica a superfície da água ou a fronteira entre os dois meios. Nos pontos desta fronteira temos que fazer um tratamento especial devido à troca de poluente entre um meio e outro. Uma limitação deste modelo é que tanto o fluxo aquático quanto o vento atuam numa única direção.

Um outro caso que se pode tratar do ponto de vista bidimensional, e usando o mesmo modelo genérico de difusão-advecção, é o da presença de poluentes em rios, como encontrado em Meyer e Mistro [28]. Seguindo a mesma linha de raciocínio e fazendo as adaptações necessárias, podemos trabalhar sucessivamente com o "mapa"do rio reduzindo-o a duas dimensões ou com cortes verticais para estudar o que acontece em um plano vertical ao longo do meio do rio que contenha simultaneamente a velocidade predominante da corrente e o campo de velocidades devido ao peso do poluente, levando-o para o sedimento.

Um outro caso, que foi objeto de vários estudos no grupo de biomatemática da Unicamp, é o da poluição de mares costeiros, motivado por acidentes de derrame de óleo no canal de São Sebastião (figura 1.9), um canal no estado de São Paulo compreendido entre a cidade de São Sebastião (no continente) e a ilha de São Sebastião, também chamada Ilhabela. Neste canal há um terminal da Petrobrás pelo qual passa algo em torno de 55% de todo o óleo transportado no Brasil [25]. Essa intensa utilização das dependências desse terminal vem acompanhado de um histórico impressionante de mais de 300 acidentes registrados nos últimos 30 anos ([25]).

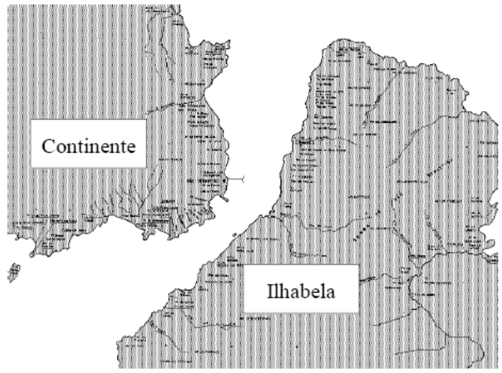

Figura 1.9: Canal de São Sebastião [4]

Segundo Fay [15], uma mancha de petróleo assume três fases no tempo:

- Fase Inercial-Gravitacional - fase que dura poucas horas e geralmente não é vista no início do derrame,
- Fase Difusiva-Advectiva - vem em seguida e dura até cerca de duas semanas e, no caso de regiões costeiras, é aquela que mais interessa para a modelagem discutida aqui e, finalmente,
- Fase de Transporte Advectivo e Tensão Superficial - ocorre posteriormente e é de interesse para derrames em alto mar e de longa duração.

Neste cenário, colhida informações no local tais como, tipo de óleo, localização inicial da mancha, ventos e correntes, é feito também o uso desta equação de Difusão-Advecção e, como nessa fase temos manchas variando de alguns metros quadrados a centenas de quilômetros quadrados e uma espessura de milímetros, podemos adotar o modelo bidimensional no espaço como uma primeira aproximação:

$\dfrac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(\alpha \nabla c - \vec{V}.c) - \sigma c + f(t,x,y)$, para $(x,y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in (0,T]$, mais as condições de contorno e inicial adequadas.

Finalmente, vamos considerar o caso de um domínio tridimensional, como visto na Figura 1.10, e adotar uma estratégia para diminuir a dimensão semelhante àquela no caso de rios de grande porte.

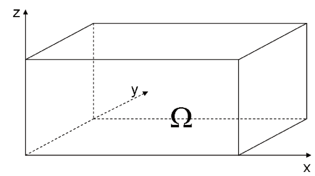

Figura 1.10: Um Tipo de Domínio no Espaço

A estratégia é a de dividir o domínio (figura 1.10), no sentido da altura z, em compartimentos bidimensionais e, em cada compartimento considerarmos o nosso modelo com as variáveis x e y juntamente com uma regra de passagem do poluente entre um compartimento e outro. A figura 1.11 ilustra essa situação:

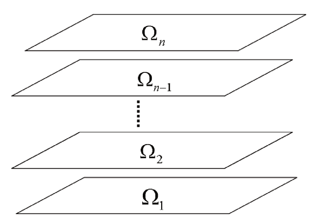

Figura 1.11: Modelo Compartimental 2D

Capítulo 2

Modelagem do Problema

Conforme visto no capítulo anterior, nosso estudo será feito adotando não apenas um domínio tridimensional, mas num domínio que contemple um meio duplo (sistema ar-água) com interação com o solo. Neste trabalho nossa intenção foi a de continuar a trabalhar com as abordagens de Diniz e Saavedra-Vásquez numa tentativa de melhorar a aproximação da realidade. Deste modo, não consideramos simplificações que reduzissem a dimensão, isto é, trabalharemos com o modelo em $\mathbb{R}^3$.

Em nosso modelo, serão considerados classicamente fenômenos de difusão efetiva (ou dispersão), do transporte advectivo, fenômenos de decaimento, as possíveis fontes e penetração no meio aquático. Assim, chamando de $C(t,x,y,z)$ a concentração de poluente no meio em estudo no ponto (x,y,z) e no instante t, descrevemos o modelo genericamente por (considerando o gradiente de C apenas nas três variáveis espaciais):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \{difusão\} - \{transporte\} - \{decaimento\} + \{fonte\},$$

onde a modelagem clássica dos fenômenos envolvidos é dada por:

$$\begin{aligned}
\{\text{difusão}\} &= div(\alpha^{(c)}\nabla C) \quad (\textit{cf.}\ \text{Okubo})[34] \\
\{\text{transporte}\} &= div(\overrightarrow{V}C) \quad (\textit{cf.}\ \text{Edelstein-Keshet})[13] \\
\{\text{decaimento}\} &= \sigma_c C \quad (\textit{cf.}\ \text{Marchuk})[22]
\end{aligned}$$

Assim, a equação que modela o processo de difusão efetiva de um determinado poluente numa região do espaço $\mathbb{R}^3$ é:

$C = C(t, x, y, z)$

$$\frac{\partial C}{\partial t} - div(\alpha^{(c)} \nabla C) + div(\overrightarrow{V} C) + \sigma_c C = f,\ (x, y, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^3, t \in (0, T] \subset \mathbb{R},$$

onde

- $\alpha^{(c)} = \alpha^{(c)}(x, y, z, t)$ aproxima a difusibilidade efetiva no meio,
- $\overrightarrow{V} = (v_1(x, y, z), v_2(x, y, z), v_3(x, y, z))$ é o campo de velocidades no meio, com $div(\overrightarrow{V})$ suposto nulo,
- σ_c aproxima o decaimento total no meio e
- f é o termo fonte, (além do ingresso do poluente por deriva, incorporado a este modelo na condição de contorno).

A seguir, apresentaremos os modelos nos meios aéreo e aquático vistos separadamente.

2.1 Meio Aéreo

Iniciaremos esta seção relembrando o domínio correspondente ao meio aéreo, apresentado no Capítulo 1.

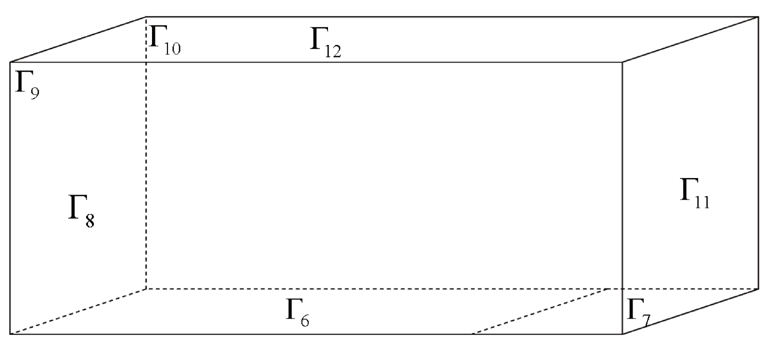

Figura 2.1: Meio Aéreo Ω_1

Para simplificar a notação trocamos $C(t, x, y, z)$ por $u^{(1)}(t, x, y, z)$. Assim, o problema no meio aéreo fica:

$u^{(1)} = u^{(1)}(t, x, y, z)$

$$\frac{\partial u^{(1)}}{\partial t} - div(\alpha^{(1)}\nabla u^{(1)} - \overrightarrow{V}u^{(1)}) + \sigma_1 u^{(1)} = f_1,\ t \in (0,T] \text{ e } (x,y,z) \in \Omega_1$$

onde

$\overrightarrow{V} = (v_1, v_2, v_3)$ com $div(\overrightarrow{V}) = 0$, (aproximando um campo "bem comportado"no sentido dos fluxos aéreos e
$u^{(1)}(0,x,y,z) = u_0^{(1)}(x,y,z) \in \Omega_1$ é a condição inicial.

As condições de contorno adotadas nessa modelagem são:

- **Ingresso do Poluente - Von Newmann**: pode dar-se num único ponto, como por exemplo uma chaminé, por parte ou partes da fronteira numa quantidade que depende de situações externas ou ao longo de toda uma parte da fronteira, que é o que ocorre no fenômeno da deriva.
  $-\alpha^{(1)}\frac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_{11}} = g(x,y,z)$, onde $g(x,y,z)$ é uma função dada.
- **Perda de Poluente para o Solo - Robin**: muitas vezes ocorre uma perda de poluente para o solo, seja por infiltração ou por percolação. Modelaremos esta perda por uma aproximação linear, ou seja,
  $-\alpha^{(1)}\frac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_7} = k_s u^{(1)}$, sendo k_s o coeficiente da proporcionalidade dessa perda.
- **Perda de Poluente para a Superfície - Robin**: como estamos tratando de um porção aérea que inclui um corpo aquático, haverá aqui também um perda (ou uma infiltração) de poluente para a superfície do corpo aquático, que será modelado semelhantemente à perda para o solo:
  $-\alpha^{(1)}\frac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_6} = \beta_1 u^{(1)}$, sendo β_1 o coeficiente da proporcionalidade dessa perda.
- **Condição de Dirichlet homogênea**: a fronteira superior está suficientemente distante para que, aí, se possa supor que não haja a presença do poluente, isto é:
  $u^{(1)}\Big|_{\Gamma_{12}} = 0$
- **Condição de Von Neumann Homogênea**: pode ocorrer que não haja perda de poluente por parte da fronteira, indicando assim uma possível simetria ou, que uma fronteira

esteja suficientemente distante, de modo que o comportamento relativo ao espaço possa ser considerado assintóticamente estacionário. Em casos assim temos:

$$\left.\frac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_{8,9,10}} = 0.$$

2.2 Meio Aquático

Como feito na seção anterior, iniciaremos esta seção relembrando o domínio Ω_2, representado na Figura 2.2 para o estudo do meio aquático:

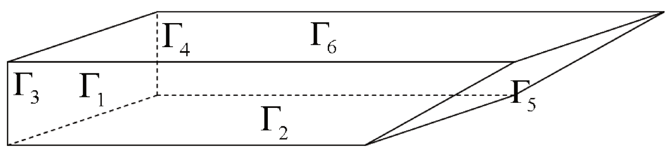

Figura 2.2: Meio Aquático Ω_w

De modo análogo e com as substituições adequadas no meio aquático Ω_1 e trocando $C(t,x,y,z)$ por $u^{(2)}(x,y,z,t)$, o problema passa a ser:

$$\frac{\partial u^{(2)}}{\partial t} - div(\alpha^{(2)}\nabla u^{(2)} - \overrightarrow{W} u^{(2)}) + \sigma_2 u^{(2)} = f_2,\ u^{(2)} = u^{(2)}(t,x,y,z),\ (x,y,z) \in \Omega_1,\ t \in (0,T]$$

com a condição inicial: $u^{(2)}(0,x,y,z) = u_0^{(2)}(x,y,z) \in \Omega_w$ mais as condições de contorno:

- **Perda de poluente para o fundo e a margem**:
  $\left.-\alpha^{(2)}\frac{\partial u^{(2)}}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_{2,5}} = k_f w$ - uma condição denominada de Robin, sendo k_f o coeficiente da proporcionalidade dessa perda.

- **Condição de Von Neumann Homogênea**:
  $\left.\frac{\partial u^{(2)}}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_{1,3,4}} = 0$, como no meio aéreo, também aqui supomos que um comportamento assintótico nos permite usar uma condição de *Von Neumann* homogênea.

- **Perda de poluente na interface com o ar**:

$-\alpha^{(2)}\dfrac{\partial u^{(2)}}{\partial \eta}\bigg|_{\Gamma_6} = \beta_2 u^{(2)}$, passagem de poluente para o ar - por evaporação, uma condição denominada de Robin.

2.3 Meios Aéreo e Aquático: Tratamento Conjunto

Muitas vezes há interesse imediato em tratar separadamente dos dois meios mencionados anteriormente. No entanto, também há casos - em quantidades significativas - em que o contaminante não só se faz presente em ambos os meios, mas também se movimenta de um para o outro.

Há, portanto, interesse em tratar desses problemas assim acoplados de um modo unificado, com vistas aos processos de discretização e aproximação numérica e as consequentes simulações computacionais.

Para isto, algumas modificações serão necessárias, não bastando "juntar"os meios aéreos e aquático: será necessário agregar instrumentos que permitam, de fato, acoplar os problemas e cuja resolução seja unificada. É o que será aqui feito no que se segue.

Desse ponto de vista e, chamando $\overrightarrow{V}^{(1)} = \overrightarrow{V}$, $\overrightarrow{V}^{(2)} = \overrightarrow{W}$, reescrevemos nosso modelo no meio aéreo e aquáticos como anteriormente:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u^{(1)}}{\partial t} - div(\alpha_1 \nabla u^{(1)} - \overrightarrow{V}^{(1)} u^{(1)}) + \sigma_1 u^{(1)} = f_1, \text{ e} \\ \\ \dfrac{\partial u^{(2)}}{\partial t} - div(\alpha_2 \nabla u^{(2)} - \overrightarrow{V}^{(2)} u^{(2)}) + \sigma_2 u^{(2)} = f_2, \end{cases} \tag{2.1}$$

onde

$$\begin{cases} u^{(1)}(x,y,z,0) = u_0^{(1)}(x,y,z), \ (x,y,z) \in \Omega_a, \text{ e} \\ u^{(2)}(x,y,z,0) = u_0^{(2)}(x,y,z), \ (x,y,z) \in \Omega_w, \end{cases}$$

com α_1 e α_2 constantes, $div(\overrightarrow{V}^{(1)}) = div(\overrightarrow{V}^{(2)}) = 0$ e com as condições de contorno como vistas nas seções 2.1 e 2.2:

i) $-\alpha_1 \dfrac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\bigg|_{\Gamma_{11}} = g \rightarrow$ entrada de poluente no meio aéreo por deriva,

ii) $u^{(1)}\Big|_{\Gamma_{12}} = 0 \rightarrow$ a fronteira superior é considerada de modo a já não haver aí poluição,

iii) $-\alpha_1 \dfrac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_7} = k_s u^{(1)} \rightarrow$ refere-se à perda de poluente para o solo às margens do lago,

iv) $-\alpha_2 \dfrac{\partial u^{(2)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_{2,5}} = k_f u^{(2)} \rightarrow$ descreve a perda de poluente para o fundo e a margem,

v) $\dfrac{\partial u^{(2)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_{1,3,4}} = 0 \rightarrow$ a Condição de Von Neumann Homogênea ilustra uma situação assintótica,

vi) $\dfrac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_{8,9,10}} = 0 \rightarrow$ a Condição de Von Neumann Homogênea, como acima, em $\Gamma_{1,3,4}$

vii) $-\alpha_1 \dfrac{\partial u^{(1)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_6 \text{ no ar}} = \beta_1(u^{(1)} - u^{(2)}) \rightarrow$ descreve segundo a lei de Fick, a passagem de poluente do ar para a água, e

viii) $-\alpha_2 \dfrac{\partial u^{(2)}}{\partial \eta}\Big|_{\Gamma_6 \text{ na água}} = \beta_2(u^{(2)} - u^{(1)}) \rightarrow$ descreve, ao contrário, a passagem de poluente da água para o ar.

As duas últimas condições dão, além do acoplamento das soluções, uma descrição daquilo que, de fato, pode acontecer: é a própria dinâmica da presença do poluente em ambos os meios que pode determinar sua circulação pela interface.

Este tratamento também se constitui num dos aspectos inovadores do presente trabalho - inclusive em função das dificuldades técnicas nos procedimentos de aproximação, de algoritmização e de simulações, devido ao fato de estarmos trabalhando em três dimensões.

Capítulo 3

Formulação Variacional e Existência e Unicidade de Solução

Iniciaremos este capítulo introduzindo uma notação que nos auxiliará na obtenção não só da formulação variacional, bem como na verificação da existência e unicidade para a solução procurada, permitindo uma posterior simplificação nesta formulação de modo a aliviar a notação usada. Primeiro, colocamos $X = (x, y, z) \in \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. Assim:

$$(u, v)_{L^2(\Omega_i)} = \int_{\Omega_i} u^{(i)}(X, t)v^{(i)}(X, t)dX,\ i = 1,\ 2.$$

$$\langle u, v\rangle_{L^2(\Gamma_i)} = \int_{\Gamma_i} u^{(1)}(X, t)v^{(1)}(X, t)d\Gamma,\ i = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6.$$

$$\langle u, v\rangle_{L^2(\Gamma_i)} = \int_{\Gamma_i} u^{(2)}(X, t)v^{(2)}(X, t)d\Gamma,\ i = 6,\ 7,\ \ldots,\ 12.$$

$$(u, v)_{L^2(\Omega)} = (u, v)_{L^2(\Omega_1)} + (u, v)_{L^2(\Omega_2)}.$$

$$\| u \|^2_{L^2(\Omega_i)} = (u, u)_{L^2(\Omega_i)},\ i = 1,\ 2.$$

$$\| u \|^2_{L^2(\Omega)} = \| u \|^2_{L^2(\Omega_1)} + \| u \|^2_{L^2(\Omega_2)}.$$

$$(u, v)_{H^1(\Omega_i)} = (u, v)_{L^2(\Omega_i)} + (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega_i)},\ i = 1,\ 2.$$

$$(u, v)_{H^1(\Omega)} = (u, v)_{H^1(\Omega_1)} + (u, v)_{H^1(\Omega_2)}.$$

$$\| u \|^2_{H^1(\Omega_i)} = \| u \|^2_{L^2(\Omega_i)} + \| \nabla u \|^2_{L^2(\Omega_i)},\ i = 1,\ 2.$$

$\| u \|^2_{H^1(\Omega)} = \| u \|^2_{H^1(\Omega_1)} + \| u \|^2_{H^1(\Omega_2)}.$

onde $(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega_i)} = \displaystyle\sum_{k=1}^{3} \int_{\Omega_i} \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial v}{\partial x_k} dX,\ i = 1,\ 2.$

e $(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega_1)} + (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega_2)}.$

3.1 Formulação Variacional

Devido à dificuldade de se obter a solução analítica (ou até mesmo a impossibilidade), faremos o uso da formulação variacional (ou fraca), para obtermos uma boa aproximação das soluções das equações do modelo em estudo. Neste sentido, vamos considerar as derivadas no sentido das distribuições [23] e, para distinguir melhor a evolução das quantidades de poluentes nos diferentes meios, consideramos as funções com as quais vamos trabalhar como tendo duas componentes: a primeira definida sobre Ω_1 e a segunda sobre Ω_2, isto é, estaremos lidando com funções

$$\begin{cases} u = (u^{(1)}(x,y,z,t), u^{(2)}(x,y,z,t)) \text{ tais que} \\ \\ u^{(i)}(x,y,z,t) \in L^2\left((0,T\,];H^1(\Omega_i)\right),\ i = 1,\ 2 \text{ e} \\ \\ \dfrac{\partial u^{(i)}}{\partial t} \in L^2\left((0,T\,];L^2(\Omega_i)\right),\ i = 1,\ 2 \text{ e com} \\ \\ u^{(1)}|_{\Gamma_{12}} = 0,\ \forall t \in\ (0,T\,]\,. \end{cases} \tag{3.1}$$

Com (3.1) identificamos as funções

$$u = (u^{(1)}(x,y,z,t), u^{(2)}(x,y,z,t)) \in U.$$

Neste espaço de funções U cujas componentes estão descritas em (3.1), multiplicamos cada termo das equações em (2.1) por uma função $v = (v^{(1)}(x,y,z), v^{(2)}(x,y,z)) \in \mathcal{V} = \{v \in H^1(\Omega) : v^{(1)}|_{\Gamma_{12}} = 0\}$ e integramos em relação à variável espacial. É importante observar que, embora no meio aquático, a difusibilidade $\alpha^{(2)}$ seja constante, isto não ocorre, em geral, no meio aéreo.

Assim, obtém-se:

$$\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial t}v^{(i)}dX-\int_{\Omega_1}div(\alpha^{(1)}\nabla u^{(1)})v^{(1)}dX-\alpha^{(2)}\int_{\Omega_2}\Delta u^{(2)}v^{(2)}dX+$$
$$+\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}\nabla(\overrightarrow{V}^{(i)}u^{(i)})v^{(i)}dX+\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}\sigma_i u^{(i)}v^{(i)}dX=\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}f_1v^{(i)}dX$$

Recorrendo ao teorema de Green no segundo e terceiro membros da esquerda e utilizando as condições de contorno de **i)** a **viii)** dadas na seção 2.3, obtemos:

$$\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial t}v^{(i)}dX+\int_{\Omega_1}\alpha^{(1)}(\nabla u^{(1)}\circ\nabla v^{(1)})dX+\int_{\Gamma_7}k_su^{(1)}v^{(1)}d\Gamma+$$
$$+\alpha^{(2)}\int_{\Omega_2}(\nabla u^{(2)}\circ\nabla v^{(2)})dX+\int_{\Gamma_2}k_fu^{(2)}v^{(2)}d\Gamma+\int_{\Gamma_5}k_fu^{(2)}v^{(2)}d\Gamma+\sum_{i=1,2}\int_{\Gamma_6}\beta_iu^{(i)}v^{(i)}d\Gamma+$$
$$+\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}V_1^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x}v^{(i)}dX+\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}V_2^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial y}v^{(i)}dX+\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}V_3^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial z}v^{(i)}dX+$$
$$+\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}\sigma_iu^{(i)}v^{(i)}dX=\sum_{i=1,2}\int_{\Omega_i}f_iv^{(i)}dX+\int_{\Gamma_{11}}gv^{(1)}d\Gamma+\int_{\Gamma_6}\beta_1u^{(2)}v^{(1)}d\Gamma+$$
$$+\int_{\Gamma_6}\beta_2u^{(1)}v^{(2)}d\Gamma$$

ou

$$\sum_{i=1,2}(\frac{\partial u^{(i)}}{\partial t},v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}+\sum_{i=1,2}(\alpha^{(i)}\nabla u^{(i)}\|\nabla v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}+\langle k_su^{(1)},v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_7)}+$$
$$+\langle k_fu^{(2)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_2)}+\langle k_fu^{(2)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_5)}+\sum_{i=1,2}\langle\beta_iu^{(i)},v^{(i)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}+$$
$$+\sum_{i=1,2}(V_1^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x},v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}+\sum_{i=1,2}(V_2^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial y},v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}+\sum_{i=1,2}(V_3^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial z},v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}+$$
$$+\sum_{i=1,2}(\sigma_iu^{(i)},v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}-\langle\beta_1u^{(2)},v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}-\langle\beta_2u^{(1)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}=$$
$$=\sum_{i=1,2}(f_i,v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}+\langle g,v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_{11})},$$

Com

$$(\alpha^{(i)}\nabla u^{(i)}\|\nabla v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}=\sum_{j=1}^{3}\int_{L^2(\Omega_i)}\frac{\partial u}{\partial x_j}\frac{\partial v}{\partial x_j}dX.$$

Obtém-se então a formulação variacional desejada:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}|v\right)_{L^2(\Omega)} + P(t;u,v) = L(v) + (u_0|v)\delta_0, \tag{3.2}$$

onde

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}|v\right)_{L^2(\Omega)} = \sum_{i=1,2}(\frac{\partial u^{(i)}}{\partial t}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)},$$

$$P(t;u,v) = \sum_{i=1,2}(\alpha^{(i)}\nabla u^{(i)}, \nabla v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} + \langle k_s u^{(1)}, v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_7)} + \langle k_f u^{(2)}, v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_2)} +$$

$$+ \langle k_f u^{(2)}, v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_5)} + \sum_{i=1,2}\langle \beta_i u^{(i)}, v^{(i)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)} + \sum_{i=1,2}(V_1^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} +$$

$$+ \sum_{i=1,2}(V_2^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial y}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} + \sum_{i=1,2}(V_3^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial z}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} + \sum_{i=1,2}(\sigma_i u^{(i)}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} +$$

$$- \langle \beta_1 u^{(2)}, v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)} - \langle \beta_2 u^{(1)}, v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)},$$

$L(v) = \sum_{i=1,2}(f_i, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} + \langle g, v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_{11})}$, $(u_0|v)\delta_0$ é a condição inicial e δ_0 é o delta de Dirac.

3.2 Existência e Unicidade da Solução

Iniciaremos esta seção apresentando algumas propriedades referente ao espaço $\mathcal{V}$ definido na seção anterior.

Seja $C_0^\infty(\Omega)$, o espaço das funções testes usuais. Assim,

- $C_0^\infty \subset \mathcal{V} \subset H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$,
- C_0^∞ é denso em $L^2(\Omega)$, (*cf.* [23]),
- a inclusão $H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ é contínua e compacta (*cf.* [2]),
- $L^2(\Omega)$ é Hilbert e separável.

Como a norma de $\mathcal{V}$ é a de $H^1(\Omega)$ segue que a inclusão $\mathcal{V} \subset L^2(\Omega)$ também é contínua e compacta. Assim, $\mathcal{V}$ é Hilbert, separável e denso em $L^2(\Omega)$.

O espaço $L^2(\Omega)$ é reflexivo, portanto podemos identificá-lo com o seu dual. Sendo $\mathcal{V}'$ o dual de $\mathcal{V}$ e com os resultados descritos no início desta seção obtemos que as inclusões $\mathcal{V} \subset L^2(\Omega) \subset \mathcal{V}'$ são contínuas e densas.

Como estamos interessados em construir um método para aproximar a solução de (3.2), precisamos garantir existência e unicidade da solução procurada. Deste modo, mostraremos que nosso problema satisfaz as condições do seguinte resultado encontrado em Lions [21], o qual garante a existência e unicidade de solução para uma classe de problemas abstratos, reescrito aqui de maneira a se adequar às necessidades deste trabalho.

Teorema 3.2.1. *Sejam $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ um conjunto aberto, limitado, de fronteira Lipschitz contínua, simplesmente conexo e os espaços de Hilbert H e V tais que, $V \subset H$, sendo esta inclusão contínua e com V denso em H, tal que:*
dado $T > 0$ (fixo), seja uma família de formas bilineares $a(t; u, v) : V \times V \to \mathbb{R}$, $\forall t \in [0, T]$ satisfazendo as seguintes hipóteses:

i) $\forall (u, v) \in V \times V$, *a função* $t \to a(t; u, v)$ *é mensurável,*

ii) $|a(t; u, v)| \leq M \|u\|_V \|v\|_V$, *q.t.p. em* Ω, $t \in [0, T]$, $\forall u, v \in V$ *e* M *uma constante,*

iii) existe $\lambda \in \mathbb{R}$ *tal que* $a(t; v, v) + \lambda \|v\|_H^2 \geq \beta \|v\|_V^2$, *q.t.p. em* Ω, $t \in [0, T]$, $\forall v \in V$, *sendo* β *uma constante estritamente positiva.*

Então, se f, $g \in L^2(0, T; V)$, *dado* $u_0 \in H$, *existe uma única função* $u \in L^2(0, T; V)$ *tal que:*

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} | v \right)_{L^2(\Omega)} + a(t; u, v) = L(v) + (u_0 | v) \delta_0, \text{ q.t.p. em } \Omega, \ t \in [0, T], \ \forall v \in V$$

A demonstração deste teorema encontra-se em Lions [21]. Para o caso em que P não é linear, Meyer [30] faz a demonstação para um problema similar, porém sem os termos advectivos. O que faremos então é mostrar que a forma bilinear P definida na seção anterior satisfaz as condições do teorema acima; com isso obtemos existência e unicidade da solução do problema (2.1) em sua formulação variacional.

3.2.1 Desigualdades Necessárias

Com o intuito de facilitar a verificação das hipóteses do teorema reproduzido na seção anterior, são necessárias algumas estimativas.

D.1 $|\alpha_i (\nabla u^{(i)} \| \nabla v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} + \sigma_i (u^{(i)}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}| \leq sup_{\Omega_i} \{\alpha_i, \sigma_i\} |(\nabla u^{(i)} \| \nabla v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)} +$
$+ (u^{(i)}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}| = M_1^{(i)} |(u^{(i)}, v^{(i)})_{H^1(\Omega_i)}| \leq M_1^{(i)} \|u^{(i)}\|_{H^1(\Omega_i)} \|v^{(i)}\|_{H^1(\Omega_i)}$,

onde $M_1^{(i)} = sup_{\Omega_i} \{\alpha_i, \sigma_i\}$, $i = 1, 2$. Esta última desigualdade decorre da desigualdade de Cauchy-Schwarz.

D.2 $\left|\sum_{j=1}^{3}\int_{L^2(\Omega_i)} V_j^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x_j}v^{(i)}dX\right| \leq \sum_{j=1}^{3} sup_{\Omega_i}\{|V_j^{(i)}|\}\int_{L^2(\Omega_i)}\left|\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x_j}\right||v^{(i)}|dX \leq$

$\leq M_2^{(i)}\left[\sum_{j=1}^{3}\int_{L^2(\Omega_i)}\left(\epsilon\left|\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x_j}\right|^2+\frac{|v^{(i)}|^2}{4\epsilon}\right)dX\right] = M_2^{(i)}\epsilon\|\nabla u^{(i)}\|^2_{L^2(\Omega_i)}+$

$+\frac{3M_2^{(i)}}{4\epsilon}\|v^{(i)}\|^2_{L^2(\Omega_i)}$

onde $M_2^{(i)} = max_{j=1,2,3}\left\{sup_{\Omega_i}\{|V_j^{(i)}|\}\right\}$ e $i = 1, 2$.

Tomando $\epsilon = \dfrac{\alpha_{inf}^{(i)}}{2M_2}$, obtemos

$$\left|\sum_{j=1}^{3}\int_{L^2(\Omega_i)} V_j^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x_j}v^{(i)}dX\right| \leq \frac{\alpha_{inf}^{(i)}}{2}\|\nabla u^{(i)}\|^2_{L^2(\Omega_i)}+\frac{3\left(M_2^{(i)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(i)}}\|v^{(i)}\|^2_{L^2(\Omega_i)}.$$

Aqui, fizemos o uso da desigualdade $ab \leq \epsilon a^2 + \frac{b^2}{4\epsilon}, \forall a, b \in \mathbb{R}$ e $\epsilon \geq 0$; que pode ser obtida de $(\sqrt{\epsilon}a - \frac{b}{2\sqrt{\epsilon}})^2 \geq 0$

D.3 $|\langle u^{(i)}, v^{(i)}\rangle_{L^2(\Gamma_j)}| \leq \|u^{(i)}\|_{L^2(\Gamma_j)}\|v^{(i)}\|_{L^2(\Gamma_j)} \leq \|u^{(i)}\|_{L^2(\partial\Omega_i)}\|v^{(i)}\|_{L^2(\partial\Omega_i)} \leq$

$\leq C_i\|u^{(i)}\|_{H^1(\Omega_i)}\|v^{(i)}\|_{H^1(\Omega_i)},\ i = 1, 2$ e C_1 e C_2 constantes adequadas.
Esta última desigualdade decorre do Teorema do Traço [14].

D.4 $\left|\sum_{j=1}^{3}\int_{L^2(\Omega_i)} V_j^{(i)}\frac{\partial u^{(i)}}{\partial x_j}v^{(i)}dX\right| = \left|(V^{(i)}\circ\nabla u^{(i)}, v^{(i)})_{L^2(\Omega_i)}\right| \leq$

$\leq \|V^{(i)}\circ\nabla u^{(i)}\|_{L^2(\Omega_i)}\|v^{(i)}\|_{L^2(\Omega_i)} \leq M_2^{(i)}\|\nabla u^{(i)}\|_{L^2(\Omega_i)}\|v^{(i)}\|_{L^2(\Omega_i)} \leq$

$\leq M_2^{(i)}\|u^{(i)}\|_{H^1(\Omega_i)}\|v^{(i)}\|_{H^1(\Omega_i)},\ i = 1, 2$ e $M_2^{(i)}$ dado em D.2.

D.5 Dado $\epsilon > 0$, existe uma constante $c(\epsilon)$ tal que $|\langle v, v\rangle_\Gamma| \leq \epsilon\|v\|^2_{H^1(\Omega)} + c(\epsilon)\|v\|^2_{L^2(\Omega)}$, onde Γ é uma parte da fronteira $\partial(\Omega)$ de Ω (cf. [21] - página 23).

D.6 Usando a desigualdade D.5 obtemos
$|\langle v^{(1)}, v^{(2)}\rangle_\Gamma| = \frac{1}{2}|(\langle v^{(1)}+v^{(2)}, v^{(1)}+v^{(2)}\rangle_\Gamma - \langle v^{(1)}, v^{(1)}\rangle_\Gamma) - \langle v^{(2)}, v^{(2)}\rangle_\Gamma| \leq$

$\leq \frac{1}{2}|\langle v^{(1)}+v^{(2)}, v^{(1)}+v^{(2)}\rangle_\Gamma| + \frac{1}{2}|\langle v^{(1)}, v^{(1)}\rangle_\Gamma)| + \frac{1}{2}|\langle v^{(2)}, v^{(2)}\rangle_\Gamma| \leq$

$\leq \frac{1}{2}\epsilon_1\|v^{(1)}+v^{(2)}\|_{H^1(\Omega)} + \frac{1}{2}\epsilon_2\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)} + \frac{1}{2}\epsilon_3\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+$

$$+\frac{1}{2}c(\epsilon_1)\|v^{(1)}+v^{(2)}\|_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{2}c(\epsilon_2)\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}+\frac{1}{2}c(\epsilon_3)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}\leq$$

$$\leq \epsilon_1\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+\epsilon_1\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+\frac{1}{2}\epsilon_2\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+\frac{1}{2}\epsilon_3\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+$$

$$+c(\epsilon_1)\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}+c(\epsilon_1)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}+\frac{1}{2}c(\epsilon_2)\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}+\frac{1}{2}c(\epsilon_3)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}=$$

$$=(\epsilon_1+\frac{1}{2}\epsilon_2)\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+(\epsilon_1+\frac{1}{2}\epsilon_3)\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+$$

$$+(c(\epsilon_1)+\frac{1}{2}c(\epsilon_2))\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}+(c(\epsilon_1)+\frac{1}{2}c(\epsilon_3))\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}$$

3.2.2 Verificação das Hipóteses do Teorema

1. $P(t;x,y,z)$ é mensurável por definição.

2. Usando as desigualdades D1. D3. e D4 obtemos

$$|P(t;x,y,z)|\leq \left|(\alpha^{(1)}\nabla u^{(1)},\nabla v^{(1)})_{L^2(\Omega_1)}\right|+\left|(\alpha^{(2)}\nabla u^{(2)},\nabla v^{(2)})_{L^2(\Omega_2)}\right|+\left|\langle k_s u^{(1)},v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_7)}\right|+$$

$$+\left|\langle k_f u^{(2)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_2)}\right|+\left|\langle k_f u^{(2)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_5)}\right|+\left|\langle \beta_1 u^{(1)},v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}\right|+\left|\langle \beta_2 u^{(2)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}\right|+$$

$$+\left|\sum_{j=1}^{3}(V_j^{(1)}\frac{\partial u^{(1)}}{\partial x_j},v^{(1)})_{L^2(\Omega_1)}\right|+\left|\sum_{j=1}^{3}(V_j^{(2)}\frac{\partial u^{(2)}}{\partial x_j},v^{(2)})_{L^2(\Omega_2)}\right|+\left|(\sigma_1 u^{(1)},v^{(1)})_{L^2(\Omega_1)}\right|+$$

$$+\left|(\sigma_2 u^{(2)},v^{(2)})_{L^2(\Omega_2)}\right|+\left|\langle \beta_1 u^{(2)},v^{(1)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}\right|+\left|\langle \beta_2 u^{(1)},v^{(2)}\rangle_{L^2(\Gamma_6)}\right|\leq$$

$$\leq M_1^{(1)}\|u^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+M_2^{(1)}\|u^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+$$

$$+M_1^{(2)}\|u^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+M_2^{(2)}\|u^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+$$

$$+k_s C_1\|u^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+k_f(C_2+C_3)\|u^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+$$

$$+\beta_1 C_4\|u^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}+\beta_2 C_5\|u^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}+$$

$$+\beta_1 C_6\|u^{(2)}\|_{H^1(\Omega)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega)}+\beta_2 C_7\|u^{(1)}\|_{H^1(\Omega)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega)}\leq$$

$$\leq M_1^{(1)}\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+M_2^{(1)}\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+M_1^{(2)}\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+$$

$$+M_2^{(2)}\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+k_sC_1\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+k_f(C_2+C_3)\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+$$

$$+\beta_1C_4\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+\beta_2C_5\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+\beta_1C_6\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}+$$

$$+\beta_2C_7\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}=M\|u\|_{H^1(\Omega)}\|v\|_{H^1(\Omega)}$$

onde $M=M_1^{(1)}+M_2^{(1)}+M_1^{(2)}+M_2^{(2)}+k_s+k_f(C_2+C_3)+\beta_1(C_4+C_6)+\beta_2(C_5+C_7)$, $M_j^{(i)}$, $i,j=1,2$ dados como na desigualdade D1. e as constantes C_i, $i=1,\dots,7$ dadas como no teorema do Traço.

3. Usando as desigualdades D.2, D.5 e D.6 e considerando $\gamma=max\{k_s,k_f,\beta_1+\beta_2\}$ obtemos

$$P(t;v,v)\geq\alpha_{inf}^{(1)}\|\nabla v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2-\frac{\alpha_{inf}^{(1)}}{2}\|\nabla v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2-\frac{3\left(M_2^{(1)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(1)}}\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2-\sigma_1\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2+$$

$$-\gamma(\epsilon_1+(1/2)\epsilon_2)\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}^2-\gamma(\epsilon_1+(1/2)\epsilon_3)\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}^2-\gamma(c(\epsilon_1)+(1/2)c(\epsilon_2))\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2+$$

$$-\gamma(c(\epsilon_1)+(1/2)c(\epsilon_3))\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2-\gamma\epsilon_4\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}^2-\gamma\epsilon_5\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)}^2-\gamma\epsilon_6\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}^2+$$

$$-\gamma\epsilon_7\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}^2-\gamma\epsilon_8\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}^2-\gamma c(\epsilon_4)\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2-\gamma c(\epsilon_5)\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2-\gamma c(\epsilon_6)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2+$$

$$-\gamma c(\epsilon_7)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2-\gamma c(\epsilon_8)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2+\alpha_{inf}^{(2)}\|\nabla v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2-\frac{\alpha_{inf}^{(2)}}{2}\|\nabla v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2+$$

$$-\frac{3\left(M_2^{(2)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(2)}}\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2-\sigma_2\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2=\frac{\alpha_{inf}^{(1)}}{2}\|\nabla v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2+\frac{\alpha_{inf}^{(2)}}{2}\|\nabla v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2+$$

$$-\left(\frac{3\left(M_2^{(1)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(1)}}+\sigma_1+\gamma(c(\epsilon_1)+(1/2)c(\epsilon_2))+\gamma c(\epsilon_4)+\gamma c(\epsilon_5)\right)\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}^2+$$

$$-\left(\frac{3\left(M_2^{(2)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(2)}}+\sigma_2+\gamma(c(\epsilon_1)+(1/2)c(\epsilon_3))+\gamma c(\epsilon_6)+\gamma c(\epsilon_7)+\gamma c(\epsilon_8)\right)\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}^2+$$

$$-\left(\gamma(\epsilon_1+(1/2)\epsilon_2)+\gamma\epsilon_4+\gamma\epsilon_5\right)\left(\|\nabla v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}+\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}\right)+$$

$$-\left(\gamma(\epsilon_1+(1/2)\epsilon_3)+\gamma\epsilon_6+\gamma\epsilon_7+\gamma\epsilon_8\right)\left(\|\nabla v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}+\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}\right)=$$

$$= \left(\frac{\alpha_{inf}^{(1)}}{2} - B^{(1)}\right) \|\nabla v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)} - \left(A^{(1)} + B^{(1)}\right) \|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)} +$$

$$+ \left(\frac{\alpha_{inf}^{(2)}}{2} - B^{(2)}\right) \|\nabla v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)} - \left(A^{(2)} + B^{(2)}\right) \|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}$$

onde

- $A^{(1)} = \dfrac{3\left(M_2^{(1)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(1)}} + \sigma_1 + \gamma(c(\epsilon_1) + (1/2)c(\epsilon_2)) + \gamma c(\epsilon_4) + \gamma c(\epsilon_5),$

- $A^{(2)} = \dfrac{3\left(M_2^{(2)}\right)^2}{2\alpha_{inf}^{(2)}} + \sigma_2 + \gamma(c(\epsilon_1) + (1/2)c(\epsilon_3)) + \gamma c(\epsilon_6) + \gamma c(\epsilon_7) + \gamma c(\epsilon_8),$

- $B^{(1)} = \gamma(\epsilon_1 + (1/2)\epsilon_2) + \gamma\epsilon_4 + \gamma\epsilon_5$ e

- $B^{(2)} = \gamma(\epsilon_1 + (1/2)\epsilon_3) + \gamma\epsilon_6 + \gamma\epsilon_7 + \gamma\epsilon_8.$

Resumindo, obtivemos:

$$P(t; v, v) \geq \left(\frac{\alpha_{inf}^{(1)}}{2} - B^{(1)}\right) \left(\|\nabla v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)} + \|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)}\right) - \left(A^{(1)} + \frac{\alpha_{inf}^{(1)}}{2}\right) \|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)} +$$

$$+ \left(\frac{\alpha_{inf}^{(2)}}{2} - B^{(2)}\right) \left(\|\nabla v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)} + \|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}\right) - \left(A^{(2)} + \frac{\alpha_{inf}^{(2)}}{2}\right) \|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)} =$$

$$= \beta^{(1)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)} - \lambda^{(1)}\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)} + \beta^{(2)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)} - \lambda^{(2)}\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)}$$

onde $\beta^{(1)} = \dfrac{\alpha_{inf}^{(1)}}{2} - B^{(1)}$ e $\beta^{(2)} = \dfrac{\alpha_{inf}^{(2)}}{2} - B^{(2)}$ são constantes estritamente positivas, bastando para isso tomar os ϵ_i, $i = 1, \ldots, 8$ tão pequenos quanto for necessário. Assim,

$$P(t; v, v) + \lambda^{(1)}\|v^{(1)}\|_{L^2(\Omega_1)} + \lambda^{(2)}\|v^{(2)}\|_{L^2(\Omega_2)} \geq \beta^{(1)}\|v^{(1)}\|_{H^1(\Omega_1)} + \beta^{(2)}\|v^{(2)}\|_{H^1(\Omega_2)}$$

Portanto $P(t; v, v) + \lambda\|v\|_{L^2(\Omega)} \geq \beta\|v\|_{H^1(\Omega)}$, onde $\lambda = max\{\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}\}$ e $0 < \beta = min\{\beta^{(1)}, \beta^{(2)}\}$.

Como estamos supondo uma fonte pontual e a deriva constante num pedaço da fronteira Γ_{11}, temos que as funções f e g pertencem a $L^2(0, T; H)$. Desta forma, as condições do Teorema 3.2.1 estão satisfeitas.

Capítulo 4

Discretização do Problema

Garantidas a existência e a unicidade para a solução do problema (2.1) na sua forma variacional em um subespaço conveniente de U, podemos utilizar algum método numérico apropriado para aproximarmos a sua solução. O método de Galerkin é um método que nos permite construir uma solução aproximada do problema variacional (3.2) associado a (2.1). Para isto, é necessário fazermos uma discretização espacial finita do domínio em questão sobre a qual é construída uma base de um subespaço finito de V. Detalharemos este processo nas próximas seções.

4.1 Discretização Espacial

A fim de simplificarmos a notação, iniciamos esta seção introduzindo uma nova notação denotando as expressões:

$$(\cdot\,,\cdot)_{L^2(\Omega_i)} \to (\cdot\,,\cdot)_{\Omega_i},\ i = 1,\ 2$$

$$\langle\cdot\,,\cdot\rangle_{L^2(\Gamma_j)} \to \langle\cdot\,,\cdot\rangle_{\Gamma_j},\ j = 1, \ldots, 12$$

Sejam V_h um subespaço de V de dimensão finita gerado pela base

$$\mathbb{B} = \{\varphi_1, \ldots, \varphi_{nn_w}, \varphi_{nn_w+1}, \ldots, \varphi_{nn_h}\}.$$

Aqui, nn_w e nn_a indicam respectivamente o número de nós nos meios aquático e aéreo e $nn_h = nn_w + nn_a$, justificando a quantidade de elementos na base $\mathbb{B}$ - a dimensão do subespaço V_h. Assim, a solução do problema (3.2) no subespaço V_h pode ser representada como:

$$u_h(x, y, z, t) = (u_h^{(1)}(x, y, z, t), u_h^{(2)}(x, y, z, t)),$$

com

$$u_h^{(1)} = \sum_{i=nn_w+1}^{nn_h} c_i(t)\varphi_i(x,y,z) \text{ e}$$

$$u_h^{(2)} = \sum_{i=1}^{nn_w} c_i(t)\varphi_i(x,y,z). \tag{4.1}$$

Substituindo as componentes de u_h em (3.2) de modo conveniente, temos:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1,2}(\frac{\partial u_h^{(i)}}{\partial t}, v^{(i)})_{\Omega_i} + \sum_{i=1,2}(\alpha_i \nabla u_h^{(i)} \| \nabla v^{(i)})_{\Omega_i} + \langle k_s u_h^{(1)}, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_7} + \langle k_f u_h^{(2)}, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_2} + \\
&+ \langle k_f u_h^{(2)}, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_5} + \sum_{i=1,2}\langle \beta_i u_h^{(i)}, v^{(i)}\rangle_{\Gamma_6} + \sum_{i=1,2}(V_1^{(i)}\frac{\partial u_h^{(i)}}{\partial x}, v^{(i)})_{\Omega_i} + \sum_{i=1,2}(V_2^{(i)}\frac{\partial u_h^{(i)}}{\partial y}, v^{(i)})_{\Omega_i} + \\
&+ \sum_{i=1,2}(V_3^{(i)}\frac{\partial u_h^{(i)}}{\partial z}, v^{(i)})_{\Omega_i} + \sum_{i=1,2}(\sigma_i u_h^{(i)}, v^{(i)})_{\Omega_i} - \langle \beta_1 u_h^{(2)}, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_6} - \langle \beta_2 u_h^{(1)}, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_6} = \\
&= \sum_{i=1,2}(f_i, v^{(i)})_{\Omega_i} + \langle g, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_{11}},\ \forall (v^(1), v^(2)) \in V_h
\end{aligned}$$

Esta expressão pode ser generalizada de modo a incluir outras condições de contorno - o que não será aqui feito, a notação já está suficientemente carregada. Consequentemente, temos:

$$\begin{aligned}
&(\sum_{i=1}^{n_w}\frac{dc_i}{dt}\varphi_i, v^{(2)})_{\Omega_2} + (\sum_{i=n_w+1}^{n_h}\frac{dc_i}{dt}\varphi_i, v^{(1)})_{\Omega_1} + \alpha_2(\sum_{i=1}^{n_w} c_i \nabla\varphi_i \| \nabla v^{(2)})_{\Omega_2} + \\
&+ \alpha_1(\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i \nabla\varphi_i \| \nabla v^{(1)})_{\Omega_1} + k_s\langle \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i\varphi_i, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_7} + k_f\langle \sum_{i=1}^{n_w} c_i\varphi_i, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_2} + \\
&+ k_f\langle \sum_{i=1}^{n_w} c_i\varphi_i, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_5} + \langle \beta_1 \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i\varphi_i, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_6} + \langle \beta_2 \sum_{i=1}^{n_w} c_i\varphi_i, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_6} + \\
&+ (\sum_{i=1}^{n_w} c_i V_1^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}, v^{(2)})_{\Omega_2} + (\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i V_1^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}, v^{(1)})_{\Omega_1} + (\sum_{i=1}^{n_w} c_i V_2^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y}, v^{(2)})_{\Omega_2} + \\
&+ (\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i V_2^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y}, v^{(1)})_{\Omega_1} + (\sum_{i=1}^{n_w} c_i V_3^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z}, v^{(2)})_{\Omega_2} + (\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i V_3^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z}, v^{(1)})_{\Omega_1} + \\
&+ \sigma_2(\sum_{i=1}^{n_w} c_i\varphi_i, v^{(2)})_{\Omega_2} + \sigma_1(\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i\varphi_i, v^{(1)})_{\Omega_1} - \beta_1\langle \sum_{i=1}^{n_w} c_i\varphi_i, v^{(2)}\rangle_{\Gamma_6} + \\
&- \beta_2\langle \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i\varphi_i, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_6} = \sum_{i=1,2}(f_i, v^{(i)})_{\Omega_i} + \langle g, v^{(1)}\rangle_{\Gamma_{11}},\ \forall\ v = (v^{(1)}, v^{(2)}) \in V_h.
\end{aligned}$$

Na realidade, isto correponde a aproximar $u^{(i)}(x,y,z,t)$, via separação de variáveis, pelas aproximações em (4.1). Assim,

$$\sum_{i=1}^{n_w}\frac{dc_i}{dt}(\varphi_i,v^{(2)})_{\Omega_2}+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}\frac{dc_i}{dt}(\varphi_i,v^{(1)})_{\Omega_1}+\alpha_2\sum_{i=1}^{n_w}c_i(\nabla\varphi_i\|\nabla v^{(2)})_{\Omega_2}+$$
$$+\alpha_1\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(\nabla\varphi_i\|\nabla v^{(1)})_{\Omega_1}+k_s\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i\langle\varphi_i,v^{(1)}\rangle_{\Gamma_7}+k_f\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,v^{(2)}\rangle_{\Gamma_2}+$$
$$+k_f\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,v^{(2)}\rangle_{\Gamma_5}+\beta_1\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i\langle\varphi_i,v^{(1)}\rangle_{\Gamma_6}+\beta_2\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,v^{(2)}\rangle_{\Gamma_6}+$$
$$+\sum_{i=1}^{n_w}c_i(V_1^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},v^{(2)})_{\Omega_2}+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(V_1^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},v^{(1)})_{\Omega_1}+\sum_{i=1}^{n_w}c_i(V_2^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},v^{(2)})_{\Omega_2}+$$
$$+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(V_2^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},v^{(1)})_{\Omega_1}+\sum_{i=1}^{n_w}c_i(V_3^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},v^{(2)})_{\Omega_2}+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(V_3^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},v^{(1)})_{\Omega_1}+$$
$$+\sigma_2\sum_{i=1}^{n_w}c_i(\varphi_i,v^{(2)})_{\Omega_2}+\sigma_1\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(\varphi_i,v^{(1)})_{\Omega_1}-\beta_1\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,v^{(2)}\rangle_{\Gamma_6}+$$
$$-\beta_2\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i\langle\varphi_i,v^{(1)}\rangle_{\Gamma_6}=\sum_{i=1,2}(f_i,v^{(i)})_{\Omega_i}+\langle g,v^{(1)}\rangle_{\Gamma_{11}},\ \forall\ v=(v^{(1)},v^{(2)})\in V_h.$$

E, como é para todo $v\in V_h$, podemos substituir $v^{(1)}$ e $v^{(2)}$ por um elemento qualquer da base $\mathbb{B}$, ou seja,

$$\sum_{i=1}^{n_w}\frac{dc_i}{dt}(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_2}+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}\frac{dc_i}{dt}(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_1}+\alpha_2\sum_{i=1}^{n_w}c_i(\nabla\varphi_i\|\nabla\varphi_j)_{\Omega_2}+$$
$$+\alpha_1\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(\nabla\varphi_i\|\nabla\varphi_j)_{\Omega_1}+k_s\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_7}+k_f\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_2}+$$
$$+k_f\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_5}+\beta_1\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6}+\beta_2\sum_{i=1}^{n_w}c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6}+$$
$$+\sum_{i=1}^{n_w}c_i(V_1^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},\varphi_j)_{\Omega_2}+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(V_1^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},\varphi_j)_{\Omega_1}+\sum_{i=1}^{n_w}c_i(V_2^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},\varphi_j)_{\Omega_2}+$$
$$+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(V_2^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},\varphi_j)_{\Omega_1}+\sum_{i=1}^{n_w}c_i(V_3^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},\varphi_j)_{\Omega_2}+\sum_{i=n_w+1}^{n_h}c_i(V_3^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},\varphi_j)_{\Omega_1}+$$

$$+ \sigma_2 \sum_{i=1}^{n_w} c_i(\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_2} + \sigma_1 \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i(\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_1} - \beta_1 \sum_{i=1}^{n_w} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6} +$$

$$- \beta_2 \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6} = \sum_{i=1,2} (f_i, \varphi_j)_{\Omega_i} + \langle g, \varphi_j \rangle_{\Gamma_{11}}, \ \varphi_j \in \mathbb{B}.$$

ou

$$\sum_{i=1}^{n_w} \frac{dc_i}{dt}(\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_2} + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} \frac{dc_i}{dt}(\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_1} + \sum_{i=1}^{n_w} c_i \{\alpha_2(\nabla\varphi_i \| \nabla\varphi_j)_{\Omega_2} + k_f \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_2} +$$

$$+ k_f \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_5} + \beta_2 \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6} + (V_1^{(2)} \tfrac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \varphi_j)_{\Omega_2} + (V_2^{(2)} \tfrac{\partial \varphi_i}{\partial y}, \varphi_j)_{\Omega_2} + (V_3^{(2)} \tfrac{\partial \varphi_i}{\partial z}, \varphi_j)_{\Omega_2} +$$

$$+ \sigma_2(\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_2} - \beta_1 \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6}\} + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i \{\alpha_1(\nabla\varphi_i \| \nabla\varphi_j)_{\Omega_1} + k_s \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_7} + \beta_1 \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6} +$$

$$+ (V_1^{(1)} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \varphi_j)_{\Omega_1} + (V_2^{(1)} \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}, \varphi_j)_{\Omega_1} + (V_3^{(1)} \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}, \varphi_j)_{\Omega_1} + \sigma_1(\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega_1} - \beta_2 \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6}\} =$$

$$= \sum_{i=1,2} (f_i, \varphi_j)_{\Omega_i} + \langle g, \varphi_j \rangle_{\Gamma_{11}}, \ \varphi_j \in \mathbb{B}. \tag{4.2}$$

Usando a notação $c(t) = (c_1(t), \ldots, c_{n_w}(t), c_{n_w+1}(t), \ldots, c_{n_h}(t))^T$ obtemos o sistema de equações diferencias ordinárias descrito abaixo:

$$A(\varphi_i, \varphi_j)\dot{c}(t) + B(\varphi_i, \varphi_j)c(t) = d(f, \varphi_j) + e(g, \varphi_j) \tag{4.3}$$

com as matrizes $A = (a_{ij})$, $B = (b_{ij})$ e os vetores $d = (d_j)$, $e = (e_j)$ dados respectivamente por:

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= (\varphi_i, \varphi_j)_{\Omega} \\
b_{ij} &= \alpha_2 \sum_{i=1}^{n_w} c_i(\nabla\varphi_i \| \nabla\varphi_j)_{\Omega_2} + \alpha_1 \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i(\nabla\varphi_i \| \nabla\varphi_j)_{\Omega_1} + \\
&+ k_s \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_7} + k_f \sum_{i=1}^{n_w} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_2} + \\
&+ k_f \sum_{i=1}^{n_w} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_5} + \beta_1 \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6} + \\
&+ \beta_2 \sum_{i=1}^{n_w} c_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle_{\Gamma_6} + \sum_{i=1}^{n_w} c_i (V_1^{(2)} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \varphi_j)_{\Omega_2} +
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i(V_1^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},\varphi_j)_{\Omega_1} + \sum_{i=1}^{n_w} c_i(V_2^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},\varphi_j)_{\Omega_2} \\
& + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i(V_2^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},\varphi_j)_{\Omega_1} + \sum_{i=1}^{n_w} c_i(V_3^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},\varphi_j)_{\Omega_2} + \\
& + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i(V_3^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},\varphi_j)_{\Omega_1} + \sigma_2\sum_{i=1}^{n_w} c_i(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_2} + \\
& + \sigma_1\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_1} - \beta_1\sum_{i=1}^{n_w} c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6} + \\
& - \beta_2\sum_{i=n_w+1}^{n_h} c_i\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6}, \\
d_j &= \sum_{i=1,2}(f_i,\varphi_j)_{\Omega_i} \text{ e} \\
e_j &= \langle g,\varphi_j\rangle_{\Gamma_{11}}
\end{aligned}
$$

para $i,j = 1,\ldots,nn_w,nn_w+1,\ldots,nn_h$.

Aqui também é razoavelmente simples verificar que outras condições de fronteira podem ser agregadas, bem como fontes de material impactante - o que não é feito apenas para simplificar fórmulas já carregadas.

4.1.1 Galerkin Contínuo: Estimativa de Erro

A resolução de problemas variacionais como (3.2), feita em subespaços $V_h \in V$ de dimensão finita, nos permite obter soluções aproximadas do problema original que, teoricamente, convergirão (e, também, na prática) para a solução analítica na medida em que os subespaços V_h se aproximem de algum modo de V. Fizemos isto utilizando o método de Galerkin o qual, via elementos finitos, nos fornecerá tais aproximações. Consideramos $\{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3,\ldots\}$ e $\{\varphi_1,\varphi_2,\ldots,\varphi_{n_h},\}$, bases do espaço de Hilbert V e de seu subespaço V_h respectivamente.

Nesta seção, vamos analisar o erro que se comete quando aplicamos o Método de Galerkin contínuo no tempo para acaharmos a solução do problema,

$$
\left(\frac{\partial u}{\partial t}|v\right) + P(t;u,v) = L(v), \forall v \in V \tag{4.4}
$$

$$
(u(0,\ .\ ),v) = (u_0,v),\ \forall v \in V,\ t \in (0,T],
$$

Aqui, estamos supondo que $u(\ .\ ,t)$, $\frac{\partial u}{\partial t}(\ .\ ,t)$, $\frac{\partial u}{\partial x}(\ .\ ,t)$, $\frac{\partial u}{\partial y}(\ .\ ,t)$ e $\frac{\partial u}{\partial z}(\ .\ ,t)$ pertencem a $L^2((0,T];L^2(\Omega))$

Assim, se u_h representa uma aproximação numérica da solução de (4.4), como comentado no início desta seção, num subespaço V_h de V, temos para $t \in (0,T]$ fixo:

$$\left(\frac{\partial u_h(t)}{\partial t}, v_h\right) + P(t; u_h, v_h) = L(v_h), \forall v_h \in V_h \tag{4.5}$$

com a condição inicial tal que

$$(u_h(0,\ .\ ), v_h) = (u_0, v_h),\ \forall v_h \in V_h. \tag{4.6}$$

Faremos uma estimativa do erro absoluto através da norma $\|u - u_h\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}$.

Para isto, primeiro vamos obter uma estimativa para $\dfrac{d(\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)})}{dt}$ para $t \in (0,T]$ fixo e, em seguida integramos em relação a t.

Substituindo em (4.5) $u_h(t,X) = \sum_{i=1}^{n_h} c_i(t)\varphi_i(X)$, $X = (x,y,z)$ e $v_h = \varphi_j$, $j = 1, 2, \ldots, \varphi_{n_h}$, obtemos o sistema de equações diferencias ordinárias (4.3) visto no final da seção anterior.

Considerando $u_{h_0} = u_h(0,X) = \sum_{i=1}^{n_h} c_i(0)\varphi_i(X),\ v_h = \varphi_j$ e a equação (4.6), obtemos o sistema $AC(0) = b$ onde $b_j = (u_0|\varphi_j)$. A solução deste sistema nos permite obter a condição inicial do sistema de equações diferenciais ordinárias (4.3) e, consequentemente, uma aproximação da condição inicial do problema (4.5) em V_h.

Para $t \in (0,T]$ fixo [1], escolhendo $v = v_h = \phi - u_h$, com $\phi \in L^2(0,T;V_h)$ e subtraindo (4.5) de (4.4), chegamos à equação:

$$(\frac{\partial(u - u_h)}{\partial t}, \phi - u_h)_\Omega + [P(u, \phi - u_h) - P(u_h, \phi - u_h)] = 0. \tag{4.7}$$

Somando $P(u - u_h, u - u_h)$ nos dois lados da equação (4.7) obtemos:

$$(\frac{\partial(u - u_h)}{\partial t}|u - u_h)_\Omega + P(u - u_h, u - u_h) = (\frac{\partial(u - u_h)}{\partial t}|u - \phi)_\Omega + P(u - u_h, u - \phi). \tag{4.8}$$

Agora, vamos fazer estimativas referentes à segunda parcela dos lados direito e esquerdo da expressão (4.8). Para isto, faremos uso das desigualdades obtidas na seção 3.2. Começamos com a segunda parcela do lado direito, isto é,

$$|P(u - u_h, u - \phi)| \leq \alpha_{sup}\|\nabla(u - u_h)\|_{L^2(\Omega)}\|\nabla(u - \phi)\|_{L^2(\Omega)} + |\sigma|\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)}\|u - \phi\|_{L^2(\Omega)} +$$

$$+ C\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)}\|u - \phi\|_{H^1(\Omega)} + M_2(t)\|\nabla(u - u_h)\|_{L^2(\Omega)}\|u - \phi\|_{L^2(\Omega)}. \tag{4.9}$$

[1] Com isto, podemos simplificar a notação omitindo t .

onde C é obtida como em D.3 (seção 3.2), e $M_2(t) = max_{i=1,2}\{M_2^{(i)}\}$ como em D.2 (seção 3.2). Nesta análise, podemos considerar que o campo de velocidades pode variar também com o tempo. Desse modo, vamos considerar $M_2 = \sup ess\{M_2(t)\}$ e, aplicando a desigualdade $ab \leq \epsilon a^2 + \frac{b^2}{4\epsilon}, \forall a, b \in \mathbb{R}$ e $\epsilon \geq 0$, em cada uma das parcelas do lado direito em (4.9), temos que

$$|P(u-u_h, u-\phi)| \leq \epsilon_1 \|\nabla(u-u_h)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{\alpha^2_{sup}}{4\epsilon_1}\|\nabla(u-\phi)\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_2\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{\sigma^2}{4\epsilon_2}\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} +$$

$$+\epsilon_3\|\nabla(u-u_h)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3}\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_4\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} + \frac{C^2}{4\epsilon_4}\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)}.$$

ou,

$$|P(u-u_h, u-\phi)| \leq (\epsilon_1+\epsilon_3)\|\nabla(u-u_h)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{\alpha^2_{sup}}{4\epsilon_1}\|\nabla(u-\phi)\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_2\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} +$$

$$+(\frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3})\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_4\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} + \frac{C^2}{4\epsilon_4}\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)}. \tag{4.10}$$

Quanto à segunda parcela do lado esquerdo, segue, do item $iii)$ do teorema de existência e unicidade na seção 3.2, que:

$$P(u-u_h, u-u_h) \geq \beta\|u-u_h\|_{H^1(\Omega)} - \lambda'\|u-u_h\|_{L^2(\Omega)}. \tag{4.11}$$

Substituindo (4.10) e (4.11) em (4.8), obtemos

$$\frac{1}{2}\frac{d\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)}}{dt} + \beta\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} \leq \lambda'\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} + (\epsilon_1+\epsilon_3)\|\nabla(u-u_h)\|^2_{L^2(\Omega)} +$$

$$+\frac{\alpha^2_{sup}}{4\epsilon_1}\|\nabla(u-\phi)\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_2\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} + (\frac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{4\epsilon_3})\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_4\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} +$$

$$+\frac{C^2}{4\epsilon_4}\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)} + (\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega$$

ou,

$$\frac{d\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)}}{dt} + c_1\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} \leq \widetilde{\lambda}\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} + c_2\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} +$$

$$+c_3\|\nabla(u-u_h)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{C^2}{2\epsilon_4}\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)} + \frac{\alpha^2_{sup}}{2\epsilon_1}\|\nabla(u-\phi)\|^2_{L^2(\Omega)} + 2(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega$$

onde, $c_1 = 2(\beta - \epsilon_4)$, $c_2 = \frac{\sigma^2}{2\epsilon_2} + \frac{M_2^2}{2\epsilon_3}$, $c_3 = 2(\epsilon_1 + \epsilon_3)$ e $\widetilde{\lambda} = 2(\lambda' + \epsilon_2)$.

Esta última desigualdade pode ser reescrita da seguinte forma [1]:

$$\frac{d\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)}}{dt} + c_1\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} \leq \lambda\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} + (c_2 - \frac{\alpha^2_{sup}}{2\epsilon_1})\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} + c_3\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} +$$

$$+\frac{C^2}{2\epsilon_4}\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)} + 2(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega + \frac{\alpha^2_{sup}}{2\epsilon_1}(\|\nabla(u-\phi)\|^2_{L^2(\Omega)} + \|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)}), \text{ onde } \lambda = \widetilde{\lambda} - c_3.$$

Agora, chamando $\widetilde{c}_1 = c_1 - c_3$, $\widetilde{c}_2 = c_2 - \frac{\alpha^2_{sup}}{2\epsilon_1}$, $\widetilde{c}_3 = \frac{C^2}{2\epsilon_4} + \frac{\alpha^2_{sup}}{2\epsilon_1}$ e fazendo as correspondentes simplificações nesta última desigualdade obtemos,

$$\frac{d\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)}}{dt} + \widetilde{c}_1\|u-u_h\|^2_{H^1(\Omega)} \leq \lambda\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \widetilde{c}_2\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)} +$$
$$+\widetilde{c}_3\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)} + 2(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega. \tag{4.12}$$

Multiplicando (4.12) por $e^{-\lambda t}$, considerando que $\frac{d(e^{-\lambda t}\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)})}{dt} = e^{-\lambda t}\frac{d(\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)})}{dt} - -\lambda e^{-\lambda t}\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)}$ e integrando de 0 a $s \in (0,T]$ em relação a t, obtemos:

$$e^{-\lambda s}\|u(s,.) - u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} - \|u(0,.) - u_h(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \widetilde{c}_1\int_0^s e^{-\lambda t}\|u-u_h\|^2_{L^2(\Omega)}dt \leq$$

$$\leq \widetilde{c}_2\int_0^s e^{-\lambda t}\|u-\phi\|^2_{L^2(\Omega)}dt + \widetilde{c}_3\int_0^s e^{-\lambda t}\|u-\phi\|^2_{H^1(\Omega)}dt + 2\int_0^s e^{-\lambda t}(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega dt. \tag{4.13}$$

Agora, tomando λ tal que $e^{-\lambda t} < 1$ e sabendo que $\widetilde{c}_1 < 0$ temos as seguintes desigualdades:

(i) $\int_0^s e^{-\lambda t}\|u(t,.) - \phi(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)}dt \leq \|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}$ e

(ii) $\int_0^s e^{-\lambda t}\|u(t,.) - \phi(t,.)\|^2_{H^1(\Omega)}dt \leq \|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}$

[1] aqui podemos escolher ϵ_4 de tal forma que $c_1 < 0$.

Assim, os lados esquerdo e direito da expressão (4.13) podem ser limitados inferiormente e superiormente por

$$e^{-\lambda T}\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} - \|u(0,.)-u_h(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \widetilde{c}_1\|u-u_h\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \tag{4.14}$$

e

$$\widetilde{c}_2\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} + \widetilde{c}_3\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + 2\int_0^s e^{-\lambda t}(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega dt \tag{4.15}$$

respectivamente.

Temos então uma nova desigualdade formada por (4.13), (4.14) e (4.15), ou seja,

$$e^{-\lambda T}\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \|u(0,.)-u_h(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)} - \widetilde{c}_1\|u-u_h\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} +$$

$$+\widetilde{c}_2\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} + \widetilde{c}_3\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + 2\int_0^s e^{-\lambda t}(\frac{\partial(u-u_h)}{\partial t}|u-\phi)_\Omega dt \tag{4.16}$$

Integrando por partes a integral que aparece nessa última desigualdade temos,

$$\int_0^s \left(\frac{\partial(u(t,.)-u_h(t,.))}{\partial t}|e^{-\lambda t}(u(t,.)-u_h(t,.))\right)dt = \big(u(t,.)-u_h(t,.)|e^{-\lambda t}(u(t,.)-\phi(t,.))\big)\Big|_0^s +$$

$$+\int_0^s e^{-\lambda t}\left\{\lambda\left(u(t,.)-u_h(t,.)|u(t,.)-\phi(t,.)\right) - \left(u(t,.)-u_h(t,.)|\frac{\partial(u(t,.)-\phi(t,.))}{\partial t}\right)\right\}dt$$

Aplicando a desigualdade de Hölder e a desigualdade $ab \leq \epsilon a^2 + \frac{b^2}{4\epsilon}, \forall a,b \in \mathbb{R}$ e $\epsilon \geq 0$ em cada uma das parcelas do lado direito desta última equação obtemos

$$\int_0^s \left(\frac{\partial(u(t,.)-u_h(t,.))}{\partial t}|e^{-\lambda t}(u(t,.)-\phi(t,.))\right)dt \leq \epsilon\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} +$$

$$+\epsilon\|u_0-u_{h_0}\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon(\lambda+1)\int_0^s \|u(t,.)-u_h(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{1}{4\epsilon}\|u(s,.)-\phi(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} +$$

$$+\frac{1}{4\epsilon}\left\{\|u_0-\phi(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \int_0^s \left[\|u(t,.)-\phi(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \|\frac{\partial(u(t,.)-\phi(t,.))}{\partial t}\|^2_{L^2(\Omega)}\right]dt\right\}$$

com esta desigualdade reescrevemos (4.16) da seguinte forma:

$$e^{-\lambda T}\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \|u(0,.)-u_h(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)} - \widetilde{c}_1\|u-u_h\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}+$$

$$+\widetilde{c}_2\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} + \widetilde{c}_3\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + 2\epsilon\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + 2\epsilon\|u_0-u_{h_0}\|^2_{L^2(\Omega)}+$$

$$+2\epsilon(\lambda+1)\int_0^s \|u(t,.)-u_h(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{1}{2\epsilon}\|u(s,.)-\phi(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{1}{2\epsilon}\Big\{\|u_0-\phi(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)}+$$

$$+\int_0^s \left[\|u(t,.)-\phi(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)} + \|\frac{\partial(u(t,.)-\phi(t,.))}{\partial t}\|^2_{L^2(\Omega)}\right] dt\Big\} \tag{4.17}$$

Abaixo listamos majorantes para as parcelas do lado direito desta última desigualdade:

- $\|u_0-u_{h_0}\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0-\phi_0\|^2_{L^2(\Omega)}$
- $\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \|u-u_h\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}$,
- $\int_0^s \|u(t,.)-u_h(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)}dt \leq \|u-u_h\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}$,
- $\int_0^s \|u(t,.)-\phi(t,.)\|^2_{L^2(\Omega)}dt \leq \|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}$,
- $\int_0^s \|\frac{\partial(u(t,.)-\phi(t,.))}{\partial t}\|^2_{L^2(\Omega)}dt \leq \|\frac{\partial(u-\phi)}{\partial t}\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}$,

Assim, (4.17) pode ser escrita como:

$$e^{-\lambda T}\|u(s,.)-u_h(s,.)\|^2_{L^2(\Omega)} \leq (1+2\epsilon+\frac{1}{2\epsilon})\|u_0-\phi_0\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{1}{2\epsilon}\|u-\phi\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}+$$

$$+(\widetilde{c}_2+\widetilde{c}_3+\frac{1}{2\epsilon})\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + 2\epsilon\|u-u_h\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}+$$

$$-(\widetilde{c}_1-2\epsilon(\lambda+1))\|u-u_h\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \frac{1}{2\epsilon}\|\frac{\partial(u-\phi)}{\partial t}\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \tag{4.18}$$

Tomando o supremo desta desigualdade para $t \in (0,T]$ e, para $\epsilon < \frac{1}{2}$ temos,

$$\|u-u_h\|^2_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} \leq e^{\lambda T}\Big[C_0\|u_0-\phi_0\|^2_{L^2(\Omega)} - C_1\|u-u_h\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}+$$

$$+ C_2\left(\|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \|u-\phi\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} + \|\frac{\partial(u-\phi)}{\partial t}\|^2_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}\right)\Big]. \tag{4.19}$$

onde $C_0 = \dfrac{1+2\epsilon+\frac{1}{2\epsilon}}{1-2\epsilon}$, $C_1 = \dfrac{\widetilde{c}_1 - 2\epsilon(\lambda+1)}{1-2\epsilon}$ e $C_2 = \dfrac{1}{1-2\epsilon}\max\left\{\dfrac{1}{2\epsilon},\ \widetilde{c}_2+\widetilde{c}_3+\dfrac{1}{2\epsilon}\right\}$

Observe-se que a cota superior do erro em (4.19) cresce exponencialmente com o valor de T. Isto indica uma dificuldade para as estimativas com períodos de tempos grandes, o que não é o caso, pois em nossos estudos consideramos intervalos de tempo relativamente pequenos.

4.2 Discretização no Tempo

O passo seguinte é fazer a discretização no tempo. Para isto, utilizaremos o Método de Crank-Nicolson que consiste em um método de diferenças finitas centradas em $t_n + \frac{\Delta t}{2}$, segundo o qual obtemos as seguintes aproximações de ordem $o(\Delta t^2)$:

$$\frac{dc_j}{dt}\Big|_{t_n+\frac{\Delta t}{2}} \approx \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} \text{ e } c_j(t_n + \tfrac{\Delta t}{2}) \approx \tfrac{c_j^{n+1}+c_j^n}{2},$$

onde $c_j^n = c(t_n; x_j, y_j, z_j)$.

Substituindo em (4.2), obtemos:

$$\sum_{i=1}^{n_w} \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t}(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_2} + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t}(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_1} + \sum_{i=1}^{n_w} \frac{c_j^{n+1} + c_j^n}{2}\{\alpha_2(\nabla\varphi_i \| \nabla\varphi_j)_{\Omega_2} +$$

$$+k_f\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_2} + k_f\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_5} + \beta_2\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6} + (V_1^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},\varphi_j)_{\Omega_2} + (V_2^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},\varphi_j)_{\Omega_2} +$$

$$+(V_3^{(2)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},\varphi_j)_{\Omega_2} + \sigma_2(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_2} - \beta_1\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6}\} + \sum_{i=n_w+1}^{n_h} \frac{c_j^{n+1} + c_j^n}{2}\{\alpha_1(\nabla\varphi_i \| \nabla\varphi_j)_{\Omega_1} +$$

$$+k_s\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_7} + \beta_1\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6} + (V_1^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial x},\varphi_j)_{\Omega_1} + (V_2^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial y},\varphi_j)_{\Omega_1} + (V_3^{(1)}\frac{\partial\varphi_i}{\partial z},\varphi_j)_{\Omega_1} +$$

$$+\sigma_1(\varphi_i,\varphi_j)_{\Omega_1} - \beta_2\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle_{\Gamma_6}\} = \sum_{i=1,2}(f_i^{n+\frac{1}{2}},\varphi_j)_{\Omega_i} + \langle g^{n+\frac{1}{2}},\varphi_j\rangle_{\Gamma_{11}},\ \varphi_j \in \mathbb{B}.$$

Separando os termos que acompanham c_j^{n+1} e c_j^n, obtemos o sistema de equações lineares:

$$Ac^{n+1} = Bc^n + d^{n+\frac{1}{2}} \tag{4.20}$$

onde as matrizes A, B são dadas pelas diversas integrais que aparecem no lado esquerdo da equação acima e o vetor d é dado pelas integrais no lado direito.

As duas figuras que veremos abaixo, servem apenas de ilustração para vermos a "forma"em que fica o sistema mencionado acima:

No caso do meio aéreo ou aquático vistos separadamentes o sistema tomaria a seguinte forma:

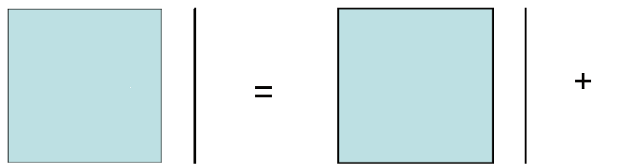

Figura 4.1: Sistema num único meio

Em nosso problema, em que há um acoplamento das equações dado pela condição de contorno na superfície Γ_6, o sistema se torna:

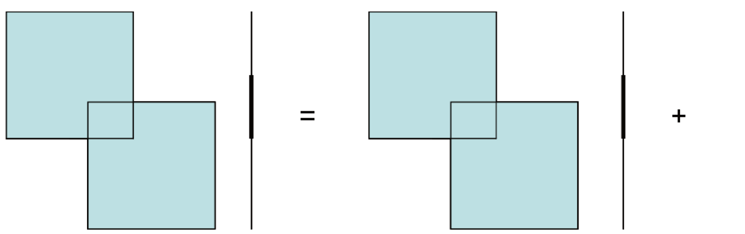

Figura 4.2: Sistema acoplado

As interseções correspondem às linhas do sistema (4.20) que incluem nós na interface ar-água (Γ_6).

4.2.1 Galerkin e Crank-Nicolson: Estimativa de Erro

A discretização temporal de (4.4), feita através do método de diferenças finitas de Crank-Nicolson nos dará um solução aproximada U. Deste modo, estamos considerando a referida equação no tempo $t_{m+\frac{1}{2}} = (m + \dfrac{1}{2})\Delta t$, onde m é um inteiro não negativo e Δt é o passo no tempo.

Como necessitamos reescrever a formulação (4.4) no tempo $t_{m+\frac{1}{2}}$, vamos considerar que $u(., X)$ é três vezes diferenciável em relação a t, onde $X = (x, y, z)$ é fixo e arbitrário em $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$. Assim,

$$u(t_{m+\frac{1}{2}}, X) = \frac{u(t_{m+1}, X) + u(t_m, X)}{2} + \xi_m \quad \text{e} \quad \frac{\partial u(t_{m+\frac{1}{2}}, X)}{\partial t} = \frac{u(t_{m+1}, X) - u(t_m, X)}{\Delta t} + \varsigma_m,$$

aproximações tais que ξ_m e ς_m são da ordem de Δt^2 ($o(\Delta t^2)$). Temos também, para $X \in \partial(\Omega)$,

$$u(t_{m+\frac{1}{2}}, X) = \frac{u(t_{m+1}, X) + u(t_m, X)}{2} + \zeta_m.$$

Substituindo as aproximações acima em (4.4) e considerando que:

$\dfrac{\partial^{k+1}u}{\partial t^k \partial x}, \dfrac{\partial^{k+1}u}{\partial t^k \partial y}, \dfrac{\partial^{k+1}u}{\partial t^k \partial z}$, $k = 0, 1, 2$ são contínuas em $\bar{\Omega}_T$ onde $\Omega_T = (0, T) \times \Omega$, obtemos:

$$(\frac{u_{m+1} - u_m}{\Delta t} + \varsigma_m | v) = P(u_{m+\frac{1}{2}} + \xi_m, v) = L(v)|_{t_{m+\frac{1}{2}}}, \ \forall v \in V, \tag{4.21}$$

com u_0 dada como condição inicial. Denotando por U a solução obtida ao aplicarmos o Método de Galerkin e Crank-Nicolson em (4.4), segue que:

$$(\frac{U_{m+1} - U_m}{\Delta t} | v_h) = P(\frac{U_{m+1} + U + m}{2}, v_h) = L(v_h)|_{t_{m+\frac{1}{2}}}, \ \forall v_h \in V_h. \tag{4.22}$$

Sendo $(U_0|v_h) = (u_0|v_h)$, $\forall v_h \in V_h$, como em 4.1.1, fazendo (4.21) menos (4.22) e considerando $v = v_h$ obtemos

$$(\frac{u_{m+1} - U_{m+1} - (u_m - U_m)}{\Delta t} + \varsigma_m | v_h) = P(u_{m+\frac{1}{2}} + \xi_m, v_h) - P(U_{m+\frac{1}{2}}, v_h) = 0, \ \forall v_h \in V_h.$$

Considerando $z_m = u_m - U_m$ nesta última equação, temos

$$(\frac{z_{m+1} - z_m}{\Delta t} + \varsigma_m | v_h) + P(u_{m+\frac{1}{2}} + \xi_m, v_h) - P(U_{m+\frac{1}{2}}, v_h) = 0, \ \forall v_h \in V_h. \tag{4.23}$$

Analogamente ao que foi feito na seção 4.1.1, consideramos $v_h = (\phi - U)_{m+\frac{1}{2}}$ ou, equivalentemente, $v_h = (\phi - u)_{m+\frac{1}{2}} + z_{m+\frac{1}{2}}$ onde $\phi \in L^2((0, T]; V_h)$. Substituindo em (4.22), temos

$$\begin{aligned}\frac{\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)} - \|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}}{2\Delta t} + P(z_{m+\frac{1}{2}}, z_{m+\frac{1}{2}}) = (\frac{z_{m+1} - z_m}{\Delta t} | (u - \phi)_{m+\frac{1}{2}})_\Omega - (\varsigma_m | v_h)_\Omega + \\ -P(\xi_m, v_h) + P(z_{m+\frac{1}{2}}, (u - \phi)_{m+\frac{1}{2}}).\end{aligned} \tag{4.24}$$

Faremos agora estimativas relativas aos termos da expressão (4.24). Com o auxílio de (4.10) (seção 4.1.1), temos

- $|P(z_{m+\frac{1}{2}},(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})| \leq (\epsilon_1+\epsilon_3)\|\nabla z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \dfrac{\alpha^2_{sup}}{4\epsilon_1}\|\nabla(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}+$
  $+\epsilon_2\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + (\frac{\sigma^2}{4\epsilon_2}+\frac{M_2^2}{4\epsilon_3})\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \epsilon_4\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} + \frac{C^2}{4\epsilon_4}\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}.$
- $-P(\xi_m, v_h) = P(\xi_m,(U-\phi)_{m+\frac{1}{2}}) = P(\xi_m,(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}} - z_{m+\frac{1}{2}}) \leq$
  $\leq (\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_3)\|\nabla\xi_m\|^2_{L^2(\Omega)} + \frac{\alpha^2_{sup}}{4\widetilde{\epsilon}_1}\left(\|\nabla(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}\right)+$
  $+(\frac{\sigma^2}{4\widetilde{\epsilon}_2}+\frac{M_2^2}{4\widetilde{\epsilon}_3})\left(\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}\right) + \widetilde{\epsilon}_4\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)}+$
  $\frac{C^2}{4\widetilde{\epsilon}_4}\left(\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} + \|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}\right) + \widetilde{\epsilon}_2\|\xi_m\|^2_{L^2(\Omega)}.$

Finalmente, para a segunda parcela do lado direito de (4.24),

- $-(\varsigma_m|v_h)_\Omega = (\varsigma_m|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}} - z_{m+\frac{1}{2}})_\Omega \leq \epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)} + \dfrac{1}{4\epsilon_5}\left(\|(u_\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}+\right.$
  $\left.+\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}\right).$

Assim, o lado direito da expressão (4.24) é majorado por

$$\begin{aligned}\mu_1\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} + \mu_2\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \mu_3\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} + \mu_4\|\nabla(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}+\\ +\mu_5\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \mu_6\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} + (\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_3)\|\nabla\xi_m\|^2_{L^2(\Omega)}+\\ +\widetilde{\epsilon}_2\|\xi_m\|^2_{L^2(\Omega)} + \widetilde{\epsilon}_4\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)} + \epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)} + (\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_\Omega.\end{aligned} \tag{4.25}$$

onde $\mu_1 = \epsilon_1+\epsilon_3+\dfrac{\alpha^2_{sup}}{4\widetilde{\epsilon}_1}$, $\mu_2 = \epsilon_2 + \dfrac{\sigma^2}{4\widetilde{\epsilon}_2} + \dfrac{M_2^2}{4\widetilde{\epsilon}_3} + \dfrac{1}{4\epsilon_5}$, $\mu_3 = \epsilon_4 + \dfrac{C^2}{4\widetilde{\epsilon}_4}$, $\mu_4 = \dfrac{\alpha^2_{sup}}{4\epsilon_1} + \dfrac{\alpha^2_{sup}}{4\widetilde{\epsilon}_1}$,
$\mu_5 = \dfrac{\sigma^2}{4\epsilon_2} + \dfrac{M_2^2}{4\epsilon_3} + \dfrac{\sigma^2}{4\widetilde{\epsilon}_2} + \dfrac{M_2^2}{4\widetilde{\epsilon}_3} + \dfrac{1}{4\epsilon_5}$ e $\mu_6 = \dfrac{C^2}{4\epsilon_4} + \dfrac{C^2}{4\widetilde{\epsilon}_4}$

Novamente usando o item iii) do teorema 3.1 (seção 3.2), temos que

$$\frac{\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)} - \|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}}{2\Delta t} + \beta\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} - \widetilde{\lambda}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}. \tag{4.26}$$

é uma cota inferior para o lado esquerdo de (4.24).

Assim, (4.24), (4.25) e (4.26) dão lugar à seguinte desigualdade:

$$\frac{\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)} - \|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}}{2\Delta t} + (\beta-\mu_1)\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} \;\leq\; (\mu_2+\widetilde{\lambda})\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \mu_3\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}+$$

$+(\mu_4+\mu_5+\mu_6)\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}+(\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_2+\widetilde{\epsilon}_3+\widetilde{\epsilon}_4)\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)}+\epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)}+$

$+(\dfrac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_\Omega$

Observando que $\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \dfrac{\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)}+\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}}{2}$, esta última desigualdade nos fornece:

$[1-\Delta t(\mu_2+\widetilde{\lambda})]\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)}+2(\beta-\mu_1-\mu_3)\Delta t\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} \leq [1+\Delta t(\mu_2+\widetilde{\lambda}+1)]\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}+$

$+2\Delta t(\mu_4+\mu_5+\mu_6)\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}+2\Delta t[(\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_2+\widetilde{\epsilon}_3+\widetilde{\epsilon}_4)\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)}+\epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)}]+$

$-\Delta t\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}+2\Delta t(\dfrac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_\Omega$

Fazendo,

- $1-\Delta t(\mu_2+\widetilde{\lambda})=c_1(\Delta t)$
- $1+\Delta t(\mu_2+\widetilde{\lambda}+1)=c_2(\Delta t)$
- $2(\beta-\mu_1-\mu_3)=c_3,$

a desigualdade acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}c_1(\Delta t)\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)}+c_3\Delta t\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} \leq c_2(\Delta t)\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}+2\Delta t(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}})_\Omega+\\ +2\Delta t(\mu_4+\mu_5+\mu_6)\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}+2\Delta t\left[(\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_2+\widetilde{\epsilon}_3+\widetilde{\epsilon}_4)\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)}+\epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)}\right]+\\ -\Delta t\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}.\end{aligned} \tag{4.27}$$

Definindo a função $F(\Delta t)=\dfrac{c_1(\Delta t)}{c_2(\Delta t)}$, escolhemos μ_2, $\widetilde{\lambda}$ e Δt tal que $0<\Delta t(\mu_2+\widetilde{\lambda})<\frac{1}{2}$. Assim, temos que existem constantes positivas $\widetilde{l}$ e $\widetilde{L}$ tais que $\widetilde{l}\leq F(\Delta t)\leq \widetilde{L}<1$. Da mesma forma, existem constantes positivas l e L tais que

$$l \leq \frac{F(\Delta t)^m}{c_2} \leq L < 1$$

Multiplicando (4.27) por $\dfrac{F(\Delta t)^m}{c_2}$ temos,

$$F(\Delta t)^{m+1}\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)} - F(\Delta t)^m\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)} + lc_3\Delta t\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} \leq$$
$$\leq 2L\Delta t(\mu_4+\mu_5+\mu_6)\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} - l\Delta t\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)} +$$
$$+2L\Delta t\left[(\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_2+\widetilde{\epsilon}_3+\widetilde{\epsilon}_4)\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)} + \epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)}\right] +$$
$$+2\Delta t\frac{F(\Delta t)^m}{c_2}\left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\right)_\Omega$$

Somando os termos desta última desigualdade com m variando de 0 a $M-1$, onde M é o número de passos no tempo e observando que

$$\sum_{m=0}^{M-1}\left[F(\Delta t)^{m+1}\|z_{m+1}\|^2_{L^2(\Omega)} - F(\Delta t)^m\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}\right] = F(\Delta t)^M\|z_M\|^2_{L^2(\Omega)} - \|z_0\|^2_{L^2(\Omega)},$$

obtemos

$$F(\Delta t)^M\|z_M\|^2_{L^2(\Omega)} + lc_3\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} - \|z_0\|^2_{L^2(\Omega)} \leq$$
$$\leq L\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}\left[2(\mu_4+\mu_5+\mu_6)\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} - \frac{l}{L}\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}\right] +$$
$$+2L\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}\left[(\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_2+\widetilde{\epsilon}_3+\widetilde{\epsilon}_4)\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)} + \epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)}\right] +$$
$$+\frac{2\Delta t}{c_2}\sum_{m=0}^{M-1}\left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|F(\Delta t)^m(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\right)_\Omega. \tag{4.28}$$

Voltamos agora nossa atenção para a última parcela do lado direito de (4.28). Usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz e novamente a desigualdade em D.2 (seção 3.2), existem $\delta_1,\ \delta_2 > 0$ tais que:

$$\frac{2\Delta t}{c_2}\sum_{m=0}^{M-1}\left(\frac{z_{m+1}-z_m}{\Delta t}|F(\Delta t)^m(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\right)_\Omega =$$
$$= \frac{2\Delta t}{c_2}\sum_{m=1}^{M-1}\left(z_m|\frac{F(\Delta t)^{m-1}(u-\phi)_{m-\frac{1}{2}} + F(\Delta t)^m(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}}{\Delta t}\right)+$$

$$+\frac{2}{c_2}\left[(z_M|F(\Delta t)^{M-1}(u-\phi)_{M-\frac{1}{2}})-(z_0|(u-\phi)_{\frac{1}{2}})\right]\leq$$

$$\leq\frac{2\Delta t}{c_2}\sum_{m=1}^{M-1}\left(\delta_1\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{4\delta_1\Delta t^2}\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}-(u-\phi)_{m-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}\right)+$$

$$+\frac{2}{c_2}\left[\delta_2\|z_M\|^2_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{4\delta_2}\|(u-\phi)_{M-1}\|^2_{L^2(\Omega)}+\delta_3\|z_0\|^2_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{4\delta_3}\|(u-\phi)_{\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}\right]$$

Portanto (4.28) pode ser escrita da seguinte forma:

$$(F(\Delta t)^M-\frac{2\delta_2}{c_2})\|z_M\|^2_{L^2(\Omega)}+lc_3\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}\leq$$

$$\leq 2L\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}(\mu_4+\mu_5+\mu_6)\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}+(1+\frac{2\delta_3}{c_2})\|z_0\|^2_{L^2(\Omega)}+$$

$$+2L\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}\left[(\widetilde{\epsilon}_1+\widetilde{\epsilon}_2+\widetilde{\epsilon}_3+\widetilde{\epsilon}_4)\|\xi_m\|^2_{H^1(\Omega)}+\epsilon_5\|\varsigma_m\|^2_{L^2(\Omega)}\right]+$$

$$+\Delta t\sum_{m=1}^{M-1}\left[(\frac{2\delta_1}{c_2}-l)\|z_m\|^2_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{2\delta_1c_2\Delta t^2}\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}-(u-\phi)_{m-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}\right]+$$

$$+\frac{1}{2\delta_2c_2}\|(u-\phi)_{M-1}\|^2_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{2\delta_3c_2}\|(u-\phi)_{\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}-l\Delta t\|z_0\|^2_{L^2(\Omega)}.$$

O fato de que $c_2>1$ implica que $\frac{2\delta_1}{c_2}-l<2\delta_1-l$. Escolhendo $\delta_1=\frac{l}{2}$ e uma vez que $\|z_0\|^2_{L^2(\Omega)}=\|u_0-U_0\|^2_{L^2(\Omega)}\leq\|u_0-\phi(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)}$ podemos concluir, finalmente que:

$$a_1\|z_M\|^2_{L^2(\Omega)}+lc_3\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}\leq 2L\Delta t\sum_{m=0}^{M-1}a_2\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)}+$$

$$+\frac{1}{2\delta_2c_2}\sum_{m=1}^{M-1}\frac{\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}-(u-\phi)_{m-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}}{\Delta t}+a_3\|u_0-\phi(0,.)\|^2_{L^2(\Omega)}+$$

$$+\frac{1}{2\delta_2c_2}\|(u-\phi)_{M-1}\|^2_{L^2(\Omega)}+\frac{1}{2\delta_3c_2}\|(u-\phi)_{\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)}+\text{ termos em }\Delta t^5. \tag{4.29}$$

onde $a_1=F(\Delta t)^M-\frac{2\delta_2}{c_2}$, $a_2=\mu_4+\mu_5+\mu_6$ e $a_3=1+\frac{2\delta_3}{c_2}-l\Delta t$.

Em síntese, obtivemos um limitante superior como aquele que foi obtido em (4.19), porém para a aproximação de Galerkin discreto, gerando taxas de convergência quando particularizamos a função ϕ - este procedimento pode ser visto em [12].

4.3 A Implementação Comentada

4.3.1 A Malha

A resolução do sistema de equações lineares (4.20) obtido na seção 4.2 depende, entre outras coisas, da construção de uma malha adequadamente dimensionada sobre o domínio $\Omega = \Omega_w \cup \Omega_a$ e uma adequada escolha das funções base do subespaço V_h, definindo assim os elementos finitos.

Em nosso domínio tridimensional optamos pelos tetraedros na discretização. Denotemos por $\{\Omega_e\}_{e=1}^{n_h}$ uma família finita de n_h tetraedros Ω_e, dois a dois disjuntos ou tendo como interseção toda uma face, toda uma aresta ou um vértice e tais que:

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{n_h} \Omega_e.$$

Associamos a esta malha o parâmetro $h = \max_e\{\text{diam}(\Omega_e)\}$ [2] e, desta forma, denotamos a família $\{\Omega_e\}_{e=1}^{n_h}$ por Υ_h

Dentre os diferentes subespaços de dimensão finita que podemos escolher para definir V_h, consideramos o espaço das funções polinomiais de três variáveis de grau menor ou igual a n definidos em Ω_e, ou seja, se $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$,

$$P_n(\Omega_e) = \{p : \Omega_e \to \mathbb{R} \ / \ p(x) = \sum_{\alpha \leq n} a_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3} x^{\alpha_1} y^{\alpha_2} z^{\alpha_3}, \ a_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3} \in \mathbb{R}\}.$$

Nas aproximações algorítmicas usaremos $n = 2$.

Este espaço tem dimensão finita, e cada função base assume um único valor em cada ponto ou nó da malha, característica de elementos finitos. Se nn_h denota o número total de nós, teremos então a mesma quantidade de funções polinomiais na base. Pelas características do problema, bem como pelo contexto do espaço funcional, resulta particularmente o subespaço:

$$V_h = \{\varphi \in C^0(\overline{\Omega}) \ / \ \varphi|_{\Omega_e} \in P_n(\Omega_e), \ \forall \ \Omega_e \in \Upsilon_h, \ \varphi|_{\Gamma_{12}} = 0\}$$

Nos cálculos dos elementos das matrizes A, B e d em (4.20) aparecem integrais envolvendo os elementos de V_{h_0}. Para facilitar estes cálculos, adotamos como base de V_h, as funções-teste

[2] A referência ao parâmetro h é relevante no seguinte sentido: para melhorar a aproximação discreta, não basta que nn_h (o número total de nós), aumente. Isto deve ocorrer com h tendendo a zero.

φ_i para as quais:

$$\varphi_i(b_j) = \delta_{ij},\ i, j = 1, 2, \ldots, nn,$$

sendo δ_{ij} a função delta de Kronecker e b_j o j-ésimo nó da malha com que se discretiza Ω. No caso de elementos de primeira ordem, para cada nó j $(1, 2, \ldots, nn)$, obtém-se uma função φ_j que é linear por partes. Assim, quando estamos trabalhando com um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, o aspecto geométrico de cada função φ_j é uma pirâmide virtual sobre cada elemento Ω_e, assumindo o valor 1 no j-ésimo nó e zero nos demais nós da malha [20].

A fim de facilitar a implementação, faremos todos os nossos cálculos no tetraedro com vértices $(0, 0, 0)$, $(0, 0, 1)$, $(1, 0, 0)$, e $(0, 1, 0)$, que será denotado por tetraedro de referência $(\hat{\Omega}_e)$, usando para cada integral que integra os elementos do sistema (4.20), uma conveniente transformação de variáveis (ver Apêndice A). Como podemos ver na Figura 4.3, cada tetraedro Ω_e em nosso domínio será relacionado com o tetraedo de referência por uma transformação afim T.

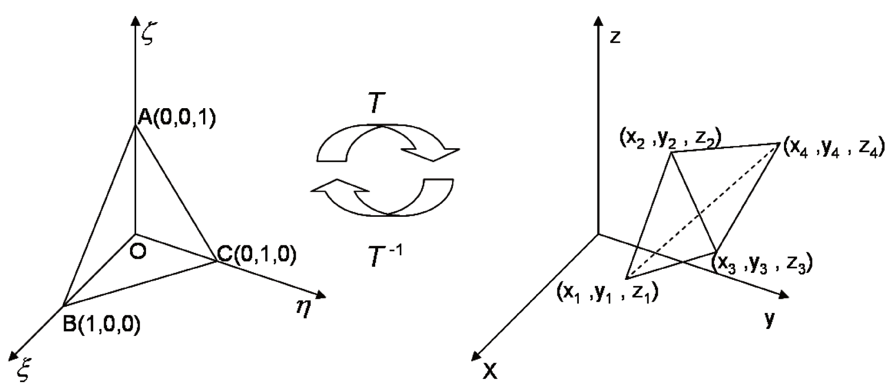

Figura 4.3: Transformação T

onde

$$T(\xi, \eta, \zeta) = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_4 - x_1 \\ y_2 - x_1 & y_3 - x_1 & y_4 - x_1 \\ z_2 - x_1 & z_3 - x_1 & z_4 - x_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$

Para o caso em que $n = 1$, as funções polinomiais $\varphi_i \in V_h$ correspondem aos elementos de primeira ordem, isto é, considerando apenas os vértices do tedraedro de referência, temos: (quatro funções-teste para quatro graus de liberdade)

$$\varphi_1 = 1 - x - y - z,\ \varphi_2 = x,\ \varphi_3 = y \ \text{ e } \ \varphi_4 = z.$$

É fácil verificar que as funções φ_1, φ_2, φ_3 e φ_4 assumem o valor 1 nos vértices O, A, B e C, respectivamente, e são nulas nos vértices restantes.

Para $n = 2$, o qual utilizaremos, as funções polinomiais $\varphi_i \in V_h$ correspondem a elementos de segunda ordem, isto é, consideramos os vértices e os pontos médios das arestas do tetraedro de referência para determinarmos as dez funções φ_i (dez graus de liberdade: quatro vértices e os pontos médios das seis arestas). Assim, temos:

$$\varphi_1 = 1 - 3(x + y + z) + 2(x^2 + y^2 + z^2) + 4(xy + xz + yz),\ \varphi_2 = 4x - 4x^2 - 4xy - 4xz,$$

$$\varphi_3 = -x + 2x^2,\ \varphi_4 = 4xy,\ \varphi_5 = -y + 2y^2,\ \varphi_6 = 4y - 4y^2 - 4xy - 4yz,$$

$$\varphi_7 = 4z - 4z^2 - 4xz - 4yz,\ \varphi_8 = 4xz,\ \varphi_9 = 4yz,\ \text{ e }\ \varphi_{10} = -z + 2z^2.$$

Montagem da Malha

A seguir, faremos alguns comentários (de modo sucinto) a respeito da montagem da malha. Primeiramente vamos recordar o domínio de nosso problema visto no capítulo 1.

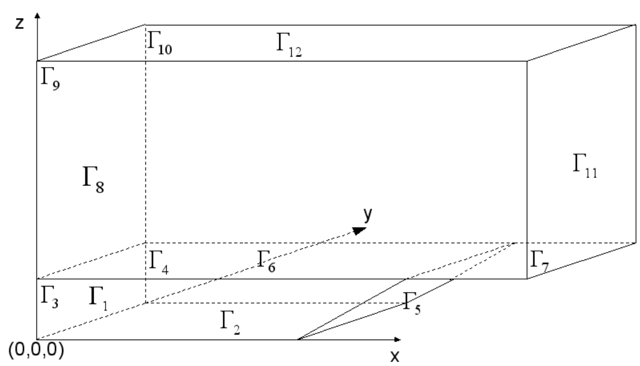

Figura 4.4: Domínio do Problema Ω

A numeração dos nós começa na origem de nosso referencial , a interseção das faces Γ_1, Γ_2 e Γ_3. A Figura 4.5 ilustra esta situação.

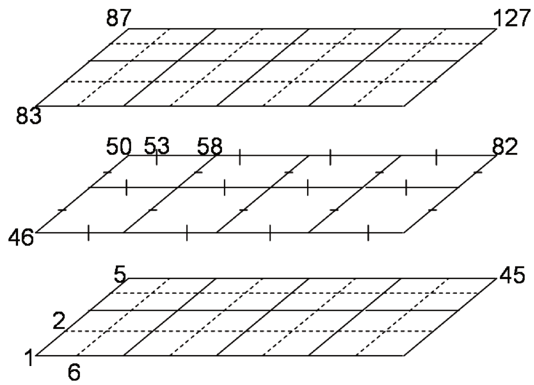

Figura 4.5: Nós - 1 nível

Com esta numeração montamos os tetraedros referente ao primeiro nível, cujos tipos estão descritos na Figura 4.6:

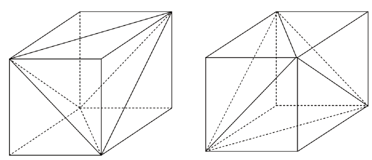

Figura 4.6: Cubos Padrões

Observe-se que precisamos desses dois tipos de posição de tetraedros, pois se montarmos a malha com apenas uma posição de tetraedro, teremos interseções entre elementos que não serão face, aresta e nem mesmo um vértice. Na Figura 4.7, a montagem da direita ilustra a situação errada e a montagem da esquerda a situação correta.

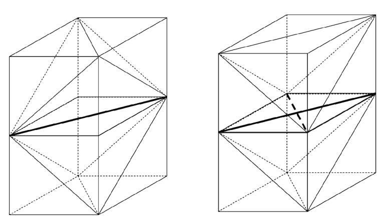

Figura 4.7: Colocação dos Tetraedros

O número de tetraedros (ou elementos finitos) na água é 1480 e no ar é 5280, totalizando 6760 tetraedros discretizando nosso domínio. Já o números de nós na água é 2951 e no ar é

8889, totalizando assim 11840 nós.

Finalmente, na tabela 4.1 logo abaixo, apresentamos as dimensões de nosso domínio que foram usadas nas simulações.

Tabela 4.1: *Dimensões do domínio*

	altura em z	comprimento em y	comprimento em x
Ar	0,02 km	0,24 km	0,88 km (superfície e margem)
Água	0,18 km	0,24 km	0,72 km (fundo) e 0,76 km (superfície)

4.3.2 SUPG

Conforme os valores do campo vetorial pelos termos de transporte existe a possibilidade de que soluções numéricas obtidas através do método aqui adotado sejam corrompidas por oscilações; isto acontecerá em casos de problemas com convecção ou advecção dominantes que extrapolem o núcleo de Péclet [3]. Estas oscilações podem ser evitadas fazendo um adequado refinamento da malha, mas com um alto custo computacional. Uma alternativa para resolvermos este problema é o método *Streamline Upwind Petrov-Galerkin* (SUPG) introduzido por Brooks e Huges (*op. cit.*), cuja idéia básica é modificar as funções peso residual para o termo convectivo do Método dos Elementos Finitos. Esta modificação atua na direção do fluxo, evitando a excessiva difusibilidade presente nas soluções obtidas através de outros métodos, sem introduzir difusão artificial e perder consistência. As funções modificadas são da forma:

$$\widetilde{\varphi}_i = \varphi_i + \psi_i$$

onde φ_i são as funções-teste que geram V_h e ψ_i são funções decontínuas que só atuam na direção do campo de velocidades, as quais dependem tanto do campo de velocidades $\overrightarrow{V}$, como do número de Péclet $P_e = \frac{|\overrightarrow{V}|h}{2\alpha}$.

Substituindo as novas funções na expressão (3.2), obtemos a formulação SUPG:

$$\sum_e \int_{\Omega_e} (\frac{\partial u_h}{\partial t} - Div(-\alpha \nabla u_h + \overrightarrow{V} u_h) + \sigma u_h - f)\psi_i d\Omega + (\frac{\partial u_h}{\partial t}|\varphi_j)_\Omega + P(t; u_h, \varphi_j) = (f|\varphi_j).$$

Como em Codina [8], vamos considerar neste trabalho:

$$\psi_i = \tau_e \overrightarrow{V} \circ \nabla \varphi_i, \text{ com } \tau = (\coth(P_e) - \frac{1}{P_e})\frac{1}{2|\overrightarrow{V}|}.$$

O processo para calcular τ_e é descrito nos seis passos relacionados abaixo, conforme o procedimento que aparece em [7], já incorporado com sucesso em diversos trabalhos correlatos ([4], [10] e [36])

1: Calcular a norma euclideana da média aritmética das velocidades características $\overrightarrow{V}_e$ dos nós do tetraedro Ω_e.

2: A partir dos vetores velocidade no elemento Ω_e, usar a transformação afim T da seção anterior para determinar os vetores correspondentes no tetraedro de referência. Aplicar o passo 1 a estas velocidades para obter a velocidade característica $\overrightarrow{V}_{ref}$.

3: Calcular o comprimento característico h_e dado por $h_e = 0,7\frac{|\overrightarrow{V}_e|}{|\overrightarrow{V}_{ref}|}$.

4: Calcular o número de Péclet γ_e, dado por $\frac{h_e|\overrightarrow{V}_e|}{2\alpha}$.

5: Calcular a função upwind $\epsilon = \coth(\gamma_e) - \frac{1}{\gamma_e}$.

6: Calcular o tempo intrínseco $\tau_e = \frac{\epsilon h_e}{2|\overrightarrow{V}_e|}$.

Analogamente ao que foi feito nas seções 4.1.1 e 4.2.1, podemos obter as mesmas estimativa para o erro com SUPG, bastando para isto supor que:

- $u(\ .\ ,t), \dfrac{\partial u}{\partial t}(\ .\ ,t) \in L^2((0,T];L^2(\Omega))$,

- $\dfrac{\partial u}{\partial x}(\ .\ ,t), \dfrac{\partial u}{\partial y}(\ .\ ,t), \dfrac{\partial u}{\partial z}(\ .\ ,t) \in L^2((0,T];H^1(\Omega))$,

- escolher $v = v_h + \tau_e \overrightarrow{V}_h \circ \nabla v_h = \phi - u_h$, com $\phi \in L^2(0,T;V_h)$ para Galerkin contínuo e

- escolher $v_h + \tau_e \overrightarrow{V}_h \circ \nabla v_h = (\phi - U)_{m+\frac{1}{2}}$ ou, equivalentemente, $v_h + \tau_e \overrightarrow{V}_h \circ \nabla v_h =$ $= (\phi - u)_{m+\frac{1}{2}} + z_{m+\frac{1}{2}}$ onde $\phi \in L^2((0,T];V_h)$ para Galerkin com Crank-Nicolson.

4.3.3 Campo de Velocidades

Neste trabalho, a fim de aproximar uma situação mais real referente à circulação no meio aquático, consideraremos um campo de velocidades na água obtido através das equações de *Stokes*, isto é,

$$\begin{aligned} \mu\Delta W_1 &- \nabla P + f = 0 \\ \mathrm{div} W_1 &= 0 \\ W_1(x) &= g(x), \forall x \in \Gamma_g \\ \left.\frac{\partial W_1}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_h} &= h \end{aligned}$$

Aqui, o domínio espacial Ω denota um conjunto aberto e limitado do $\mathbb{R}^3$ tal que $\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_g \cup \Gamma_h$ e $\emptyset \neq \overline{\Gamma_g \cap \Gamma_h}$, μ é o coeficiente de viscosidade, W_1 é a velocidade, P é a pressão e f, no presente caso nula, é a força.

Em [36], Saavedra-Vásquez desenvolve uma rotina de simulações que foi implementada usando Elementos Finitos. Esta rotina utiliza as condições dadas nas fronteiras do domínio para fornecer a circulação de uma porção aquática (no presente caso é uma porção marítima).

Em nosso trabalho, adaptamos esta rotina às nossas condições de contorno para obtermos a circulação no meio aquático $\Omega^{(2)}$. Em dias onde o vento é muito forte, a cirulação no meio aquático sofre influência direta do vento e, neste caso, além das condições de contorno dadas pela entrada do canal que forma o lago (Γ_1 e Γ_5 na Figura 4.8), incluímos também a ação do vento na superfície (Γ_6).

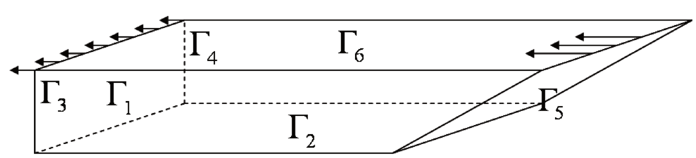

Figura 4.8: Fronteiras em $\Omega^{(2)}$ - Stokes

Capítulo 5

RESULTADOS

Neste capítulo apresentaremos alguns cenários típicos [1] simulando a dispersão de poluentes em corpos aquáticos com dimensões superficiais não muito grandes ou com grande profundidade.

Uma das maiores dificuldades na Modelagem Matemática é a obtenção dos parâmetros, pois nem sempre conseguimos dados na literatura e com os diversos orgãos que possam estar envolvidos no poblema.

5.1 Cenários e Simulações

Embora um dos principais interesses do presente trabalho seja o de obter aproximações numéricas de confiabilidade quantitativa, *outputs* gráficas[2] e, portanto, de caráter qualitativo têm imensa utilidade para a Matemática Aplicada em termos da visualização do comportamento evolutivo da presença de material impactante nas sucessivas "fatias"que descrevem o domínio. Este tipo de saída é, também, de interesse a profissionais de outras áreas - justamente pela visualização do comportamento estudado.

A seguir relembramos os coeficientes de nosso problema e apresentamos duas tabelas, uma com as características dos experiemntos - Tabela 5.1 e a outra com os parâmetros das discretizações - Tabela 5.2, facilitando assim o entendimento do que foi feito nas próximas quatro seções.

- $\alpha^{(1)} \rightarrow$ coeficiente de difusão no ar e $\alpha^{(2)} \rightarrow$ coeficiente de difusão na água,
- $g \rightarrow$ entrada de poluente no ar (deriva) e $f \rightarrow$ fonte na água,
- $\beta_1 \rightarrow$ passagem ar-água e $\beta_2 \rightarrow$ passagem água-ar,

[1]embora sem acesso a todos os parâmetos envolvidos. Neste caso alguns foram estimados.

[2]as simulações foram obtidas através de códigos utilizando o ambiente MATLAB® do LBMA/IMECC.

- $\sigma_1 \rightarrow$ decaimento no ar e $\sigma_2 \rightarrow$ decaimento na água,

- $k_s \rightarrow$ perda na terra e $k_f \rightarrow$ perda no fundo e margem,

Na Tabela 5.1 apresentamos as características dos experimentos (ou cenários) considerados nessa tese.

Tabela 5.1: *Características dos Experimentos*

	Seção	Deriva	Fonte na água	Ventos em Superfície
Experimento 1	5.1.1	Sim	Não	Não
Experimento 2	5.1.2	Sim	Sim	Não
Experimento 3	5.1.3	Não	Sim	Não
Experimento 4	5.1.4	Não	Sim	Sim

Na tabela 5.2 constam os parâmetros referentes às discretizações espacial e temporal. Estes valores foram os mesmos em todas as simulações.

Tabela 5.2: *Parâmetros da discretização*

Parâmetros	**Valores**	**Unidades**
Δx	0,04	km
Δy	0,03	km
Δz_w	0,01	km
Δz_a	0,03	km
Δt	0,02	horas

Para o campo de velocidades no ar, em dias de ventos normais, adotamos um perfil parabólico com fluxo laminar, no qual as velocidades usadas foram: 20 km/h a 180 metros do solo e zero na superfície. Já na água, a circulação e dada pela entrada do canal que forma o lago (via Stokes - neste caso usamos uma velocidade de 1 km/h). Como usaremos em várias simulações esta situação para o campo de velocidades, vamos nos referir a este cenário como situação padrão simplesmente.

Foram dois tipos de graficos para os experimentos:

1) Um gráfico, cuja unidade de medida é a concentração (g/l), mostrando vários níveis com cortes paralelos ao plano-xy (as "fatias") nas alturas:

- 0 (fundo),

- Δz_w (nível intermediário na água),

- $2\Delta z_w$ (superfície na água),
- $2\Delta z_w$ (superfície no ar),
- $2\Delta z_w + \Delta z_a$ (primeiro nível no ar),
- $2\Delta z_w + 2\Delta z_a$ (segundo nível no ar),
- $2\Delta z_w + 3\Delta z_a$ (terceiro nível no ar),
- $2\Delta z_w + 4\Delta z_a$ (quarto nível no ar) e
- $2\Delta z_w + 5\Delta z_a$ (quinto ou penúltimo nível no ar).

2) Um gráfico (com a mesma unidade de medida citada no item anterior) mostrando um corte paralelo ao plano-xz em $y = 4\Delta y$.

5.1.1 Cenários com Deriva

Em nosso primeiro experimento - cenário, consideramos que há deriva e que não há fontes no meio aéreo ou aquático, situação que será diferente a da Seção 5.1.2 onde, além da deriva, teremos uma fonte no meio aquático. Observamos também que o valor da deriva será o mesmo.

Neste caso, o resultado esperado combina a presença do material impactante introduzido no meio aéreo através de um pedaço da fronteira esquerda (deriva em Γ_{11}) com a passagem para o meio aquático através da superfície ar-água (Γ_6). Assim, podemos esperar um aumento da quantidade de mateial impactante no meio aquático. Isto se pode ver na coluna à direita das figuras 5.1-5.3 e na figura 5.4. Quanto aos campos de velocidades no ar e na água, teremos a situação padrão, ou seja, perfil parabólico no ar e Stokes na água como mencionado anteriormente. Na Tabela 5.3 encontramos os valores para os coeficientes desta situação.

Tabela 5.3: *Parâmetros com Deriva*

Param.	**Valores**	**Unidades**	**Param.**	**Valores**	**Unidades**
$\alpha^{(1)}$	0,05	km^2/h	β_2	0	km/h
$\alpha^{(2)}$	0,007	km^2/h	σ_1	0,0001	h^{-1}
g	0,002	(g/l)(km/h)	σ_2	0,0002	h^{-1}
f	0	(g/l)/h	k_s	0,001	km/h
β_1	0,0001	km/h	k_f	0,008	km/h

A faixa em marrom no terceiro gráfico da coluna central representa a terra - margem do corpo aquático (figuras 5.1-5.3).

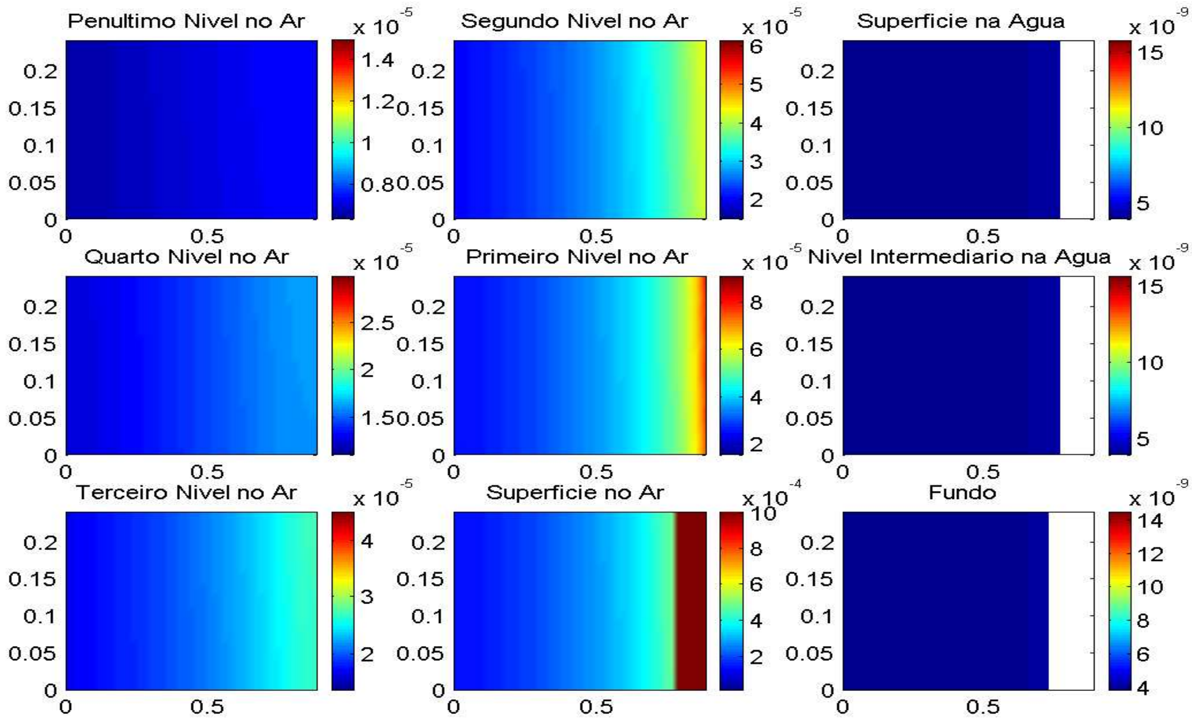

Figura 5.1: Deriva, T = 2 u.t.

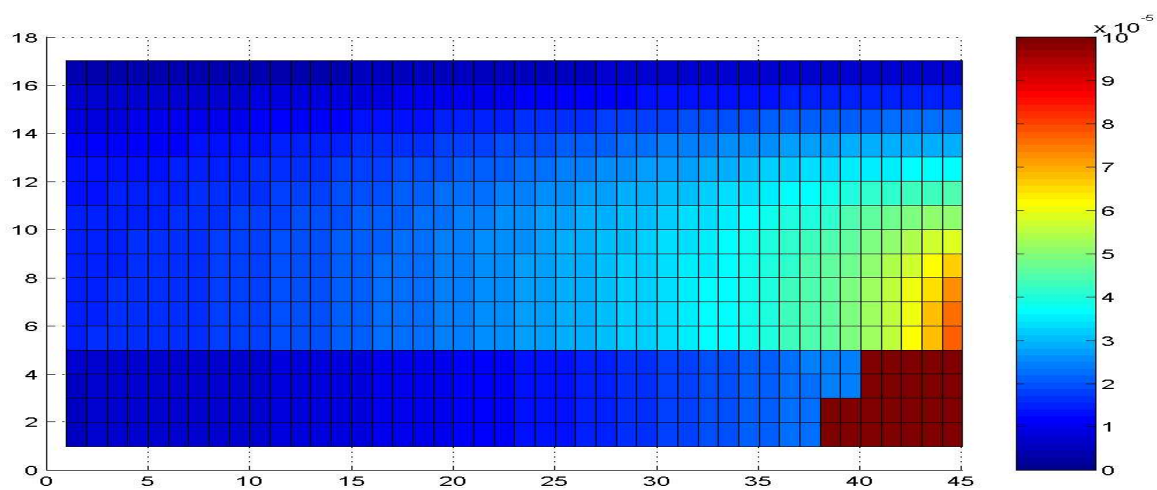

Figura 5.2: Deriva, T = 2 u.t.

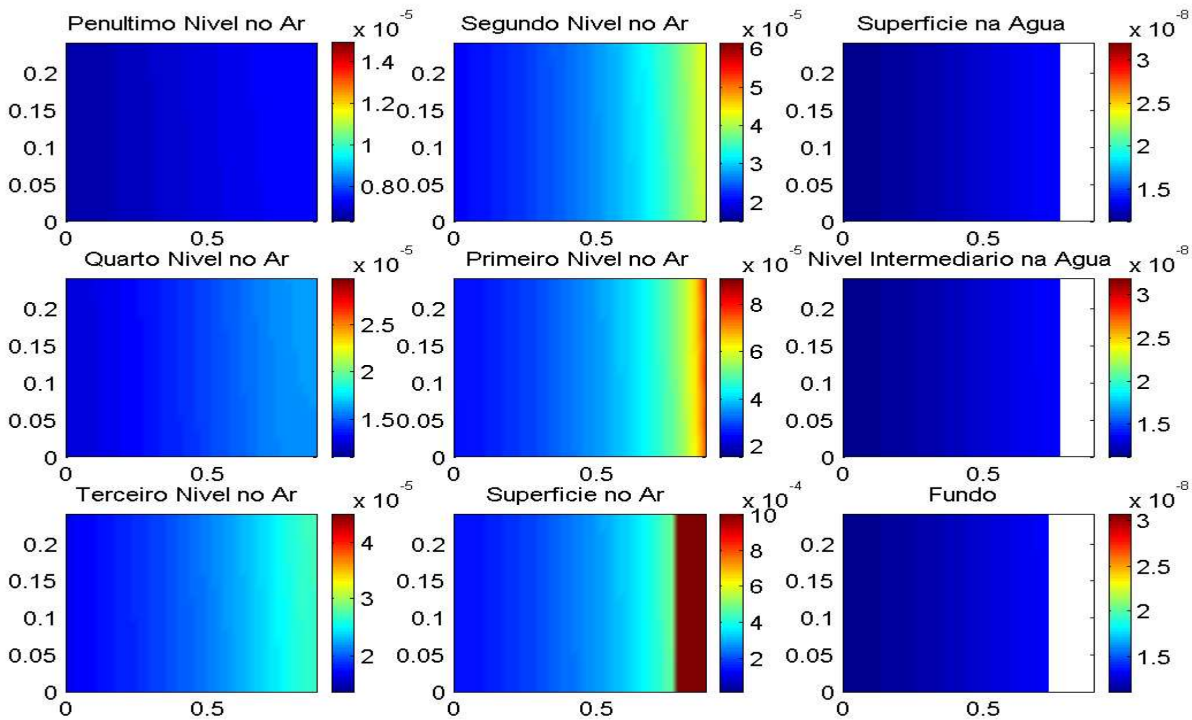

Figura 5.3: Deriva, T = 4 u.t.

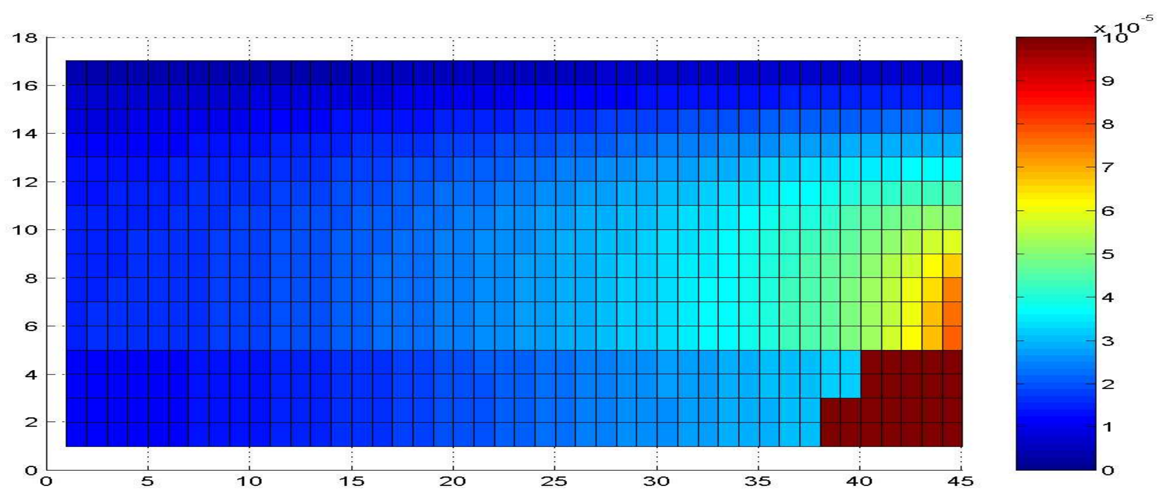

Figura 5.4: Deriva, T = 4 u.t.

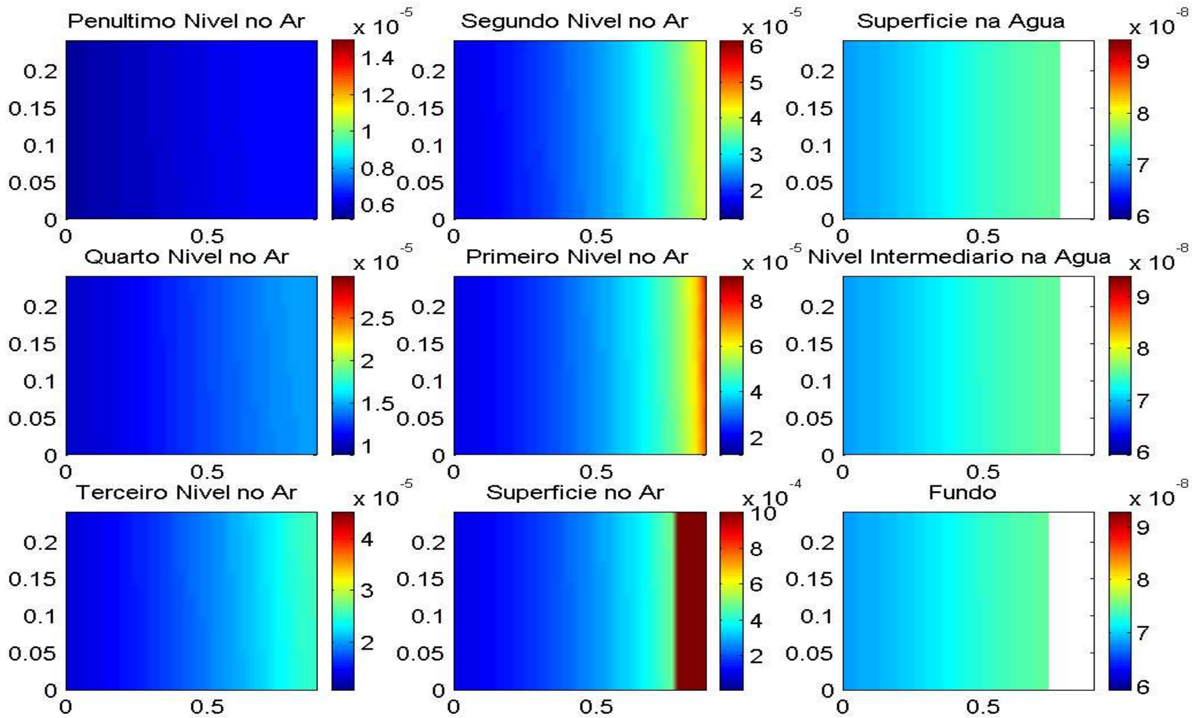

Figura 5.5: Deriva, T = 10 u.t.

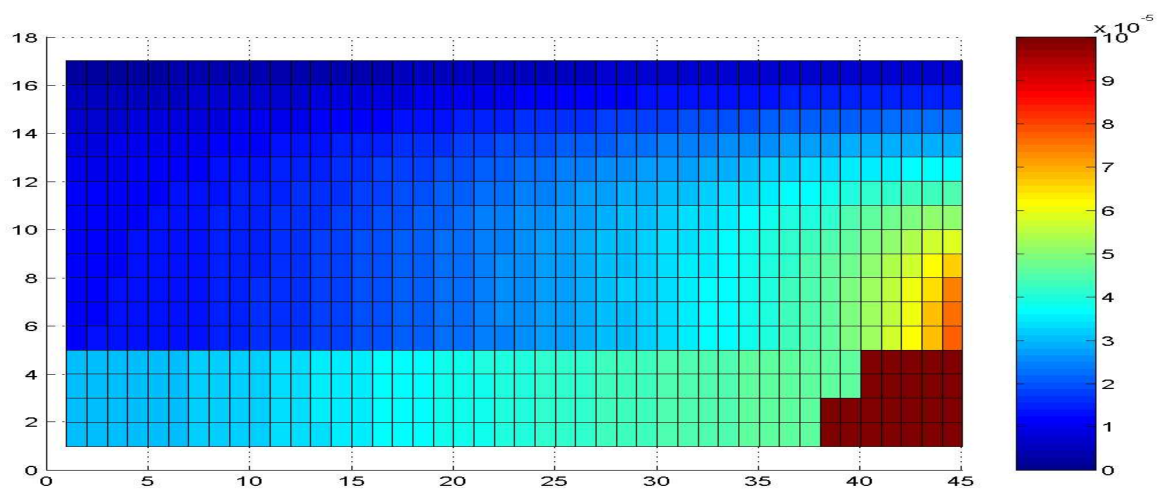

Figura 5.6: Deriva, T = 10 u.t.

Nos próximos dois cenários não temos mais a deriva a partir de $T = 15$ u.t.; deste modo faremos os gráficos apenas do meio aquático, uma vez que no meio aéreo a quantidade do material impactante vai se tornar nula devido à passagem para a água. Assim, o resultado esperado é uma diminuição da quantidade de material impactante com o decorrer do tempo, cuja verificação se pode ver na figura 5.5.

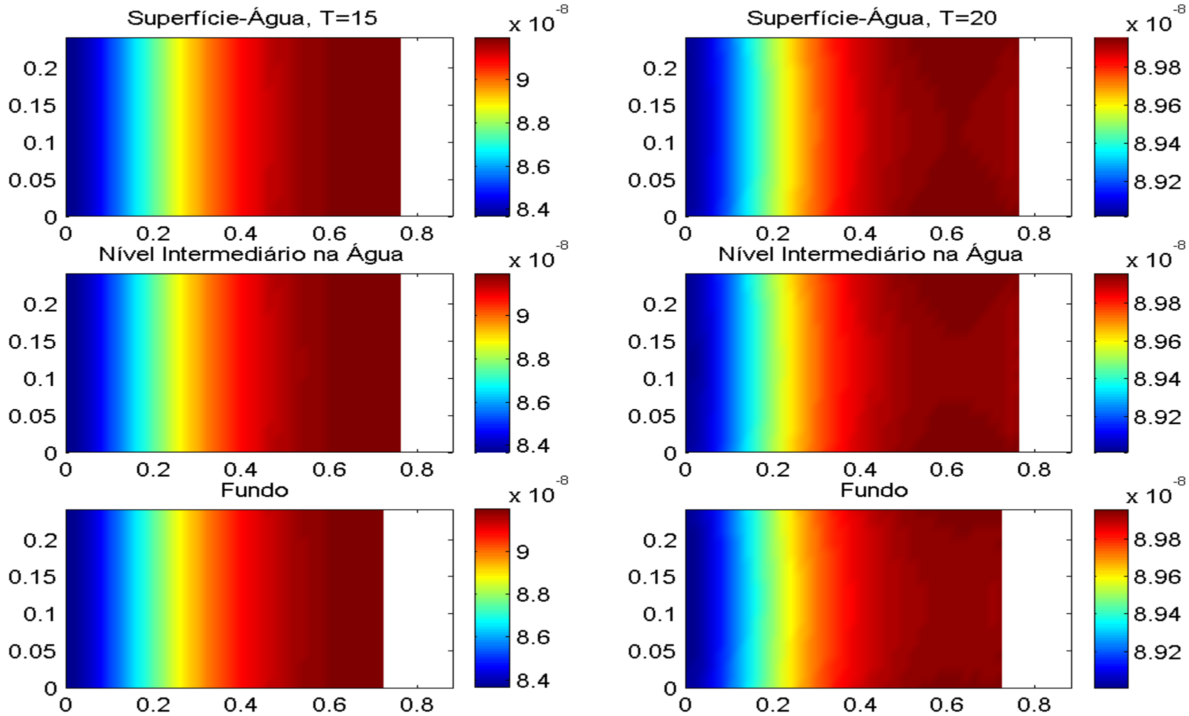

Figura 5.7: Sem Deriva, T = 15 e 20 u.t.

5.1.2 Cenários com Deriva e Fonte na Água

Como dito na seção anterior, neste experimento - cenário, o valor da deriva continua o mesmo, temos também uma fonte pontual no meio aquático e a passagem é do ar para a água, situação diferente a da Seção 5.1.3 onde teremos uma fonte pontual (com o mesmo valor adotado aqui) e passagem da água para o ar.

Neste caso, além da passagem do material impactante para o meio aquático, o resultado esperado combina a presença do material impactante por deriva com uma fonte pontual na lateral direita (no primeiro gráfico da coluna à direita, a borda superior) do lago. Assim, além de resultados como os das figuras 5.1-5.5, deverá aparecer a influência da fonte. Isto se pode ver nas partes superiores das figuras 5.6-5.8 na coluna à direita: nitidamente (embora pequena) se percebe a influência da fonte citada. Na Tabela 5.4 encontramos os valores para os coeficientes desta situação.

Tabela 5.4: *Parâmetros com Deriva e Fonte na Água*

Param.	**Valores**	**Unidades**	**Param.**	**Valores**	**Unidades**
$\alpha^{(1)}$	0,05	km^2/h	β_2	0	km/h
$\alpha^{(2)}$	0,007	km^2/h	σ_1	0,0001	h^{-1}
g	0,002	(g/l)(km/h)	σ_2	0,0002	h^{-1}
f	0,000025	(g/l)/h	k_s	0,001	km/h
β_1	0,0001	km/h	k_f	0,008	km/h

Nestes cenários, novamente trabalhamos com a situação padrão para os campos de velocidades e a parte marrom no terceiro gráfico da coluna central representa a margem (terra).

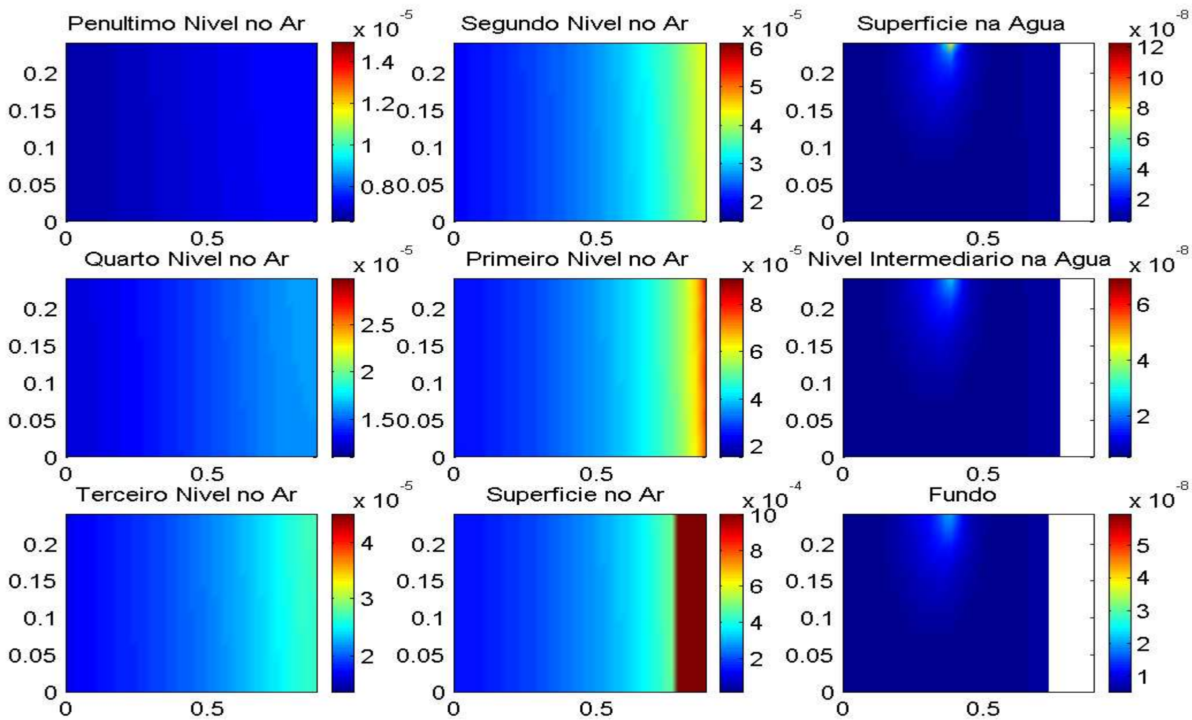

Figura 5.8: Deriva e Fonte na Água, T = 2 u.t.

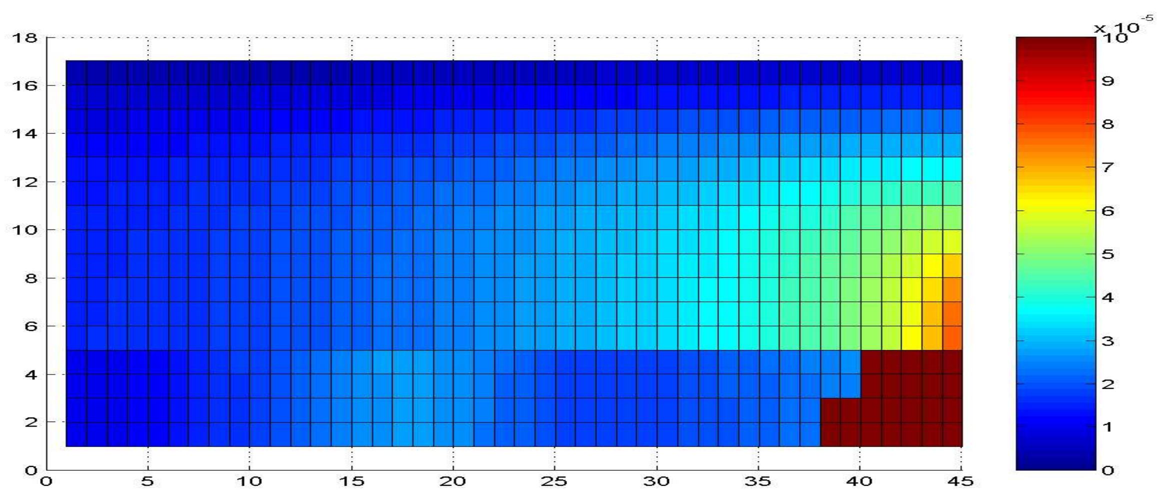

Figura 5.9: Deriva e Fonte na Água, T = 2 u.t.

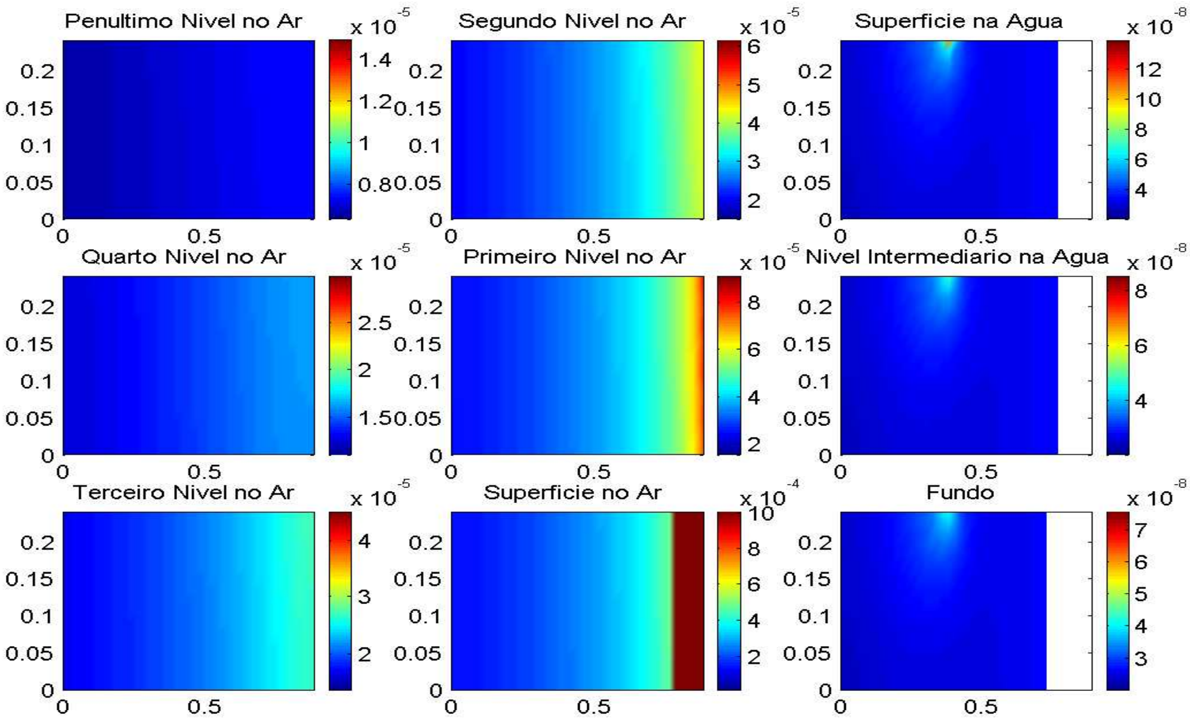

Figura 5.10: Deriva e Fonte na Água, T = 4 u.t.

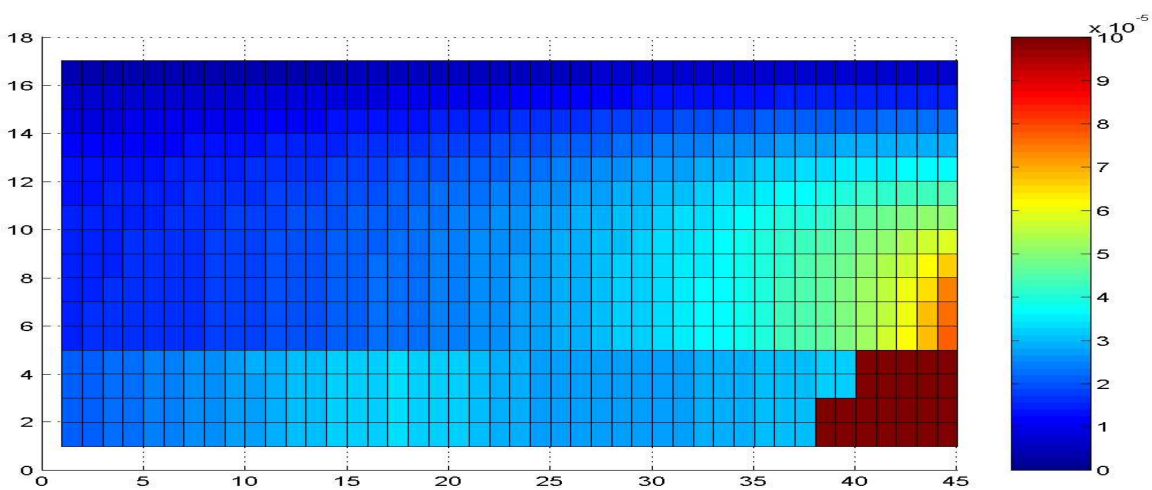

Figura 5.11: Deriva e Fonte na Água, T = 4 u.t.

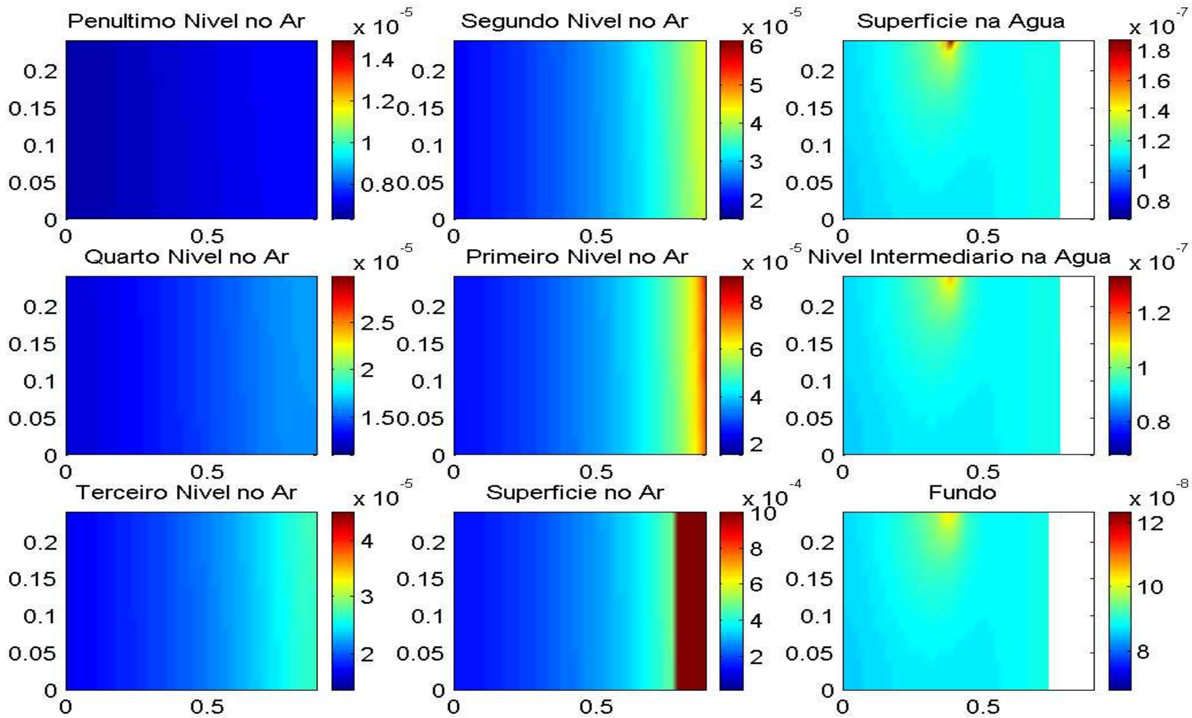

Figura 5.12: Deriva e Fonte na Água, T = 10 u.t.

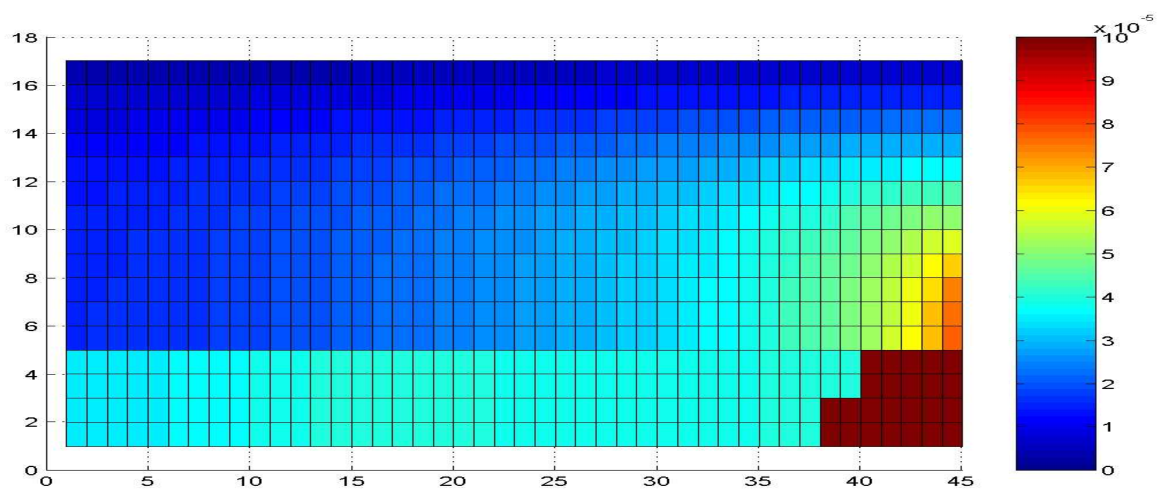

Figura 5.13: Deriva e Fonte na Água, T = 10 u.t.

5.1.3 Cenários com Fonte na Água

Agora relembramos que temos somente uma fonte pontual na água (com o mesmo valor da Seção 5.1.2), não temos mais a deriva e a passagem é da água para o ar.

Neste caso, o resultado esperado combina a presença do material impactante dada por uma fonte pontual na lateral direita (no primeiro gráfico da coluna à direita, a borda superior) do lago com a passagem para o meio aéreo (em Γ_6). Novamente os campos de velocidades continuam os mesmos (a situação padrão), situação que não teremos mais na Seção 5.1.4. Na Tabela 5.5 encontramos os valores para os coeficientes desta situação.

Tabela 5.5: *Parâmetros com Fonte na Água*

Param.	**Valores**	**Unidades**	**Param.**	**Valores**	**Unidades**
$\alpha^{(1)}$	0,05	km^2/h	β_2	0,0001	km/h
$\alpha^{(2)}$	0,007	km^2/h	σ_1	0,0001	h^{-1}
g	0	(g/l)(km/h)	σ_2	0,0002	h^{-1}
f	0.001	(g/l)/h	k_s	0,001	km/h
β_1	0	km/h	k_f	0,008	km/h

Observe que agora a dinâmica do material impactante é da água para o ar, situação contrária aos cenários vistos anteriormente. Quanto à margem, esta continua em destaque na cor marrom (terceiro gráfico da coluna central).

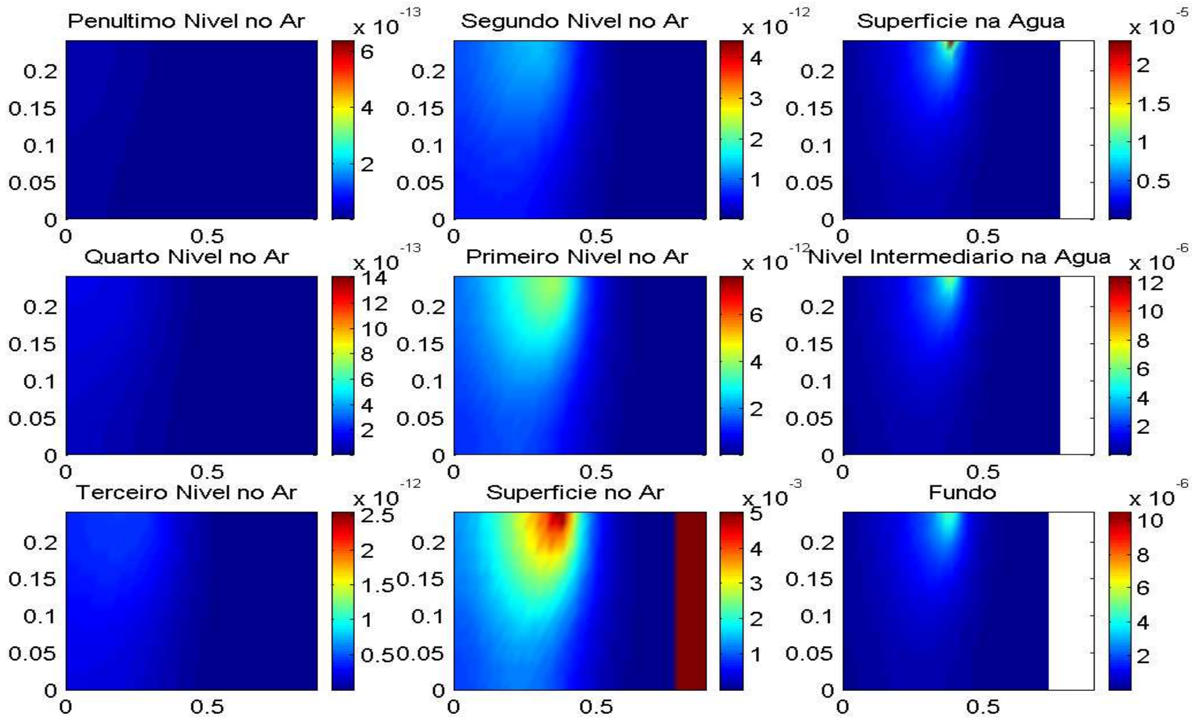

Figura 5.14: Fonte na Água, T = 2 u.t.

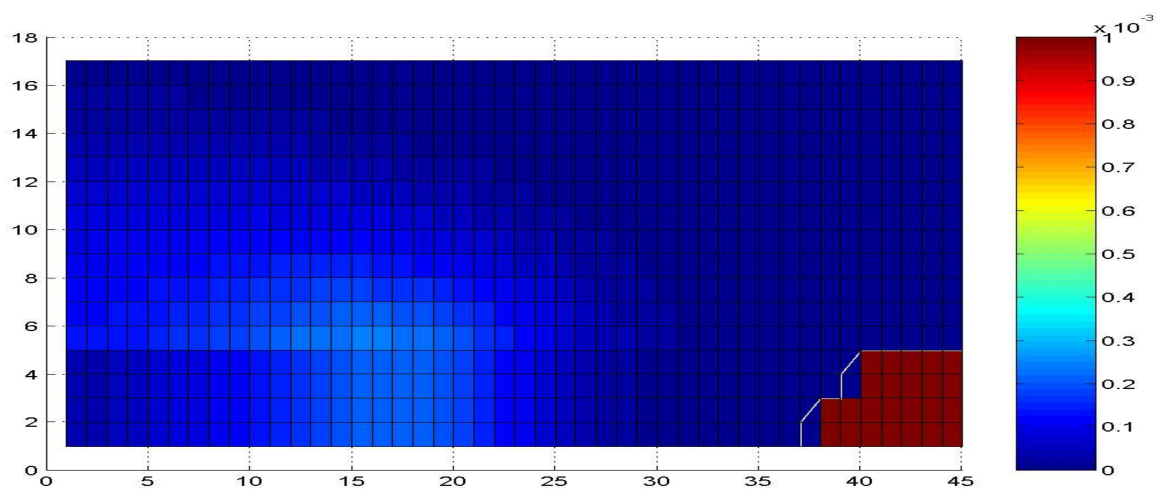

Figura 5.15: Fonte na Água, T = 2 u.t.

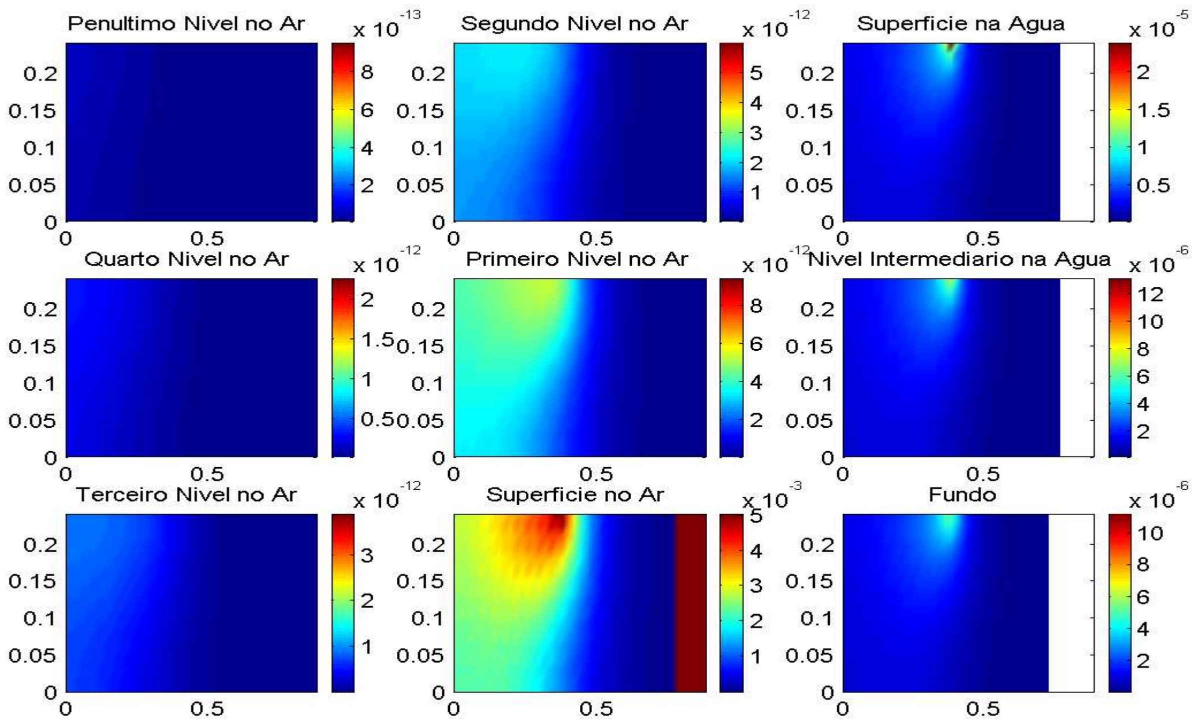

Figura 5.16: Fonte na Água T = 4 u.t.

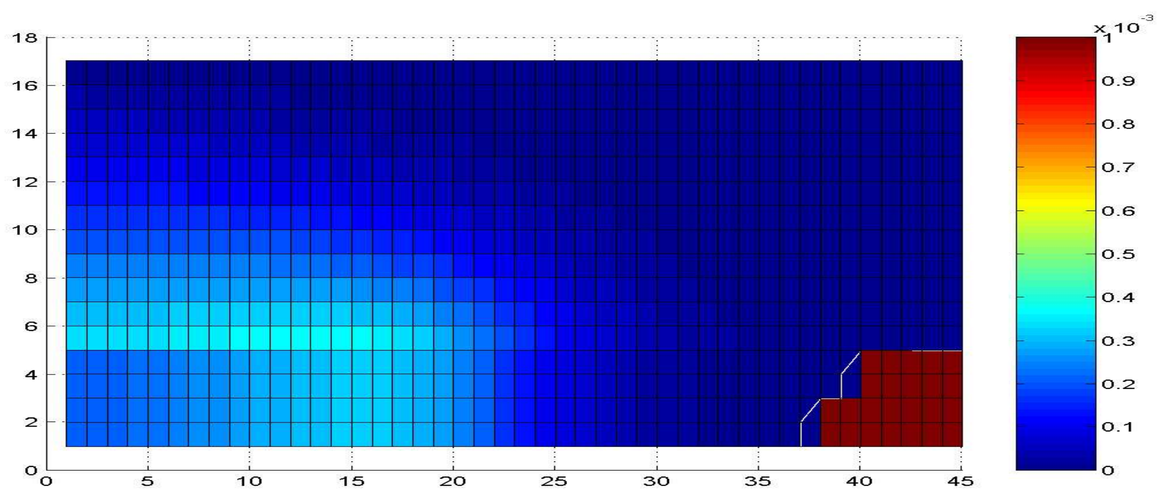

Figura 5.17: Fonte na Água, T = 4 u.t.

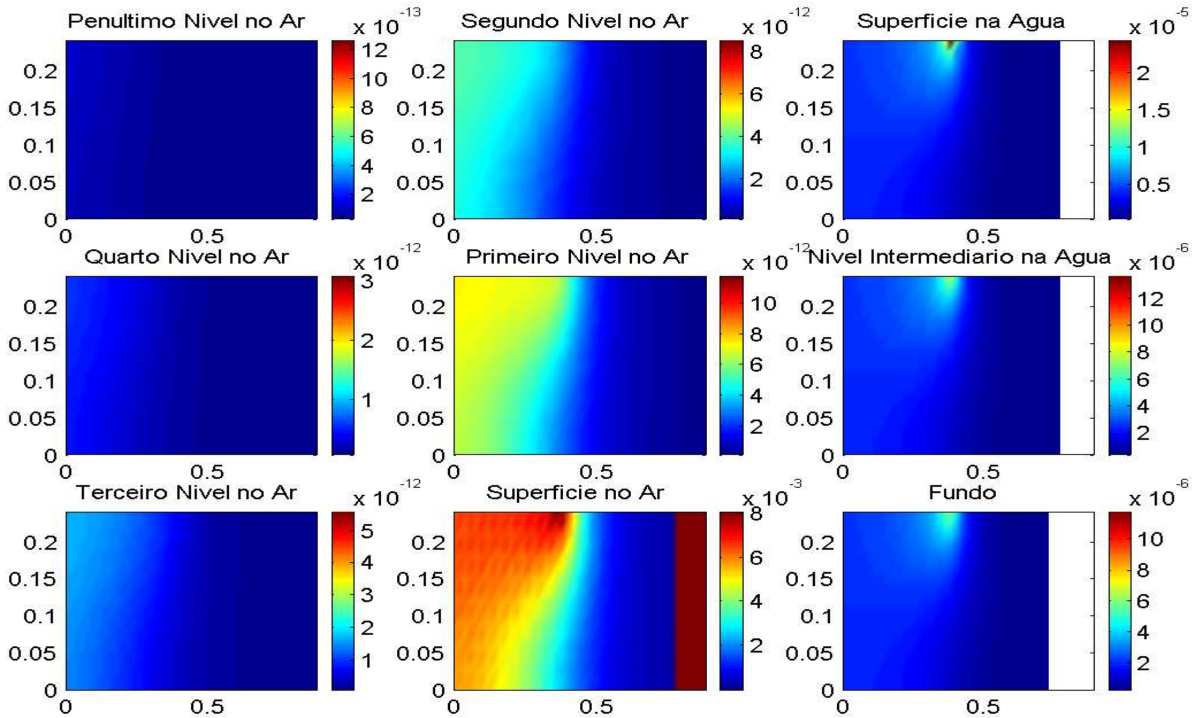

Figura 5.18: Fonte na Água T = 10 u.t.

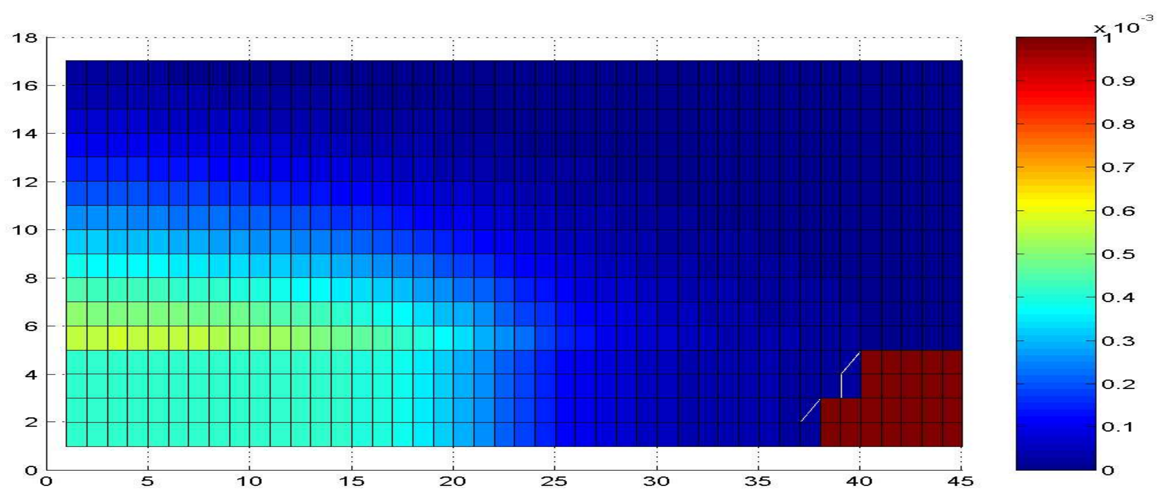

Figura 5.19: Fonte na Água, T = 10 u.t.

5.1.4 Cenários com Fonte na Água e Vento Moderado

Como mencionado no final do capítulo 4, apresentaremos agora alguns cenários com a predominância de ventos moderados, isto é, ventos compreendidos entre 5 km/h e 15 km/h. Nesse experimento - cenário, temos a mesma situação da Seção 5.1.3 quanto ao valor da fonte. A diferença está na circulação que, no meio aquático, que sofre influência direta dos ventos mais fortes. Para obtermos a circulação no meio aquático, utilizamos como condição de contorno na superfície para a equação de Stokes, uma proporção de 3% dos valores -9 Km/h e 14 Km/h e zero em x, y e z respectivamente para os ventos.

Neste caso, o resultado esperado combina a presença do material impactante proveniente de uma fonte pontual na lateral direita (no primeiro gráfico da coluna à direita, a borda superior[1]) do lago com uma ação mais forte do vento. Assim, se comparado com a situação apresentada na seção 5.1.3 (figuras 5.9 - 5.11) deverá aparecer uma forte influência do vento no meio aquático provocando um deslocamento da pluma de material impactante na direção imposta pelo vento. Isto se pode ver nas figuras 5.12 - 5.14[2]. Na Tabela 5.6 encontramos os valores para os coeficientes desta situação.

Tabela 5.6: *Parâmetros com Fonte na Água e Vento Moderado*

Param.	**Valores**	**Unidades**	**Param.**	**Valores**	**Unidades**
$\alpha^{(1)}$	0,05	km^2/h	β_2	0,0001	km/h
$\alpha^{(2)}$	0,007	km^2/h	σ_1	0,0001	h^{-1}
g	0	(g/l)(km/h)	σ_2	0,0002	h^{-1}
f	0.001	(g/l)/h	k_s	0,001	km/h
β_1	0	km/h	k_f	0,008	km/h

Aqui, a margem está representada em marrom no terceiro gráfico da coluna central. O período de tempo ilustrado é mais curto do que em casos vistos anteriormente, devido à dispersão mais rápida que ocorre neste caso. Os demais ensaios realizados não são aqui apresentados em função de uma repetição de padrões evolutivos de comportamento, especialmente em termos usuais.

[1]Esta escolha se deve ao propósito de simular a siuação de fato dos Igapós que motivam o presente trabalho, com suas possíveis fontes pontuais.

[2]O autor agradece a sugestão da Prof$^{a.}$ Dr$^{a.}$ Sandra M. C. Malta, por ocasião do XXIX CNMAC de Campinas, de incluir situações de predominância do vento também na circulação do meio aquático.

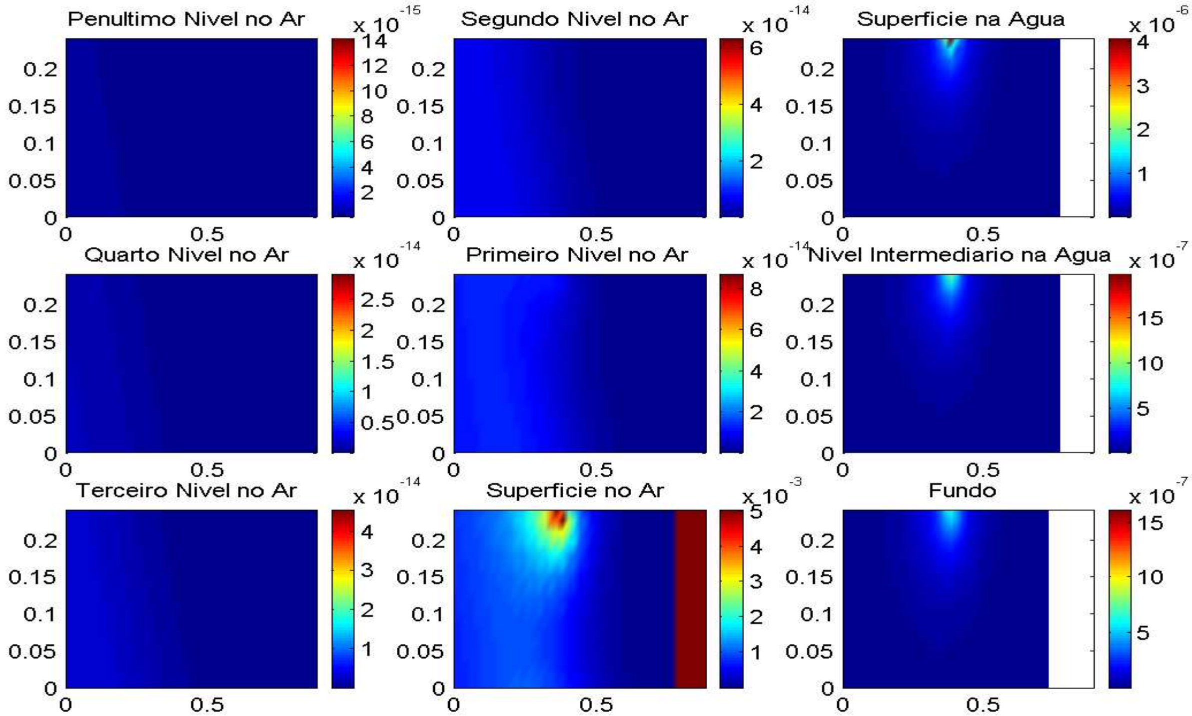

Figura 5.20: Fonte na Água e Vento Moderado, T = 2 u.t.

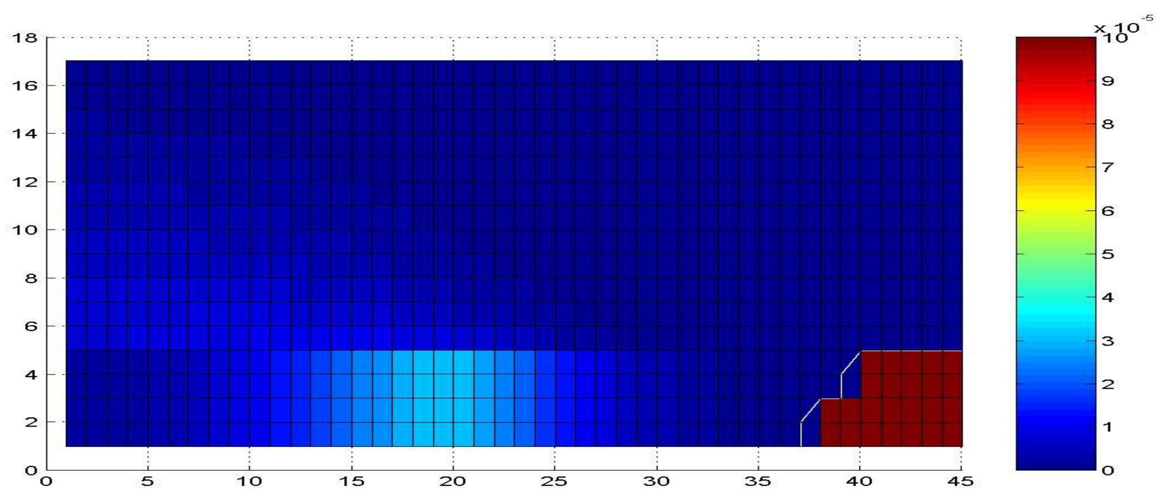

Figura 5.21: Fonte na Água e Vento Moderado, T = 2 u.t.

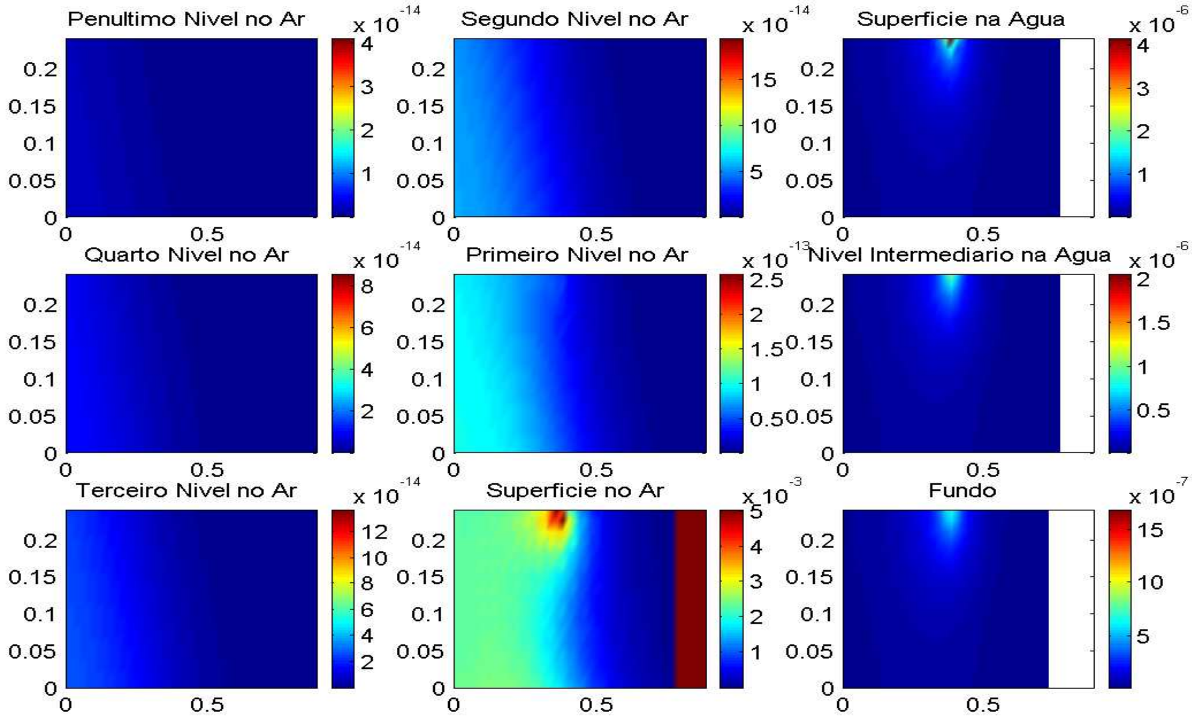

Figura 5.22: Fonte na Água e Vento Moderado, T = 4 u.t.

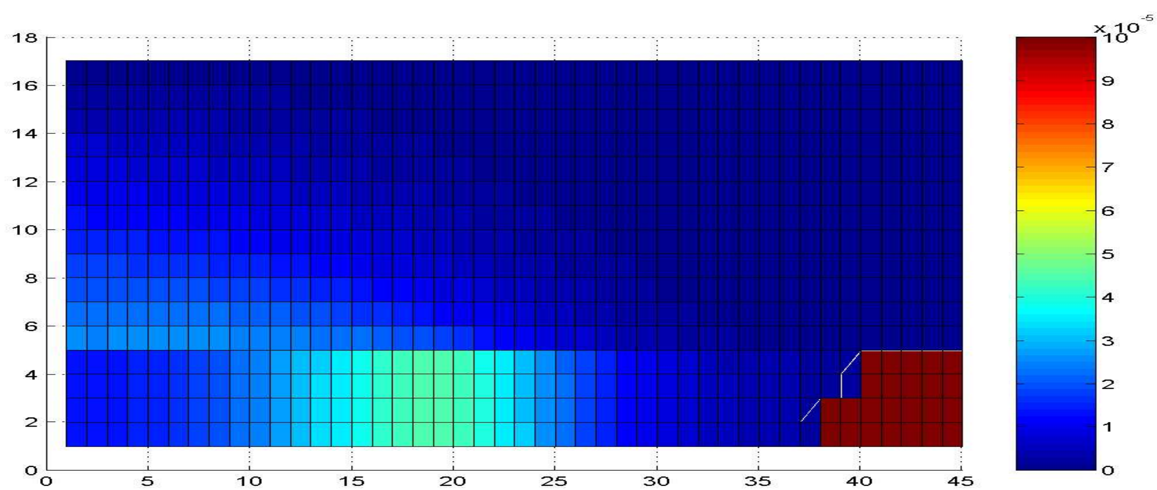

Figura 5.23: Fonte na Água e Vento Moderado, T = 4 u.t.

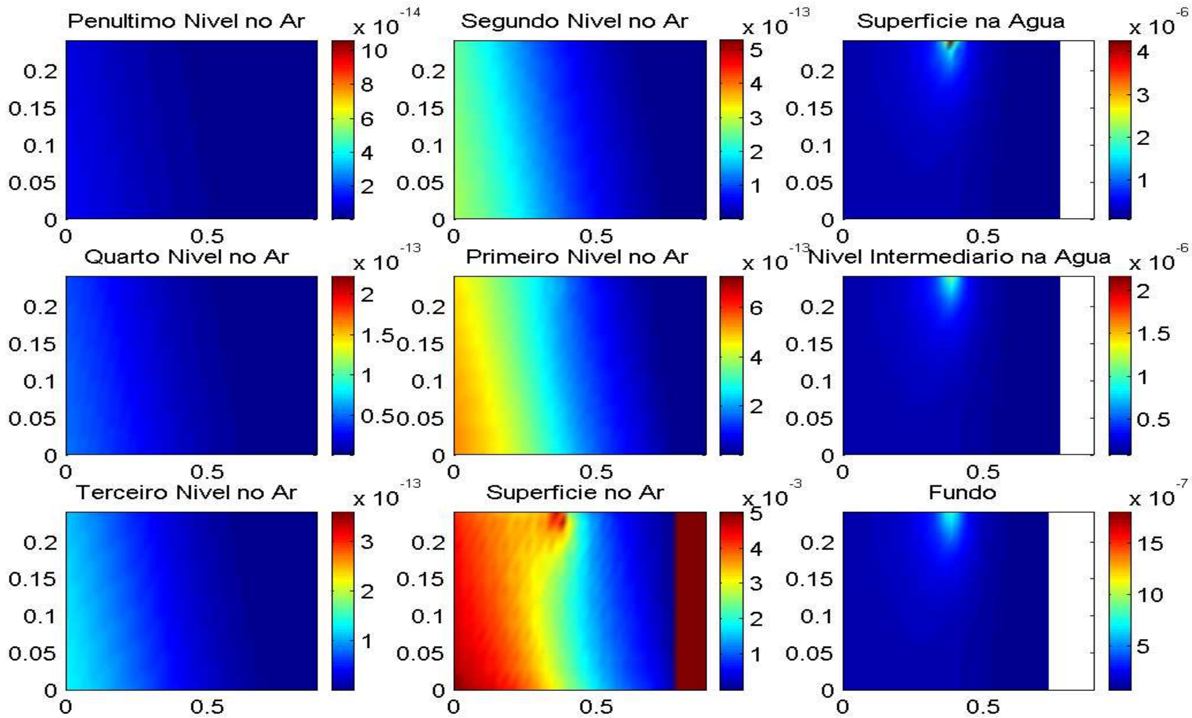

Figura 5.24: Fonte na Água e Vento Moderado, T = 10 u.t.

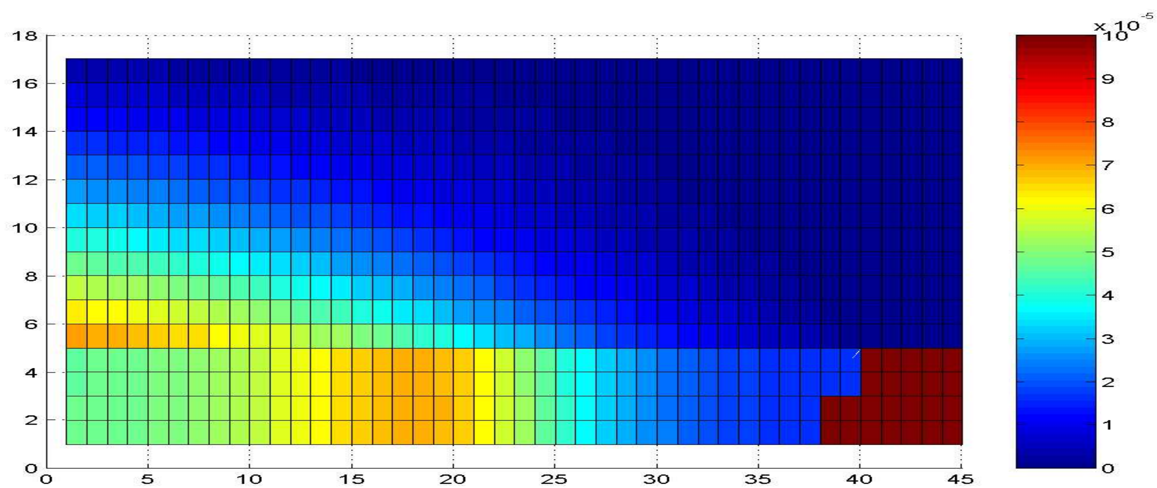

Figura 5.25: Fonte na Água e Vento Moderado, T = 10 u.t.

5.2 Conclusões

Este modelo, introduz um aspecto inovador que é o de considerar uma numeração dupla dos nós na superfície junto com uma dupla condição de Robin (bi-dimensional) nesta mesma fronteira. Isto foi necessário para se trabalhar com os meios aéreo e aquático separadamente, uma vez que a passagem do material impactante ocorre a todo o tempo em toda a superfície que forma a interface.

Na simulações apresentadas, os resultados mostraram-se totalmente de acordo com as expectativas para os fenômenos considerados, principalmente com uma intuição adquirida no estudo de trabalhos anteriores do grupo ([11] e [36]). Em tais cenários o processo de difusão, o transporte e a passagem de material impactante de um meio para o outro (dada pela citada condição de Robin na superfície) foram compatíveis com o esperado, mesmo com condições bastante variadas nas diversas simulações, que incluíram: condição de Dirichlet homogênea, Von Neumann homogênea, Robin, Robin dupla e entrada do poluente por deriva.

O uso de técnicas SUPG, permitiram uma maior liberdade em relação aos termos de transporte, ou seja, foi possível trabalhar com dados de ventos bastante mais próximos de realidades locais como, por exemplo, as de dias de ventos significativamente mais fortes.

Destacamos neste texto o tratamento teórico original, que nos garante existência e unicidade da solução do problema em sua formulação variacional e também a convergência dos métodos de Galerkin discreto e contínuo nas situações apresentadas, resultados que exigiram a adaptação e a modificação de resultados anteriores para as situações aqui consideradas.

Outro destaque em termo da computação científica envolvida e que merece ser comentado é o de trabalhar com elementos finitos tri-dimensionais de segunda ordem em concordância com a descrição do domínio apresentado, suas características geométricas e as inerentes dificuldades algorítmicas.

Apesar de termos trabalhado com um domínio de geometria regular (a não ser, evidentemente, pela margem submersa inclinada do corpo aquático denominada, na modelagem, de fronteira Γ_5), o código principal (Anexo B) independe totalmente desta situação sendo facilmente adaptado mesmo se viermos considerar domínios bem mais irregulares, bastando para isso, introduzir uma nova malha de elementos finitos descritiva da situação de domínio a ser trabalhada. Em outras palavras a simulação numérica resultantes independe, nesse sentido, de especificidades geométricas do domínio.

5.3 Considerações Finais

Cabem alguns comentários finais sobre aquilo que este trabalho aponta como possíveis desafios futuros. Em primeiro lugar, a robustez do programa nos anima a procurar parcerias com profissionais de áreas relacionadas ao meio ambiente para a avaliação de estratégias de descarte de materiais impactantes. As condições de descarte usadas na modelagem parecem abrir o espectro de situações efetivamente achadas na realidade.

Na modelagem e nas consequentes simulações numéricas, os parâmetros usados para a difusibilidade foram considerados constantes no espaço e no tempo. Outros trabalhos do grupo de Ecologia Matemática abordaram situações de difusibilidade variando no tempo, ou com a própria concentração do poluente, algo que, na formulação variacional leva a modelagens muito semelhantes àquelas aqui desenvolvidas, inclusive em termos dos algoritmos implementados.

Há, também, outros desafios instigantes, como o de incluir, na modelagem, considerações estocásticas e de natureza "fuzzy", introduzindo na modelagem determinista aqui adotada incertezas de certa forma naturais.

Além disso, há outras perspectivas de trabalho futuro, como a de abordar estudo de casos específicos no ambiente acadêmico, estudando-os e usando o trabalho aqui apresentado no estudo, na análise e na crítica de situações locais e nas quais, de fato, mesmo que não de direito, ocorrem impactos ambientais de relevância ecossistêmica.

Apêndice A

Cálculo dos Produtos Internos

Além do que foi rapidamente comentado na seção 4.3.1, cabe destacar como foram feitos os cálculos dos produtos internos que aparecem no sistema (4.19). Da transformação dada nesta seção temos:

$$x(\xi,\eta,\zeta) = x_1 + (x_2 - x_1)\xi + (x_3 - x_1)\eta + (x_4 - x_1)\zeta$$

$$y(\xi,\eta,\zeta) = y_1 + (y_2 - y_1)\xi + (y_3 - y_1)\eta + (y_4 - y_1)\zeta$$

$$z(\xi,\eta,\zeta) = z_1 + (z_2 - z_1)\xi + (z_3 - z_1)\eta + (z_4 - z_1)\zeta$$

e

$$\varphi_{\hat{i}}(\xi,\eta,\zeta) = \varphi_i(x(\xi,\eta,\zeta), y(\xi,\eta,\zeta), z(\xi,\eta,\zeta))$$

Assim,

$$\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial \xi} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \xi}$$

$$\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial \eta} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial \zeta} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \zeta} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \zeta} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \zeta}$$

ou

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial \xi} &= \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(x_2 - x_1) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}(y_2 - y_1) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}(z_2 - z_1)\\
\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial \xi} &= \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(x_3 - x_1) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}(y_3 - y_1) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}(z_3 - z_1)\\
\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial \xi} &= \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(x_4 - x_1) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}(y_4 - y_1) + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z}(z_4 - z_1)
\end{aligned}
$$

Chamando de T_{ij} o determinante da matriz obtida de T retiradas a linha i e a coluna j, obtemos:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} &= \frac{T_{11}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x} - \frac{T_{12}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y} + \frac{T_{13}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\\
\frac{\partial \varphi_i}{\partial y} &= -\frac{T_{21}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x} + \frac{T_{22}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y} - \frac{T_{23}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\\
\frac{\partial \varphi_i}{\partial z} &= \frac{T_{31}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x} - \frac{T_{32}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y} + \frac{T_{33}}{detT}\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}
\end{aligned}
$$

Portanto, os produtos internos que aperecem no sistema (4.19) são calculados da seguinte foma:

$$
(\varphi_j|\varphi_i) = |detT|\left(\varphi_{\hat{j}}|\varphi_{\hat{i}}\right),
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}\right) &= \frac{T_{11}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{11}T_{21}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right)\right] +\\
&+ \frac{T_{11}T_{31}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right)\right] + \frac{T_{21}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) +\\
&- \frac{T_{21}T_{31}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right)\right] + \frac{T_{31}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}\right) &= \frac{-T_{11}T_{12}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{11}T_{22}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{11}T_{32}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) +\\
&+ \frac{T_{21}T_{12}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{21}T_{22}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{21}T_{32}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) +\\
&- \frac{T_{31}T_{12}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{31}T_{22}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{31}T_{32}}{|detT|}\left(\frac{\partial \varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial \varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial z}\right) &= \frac{T_{11}T_{13}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{11}T_{23}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{11}T_{33}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&- \frac{T_{21}T_{13}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{21}T_{23}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{21}T_{33}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&+ \frac{T_{31}T_{13}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{31}T_{23}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{31}T_{33}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}\right) &= \frac{-T_{12}T_{11}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{12}T_{21}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{12}T_{31}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&+ \frac{T_{22}T_{11}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{22}T_{21}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{22}T_{31}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&- \frac{T_{32}T_{11}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{32}T_{21}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{32}T_{31}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial y}\right) &= \frac{T_{12}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{12}T_{22}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right)\right] + \\
&+ \frac{T_{12}T_{32}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right)\right] + \frac{T_{22}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \\
&- \frac{T_{22}T_{32}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right)\right] + \frac{T_{32}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial z}\right) &= \frac{-T_{12}T_{13}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{12}T_{23}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{12}T_{33}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&+ \frac{T_{22}T_{13}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{22}T_{23}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{22}T_{33}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&- \frac{T_{32}T_{13}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{32}T_{23}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{32}T_{33}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}\right) &= \frac{T_{13}T_{11}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{13}T_{21}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{13}T_{31}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&- \frac{T_{23}T_{11}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{23}T_{21}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{23}T_{31}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&+ \frac{T_{33}T_{11}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{33}T_{21}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{33}T_{31}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial y}\right) &= \frac{-T_{13}T_{12}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{13}T_{22}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{13}T_{32}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&+ \frac{T_{23}T_{12}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{23}T_{22}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \frac{T_{23}T_{32}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \\
&- \frac{T_{33}T_{12}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + \frac{T_{33}T_{22}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - \frac{T_{33}T_{32}}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\varphi_j}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial z}\right) &= \frac{T_{13}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - \frac{T_{13}T_{23}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right)\right] + \\
&+ \frac{T_{13}T_{33}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial x}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right)\right] + \frac{T_{23}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + \\
&- \frac{T_{23}T_{33}}{|detT|}\left[\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial y}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right)\right] + \frac{T_{33}^2}{|detT|}\left(\frac{\partial\varphi_{\hat{j}}}{\partial z}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
\end{aligned}
$$

$$
\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}\right) = T_{11}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - T_{21}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + T_{31}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
$$

$$
\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial y}\right) = -T_{12}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) + T_{22}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) - T_{32}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right),
$$

$$
\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}\right) = T_{13}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial x}\right) - T_{23}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial y}\right) + T_{33}\left(\varphi_j \text{ (ou 1)}|\frac{\partial\varphi_{\hat{i}}}{\partial z}\right).
$$

Apêndice B

Os Códigos Computacionais

```
%------------------------------------------------------------------------
%  Programa principal
%------------------------------------------------------------------------
clear all
%------------------------------------------------------------------------
% CARREGANDO ARQUIVOS
%------------------------------------------------------------------------
load malha3D
load smr3D
load intfrontF
load intfrontL
load intfrontI
load velocUo
load velocVo
load velocWo
%------------------------------------------------------------------------
% DADOS DO DOMINIO ESPACIAL
%------------------------------------------------------------------------
nnl = 10;            % no. de nos locais
%------------------------------------------------------------------------
% DADOS DO DOMINIO TEMPORAL
tfinal = 5;
nt = 250;  % no. de iteracoes
dt = tfinal/nt;  % delta t
```

```
%-----------------------------------------------------------------------
% CAMPOS DE VELOCIDADES
Vxw = Uo;
Vyw = Vo;
Vzw = Wo;
%Vxa = 0.0001*ones(nna,1);  % velocidade em x
Vya = 0*ones(nna,1);  % velocidade em y
Vza = 0*ones(nna,1); % velocidade em z
zv=2*dz;
for i=1:inda1
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+dza/2;
for i=inda1+1:inda1+inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+dza;
for i=inda1+inda2+1:2*inda1+inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+3*dza/2;
for i=2*inda1+inda2+1:2*inda1+2*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+2*dza;
for i=2*inda1+2*inda2+1:3*inda1+2*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+5*dza/2;
for i=3*inda1+2*inda2+1:3*inda1+3*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+3*dza;
for i=3*inda1+3*inda2+1:4*inda1+3*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+7*dza/2;
for i=4*inda1+3*inda2+1:4*inda1+4*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
```

```
zv=2*dz+4*dza;
for i=4*inda1+4*inda2+1:5*inda1+4*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+9*dza/2;
for i=5*inda1+4*inda2+1:5*inda1+5*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+5*dza;
for i=5*inda1+5*inda2+1:6*inda1+5*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+11*dza/2;
for i=6*inda1+5*inda2+1:6*inda1+6*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
zv=2*dz+6*dza;
for i=6*inda1+6*inda2+1:7*inda1+6*inda2
    vxar(i)=427.35*zv^2-0.6837;
end
Vxa=-vxar';
Vx=[Vxw; Vxa];
Vy=[Vyw; Vya];
Vz=[Vzw; Vza];
%-------------------------------------------------------------------------
% COEFICIENTES DO PROBLEMA
%-------------------------------------------------------------------------
alfw = 0.007;   % difusibilidade na agua
alfa = 0.05;   % difusibilidade no ar
sigw = zeros(nelw,1); %0.00;  % decaimento na agua
siga = zeros(nela,1);  % decaimento no ar
sig  =[sigw; siga];
ka   =0.001; % perda na terra
kw   = 0.001;    % perda no fundo e margem
betw = 0.01;  % passagem agua-ar
beta = 0.0;   % passagem ar-agua
g    = 0;    % entrada de poluente
f=zeros(nn,1);
deriva=g*ones(nn,1);
```

```
%-----------------------------------------------------------------------
% FONTE NA AGUA
%f(nnw-((2*ny+1)*(2*nx+1+2)-1)/2+9)=1;
%-----------------------------------------------------------------------
% FONTE NO AR
%f(nn-2*inda-2)=0.2;
%f(nn-2*inda-inda1+2)=0.2;
E = sparse(nn-inda1,nn-inda1); D = sparse(nn-inda1,nn-inda1);
h = zeros(nn-inda1,1); deriva = zeros(nn-inda1,1);
%-----------------------------------------------------------------------
% AGUA
for e =1:nelw
    J =zeros(3,3);
    % jacobiano da transformacao
    for s=1:2
        J(s,1)= x(e,2*s+1)-x(e,1);
        J(s,2)= y(e,2*s+1)-y(e,1);
        J(s,3)= z(e,2*s+1)-z(e,1);
     end
  J(3,1)=x(e,10)-x(e,1); J(3,2)=y(e,10)-y(e,1); J(3,3)=z(e,10)-z(e,1);
  J11=det(J(2:3,2:3)); J21=det(J(1:2:3,2:3)); J31=det(J(1:2,2:3));
  J12=det(J(2:3,1:2:3)); J22=det(J(1:2:3,1:2:3)); J32=det(J(1:2,1:2:3));
  J13=det(J(2:3,1:2));J23=det(J(1:2:3,1:2));J33=det(J(1:2,1:2));
  vol =det(J);
  J1= [J11 J12 J13];  J2= [J21 J22 J23];  J3= [J31 J32 J33];
  % media das velocidades
  Vm = [0 0 0];
  for r =1:10
      rg = M(e,r);
      V = [Vx(rg) Vy(rg) Vz(rg)];
      Vm = Vm + 0.1*V;
  end
 % Calculo das medias das veloc. no elem ref., num. de peclet e tau
     Vm = [Vm(1) Vm(2)  Vm(3)];
     S1=  Vm*J1';   S2= -Vm*J2';   S3=  Vm*J3';
     Vref= (1/vol)*[S1 S2 S3];
     he = (0.7*norm(Vm))/norm(Vref);
     lambda = norm(Vm)*he/(2*alfw);
     tau = ((coth(lambda)-1/lambda)*he)/(2*norm(Vm));
```

```
% definicao da matriz dos coef. (grad(phij)|grad(phii)):R
  ss = J1*J1'*cxx +J2*J2'*cyy + J3*J3'*czz;
  R= (ss - J1*J2'*cxy + J1*J3'*cxz- J2*J3'*cyz)/vol;
%* Matriz de coef. ( phij|Vograd(phii) ) = Pij
   Vm = [Vm(1) -Vm(2)  Vm(3)];
   S1=  Vm*J1';   S2= -Vm*J2';   S3=  Vm*J3';
   P = (S1*b1 + S2*b2 + S3*b3);
     v12= -Vm(1)*Vm(2);  v13= Vm(1)*Vm(3);   v23 = -Vm(2)*Vm(3);
  %definicao da matriz dos coef. ( Vograd(phij)|Vograd(phii)):Q
 ss0 = S1^2*cxx + S2^2*cyy +S3^2*czz;
 ss1=-(Vm(1)^2*J11*J21+Vm(2)^2*J12*J22 +Vm(3)^2*J13*J23);
 ss2=  v12*(J11*J22+J12*J21)-v13*(J11*J23+J13*J21)+ v23*(J12*J23+J22*J13);
 ss3=  Vm(1)^2*J11*J31+Vm(2)^2*J12*J32 +Vm(3)^2*J13*J33 ;
 ss4= - v12*(J11*J32+J12*J31)+v13*(J11*J33+J13*J31)- v23*(J12*J33+J32*J13);
 ss5= -(Vm(1)^2*J21*J31 + Vm(2)^2*J22*J32 + Vm(3)^2*J23*J33);
 ss6= v12*(J21*J32+J22*J31)- v13*(J21*J33+J23*J31)+ v23*(J22*J33+J23*J32);
 Q = (ss0 +(ss1+ss2)*cxy +(ss3+ss4)*cxz+(ss5+ss6)*cyz)/vol ;
 MP = alfw*R+ tau*Q+sig(e)*P+P'+sig(e)*vol*a;
 for i=1:10
    ig = M(e,i);
    fr = front(e,i);
   %integral fronteira superior
    if fr == 6
       ISFIS6 = betw*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3));
    else
       ISFIS6 = 0;
    end
    %integral fronteira inferior
    if fr == 2
       ISFIS2 = kw*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3));
    else
       ISFIS2 = 0;
    end
   EE =(MP + ISFIS6 + ISFIS2)*(dt/2);
   aa = vol*a + tau*P + EE;
   bb = vol*a + tau*P - EE;  for j=1:10
     jg =M(e,j);
     E(ig,jg)= E(ig,jg)+ aa(i,j);
     D(ig,jg)= D(ig,jg)+ bb(i,j);
    end % for j
```

```
     h(ig) = h(ig)+ f(ig)*(vol*abs(fi(i))+ tau*P(1,i))*dt;
  end %  for i
end %for tr
%-------------------------------------------------------------------------
%-------------------------------------------------------------------------
% Passagem da agua para o ar
for e=5*nx*ny+1:nelw
     J =zeros(3,3);
    % jacobiano da transformacao
    for s=1:2
        J(s,1)= x(e,2*s+1)-x(e,1);
        J(s,2)= y(e,2*s+1)-y(e,1);
        J(s,3)= z(e,2*s+1)-z(e,1);
     end
  J(3,1)=x(e,10)-x(e,1); J(3,2)=y(e,10)-y(e,1); J(3,3)=z(e,10)-z(e,1);
  J11=det(J(2:3,2:3)); J21=det(J(1:2:3,2:3)); J31=det(J(1:2,2:3));
  J12=det(J(2:3,1:2:3)); J22=det(J(1:2:3,1:2:3)); J32=det(J(1:2,1:2:3));
  J13=det(J(2:3,1:2));J23=det(J(1:2:3,1:2));J33=det(J(1:2,1:2));
  vol =det(J);
  J1= [J11 J12 J13];  J2= [J21 J22 J23];  J3= [J31 J32 J33];
  Vm = [0 0 0];
  for r =1:10
      rg = M(e,r)+(2*ny+1)*(2*(nxa-nter)+1);
      V = [Vx(rg) Vy(rg) Vz(rg)];
      Vm = Vm + 0.1*V;
  end
% Calculo das medias das veloc. no elem ref., num. de peclet e taue
     Vm = [Vm(1) Vm(2)  Vm(3)];
     S1=  Vm*J1';   S2= -Vm*J2';   S3=  Vm*J3';
     Vref= (1/vol)*[S1 S2 S3];
     he = (0.7*norm(Vm))/norm(Vref);
     lambda = norm(Vm)*he/(2*alfa);
     tau = ((coth(lambda)-1/lambda)*he)/(2*norm(Vm));
    for i=1:6
        pass=front(e,i);
        if pass==6
           P1=betw*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3))*(dt/2);
           P2=betw*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3))*(dt/2);
           ig=M(e,i)+(2*ny+1)*(2*(nxa-nter)+1);
           for j=1:6
               jg=M(e,j);
```

```
              E(ig,jg) = E(ig,jg) - P1(i,j);
              D(ig,jg) = D(ig,jg) + P2(i,j);
           end % if
        end % for j
   end % for i
end % for e
%-------------------------------------------------------------------------
% Passagem do ar para a agua
for e=nelw+1:nelw+5*ny*(nxa-nter)
    J =zeros(3,3);
    % jacobiano da transformacao
    for s=1:2
        J(s,1)= x(e,2*s+1)-x(e,1);
        J(s,2)= y(e,2*s+1)-y(e,1);
        J(s,3)= z(e,2*s+1)-z(e,1);
     end
  J(3,1)=x(e,10)-x(e,1); J(3,2)=y(e,10)-y(e,1); J(3,3)=z(e,10)-z(e,1);
  J11=det(J(2:3,2:3)); J21=det(J(1:2:3,2:3)); J31=det(J(1:2,2:3));
  J12=det(J(2:3,1:2:3)); J22=det(J(1:2:3,1:2:3)); J32=det(J(1:2,1:2:3));
  J13=det(J(2:3,1:2));J23=det(J(1:2:3,1:2));J33=det(J(1:2,1:2));
  vol =det(J);
  J1= [J11 J12 J13];  J2= [J21 J22 J23];  J3= [J31 J32 J33];
  Vm = [0 0 0];
  for r =1:10
      rg = M(e,r)-(2*ny+1)*(2*(nxa-nter)+1);
      V = [Vx(rg) Vy(rg) Vz(rg)];
      Vm = Vm + 0.1*V;
  end
 % Calculo das medias das veloc. no elem ref., num. de peclet e taue
     Vm = [Vm(1) Vm(2)  Vm(3)];
     S1=  Vm*J1';   S2= -Vm*J2';   S3=  Vm*J3';
     Vref= (1/vol)*[S1 S2 S3];
     he = (0.7*norm(Vm))/norm(Vref);
     lambda = norm(Vm)*he/(2*alfa);
     tau = ((coth(lambda)-1/lambda)*he)/(2*norm(Vm));
    for i=1:6
        pass=front(e,i);
        if pass==6
           P1=beta*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3))*(dt/2);
           P2=beta*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3))*(dt/2);
           ig=M(e,i)-(2*ny+1)*(2*(nxa-nter)+1);
```

```
          for j=1:6
              jg=M(e,j);
              E(ig,jg) = E(ig,jg) - P1(i,j);
              D(ig,jg) = D(ig,jg) + P2(i,j);
           end % if
        end % for j
   end % for i
end % for e
%-------------------------------------------------------------------------
%AR
for e =nelw+1:nel
     J =zeros(3,3);
    % jacobiano da transformacao
    for s=1:2
        J(s,1)= x(e,2*s+1)-x(e,1);
        J(s,2)= y(e,2*s+1)-y(e,1);
        J(s,3)= z(e,2*s+1)-z(e,1);
     end
  J(3,1)=x(e,10)-x(e,1); J(3,2)=y(e,10)-y(e,1); J(3,3)=z(e,10)-z(e,1);
  J11=det(J(2:3,2:3)); J21=det(J(1:2:3,2:3)); J31=det(J(1:2,2:3));
  J12=det(J(2:3,1:2:3)); J22=det(J(1:2:3,1:2:3)); J32=det(J(1:2,1:2:3));
  J13=det(J(2:3,1:2));J23=det(J(1:2:3,1:2));J33=det(J(1:2,1:2));
  vol =det(J);
  J1= [J11 J12 J13];  J2= [J21 J22 J23];  J3= [J31 J32 J33];
  % media das velocidades
  Vm = [0 0 0];
  for r =1:10
      rg = M(e,r);
      V = [Vx(rg) Vy(rg) Vz(rg)];
      Vm = Vm + 0.1*V;
  end
 % Calculo das medias das veloc. no elem ref., num. de peclet e taue
     Vm = [Vm(1) Vm(2)  Vm(3)];
     S1=  Vm*J1';   S2= -Vm*J2';   S3=  Vm*J3';
     Vref= (1/vol)*[S1 S2 S3];
     he = (0.7*norm(Vm))/norm(Vref);
     lambda = norm(Vm)*he/(2*alfa);
     tau = ((coth(lambda)-1/lambda)*he)/(2*norm(Vm));
% definicao da matriz dos coef. (grad(phij)|grad(phii)):R
  ss = J1*J1'*cxx +J2*J2'*cyy + J3*J3'*czz;
  R= (ss - J1*J2'*cxy + J1*J3'*cxz- J2*J3'*cyz)/vol;
```

```
%* Matriz de coef. ( phij|Vograd(phii) ) = Pij
   Vm = [Vm(1) -Vm(2)  Vm(3)];
   S1=  Vm*J1';   S2= -Vm*J2';   S3=  Vm*J3';
   P = (S1*b1 + S2*b2 + S3*b3);
    v12= -Vm(1)*Vm(2);  v13= Vm(1)*Vm(3);   v23 = -Vm(2)*Vm(3);
  %definicao da matriz dos coef. ( Vograd(phij)|Vograd(phii)):Q
 ss0 = S1^2*cxx + S2^2*cyy +S3^2*czz;
 ss1=-(Vm(1)^2*J11*J21+Vm(2)^2*J12*J22 +Vm(3)^2*J13*J23);
 ss2=  v12*(J11*J22+J12*J21)-v13*(J11*J23+J13*J21)+ v23*(J12*J23+J22*J13);
 ss3=  Vm(1)^2*J11*J31+Vm(2)^2*J12*J32 +Vm(3)^2*J13*J33 ;
 ss4= - v12*(J11*J32+J12*J31)+v13*(J11*J33+J13*J31)- v23*(J12*J33+J32*J13);
 ss5= -(Vm(1)^2*J21*J31 + Vm(2)^2*J22*J32 + Vm(3)^2*J23*J33);
 ss6= v12*(J21*J32+J22*J31)- v13*(J21*J33+J23*J31)+ v23*(J22*J33+J23*J32);
 Q = (ss0 +(ss1+ss2)*cxy +(ss3+ss4)*cxz+(ss5+ss6)*cyz)/vol ;
 MP = alfa*R+ tau*Q+sig(e)*P+P'+sig(e)*vol*a;
 for i=1:10
    ig = M(e,i);
    fr = front(e,i);
   if fr ~= 13
   %integral fronteira inferior e superior
    if fr == 6
       ISFIS6 = beta*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3));
    else
       ISFIS6 = 0;
    end
if fr == 7
       ISFIS7 = ka*(vol*ISFI+ tau*(S1*isfi1 + S2*isfi2 + S3*isfi3));
    else
       ISFIS7 = 0;
    end
    EE =(MP + ISFIS6 + ISFIS7)*(dt/2);
   aa = vol*a + tau*P + EE;
   bb = vol*a + tau*P - EE;
  for j=1:10
     jg =M(e,j);
     frj = front(e,j);
     if frj ~=13
     E(ig,jg)= E(ig,jg)+ aa(i,j);
     D(ig,jg)= D(ig,jg)+ bb(i,j);
 end
 end % for j
```

```
  % fontes
  h(ig) = h(ig) + f(ig)*(vol*abs(fi(i))+ tau*P(1,i))*dt;
  % deriva
 if fr==11
    h(ig)=h(ig)+g*(vol*ISFL1(i)+tau*(S1*isfl11(i)+S2*isfl21(i)...
         +S3*isfl31(i)))*dt;
 end
  end
   end %  for i
end %for tr
%--------------------------------------------------------------------
% Resolvendo o sistema
[L,U]=lu(E); save matE L U D h nn nnw inda1 nt; clear all
load matE %cn = zeros(nn-inda1,1);
load solfwa5sva
for i=1:nt
    cn = D*cn+h;
    cn = L\cn;
    cn = U\cn;
end
save solfwa10sva cn
cmaxw=cn(1); cminw=cn(1);
for i=2:nnw
    if cn(i)>cmaxw
       cmaxw=cn(i);
    end
    if cn(i)<cminw
       cminw=cn(i);
    end
end
cmaxa=cn(nnw+1); cmina=cn(nnw+1);
for i=nnw+2:nn-inda1
    if cn(i)>cmaxa
       cmaxa=cn(i);
    end
    if cn(i)<cmina
       cmina=cn(i);
    end
end
save cnmaxminfwa10sva cmaxw cminw cmaxa cmina
```

Bibliografia

[1] B. J. Alloway and D. C. Ayres, *Chemical Principles of Environmental Pollution*. Blackie Academic & Professional, London, (1997).

[2] H. Brézis, *Análisis Funcional Teoría e Aplicaciones*. Alianza Editorial, (1984).

[3] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes, *Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on incomprenssible Navier-Stokes equations*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **32**(1982), 199-259.

[4] R. F. Cantão, *Modelagem e Simulação Numérica de Derrames de Óleo no Canal de São Sebastião, SP*, (Dissertação de Mestrado), Imecc-Unicamp, Campinas (1998).

[5] C.D.C environmental Health, *National Report on Human Exposure to Environmental Chemicals*. (http://www.cdc.gov/nceh/dls/report), Centers for Disease Control and Prevention for environmental Health, Atlanta (2001), 72.

[6] I. Christie, D. F. Griffiths, A. R. Mitchell and O. C. Zienkiewicz, *Finite Elements Methods for Second Order Differential Equations with significant First Derivates*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, **10**(1976), 1389-1396.

[7] R. Codina, E. Oñate, and M. Cervera, *The intrinsic time for the Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulation using quadratic elements*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **94**(1992), 239-262.

[8] R. Codina, *Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation*. Methods in Applied Mechanics and Engineering, **156**(1998), 185-210.

[9] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, Oxford (1979).

[10] R. F. de Oliveira, *O Comportamento Evolutivo de uma Mancha de Óleo na Baía de Ilha Grande, RJ: Modelagem, Análise numérica e Simulações*, (Tese de Doutorado), Imecc-Unicamp. Campinas (2003).

[11] G. L. Diniz, *Dispersão de Poluentes num Sistema Ar-Água: Modelagem, Aproximação e Aplicações*, (Tese de Doutorado), Imecc-Unicamp. Campinas (2003).

[12] J. Douglas and T. Doupont, *Galerkin Methods for Parabolic Equations*. SIAM J. Numer. Anal., **7**(4) (1970), 1575-1626.

[13] L. Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*. Random-House, New York (1988).

[14] L. C. Evans, *Partial Differential Equations*. Graduates Studies in Mathematics, American Mathematical Society, **19**(1998).

[15] J. A. Fay, *The Spread of Oil Slicks on a Calm Sea. Oil in the Sea*. Plenum Press, (1969), 53-63.

[16] A. Gore, *A Terra em balanço: ecologia e o espírito humano*. Augustus, São Paulo, (1993).

[17] T. J. R. Hughes, L. P. Franca and M. Balestra, *A New Finite Element Formulation For Computation Fluid Dynamics: V. Circunventing the Babuska-Brezzi, Condition: Stable Petrov-Galerkin Formulation of the Stokes Problem Accomodating Equal-Order Interpolations*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **59**(1986), 85-99.

[18] N. F. Inforzato and J. F. C. A. Meyer, *Modelagem Matemática e Aproximação Numérica de um problema Tri-dimensional de Poluição em Sistemas Ar-água*. XIV Congresso da Sociedade Latino Americana de Biologia Matemática, Imecc-Unicamp. Campinas (2007).

[19] K. Kachiashvili, D. Gordeziani, R. Lazarov and D. Melikdzhanian, *Modelling and Simulation of Pollutants Transport in River*. Applied Mathematical Modelling, **31**(2007), 1371-1396.

[20] H. Kardestuncer and D. H. Norrie, *Finite Element Handbook*. Can. Journal Aquat. Science, **53**(1996), 2554-2566.

[21] J. L. Lions, *Equations Differentelles Operationelles et Problèmes aux Limites*. Springer-Verlag, (1961).

[22] G. I. Marchuk, *Mathematical Models in Environmental Problems*. Studies in Mathematical and its Applications, **16**(1986).

[23] L. A. Medeiros and P. H. Rivera, *Espaços de Sobolev e Equações Diferenciais Parciais*. Textos de Métodos Matemáticos, UFRJ, Rio de Janeiro, (1975).

[24] K. Mellanby, *Biologia da Poluição*. Edusp, São Paulo, (1982).

[25] J. F. C. A. Meyer, R. F. Cantão and I. R. F. Poffo, *Oil Movement in Coastal Seas: Modelling and Numerical Simulation, Oil Spill 98*. Computational Mechanics Publications, (1998), 76-87.

[26] J. F. C. A. Meyer and G. L. Diniz, *Pollutant dispersion in wetland systems: Mathematical modelling and numerical simulations*. Ecological Modelling, **200**(2007), 360-370.

[27] J. F. C. A. Meyer and M. E. R. Georges, *Presença de Poluentes em Águas Fluviais: uma Primeira Abordagem*. Anais do XXI CNMAC, (1998), 36.

[28] J. F. C. A. Meyer and D. C. Mistro, *Mathematical Modelling and Numerical Simulation of the Pollution of Rivers due to Metallic Mercury*. Annals-Panamerican Workshop for Applied and Computational Mathematics, (1993).

[29] J. F. C. A. Meyer and S. E. Palomino-Castro, *Um Problema de Poluição do Ar por Aerossóis: Modelagem Matemática e Simulação Numérica, in: A Questão Ambiental: Cenários de Pesquisa*. Textos do NEPAM, (1995), 299-309.

[30] J. F. C. A. Meyer, *Modelagem e Simulação Numérica do Transporte Térmico em Meios Compostos*, (Tese de Doutorado), Imecc-Unicamp. Campinas (1988).

[31] J. D. Murray, *Mathematical Biology*. Springer, New York (1989).

[32] F. L. Neto e J. Bertoni, *Conservação do Solo*. Ed. Icone, São Paulo, (1990).

[33] J. C. J. Nihoul, *Modelling of Marine Systems*. Oceanography Series, **10**(1975).

[34] A. Okubo, *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer, New York (1980).

[35] Universidade Mata Atlântica, *O Estado do Mundo*. Ed. Uma, São Paulo, (2002).

[36] J. C. S. Vásquez, *Comportamento Evolutivo de Descarga de Água de Produção Decorrente de Atividade Offshore: Tratamento Numérico e Simulação Computacional*, (Tese de Doutorado), Imecc-Unicamp. Campinas (2005).